

# 氢氧混合气体爆轰波的真实 化学反应模型数值模拟

胡湘渝<sup>1,2</sup>, 张德良<sup>1</sup>

(1. 中国科学院力学研究所高温气体动力学开放实验室, 北京 100080;

2. 北京理工大学爆炸灾害预防控制国家重点实验室, 北京 100081)

摘要: 采用高精度的 ENO 格式和基于基元化学反应的真实化学反应模型求解氢氧混合气体一维爆轰波的精细结构。采用直接起爆方法得到稳定传播的爆轰波, 计算的爆轰波阵面参数和实验相当符合。对爆轰波反应区化学反应的研究表明, 参与反应的不同组分具有不同类型的变化特征。网格尺寸影响的研究表明, 计算结果的精度随着网格尺寸的增加而增加, 并能保持较好的收敛性。移动网格研究结果表明, 网格运动速度和爆轰速度接近时, 两者的相互作用对计算结果产生一定影响。

关键词: 爆轰波; 数值模拟; 基元化学反应; 网格

\* 中图分类号: O381 文献标识码: A

## 1 引 言

采用数值方法研究爆轰作用时, 主要需处理好两个问题: 一是爆轰波的强间断, 二是爆轰波结构中化学反应和能量释放在过程。对于第一个问题, 70 年代以来, 各种数值格式的出现, 使得爆轰波强间断的处理得到很大的发展<sup>[1-3]</sup>。对于第二个问题, 描述爆轰波结构的模型通常为 C-J 模型或简单的 ZND 模型, 其中 C-J 模型无法描述化学反应区的结构。采用简单的 ZND 模型如一阶段模型或二阶段模型, 在许多情况下可以较好描述爆轰波结构且计算量较小, 也允许通过和理论解对比的方法调整各种参数<sup>[4-6]</sup>。然而不同的爆轰波作用问题, 特别是许多爆轰过程, 如点火、形成和熄灭等, 很难得到理论解, 而且能量释放机制并不能采用相同的简单模型描述。另外, 爆轰波结构中的化学反应也特别复杂, 要得到更加精细的爆轰波结构, 必须考虑混合气体的真实化学反应过程。本文的工作旨在这一方面作些努力。

## 2 物理和数值模型

### 2.1 控制方程

气相爆轰作用过程的控制方程组为具有化学反应的混合气体 Euler 方程组<sup>[7]</sup>, 具有  $N$  种组分的质量守恒, 动量守恒和能量守恒方程的统一形式为

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}(\mathbf{U})}{\partial x} = \mathbf{S}(\mathbf{U}) \quad (1)$$

式中:  $\mathbf{U} = (\rho, \rho u, E, \rho_1, \dots, \rho_{N-1})^T$ ,  $\mathbf{F}(\mathbf{U}) = (\rho u, \rho u^2 + p, (E + p)u, \rho_1 u, \dots, \rho_{N-1} u)^T$ ,  $\mathbf{S}(\mathbf{U}) = (0, 0, 0, \dot{\omega}_1, \dots, \dot{\omega}_{N-1})^T$ , 并有

$$E = e + u^2/2 \quad (2)$$

$\rho$  为密度,  $u$  为  $x$  方向速度,  $p$  为压力,  $E$  为单位质量的总能,  $e$  为比内能,  $\dot{\omega}_i$  为反应生成速率,  $N$  为组分数。另外, 各组分与混合气体的关系有

\* 收稿日期: 2000-02-13; 修回日期: 2000-05-16

基金项目: 国家自然科学基金项目(19872068); 国家高性能计算基金项目(00106)

作者简介: 胡湘渝(1973—), 男, 博士后。

$$Y_i = \frac{\rho_i}{\rho}, \quad Y_N = 1 - \sum_{i=1}^{N-1} Y_i, \quad h = \sum_{i=1}^N Y_i h_i \quad i = 1, \dots, N \quad (3)$$

$$h_i = h_{i0} + \int_{T_0}^T c_{pi} dT \quad i = 1, \dots, N \quad (4)$$

式中:  $h$  为比焓,  $h_i$  为第  $i$  种组分的比焓,  $Y_i$  为第  $i$  种组分的质量分数,  $c_{pi}$  为第  $i$  种组分的比定压热容。

$$\text{状态方程} \quad e = \theta h - p, \quad p = \sum_{i=1}^N \rho_i R_i T, \quad R_i = \frac{R}{W_i} \quad (5)$$

式中:  $R$  为普适气体常数,  $W_i$  为第  $i$  种组分的摩尔质量。

$$\text{化学反应生成率} \quad \dot{\omega}_i = W_i dn_i / dt \quad (6)$$

式中:  $n_i$  为第  $i$  种组分的摩尔浓度,  $i = 1, \dots, N$ 。

## 2.2 化学反应模型

采用 8 种组分、19 种基元反应模型<sup>[8]</sup> 描述  $H_2$ 、 $O_2$  的化学反应机制, 各组分为  $H_2$ 、 $O_2$ 、 $O$ 、 $H$ 、 $OH$ 、 $HO_2$ 、 $H_2O_2$ 、 $H_2O$ , 其化学反应一般形式可以写为

$$\sum_{i=1}^N \nu_{ik}' \chi_i = \sum_{i=1}^N \nu_{ik}'' \chi_i \quad (7)$$

式中:  $\nu_{ik}'$  和  $\nu_{ik}''$  分别为反应物和生成物的克分子数,  $\chi_i$  为第  $i$  种组分的化学符号。各组分的反应生成率由基元反应的动力学模型给出

$$\dot{\omega}_i = W_i \sum_{k=1}^K (\nu_{ik}'' - \nu_{ik}') \left\{ \sum_{i=1}^N \alpha_{ik} C_{\chi_i} \right\} \left\{ K_{f,k} \prod_{i=1}^N (C_{\chi_i})^{\nu_{ik}'} - K_{b,k} \prod_{i=1}^N (C_{\chi_i})^{\nu_{ik}''} \right\} \quad (8)$$

式中:  $C_{\chi_i} = \rho_i / W_i$  为第  $i$  种组分的摩尔浓度,  $\alpha_{ik}$  为第三体效应系数,  $K_{f,k}$  和  $K_{b,k}$  分别为正、逆反应的反应常数。第  $k$  个反应的正反应常数由 Arrhenius 方程给出

$$K_{f,k} = A_k T^{n_k} \exp(-E_{ak} / RT) \quad (9)$$

式中:  $E_{ak}$  为第  $k$  个反应的活化能。而第  $k$  个反应的逆反应常数由正反应常数和压力平衡常数  $K_{c,k}$  的关系求出。另外, 根据实际的计算实例还可加入 Ar 或  $N_2$  作为稀释气体。

## 2.3 数值方法

采用时间分裂方法<sup>[7]</sup> 处理耦合过程。即首先计算流体流动的效应, 得到过渡值  $\tilde{U}_{n+1}$ 。然后“继续”计算, 将化学反应的贡献叠加到  $\tilde{U}_{n+1}$  上, 最终得到体现整体效应的  $U_{n+1}$ 。

对于流体流动方程来说, 数值计算的时间步长  $\Delta t_{\text{fluid}}$  要满足 CFL 条件; 对于化学反应方程来说, 化学反应动力学数值积分的时间步长  $\Delta t_{\text{chem}}$  要满足精度收敛条件。这两个时间步长一般并不相同, 在许多情况下后者比前者更小, 所以在计算时, 可采取以下方法: 对于流体流动  $\Delta t_{\text{fluid}}$  时间步长, 化学反应部分以多步积分计算。

流动部分计算采用 90 年代以来发展的高精度计算格式——WENO (Weighted Essentially Non-oscillatory) 格式<sup>[3]</sup>。该格式在空间方向具有三阶精度, 能够较好地处理由气相爆轰波复杂结构引起的各种间断, 并具有较小的数值粘性。在时间方向采用具有三阶精度的 TVD Runge-Kutta 格式<sup>[2]</sup> 积分。采用 CHEMEQ<sup>[9]</sup> 程序包积分化学反应方程组, CHEMEQ 为单步格式, 二阶精度, 无须计算雅可比矩阵, 但仍可相当好的处理刚性问题。

## 2.4 温度的处理

在本文问题中, 温度是一个重要参数, 它的变化与流体流动、化学反应耦合有关, 它可由式 (2) ~ 式 (5) 联立迭代求解。对于流动部分, 可以通过守恒量同时求解温度和压力。为了提高化学反应的计算精度, 并保持较大的时间步长, 考虑由于反应引起的温度变化是必要的。采用时间分裂方法处理化学反应和流动耦合时, 反应中总内能总保持不变, 因此也可求解对应于各化学反应时间步长  $\Delta t_{\text{chem}}$  后的新组分浓度的温度。

### 3 数值模拟结果

#### 3.1 计算条件和初始条件

研究的混合气体的摩尔数比为  $n(\text{H}_2) : n(\text{O}_2) : n(\text{Ar}) = 2 : 1 : 7$ , 初压和初温分别为 6670Pa 和 298K。在封闭端有一小段高温、高压区域点火, 迅速引爆混合气体, 达到稳定爆轰并以恒定爆速传播。点火区的参数为  $p_{\text{ign}} = 28.0p_0$ 、 $\rho_{\text{ign}} = 5.0\rho_0$  和  $T_{\text{ign}} = 13.0T_0$ 。

为了研究网格分辨率对数值模拟结果的影响, 分别计算了网格尺寸  $\Delta x = 2.0, 1.0, 0.5, 0.333, 0.25\text{mm}$  时的直接起爆过程, 均采用同样的初始条件起爆。本文将以  $\Delta x = 0.5\text{mm}$  的情况作为典型算例进行分析。另外, 为了研究移动网格对计算结果的影响, 还计算了当网格分别以 500, 1000, 1500m/s 的速度以及恒定爆速逆向爆轰波阵面运动时对爆轰参数以及爆轰波结构的影响。在采用移动网格时, 采用冲击压力为  $2.0p_{\text{CJ}}$  的无反应冲击波起爆。

#### 3.2 流场基本特征和爆轰波阵面基本参数

图 1、图 2 给出了在  $200\mu\text{s}$  时刻稳定爆轰波向右传播时的全流场的压力和粒子速度空间分布曲线。从图上可以看出, 前导激波和紧跟在其后的化学反应区构成爆轰波阵面, 然后是稀疏波区, 粒子速度在稀疏波区逐渐降低, 约在爆轰距离的 1/2 处变为零并过渡到稳定区, 在稳定区粒子速度为零且压力保持不变。这个结果和 C-J 模型的自相似解符合得相当好, 主要的差别是给出了 C-J 模型无法描述的爆轰波结构, 即前导激波和化学反应区的状态分布。

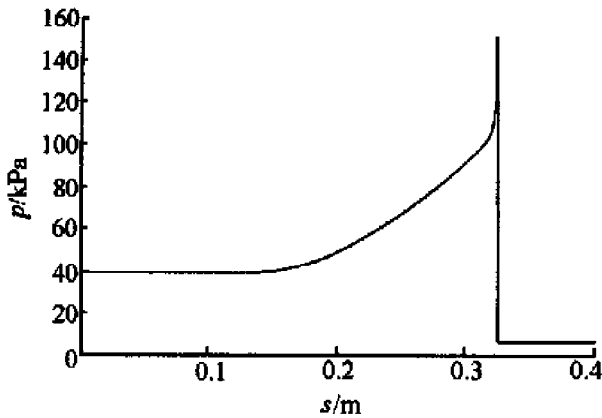


图 1  $200\mu\text{s}$  时刻压力分布图

Fig.1 Pressure profile at  $200\mu\text{s}$

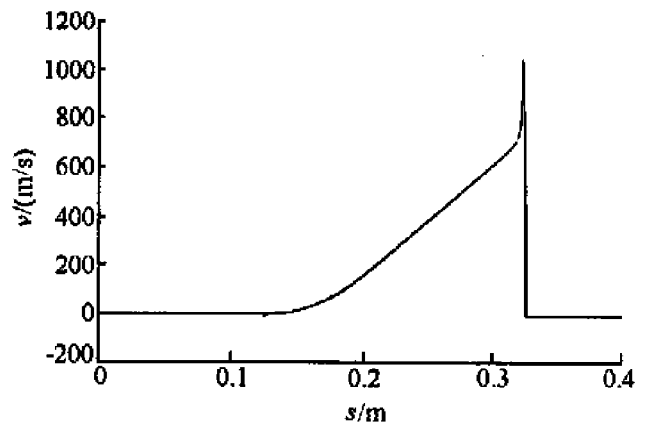


图 2  $200\mu\text{s}$  时刻粒子速度分布图

Fig.2 Particle velocity profile at  $200\mu\text{s}$

本文根据走时曲线拟合的正常爆轰速度为 1615m/s, 与文献[10] 计算的理想 C-J 爆速 1618m/s 误差很小。气相爆轰波的反应区较长, 根据 C-J 条件  $D_{\text{CJ}} = u_{\text{CJ}} + c_{\text{CJ}}$  可以确定 C-J 面的位置, 并可得到 C-J 爆轰压力  $p_{\text{CJ}} \approx 93.6\text{kPa}$ , 这个结果和实验数据<sup>[10]</sup> 相当接近。计算的前导激波 von Neumann 尖峰的压力约为  $1.62p_{\text{CJ}}$ , 比理想 ZND 模型计算的  $1.86p_{\text{CJ}}$  要低一些。如果以前导激波面到 C-J 面的距离为爆轰波的宽度, 则数值模拟的稳定爆轰波的反应区宽度约为 22mm, 比文献[11] 采用定常解得到的计算值 12mm 要大, 这可能是因为非定常数值模拟的精度要低一些的缘故。另外, 本文数值模拟不能计算反应诱导区的长度, 这是因为诱导区的长度定常解的值为  $20.0\mu\text{m}$ , 而数值计算的前导激波的宽度和反应诱导区宽度相当, 两者无法分辨的缘故。

#### 3.3 爆轰波的直接起爆过程

计算表明, 本文数值模拟的爆轰波的直接起爆过程虽然很快, 但是仍然可以看到清晰的起爆过程。图 3 给出了当  $\rho_{\text{ign}} = 5.0\rho_0$  时, 稳定爆轰波形成过程的压力分布图, 时间为  $0 \sim 18\mu\text{s}$ , 每条曲线间隔  $2\mu\text{s}$ 。从图中可以看出, 初始条件产生一个冲击波和一个波后的高温高压区, 高温高压区迅速点燃混合气体,

形成很高压力,克服壁面端的稀疏作用,并逐渐形成爆轰。由于爆轰在冲击波后的区域形成,因此首先形成的爆轰为超压爆轰,超压爆轰的爆速大于正常爆速,因此爆轰波阵面很快超过冲击波阵面,然后爆压逐渐下降并形成稳定爆轰。

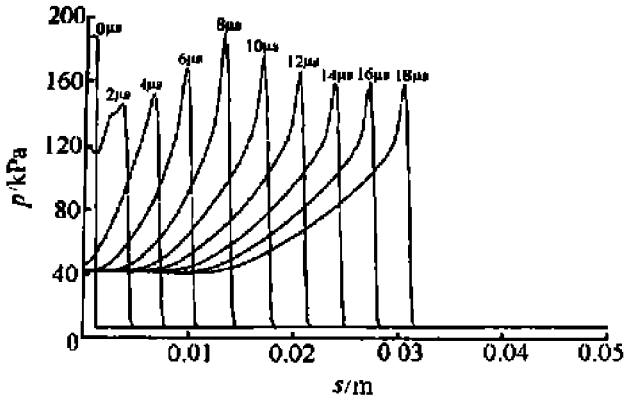


图3  $\rho_{\text{ign}}=5.0\rho_0$  时, 0~18 $\mu\text{s}$  的压力分布图

Fig.3 Pressure profiles from 0~18 $\mu\text{s}$  when  $\rho_{\text{ign}}=5.0\rho_0$

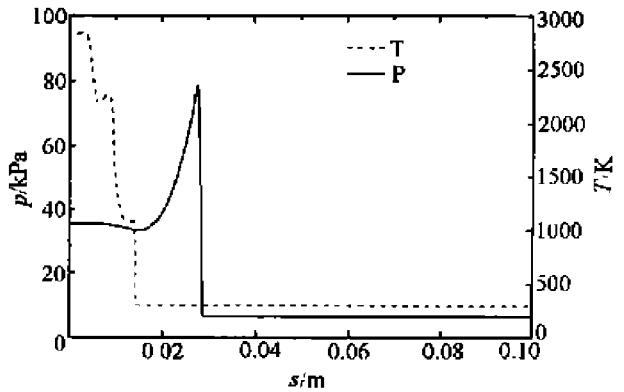


图4  $\rho_{\text{ign}}=4.7\rho_0$  时, 20 $\mu\text{s}$  时刻的压力和温度分布图

Fig.4 Temperature and pressure profiles when  $\rho_{\text{ign}}=4.7\rho_0$

图4给出了当  $\rho_{\text{ign}}=4.7\rho_0$  时, 点火后 20 $\mu\text{s}$  时刻的压力和温度复合分布图。从图上可以看出, 前导激波引起的温升很低, 化学反应主要在后部的稀疏区域完成, 即出现前导激波和化学反应区解耦的情况, 根据前导激波阵面到温度曲线导数极值点距离得到的反应诱导区长度为 0.01m, 这个值远远大于爆轰的情况, 并且随时间不断增加, 从以上分析可以看出, 如果初始条件的高温高压区的点火能量不够大, 则不能形成爆轰, 因此存在使得爆轰波能够形成的临界点火能量。

### 3.4 化学反应区的组分浓度变化

采用真实化学反应模型的特点是不但可以得到前导激波后的压力、速度、密度和温度的变化过程, 还可以得到爆轰波内参与化学反应的各组分的浓度变化、即化学能的释放过程。

图5给出了在 200 $\mu\text{s}$  时刻各组分的浓度分布情况。从图上可以看出, 化学反应主要在前导激波阵面到 C-J 面之间区域的前半部分进行。然而化学反应并没有在 C-J 面完全结束。由于稀疏过程中温度略有降低, 导致化学平衡向生成  $\text{H}_2\text{O}$  的方向运动, 并且释放化学能, 但这些能量并不能输送给爆轰波。因此采用真实化学反应模型时, 爆热应当计算在前导激波阵面到 C-J 面的化学能释放, 这个值显然比 C-J 模型和理想 ZND 模型要小。

在  $\text{H}_2$ 、 $\text{O}_2$  爆轰的化学反应过程中, 根据浓度变化的量级可以将参与反应的组分分为三类, 各类具有不同变化特征。第一类为浓度变化最大的  $\text{H}_2$ 、 $\text{O}_2$  和  $\text{H}_2\text{O}$ , 其峰值浓度量级为  $10^{-1}\text{mol}/\text{m}^3$ 。它们是反应物和主要生成物, 快速消耗和生成后在稀疏波区缓

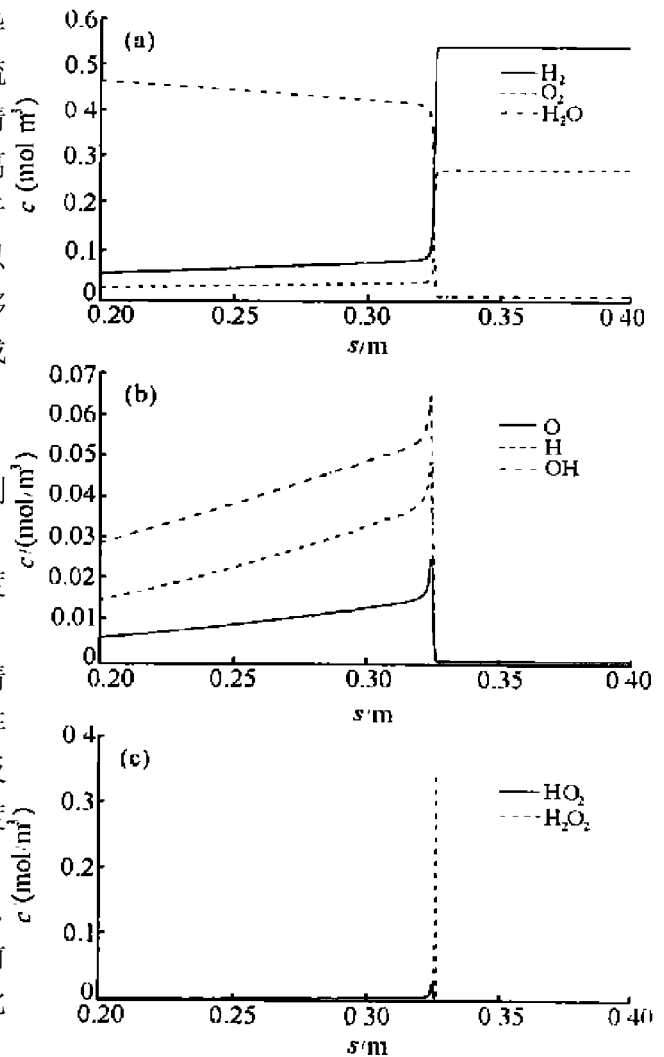


图5 200 $\mu\text{s}$  时刻各组分摩尔浓度分布图

Fig.5 Concentration of compositions at 200 $\mu\text{s}$

慢下来。

慢变化。第二类为浓度变化较小的 OH、O 和 H，其峰值浓度量级为  $10^{-2} \text{mol/m}^3$ 。它们迅速达到尖峰后在反应区快速衰减，然后在稀疏波区缓慢衰减并达到稳定值。第三类为浓度变化最小的  $\text{H}_2\text{O}_2$  和  $\text{HO}_2$ 。 $\text{HO}_2$  的变化规律虽然和第二类组分变化规律相近，但它的峰值浓度只有  $10^{-5} \text{mol/m}^3$  且衰减更快。 $\text{H}_2\text{O}_2$  峰值浓度稍高，为  $10^{-4} \text{mol/m}^3$ ，但衰减速度比  $\text{HO}_2$  还要快，其浓度超过  $10^{-4} \text{mol/m}^3$  的时间只有  $0.6 \mu\text{s}$  左右。以上分析表明，不同组分在爆轰波化学反应中的特征和起的作用并不相同，甚至有很大差别，这为进一步采用合理的简化的化学反应模型<sup>[12]</sup> 模拟爆轰波的结构提供了线索。

### 3.5 网格研究

本文的数值计算结果表明，不同网格尺寸条件下对稳定爆轰时的各状态的分布影响很小。从表 1 的结果可以看出，平均爆速、C-J 爆压和壁面压力在不同的网格尺寸下皆收敛于相同的值。网格尺寸引起计算结果的主要差别是化学反应区长度和前导激波强度的变化。图 6 给出化学反应区长度和 von Neumann 峰值随网格尺寸减小的变化情况。从图上可以看出，化学反应区长度随着网格尺寸的减小而减小，前导激波的 von Neumann 压力峰值随着网格尺寸的减小而增高，然而它们的变化不是线性的，而是随着网格尺寸的减小收敛于固定值，拟合的结果表明他们分别收敛于  $0.023\text{m}$  和  $1.82p_{CJ}$ 。

网格移动对计算结果的影响和网格移动速度与爆速的关系相关。当网格移动速度和爆速差别较大时，对计算结果几乎没有影响。当网格移动速度和爆速差别较小时，计算的爆轰参数虽然也变化很小，但是除压力波形外，前导激波后区域的密度、温度、浓度分布波形都出现周期性振荡。图 7 给出了当网格速度为稳定爆速时计算的化学反应区中的  $\text{H}_2$ 、 $\text{O}_2$  和  $\text{H}_2\text{O}$  的浓度分布。不同网格尺寸的计算结果表

表 1 网格尺寸和爆轰参数

Table 1 Grid size and detonation parameters

网格尺寸 /mm	爆速 /(m/s)	C-J 爆压 /kPa	壁面压力 /kPa	von Neumann 峰压力 /kPa	爆轰波宽度 /mm
2.0000	1615	93.6	39.1	130	32
1.0000	1615	93.6	39.1	141	23
0.5000	1615	93.6	39.1	151	22
0.3333	1615	93.6	39.1	157	21
0.2500	1615	93.6	39.1	161	21

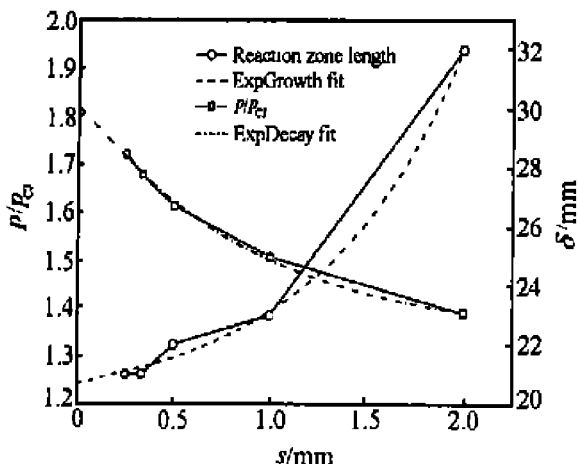


图 6 von Neumann 峰值和反应区长度与网格尺寸关系

Fig.6 von Neumann spike and reaction zone length versus grid size

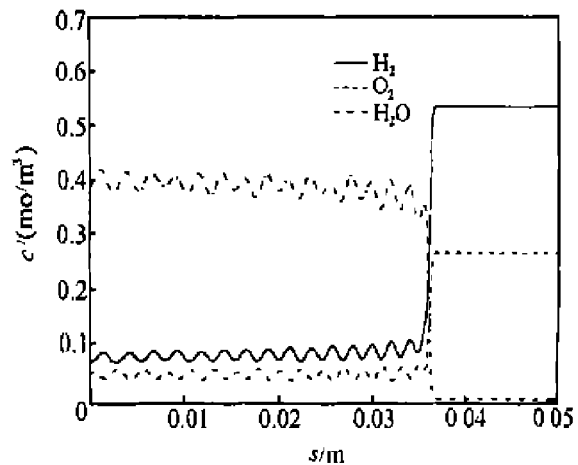


图 7  $170 \mu\text{s}$  时刻  $\text{H}_2$ 、 $\text{O}_2$ 、OH 和  $\text{H}_2\text{O}$  摩尔浓度分布图

Fig.7 Concentration of  $\text{H}_2$ ,  $\text{O}_2$ , OH and  $\text{H}_2\text{O}$  at  $170 \mu\text{s}$

明, 振荡引起的波动的波长和网格尺寸成正比, 但跨越的网格数总是恒定的, 一般为 8 个格点。另外, 无反应激波移动网格计算的结果表明并没有振荡情况。因此, 这种振荡可能与爆轰波非稳定性振动以及网格之间的共振有关, 但具体的机理仍然不清楚。

#### 4 讨论与结论

采用高精度格式和以基元反应为基础的真实化学模型, 对低压混合气体(摩尔比为  $n(\text{H}_2) : n(\text{O}_2) : n(\text{Ar}) = 2 : 1 : 7$ )爆轰的直接起爆和传播特性进行了一系列的数值模拟研究。这些研究验证了采用真实化学反应模型计算的爆轰波结构的可靠性以及其对网格尺寸和网格移动的影响, 并同时验证了所采用差分格式、化学反应计算以及两者耦合和化学反应过程中的温度的处理方法。

采用不同的网格尺寸时, 计算的爆轰速度、稳定爆压等全局量相同。而计算的前导激波强度和反应区长度等局部量则和网格的尺寸相关, 因此要计算更加精确的爆轰波的结构则需要更小的网格尺寸。移动网格的研究表明, 网格运动和爆轰波之间的非线性共振关系是一个值得注意的因素。

采用的真实化学反应模型基于基元化学反应, 反应物的分解、生成物的形成以及一系列的链分支反应的机理和作用过程十分明晰, 在不同的条件下的能量转化过程完全由各基元反应自身的特性决定而不需要进行各种经验参数控制。因此这种化学反应模型更加适合于研究各种爆轰过程问题, 计算的爆轰波精细结构也更加合理。由于采用真实化学反应模型计算效率不高, 因而许多问题仍然希望采用简化的反应模型计算, 以提高计算效率。但是可以通过将真实化学模型的计算结果与采用简化模型计算结果进行比较的方法改进简化模型或者模型参数, 文中对反应区组分分布和特性的分析, 应当有利于这方面的工作。

#### 参考文献:

- [1] Harten R J. High Resolution Schemes for Hyperbolic Conservation Laws [J]. *Journal of Computational Physics*, 1983, 49(1): 231-303.
- [2] Shu W C, Osher S. Efficient Implementation of Essentially Non-oscillatory Shock-capturing Schemes I [J]. *Journal of Computational Physics*, 1988, 77(2): 439-471.
- [3] Jiang G S, Shu C W. Efficient Implementation of Weighted ENO Schemes [J]. *Journal of Computational Physics*, 1996, 126(1): 202-228.
- [4] Taki S, Fujiwara T. Numerical Analysis of Two-dimensional Nonsteady Detonations [J]. *AIAA Journal*, 1978, 16(1): 73-77.
- [5] Schoffel S J, Ebert F. Numerical Analysis Concerning the Spatial Dynamics of an Initially Plane Gaseous ZND Detonation [J]. *Shock Waves, Explosions and Detonations, Prog in Astro and Aero*, 1988, 114(1): 3-11.
- [6] Lefebvre M H. Simulation of Cellular Structure in a Detonation Wave [J]. *Shock Waves, Explosions and Detonations, Prog in Astro and Aero*, 1991, 153: 64.
- [7] Oran E S, Boris J P. Numerical Simulation of Reactive Flow [M]. New York: Elsevier Press, 1987.
- [8] Westbrook C K. Hydrogen Oxidation Kinetics in Gaseous Detonation [J]. *Combustion Science and Technology*, 1982, 29(1): 67-81.
- [9] Yong T R. CHEMEQ-Subroutine for Solving Stiff Ordinary Differential Equations [R]. AD-A0835545, 1979.
- [10] Gordon S, McBride B J. Computer Program for Calculation of Complex Chemical Equilibrium Compositions, Rocket Performance, Incident and Reflected Shocks, and Chapman-Jouget Detonations [R]. NASA SP273, 1971.
- [11] Lefebvre M H. Computations of Detonation Structure; the Influence of Model Input Parameter [R]. NRL/MR/4404-92-6961, 1992.
- [12] Peters N, Rogg B. Reduced Kinetic Mechanisms for Application in Combustion Systems, Part I: Flames [M]. Berlin: Springer-Verlag, 1993.

## Numerical Simulation of Gaseous Detonation of H<sub>2</sub>-O<sub>2</sub> Mixture with Detailed Chemical Reaction Model

HU Xiang-yu<sup>1,2</sup>, ZHANG De-liang<sup>1</sup>

(1. *LHD, Institute of Mechanics, Chinese Academy of Science, Beijing 100080, China;*

2. *National Laboratory of Explosion and Safety Science, Beijing Institute of Technology, Beijing 100081, China*)

**Abstract:** With a high resolution ENO (Essentially Non-oscillatory) scheme and a detailed chemical reaction model, one dimensional detonation wave structure of H<sub>2</sub>-O<sub>2</sub> mixture was calculated. The numerical results were good agreement with experimental data. The refined structures of reaction zones were discussed. The effects of grid size and moving grid were investigated.

**Key words:** detonation wave; numerical simulation; elementary reaction; grid