



# (12) 发明专利申请

(10) 申请公布号 CN 112562793 A

(43) 申请公布日 2021. 03. 26

(21) 申请号 202011439758.7

(22) 申请日 2020.12.10

(71) 申请人 北京理工大学

地址 100081 北京市海淀区中关村南大街5号

申请人 北京动力机械研究所

(72) 发明人 滕宏辉 周林 张义宁 杨鹏飞

(74) 专利代理机构 北京国坤专利代理事务所  
(普通合伙) 11491

代理人 王峰刚

(51) Int. Cl.

G16C 20/10 (2019.01)

G06F 30/20 (2020.01)

G06F 111/10 (2020.01)

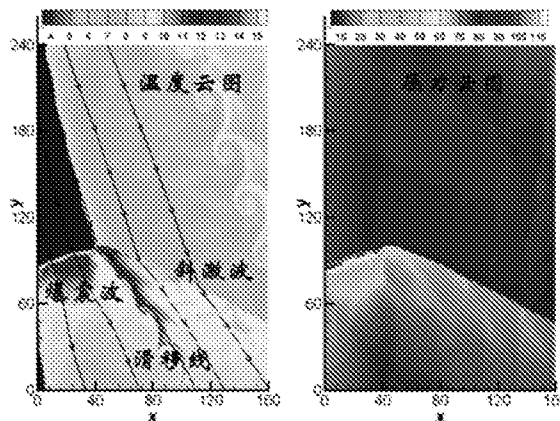
权利要求书5页 说明书13页 附图2页

## (54) 发明名称

一种针对燃料爆震燃烧的两步反应模型计算方法

## (57) 摘要

本发明提供一种针对燃料爆震燃烧的两步反应模型计算方法,包括根据已有基元反应模型计算燃料爆震波关键参数,选取典型关键参数构建燃料爆震燃烧两步诱导-放热反应模型,采用实验及数值模拟验证所述两步反应模型;通过建模使两步反应模型对应燃料稳定性参数与基元反应模型一致,保证两步反应模型在爆震波稳定性描述方面与复杂基元反应模型一致,可根据实际问题,灵活选择重点关注的爆震燃烧特征参数,使两步反应模型计算得到的特征参数与基元反应模型一致,解决两步反应模型对实际燃料爆震燃烧物理过程模拟的问题,实现两步反应模型在较高爆震燃烧数值模拟效率基础上兼顾模拟精度,可推动两步反应模型在爆震燃烧领域及工程设计领域的广泛应用。



1. 一种针对燃料爆震燃烧的两步反应模型计算方法,其特征在于,包括:

- S1、根据基元反应模型确定爆震波关键参数;
- S2、根据所述基元反应模型爆震波关键参数,构建两步反应模型;
- S3、采用实验及数值模拟验证所述两步反应模型。

2. 根据权利要求1所述的一种针对燃料爆震燃烧的两步反应模型计算方法,其特征在于,所述S1包括以下步骤:

S11、首先采用基元反应模型计算给定初始状态燃料/氧化剂均匀混合气体中C-J爆震波速 $\tilde{V}_{CJ}$ 、C-J爆震波马赫数 $\tilde{M}_{CJ}$ 、C-J状态参数及von Neumann状态参数。其中C-J状态参数包括:温度 $\tilde{T}_{CJ}$ 、压力 $\tilde{P}_{CJ}$ 、及密度 $\tilde{\rho}_{CJ}$ , von Neumann状态参数包括:温度 $\tilde{T}_{vn}$ 、压力 $\tilde{P}_{vn}$ 、密度 $\tilde{\rho}_{vn}$ 、比热比 $\tilde{\gamma}_{vn}$ ;

S12、利用基元反应模型计算混气C-J爆震波对应的ZND(Zel'dovich-von Neumann-Döring)结构,确定诱导区实际物理长度 $\Delta_I$ ,同时计算爆震波一维稳定性参数 $\tilde{\chi}$ 。

3. 根据权利要求1所述的一种针对燃料爆震燃烧的两步反应模型计算方法,其特征在于,所述S2两步反应模型为诱导-放热两步反应模型;其使用两个反应速率控制方程分别模拟爆震燃烧的两个过程,第一步诱导反应代表的是诱导区内点火过程,第二步放热反应代表的是放热反应区内热量释放过程,其具体形式如下:

$$\frac{\partial(\rho\xi)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u\xi)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v\xi)}{\partial y} = H(1-\xi)\rho k_I \text{EXP}\left[E_I\left(\frac{1}{T_s} - \frac{1}{T}\right)\right]$$

$$\frac{\partial(\rho\lambda)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u\lambda)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v\lambda)}{\partial y} = [1-H(1-\xi)](1-\lambda)\rho k_R \text{EXP}\left[-\frac{E_R}{T}\right]$$

其中 $\xi$ 是诱导反应进度变量, $\lambda$ 是放热反应进度变量, $H(1-\xi)$ 是一个阶跃函数:

$$H(1-\xi) = \begin{cases} 1, & \text{if } 0 < \xi \leq 1 \\ 0, & \text{if } \xi \leq 0 \end{cases}$$

$k_I$ 是诱导区化学反应速率常数,通常取 $k_I = -u_{vn}$ ;其中 $u_{vn}$ 是爆震波坐标系下,C-J(Chapman-Jouguet)爆震波中前导激波后气流的速度; $k_R$ 是放热反应区化学反应速率常数; $E_I$ 和 $E_R$ 分别是诱导区和放热反应区的活化能, $T_s$ 是前导激波后气流的温度;上述物理量均为无量纲量,长度采用的是诱导区长度进行无量纲化,时间采用诱导区长度与参考速度的比值进行无量纲化;

用C-J爆震波前导激波后气流温度对诱导反应和放热反应活化能进行归一化处理,即:

$$\varepsilon_I = \frac{E_I}{T_s}, \varepsilon_R = \frac{E_R}{T_s}。$$

4. 根据权利要求1所述的一种针对燃料爆震燃烧的两步反应模型计算方法,其特征在于,所述S2包括以下步骤:

S21、取基元反应模型计算得到的混气C-J爆震波速 $V_{CJ}$ 和von Neumann状态下比热比 $\tilde{\gamma}_{vn}$ 分别作为两步反应模型的C-J爆震波速 $V_{CJ}$ 和比热比 $\gamma$ ;

S22、从基元反应模型计算得到的C-J状态参数(温度 $\tilde{T}_{CJ}$ 、压力 $\tilde{P}_{CJ}$ 、密度 $\tilde{\rho}_{CJ}$ )、von Neumann状态参数(温度 $\tilde{T}_{vn}$ 、压力 $\tilde{P}_{vn}$ 、密度 $\tilde{\rho}_{vn}$ )及C-J爆震波马赫数 $\tilde{M}_{CJ}$ ,共七个爆震波特征参数中任选其一,作为两步反应模型对应的特征参数,再结合比热比 $\gamma$ 和 $v_{CJ}$ ,根据固定比热比爆震理论,唯一确定两步反应模型的无量纲放热量 $Q$ 和气体常数 $R$ ;

其中,若选取基元反应模型的C-J爆震波马赫数 $\tilde{M}_{CJ}$ 作为两步反应模型的C-J爆震波马赫数 $M_{CJ}$ ,则两步反应模型无量纲放热量 $Q$ 和气体常数 $R$ 可通过以下方程组求解得到:

$$M_{CJ} = \frac{v_{CJ}}{\sqrt{\gamma R \tilde{T}_0}}$$

$$M_{CJ} = \left[ \left( 1 + \frac{\gamma^2 - 1}{\gamma} Q \right) + \sqrt{\left( 1 + \frac{\gamma^2 - 1}{\gamma} Q \right)^2 - 1} \right]^{\frac{1}{2}}$$

其中 $\tilde{T}_0$ 为爆震波波前混气静温。

若选取基元反应模型爆震波C-J状态温度 $\tilde{T}_{CJ}$ 作为两步反应模型爆震波C-J状态温度 $T_{CJ}$ ,则两步反应无量纲放热量 $Q$ 和气体常数 $R$ 可通过以下方程组求解得到:

$$\frac{T_{CJ}}{\tilde{T}_0} = \frac{(\gamma M_{CJ}^2 + 1)^2}{(\gamma + 1)^2 M_{CJ}^2}$$

$$M_{CJ} = \left[ \left( 1 + \frac{\gamma^2 - 1}{\gamma} Q \right) + \sqrt{\left( 1 + \frac{\gamma^2 - 1}{\gamma} Q \right)^2 - 1} \right]^{\frac{1}{2}}$$

$$M_{CJ} = \frac{v_{CJ}}{\sqrt{\gamma R \tilde{T}_0}}$$

其中 $\tilde{T}_0$ 为爆震波波前混气静温。

若选取基元反应模型爆震波C-J状态压力 $\tilde{P}_{CJ}$ 作为两步反应模型爆震波C-J状态压力 $P_{CJ}$ ,则两步反应无量纲放热量 $Q$ 和气体常数 $R$ 可通过以下方程组求解得到:

$$\frac{P_{CJ}}{\tilde{P}_0} = \frac{\gamma M_{CJ}^2 + 1}{\gamma + 1}$$

$$M_{CJ} = \left[ \left( 1 + \frac{\gamma^2 - 1}{\gamma} Q \right) + \sqrt{\left( 1 + \frac{\gamma^2 - 1}{\gamma} Q \right)^2 - 1} \right]^{\frac{1}{2}}$$

$$M_{CJ} = \frac{v_{CJ}}{\sqrt{\gamma R \tilde{T}_0}}$$

其中 $\tilde{T}_0$ 为爆震波波前混气静温, $\tilde{P}_0$ 为爆震波波前混气静压。

若选取基元反应模型爆震波C-J状态密度 $\tilde{\rho}_{CJ}$ 作为两步反应模型爆震波C-J状态温度 $\rho_{CJ}$ ,则两步反应无量纲放热量Q和气体常数R可通过以下方程组求解得到:

$$\frac{\rho_{CJ}}{\tilde{\rho}_0} = \frac{(\gamma + 1)M_{CJ}^2}{\gamma M_{CJ}^2 + 1}$$

$$M_{CJ} = \left[ \left( 1 + \frac{\gamma^2 - 1}{\gamma} Q \right) + \sqrt{\left( 1 + \frac{\gamma^2 - 1}{\gamma} Q \right)^2 - 1} \right]^{\frac{1}{2}}$$

$$M_{CJ} = \frac{v_{CJ}}{\sqrt{\gamma R \tilde{T}_0}}$$

其中 $\tilde{T}_0$ 为爆震波波前混气静温, $\tilde{\rho}_0$ 为爆震波波前混气密度。

若选取基元反应模型爆震波von Neumann状态温度 $\tilde{T}_{vn}$ 作为两步反应模型爆震波von Neumann状态温度 $T_{vn}$ ,则两步反应无量纲放热量Q和气体常数R可通过以下方程组求解得到:

$$\frac{T_{vn}}{\tilde{T}_0} = \frac{(2\gamma M_{CJ}^2 - \gamma + 1) [2 + (\gamma - 1)M_{CJ}^2]}{(\gamma + 1)^2 M_{CJ}^2}$$

$$M_{CJ} = \left[ \left( 1 + \frac{\gamma^2 - 1}{\gamma} Q \right) + \sqrt{\left( 1 + \frac{\gamma^2 - 1}{\gamma} Q \right)^2 - 1} \right]^{\frac{1}{2}}$$

$$M_{CJ} = \frac{v_{CJ}}{\sqrt{\gamma R \tilde{T}_0}}$$

其中 $\tilde{T}_0$ 为爆震波波前混气静温。

若选取基元反应模型爆震波von Neumann状态压力 $\tilde{P}_{vn}$ 作为两步反应模型爆震波von Neumann状态压力 $P_{vn}$ ,则两步反应无量纲放热量Q和气体常数R可通过以下方程组求解得到:

$$\frac{P_{vn}}{\tilde{P}_0} = \frac{2\gamma M_{CJ}^2 - \gamma + 1}{\gamma + 1}$$

$$M_{CJ} = \left[ \left( 1 + \frac{\gamma^2 - 1}{\gamma} Q \right) + \sqrt{\left( 1 + \frac{\gamma^2 - 1}{\gamma} Q \right)^2 - 1} \right]^{\frac{1}{2}}$$

$$M_{CJ} = \frac{v_{CJ}}{\sqrt{\gamma R \tilde{T}_0}}$$

其中 $\tilde{T}_0$ 为爆震波波前混气静温, $\tilde{P}_0$ 为爆震波波前混气静压。

若选取基元反应模型爆震波von Neumann状态密度 $\tilde{\rho}_{vn}$ 作为两步反应模型爆震波von Neumann状态密度 $\rho_{vn}$ ,则两步反应无量纲放热量 $Q$ 和气体常数 $R$ 可通过以下方程组求解得到:

$$\frac{\rho_{vn}}{\tilde{\rho}_0} = \frac{(\gamma + 1)M_{CJ}^2}{(\gamma - 1)M_{CJ}^2 + 2}$$

$$M_{CJ} = \left[ \left( 1 + \frac{\gamma^2 - 1}{\gamma} Q \right) + \sqrt{\left( 1 + \frac{\gamma^2 - 1}{\gamma} Q \right)^2 - 1} \right]^{\frac{1}{2}}$$

$$M_{CJ} = \frac{v_{CJ}}{\sqrt{\gamma R \tilde{T}_0}}$$

其中 $\tilde{T}_0$ 为爆震波波前混气静温, $\tilde{\rho}_0$ 为爆震波波前混气密度。

S23、根据确定的两步反应模型的无量纲放热量 $Q$ 和比热比 $\gamma$ ,根据固定比热比爆震理论计算两步反应模型对应的C-J状态参数(温度 $t_{CJ}$ 、压力 $p_{CJ}$ 、密度 $\rho_{CJ}$ )和vonNeumann状态参数(温度 $t_{vn}$ 、压力 $p_{vn}$ 、密度 $\rho_{vn}$ 、速度 $u_{vn}$ );

S24、假设定容爆炸的点火延迟时间 $\tau_1$ 具有Arrhenius形式:

$$\tau_1 \sim A \exp\left(\frac{E_I}{RT}\right)$$

其中 $T$ 为温度, $R$ 为气体常数, $E_I$ 为活化能, $A$ 为指前因子。

给定不同扰动爆震波速度 $\pm 1\% \tilde{V}_{CJ}$ ,采用基元反应计算经过爆震波前导激波压缩之后气体温度 $T_1$ 和 $T_2$ ,以及定容爆炸对应点火延迟时间 $\tau_1$ 和 $\tau_2$ ;根据定容爆炸理论计算无量纲诱导反应活化能 $\varepsilon_I$ :

$$\varepsilon_I = \frac{E_I}{RT_{vn}} = \frac{1}{T_{vn}} \frac{\ln \tau_2 - \ln \tau_1}{\frac{1}{T_2} - \frac{1}{T_1}}$$

S25、取诱导区化学反应速率常数 $k_I = -u_{vn}$ ,同时取定 $\varepsilon_R = 1.0$ ;通过调整放热反应区化学反应速率常数 $k_R$ ,使得两步反应模型计算得到的爆震波一维稳定性参数 $x$ 与基元反应模型计算得到的爆震波一维稳定性参数 $\tilde{x}$ 相等,从而确定放热反应区化学反应速率常数 $k_R$ 。

5. 根据权利要求2所述的一种针对燃料爆震燃烧的两步反应模型计算方法,其特征在于,所述S12计算爆震波一维稳定性参数 $\chi$ 方法如下:

$$\chi \equiv \varepsilon_I \frac{\Delta_I}{\Delta_R}$$

其中 $\varepsilon_I$ 为诱导反应活化能; $\Delta_I$ 为诱导区长度,定义为前导激波与反应热释放速率最大的位置之间的长度; $\Delta_R$ 放热区长度,定义为:

$$\Delta_R = \frac{u_{CJ}}{\dot{\sigma}_{max}}$$

其中 $u_{CJ}$ 为爆震波坐标系下,CJ状态下当地声速; $\dot{\sigma}$ 为化学反应热释放速率,可通过下式计算:

$$\dot{\sigma} = (1 - \lambda) \frac{Q}{c^2} \frac{d\lambda}{dt}$$

其中 $c$ 为当地声速。

## 一种针对燃料爆震燃烧的两步反应模型计算方法

### 技术领域

[0001] 本发明涉及航空航天技术领域,特别是一种针对燃料爆震燃烧的两步反应模型计算方法。

### 背景技术

[0002] 燃烧是燃料化学能转化为热能的主要形式,一般可分为缓燃燃烧和爆震燃烧两种模式。对于缓燃燃烧,燃烧波传播速度为米每秒量级,燃烧过程通常可近似为等压燃烧过程。而对于爆震燃烧,强激波与化学反应紧密耦合在一起,其传播速度可达千米每秒量级,燃烧过程通常可近似为等容燃烧过程。相比于缓燃燃烧,爆震燃烧放热快,产生的熵增较小,具有更高的热效率。因此,与基于缓燃燃烧的传统发动机相比,基于爆震燃烧的爆震发动机具有自增压、熵增低、热循环效率高的优点。

[0003] 然而针对爆震发动机的试验系统非常复杂,并且由于试验观测手段有限,往往无法获得爆震发动机内部爆震燃烧过程以及爆震波等流场参数分布的详细信息。另外由于试验所需周期长且试验成本和费用昂贵等诸多因素的限制,目前通常采用数值模拟的手段研究爆震发动机内爆震燃烧详细过程,进而弥补上述试验存在的局限性。

[0004] 目前对于爆震燃烧进行数值模拟所采用的化学动力学模型主要可以分为基元反应模型和分步反应模型。

[0005] 基元反应模型是化学反应流体力学中最基本、最重要的化学反应模型之一。基元反应模型主要通过若干基本粒子组元之间的化学反应实现,可以描述宏观的燃烧、离解等过程。由于涉及的化学反应较多,相比分步反应更能反映燃料的燃烧特性。通常的基元反应模型是非常复杂的,例如高链烃燃烧的全反应涉及几十种基本粒子和上千个基元反应,即使通过详细化学反应模型简化的反应机制也达上百个反应之多,而且其中很多反应的化学动力学过程目前还不清楚。常见的氢气/氧气简化基元反应模型相对简单,通常涉及到大约十种基本粒子和二十个左右的基元反应,因此这方面数值模拟工作比较多。基元反应模型能够完整系统的描述整个燃烧系统的化学反应过程,但是其较低的模拟效率制约了其应用。在采用基元反应模型的氢氧爆震数值模拟中,通常求解化学反应源项的时间要占整个数值计算时间的80%以上。如果模拟碳氢燃料的爆震燃烧,随着模型的复杂程度增加,越来越多的时间被用来求解源项。然而,这些求解得到的关于流场各部分组元分布的信息并不是我们所需要的,只有极少量的数据是有用的。由于源项的求解耗费了大量的时间,网格密度受到限制从而可能导致影响数值结果的精度。因此,有必要对化学反应模型进行简化,从而提高数值模拟的效率。

[0006] 分步反应模型根据其对爆震波的不同简化程度,可以分为单步反应模型和两步反应模型等。

[0007] 单步反应模型通常简单的考虑化学反应过程中热量释放的影响,将爆震燃烧对应反应放热过程通过一个参数(即化学反应进度变量)和能量守恒以及流动方程联系起来。同时化学反应进度变量是通过对化学反应速率的积分得到的,因此建立了流动和化学反应之

间的联系。单步反应模型虽然简单,可通过该模型定性的模拟爆震燃烧的一些宏观现象,但是进一步关于燃料爆震燃烧的详细特性和一些定量参数就无法获得。比如爆震波一维稳定性研究表明,数值模拟采用单步反应模型不能得到临界起爆能量、爆震极限等反应爆震波起爆与传播的关键特征参数。

[0008] 两步反应模型与单步反应模型思想相同,但其在单步反应模型基础上进一步增加了对于爆震波结构的描述,即用两个无量纲化学反应进度变量 $\xi$  ( $1 \rightarrow 0$ ) 和 $\lambda$  ( $0 \rightarrow 1$ ) 分别描述爆震燃烧过程中包含的诱导反应过程和放热反应过程。两个反应进度变量同时也可以看作反应物和燃烧产物的质量分数。当诱导反应没有发生时 $\xi = 1$ ,随着诱导反应进行, $\xi$ 逐渐减小,当诱导反应结束时,即反应气体已全部转化为活性基团( $\xi = 0$ )。同样,在放热反应阶段,用无量纲变量 $\lambda$ 来表示放热反应进行的程度。放热反应没有发生时 $\lambda = 0$ ,此时没有燃烧产物的产生;当诱导反应进度变量 $\xi = 0$ 时,放热反应开始进行,并且随着放热反应的进行, $\lambda$ 逐渐增大,当放热反应结束时 $\lambda = 1$ ,此时反应气体全部转化为燃烧产物。图1为两步化学反应模型示意图,爆震波从右向左传播。未反应气体经前导激波压缩后,温度和压力都相对较高,未反应气体吸收一部分能量使得气体分子开始活化,诱导反应开始进行,当气体分子活化完成后,放热反应开始进行,大量的热量释放出来,驱动爆震波自持传播。

[0009] 分步反应模型通过简单的反应模拟爆震燃烧放热过程,计算效率高,通用性强,因此在过去几十年得到了广泛的应用。其中,在早期支链反应模型基础上改进的两步诱导-放热反应模型在爆震波一维稳定性、爆震波胞格理论、斜爆震波起爆区结构及波面稳定性等爆震基础机理研究方面已经取得了比较好的效果,具有广泛的应用前景。然而上述应用两步反应模型对爆震燃烧的研究中所采用的燃料大都不是实际燃料,而是满足研究中给定的两步反应模型参数的假想燃料。这是因为目前尚缺乏针对实际燃料的两步反应模型参数确定方法,即针对实际燃料的两步反应模型建模技术,由此大大限制了两步反应模型在爆震燃烧领域的广泛应用。因此,急需一种针对实际燃料的两步反应模型建模计算新方法。

## 发明内容

[0010] 本发明的目的在于提供一种针对燃料爆震燃烧的两步反应模型计算方法,可以实现针对实际燃料的两步反应模型参数确定,及在爆震燃烧领域的广泛应用。

[0011] 本发明提供的一种针对燃料爆震燃烧的两步反应模型计算方法是这样实现的:

[0012] S1、根据基元反应模型确定爆震波关键参数;

[0013] S2、根据所述基元反应模型爆震波关键参数,构建两步反应模型;

[0014] S3、采用实验及数值模拟验证所述两步反应模型。

[0015] 进一步的,S1包括以下步骤:

[0016] S11、首先采用基元反应模型计算给定初始状态燃料/氧化剂均匀混合气体中C-J爆震波速 $\tilde{V}_{CJ}$ 、C-J爆震波马赫数 $\tilde{M}_{CJ}$ 、C-J状态参数及von Neumann状态参数。其中C-J状态参数包括:温度 $\tilde{T}_{CJ}$ 、压力 $\tilde{P}_{CJ}$ 、及密度 $\tilde{\rho}_{CJ}$ 、von Neumann状态参数包括:温度 $\tilde{T}_{vm}$ 、压力 $\tilde{P}_{vm}$ 、密度 $\tilde{\rho}_{vm}$ 、比热比 $\tilde{\gamma}_{vm}$ ;

[0017] S12、利用基元反应模型计算混气C-J爆震波对应的ZND (Zel'dovich-von Neumann-Döring) 结构,确定诱导区实际物理长度 $\Delta_I$ ,同时计算爆震波一维稳定性参数 $\tilde{\lambda}$ 。



[0018] 进一步的, S2两步反应模型为诱导-放热两步反应模型;其使用两个反应速率控制方程分别模拟爆震燃烧的两个过程,第一步诱导反应代表的是诱导区内点火过程,第二步放热反应代表的是放热反应区内热量释放过程,其具体形式如下:

$$[0019] \quad \frac{\partial(\rho\xi)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u\xi)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v\xi)}{\partial y} = H(1-\xi)\rho k_I \text{EXP} \left[ E_I \left( \frac{1}{T_s} - \frac{1}{T} \right) \right]$$

$$[0020] \quad \frac{\partial(\rho\lambda)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u\lambda)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v\lambda)}{\partial y} = [1-H(1-\xi)](1-\lambda)\rho k_R \text{EXP} \left[ -\frac{E_R}{T} \right]$$

[0021] 其中 $\xi$ 是诱导反应进度变量, $\lambda$ 是放热反应进度变量, $H(1-\xi)$ 是一个阶跃函数:

$$[0022] \quad H(1-\xi) = \begin{cases} 1, & \text{if } 0 < \xi \leq 1 \\ 0, & \text{if } \xi \leq 0 \end{cases}$$

[0023]  $k_I$ 是诱导区化学反应速率常数,通常取 $k_I = -u_{vn}$ ;其中 $u_{vn}$ 是爆震波坐标系下,C-J (Chapman-Jouguet)爆震波中前导激波后气流的速度; $k_R$ 是放热反应区化学反应速率常数; $E_I$ 和 $E_R$ 分别是诱导区和放热反应区的活化能, $T_s$ 是前导激波后气流的温度;上述物理量均为无量纲量,长度采用的是诱导区长度进行无量纲化,时间采用诱导区长度与参考速度的比值进行无量纲化;

[0024] 用C-J爆震波前导激波后气流温度对诱导反应和放热反应活化能进行归一化处理,即:

$$[0025] \quad \varepsilon_I = \frac{E_I}{T_s}, \varepsilon_R = \frac{E_R}{T_s}$$

[0026] 进一步的,S2包括以下步骤:

[0027] S21、取基元反应模型计算得到的混气C-J爆震波速 $V_{CJ}$ 和von Neumann状态下比热比 $\tilde{\gamma}_{vn}$ 分别作为两步反应模型的C-J爆震波速 $V_{CJ}$ 和比热比 $\gamma$ ;

[0028] S22、从基元反应模型计算得到的C-J状态参数(温度 $\tilde{T}_{CJ}$ 、压力 $\tilde{P}_{CJ}$ 、密度 $\tilde{\rho}_{CJ}$ )、von Neumann状态参数(温度 $\tilde{T}_{vn}$ 、压力 $\tilde{P}_{vn}$ 、密度 $\tilde{\rho}_{vn}$ )及C-J爆震波马赫数 $\tilde{M}_{CJ}$ ,共七个爆震波特征参数中任选其一,作为两步反应模型对应的特征参数,再结合比热比 $\gamma$ 和 $v_{CJ}$ ,根据固定比热比爆震理论,唯一确定两步反应模型的无量纲放热量 $Q$ 和气体常数 $R$ ;

[0029] 其中,若选取基元反应模型的C-J爆震波马赫数 $\tilde{M}_{CJ}$ 作为两步反应模型的C-J爆震波马赫数 $M_{CJ}$ ,则两步反应模型无量纲放热量 $Q$ 和气体常数 $R$ 可通过以下方程组求解得到:

$$[0030] \quad M_{CJ} = \frac{v_{CJ}}{\sqrt{\gamma R \tilde{T}_0}}$$

$$[0031] \quad M_{CJ} = \left[ \left( 1 + \frac{\gamma^2 - 1}{\gamma} Q \right) + \sqrt{\left( 1 + \frac{\gamma^2 - 1}{\gamma} Q \right)^2 - 1} \right]^{\frac{1}{2}}$$

[0032] 其中 $\tilde{T}_0$ 为爆震波波前混气静温。

[0033] 若选取基元反应模型爆震波C-J状态温度 $\tilde{T}_{CJ}$ 作为两步反应模型爆震波C-J状态温

度 $T_{CJ}$ ，则两步反应无量纲放热量 $Q$ 和气体常数 $R$ 可通过以下方程组求解得到：

$$[0034] \quad \frac{T_{CJ}}{\tilde{T}_0} = \frac{(\gamma M_{CJ}^2 + 1)^2}{(\gamma + 1)^2 M_{CJ}^2}$$

$$[0035] \quad M_{CJ} = \left[ \left( 1 + \frac{\gamma^2 - 1}{\gamma} Q \right) + \sqrt{\left( 1 + \frac{\gamma^2 - 1}{\gamma} Q \right)^2 - 1} \right]^{\frac{1}{2}}$$

$$[0036] \quad M_{CJ} = \frac{v_{CJ}}{\sqrt{\gamma R \tilde{T}_0}}$$

[0037] 其中 $\tilde{T}_0$ 为爆震波波前混气静温。

[0038] 若选取基元反应模型爆震波C-J状态压力 $\tilde{P}_{CJ}$ 作为两步反应模型爆震波C-J状态温度 $P_{CJ}$ ，则两步反应无量纲放热量 $Q$ 和气体常数 $R$ 可通过以下方程组求解得到：

$$[0039] \quad \frac{P_{CJ}}{\tilde{P}_0} = \frac{\gamma M_{CJ}^2 + 1}{\gamma + 1}$$

$$[0040] \quad M_{CJ} = \left[ \left( 1 + \frac{\gamma^2 - 1}{\gamma} Q \right) + \sqrt{\left( 1 + \frac{\gamma^2 - 1}{\gamma} Q \right)^2 - 1} \right]^{\frac{1}{2}}$$

$$[0041] \quad M_{CJ} = \frac{v_{CJ}}{\sqrt{\gamma R \tilde{T}_0}}$$

[0042] 其中 $\tilde{T}_0$ 为爆震波波前混气静温， $\tilde{P}_0$ 为爆震波波前混气静压。

[0043] 若选取基元反应模型爆震波C-J状态密度 $\tilde{\rho}_{CJ}$ 作为两步反应模型爆震波C-J状态温度 $\rho_{CJ}$ ，则两步反应无量纲放热量 $Q$ 和气体常数 $R$ 可通过以下方程组求解得到：

$$[0044] \quad \frac{\rho_{CJ}}{\tilde{\rho}_0} = \frac{(\gamma + 1) M_{CJ}^2}{\gamma M_{CJ}^2 + 1}$$

$$[0045] \quad M_{CJ} = \left[ \left( 1 + \frac{\gamma^2 - 1}{\gamma} Q \right) + \sqrt{\left( 1 + \frac{\gamma^2 - 1}{\gamma} Q \right)^2 - 1} \right]^{\frac{1}{2}}$$

$$[0046] \quad M_{CJ} = \frac{v_{CJ}}{\sqrt{\gamma R \tilde{T}_0}}$$

[0047] 其中 $\tilde{T}_0$ 为爆震波波前混气静温， $\tilde{\rho}_0$ 为爆震波波前混气密度。

[0048] 若选取基元反应模型爆震波von Neumann状态温度 $\tilde{T}_{vn}$ 作为两步反应模型爆震波von Neumann状态温度 $T_{vn}$ ，则两步反应无量纲放热量 $Q$ 和气体常数 $R$ 可通过以下方程组求解

得到:

$$[0049] \quad \frac{T_{vn}}{\tilde{T}_0} = \frac{(2\gamma M_{CJ}^2 - \gamma + 1) [2 + (\gamma - 1)M_{CJ}^2]}{(\gamma + 1)^2 M_{CJ}^2}$$

$$[0050] \quad M_{CJ} = \left[ \left( 1 + \frac{\gamma^2 - 1}{\gamma} Q \right) + \sqrt{\left( 1 + \frac{\gamma^2 - 1}{\gamma} Q \right)^2 - 1} \right]^{\frac{1}{2}}$$

$$[0051] \quad M_{CJ} = \frac{v_{CJ}}{\sqrt{\gamma R \tilde{T}_0}}$$

[0052] 其中 $\tilde{T}_0$ 为爆震波波前混气静温。

[0053] 若选取基元反应模型爆震波 von Neumann 状态压力 $\tilde{P}_{vn}$ 作为两步反应模型爆震波 von Neumann 状态压力 $P_{vn}$ , 则两步反应无量纲放热量 $Q$ 和气体常数 $R$ 可通过以下方程组求解得到:

$$[0054] \quad \frac{P_{vn}}{\tilde{P}_0} = \frac{2\gamma M_{CJ}^2 - \gamma + 1}{\gamma + 1}$$

$$[0055] \quad M_{CJ} = \left[ \left( 1 + \frac{\gamma^2 - 1}{\gamma} Q \right) + \sqrt{\left( 1 + \frac{\gamma^2 - 1}{\gamma} Q \right)^2 - 1} \right]^{\frac{1}{2}}$$

$$[0056] \quad M_{CJ} = \frac{v_{CJ}}{\sqrt{\gamma R \tilde{T}_0}}$$

[0057] 其中 $\tilde{T}_0$ 为爆震波波前混气静温,  $\tilde{P}_0$ 为爆震波波前混气静压。

[0058] 若选取基元反应模型爆震波 von Neumann 状态密度 $\tilde{\rho}_{vn}$ 作为两步反应模型爆震波 von Neumann 状态密度 $\rho_{vn}$ , 则两步反应无量纲放热量 $Q$ 和气体常数 $R$ 可通过以下方程组求解得到:

$$[0059] \quad \frac{\rho_{vn}}{\tilde{\rho}_0} = \frac{(\gamma + 1)M_{CJ}^2}{(\gamma - 1)M_{CJ}^2 + 2}$$

$$[0060] \quad M_{CJ} = \left[ \left( 1 + \frac{\gamma^2 - 1}{\gamma} Q \right) + \sqrt{\left( 1 + \frac{\gamma^2 - 1}{\gamma} Q \right)^2 - 1} \right]^{\frac{1}{2}}$$

$$[0061] \quad M_{CJ} = \frac{v_{CJ}}{\sqrt{\gamma R \tilde{T}_0}}$$

[0062] 其中 $\tilde{T}_0$ 为爆震波波前混气静温,  $\tilde{\rho}_0$ 为爆震波波前混气密度。

[0063] S23、根据确定的两步反应模型的无量纲放热量 $Q$ 和比热比 $\gamma$ , 根据固定比热比爆

震理论计算两步反应模型对应的C-J状态参数(温度 $t_{CJ}$ 、压力 $p_{CJ}$ 、密度 $\rho_{CJ}$ )和von Neumann状态参数(温度 $t_{vn}$ 、压力 $p_{vn}$ 、密度 $\rho_{vn}$ 、速度 $u_{vn}$ )；S24、假设定容爆炸的点火延迟时间 $\tau_1$ 具有Arrhenius形式：

$$[0064] \quad \tau_1 \sim A \exp\left(\frac{E_I}{RT}\right)$$

[0065] 其中T为温度,R为气体常数, $E_I$ 为活化能,A为指前因子。

[0066] 给定不同扰动爆震波速度 $\pm 1\% \tilde{V}_{CJ}$ ,采用基元反应计算经过爆震波前导激波压缩之后气体温度 $T_1$ 和 $T_2$ ,以及定容爆炸对应点火延迟时间 $\tau_1$ 和 $\tau_2$ ;根据定容爆炸理论计算无量纲诱导反应活化能 $\varepsilon_1$ :

$$[0067] \quad \varepsilon_1 = \frac{E_I}{RT_{vn}} = \frac{1}{T_{vn}} \frac{\ln \tau_2 - \ln \tau_1}{\frac{1}{T_2} - \frac{1}{T_1}}$$

[0068] S25、取诱导区化学反应速率常数 $k_I = -u_{vn}$ ,同时取定 $\varepsilon_R = 1.0$ ;通过调整放热反应区化学反应速率常数 $k_R$ ,使得两步反应模型计算得到的爆震波一维稳定性参数 $\chi$ 与基元反应模型计算得到的爆震波一维稳定性参数 $\tilde{\chi}$ 相等,从而确定放热反应区化学反应速率常数 $k_R$ 。

[0069] 进一步的,S12计算爆震波一维稳定性参数 $\chi$ 方法如下:

$$[0070] \quad \chi \equiv \varepsilon_I \frac{\Delta_I}{\Delta_R}$$

[0071] 其中 $\varepsilon_I$ 为诱导反应活化能; $\Delta_I$ 为诱导区长度,定义为前导激波与反应热释放速率最大的位置之间的长度; $\Delta_R$ 放热区长度,定义为:

$$[0072] \quad \Delta_R = \frac{u_{CJ}}{\dot{\sigma}_{max}}$$

[0073] 其中 $u_{CJ}$ 为爆震波坐标系下,CJ状态下当地声速; $\dot{\sigma}$ 为化学反应热释放速率,可通过下式计算:

$$[0074] \quad \dot{\sigma} = (1 - \lambda) \frac{Q}{c^2} \frac{d\lambda}{dt}$$

[0075] 其中c为当地声速。

[0076] 本发明的有益效果:

[0077] 1、爆震波稳定性参数是描述爆震波稳定性的重要特征参数,本方法通过建模使得两步反应模型对应燃料稳定性参数 $\chi$ 与基元反应模型 $\tilde{\chi}$ 保持一致,保证了简单的两步反应模型在爆震波的稳定性描述方面与复杂的基元反应模型一致。

[0078] 2、本建模方法可根据实际研究问题需要,灵活选择七个爆震波特征参数,研究重点关注的爆震燃烧特征参数,使得两步反应模型计算得到的特征参数与基元反应模型一致。

[0079] 3、本计算方法可以保证两步反应模型对燃料爆震燃烧典型特征参数的准确模拟,解决两步反应模型对实际燃料爆震燃烧物理过程模拟的问题,实现两步反应模型在较高爆

震燃烧数值模拟效率基础上兼顾模拟精度,可推动两步反应模型在爆震燃烧领域及工程设计领域的广泛应用。

### 附图说明

[0080] 图1是本发明提供的实施例一 $P_0=1\text{atm}, T_0=300\text{K}$ ,化学恰当比乙烯/空气两步反应模型与基元反应模型ZND结构对比;

[0081] 图2是本发明提供的实施例二 $P_0=1\text{atm}, T_0=500\text{K}$ ,化学恰当比JP-10/空气两步反应模型与基元反应模型ZND结构对比图;

[0082] 图3是采用两步反应模型模拟得到的化学恰当比氢气/空气预混气旋转爆震燃烧温度和压力流场;

[0083] 图4是两步反应模型数值模拟不同时刻爆震波传播速度与基元反应模型计算的C-J速度比值。

### 具体实施方式

[0084] 为了使本技术领域的人员更好地理解本申请中的技术方案,下面将结合本申请实施例中的附图,对本申请实施例中的技术方案进行清楚、完整的描述,显然,所描述的实施例仅仅是本申请一部分实施例,而不是全部的实施例。基于本申请中的实施例,本领域普通技术人员在没有做出创造性劳动前提下所获得的所有其他实施例,都应当属于本申请保护的范围。

[0085] 本发明提供了一种针对燃料爆震燃烧的两步反应模型计算方法:

[0086] S1、根据基元反应模型确定爆震波关键参数;

[0087] S2、根据所述基元反应模型爆震波关键参数,构建两步反应模型;

[0088] S3、采用实验及数值模拟验证所述两步反应模型。

[0089] 进一步的,S1包括以下步骤:

[0090] S11、首先采用基元反应模型计算给定初始状态燃料/氧化剂均匀混合气体中C-J爆震波速 $\tilde{V}_{CJ}$ 、C-J爆震波马赫数 $\tilde{M}_{CJ}$ 、C-J状态参数及von Neumann状态参数。其中C-J状态参数包括:温度 $\tilde{T}_{CJ}$ 、压力 $\tilde{P}_{CJ}$ 、及密度 $\tilde{\rho}_{CJ}$ , von Neumann状态参数包括:温度 $\tilde{T}_{vn}$ 、压力 $\tilde{P}_{vn}$ 、密度 $\tilde{\rho}_{vn}$ 、比热比 $\tilde{\gamma}_{vn}$ ;

[0091] S12、利用基元反应模型计算混气C-J爆震波对应的ZND(Zel'dovich-von Neumann-Döring)结构,确定诱导区实际物理长度 $\Delta_I$ ,同时计算爆震波一维稳定性参数 $\tilde{\chi}$ 。

[0092] 进一步的,S2两步反应模型为诱导-放热两步反应模型;其使用两个反应速率控制方程分别模拟爆震燃烧的两个过程,第一步诱导反应代表的是诱导区内点火过程,第二步放热反应代表的是放热反应区内热量释放过程,其具体形式如下:

$$[0093] \quad \frac{\partial(\rho\xi)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u\xi)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v\xi)}{\partial y} = H(1-\xi)\rho k_I \text{EXP} \left[ E_I \left( \frac{1}{T_S} - \frac{1}{T} \right) \right]$$

$$[0094] \quad \frac{\partial(\rho\lambda)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u\lambda)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v\lambda)}{\partial y} = [1-H(1-\xi)](1-\lambda)\rho k_R \text{EXP} \left[ -\frac{E_R}{T} \right]$$

[0095] 其中 $\xi$ 是诱导反应进度变量, $\lambda$ 是放热反应进度变量, $H(1-\xi)$ 是一个阶跃函数:

$$[0096] \quad H(1-\xi) = \begin{cases} 1, & \text{if } 0 < \xi \leq 1 \\ 0, & \text{if } \xi \leq 0 \end{cases}$$

[0097]  $k_I$ 是诱导区化学反应速率常数,通常取 $k_I = -u_{vn}$ ;其中 $u_{vn}$ 是爆震波坐标系下,C-J (Chapman-Jouguet)爆震波中前导激波后气流的速度; $k_R$ 是放热反应区化学反应速率常数; $E_I$ 和 $E_R$ 分别是诱导区和放热反应区的活化能, $T_s$ 是前导激波后气流的温度;上述物理量均为无量纲量,长度采用的是诱导区长度进行无量纲化,时间采用诱导区长度与参考速度的比值进行无量纲化;

[0098] 用C-J爆震波前导激波后气流温度对诱导反应和放热反应活化能进行归一化处理,即:

$$[0099] \quad \varepsilon_I = \frac{E_I}{T_s}, \quad \varepsilon_R = \frac{E_R}{T_s}$$

[0100] 进一步的,S2包括以下步骤:

[0101] S21、取基元反应模型计算得到的混气C-J爆震波速 $V_{CJ}$ 和von Neumann状态下比热比 $\tilde{\gamma}_{vn}$ 分别作为两步反应模型的C-J爆震波速 $V_{CJ}$ 和比热比 $\gamma$ ;

[0102] S22、从基元反应模型计算得到的C-J状态参数(温度 $\tilde{T}_{CJ}$ 、压力 $\tilde{P}_{CJ}$ 、密度 $\tilde{\rho}_{CJ}$ )、von Neumann状态参数(温度 $\tilde{T}_{vn}$ 、压力 $\tilde{P}_{vn}$ 、密度 $\tilde{\rho}_{vn}$ )及C-J爆震波马赫数 $\tilde{M}_{CJ}$ ,共七个爆震波特征参数中任选其一,作为两步反应模型对应的特征参数,再结合比热比 $\gamma$ 和 $v_{CJ}$ ,根据固定比热比爆震理论,唯一确定两步反应模型的无量纲放热量 $Q$ 和气体常数 $R$ ;

[0103] 其中,若选取基元反应模型的C-J爆震波马赫数 $\tilde{M}_{CJ}$ 作为两步反应模型的C-J爆震波马赫数 $M_{CJ}$ ,则两步反应模型无量纲放热量 $Q$ 和气体常数 $R$ 可通过以下方程组求解得到:

$$[0104] \quad M_{CJ} = \frac{v_{CJ}}{\sqrt{\gamma R \tilde{T}_0}}$$

$$[0105] \quad M_{CJ} = \left[ \left( 1 + \frac{\gamma^2 - 1}{\gamma} Q \right) + \sqrt{\left( 1 + \frac{\gamma^2 - 1}{\gamma} Q \right)^2 - 1} \right]^{\frac{1}{2}}$$

[0106] 其中 $\tilde{T}_0$ 为爆震波波前混气静温。

[0107] 若选取基元反应模型爆震波C-J状态温度 $\tilde{T}_{CJ}$ 作为两步反应模型爆震波C-J状态温度 $T_{CJ}$ ,则两步反应无量纲放热量 $Q$ 和气体常数 $R$ 可通过以下方程组求解得到:

$$[0108] \quad \frac{T_{CJ}}{\tilde{T}_0} = \frac{(\gamma M_{CJ}^2 + 1)^2}{(\gamma + 1)^2 M_{CJ}^2}$$

$$[0109] \quad M_{CJ} = \left[ \left( 1 + \frac{\gamma^2 - 1}{\gamma} Q \right) + \sqrt{\left( 1 + \frac{\gamma^2 - 1}{\gamma} Q \right)^2 - 1} \right]^{\frac{1}{2}}$$

$$[0110] \quad M_{CJ} = \frac{v_{CJ}}{\sqrt{\gamma R \tilde{T}_0}}$$

[0111] 其中 $\tilde{T}_0$ 为爆震波波前混气静温。

[0112] 若选取基元反应模型爆震波C-J状态压力 $\tilde{P}_{CJ}$ 作为两步反应模型爆震波C-J状态温度 $P_{CJ}$ ，则两步反应无量纲放热量 $Q$ 和气体常数 $R$ 可通过以下方程组求解得到：

$$[0113] \quad \frac{P_{CJ}}{\tilde{P}_0} = \frac{\gamma M_{CJ}^2 + 1}{\gamma + 1}$$

$$[0114] \quad M_{CJ} = \left[ \left( 1 + \frac{\gamma^2 - 1}{\gamma} Q \right) + \sqrt{\left( 1 + \frac{\gamma^2 - 1}{\gamma} Q \right)^2 - 1} \right]^{\frac{1}{2}}$$

$$[0115] \quad M_{CJ} = \frac{v_{CJ}}{\sqrt{\gamma R \tilde{T}_0}}$$

[0116] 其中 $\tilde{T}_0$ 为爆震波波前混气静温， $\tilde{p}_0$ 为爆震波波前混气静压。

[0117] 若选取基元反应模型爆震波C-J状态密度 $\tilde{\rho}_{CJ}$ 作为两步反应模型爆震波C-J状态温度 $\rho_{CJ}$ ，则两步反应无量纲放热量 $Q$ 和气体常数 $R$ 可通过以下方程组求解得到：

$$[0118] \quad \frac{\rho_{CJ}}{\tilde{\rho}_0} = \frac{(\gamma + 1)M_{CJ}^2}{\gamma M_{CJ}^2 + 1}$$

$$[0119] \quad M_{CJ} = \left[ \left( 1 + \frac{\gamma^2 - 1}{\gamma} Q \right) + \sqrt{\left( 1 + \frac{\gamma^2 - 1}{\gamma} Q \right)^2 - 1} \right]^{\frac{1}{2}}$$

$$[0120] \quad M_{CJ} = \frac{v_{CJ}}{\sqrt{\gamma R \tilde{T}_0}}$$

[0121] 其中 $\tilde{T}_0$ 为爆震波波前混气静温， $\tilde{\rho}_0$ 为爆震波波前混气密度。

[0122] 若选取基元反应模型爆震波von Neumann状态温度 $\tilde{T}_{vn}$ 作为两步反应模型爆震波von Neumann状态温度 $T_{vn}$ ，则两步反应无量纲放热量 $Q$ 和气体常数 $R$ 可通过以下方程组求解得到：

$$[0123] \quad \frac{T_{vn}}{\tilde{T}_0} = \frac{(2\gamma M_{CJ}^2 - \gamma + 1)[2 + (\gamma - 1)M_{CJ}^2]}{(\gamma + 1)^2 M_{CJ}^2}$$

$$[0124] \quad M_{CJ} = \left[ \left( 1 + \frac{\gamma^2 - 1}{\gamma} Q \right) + \sqrt{\left( 1 + \frac{\gamma^2 - 1}{\gamma} Q \right)^2 - 1} \right]^{\frac{1}{2}}$$

$$[0125] \quad M_{CJ} = \frac{v_{CJ}}{\sqrt{\gamma R \tilde{T}_0}}$$

[0126] 其中 $\tilde{T}_0$ 为爆震波波前混气静温。

[0127] 若选取基元反应模型爆震波 von Neumann 状态压力 $\tilde{P}_{vn}$ 作为两步反应模型爆震波 von Neumann 状态压力 $P_{vn}$ , 则两步反应无量纲放热量 $Q$ 和气体常数 $R$ 可通过以下方程组求解得到:

$$[0128] \quad \frac{P_{vn}}{\tilde{P}_0} = \frac{2\gamma M_{CJ}^2 - \gamma + 1}{\gamma + 1}$$

$$[0129] \quad M_{CJ} = \left[ \left( 1 + \frac{\gamma^2 - 1}{\gamma} Q \right) + \sqrt{\left( 1 + \frac{\gamma^2 - 1}{\gamma} Q \right)^2 - 1} \right]^{\frac{1}{2}}$$

$$[0130] \quad M_{CJ} = \frac{v_{CJ}}{\sqrt{\gamma R \tilde{T}_0}}$$

[0131] 其中 $\tilde{T}_0$ 为爆震波波前混气静温,  $\tilde{P}_0$ 为爆震波波前混气静压。

[0132] 若选取基元反应模型爆震波 von Neumann 状态密度 $\tilde{\rho}_{vn}$ 作为两步反应模型爆震波 von Neumann 状态密度 $\rho_{vn}$ , 则两步反应无量纲放热量 $Q$ 和气体常数 $R$ 可通过以下方程组求解得到:

$$[0133] \quad \frac{\rho_{vn}}{\tilde{\rho}_0} = \frac{(\gamma + 1)M_{CJ}^2}{(\gamma - 1)M_{CJ}^2 + 2}$$

$$[0134] \quad M_{CJ} = \left[ \left( 1 + \frac{\gamma^2 - 1}{\gamma} Q \right) + \sqrt{\left( 1 + \frac{\gamma^2 - 1}{\gamma} Q \right)^2 - 1} \right]^{\frac{1}{2}}$$

$$[0135] \quad M_{CJ} = \frac{v_{CJ}}{\sqrt{\gamma R \tilde{T}_0}}$$

[0136] 其中 $\tilde{T}_0$ 为爆震波波前混气静温,  $\tilde{\rho}_0$ 为爆震波波前混气密度。

[0137] S23、根据确定的两步反应模型的无量纲放热量 $Q$ 和比热比 $\gamma$ , 根据固定比热比爆震理论计算两步反应模型对应的C-J状态参数(温度 $t_{CJ}$ 、压力 $p_{CJ}$ 、密度 $\rho_{CJ}$ )和 von Neumann 状态参数(温度 $t_{vn}$ 、压力 $p_{vn}$ 、密度 $\rho_{vn}$ 、速度 $u_{vn}$ ); S24、假设定容爆炸的点火延迟时间 $\tau_i$ 具有 Arrhenius 形式:



$$[0138] \quad \tau_i \sim A \exp\left(\frac{E_i}{RT}\right)$$

[0139] 其中T为温度,R为气体常数, $E_i$ 为活化能,A为指前因子。

[0140] 给定不同扰动爆震波速度 $\pm 1\% \bar{V}_{CJ}$ ,采用基元反应计算经过爆震波前导激波压缩之后气体温度 $T_1$ 和 $T_2$ ,以及定容爆炸对应点火延迟时间 $\tau_1$ 和 $\tau_2$ ;根据定容爆炸理论计算无量纲诱导反应活化能 $\varepsilon_I$ :

$$[0141] \quad \varepsilon_I = \frac{E_i}{RT_{vn}} = \frac{1}{T_{vn}} \frac{\ln \tau_2 - \ln \tau_1}{\frac{1}{T_2} - \frac{1}{T_1}}$$

[0142] S25、取诱导区化学反应速率常数 $k_I = -u_{vn}$ ,同时取定 $\varepsilon_R = 1.0$ ;通过调整放热反应区化学反应速率常数 $k_R$ ,使得两步反应模型计算得到的爆震波一维稳定性参数 $\chi$ 与基元反应模型计算得到的爆震波一维稳定性参数 $\bar{\chi}$ 相等,从而确定放热反应区化学反应速率常数 $k_R$ 。

[0143] 进一步的,计算爆震波一维稳定性参数 $\chi$ 方法如下:

$$[0144] \quad \chi \equiv \varepsilon_I \frac{\Delta_I}{\Delta_R}$$

[0145] 其中 $\varepsilon_I$ 为诱导反应活化能; $\Delta_I$ 为诱导区长度,定义为前导激波与反应热释放速率最大的位置之间的长度; $\Delta_R$ 放热区长度,定义为:

$$[0146] \quad \Delta_R = \frac{u_{CJ}}{\dot{\sigma}_{max}}$$

[0147] 其中 $u_{CJ}$ 为爆震波坐标系下,CJ状态下当地声速; $\dot{\sigma}$ 为化学反应热释放速率,可通过下式计算:

$$[0148] \quad \dot{\sigma} = (1 - \lambda) \frac{Q}{c^2} \frac{d\lambda}{dt}$$

[0149] 其中c为当地声速。

[0150] 具体实施例一:

[0151] 下表给出了按照本发明建模方法计算的 $P_0 = 1 \text{ atm}$ ,  $T_0 = 300 \text{ K}$ ,化学恰当比乙烯/空气均匀预混气两步反应参数及两步反应模型与基元反应模型爆轰燃烧特征参数对比。同时图1给出了两步反应模型混气C-J爆轰波ZND结构温度与基元反应模型计算结果对比。其中,建模中保证两步反应模型与基元反应模型计算得到的爆轰波马赫数保持一致。可以看出,本发明所述建模方法得到的两步反应模型,能够很好描述爆轰波的ZND结构,两步反应温度曲线变化趋势与基元反应结果定性十分接近,说明了本发明的可行性和有效性。

[0152]

Q	$\gamma$	$\varepsilon_I$	$\varepsilon_R$	$k_R$	R (J/(kg·K))	$\chi$	$\Delta_I$ (m)
27.8	1.26	13.53	1.00	6.95	317.0	12.90	6.07E-4

[0153]  $P_0 = 1 \text{ atm}$ ,  $T_0 = 300 \text{ K}$ ,化学恰当比乙烯/空气两步反应模型参数

[0154]	乙烯/空气	C-J 爆震波			C-J 状态			von Neumann 状态		
	爆震波特征参数	速度 (m/s)	马赫 数	稳定性参 数	温度 (K)	压力 (atm)	密度 (kg/m <sup>3</sup> )	温度 (T)	压力 (atm)	密度 (kg/m <sup>3</sup> )
	基元反应模型	1823.8	5.27	12.90	2924	18.21	1.81	1593	33.28	6.27
	两步反应模型	1823.8	5.27	12.90	2739	15.93	1.74	1356	30.85	6.82

[0155]  $P_0=1\text{atm}, T_0=300\text{K}$ , 化学恰当比乙烯/空气两步反应模型与基元反应模型爆轰燃烧特征对比

[0156] 具体实施例二:

[0157] 进一步, 下表及图2给出了采用本发明建模方法对大分子碳氢燃料JP-10两步反应建模结果与基元反应模型对比。同样在建模中保证两步反应模型与基元反应模型计算得到的爆轰波马赫数保持一致。建模对应的状态及燃料组分参数为 $P_0=1\text{atm}, T_0=500\text{K}$ , 化学恰当比JP-10/空气。大分子碳氢燃料燃烧过程十分复杂, 典型的基元反应模型包含几十上百种组分, 对应的反应在几百到几千量级, 直接利用其进行数值模拟十分困难。而采用本文建模方法得到的两步反应模型, 能够十分简单并且相对准确的描述其发生爆轰燃烧时对应的激波诱导及燃烧放热过程, 充分说明了本建模方法的特点和优势。

[0158]	Q	$\gamma$	$\epsilon_I$	$\epsilon_R$	$k_R$	R (J/(kg·K))	x	$\Delta_I$ (m)
	15.8	1.27	6.87	1.00	5.27	286.9	5.02	8.62E-4

[0159]  $P_0=1\text{atm}, T_0=500\text{K}$ , 化学恰当比JP-10/空气两步反应模型参数

[0160]	JP-10/空气	C-J 爆震波			C-J 状态			von Neumann 状态		
	爆震波特征参数	速度 (m/s)	马赫 数	稳定性 参数	温度 (K)	压力 (atm)	密度 (kg/m <sup>3</sup> )	温度 (T)	压力 (atm)	密度 (kg/m <sup>3</sup> )
	基元反应模型	1773.7	4.15	5.02	1732	11.21	1.78	1036	20.07	5.81
	两步反应模型	1773.7	4.15	5.02	1772	10.10	1.71	980	19.20	5.88

[0161]  $P_0=1\text{atm}, T_0=500\text{K}$ , 化学恰当比JP-10/空气两步反应模型与基元反应模型爆轰燃烧特征对比

[0162] 具体实施例三:

[0163] 为进一步验证本发明两步反应模型计算方法对实际燃料爆震燃烧模拟情况, 采用两步反应模型对对旋转爆震发动机燃烧室流场进行数值模拟, 并将模拟得到的爆轰波特征参数与基元反应模型结果进行对比。同样在建模中保证两步反应模型与基元反应模型计算得到的爆轰波速度和马赫数保持一致。建模对应的状态及燃料组分参数为 $P_0=5500\text{Pa}, T_0=216\text{K}$ , 化学恰当比氢气/空气预混气, 其中上述状态参数对应旋转爆震发动机典型工作高度 $H=20\text{km}$ 来流静压和静温条件。下表给出了采用本发明计算得到的两步反应模型参数。

[0164]	Q	$\gamma$	$\epsilon_I$	$\epsilon_R$	$k_R$	R (J/(kg·K))	x	$\Delta_I$ (m)
	24.9	1.32	5.77	1.00	2.63	422	1.59	2.49E-3

[0165]  $P_0=5500\text{Pa}, T_0=216\text{K}$ , 化学恰当比氢气/空气预混气两步反应模型参数

[0166] 旋转爆震发动机的燃烧室构型主要为等直的圆环,当燃烧室的径向厚度与内径相比很小时,可忽略其径向的影响。把燃烧室沿其母线展开得到二维矩形计算区域,对上下边界采用周期性边界条件以实现爆震波的周期性传播,左侧边界为预混气超声速入口边界条件,右侧出口采用外推边界条件。二维数值模拟算例计算条件设置为:周向长度 $Y=240 \Delta I$ ,轴向长度 $X=160 \Delta I$ ,反应物为化学恰当比的氢气/空气预混气,预混气填充总压 $P_t=29P_0$ ,预混气总温 $T_t=3.6T_0$ 。数值模拟收敛之后,旋转爆震流场温度和压力分布云图如图3所示。从图中可以看出典型的旋转爆震流场中爆震波-斜激波-滑移线典型结构特征,并且压力云图中可以明显看到爆震波面存在沿波面法向左右运动的三波点和横波结构。上述结果表明两步反应模型能够较为精细的模拟典型爆震波波系结构特征。

[0167] 图4所示为监测到的不同时刻爆震波面传播速度的变化。为方便对比,采用基元反应模型计算的C-J爆震波速度对监测到的两步反应模型数值模拟爆震波传播速度进行归一化处理。可以看出,横波结构的存在导致爆震波面传播速度出现周期性的变化,爆震波传播速度整体在0.8到1.0左右上下波动,平均速度大约C-J速度的90%。爆震波面运动横波结构的存在导致爆震波传播速度发生波动,而爆震波后高温高压燃烧产物向燃烧室下游的侧向膨胀导致实际爆震波传播速度一定程度小于C-J速度,上述数值模拟速度与C-J速度之间的差异是正常的物理现象。上述结果说明本发明计算方法针对实际燃料建模结果,能够实现对燃料爆震燃烧特征参数的准确模拟,说明了本发明的可行性和有效性。

[0168] 以上所述,仅为本发明的较佳的具体实施方式,但本发明的保护范围并不局限于此,所有熟悉本技术领域的技术人员在本发明公开的技术范围内,根据本发明的技术方案及其本发明的构思加以等同替换或改变均应涵盖在本发明的保护范围之内。

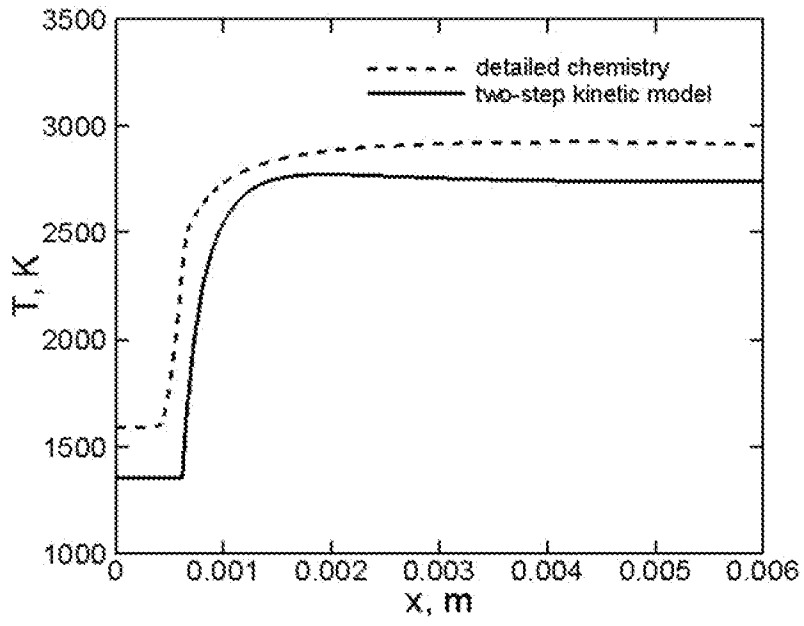


图1

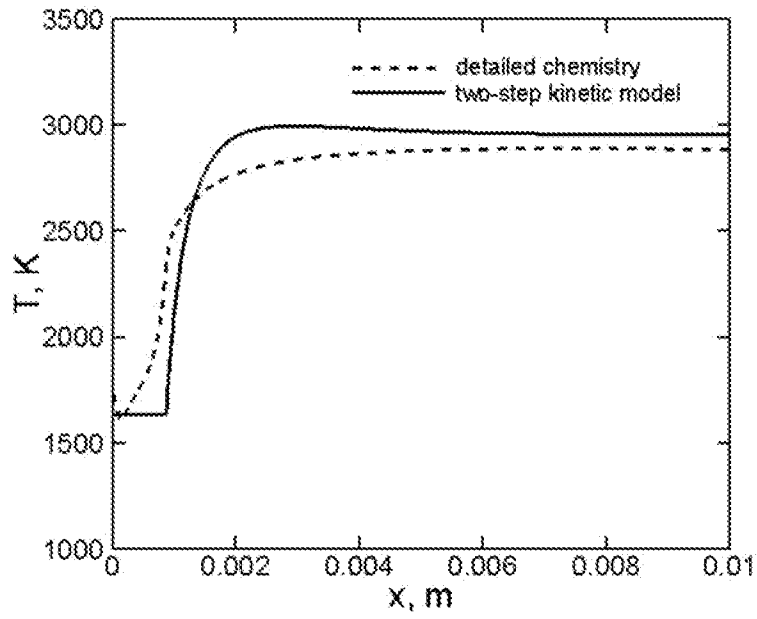


图2

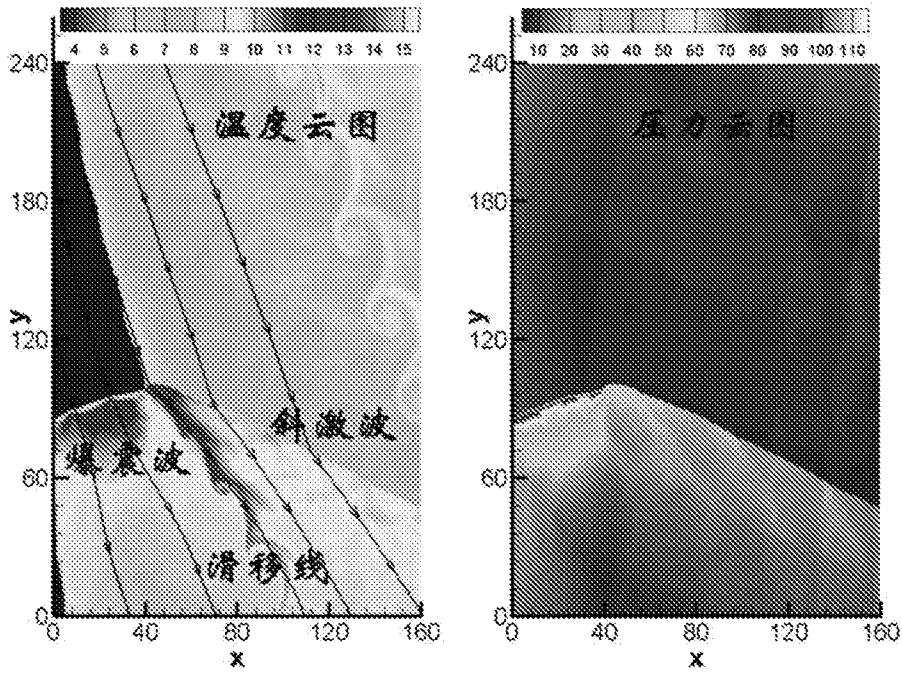


图3

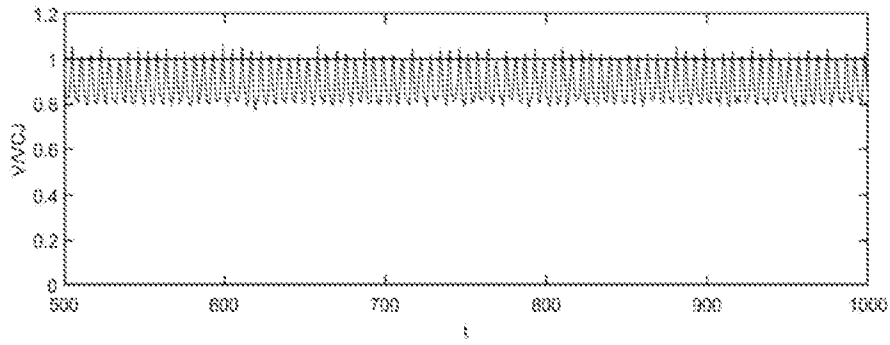


图4