

文章编号: 1001- 2486(2010) 05- 0001- 06

## 采用不同化学反应源项处理方法的胞格爆轰数值研究\*

刘世杰, 林志勇, 孙明波, 刘卫东

(国防科技大学 航天与材料工程学院, 湖南 长沙 410073)

**摘要:** 采用一种改进的化学非平衡流解耦方法对 Euler 反应流方程进行解耦处理, 对流项采用五阶 WENO 格式进行离散, 化学反应源项分别采用梯形公式和  $\alpha$ -QSS 拟稳态逼近两种方法处理, 时间步进采用二阶精度的 Runge-Kutta 方法, 对  $H_2/O_2/Ar$  预混气的胞格爆轰进行了二维数值模拟。两种处理方法都得到了合理的三波点结构, 计算结果接近, 但  $\alpha$ -QSS 拟稳态逼近处理方法的化学反应较完全, 爆轰波传播速度较高; 揭示了爆轰波结构的发展变化过程, 横波与横波、横波与壁面碰撞引起的二次起爆对爆轰波的稳定发展至关重要; 分析了数值胞格结构, 胞格长宽比与参考文献基本一致, 验证了本计算方法的有效性。

**关键词:** 胞格爆轰; 解耦方法; 梯形公式;  $\alpha$ -QSS 拟稳态逼近方法; 胞格结构

中图分类号: V435. 12 文献标识码: A

## Numerical Simulation of Cellular Detonation Using Different Chemical Reacting Source Term Methods

LIU Shi-jie, LIN Zhi-yong, SUN Ming-bo, LIU Wei-dong

(College of Aerospace and Material Engineering, National Univ. of Defence Technology, Changsha 410073, China)

**Abstract:** An improved de-coupled solver of non-equilibrium flow was used to split the Euler equations for a reacting flow. Inviscid flux was calculated with fifth-order WENO scheme. Trapezoid formula and  $\alpha$ -QSS methods were applied to deal with the stiffness generated by the chemical reacting source term of species equations separately. Time integration was performed with two-order TVD Runge-Kutta scheme. Cellular detonation of  $H_2/O_2/Ar$  in a straight tube was numerically studied. Calculated results by different methods were similar, and triple point structures were analyzed. The releasing heat of chemical reaction dealt with by  $\alpha$ -QSS method is higher than that by trapezoid formula, so the detonation wave propagating speed of  $\alpha$ -QSS method is higher than that of trapezoid formula too. Development of cellular structure was elaborated. Due to interactions between transverse waves and between transverse wave and tube wall, re-initiation was ignited, which plays a crucial role in the propagating of detonation wave. Ratio of numerical cellular structure length to width is consistent with reference value, which indicates the feasibility of the numerical method.

**Key words:** cellular detonation; uncoupled non-equilibrium method; trapezoid formula;  $\alpha$ -QSS; cellular structure

爆轰是紧密耦合在一起的冲击波、化学反应波在可燃混合物中超声速传播的高速燃烧现象。爆轰燃烧本身具有能量释放速率快、热力循环效率高等优点, 在推进领域中一直以来都备受关注。近几十年来, 采用爆轰模式组织燃烧的各种发动机, 如脉冲爆轰发动机、斜爆轰波发动机和旋转爆轰波发动机等, 成为研究的热点。针对爆轰波本身的研究也受到越来越多的关注。

经典的 G-J 理论和 ZND 模型, 都认为爆轰波是一维的强间断面, 忽略了其结构细节。从螺旋爆轰现象的发现到烟熏法、高频压力测量、高速纹影等试验手段的出现, 再到近年来激光片光技术的运用, 不断出现的实验观测结果一直在推动着人们对爆轰本质的认识<sup>[1]</sup>。但爆轰波传播速度快, 若要对其传播和演化过程进行全面的试验观测, 成本和难度都较大, 而数值研究恰可以弥补这方面的不足<sup>[2-11]</sup>。对胞格爆轰的数值模拟也存在一定的难度: (1) 为捕捉激波、燃烧波等精细结构, 必须采用高精度、低耗散的数值格式和小尺度的网格分布, 导致计算量较大; (2) 流体动力学方程和化学反应之间的非线性耦合产生

\* 收稿日期: 2010- 03- 24

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(90816016)

作者简介: 刘世杰(1983-), 男, 博士生。

的刚性问题;(3) 化学反应本身也存在多时间尺度,需要对化学反应源项进行特殊处理。随着计算能力的提高和高精度格式的出现,第一个难点已不再成为限制条件。针对化学非平衡流的刚性问题,可以采用解耦或者非解耦的方法来解决。耦合方法计算量较大,且当增减组分时,需要重新求解化学反应源项对独立变量的系数矩阵,不方便操作。近年来刘君<sup>[12-13]</sup>提出了一种将化学反应和流动控制方程解耦处理的方法,不但公式推导简便,而且可以有效地解决刚性问题<sup>[12-16]</sup>。在化学非平衡流解耦处理的情况下,描述化学反应的部分是一个刚性的非线性常微分方程组。目前广泛使用的一种求解器是 VODE<sup>[17]</sup>, VODE 是一种变系数的常微分方程组求解器,采用自适应时间步长处理刚性问题,具有较高的精度和可靠性。但 VODE 涉及矩阵操作,计算效率较低,尤其是在反应流的计算中由于每一步都要在所有的网格中计算化学反应,虽然计算能力在不断提高,但是在大量网格条件下用 VODE 计算化学反应所耗费的计算资源仍是难以承受的。刘瑜<sup>[15]</sup>的研究结果表明,在计算精度基本相当的情况下,采用梯形公式<sup>[12-13]</sup>和拟稳态逼近方法<sup>[18-19]</sup>较 VODE 可以较大地提高计算效率。

本文采用一种改进的化学非平衡流解耦方法<sup>[14]</sup>和基元化学反应模型,反应源项分别用梯形公式和  $\alpha$ -QSS 拟稳态逼近方法来处理,对  $H_2/O_2/Ar$  预混气的胞格爆轰进行数值模拟,对比研究不同的化学反应源项处理方法对计算结果的影响。

## 1 控制方程和数值方法

### 1.1 解耦方法及化学反应源项处理方法

本文采用二维的 Euler 反应流方程,具体的控制方程和解耦方法可参考文献[13-14],此处不再赘述。

每种化学反应模型都有一定的适用范围,林志勇<sup>[11]</sup>采用敏感性分析方法,并结合着火延迟时间、层流火焰速度和火焰结构等实验数据对多种氢氧化学反应动力学模型进行了分析,结果表明,Connaire 模型<sup>[20]</sup>较好,其计算结果可以在较大范围内与实验结果相吻合,因此本文采用 Connaire 化学反应模型。

化学反应式可统一写为

$$\sum_{k=1}^N v'_{k,r} X_k \leftrightarrow \sum_{k=1}^N v''_{k,r} X_k \quad (1)$$

$k$  组分的化学反应方程为

$$dy_k/dt = \alpha_k \quad (2)$$

$$\alpha_k = M_k \sum_{r=1}^{N_r} (v''_{k,r} - v'_{k,r}) \left[ k_{fr} \prod_{k=1}^N \left( \frac{\rho_k}{M_k} \right)^{v'_{k,r}} - k_{br} \prod_{k=1}^N \left( \frac{\rho_k}{M_k} \right)^{v''_{k,r}} \right] \quad (3)$$

$\alpha_k$  项可以整理成  $\alpha_k = -p_k \rho_k + q_k$ ,代入方程(2)可得

$$dy_k/dt = -p_k y_k + q_k \quad (4)$$

梯形公式处理方法<sup>[12-13]</sup>将系数  $p_k$ 、 $q_k$  在计算时做冻结处理,采用隐式二阶离散,最终表达式如下:

$$y_k^{n+1} = [y_k^n (1 - p_k \Delta t/2) + q_k \Delta t] / (1 + p_k \Delta t/2) \quad (5)$$

梯形公式形式简单,计算效率高,对于线性问题具有二阶精度。

稳态逼近方法<sup>[18]</sup>从化学反应方程组的特殊形式出发,通过逼近渐近解来求解刚性方程组。如果  $p_k$ 、 $q_k$  为常数,则方程(4)有精确解:

$$y(t) = y^0 e^{-pt} + \frac{q}{p} (1 - e^{-pt}) \quad (6)$$

当  $q$ 、 $p$  在一个时间步  $\Delta t$  内变化缓慢时,采用上一时刻  $t^0$  的  $q(t^0)$ ,将  $p(t^0)$  代入上式计算会得到  $y(t^0 + \Delta t)$  的较好的近似值。实际上所有拟稳态逼近方法都是基于上式,并且所有的拟稳态逼近方法要求在  $q$ 、 $p$  为常数时都应该得到精确解。本文的拟稳态逼近方法是采用由 Mott<sup>[18-19]</sup>等发展的  $\alpha$ -QSS 刚性求解器。(6)式可以改写成

$$y(\Delta t) = y^0 + \frac{(q - py^0) \Delta t}{1 + \alpha(p \Delta t)} \quad (7)$$

$$\alpha(p \Delta t) = \frac{1 - (1 - e^{-p \Delta t})/p \Delta t}{1 - e^{-p \Delta t}} \quad (8)$$

$\alpha$  是  $p \Delta t$  的函数,对于两种极限情况。 $p \Delta t \rightarrow \infty$  时,  $\alpha \rightarrow 1$  对应无穷快的反应;  $p \Delta t \rightarrow 0$  时,  $\alpha \rightarrow \frac{1}{2}$  对应无穷慢的反应。 $\alpha$ -QSS 采用预测-修正的方法进行计算。

预测步:

$$y^p = y^0 + \frac{(q^0 - p^0 y^0) \Delta t}{1 + \alpha^0(p^0 \Delta t)} \quad (9)$$

修正步:

$$y^c = y^0 + \frac{(q^* - p^* y^*) \Delta t}{1 + \alpha^*(p^* \Delta t)} \quad (10)$$

其中上标 0 表示初始值,上标  $p$  和  $c$  分别表示预测值和修正值。预测步使用的都是初始值,而修正步既使用初始值,也使用预测值。在修正步,  $p$  由初值和预测值做简单的平均,即

$$p^* = \frac{1}{2}(p^0 + p^p) \quad (11)$$

$$\alpha^* = \alpha(p^* \Delta t) \quad (12)$$

$q$  则用  $\alpha^*$  做加权平均,即

$$q^* = \alpha^* q^p + (1 - \alpha^*) q^0 \quad (13)$$

为了提高精度,需要在修正步进行迭代,在迭代时将上一步迭代的修正值作为这一步迭代的预测值。实际计算过程中,为了提高计算效率,不直接计算指数函数求  $\alpha$ , 而由 Pade 逼近得到,其中  $r = 1/(p \Delta t)$ 。

$$\alpha(p \Delta t) \approx \frac{180r^3 + 60r^2 + 11r + 1}{360r^3 + 60r^2 + 12r + 1} \quad (14)$$

Mott 给出了  $\alpha$ -QSS 基于精度的时间步长选择算法,如果某步计算中初始预测值和最终修正值满足:

$$|y_k^c - y_k^p| \leq \varepsilon_2 y_k^c, \quad k = 1, 2, \dots, N_s \quad (15)$$

其中  $\varepsilon_2$  为指定的常数,一般取  $10^{-2}$  量级,则这一步计算成功,否则这一步计算没有达到精度要求,需要减小时间步长重新计算。为了不把计算时间浪费在选择时间步长的过程中,一般让步长为原步长的  $1/2$  或  $1/3$ 。设上一步的时间步长为  $(\Delta t)_{old}$ , 且满足:

$$|y_k^c - y_k^p| = a (\Delta t)_{old}^2 \quad (16)$$

其中  $a$  为常数,设下一步的时间步长为  $(\Delta t)_{new}$ , 使其满足:

$$|a (\Delta t)_{new}^2| = \varepsilon_1 y_i^c \quad (17)$$

其中  $\varepsilon_2 = c \varepsilon_1$ ,  $c > 1$  为指定常数。定义参数:

$$\sigma = \max_k \left( \frac{|y_k^c - y_k^p|}{\varepsilon_1 y_k^c} \right) \quad (18)$$

则由以上各式,可得

$$(\Delta t)_{new} = \frac{(\Delta t)_{old}}{\sqrt{\sigma}} \quad (19)$$

## 1.2 数值方法和计算条件

本文的模拟对象为摩尔比 2: 1: 7 的  $H_2/O_2/Ar$  预混气,初始温度 298K,压力 6670Pa。要精确模拟爆轰波的发展过程,要求网格尺度能够分辨出预混气的诱导距离。针对本文的模拟对象,文献[8]的研究结果表明,采用 0.1mm 的网格间距就可以得到合理的爆轰波结构。计算区域宽 2cm,长 9cm。

在初场与边界条件处理中,入口为超声速入口条件,速度为 G-J 爆轰速度,把爆轰波限制在较小的运动范围内以节约计算量。把一维 ZND 计算结果映射到二维流场中进行初始化,由于最终的计算结果基本上不受起爆初场的影响<sup>[8]</sup>,为加快横波的生成,在 ZND 初始化的爆轰波面上加入了适当的压力扰

动。控制方程对流项采用五阶精度的WENO格式进行空间离散,时间推进上采用二阶精度的具有TVD保持性质的Runge-Kutta方法,化学反应源项分别采用了梯形公式和 $\alpha$ -QSS拟稳态逼近两种处理方法。

## 2 计算结果分析

### 2.1 流场结构对比分析

采用梯形公式和 $\alpha$ -QSS拟稳态逼近处理方法所得的流场结构分别如图1、2所示,两种方法的计算结果极为类似,都反映出了爆轰波的三波点结构。其中M为马赫干,I为诱导激波,TW为横波,A点即为三波点,是马赫干、诱导激波和横波的交点,横波从三波点延伸到波阵面之后,强度不断减弱。马赫干M强度较强,预混气经过M之后迅速发生了化学反应,温度、压力极大提高;诱导激波I强度较弱,预混气经过I后温升较小,又经过了较长的诱导区后才发生反应,其中R代表诱导激波后的反应面。由于马赫干和诱导激波后气体状态的差异,诱导产生了横向激波TW,沿从马赫干到诱导激波的方向运动,垂直于爆轰波的传播方向。AF为滑移线,由三波点和横波的急速横向运动而产生。

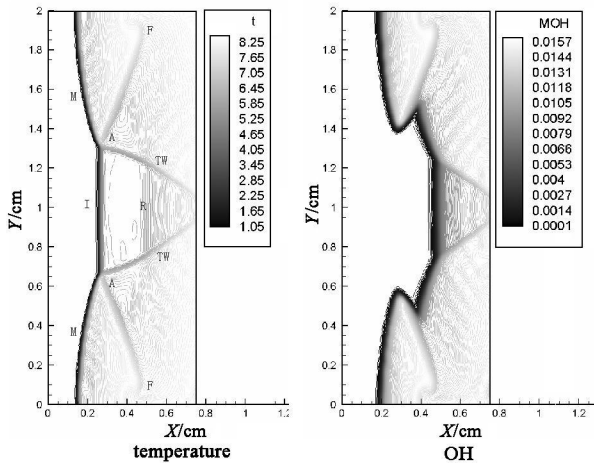


图1 梯形公式所得的爆轰波结构

Fig. 1 Temperature and OH fraction distribution by trapezoid formula

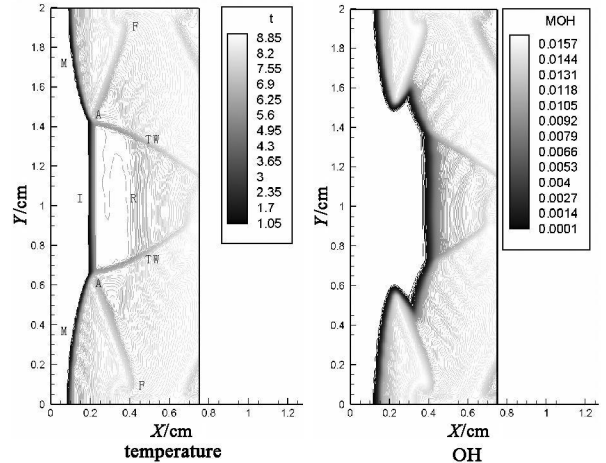


图2  $\alpha$ -QSS方法所得的爆轰波结构

Fig. 2 Temperature and OH fraction distribution by  $\alpha$ -QSS

两种化学反应源项处理方法所得到的流场分布非常吻合,但对比分析发现,采用 $\alpha$ -QSS处理方法化学反应更加完全,释放的能量更多,流场温度偏高。而爆轰波的传播速度与化学反应释放的总能量相关,因此对应的爆轰波传播速度偏大,使得爆轰波面不断前传。 $\alpha$ -QSS处理方法模拟所得的爆轰波传播速度约为1625m/s,与G-J速度1618m/s偏差0.43%;而梯形公式处理方法所得的爆轰波传播速度为1605m/s,略低于G-J速度。刘瑜<sup>[1]</sup>针对预混气激波诱导燃烧工况,对比研究了梯形公式和 $\alpha$ -QSS两种处理方法的影响,发现采用 $\alpha$ -QSS处理方法所得的流场温度更高、化学反应更加完全,与本文的计算结果类似。林志勇<sup>[1]</sup>采用VODE处理方法计算了相同工况的胞格爆轰,获得的传播速度为1636m/s,也大于G-J速度,本文的流场分布与VODE的计算结果基本一致,而所需的计算量则较小,提高了计算效率。

### 2.2 横波和三波点的运动

由于两种化学反应源项处理方法所得的计算结果基本一致,以后内容都采用 $\alpha$ -QSS的计算结果来进行分析。图3所示为横波和三波点运动过程中不同时刻的压力分布。在图3(a)时,马赫干位于靠近壁面侧而诱导激波位于流场中间,两横波相对运动;在图3(b)时,两横波发生了对撞,在诱导激波后产生了热点,而热点前方的区域1内存在大量的经过诱导激波加热后的未反应预混气。热点迅速引燃区域1内的预混气,在流场中心产生一个高温、高压区域。该高压区向前方膨胀,诱导引燃入口处的预混气,形成新的马赫干,而原来两侧的马赫干则退化为诱导激波。该高压区向两侧膨胀,形成了新的横波;至图3(d)时,已形成了新的稳定的三波点结构,与图3(a)时相比,流场结构发生了很大的变化,横波传播方向反转,两横波相向运动,朝壁面侧发展;图3(e)时,横波与壁面发生碰撞,在壁面处产生热点,热

点引燃其前面 1 区内经过加热的预混气, 在两侧壁面处分别产生了高温、高压区, 进一步促使形成了新的马赫干和横波。再经过一段时间的发展, 流场结构又可以恢复到图 3(a) 时的状态, 开始一个新的发展周期。

通过以上分析可知, 在爆轰波的发展过程中, 横波与横波、横波与壁面碰撞所形成的热点为二次起爆创造了条件, 此时马赫干后的压力最高, 横波的强度最大。在此后的发展过程中, 横波扫过的前导激波转变为马赫干, 而马赫干、前导激波和横波的强度都逐渐变弱, 在下次对撞前其强度最弱, 此时在远离三波点一侧的马赫干已逐渐出现了激波与燃烧波分离的现象, 并开始向诱导激波转变。随着二次起爆的出现, 又形成了新的强马赫干和横波, 开始新一轮的发展周期。在整个发展过程中, 马赫干、诱导激波和横波强度都是不断变化的, 而横波与三波点的运动与对撞则是爆轰波能够稳定存在的根本保证。

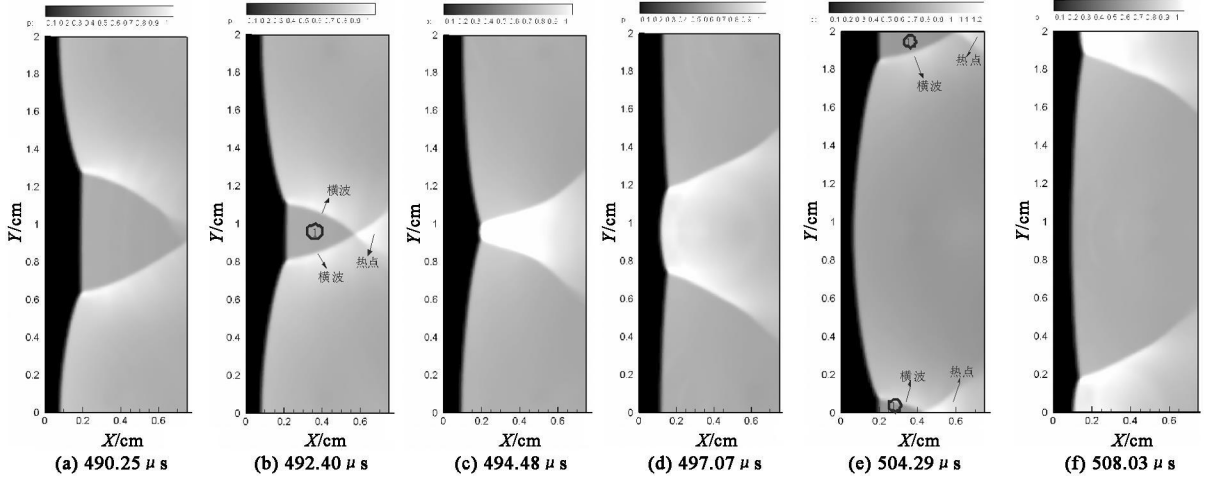


图 3 横波和三波点运动过程中不同时刻的压力分布

Fig. 3 Pressure figures of transverse wave and triple point at different time

### 2.3 胞格结构

由实验观察到, 爆轰波运动过程中三波点的轨迹形成了一些鱼鳞状的胞格结构。胞格尺寸(通常指胞格宽度)可以用来衡量预混气起爆的难易程度, 还可用来定量预测直接起爆所需的能量, 是爆轰研究的重要参数。对于不同的混合气体, 有的胞格结构非常规则, 而有的则较为凌乱。对于本文的研究工况, 试验得到了非常规则的胞格分布。本文通过记录不同时刻压强较高的三波点的运动轨迹, 模仿烟熏法的试验原理, 得到了数值胞格分布, 如图 4 所示。图 5 为单个胞格的放大图, 运动方向为从左到右。由于胞格结构是不同时刻压力场分布的叠加, 马赫干 M、三波点 A、横波 TW 和热点 HS 在胞格结构中清晰可见, 其发展变化过程与前面分析的横波的运动过程十分吻合。

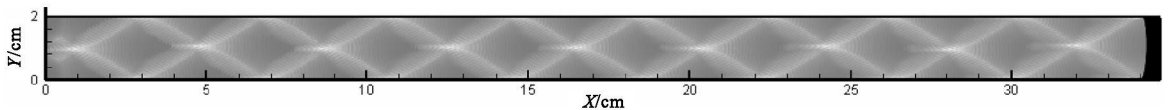


图 4 爆轰波胞格结构

Fig. 4 Cellular structure of detonation wave

图 6 为胞格中心线上的压力分布, 共记录了 8 个胞格结构。在由三波点碰撞引起的二次起爆时压力最高, 随后中心线上压力逐渐衰减, 强度从马赫干衰减为诱导激波, 直至下一次三波点对撞时, 又引起了新的压力高峰。爆轰波在壁面附近的重新起爆主要由横波和壁面碰撞所形成的热点引起, 因此计算区域的宽度会对胞格宽度有一定的影响。受本计算区域的影响, 本文所得的胞格宽度为 2cm, 小于实际胞格宽度, 平均胞格长度为 3.875cm, 计算区域过小在一定程度上限制了爆轰波的发展。胞格的长宽比反映的是爆轰波和横波平均传播速度之间的比值, 其中爆轰波的平均传播速度为定值, 由总放热量决定; 而横波的平均传播速度与波后声速相关。因此胞格的长宽比基本上与计算区域无关, 而仅与预混气

的性质相关。本文的长宽比为 1.9375, 文献[10]所得的长宽比位于 1.8~2.0, 计算结果比较吻合, 验证了本计算的有效性。

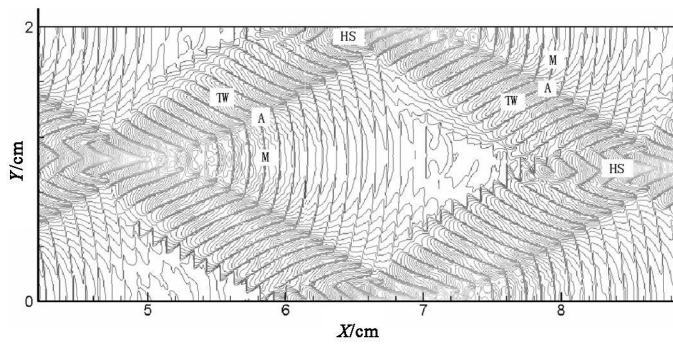


图5 单个胞格结构

Fig. 5 Close-up of cellular structure

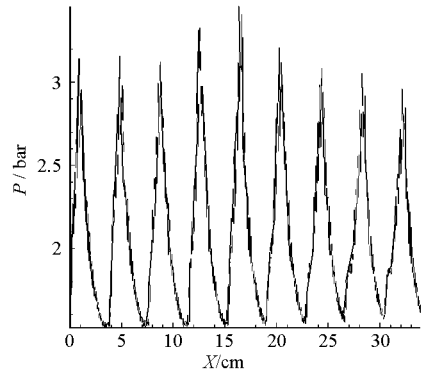


图6 沿胞格中心线的压力分布

Fig. 6 Pressure distribution along center line of detonation cell

### 3 结论

(1) 采用梯形公式和  $\alpha$ -QSS 拟稳态逼近方法都得到了合理的爆轰波三波点结构, 计算结果近似, 但  $\alpha$ -QSS 拟稳态逼近处理方法对应的化学反应更完全, 放热量较大, 爆轰波传播速度较高;

(2) 在爆轰波的发展变化过程中横波和三波点结构是不断运动变化的, 横波与横波、横波与壁面碰撞所形成的热点为二次起爆创造了条件, 是爆轰波能够稳定传播的根本保证;

(3) 胞格结构的长宽比基本上与计算区域无关, 而仅与混合气的初始状态相关。本数值胞格长宽比的合理性验证了本计算方法的有效性。

致谢: 感谢国防科技大学航天与材料工程学院刘瑜博士在处理方法上所提供的宝贵意见!

### 参考文献:

- [1] Lee J H S. The Detonation Phenomenon[M]. Cambridge University Press, 2008.
- [2] Taki S, Fujiwara T. Numerical Analysis of two Dimensional Nonsteady Detonations[J]. AIAA Journal, 1978, 16: 73- 77.
- [3] Oran E S, Boris J P, Flanigan M, et al. Numerical Simulations of Detonations in Hydrogen-air and Methane-air Mixtures[C]// Eighteenth Symposium (International) on Combustion, 1981: 1641- 1649.
- [4] Kaibasarath K, Oran E S, Boris J P, et al. Determination of Detonation Cell Size and the Role of Transverse Waves in Two-dimensional Detonations[J]. Combustion and Flame, 1985, 61: 199- 209.
- [5] Oran E S, Weber J W, Stefanow E I, et al. A Numerical Study of a Two-dimensional H<sub>2</sub>- O<sub>2</sub>- Ar Detonation Using a Detailed Chemical Reaction Model[J]. Combustion and Flame, 1998, 113: 147- 163.
- [6] Deiterding R. Efficient Simulation of Multi-dimensional Detonation Phenomena[J]. Conference on Science Computing, 2002: 94- 101.
- [7] 胡湘渝, 张德良. 氢氧混合气体爆轰波的真实化学反应模型数值模拟[J]. 爆炸与冲击, 2002, 22(1): 1- 7.
- [8] 王昌建, 徐胜利. 直管内胞格爆轰的基元反应数值模拟[J]. 爆炸与冲击, 2005, 25(5): 405- 416.
- [9] 王丁喜, 严传俊. 爆震燃烧波在管内传播过程的二维数值模拟[J]. 机械科学与技术, 2006, 25(4): 461- 464.
- [10] 李廷文, 刘云峰, 王健平. 二维爆轰波详细化学反应数值模拟[J]. 气体物理- 理论与应用, 2007, 2(1): 52- 58.
- [11] 林志勇. 高静温超声速预混气爆震起爆与发展过程机理研究[D]. 长沙: 国防科技大学, 2008.
- [12] 刘君, 张涵信, 高树椿. 一种新型的计算化学非平衡流动的解耦方法[J]. 国防科技大学学报, 2000, 22(5): 19- 23.
- [13] 刘君, 周松柏, 徐春光. 超声速流动中燃烧现象的数值模拟方法及应用[M]. 长沙: 国防科技大学出版社, 2008.
- [14] 孙明波, 梁剑寒, 王振国. 一种非平衡流解耦方法及其计算激波诱导燃烧的应用验证[J]. 航空动力学报, 2008, 23(11): 2055- 2061.
- [15] 刘瑜. 化学非平衡流的计算方法研究及其在激波诱导燃烧现象模拟中的应用[D]. 长沙: 国防科技大学, 2008.
- [16] 刘世杰, 孙明波, 林志勇, 等. 非平衡流解耦方法对钝头体激波诱导振荡燃烧的数值模拟[C]// 第二届高超声速科技学术会议, CSTAM- 2009- 0005, 2009.
- [17] Brown P N, Byrne G D, Hindmarsh A C. VODE: A Variable-coefficient ODE Solver[J]. SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing, 1989, 10(5): 1038- 1051.
- [18] Mott D R, Oran E S, Leer B V. A Quasi-steady-state Solver for the Stiff Ordinary Differential Equations[J]. Journal of computational physics, 2000, 164: 407- 428.
- [19] Mott D R, Oran E S. CHEM2: A Solver for the Stiff Ordinary Differential Equations of Chemical Kinetics[R]. NRI/MR/ 6400- 01- 8553, 2001.
- [20] Connaire M O, Curran H J, Simmie J M, et al. A Comprehensive Modeling Study of Hydrogen Oxidation[J]. International Journal of Chemical Kinetics, 2004, 36(11): 603- 622.