文章编号：1000-5773(2004)01-0040-07

氢气-空气混合物中瞬态爆轰过程的二维数值模拟*

董 刚，范宝春，谢 波

（南京理工大学动力工程学院，江苏南京 210094）

摘要：对高温火团引发的氢气-空气混合气的瞬态爆轰过程进行了二维数值模拟，考虑了 H_2-O_2-N_2 的详细化学反应动力学机理，该机理包含了 19 个基元反应和 9 种组分。采用分裂格式处理带化学反应的 Euler 方程，其中使用全耦合的 TVD 格式求解流场，使用基于 Gear 算法的微分方程解法器求解化学反应过程。计算结果表明：在 $H_2:O_2:N_2=0.4:0.4:0.2$（摩尔比）的混合气中，高温气团初始温度为 $T/T_0=5.3$ 时可诱导爆轰，爆轰波以 2300 m/s 的速度传播，同时爆轰波阵面在管壁会形成反射波。还对计算的爆轰波后组分的浓度和温度进行了讨论，为理解爆轰波后结构提供信息。

关键词：爆轰波；化学反应机理；数值模拟

中图分类号：O381 **文献标识码**：A

1 引 言

可燃混合气可以通过高温火团诱导爆轰，这一过程不仅对了解和防治爆炸灾害的发生，而且对于在脉冲爆轰发动机（Pulse Detonation Engine，PDE）中的应用，都具有重要的理论价值和实际意义。数值研究表明[1~3]，初始高温火团在燃烧过程中导致组分和温度梯度，会使燃烧加速，在适当的条件下导致爆轰波的形成。已经进行的理论研究主要集中在一维问题，考虑的化学反应主要是单步或两步反应。因此，复杂反应系统中高温火团诱导的瞬态爆轰过程仍是一个值得研究的问题。

本研究以氢气-空气可燃混合气为研究对象，考虑复杂的反应系统，对其高温火团诱导的瞬态爆轰过程进行了二维数值模拟。其中使用了氢气-空气的详细化学反应动力学机理，包含了 19 步基元反应和 9 种组分，对计算结果进行了讨论和分析。

2 数学模型

2.1 基本方程

本研究采用二维的、带化学反应的 Euler 方程

$$\frac{\partial U}{\partial t}+\frac{\partial F}{\partial x}+\frac{\partial G}{\partial y}=S \tag{1}$$

式中

$$U=\begin{pmatrix}\rho Y_1\\ \vdots\\ \rho Y_k\\ \rho u\\ \rho v\\ E\end{pmatrix},F=\begin{pmatrix}\rho u Y_1\\ \vdots\\ \rho u Y_k\\ \rho u^2+p\\ \rho u v\\ u(E+p)\end{pmatrix},G=\begin{pmatrix}\rho v Y_1\\ \vdots\\ \rho v Y_k\\ \rho u v\\ \rho v^2+p\\ v(E+p)\end{pmatrix},S=\begin{pmatrix}\dot\omega_1\\ \vdots\\ \dot\omega_k\\ 0\\ 0\\ 0\end{pmatrix} \tag{2}$$

* **收稿日期**：2003-05-06；**修回日期**：2003-07-21

基金项目：国家自然科学基金重点项目（19832030）；南京理工大学科研发展基金（AB41411）

作者简介：董 刚（1970—），男，博士，副教授，主要研究方向为燃烧理论与技术、爆炸力学.

E-mail：dgvehicle@yahoo.com

式中:Y_k 为组分 k 的质量分数,ω_k 为组分 k 的化学反应速率,ρ 为密度,p 为压力,u 和 v 分别为 x 和 y 方向的速度分量,E 为单位体积的总内能,它包含热能、化学能和动能,即

$$E=\rho\int c_V\mathrm{d}T+\sum\rho_k h_k^0+\frac{1}{2}\rho(u^2+v^2) \tag{3}$$

式中:c_V 为混合物的定容比热,表达为 $c_V=\sum c_{Vk}Y_k$;h_k^0 为组分 k 的生成焓;T 为温度。组分 k 的定容比热和生成焓由下式计算

$$\frac{c_{Vk}}{\widetilde{R}}=A_1+A_2T+A_3T^2+A_4T^3+A_5T^4-1 \tag{4}$$

$$\frac{h_k^0}{\widetilde{R}T}=A_1+\frac{A_2}{2}T+\frac{A_3}{3}T^2+\frac{A_4}{4}T^3+\frac{A_5}{5}T^4+\frac{A_6}{T} \tag{5}$$

式中:$\widetilde{R}=R/M_k$,R 为普适气体常数,M_k 为组分 k 的分子量,相关常数 A_n($n=1\sim6$)由热力学数据表查得[4]。

2.2　数值计算方法

本研究考虑的系统包含了两个特征时间,即气相流动特征时间 $\tau_A=L/c_0$(其中 L 为管长,c_0 为初始声速)和化学反应特征时间 $\tau_{\mathrm{ch},k}=RT\exp(RT/E_k)/(QAT^{\beta_k}E_k)$,其中 $Q=Q_C/CT$,Q_C 为反应热。由于两者的值相差较大,给数值计算带来了困难,因此本研究采用分裂格式进行求解

$$U^{n+1}=L_{fx}^{\Delta t/2}L_{fy}^{\Delta t/2}L_c^{\Delta t}L_{fy}^{\Delta t/2}L_{fx}^{\Delta t/2}U^n \tag{6}$$

式中:U^n 和 U^{n+1} 分别为第 n 和第 $n+1$ 个时间步的解,Δt 为时间步长。$L_{fx}^{\Delta t/2}$ 和 $L_{fy}^{\Delta t/2}$ 分别为对流项在 x 和 y 方向半个时间步长的算子,为了提高捕捉激波的精度,采用全耦合 TVD 格式,其中 x 方向的右特征矩阵为

$$\boldsymbol{R}_x=\begin{bmatrix}1&0&\cdots&0&0&Y_1&Y_1\\0&1&\cdots&0&0&Y_2&Y_2\\\vdots&\vdots&\ddots&\vdots&\vdots&\vdots&\vdots\\0&0&\cdots&1&0&Y_k&Y_k\\u&u&\cdots&u&0&u+c&u-c\\v&v&\cdots&v&-1&v&v\\u^2+v^2-\dfrac{p_{\rho_1}}{p_E}&\cdots&\cdots&u^2+v^2-\dfrac{p_{\rho_k}}{p_E}&-v&H+uc&H-uc\end{bmatrix} \tag{7}$$

特征根 λ_x 和 Riemann 不变量 α_x 分别为

$$\lambda_x=\begin{pmatrix}u\\\vdots\\u\\u+c\\u-c\end{pmatrix},\alpha_x=\begin{pmatrix}\Delta\rho_1-Y_1\dfrac{\Delta p}{c^2}\\\vdots\\\Delta\rho_k-Y_k\dfrac{\Delta p}{c^2}\\(\Delta p+\rho c\Delta u)/(2c^2)\\(\Delta p-\rho c\Delta u)/(2c^2)\end{pmatrix}$$

y 方向的右特征矩阵

$$\boldsymbol{R}_y=\begin{bmatrix}1&0&\cdots&0&0&Y_1&Y_1\\0&1&\cdots&0&0&Y_2&Y_2\\\vdots&\vdots&\ddots&\vdots&\vdots&\vdots&\vdots\\0&\cdots&\cdots&1&0&Y_k&Y_k\\u&u&\cdots&u&1&u&u\\v&v&\cdots&v&0&v+c&v+c\\u^2+v^2-\dfrac{p_{\rho_1}}{p_E}&\cdots&\cdots&u^2+v^2-\dfrac{p_{\rho_k}}{p_E}&u&H+cv&H-cv\end{bmatrix} \tag{8}$$

特征根 λ_y 和 Riemann 不变量 α_y 分别为

$$\lambda_y=\begin{pmatrix} v \\ \vdots \\ v \\ v+c \\ v-c \end{pmatrix},\alpha_y=\begin{pmatrix} \Delta\rho_1-Y_1\dfrac{\Delta p}{c^2} \\ \vdots \\ \Delta\rho_k-Y_k\dfrac{\Delta p}{c^2} \\ (\Delta p+\rho c\Delta v)/(2c^2) \\ (\Delta p-\rho c\Delta v)/(2c^2) \end{pmatrix}$$

式中：$H=(E+p)/\rho$ 为总焓，$c^2=\sum Y_k p_{\rho_k}+(H-u^2-v^2)p_E$ 为冻结声速，$\rho_k=\rho Y_k$，$p_{\rho_k}=\partial p/\partial\rho_k$，$p_E=\partial p/\partial E$。

(7)式中 $L_c^{\Delta t}$ 为一个时间步长的化学反应的算子，对于多组分化学反应动力学系统，由于不同物质的反应特征时间相差很大，导致复杂反应系统出现刚性(Stiffness)，因此我们采用基于 Gear 算法的 LSODE 程序[5]求解化学反应过程。

2.3 边界条件

在 x 方向的封闭端为绝热刚性壁面，$\partial T/\partial x=0$，$u=v=0$；在 x 方向的开口端为出口边界条件，$T/T_0=1$，$p/p_0=1$，$\partial u/\partial x=0$，$\partial v/\partial y=0$。在 y 方向，管的上下端均为绝热刚性管壁，因而有 $\partial T/\partial y=0$，$u=v=0$。此外，在壁面附近采用一阶 Roe 格式加入数值粘性，以考虑绝热壁面的无滑移条件，边界的组分浓度和其它参数由考虑化学反应的特征线方程和相容方程来决定。

3 氢气-空气反应动力学机理

对氢气-空气混合气，我们使用含 19 个基元反应和 9 种组分的化学反应机理，见表 1。

表 1 氢气-空气的 19 步化学反应机理

Table 1 19 step chemical reaction mechanism for hydrogen-air (kJ-mol-s)

No.	Element reactions	Pre-exponent factor A_{fi}	Temperature exponent β_{fi}	Activation Energy E_{fi}
1	$H+O_2=O+OH$	0.510×10^{17}	−0.82	69.0
2	$H_2+O=H+OH$	0.180×10^{11}	1.0	36.9
3	$H_2+OH=H_2O+H$	0.120×10^{10}	1.3	15.2
4	$2OH=H_2O+O$	0.600×10^{9}	1.3	0.0
5	$H+OH+M=H_2O+M^{(1)}$	0.750×10^{24}	−2.6	0.0
6	$O_2+M=2O+M$	0.190×10^{12}	0.5	400.0
7	$H_2+M=2H+M^{(2)}$	0.220×10^{13}	0.5	387.1
8	$H_2+O_2=2OH$	0.170×10^{14}	0.0	200.0
9	$H+O_2+M=HO_2+M^{(3)}$	0.210×10^{19}	−1.0	0.0
10	$H+2O_2=HO_2+O_2$	0.670×10^{20}	−1.42	0.0
11	$H+O_2+N_2=HO_2+N_2$	0.670×10^{20}	−1.42	0.0
12	$HO_2+H=H_2+O_2$	0.250×10^{14}	0.0	2.9
13	$HO_2+H=2OH$	0.250×10^{15}	0.0	7.9
14	$HO_2+O=OH+O_2$	0.480×10^{14}	0.0	4.2
15	$HO_2+OH=H_2O+O_2$	0.500×10^{14}	0.0	4.2
16	$2HO_2=H_2O_2+O_2$	0.200×10^{13}	0.0	0.0
17	$H_2O_2+M=2OH+M$	0.120×10^{18}	0.0	190.2
18	$H_2O_2+H=HO_2+H_2$	0.170×10^{13}	0.0	15.7
19	$H_2O_2+OH=H_2O+HO_2$	0.100×10^{14}	0.0	7.5

Note: (1) Enhanced third body coefficient: $H_2O=20.0$; (2) Enhanced third body coefficient: $H=2.0$, $H_2=3.0$, $H_2O=6.0$; (3) Enhanced third body coefficient: $H_2O=21.0$, $O_2=0.0$, $H_2=3.3$, $CO=2.1$, $N_2=0.0$.

在化学反应的计算中,组分 k 的净生成速率 $\dot{\omega}_k$(参见(2)式)可表达如下

$$\dot{\omega}_k = \sum_{i=1}^{I}\left(\gamma''_{ki}-\gamma'_{ki}\right)\left(k_{\mathrm{f}i}\prod_{k=1}^{K}X_k^{\gamma'_{ki}} - k_{\mathrm{b}i}\prod_{k=1}^{K}X_k^{\gamma''_{ki}}\right) \tag{9}$$

式中,γ'_{ki}、γ''_{ki} 分别表示第 i 个基元反应中第 k 种物质正、逆反应计量系数;X_k 为组分 k 的摩尔分数,它与质量分数的转换为 $X_k = Y_k\overline{W}/W_k$($\overline{W}$ 为混合物平均分子量,W_k 为组分 k 的分子量);$k_{\mathrm{f}i}$、$k_{\mathrm{b}i}$ 分别表示第 i 个基元反应的正、逆反应速率常数,它们遵循 Arrhenius 形式

$$k_{\mathrm{f}i} = A_{\mathrm{f}i}T^{\beta_{\mathrm{f}i}}\exp(-E_{\mathrm{f}i}/RT) \tag{10}$$

其中 $A_{\mathrm{f}i}$ 表示第 i 个正反应的指前因子;$\beta_{\mathrm{f}i}$ 表示第 i 个正反应的温度指数;$E_{\mathrm{f}i}$ 表示第 i 个正反应的活化能,见表 1。

4　结果与讨论

考虑一端封闭、一端开口的二维绝热刚性管道,其长度 $X/L=1$,直径 $Y/L=0.1$,见图 1。管道内为 H_2-O_2-N_2 混合气,其初始组成为 $H_2:O_2:N_2=0.4:0.4:0.2$(摩尔比)。在管道的封闭端($X/L=0$),有一 $T/T_0=5.3$ 的初始高温气团,该气团位于封闭端 $0<X/L<0.05$,$0<Y/L<0.1$ 再加上 $R=0.1$ 的 1/4 圆弧所包含的区域(图 1 中阴影部分)。管内其它区域温度 $T/T_0=1$,全管压力 $p/p_0=1$。在计算初始时刻($t=0$,无量纲时间,下同),该气团开始燃烧。

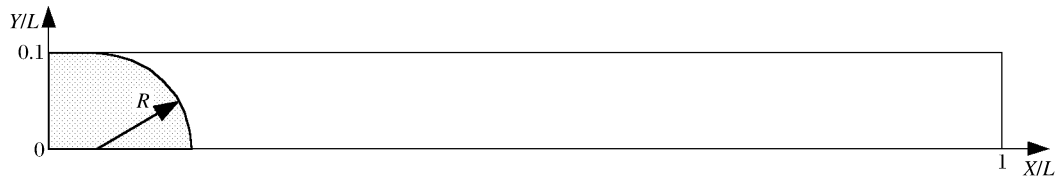
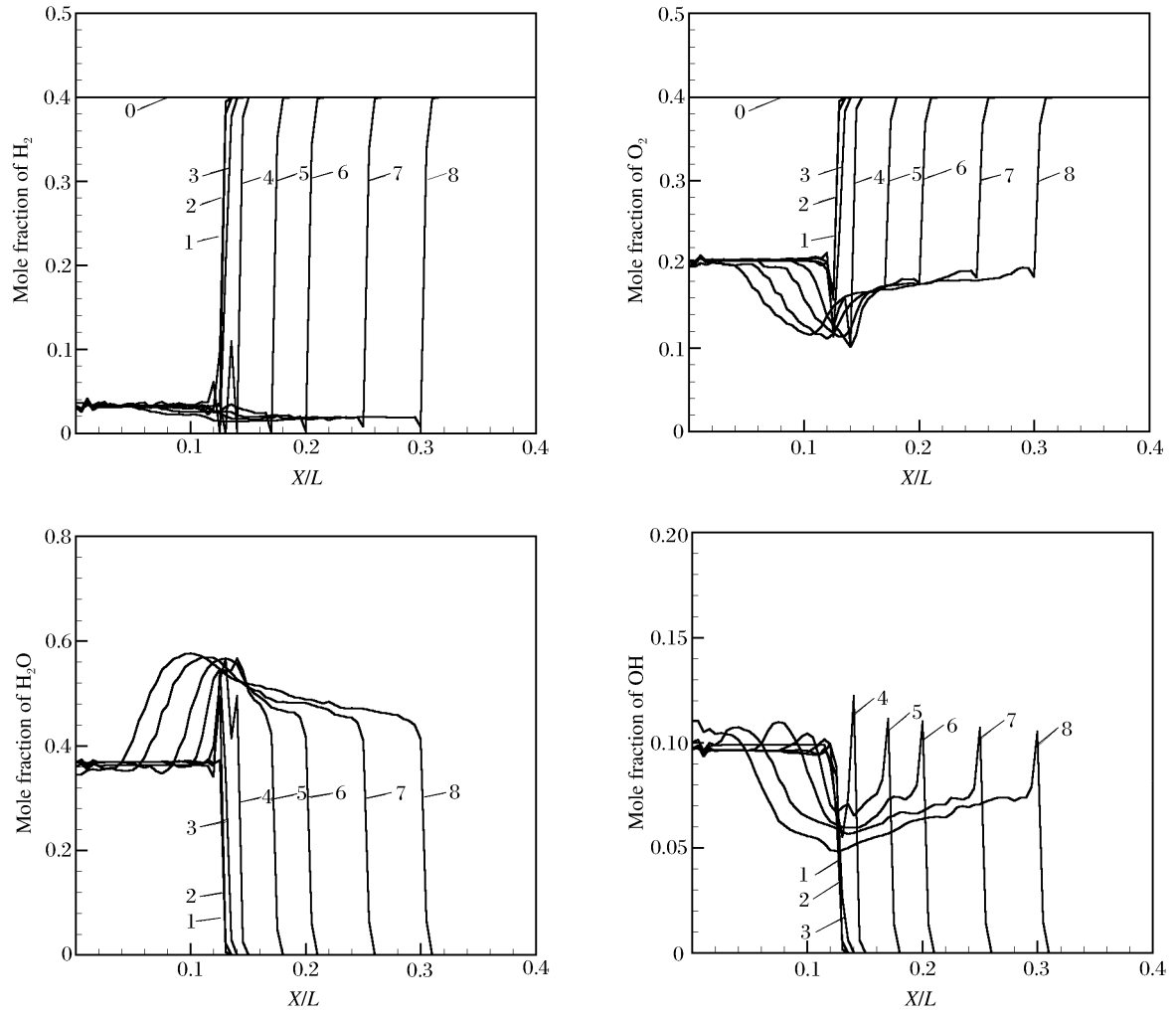


图 1　计算区域示意图

Fig. 1　Schematic of the computational domain

图 2 给出了不同时刻,在 $Y/L=0.05$ 的位置上,反应物 H_2、氧化剂 O_2、主产物 H_2O 和自由基 OH 的组分摩尔分数变化。可以看出,当 $t\leqslant 0.0034$ 的时候(曲线 0、1),H_2 已从初始($t=0$)的 0.4 消耗至 0.035 左右,O_2 则从 0.4 消耗至 0.2 左右;同时主产物 H_2O 则增值 0.36,自由基 OH 也增加到 0.1,这表明,在很短的时间内燃烧过程已经发生。当该过程进行到 $t\leqslant 0.0093$ 时(曲线 2、曲线 3),这些组分的摩尔分数变化不大,火团内的燃烧过程较为稳定。当 $t=0.0109$ 时(曲线 4),H_2 和 O_2 浓度在火团与未燃物的交界面上有明显的消耗,而 H_2O 和 OH 在该位置的生成出现了峰值,该时刻浓度曲线的位置也明显右移,说明受化学反应控制的燃烧过程继续进行并开始加速。当 $0.0156\leqslant t\leqslant 0.036$ 时(曲线 5～曲线 8),尽管 H_2 的消耗不再明显,但 O_2 仍在不断消耗且消耗范围在原火团内不断扩大,H_2O 的形成也显示了相同的规律,自由基 OH 随燃烧的进行也不断消耗,但在已燃气与未燃气交界处产生尖峰,其它中间产物和自由基的变化规律与 OH 相似,限于篇幅这里不再讨论。这一时段的组分浓度变化表明,火团内部中间产物和自由基还在发生反应,促使燃烧进一步完成,此区域处于膨胀过程;而已燃气与未燃气的交界处,新的燃烧开始发生,由于膨胀区类似于活塞的作用,使得从膨胀区边缘到此交界处的区域为压缩过程,它逐步加快了燃烧前峰右移的速度,最终导致爆轰波的出现。为说明这一现象的出现,图 3 给出了 $Y/L=0.05$ 的位置上,不同时刻压力的变化曲线,在 $t\leqslant 0.0068$ 时(曲线 0、曲线 1、曲线 2),压力没有明显上升;当 $t=0.0093$ 时,在火团与未然气交界处,有一 $p/p_0=4$ 的压力峰,当 $t=0.109$ 时,该压力峰上升为 $p/p_0=11$,这表明爆轰波开始形成;当 $t\geqslant 0.0156$ 以后,压力峰继续上升并维持在 $p/p_0=13$ 左右,且爆轰波阵面右移加快,逐渐形成定常的爆轰波传播。图 4 计算的爆速随时间的变化曲线也表明,高温火团诱导的爆轰波在 $t=0.02$ 以内形成,以后以 2300 m/s 的速度传播。作者利用 Gordon 和 Mcbride 程序[6]计算的在相同条件下的 C-J 爆速为 2145 m/s,与本文计算结果比较符合。



0. t=0;1. t=0.0034;2. t=0.0068;3. t=0.0093;4. t=0.0109;5. t=0.0156;6. t=0.0203;7. t=0.0282;8. t=0.0360

图 2 不同时刻的组分摩尔分数曲线(Y/L=0.05)

Fig. 2 Species mole fraction curves at the different time (Y/L=0.05)

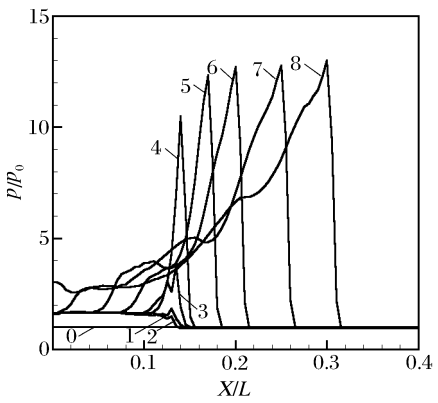


图 3 不同时刻的压力曲线(Y/L=0.05)
(曲线标号意义同图 2)

Fig. 3 Pressure curves at the different time (Y/L=0.05)
(Numbers in curves are same as Fig. 2)

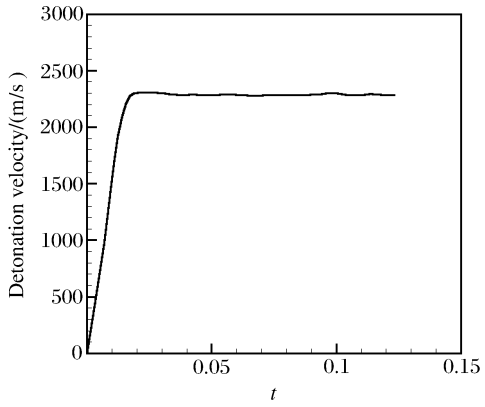


图 4 爆轰波速度随时间的变化曲线

Fig. 4 Detonation velocity curve along with the time

图 5 给出的不同时刻的压力等值线显示了爆轰波传播过程。初始时刻高温气体圆弧表面与管道上壁相切，接触点角度为 0 °；而圆弧表面与管道下壁法向相接，接触点角度为 90 °。当燃烧发生后，反应放出的热量在绝热管壁处积累使得该处的燃烧加速[7]，其中管道上壁的传播速度高于管道下壁的传播速度，当形成定常的爆轰波后，整个爆轰波阵面相对于原来的高温气团曲率变小。其中在管道上壁爆轰波相对于壁面形成一定角度，从而发生规则反射，反射波反射至管道下壁后又形成二次规则反射，如此反复向波后传播。爆轰波阵面与管道下壁的壁面亦形成一定角度并形成反射波，但其强度弱于前者。本文中计算的这一结果与文献[8]的计算结果是相似的。此外，图 5 的结果还显示，在爆轰波的传播过程中，反射波结构也不断地向前移动。

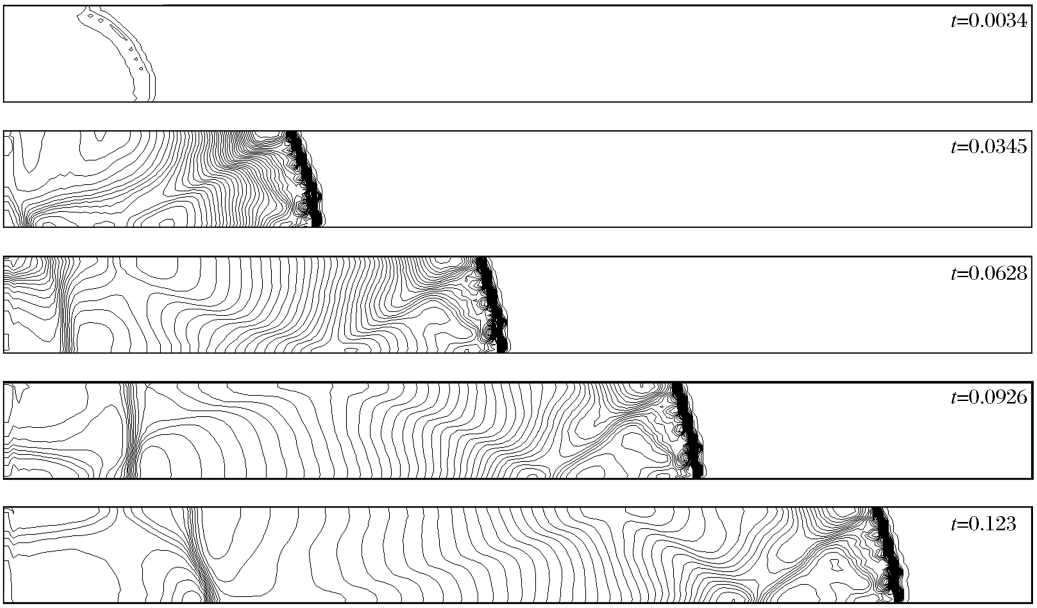


图 5　不同时刻的压力二维等值线

Fig. 5　Pressure contours at the different time

图 6 给出了 $t=0.123$ 时，在 $Y/L=0.05$ 的位置上，稳定爆轰波后组分摩尔分数和温度的分布。其中波后的无量纲温度在 9～11 之间（初始无量纲温度为 5.3），在爆轰波阵面处为 10.5；生成的主产物 H_2O 的摩尔浓度在 0.4 以上，其中在 $X/L=0.1$ 处，其摩尔浓度峰值达到 0.55；而 O_2 摩尔浓度维持在 0.13～0.2，H_2 的摩尔浓度维持在 0～0.04 之间。燃烧产物中的重要自由基摩尔浓度由大到小的顺序为 OH＞O＞H，这三种自由基的浓度维持在 0.004～0.1 之间。

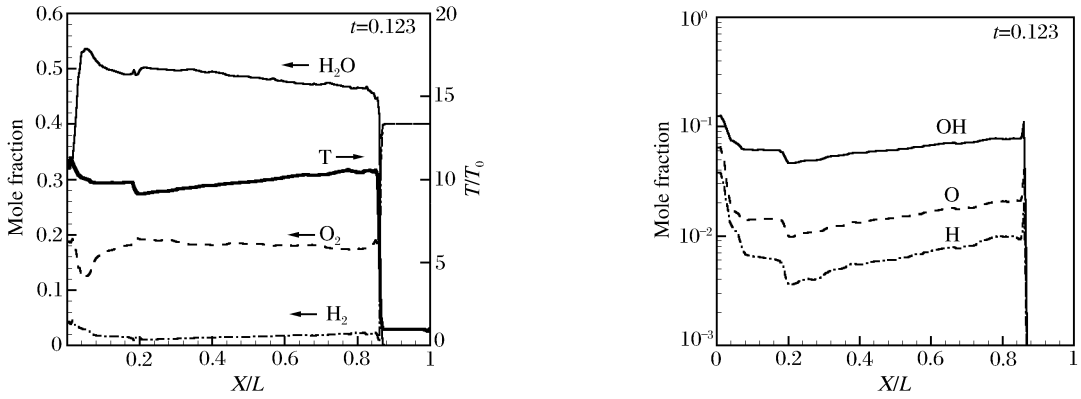


图 6　$Y/L=0.05$ 处，组分浓度和温度在 x 方向的分布（$t=0.123$）

Fig. 6　Species mole fractions and temperature curves at $Y/L=0.05$ ($t=0.123$)

5 结 论

采用分裂格式处理带化学反应的二维 Euler 方程，求解氢气-空气混合气的瞬态爆轰过程，其中流场采用全耦合的二维 TVD 格式求解，化学反应采用 Gear 算法求解。使用了氢气-空气的详细化学反应动力学机理，该机理包含了 19 个基元反应和 9 种组分。计算结果表明，在本文给定的条件下，高温气团开始燃烧后，受反应动力学的控制，燃烧不断深入，燃烧速度加快并最终导致爆轰的形成，随后的爆轰波以 2300 m/s 的爆速向前传播。定常传播的爆轰波阵面在管壁处可发生正规反射，形成反射波及二次反射波，这种结构可随着爆轰波的传播而前移。对瞬态爆轰过程的理解有助于深入研究脉冲爆轰推进的原理，从而为脉冲爆轰发动机的开发研制提供理论依据。此外，在本文中采用多组分化学反应动力学方法可以计算爆轰波后的组分浓度和温度分布，为了解其内部结构提供信息。

References:

[1] He L. Contribution of Thermal Conduction Effect to Transition from Self-Explosion to Detonation [J]. Combustion Science and Technology, 1994, 96: 33－45.

[2] Smirnov N N, Panfilov I I. Deflagration to Detonation Transition in Combustible Gas Mixtrues [J]. Combustion and Flame, 1995, 101: 91－100.

[3] Fan B C, Xing X J, Li H Z. Explosion Induced by a Hot Reactive Gas Pocket and Its Suppression [J]. ACTA Armamentarii, 2001, 22(2): 195－198. (in Chinese)
范宝春，邢晓江，李鸿志. 可燃介质中高温火团诱导的爆炸及其抑制 [J]. 兵工学报，2001，22(2)：195－198.

[4] Kee R J, Rupley F M, Miller J A. The CHEMKIN Thermodynamic Data Base [R]. SAND87-8215B, 1990.

[5] Hindmarsh A C. ODEPACK, a Systematized Collection of ODE Solvers [A]. Stepleman R S. Scientific Computinge [C]. Amsterdam: IMACS Transactions on Scientific Computation, 1983. 55－64.

[6] Gordon S, Mcbride B J. Computer Program for Calculation of Complex Chemical Equilibrium Compositions, Rocket Performance Incident and Reflected Shocks, and Chapman-Jouguet Detonations [R]. NASA-SP-273, 1971.

[7] Fan B C, Jiang X H, Li H Z. Three Dimensional Numerical Simulation of Explosion Induced by Obstacles in CH_4-O_2 Mixture [J]. Journal of China Coal Society, 2002, 27(4): 371－373. (in Chinese)
范宝春，姜孝海，李鸿志. 障碍物导致甲烷-氧气爆炸的三维数值模拟 [J]. 煤炭学报，2002，27(4)：371－373.

[8] Kim H, Anderson D A, Lu F K, et al. Numerical Simulation of Transient Combustion Process in Pulse Detonation Engine [R]. AIAA 2000-0887, 2000.

Two-Dimensional Simulation of Transient Detonation Process for H_2-O_2-N_2 Mixture

DONG Gang, FAN Bao-Chun, XIE Bo

(*Institute of Power Engineering, Nanjing University of Science and Technology, Nanjing* 210094, *China*)

Abstract: By solving the two-dimensional Euler equations coupled with the chemistry, a numerical simulation of transient detonation process induced by flame for H_2-O_2-N_2 mixture was performed, and a detailed chemical mechanism for H_2-O_2-N_2 system, which included 19 element reactions and 9 species, was involved. A splitting operator method was used to treat separately the hydrodynamical process and chemical process in the detonation simulation. The TVD scheme was used to capture the detonation wave and the Gear algorithm was used to solve the chemical reaction. The calculated results show that combustion rate of flame can be accelerated and lead to the occurrence of detonation when the initial mole fraction ratio of the mixture is $H_2 : O_2 : N_2 = 0.4 : 0.4 : 0.2$ and the initial nondimensional temperature is $T/T_0 = 5.3$, the detonation wave can be propagated steadily with the detonation velocity of 2300 m/s. The reflection of the detonation wave can be observed. In addition, the variations of species concentrations and temperature behind the detonation wave were also discussed in order to understand the inherent structure behind the detonation wave.

Key words: detonation wave; chemical reaction mechanism; numerical simulation