文章编号:1000-5773(2008)04-0350-07

气相爆轰波数值模拟中化学反应模型研究*

王 刚[1],张德良[2],刘凯欣[1]

(1. 北京大学工学院力学与空天技术系和湍流与复杂系统研究国家重点实验室,北京 100871;
2. 中国科学院力学研究所,北京 100080)

摘要:基于改进的时-空守恒元解元算法对气相爆轰波数值模拟中 3 种常用化学反应模型(二步模型,基元反应模型和 Sichel 的二步模型)进行了考察。对平面爆轰波和具有胞格结构的爆轰波进行了数值模拟,并对数值结果进行了比较和讨论。结果表明:3 种化学反应模型得到的爆轰参数准确性有所差异,但得到的胞格结构均能和实验结果较好吻合。3 种化学反应模型在爆轰波数值模拟中各有优缺点,应视具体问题决定使用哪种化学反应模型。

关键词:CE/SE 算法;爆轰波;胞格结构;数值模拟

中图分类号:O381 **文献标识码**:A

1 引 言

气相爆轰波传播是一个十分复杂的现象,长期以来人们主要通过实验手段对爆轰波进行研究。从 20 世纪 80 年代以来,随着计算方法和计算机技术的进一步发展,爆轰的数值模拟也迅速发展起来。采用数值方法研究爆轰问题时主要要处理好两方面的问题:一是处理好爆轰波的强间断,主要体现在采用的数值格式上;二是处理好爆轰波中化学反应和能量释放的过程,主要体现在采用适当的化学反应模型上。

随着各种高分辨率格式(例如 TVD(Total Variation Diminishing)格式[1]、CE/SE(The Space-Time Conservation Element and Solution Element Method)格式[2-3]等)的出现,第一方面的问题已经得到很好的解决。目前,在解决爆轰波问题时较常用的化学反应模型有 C-J 模型,一步、二步模型,基元反应模型和 Sichel 的二步模型。其中 C-J 模型有解析解,一步模型和二步模型只是相差一个诱导反应。因此,二步模型,基元反应模型和 Sichel 的二步模型是数值模拟中常用的 3 种化学反应模型。二步模型能抓住爆轰波传播过程的主要特征,并且不需要很大的计算量。2002 年,Sichel[4]等提出了一种新的二步模型,我们称之为 Sichel 的二步模型。该模型考虑气体组分变化,弥补了原二步模型只考虑单位质量气体反应热 Q 的释放这一缺陷,使得二步模型的计算精度大幅度提高。基元反应模型真实地反映了爆轰反应过程,能够更好地发现和解释爆轰现象。虽然这 3 种化学反应模型已经在爆轰波数值模拟中得到广泛应用,但对于这 3 种模型间的差别缺少定量和全面的比较。

本研究将基于改进的 CE/SE 算法对气相爆轰波数值模拟中上述 3 种常用化学反应模型进行考察。使用这 3 种化学反应模型对平面爆轰波和具有胞格结构的爆轰波进行了数值模拟。通过对爆轰参数、计算要求、胞格结构尺寸等方面的比较,讨论了 3 种化学反应模型的优缺点。

* **收稿日期**:2007-11-22;**修回日期**:2008-03-03
基金项目:国家自然科学基金(20490206)
作者简介:王 刚(1980—),男,博士研究生,主要从事计算流体力学和爆轰波数值模拟研究. E-mail:wg1208@163.com
通讯作者:张德良(1939—),男,研究员,主要从事计算流体力学研究. E-mail:dlzhang@imech.ac.cn

2　化学反应模型

2.1　二步模型

二步模型将复杂的反应过程简化为两个阶段:诱导阶段和放热阶段。诱导进行度 α($0\leqslant\alpha\leqslant1$,$\alpha=1$ 表示还未进行诱导反应,$\alpha=0$ 表示诱导反应完成)和反应进行度 β($0\leqslant\beta\leqslant1$,$\beta=1$ 表示还未进行化学反应,$\beta=0$ 表示化学反应完成)的变化速率 ω_α、ω_β 常采用二级可逆反应形式[5]

$$\begin{cases}\omega_\alpha=-k_\alpha\rho\exp\left(-\dfrac{E_\alpha}{RT}\right)\\ \omega_\beta=\begin{cases}0 & (\alpha>0)\\ \omega_\beta^+ +\omega_\beta^-=-k_\beta p^2\left[\beta^2\exp\left(-\dfrac{E_\beta}{RT}\right)-(1-\beta)^2\exp\left(-\dfrac{E_\beta+Q}{RT}\right)\right] & (\alpha\leqslant0)\end{cases}\end{cases}\tag{1}$$

式中:k_α、k_β 分别为诱导反应和放热反应速率常数;ρ、T、p 和 R 分别为参加反应的可燃气体的密度、温度、压力和气体常数;E_α 为诱导反应的活化能;E_β 和 $E_\beta+Q$ 分别表示正、逆向化学反应活化能,p 为混合气体压强,Q 为单位质量气体的反应热。参数选取参考文献[6]。

2.2　基元反应模型

基元反应模型能够真实地反映爆轰反应过程。不同的基元反应所采用的组分、方程数目各不相同,例如本研究采用 8 组分 20 基元反应模型(如表 1 所示)描述 H_2+O_2 爆轰的化学反应机制。组分为 H_2、O_2、H、O、OH、HO_2、H_2O 和 H_2O_2。化学反应统一写为

$$\sum_{i=1}^{n_s}v_{ki}'X_i\leftrightarrow\sum_{i=1}^{n_s}v_{ki}''X_i\tag{2}$$

式中:n_s($n_s=8$)为组分数;$k=1,\cdots,n_r$,n_r($n_r=20$)为基元反应数;X_i 表示组分;v_{ki}'和 v_{ki}''分别为正向和逆向反应的各组分化学计量系数。

表 1　H_2+O_2 8 组分 20 反应模型

Table 1　Detailed chemical reaction model of hydrogen-oxygen mixture (Unit:mol,s,cm,K,J)

No.	Reaction	A	n	E_a	No.	Reaction	A	n	E_a
1	$H_2+O_2=2OH$	1.70×10^{13}	0.0	200 055	11	$H+H+H_2=H_2+H_2$	9.20×10^{16}	−0.6	0
2	$OH+H_2=H_2O+H$	1.17×10^{9}	1.3	15 182	12	$H+H+H_2O=H_2+H_2O$	6.00×10^{19}	−1.3	0
3	$O+OH=O_2+H$	4.00×10^{14}	−0.5	0	13	$H+OH+M=H_2O+M$	1.60×10^{23}	−2.0	0
4	$O+H_2=OH+H$	5.06×10^{4}	2.7	26 336	14	$H+O+M=OH+M$	6.20×10^{16}	−0.6	0
5	$H+O_2+M=HO_2+M$	3.61×10^{17}	−0.7	0	15	$O+O+M=O_2+M$	1.89×10^{13}	0.0	−7 486
6	$OH+HO_2=H_2O+O_2$	7.50×10^{12}	0.0	0	16	$H+HO_2=H_2+O_2$	1.25×10^{13}	0.0	0
7	$H+HO_2=2OH$	1.40×10^{14}	0.0	4 493	17	$HO_2+HO_2=H_2O_2+O_2$	2.00×10^{12}	0.0	0
8	$O+HO_2=O_2+OH$	1.40×10^{13}	0.0	4 493	18	$H_2O_2+M=2OH+M$	1.30×10^{17}	0.0	190 509
9	$2OH=O+H_2O$	6.00×10^{8}	1.3	0	19	$H_2O_2+H=HO_2+H_2$	1.60×10^{12}	0.0	15 910
10	$H+H+M=H_2+M$	1.00×10^{18}	−1.0	0	20	$H_2O_2+OH=H_2O+HO_2$	1.00×10^{13}	0.0	7 537

Note:The third-body effect coefficient:(5) $C_{H_2O}=18.6$,$C_{H_2}=2.86$;
(10) $C_{H_2O}=0$,$C_{H_2}=0$;
(13) $C_{H_2O}=5.0$;
(14) $C_{H_2O}=5.0$;others $C=1.0$.

第 i 种组分的密度生成率为

$$\dot{\omega}_i=W_i\sum_{k=1}^{n_r}(v_{ki}''-v_{ki}')R_{P,k}\tag{3}$$

式中：$R_{P,k}$为第 k 个可逆化学反应的进行速率；W_i 为第 i 种组分的分子量。

2.3 Sichel 的二步模型[4]

在 Sichel 的二步模型中，ω_α 和 ω_β 的形式为

$$\begin{cases}\dot{\omega}_\alpha = \dfrac{p}{3R_0T}\cdot\exp\left[35.1715-\dfrac{8\,530.6}{T}-7.22\times10^{-11}p^2\cdot\exp\left(\dfrac{21\,205}{T}\right)\right] \\ \dot{\omega}_\beta = \begin{cases}0 & \alpha>0\\ (1-\beta)\cdot a\cdot\exp(-b/T)+c & \alpha\leqslant 0\end{cases}\end{cases} \tag{4}$$

式中：p 为压强，单位是 0.1 MPa；T 为温度，单位是 K；R_0($R_0=8.314$ J/(mol·K))是普适气体常数；本文中 $a=1.20\times10^8$，$b=8\times10^3$，$c=0$。

Sichel 的二步模型中假设各种组分质量分数以相同的速率变化，即用 β 表示各组分的反应进行度。各组分浓度 $Y_i=(Y_{P,i}-Y_{R,i})\beta+Y_{R,i}$，其中 $Y_{R,i}$为初始反应物中各组分的质量分数，$Y_{P,i}$为反应达到平衡后产物中各组分的质量分数。$Y_{R,i}$和 $Y_{P,i}$采用基元反应的计算结果。

3 控制方程和数值方法

3.1 控制方程

采用 Euler 方程描述爆轰化学反应过程，在二维笛卡儿坐标系中控制方程为

$$\frac{\partial \boldsymbol{Q}}{\partial t}+\frac{\partial \boldsymbol{E}}{\partial x}+\frac{\partial \boldsymbol{F}}{\partial y}=\boldsymbol{S} \tag{5}$$

对二步模型：$\boldsymbol{Q}=(\rho,\rho u,\rho v,E,\rho\alpha,\rho\beta)$，$\boldsymbol{E}=(\rho u,\rho u^2+p,\rho uv,(E+p)u,\rho\alpha u,\rho\beta u)$，$\boldsymbol{F}=(\rho v,\rho uv,\rho v^2+p,(E+p)v,\rho\alpha v,\rho\beta v)$，$\boldsymbol{S}=(0,0,0,0,\omega_\alpha,\omega_\beta)$；对基元反应模型：$\boldsymbol{Q}=(\rho C_i,\rho u,\rho v,E)$，$\boldsymbol{E}=(\rho uC_i,\rho u^2+p,\rho uv,(E+p)u)$，$\boldsymbol{F}=(\rho vC_i,\rho uv,\rho v^2+p,(E+p)v)$，$\boldsymbol{S}=(\omega_i,0,0,0)$。其中：$\rho$、$u$、$v$、$p$ 分别是密度、x 方向的速度分量、y 方向的速度分量、压强；C_i($i=1,\cdots,n_s$)为第 i 种组分的质量分数，ω_i 为第 i 种组分的单位体积的质量生成率。E 为单位体积的总能。

在二步模型中不考虑化学组分，只考虑了单位质量混合气体的反应热 Q 的释放，其单位体积的总能 E 形式如下

$$E=\frac{p}{\gamma-1}+\frac{\rho(u^2+v^2)}{2}+\rho\beta Q \tag{6}$$

式中：γ 为气体的绝热指数。在基元反应模型和 Sichel 的二步模型中，单位体积的总能 E 形式如下

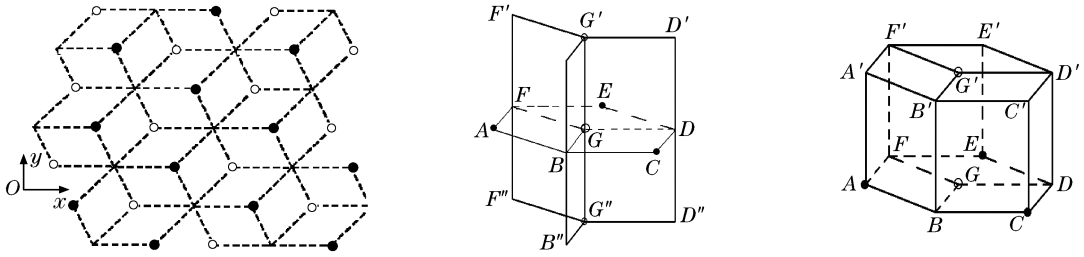
$$E=\rho h-p+\frac{\rho}{2}(u^2+v^2) \tag{7}$$

式中：焓 h 通过热化学关系式 $h=h(\rho_i,T)$[7]求得。3 种模型均采用理想气体状态方程，$p=\rho RT$。

3.2 CE/SE 方法的改进

自从 1995 年 Chang 提出 CE/SE 算法以来[8]，CE/SE 算法在计算流体力学中得到广泛应用。但是在应用中我们发现 CE/SE 方法也存在一些问题，例如单元结构复杂、程序编写复杂和很难向三维推广等。为此，在原 CE/SE 算法基础上，我们提出了一种改进的 CE/SE 算法[9]。在改进的 CE/SE 算法中直接采用 4 个守恒元来求解 Euler 方程组，虽然这样做需要增加一个守恒元，但是它可以简单、清晰和直接地求解具有激波间断的流场。这种改进后的 CE/SE 算法具有编程方便、计算时间少和便于向三维推广的特点。

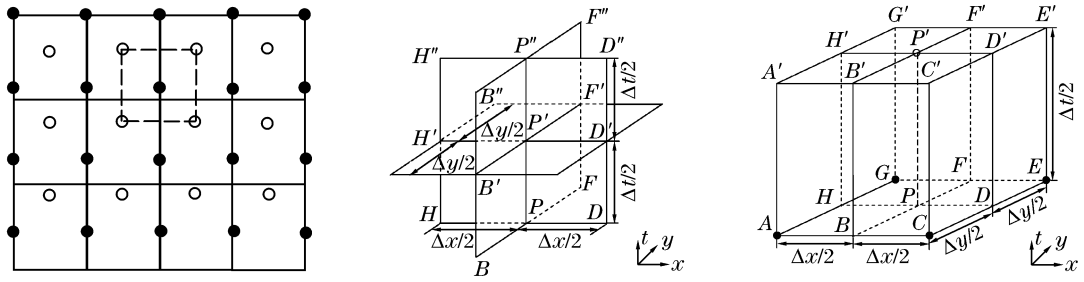
图 1 给出了 Chang 提出 CE/SE 算法中的解元和守恒元的网格结构，而图 2 给出了我们改进的 CE/SE算法的解元和守恒元的网格结构。



(a) Mash structure　　(b) Solution element SE(G)　　(c) Conservation element CE(G)

图 1　Chang 提出的 CE/SE 算法的解元和守恒元网格结构[8]

Fig. 1　Mesh construction of the original CE/SE method by Chang[8]



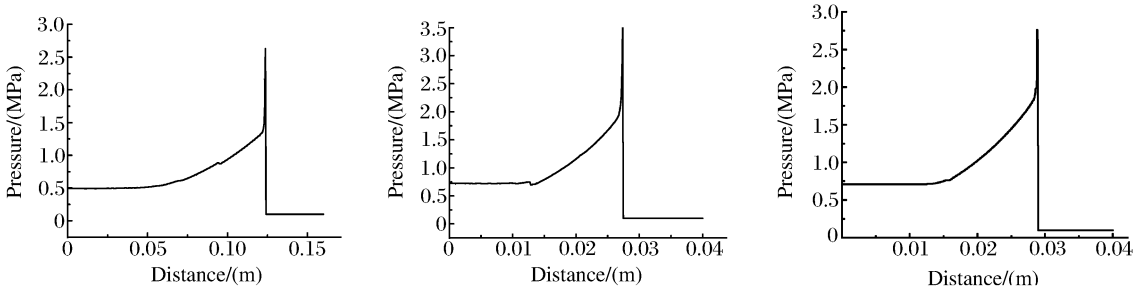
(a) Mash structure　　(b) Solution element SE(P')　　(c) Conservation element CE(P')

图 2　改进的 CE/SE 算法的解元和守恒元网格结构

Fig. 2　Mesh construction of the improved CE/SE method

4　数值结果及分析

本计算模型的初始状态为在封闭的直管道内充满 H_2-O_2(2∶1)混合气体。初始压力和温度为 0.1 MPa和 298 K。在管道左端点火区加一个高温高压的初始条件。图 3 给出了 3 种模型得到压力分布图,3 种模型均能得到典型的爆轰波压力分布图。表 2 给出了 3 种模型模拟平面爆轰波所得到的爆轰参数。通过比较可以发现:(1) 3 种模型得到的爆速均能很好地和实验相吻合,相对误差均小于 3%;(2) 二步模型得到的温度有较大误差,Sichel 的二步模型相对误差为 12.7%,但较二步模型相对误差减少 18.5%,基元反应模型相对误差在 5%以内;(3) Sichel 的二步模型和基元反应模型得到 C-J 压力均较准确,二步模型有一定的误差。总的来看基元反应模型较为准确,Sichel 的二步模型次之,二步模型最差。但相同条件下,二步、Sichel 的二步和基元反应模型耗费计算时间比大约为 1.0∶2.5∶3.2,使用的内存比约为 1.0∶1.4∶3.1。



(a) Two-step chemical model　　(b) New two-step chemical model　　(c) Detailed chemical reaction model

图 3　3 种化学反应模型得到的压力分布图(网格数 1 000)

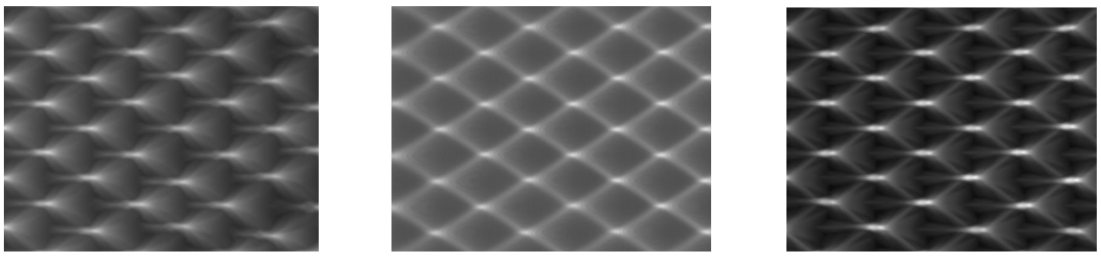
Fig. 3　Pressure profiles obtained from the three chemical reaction models(1 000 meshes)

表 2 3 种模型得到的爆轰参数(网格数 1 000)

Table 2 Properties of detonations from the three chemical reaction models(1 000 meshes)

Method	Detonation velocity/(m/s)	Temperature/(K)	C-J pressure/(MPa)
Experiment[13]	2 825	3 583	1.860
C-J theory[13][1]	2 853	—	1.859
Two-step chemical model	2 784	2 466	1.255
New two-step chemical model	2 908	4 037	1.870
Detailed chemical reaction model	2 826	3 421	1.860

我们还使用改进的 CE/SE 算法和 3 种化学反应模型对具有胞格结构的爆轰波进行了数值模拟。图 4 给出了采用二步模型、基元反应模型和 Sichel 的二步模型得到的部分数值胞格结构。为了得到胞格结构,形成爆轰后在波阵面上加入了人工扰动。图 5 为烟熏金属片记录下来的爆轰波胞格结构[10]。通过对比发现这 3 种模型得到的数值胞格能够很好地和实验结果吻合。为了定量比较 3 种模型得到的胞格结构,表 3 给出了 3 种模型得到的胞格尺寸,同时给出了实验结果。通过比较可以发现,这 3 种化学反应模型得到的爆轰波胞格结构均能较好地和实验结果吻合。



(a) Two-step chemical model (b) New two-step chemical model (c) Detailed chemical reaction model

图 4 3 种化学反应模型得到的胞格结构(网格数 250×200)

Fig. 4 Cellular patterns by the three chemical reaction models (250×200 meshes)

表 3 3 种模型得到的胞格尺寸

Table 3 Cell parameters from the three chemical reaction models

Method	Cell width/Cell length (d/l)	Exit angle α/(°)	Entrance angle β/(°)	Angle of transverse wave trace ω/(°)
Experiment	0.5～0.6	5～10	32～40	≈30
Two-step chemical model	0.59	9.2	33.0	30.5
New two-step chemical model	0.60	11.2	31.5	29.0
Detailed chemical reaction model	0.51	9.5	38.2	28.5

应该注意到,二步模型编程简单,计算时间短,对电脑要求较低,但得到的数值结果能够反映爆轰波的基本性质。特别是 Sichel 的二步模型的提出,使计算得到的爆轰参数的精度得到很大提高,但计算量也相应增加。基元反应模型虽然编程复杂,计算时间较长,但得到的爆轰参数最为准确,且能得到组分的分布和变化情况。Sichel 的二步模型虽然也能得到组分的分布和变化情况,但是根据反应进行度 β 得到的,和二步模型没有本质区别,不能正确反

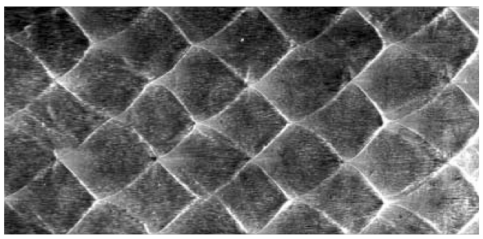
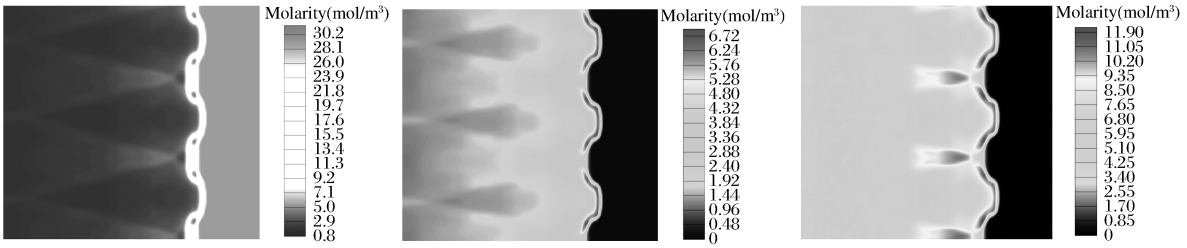


图 5 实验得到的胞格结构

Fig. 5 Cellular patterns obtained by experiments

应爆轰波阵面内的组分情况,只是计算得到的爆轰参数较为准确。图 6 给出了基元反应模型得到的爆轰波阵面附近 H_2、H 和 H_2O 的摩尔浓度分布图,这是两种二步模型所不能得到的。因此,基元反应模型以其计算准确和能够真实反映化学反应过程在爆轰机理研究方面[11]起着这不可替代的作用。而二步模型以其要求较低和能够反映爆轰主要特性在工程应用[12]中被广泛使用。

上述讨论,尤其是计算时间和所需内存是针对 H_2-O_2 爆轰,当化学组分增多时,使用基元反应模型所需的计算时间和内存还要相应地增加,而两种二步模型基本不变。因此对于复杂组分气体(例如汽油蒸汽)爆轰问题,两种二步模型较有优势,其中 Sichel 的二步模型的优势更为明显。



(a) Contours of the molarity of H_2　(b) Contours of the molarity of H　(c) Contours of the molarity of H_2O

图 6　组分摩尔浓度分布图(网格数 120×120)

Fig. 6　Contours of molarities (120×120 meshes)

5　结　论

基于改进的 CE/SE 算法对气相爆轰数值模拟中 3 种常用化学反应模型(二步模型,基元反应模型和 Sichel 的二步模型)进行了考察。分别使用这 3 种模型对平面爆轰波和具有胞格结构的爆轰波进行了数值模拟。通过对爆轰参数、计算要求、胞格结构尺寸等方面的比较和讨论,可以得到以下结论:

(1) 3 种化学反应模型均能得到准确的爆轰速度和胞格结构;

(2) 二步模型能够定性反映爆轰波的基本特性,而且要求较低,因此在一般工程应用和定性数值模拟中有广泛的发展空间;

(3) 基元反应模型得到的气动参数准确,能够准确模拟爆轰波传播过程中的细节,故机理性研究应采用基元反应模型,对于精度要求较高的应用问题,也应使用基元反应模型;

(4) Sichel 的二步模型提高了二步模型的计算精度,计算量也有所增加,但对于复杂组分气体爆轰,Sichel 的二步模型有着明显优势和广泛应用前景。

References:

[1] Harten A. High Resolution Schemes for Hyperbolic Conservation Law [J]. J Comput Phys,1983,49:357-393.

[2] Zhang Z C,John Yu S T,Hao H,et al. Direct Calculations of Two-and Three-Dimensional Detonations by an Extended CE/SE Method [R]. AIAA 2001-0476,2001,

[3] Wang B,Hao H,John Yu S T. Direct Calculation of Wave Implosion for Detonation Initiation in Pulsed Detonation Engines [R]. AIAA 2005-1306,2005,

[4] Sichel M,Tonello N A,Oran E S,et al. A Two-Step Kinetics Model for Numerical Simulation of Explosions and Detonations in H_2-O_2 Mixtures [J]. Proceedings of the Royal Society of London Series A-Mathematical Physical and Engineering Sciences,2002,458 (2017):49-82.

[5] Shiro T,Toshi F. Numerical Simulation on the Establishment of Gaseous Detonation [J]. Progress in Astronautics and Aeronautics,1984,94:186-200.

[6] Smirnov N N,Panfilov I I. Deflagration to Detonation Transition in Combustible Gas Mixtures [J]. Combustion and

Flame,1995,101:91-100.

[7] McBride B J,Zehe M J,Gordon S. NASA Glenn Coefficients for Calculating Thermodynamic Properties of Individual Species [R]. NASA/TP-2002-211556,2002,

[8] 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]. J Comput Phys,1995,119:295-324.

[9] Wang G,Zhang D L,Liu K X. An Improved CE/SE Scheme and Its Application to Detonation Propagation [J]. Chinese Physics Letters,2007,24(12):3563-3566.

[10] Achasov O V,Penyazkov O G. Dynamics Study of Detonation-Wave Cellular Structure—(1) Statistical Properties of Detonation Wave Front [J]. Shock Waves,2002,11:297-308.

[11] Oran E S,Weber J W,Stefaniw E I,et al. A Numerical Study of a Two-Dimensional H_2-O_2-Ar Detonation Using a Detailed Chemical Reaction Model [J]. Combustion and Flame,1998,113:147-163.

[12] Liu C L,Zhang D L,Hu Z M,et al. Numerical Simulation of Forward-Running Detonation Drivers for High-Enthalpy Shock Tunnels [J]. Chinese Journal of Computational Mechanics,2005,22 (4):425-430. (in Chinese)
刘长礼,张德良,胡宗民,等. 正向爆轰驱动高焓激波风洞的数值模拟 [J]. 计算力学学报,2005,22(4):425-430.

[13] Nettleton M A. Gaseous Detonations:Their Nature,Effects and Control [M]. London,New York:Chapman and Hall,1987:30-31.

Study on Chemical Reaction Models in Gaseous Detonation Numerical Simulation

WANG Gang[1],ZHANG De-Liang[2],LIU Kai-Xin[1]

(1. *LTCS and Department of Mechanics & Aerospace Engineering, College of Engineering, Peking University, Beijing* 100871, *China*;
2. *Institute of Mechanics, Chinese Academy of Sciences, Beijing* 100080, *China*)

Abstract: Three common chemical reaction models in gaseous detonation numerical simulation have been studied in this work based on an improved space-time conservation element and solution element method. Planar and cellular detonations have been simulated and the numerical results have been compared and discussed. We found that all the cellular patterns simulated by the three chemical reaction models could agree well with the experimental results, though the accuracies of detonation parameters calculated by the three chemical reaction models were rather different. The three chemical reaction models have respective advantage and disadvantage. Adopting which chemical reaction model should consider the specified problems.

Key words: CE/SE method; detonation wave; cellular pattern; numerical simulation