

文章编号: CSTAM2014-P19-0089

分裂算法对流动燃烧数值模拟结果的影响

刘云峰, 姜宗林

(中国科学院力学研究所高温气体动力学国家重点实验室, 北京 100190)

摘要: 本文分析了分裂算法对流动燃烧模拟结果的影响。与理论结果相比, 分裂算法会造成整个系统的动量不守恒。在此基础上, 提出一个新的模型来对分裂算法的数值结果进行修正。利用该模型, 模拟得到了准爆轰波现象, 并分析了准爆轰波的热力学特性。结果表明, 准爆轰波是热壅塞的加热流动, 是声速附近的加热流动。

关键词: 分裂算法; 高超声速流动; 超声速燃烧; 准爆轰波

中图分类号: V433.9

文献标识码: A

0 引言

在爆轰波的实验研究中, 除了CJ爆轰波外, 人们经常会发现一种奇怪的现象, 就是以大约50% CJ爆速传播的准定常波, 被叫做准爆轰波^[1-2]。实验结果表明, 准爆轰波的波面结构与CJ爆轰波的波面结构完全不同, 激波面与火焰面之间的距离很长, 呈现出双间断结构, 具有准一维特性。而且, 准爆轰波与CJ爆轰波的转变是突变的, 二者之间不存在其它类型的传播状态或传播速度。

人们对准爆轰波的机理进行了深入的实验研究, 并对其特征有了深刻的认识。Wagner 通过光学方法发现, 准爆轰波波面的传播轨迹与燃烧产物的 $c+$ 特征线几乎是平行的, 而且其传播速度非常接近于燃烧产物的声速^[3]。朱雨建等通过热力学分析后发现, 准爆轰波面的热力学状态不是激波后的理论状态, 受前导激波和燃烧产物的共同影响, 其传播机理无法用经典的ZND理论解释^[4]。Lee 认为, 准爆轰波的热力学状态应该是热壅塞的^[5]。虽然已经有很多准爆轰波的实验结果, 但是, 目前还没有

数值模拟能够模拟得到准爆轰波, 也无法准确解释其传播机理。

本文认为, 准爆轰波的物理机理是热壅塞, 而数值模拟无法得到准爆轰的关键在于数值方法的问题。在流动燃烧的控制方程中, 热量的释放是通过在N-S方程或Euler方程的能量守恒方程中增加源项的方法实现的。能量守恒方程要与质量守恒和动量守恒方程同时耦合求解, 这样才可以保证整个系统的质量、动量和能量守恒。这一控制方程是由钱学森等^[6]在1949年首先提出的, 当时提出该方程的目的是用来研究超声速燃烧。

而目前的数值模拟却采用了分裂算法。所谓分裂算法, 就是将流动过程和加热过程解耦。第一步, 先让无化学反应的流体流动, 得到流体的密度和速度; 第二步, 让流体保持密度和速度不变, 将热量加进去, 提高了流体的压力和温度。在加热过程中, 流体的密度和速度保持不变, 只改变压力和温度, 实际上就是等容燃烧过程。

分裂算法模拟得到的数值结果跟等截面加热管

收稿日期: 2014-06-07; 修订日期:

基金项目: 国家自然科学基金 (90916028)

作者简介: 刘云峰 (1971-), 男, 山东龙口, 高工, 研究方向: 高超声速气动、激波与爆轰物理, E-mail: liuyunfeng@imech.ac.cn

流的理论结果是有差别的, 分裂算法会造成系统动量的不守恒。动量不守恒对最终结果的影响根据初始状态的不同而不同, 在声速流动附近最明显, 会导致数值结果定性不准确。本文根据等截面加热管流理论对数值结果进行了修正, 提出了一个新的物理模型。通过一维数值模拟得到了准爆轰波, 其热力学特性跟实验结果吻合得很好。

1 控制方程和物理模型

一维控制方程是Euler方程, 化学反应采用Arrhenius形式的总包一步有限速率的化学反应模型, 忽略了粘性、扩散和热传导过程。

在数值模拟中, 由于是采用分裂算法, 首先根据质量守恒方程计算得到密度, 再根据动量守恒方程计算得到速度, 最后, 保持密度和速度不变, 根据能量守恒方程计算得到压力和温度。前两步是没有化学反应的流动, 燃烧放热就是在第三步完成的。

本文认为, 根据等截面加热管流理论对流动燃烧的解释, 这时候计算出来的状态是不准确的, 包括压力、温度、速度、密度、马赫数等所有参数都要变化。这时候, 就需要提出一个物理模型, 来对流场参数进行修正。假设 ρ , u , P 是分裂算法计算得到的密度、速度和压力, 而设 ρ' , u' , P' 是物理值, C 是常数, 那么根据质量守恒定理,

$$\rho' = \frac{1}{C} \rho \quad (1)$$

$$u' = Cu \quad (2)$$

将式(1)和(2)带入到能量方程中, 得到新的能量方程(3), 最终简化后得方程(4):

$$e' = \frac{p'}{(\gamma-1)\rho'} + u'^2/2 = \frac{Cp'}{(\gamma-1)\rho} + C^2u^2/2 \quad (3)$$

$$e = \frac{e'}{C} = \frac{p'}{(\gamma-1)\rho} + Cu^2/2 + Zq \quad (4)$$

本文就是利用新的能量方程(4)来求解CJ爆轰波和准爆轰波的燃烧过程的。进一步解释分裂算法对整个系统造成的影响。文献[7]给出了详细的理论分析, 包括微分形式的控制方程和积分形式的控制方程。无论哪种控制方程, 能量方程只表明系统的总焓是增加的, 没有其它任何假设。为了对系统进行求解, 在微分方程中, 是通过联立求解8个线性方程组得到结果的。在积分方程中, 是从动量守恒方程出发, 以动量守恒方程作为约束条件, 得到燃烧后的各个物理量的。也就是说, 理论结果是严格保证动量守恒的。而在CFD中, 由于采用了分裂算法, 采用了“等容燃烧”的假设, 必然导致系统的动量不守恒。

动量不守恒对结果的影响根据初始状态的不同而不同, 在声速点附近的偏差最大。对CJ爆轰波影响小, 因为CJ爆轰波接近于等容燃烧。对亚声速燃烧波的影响也小, 因为气体的速度很低。换言之, 加热量是一个过程量, 而不是状态量。而在CFD中, 忽略了加热过程, 把加热量当成状态量来简单处理, 必然会带来误差。本文提出的模型就是从理论出发, 对数值结果造成的系统动量不守恒的一个定性的修正。

2 数值格式和初边值条件

对准爆轰波进行了一维数值模拟研究。计算域是一维管道, 左端是封闭的。空间方向上采用了三阶ENO格式离散, 对矢通量进行了Steger-Warming分解。时间方向上采用三阶TVD Runge-Kutta法。壁面采用反射边界条件。爆轰气体为满足化学反应

当量比的氢气/空气预混气体，初始压力是1atm，初始温度是300K。爆轰波是通过高温高压气体在左端点燃的，形成过驱爆轰波，并一直发展到稳定状态。开展了网格分辨率研究，网格尺度分别为0.1mm 和 0.05 mm。

3 结果与讨论

公式(4)中参数C的准确物理表达式目前还没有办法给出。在计算中，假设C为常数，来定性地研究流场的变化。图1给出了不同参数下的爆轰波传播速度。计算网格为0.1mm。可以看出，当C=1时，爆轰波的传播速度为1950m/s，就是混合气体的CJ爆速。也就是说，用分裂算法可以模拟出CJ爆轰波，这和等截面加热管流理论预测是一致的。随着C继续增大，直到C=2.7，爆速基本保持在1800m/s左右，约为90%CJ爆速，这一传播速度在实验中是经常被发现的。

但是，当C增大到2.8的时候，流场发生了突变，爆轰波的传播速度突然降低为1050m/s，约为CJ爆速的一半，并保持稳定传播，这就是准爆轰波。在不同网格下，同样模拟得到了准爆轰波，表明这不是由于网格边界条件等参数引起的，而是方程固有的特性。从速度的变化可以看出，虽然分裂算法有一定的误差，但是，在一定的范围内，其影响还是非常小的，比如 $C \leq 2.7$ ，对传播速度的影响小于10%。只有在流场的性质发生剧烈变化的时候，才有显著的影响。

图2给出了CJ爆轰波的波面压力曲线。可见，波面的压力为15atm，为CJ压力值。速度为零的点位于距离中间的位置，左端的平台压力为5.2atm。这是典型的CJ爆轰波的压力曲线。

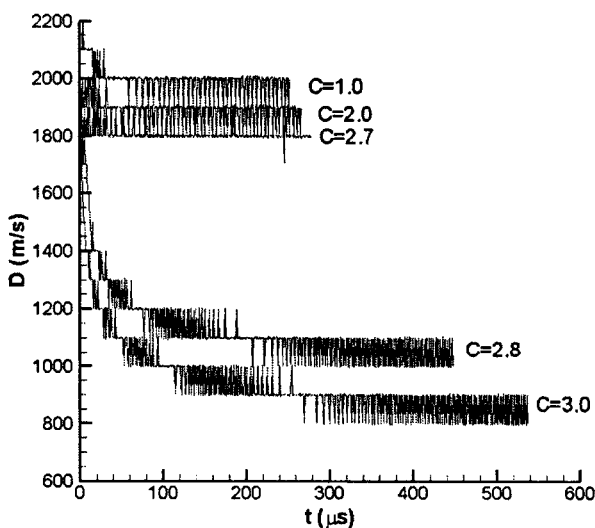


图1、不同参数C下的爆轰波传播速度 (dx=0.1mm)
Fig.1 Detonation speeds at different parameter C

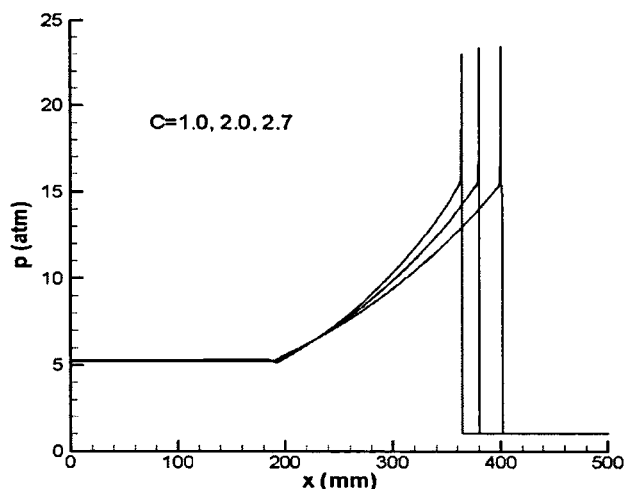


图2、CJ爆轰波的压力曲线

Fig.2 Pressure profiles of CJ detonation

图3给出了准爆轰波的压力曲线，可以看出，跟图2的形状完全不同，波面压力降为6atm，左端平台压力降为4.5atm。压力曲线形状不同，表明二者的热力学特性截然不同。

准爆轰波波面的温度曲线绘于图4之中，同时还给出了参数Z的曲线（虚线表示），用来标明火焰面的位置。可以看出，准爆轰波面为双间断结构，分别为入射激波和放热面。双间断将波面分成了三个区，这和试验观察到的结果是一致的。在入射激波

和火焰面之间的区域，其温度值并不是入射激波后诱导的温度值，而是有所下降。

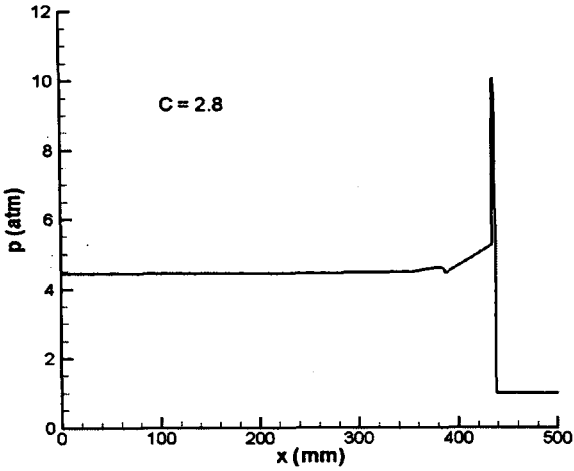


图3、准爆轰波的压力曲线

Fig.3 Pressure profile of quasi-detonation

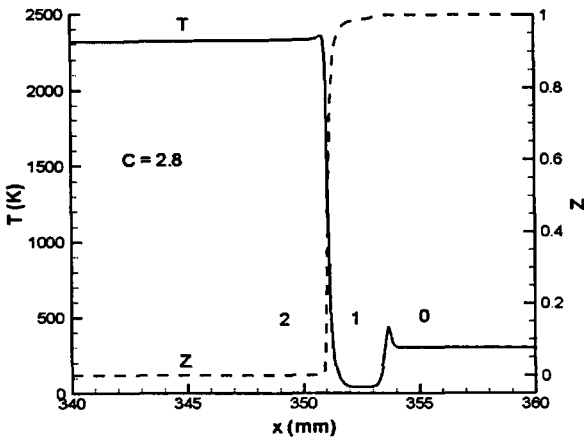


图4、准爆轰波的温度曲线

Fig.4 Profiles of Temperature and Parameter Z of quasi-detonation这一结果和一维加热管流的理论解释是定性一致的。一维加热管流理论认为，对亚声速加热，当马赫数大于一定值时，加热会使温度下降。这是因为，尽管气体受到加热，但是气体的动能增加很快，此时气体的静焓增加已经抵不上气体动能的增加，因此虽然加热，但是气体的静温反而下降。图5给出了与图4对应的速度和声速的曲线。可以看出，在中间区域，气体的速度增加，声速降

低。气体的平均速度为1000m/s，同准爆轰波的传播速度相当。

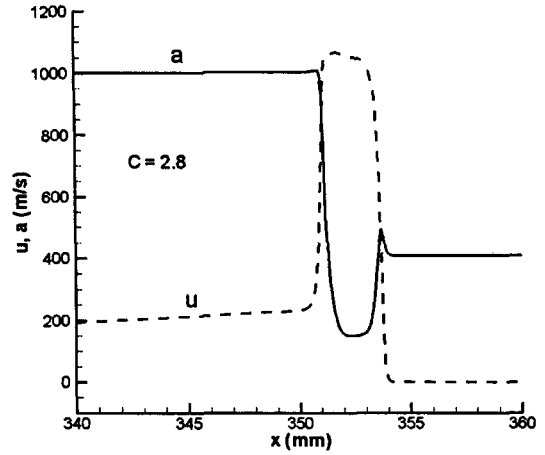


图5、准爆轰波的气体速度和声速曲线

Fig.5 Velocity and sound speed profiles of quasi-detonation

最后，来讨论一下声速面的情况。图6给出了CJ爆轰波面的速度和声速曲线，爆轰波从左向右传播。可以看出，在CJ爆轰波面上，刚开始时是亚声速燃烧，等反应结束时，刚好到达声速状态，即满足CJ理论。CJ理论认为，燃烧后的马赫数正好是声速。而后，稀疏波迅速将燃烧产物的速度降低，稀疏波传播到声速点停止，不会对爆轰波面造成影响。同时从图上可以看出，CJ爆轰波面非常窄，宽度只有0.1mm。

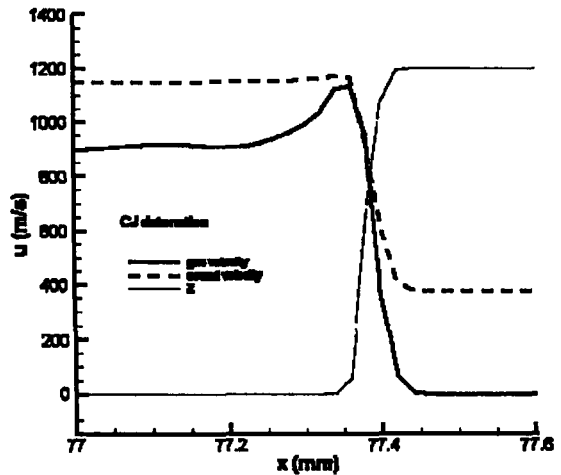


图6、CJ爆轰波波面的气体速度和声速曲线

Fig.6 Gas velocity and sound speed at the front of CJ detonation

图7给出了90% CJ爆轰波 ($C=2.7$) 的波面速度和声速曲线, 其中还包括参数 Z 的曲线, 用来标明火焰面的位置。可以看出速度和声速有两个相交点, 即两个声速面。第一个声速面表明气体膨胀到超声速。第二个声速面正好对应 $Z=0$ 的情况, 表明放热结束后, 流体刚好达到声速, 即CJ状态。随后, 稀疏波将燃烧气体的速度降低, 但只能影响到声速点, 不会影响爆轰波的自维持传播。

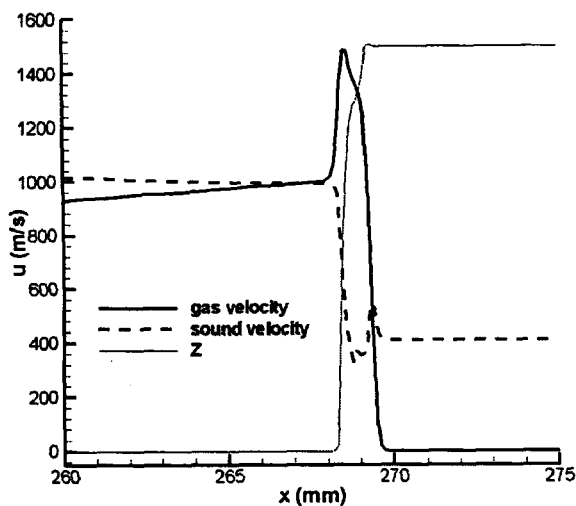


图 7、90% CJ 爆轰波波面的气体速度和声速曲线

Fig.7 Gas velocity and sound speed at the front of 90% CJ detonation

图8给出了准爆轰波的波面结构, 同样给出了参数 Z 的变化曲线。结构同图7基本相同, 但是可以清楚地看出, 在放热结束前气体就达到了声速点, 即热壅塞状态。可见, 在热力学上, 准爆轰波的确是热壅塞的, 从而证明了前言中的假设。该结果同时还说明, 声速面的准确模拟对于研究流动燃烧现象是非常重要的。放热发生在声速点的两侧, 一方面波的传播速度要降低, 另外, 波不能够自维持稳定传播, 稀疏波会不断地将波速降低。从图上还可以看出, 同CJ爆轰波相比, 准爆轰波的波面非常宽, 宽度约为4mm。

上述分析表明, 一个能够自维持地稳定传播燃烧波 (无论是CJ爆轰波还是准爆轰波), 一定有一个声速面的存在, 该声速面隔绝了后面的稀疏波对前导波面的侵蚀作用。本研究提出的物理模型的数值模拟结果恰恰能够反映这一点, 这是准爆轰波传播的本质, 即热壅塞流动。

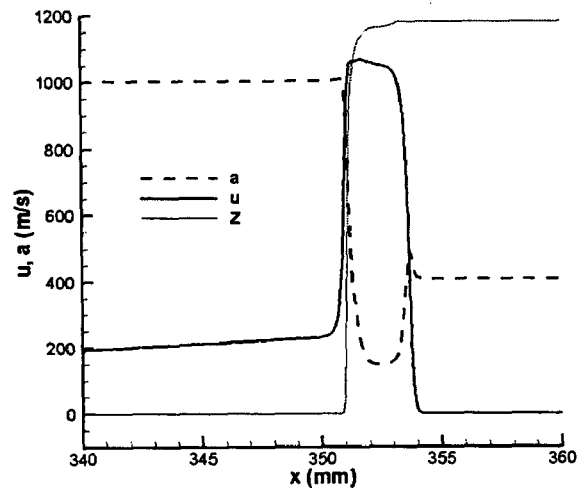


图 8、准爆轰波波面的气体速度和声速曲线

Fig.8 Gas velocity and sound speed at the front of quasi-detonation

4 结论

(1)现在的数值模拟方法在模拟流动燃烧过程中, 由于所用的分裂算法采用等容燃烧假设, 会造成系统动量不守恒, 不能够完全准确地模拟燃烧复杂流场, 尤其是接近声速流动和热壅塞流动。

(2)提出了一个简化的模型来修正分裂算法带来的误差。利用该模型模拟得到了准爆轰波, 同实验结果定性吻合得很好。通过对准爆轰的热力学特性分析可以发现, 准爆轰波是热壅塞的。

参考文献

- [1] G. Dupre, O. Peraldi, J.H.S. Lee, Knystautas R., "Propagation of detonation waves in an acoustic absorbing walled tube," Progr. Astronaut. Aeronaut. 114, 248 (1988).
- [2] J.H.S. Lee, R. Knystautas, C.K. Chan, "Turbulence flame propagation in obstacle-filled tubes," Proc. Combust. Inst. 20(1), 1663 (1985).

- [3] H.G. Wagner, "Some experiments about flame acceleration," Proceedings of first International Specialist Meeting on Fuel-Air Explosions, Montreal, 1982, P.77-99.
- [4] 朱雨建, 杨基明, J.H.S. Lee, "爆轰波透射孔栅形成的高速爆燃波的结构和行为," 爆炸与冲击, 28 (2), 98 (2008)
- [5] J.H.S. Lee, "The propagation of turbulent flame and detonations in tubes," Advances in Chemical Reaction Dynamics, edited by P.M. Rentzepis and C. Capellos, Kluwer Academic Publishers, 1986, P. 346-387.
- [6] H.S. Tsien, M. Beilock, "Heat source in a uniform Flow," Journal of the Aeronautical Sciences 16(12), 756 (1949).
- [7] 童秉刚, 孔祥言, 邓国华, 气体动力学, 高等教育出版社, 1989: 98-108

Study of operator-splitting algorithm on numerical simulations of supersonic combustion

Liu Yunfeng, Jiang Zonglin

(State Key Laboratory of High Temperature Gas Dynamics, Institute of Mechanics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China)

Abstract: In this paper, the characters of operator-splitting algorithm in numerical simulations of combustion flow are analyzed. In numerical simulations, the combustion is handled using an operator-splitting algorithm so that during each time step the motionless fluid is first allowed to react at constant volume and then subsequently the nonreactive fluid is allowed to convert. This algorithm would break the conservation of momentum of the combustion system. A correction model is introduced to correct the numerical results. Quasi-detonation is simulated firstly by using this correction model, which is in good agreement with experimental results. The thermodynamic characters of quasi-detonation show that it is thermally choked.

Key words: Operator-splitting algorithm, Hypersonic, Supersonic combustion, Quasi-detonation