
气相爆轰基本理论与数值计算

Basic Theory and Numerical Calculation of Gaseous Detonation

(2-nd Edition)

Bai Haotong

Baiht0201@nuaa.edu.cn

前言（第二版）

在《气相爆轰基本数值计算》第一版及其相关程序开源发布后，受到了广大业内学生、老师们的认可。我作为一个非爆轰专业的学生，对此感到非常的荣幸。

2024 年我回国读博，在第一学期又选修了一门《爆轰物理学》课程，这门课主要学习凝聚态物质的爆轰理论。当然，凝聚态爆轰与气相爆轰的基本理论都是一致的，即 C-J 理论与 ZND 结构。上课的是理学院的老师，他们的讲解很深刻，让我进一步认识到了爆轰理论基本模型建立时的思想。这门课启发我发现了 Rayleigh 流模型、冲压发动机模态转换、爆轰波 ZND 结构之间的联系，让我进一步完善了本文第一章节中的“从 Rayleigh 流模型到爆轰理论”。本文的题目也更新为了《气相爆轰基本理论与数值计算》。

在这两年间也收到了不少网友来信提醒我文档里出现的一些笔误，一直没找机会集中修改。借此更新版本的机会，纠正了上一个版本中的一系列问题。也在此答谢每位提出建议的网友。

本文第二版虽增加了部分内容，但受作者水平及研究方向的限制，只能作为爆轰与燃烧相关专业学生入门学习爆轰、反应流计算的材料，远达不到教材的水平。要系统性学习爆轰理论与化学反应流动，需要参考相关的专业教材。

Bai Haotong

2025.07.25 于长沙

前言

爆轰波是一种在可燃混合气体中以超声速稳定传播的燃烧波，混合气通过激波压缩达到自点火温度发生燃烧，而燃烧释放的热量又驱动激波的传播，从而达到了稳定传播的状态。爆轰波存在自增压燃烧的特性，采用爆轰燃烧的热力学循环过程相比其它等容燃烧或等压燃烧过程具有更高的热效率，应用于推进系统能够简化推进系统增压结构、提高推力。因此，爆轰推进技术在高超声速吸气式飞行器动力领域有重大的引用潜力。

在爆轰波的理论计算方面，最早在 20 世纪初由英国物理化学家 Chapman 和法国工程师 Jouguet 分别建立了预测爆轰波速的理论计算模型，后称“C-J”理论。该理论忽略爆轰波的内部结构，认为化学反应具有无限快的速率，同时假设爆轰波后气流速度达到声速，从而求解出爆轰波后压力、温度等气流参数。二战期间 Zeldovich、von Neumann, Doring 引入了化学动力学过程，将爆轰波描述为由前导激波、诱导区和化学反应区构成的有限厚度的薄层，该理论称为“ZND”理论，所建立的爆轰波结构又称“ZND”结构。ZND 结构是被认为较为接近真实的爆轰波结构，得到了很好的实验验证。

随着计算机和数值计算技术的发展，国内外学者提出并发展了大量基于 C-J 理论和 ZND 理论的爆轰波计算方法，常用的有三种。第一种基于 C-J 理论，认为化学反应速率无限大，放热在瞬间完成，且反应前后比热比是已知的。该方法人为假设反应放热量和化学反应前后的气体性质，作为定量研究的方法不够准确，但能够定性研究爆轰波的许多性质，且对 C-J 爆速的预测是比较准确的。第二种方法考虑了爆轰波化学反应面与激波面的强耦合特性，假设无限快反应速率，建立了化学平衡激波关系，在求解气相爆轰波方面有很可观的计算速度和准确性。第三种方法则考虑了更加真实的化学反应动力学过程，即求解具有化学反应源项的 N-S 方程组，属于计算流体力学 (CFD) 方法，该方法最贴近实际的物理化学过程，但计算速度相对最低。

作者在 2022 年 10 月-2023 年 4 月间对上述三种方法在 Matlab 平台上进行了编程，并将后两种方法的求解程序整理并建立了气相爆轰工具箱。基于第二种方法（化学平衡模型）的求解程序可以实现混合气 C-J 爆速正爆轰波、斜爆轰波、斜爆轰波极曲线的求解，以及斜爆轰发动机理论推力的计算；基于第三种方法（化

学动力学模型)的求解程序可以实现混合气爆轰波 ZND 结构、等容爆炸、一维无粘爆轰波的起爆、传播(即一维无粘非平衡化学反应流动)的计算。该爆轰工具箱所涉及的理论都是气相爆轰物理和数值计算方法的经典理论,虽然不能对复杂的工程模型进行仿真计算,但对工程模型初步设计以及初学者的理论学习都有比较高的参考意义。

本文将围绕文章所附“气相爆轰工具箱”程序,对气相爆轰基本理论及数值计算方法进行整理归纳。本文第一章介绍了 C-J 理论的基本概念,并从经典热力学中的 Rayleigh 流理论重新推导了爆轰波的 C-J 解、ZND 结构,并解读其物理含义,最后对全文将要涉及到的气体热力学概念及其对应符号表示进行梳理;第二章主要介绍爆轰波的化学平衡激波关系算法,最后对现有的斜爆轰冲压发动机理论推力模型提出改进思考;第三章主要围绕一维无粘非平衡反应流方程的求解,介绍计算爆轰波的化学动力学方法。

本文仅引用所涉及理论最主要的参考文献,其中爆轰波的基本理论以及化学平衡模型主要涉及文献[1]、[9]、[10],来源于中科院力学所姜宗林团队的工作成果;化学非平衡流动的计算方法主要涉及文献[23]、[24]、[26],来源于国防科技大学刘君团队的工作成果,相关文献在后文中不会进行逐句的详细引用。

本文将重点强调模型的推导以及求解过程中的关键问题,并包含作者的学习心得。一般的气体动力学、气相爆轰动力学、热力学和数值计算及其相关学科的基本公式在本文中不会一一给出。

本文所附求解程序在附录中给出,程序验证工作作者已经根据相关文献中的验证方法自行完成,在本文中不作强调。

受作者水平限制,工作中难免存在错误,还请广大读者批评指正。

Bai Haotong

2023.05.24 于俄罗斯

目录

1. 气相爆轰的基本理论	6
1.1 从 Rayleigh 流理论与 C-J 理论	
1.2 从 Rayleigh 流理论到 ZND 理论	
1.3 混合气体热力学基本性质与符号表示	
2. 激波化学平衡方法	24
2.1 激波化学平衡方法的建立	
2.2 斜爆轰波的求解与极曲线	
2.3 斜爆轰冲压发动机理论推力模型	
3. 化学动力学方法	43
3.1 一维无粘非平衡反应流动方程与化学动力学方法	
3.2 等容爆炸与爆轰波 ZND 结构	
3.3 一维无粘流基础	
3.4 基于时间项分裂的解耦方法	
参考文献	59
后记	62

1 气相爆轰的基本理论

经典爆轰理论由“C-J”理论和“ZND”理论构成。C-J 理论是一种预测爆轰波速的理论计算模型，该理论忽略爆轰波的内部结构，认为化学反应具有无限快的速率，同时假设爆轰波后气流速度达到声速，从而求解出爆轰波后压力、温度等气流参数。ZND 理论将爆轰波描述为由前导激波、诱导区和化学反应区构成的有限厚度的薄层，所建立的爆轰波结构又称“ZND 结构”。ZND 结构是被认为较为接近真实的爆轰波结构，得到了很好的实验验证。

Rayleigh 流动模型则描述了理想气体在一维等截面直管中受换热影响的流动过程。对于包括超燃冲压发动机在内的众多发动机燃烧室来说，化学反应放热是整个流动最主要的影响因素。基于这个性质，Rayleigh 模型能够很好地刻画出发动机燃烧室内流动的基本特征。

对爆轰发动机而言，我们应当既考虑经典爆轰理论，又考虑 Rayleigh 流动模型。然而，当我们把这两个模型放在一起考虑时，会发现爆轰理论和 Rayleigh 流动模型其实是同一理论的“一体两面”。本文将基于 Rayleigh 流模型推导出爆轰理论的基本结论，从 Rayleigh 流模型的角度对经典爆轰理论做出诠释。

1.1 从 Rayleigh 流理论与 C-J 理论

早在 20 世纪初，Chapman 和 Jouguet 就给出了爆轰波自持传播的系统理论，即 C-J 理论。最早的 C-J 理论把爆轰波简化成了一个具有无限快反应速率的一维间断面，通过一维守恒的流动方程可以唯一确定一个爆轰波传播速度(C-J 速度)和爆轰波后一系列流动状态(C-J 状态)。尽管 C-J 理论的物理本质存疑，但它对爆轰波宏观行为的预测有非常高的准确性，是爆轰早期研究里程碑式的成果^[1]。

关于 C-J 理论，张博^[2]、H. D. Gruschka^[3]所著的教材里给出了很清晰的推导，其基本逻辑是将爆轰波的一维守恒方程中的质量、动量方程联立，得到 Rayleigh 线方程，将质量、能量方程联立，得到 Hugoniot 线方程，然后在 $p-v$ 图（压力-比体积图）上研究 Rayleigh 线与 Hugoniot 线切点的性质，该点即为 C-J 状态的解点。

关于 C-J 理论的基本推导可谓是前人之述备矣，作者因此不作详细介绍。作者将根据自己的理解，从比 C-J 理论提出更早的 Rayleigh 流理论的角度阐述 C-J 理论的物理含义，并在 $h-s$ 图（焓-熵图）上研究 C-J 状态解点性质。

1.1.1 C-J 爆轰波的控制方程与 Rayleigh 流理论

图 1 给出了一维加热直管流动（即 Rayleigh 流）的理论假设示意图，在一维等面积直管中加入热量，其流动状态将发生变化。当我们忽略加热距离 dx ，仅关注管道左端入口流动与管道右端出口流动状态时，实际上已经把加热过程处理成了间断。因此，我们在这里把 C-J 理论的基本假设看作是 Rayleigh 流理论的一种特殊情况。

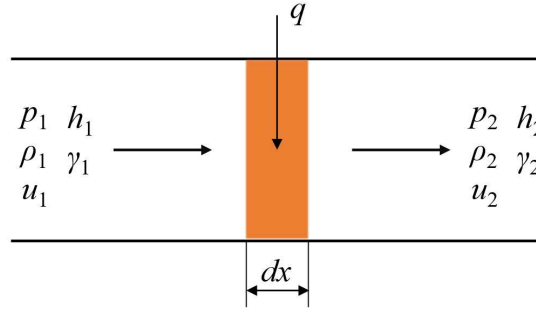


图 1 Rayleigh 流理论的基本假设

给出 Rayleigh 流理论的守恒型控制方程，它在形式上与 C-J 爆轰波的控制方程是统一的：

$$\rho_1 u_1 = \rho_2 u_2 = \dot{m} \quad (1-1-1)$$

$$p_1 + \rho_1 u_1^2 = p_2 + \rho_2 u_2^2 \quad (1-1-2)$$

$$h_1 + q + \frac{u_1^2}{2} = h_2 + \frac{u_2^2}{2} \quad (1-1-3)$$

式中下标“1”和“2”分别表示换热前后的气体状态，其中焓 h 为热焓， $h = \int_0^T c_p dT$ ， c_p 为比热容， q 为换热量，是一个有限值。

现在我们考虑一种换热前后气体比热容 c_p 与比热比 γ 发生变化的 Rayleigh 流过程，同时假设这种比热变化与温度变化无关，而是由于换热结束后气体的某种状态变化有关（如化学反应）：

改写式(1-1-2)：

$$p + \rho u^2 = p \left(1 + \frac{\rho u^2}{p} \right) = p(1 + \gamma Ma^2) = \text{const} \quad (1-1-4)$$

则对于换热前后的静压关系：

$$\frac{p_2}{p_1} = \frac{1 + \gamma_1 Ma_1^2}{1 + \gamma_2 Ma_2^2} \quad (1-1-5)$$

改写式(1-1-1):

$$pMa\sqrt{\frac{\gamma}{RT}} = \text{const} \quad (1-1-6)$$

代入式(1-1-4), 得到换热前后的静温关系:

$$\frac{T_2}{T_1} = \frac{Ma_2^2 p_2^2 \gamma_2}{Ma_1^2 p_1^2 \gamma_1} = \frac{Ma_2^2}{Ma_1^2} \left(\frac{1 + \gamma_1 Ma_1^2}{1 + \gamma_2 Ma_2^2} \right)^2 \frac{\gamma_2}{\gamma_1} \quad (1-1-7)$$

根据气动函数:

$$\frac{T^*}{T} = 1 + \frac{\gamma - 1}{2} Ma^2 \quad (1-1-8)$$

代入式(1-1-7), 得到换热前后的总温关系:

$$\frac{T_2^*}{T_1^*} = \frac{Ma_2^2}{Ma_1^2} \left(\frac{1 + \gamma_1 Ma_1^2}{1 + \gamma_2 Ma_2^2} \right)^2 \frac{2 + (\gamma_2 - 1) Ma_2^2}{2 + (\gamma_1 - 1) Ma_1^2} \frac{\gamma_2}{\gamma_1} \quad (1-1-9)$$

现在考虑换热过程对总温的影响, 由于换热量直接影响总焓的变化, 因此:

$$H_2 - H_1 = T_2^* cp_2 - T_1^* cp_1 = T_2^* \frac{\gamma_2 R}{\gamma_2 - 1} - T_1^* \frac{\gamma_1 R}{\gamma_1 - 1} = q \quad (1-1-10)$$

代入式(1-1-9), 得到:

$$\frac{T_2^*}{T_1^*} = \left(\frac{q}{T_1^*} + \frac{\gamma_1 R}{\gamma_1 - 1} \right) \frac{\gamma_2 - 1}{\gamma_2 R} = \frac{Ma_2^2}{Ma_1^2} \left(\frac{1 + \gamma_1 Ma_1^2}{1 + \gamma_2 Ma_2^2} \right)^2 \frac{2 + (\gamma_2 - 1) Ma_2^2}{2 + (\gamma_1 - 1) Ma_1^2} \frac{\gamma_2}{\gamma_1} \quad (1-1-11)$$

根据 Rayleigh 流理论, 不论是超声速气体还是亚声速气体, 在加热后其流动马赫数 Ma 都会趋近于 1, 当出口马赫数 Ma_2 等于 1 时, 能唯一确定一个最大加热量 (关于这一结论将在下一节中做出详细解释)。在本文所假设的变比热比 Rayleigh 流理论中, 对应于入口马赫数 Ma_1 最大加热量给出:

$$\left(\frac{q_{\max}}{T_1^*} + \frac{\gamma_1 R}{\gamma_1 - 1} \right) \frac{\gamma_2 - 1}{\gamma_2 R} = \frac{1}{Ma_1^2} \frac{(1 + \gamma_1 Ma_1^2)^2}{(1 + \gamma_2)(2 + (\gamma_1 - 1) Ma_1^2)} \frac{\gamma_2}{\gamma_1} \quad (1-1-12)$$

再次代入气动函数化简:

$$\begin{aligned} \left(\frac{\frac{q_{\max}}{T_1 \left(1 + \frac{\gamma_1 - 1}{2} Ma_1^2 \right)} + \frac{\gamma_1 R}{\gamma_1 - 1}}{\gamma_2 R} \right) \frac{\gamma_2 - 1}{\gamma_2} &= \left(\frac{\frac{q_{\max}}{T_1 \frac{\gamma_1 R}{\gamma_1 - 1} \left(1 + \frac{\gamma_1 - 1}{2} Ma_1^2 \right)} + 1}{\gamma_1 - 1} \right) \frac{\gamma_2 - 1}{\gamma_2} \frac{\gamma_1}{\gamma_2} \\ &= \left(\frac{\frac{q_{\max}}{\frac{a_1^2}{\gamma_1 - 1} \left(1 + \frac{\gamma_1 - 1}{2} Ma_1^2 \right)} + 1}{\gamma_1 - 1} \right) \frac{\gamma_2 - 1}{\gamma_2} \frac{\gamma_1}{\gamma_2} \end{aligned}$$

得到用换热前后比热比、来流声速 a_1 所表示的最大换热量与来流马赫数 Ma_1 之间的关系:

$$\frac{q_{\max}}{a_1^2} = \left(\frac{(1 + \gamma_1 Ma_1^2)^2}{Ma_1^2 (1 + \gamma_2) (2 + (\gamma_1 - 1) Ma_1^2)} \left(\frac{\gamma_2}{\gamma_1} \right)^2 \frac{\gamma_1 - 1}{\gamma_2 - 1} - 1 \right) \left(\frac{1}{\gamma_1 - 1} + \frac{Ma_1^2}{2} \right) \quad (1-1-13)$$

事实上, 这里我们已经得出了对于某反应放热下的 C-J 马赫数与加热量的关系。观察一般 C-J 理论中 C-J 马赫数的表达式^[2]:

$$\begin{aligned} M_{C-J} &= \left[\frac{\gamma_1}{\gamma_2} \left(1 - \frac{2}{1 \pm \sqrt{1 + \frac{4}{K} \frac{\gamma_1}{\gamma_2}}} \right) \right]^{-1/2} \\ K &= \frac{2\gamma_1(\gamma_2 + 1)}{\gamma_2^2} \left[\frac{\gamma_2 - \gamma_1}{\gamma_1 - 1} + \frac{\gamma_1(\gamma_2 - 1)q}{a_1^2} \right] \end{aligned} \quad (1-1-14)$$

不难证明, 式(1-1-13)与(1-1-14)完全等价。

1.1.2 Rayleigh 流动的物理性质

现在我们回顾经典的 Rayleigh 流理论^[4], 考虑一个连续的换热过程, 即换热量 q 是一个无限小量 δq 。对方程(1-1-2)取微分, 并在方程两侧同除以压强 p :

$$\frac{dp}{p} + \frac{\rho u^2}{p} \frac{du}{u} = 0 \quad (1-1-15)$$

运用声速公式和马赫数定义, 得:

$$\frac{dp}{p} + \gamma Ma^2 \frac{du}{u} = 0 \quad (1-1-16)$$

对方程(1-1-2)取对数微分, 并代入状态方程:

$$\frac{dp}{p} + \frac{du}{u} - \frac{dT}{T} = 0 \quad (1-1-17)$$

联立式(1-1-16)和式(1-1-17)，消去压强，得：

$$\frac{dT}{T} = (1 - \gamma Ma^2) \frac{du}{u} \quad (1-1-18)$$

将理想气体声速公式代入马赫数定义：

$$u = Ma \sqrt{\gamma RT} \quad (1-1-19)$$

两边取对数微分：

$$\frac{du}{u} = \frac{dMa}{Ma} + \frac{1}{2} \left(\frac{dT}{T} + \frac{d\gamma}{\gamma} \right) \quad (1-1-20)$$

考虑比热比的定义：

$$\gamma = \frac{c_p}{c_v} = \frac{c_p}{c_p - R}$$

对两边取微分，同时除以 γ ：

$$\frac{d\gamma}{\gamma} = \frac{1}{\gamma} \frac{\frac{dc_p}{dT}(c_p - R) - \frac{dc_p}{dT}c_p}{(c_p - R)^2} dT = -\frac{1}{\gamma^2} \frac{\frac{dc_p}{dT} \gamma RT}{(c_p - R)^2} \frac{dT}{T} = -\frac{\frac{dc_p}{dT} a^2}{c_p^2} \frac{dT}{T} \quad (1-1-21)$$

注意，我们此前假设过比热容 c_p 和比热比 γ 在换热前后发生变化，但这种变化仅仅是由于经历了有限换热值 q 的换热后，气体状态发生了某种变化所导致的。对于经历无限换热量 δq 连续的换热过程比热容 c_p 和比热比 γ 是不随温度连续变化。因此在连续换热过程中：

$$\frac{d\gamma}{\gamma} = 0 \quad (1-1-22)$$

这也是经典 Rayleigh 流理论的基本假设，与我们的假设并不冲突。将式(1-1-18)、(1-1-22) 代入式(1-1-20)，得：

$$\frac{dT}{T} = \frac{2(1 - \gamma Ma^2)}{1 + \gamma Ma^2} \frac{dMa}{Ma} \quad (1-1-23)$$

对气动函数(1-1-8)取对数微分，有：

$$\begin{aligned}\frac{dT^*}{T^*} &= \frac{dT}{T} + \frac{(\gamma-1)}{1+\frac{\gamma-1}{2}Ma^2} \frac{dMa}{Ma} + \frac{\gamma Ma^2}{2+(\gamma-1)Ma^2} \frac{d\gamma}{\gamma} \\ &= \frac{dT}{T} + \frac{(\gamma-1)}{1+\frac{\gamma-1}{2}Ma^2} \frac{dMa}{Ma}\end{aligned}\quad (1-1-24)$$

代入式(1-1-23)，得到：

$$\frac{dMa}{Ma} = \frac{\left(1+\gamma Ma^2\right)\left(1+\frac{\gamma-1}{2}Ma^2\right)}{2(1-Ma^2)} \frac{dT^*}{T^*}\quad (1-1-25)$$

(1-1-25)这就是 Rayleigh 流理论中的马赫数变化与总温变化的关系。将式(1-1-25)代回到式(1-1-17)~(1-1-21)，得到压强关于总温的表达式：

$$\frac{dp}{p} = -\frac{\gamma Ma^2 \left(1+\frac{\gamma-1}{2}Ma^2\right)}{1-Ma^2} \frac{dT^*}{T^*}\quad (1-1-26)$$

考虑气动函数：

$$\frac{p^*}{p} = \left(1+\frac{\gamma-1}{2}Ma^2\right)^{\frac{\gamma}{\gamma-1}}\quad (1-27)$$

对式(1-1-27)取微分，去掉 $\frac{d\gamma}{\gamma}$ 项，代入式(1-1-26)，得到换热对总压的影响：

$$\frac{dp^*}{p^*} = -\frac{\gamma Ma^2}{2} \frac{dT^*}{T^*}\quad (1-1-28)$$

对于理想气体的非等熵流动过程：

$$ds = c_p \frac{dT^*}{T^*} - R \frac{dp^*}{p^*}\quad (1-1-29)$$

将式(1-1-28)代入，得到换热过程对熵的影响：

$$\frac{ds}{c_p} = \left(1+\frac{\gamma-1}{2}Ma^2\right) \frac{dT^*}{T^*}\quad (1-1-29)$$

观察式(1-1-25)、(1-1-26)、(1-1-29)，总结以下规律，并绘制成表 1-1：

1) 向超声速流动中加入热量 $\delta q > 0$ 时，总温 T^* 升高，压强 p 升高，马赫数 Ma 降低，熵 s 增大。

2) 向亚声速流动中加入热量 $\delta q > 0$ 时，总温 T^* 升高，压强 p 降低，马赫数

Ma 增大, 熵 s 增大。

表格 1 换热过程对流动的影响

条件	加热 $\delta q > 0$		加热 $\delta q < 0$	
参数	$Ma < 1$	$Ma > 1$	$Ma < 1$	$Ma > 1$
dT^*	>0	>0	<0	<0
dMa	>0	<0	<0	>0
dp	<0	>0	>0	<0
ds	>0	>0	>0	>0

这就是经典 Rayleigh 流理论的部分结论, 现在我们从 Rayleigh 流理论的角度来研究 C-J 解点的性质。

1.1.3 Rayleigh 曲线对 C-J 理论物理含义的阐述

如图 2、图 3 分别为 Rayleigh 线 (下简称 R 线) 与 Hugoniot 线 (下简称 H 线) 在 $h-s$ (焓-熵平面) 与 $p-v$ (压强-比体积平面) 上的示意图。其中, $h-s$ 平面上的 R 线与 H 线基于真实的标准状态下当量比空气-氢气混合气的热力学数据绘制。给出 $h-s$ 图上 R 线的基本公式:

$$\frac{s-s_0}{c_p} = \ln \frac{T}{T_0} - \frac{\gamma-1}{\gamma} \ln \left(\frac{(1+\gamma Ma_0^2) \pm \sqrt{(1+\gamma Ma_0^2)^2 - 4\gamma Ma_0(T/T_0)}}{2} \right) \quad (1-1-30)$$

式中 T_0 为起始温度, Ma_0 为起始马赫数。在图 2 中的 R_1 线上起始马赫数 $Ma = 5$, R_2 线上 $Ma = 1/5$, 当地温度 $T_0 = 298.15K$, 压强 $p_0 = 1atm$ 。经过计算, 当 R_1 线上超音速分支单位加热量 $q_{max} = 199kJ$ 时, 流动达到壅塞状态。

给出 $p-v$ 图上 R 线的基本公式:

$$\frac{p}{p_0} = (1+\gamma_0 Ma_0^2) - \gamma_0 Ma_0^2 \frac{v}{v_0} \quad (1-1-31)$$

给出 $p-v$ 图上 H 线的基本公式:

$$\left(\frac{p}{p_0} + \alpha \right) \left(\frac{v}{v_0} - \alpha \right) = \beta \quad (1-1-32)$$

式中, $\alpha = \frac{\gamma_1-1}{\gamma_1+1}$; $\beta = \frac{\gamma_1-1}{\gamma_1+1} \left(\frac{\gamma_0+1}{\gamma_0-1} - \frac{\gamma_1-1}{\gamma_1+1} + 2 \frac{q}{p_0 v_0} \right)$, γ_0 和 γ_1 分别为反应前、后比热比, q 为反应放热。

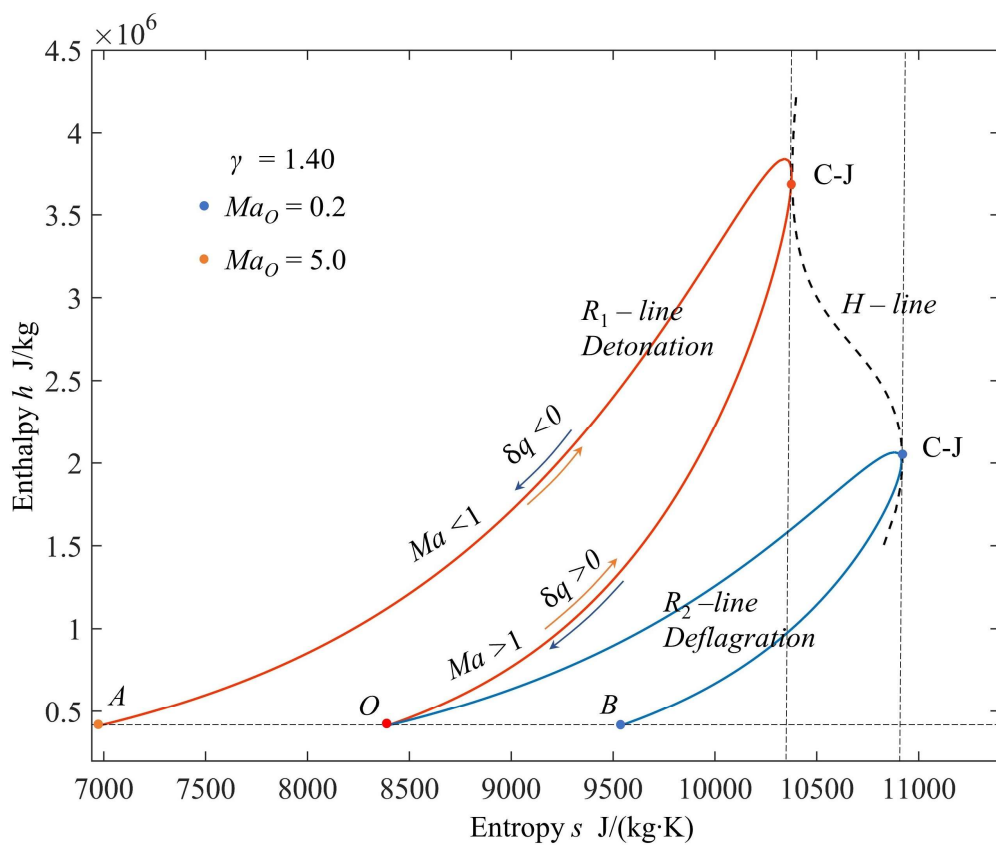


图 2 Rayleigh 线与 Hugoniot 线 h - s 图

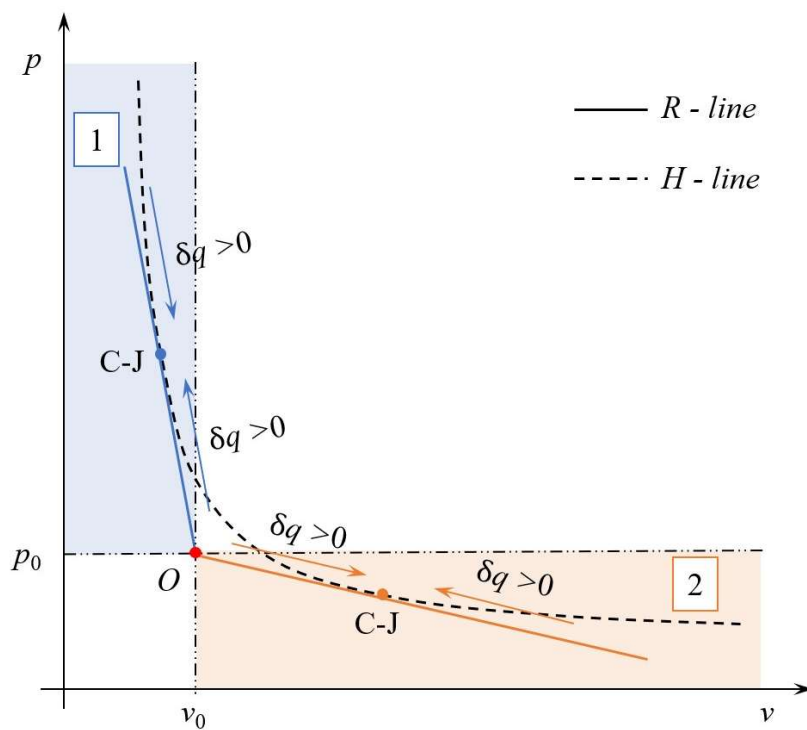


图 3 Rayleigh 线与 Hugoniot 线 p - v 图

从上式中注意到，在 $h-s$ 图上 H 线的物理意义是不明确的，这是因为 H 线所表示的物理含义是间断的，由于 γ 发生有限值的变化而无法根据理想气体熵公式(1-1-29)计算出每个点所对应的熵值。为方便讨论，我们假设 $\gamma_0 = \gamma_1$ ，变换式(1-1-32)并代入理想气体状态方程，得到 H 线上温度比与压强比的关系：

$$\frac{T}{T_0} = \frac{p}{p_0} \left(\frac{\beta}{p/p_0 + \alpha} + \alpha \right) \quad (1-1-33)$$

代入熵公式(1-1-29)，同时取 $q = q_{\max} = 199\text{kJ}$ ，这样我们就得到了图 2 中的 H 线。在两条 R 线的壅塞点处，H 线、R 线与等熵线三线相切，正如图 3 中的两个 C-J 点，这也是 C-J 理论的经典结论。

对比图 2、图 3，我们得出关于 $h-s$ 图上 C-J 解的以下结论：

(1) $h-s$ 图中 R_1 线对应 $p-v$ 图中“1”区域 R 线分支，即爆轰区分支。 $h-s$ 图中从参考焓线与 R_1 线超声速分支的交点 O 出发，在超声速气流中加入热量 q 达到壅塞点，对应于在 $p-v$ 图中从参考点 O 出发，沿着“1”区域 R 线分支向上移动达到 C-J 点。

(2) $h-s$ 图中 R_2 线对应 $p-v$ 图中“2”区域 R 线分支，即爆燃区分支。 $h-s$ 图中从参考焓线与 R_2 线亚声速分支的交点 O 出发，在亚声速气流中加入热量 q 达到壅塞点，对应于在 $p-v$ 图中从参考点 O 出发，沿着“2”区域 R 线分支向下移动达到 C-J 点。

(3) 应用 Rayleigh 流理论的结论，在超声速流动中加入热量，马赫数逐步降低到 $Ma = 1$ ，压强 p 升高，密度 ρ 升高，比体积 v 降低，熵增大。这对应超声速气流经历 C-J 爆轰波后马赫数达到 $Ma = 1$ 的过程。在亚声速流动中加入热量，马赫数逐步升高到 $Ma = 1$ ，压强 p 降低，密度 ρ 降低，比体积 v 增大，熵增大。这对应亚声速气流经历 C-J 爆燃波后马赫数达到 $Ma = 1$ 的过程。

(4) 在 $h-s$ 图中应用 Rayleigh 流理论描述 C-J 理论有许多好处，根据 Jouguet 在 C-J 爆轰理论中的声速下游流场条件，我们可以直观地判断 C-J 解就是 Rayleigh 流动的壅塞点，这对应着早期研究中认为“热壅塞”效应引起的加速导致了一个稳定的爆轰波结构^[3]。通过绘制 $h-s$ 图上的 Hugoniot 线，我们也直观地得出了 C-J 爆轰解具有 Hugoniot 线上的最小熵，C-J 爆燃解具有 Hugoniot 线上的最大熵结论，并且能得到 C-J 解上 Rayleigh 线、Hugoniot 线、等熵线三

线相切的结论。

(5) 经典的 C-J 爆轰理论认为在爆轰波的内部结构中，从 von-Neumann 尖点到 C-J 点的流动参数都是沿着 Rayleigh 线变化的。从 $h-s$ 图中我们可以直观地看到，从任意方向沿着 Rayleigh 线靠近 C-J 点的过程中，熵的变化率都不断减小，直到 C-J 点处与等熵线完全相切，熵的变化率变成零，这说明沿着 Rayleigh 线到达 C-J 点的过程是熵增加最慢的一条途径。但在现代不可逆过程热力学的理论中，过程的发展方向应该沿着熵增加最快的方向进行，这也是经典 C-J 爆轰理论的局限性之一。

1.2 从 Rayleigh 理论到 ZND 结构

20 世纪中叶 Zeldovich、von Neumann, Doring 分别独立提出了将爆轰波描述为由前导激波、诱导区和化学反应区构成的有限厚度的薄层，流动在经历了爆轰波的 ZND 结构之后达到 C-J 状态，如图 4 所示。

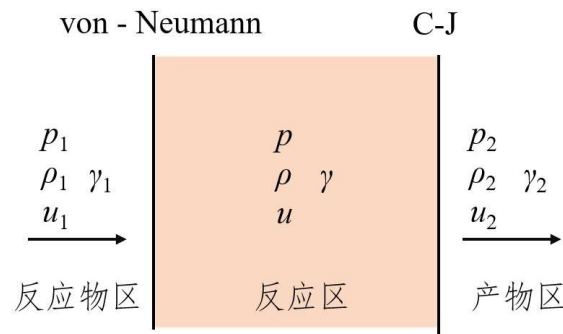


图 4 爆轰波 ZND 结构

前导激波面后的流动状态通常称为 von Neumann 状态，流动跨越激波面不发生化学反应，仅发生激波压缩过程。这个激波压缩过程使混合气温度迅速上升到自燃温度，诱导了混合气高温下的自燃机制，同时化学反应释放的热量使气体燃烧膨胀，支持前导激波稳定传播^[1]。

ZND 结构不仅是一种爆轰波的力学模型，它也是一维无粘定常流动的一个解。基于化学动力学模型，通过 CFD 方法求解一维无粘定常流动可以自然得出爆轰波的 ZND 结构。这无疑显示了 ZND 理论的巨大成功——时至今日通过开展包含化学动力学过程的无粘流动 CFD 仿真仍然可以研究大量的爆轰理论、工程、技术问题，即使现代热力学理论对经典爆轰理论的本质思想存在质疑。

ZND 结构假设完善和补充了经典的 C-J 理论，解释了初始状态点到 C-J 点之间的热力学过程，让我们对爆轰波有了更清晰的认识。现在我们从上一节的

观点出发，从 Rayleigh 流模型的角度来解释爆轰波的 ZND 结构。

首先，注意到最大加热量与来流马赫数间的关系式(1-1-12)，

$$\left(\frac{q_{\max}}{T_1^*} + \frac{\gamma_1 R}{\gamma_1 - 1} \right) \frac{\gamma_2 - 1}{\gamma_2 R} = \frac{1}{Ma_1^2} \frac{(1 + \gamma_1 Ma_1^2)^2}{(1 + \gamma_2)(2 + (\gamma_1 - 1)Ma_1^2)} \frac{\gamma_2}{\gamma_1} \quad (1-1-12)$$

在等式左端不变的情况下，等式右端是关于来流马赫数 Ma_1 的四次多项式，在排除了负值解后，还应当有两个相异的解。然而这两个解并不是对应上下 C-J 点的解，因为等式左端的来流总温 T_1^* 是固定的，而对应不同爆轰分支的总温 T^* 是不同的。因此，这两个解必定出现在同一条 Rayleigh 线上。那么这两个解应当满足什么关系？要解决这个问题，我们先考虑超燃冲压发动机中的燃烧模态转换现象。

1.2.1 超燃冲压发动机的模态转换

假象一种最简单超燃冲压发动机燃烧室模型，燃烧室型面被简化为一维光滑等截面直管，燃烧过程被简化为热量的直接加入，且热量加入前后气体的性质不发生改变。这样一来，我们可以通过 Rayleigh 流模型来研究超燃冲压发动机燃烧室内的流动。

在发动机内流道中，有流量公式：

$$\dot{m} = K \frac{p^*}{\sqrt{T^*}} A q(Ma) \quad (1-2-1)$$

其中， K 是和气体性质有关的常数， A 为流道截面积， p^* 和 T^* 为流体总压和总温， $q(Ma)$ 为气动函数：

$$q(\lambda) = \left(\frac{\gamma + 1}{2} \right)^{\frac{1}{\gamma - 1}} \lambda \left(1 - \frac{\gamma - 1}{\gamma + 1} \lambda^2 \right)^{\frac{1}{\gamma - 1}}, \quad \lambda = \sqrt{\frac{(\gamma + 1)Ma^2}{2 + (\gamma - 1)Ma^2}} \quad (1-2-2)$$

显然，在 $Ma = 1$ 时， q 取最大值 $q(Ma) = 1$ 。

燃烧室内流道中， \dot{m} 是恒定的，因此：

$$\sqrt{T^*} = K \frac{p^*}{\dot{m}} A q(Ma) \leq K \frac{p^*}{\dot{m}} A \quad (1-2-3)$$

通过 Rayleigh 流模型我们知道，在超声速气流中加入热量，流动马赫数 Ma 总趋向于 1。又由于 T^* 和燃烧所加入的热量直接相关，因此，流量公式告诉我们，对超燃发动机而言，在来流一定的条件下要保持全流道马赫数 Ma 不小于 1，燃

烧室中可加入的热量是有限的。

我们来考虑一种临界状态，燃烧室入口的超声速气流经过热量的加入，在出口处马赫数 $Ma=1$ 。也就是说，此时超燃冲压发动机达到了最大加热量，发动机内热量加入过程对应于燃气流动状态沿着 Rayleigh 线的超声速分支达到 $Ma=1$ 的壅塞点，其流量公式为：

$$K \frac{p_{in}^*}{\sqrt{T_{in}^*}} Aq(Ma_{in}) = K \frac{p_{out}^*}{\sqrt{T_{out}^*}} Aq(1) \quad (1-2-4)$$

现在，假设在燃烧室出口刚好达到壅塞的情况下，继续加入一个无穷小的热量 δq ，出口处的总压 p_{out}^* 稍微下降，总温 T_{out}^* 稍微上升。然而 $q(1)=1$ 已经达到了最大值。因此，要满足流量公式，燃烧室入口的流动状态必须相对前述的临界状态必须有所改变， $p_{in}^* q(Ma_{in})$ 要相应减小。事实上，此时燃烧室入口处会产生一道正激波，通过正激波后 $Ma<1$ ， $p_{in}^* q(Ma_{in})$ 相对波前会略微下降，流量公式得以满足^[5]。对于 Rayleigh 流模型而言，正激波使得燃烧室入口处的状态点从超声速分支通过正激波的 Hugoniot 线跃迁至 Hugoniot 线与 Rayleigh 线亚声速分支的交点，然后沿着 Rayleigh 线移动至壅塞点。

如果我们在临界状态的基础上加入一个有限值的 q ，则正激波会前移进入进气道的隔离段，此时整个燃烧室内都是亚声速燃烧的状态。加热量的改变带来燃烧室内超声速/亚声速模式的变化，称为超燃冲压发动机的模态转换。

1.2.2 Rayleigh 曲线对 ZND 理论的阐述

现在，我们再回到之前的问题上，式(1-1-12)的两个相异解满足什么关系？答案就是正激波关系式。和超燃冲压发动机的模态转换一样，式(1-1-12)的两个解中，一个解对应于超声速初始点沿着 Rayleigh 线超声速分支到达 C-J 点，另一个解对应于超声速初始点跃迁至正激波波后的亚声速状态点，再沿着 Rayleigh 线超声速分支到达 CJ 点。

如果我们把正激波关系式

$$Ma_2^2 = \frac{1 + \frac{\gamma-1}{2} Ma_1^2}{\gamma Ma_1^2 - \frac{\gamma-1}{2}} \rightarrow Ma_1^2 = \frac{2 + (\gamma-1) Ma_2^2}{2\gamma Ma_2^2 - (\gamma-1)} \quad (1-2-5)$$

其中 Ma_2 为波后马赫数，代入式(1-1-12)的右半部分：

$$\frac{1}{Ma_1^2} \frac{(1 + \gamma_1 Ma_1^2)^2}{(2 + (\gamma_1 - 1) Ma_1^2)} = \frac{\left(\frac{(\gamma Ma_2^2 + 1)(\gamma + 1)}{2\gamma Ma_2^2 - (\gamma - 1)} \right)^2}{\frac{2 + (\gamma - 1) Ma_2^2}{2\gamma Ma_2^2 - (\gamma - 1)} \cdot \frac{(\gamma + 1)^2 Ma_2^2}{2\gamma Ma_2^2 - (\gamma - 1)}}$$

上下系数相消后，化简为：

$$\frac{1}{Ma_1^2} \frac{(1 + \gamma_1 Ma_1^2)^2}{(2 + (\gamma_1 - 1) Ma_1^2)} = \frac{1}{Ma_2^2} \frac{(1 + \gamma_1 Ma_2^2)^2}{(2 + (\gamma_1 - 1) Ma_2^2)} \quad (1-2-6)$$

我们得到，通过正激波前后的马赫数满足相同的马赫数-最大加热量关系。这说明了来流先通过一道正激波，然后再加入能产生 CJ 爆轰的热量 Q_{CJ} 后，沿着 Rayleigh 线亚声速分支恰好也到达 CJ 状态点，而这正对应了 ZND 结构的基本假设。

如图 5 为 Rayleigh 线与 Hugoniot 线在 $h-s$ 平面上的示意图，其基本条件与图 2 相同，图 2 中的 H 线对应图 5 的 H_2 线。但在图 2 的基础上，图 5 还绘制了一条放热量为 0 的 H_1 线，即正激波的 Hugoniot 线。

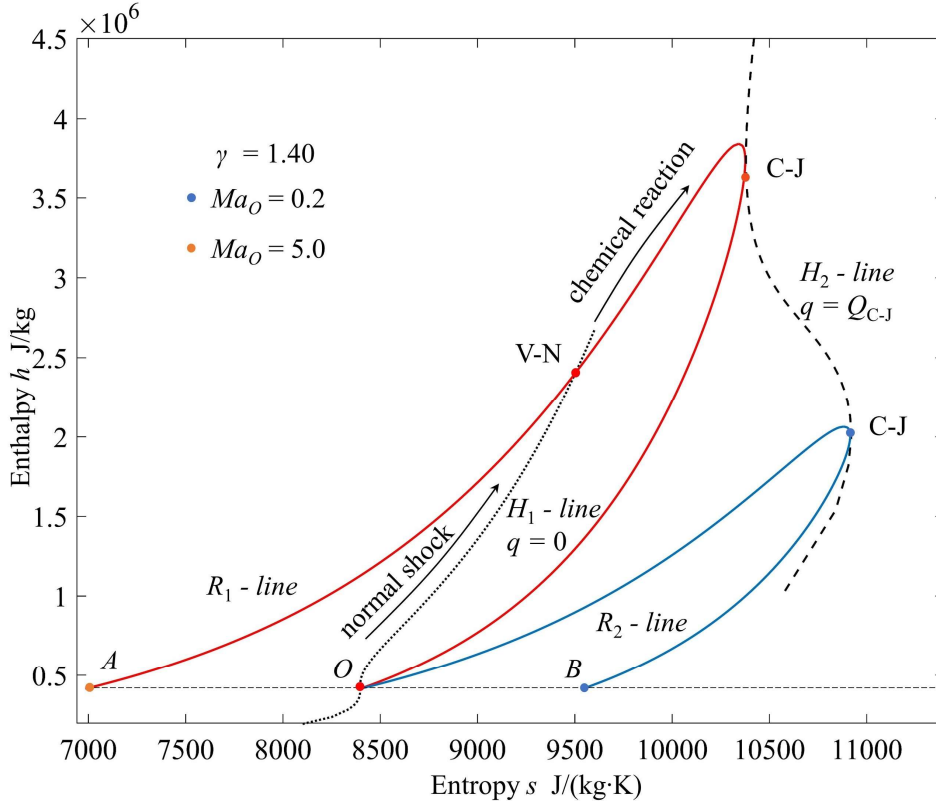


图 5 Rayleigh 线与 Hugoniot 线 $h-s$ 图

从图 5 中我们可以更加清晰地看出爆轰波 ZND 结构内的热力学状态变化过程。我们把有限厚度的爆轰波波面看作是一维等截面直管，把化学反应放热

看作是热量加入，爆轰波的气流从爆轰波的波头前方(对应图 5 中 O 点)，经历一道正激波跃迁至 $V-N$ 点（即 von-Neumann 尖点），然后沿着 Rayleigh 线亚声速分支到达 CJ 状态点。这便是从 Rayleigh 流模型的角度对 ZND 结构的诠释。

Jiang^[6]等人对超燃冲压发动机的理论工作马赫数提出了两条临界条件：第一为发动机在给定马赫数下最大加热量条件，即 Rayleigh 壅塞条件；第二临界条件为发动机燃烧室内扰动不会前传的条件，即燃烧室入口 $C-J$ 马赫数条件。从本文角度来看，上述两个临界条件其实是相同的：若燃烧室内加热量无法达到 Rayleigh 流动壅塞条件，则燃烧室入口必定高于 $C-J$ 马赫数。

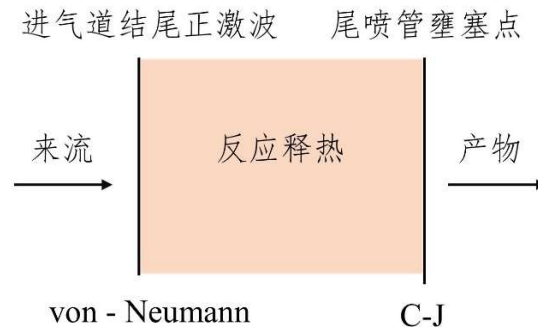


图 6 亚燃冲压发动机流动状态与 $C-J$ 爆轰波结构类比

1.2.3 Rayleigh 流模型到爆轰理论的总结

Rayleigh 流模型和 $C-J$ 、ZND 理论分别是发动机热力学和爆轰波宏观分析的经典理论，但它们其实都是一维无粘流动方程的一体两面。

借助于 Rayleigh 流模型，我们能通过 Rayleigh 流动公式描述爆轰波前后以及爆轰波内部的流动参数变化，在 $h-s$ 图上更加直观地认识到爆轰波 $C-J$ 状态点附近的流动特性。 $C-J$ 状态点对应于 Rayleigh 线上的壅塞点，而爆轰波的 ZND 结构内的流动过程对应了 Rayleigh 线上超声速初始点先通过正激波跃迁至亚声速状态点，再沿着 Rayleigh 线超声速分支到达壅塞点。

反言之，借助于 $C-J$ 理论我们也能对超燃冲压发动机的设计做出一些定性分析，超燃冲压发动机燃料的最大释热量决定其以超燃模式工作的最低马赫数，即该燃料与当量空气爆轰的 $C-J$ 马赫数。而超燃冲压发动机的在某马赫数下的最大释热量则对应了其燃料以一定混合比产生相同的 $C-J$ 爆轰马赫数所释放的热量。

1.3 混合气热力学基本性质与符号表示

在开始正式进行数值计算的理论讨论前，梳理一下热完全气体基本热力学概念和相关符号是非常有必要的。化学动力学、热力学、流体力学中涉及大量热力学概念，或符号不同，或单位不同，如不给出具体符号及单位，非常容易混淆。尤其需要注意，化学动力学中，多用质量 g、体积 cm^3 、能量 cal 作单位，而在流体力学和热力学中，多用质量 kg、体积 m^3 、能量 J 作单位。

1.3.1 混合气体的定义

假设混合气体中包含 ns 中组分，每一种气体组分分别满足理想气体状态方程：

$$p_i = \rho_i R_i T \quad (i=1, \dots, ns) \quad (1-3-1)$$

式中 p_i 为组元气体分压， ρ_i 为组元气体 i 的比质量， $R_i = R_u / W_i$ 为组元 i 的气体常数， $R_u = 8.31446 \text{ [J/(mole}\cdot\text{K)]}$ 为普适气体常数， W_i 为摩尔质量， T 为混合气体温度。

根据 Dalton 分压定律，混合气体的压力为各组元气体的分压之和：

$$p = \sum_{i=1}^{ns} p_i = \sum_{i=1}^{ns} \rho_i R_i T \quad (1-3-2)$$

组元气体的质量分数定义为：

$$Y_i = \frac{\rho_i}{\rho} \quad (i=1, \dots, ns) \quad (1-3-3)$$

组元气体摩尔分数定义为：

$$X_i = \frac{Y_i}{W_i} \frac{1}{\sum_{i=1}^{ns} \frac{Y_i}{W_i}} \quad (1-3-4)$$

混合气气体常数、混合气摩尔质量定义为：

$$\left. \begin{aligned} R &= \sum_{i=1}^{ns} Y_i R_i = \frac{R_u}{M} \\ W &= \frac{1}{\sum_{i=1}^{ns} \frac{Y_i}{W_i}} \end{aligned} \right\} \quad (1-3-5)$$

代入式(1-3-2)，得到热完全混合气体状态方程：

$$p = \rho RT \quad (1-3-6)$$

1.3.2 热完全气体的热力学参数

由热完全气体的定义，其定压比热和定容比热仅是温度的函数：

$$\left. \begin{aligned} c_{pi} &= c_{pi}(T) \\ c_{vi} &= c_{pi}(T) - R_i \end{aligned} \right\} \quad (1-3-7)$$

热完全气体的比焓定义为：

$$h_i = (h_i - h_{i,298.15}^0) + \Delta h_{f,i,298.15}^0 \quad (1-3-8)$$

式中 $\Delta h_{f,i,298.15}^0$ 为 $T=298.15\text{K}$ 时热完全气体生成能， $h_i - h_{i,298.15}^0$ 表示气体的显焓，

定义为：

$$h_i - h_{i,298.15}^0 = \int_{298.15}^T c_{pi}(t) dt \quad (1-3-9)$$

生成能与该温度下焓值一般不相等，仅仅在 $T=298.15\text{K}$ 时有 $\Delta h_{f,i,298.15}^0 = h_{i,298.15}^0$ 。

对于单质气体及电子， $\Delta h_{f,i,298.15}^0 = h_{i,298.15}^0 = 0$ 。

此外，比焓还可以定义为：

$$h_i = (h_i - h_{i,0}^0) + \Delta h_{f,0}^0 \quad (1-3-10)$$

式中 $\Delta h_{f,i,0}^0$ 为 $T=0\text{K}$ 时热完全气体生成能，称为有效零点能， $h_i - h_{i,0}^0$ 表示气体的热焓，定义为：

$$h_i^* = h_i - h_{i,0}^0 = \int_0^T c_{pi}(t) dt \quad (1-3-11)$$

注意，我们前面讨论的量热完全气体的焓值均为热焓。

热完全气体熵的计算式为：

$$s_i = s_i^0 - R_i \ln \frac{p}{p_0} \quad (1-3-12)$$

式中 $s_i^0 = \int_{298.15}^T \frac{c_{pi}}{T} dT$ 称为标准熵， $p_0 = 101325 [\text{pa}]$ 为标准大气压。

本文的数值计算均采用 NASA Glenn Research Center 在 2002 年的组分数据库^[8]对气体组分的热力学特性进行拟合，拟合函数为分段 9 系数多项式：

$$\frac{C_{pi}^0(T)}{R_u} = a_{i1} \frac{1}{T^2} + a_{i2} \frac{1}{T} + a_{i3} + a_{i4}T + a_{i5}T^2 + a_{i6}T^3 + a_{i7}T^4 \quad (1-3-13)$$

$$\frac{H_i^0(T)}{R_u T} = -a_{i1} \frac{1}{T^2} + a_{i2} \frac{\ln T}{T} + a_{i3} + \frac{1}{2}a_{i4}T + \frac{1}{3}a_{i5}T^2 + \frac{1}{4}a_{i6}T^3 + \frac{1}{5}a_{i7}T^4 + b_{i1} \frac{1}{T} \quad (1-3-14)$$

$$\frac{S_i^0(T)}{R_u} = -\frac{1}{2}a_{i1} \frac{1}{T^2} - a_{i2} \frac{1}{T} + a_{i3} \ln T + a_{i4}T + \frac{1}{2}a_{i5}T^2 + \frac{1}{3}a_{i6}T^3 + \frac{1}{4}a_{i7}T^4 + b_{i2} \frac{1}{T} \quad (1-3-15)$$

C_{pi}^0 、 H_i^0 、 S_i^0 分别为标准压力和温度 T 下组分 i ($i = 1, \dots, ns$) 的定压摩尔热容、摩尔焓和摩尔熵，系数 a_{i1} – a_{i7} 以及 b_{i1} 和 b_{i2} 来源文献[8]。根据麦克斯韦关系求出摩尔吉布斯自由能 G_i^0 ：

$$G_i^0(T) = H_i^0(T) - S_i^0(T) \cdot T \quad (1-3-16)$$

因此，本文中的比热容 c_{pi} 、比焓 h_i ，标准熵 s_i^0 分别表示为：

$$\begin{cases} c_{pi} = \frac{C_{pi}^0(T)}{W_i} \\ h_i = \frac{H_i^0(T)}{W_i} \\ s_i^0 = \frac{S_i^0(T)}{W_i} \end{cases} \quad (1-3-17)$$

在 NASA 九系数热力学数据库中，零点能 $\Delta h_{f,i,0}^0$ 需要查表获得，而不能直接删去式(1-3-14)中的最后一项，这与 NASA 七系数多项式的性质是不一样的。

此外，还有气体内能 e_i ，定义为：

$$e_i = \int_{298.15}^T c_v(t) dt + \Delta h_{f,i,298.15}^0 \quad (1-3-18)$$

代入式(1-3-7)，得到用焓值表达的比内能：

$$e_i = h_i - R_i T \quad (1-3-19)$$

以及用气体热焓表示的内能 e_i^* ：

$$e_i^* = h_i^* - R_i T \quad (1-3-20)$$

对于混合气体的比热容 c_p 比焓 h 、比熵 s ，它们的表达式为

$$\begin{cases} c_p = \sum_{i=1}^{ns} Y_i c_{pi} \\ h = \sum_{i=1}^{ns} Y_i h_i \\ s = \sum_{i=1}^{ns} Y_i s_i \end{cases} \quad (1-3-21)$$

混合气体内能、自由能、定容比热的定义是类似的，不再一一给出。上式中的比热是冻结比热，这是由于根据比热的定义：

$$c_p = \left(\frac{\partial h}{\partial T} \right)_p = \sum_{i=1}^{ns} Y_i c_{pi} + \sum_{i=1}^{ns} h_i \left(\frac{\partial Y_i}{\partial T} \right)_p \quad (1-3-22)$$

等式中的后一项涉及到质量分数的变化，本文计算仅取第一项。

冻结比热比和冻结声速的定义分别为：

$$\gamma_f = \frac{c_p}{c_v} \quad (1-3-23)$$

$$a_f = \sqrt{\gamma RT} \quad (1-3-24)$$

如不作特意说明，本文中涉及的 γ 与 a 都是指冻结比热比与冻结声速。注意量热气体比热比 γ 的概念，如果采用焓值和内能来表达，它仅表示热焓 h_i^* 与热焓对应的内能 e_i^* 之间的比值：

$$\gamma = \frac{h^*}{e^*} \quad (1-3-25)$$

试想如果由比焓和内能来表达比热比 γ ，显然对于单质气体，在标准温度下 $\gamma = 0$ ，这是不可以接受的，但这是个经常被弄混淆的概念。

实际上，在连续介质热力学中，理想气体“比热比”这个概念其实对应着三个不同的数，分别是压强-密度等熵指数、温度-密度等熵指数和压强-温度等熵指数。这三个数表示等熵变化时压强、密度和温度之间的相对变化关系，但对于理想气体，它们都恰好等于比热比。

2 激波化学平衡方法

2.1 激波化学平衡方法的建立

一般认为，在激波波阵面紧后方不能瞬时达到化学热力学平衡状态，在波阵面后存在一定的弛豫过程。但我们前面已经谈到，爆轰波化学反应面与激波面之间具有的强耦合的特性，宏观上来看，爆轰波内非平衡弛豫过程形成的内部结构相对流动尺度可以忽略不计。这与高超声速绕流的反应激波存在区别，高超声速流动中激波诱导的化学反应（如空气的解离）具有较长的诱导距离，接近流动本身的尺度，其弛豫过程不能够被简单地忽视。

正是由于爆轰波存在的反应面和激波面强耦合特性，假设了无限快反应速率，把爆轰波处理成间断面的 C-J 理论能够在爆轰波宏观行为的预测上取得成功，而化学平衡激波关系则是在 C-J 理论上的进一步改造。

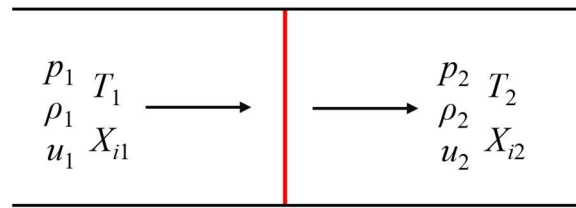


图 7 多组分气体化学平衡激波关系示意图

如图 7 为多组分气体化学平衡激波关系示意图，不同于 C-J 理论，化学平衡激波关系中不假设反应前后比热比 γ 、放热量 q 是已知量，而只需要假设来流速度 u_1 、压力 p_1 、密度 ρ_1 、温度 T_1 （或焓 $h(T_1)$ ）以及激波前的气体成分（图中为摩尔分数 X_{i1} ）是已知的。然后，根据波前的物理量求解波后的速度 u_2 、压力 p_2 、密度 ρ_2 、温度 T_2 以及气体组分 X_{i2} 。当上述物理量满足激波关系，且激波后的气体组分 X_{i2} 满足波后当地压强 p_2 、温度 T_2 下的化学平衡关系，就形成了化学平衡激波。

因此，化学平衡激波关系可以被分为激波关系与反应平衡两部分迭代求解 [9]，在计算激波关系时，我们需要假设波后组分是已知的，利用波前的流动参数和激波前后的组分求解出波后的流动参数；计算化学平衡时，根据波后的压力、温度计算出波后组分的平衡状态。当算出了波后的平衡组分后，再次计算激波关系式，不断迭代直至收敛，其逻辑框图如图 8 所示。

该化学平衡激波求解迭代方法具有类似爆轰波 ZND 结构假设的物理意义：

ZND 结构中，爆轰波的反应区可以被认为是爆轰波的一个中间解，产物区流动是爆轰波的化学平衡解。化学激波平衡算法的迭代路径则可以模拟该 ZND 结构中的化学动力学反应过程：迭代开始时假设激波前后冻结无反应，类似 ZND 结构的 von Neumann 面，迭代过程中组分逐渐收敛至平衡状态，且温度随迭代过程逐步上升、压强下降，变化规律与 ZND 结构的反应区相同。张子健在提出该方法的基础上，证明了算法的物理意义，可参考文献[9]、[10]。需要简单指出的是，经作者实践后发现迭代过程中物理量的变化规律并不一定与 ZND 结构相似，这受迭代初值和松弛因子的影响。

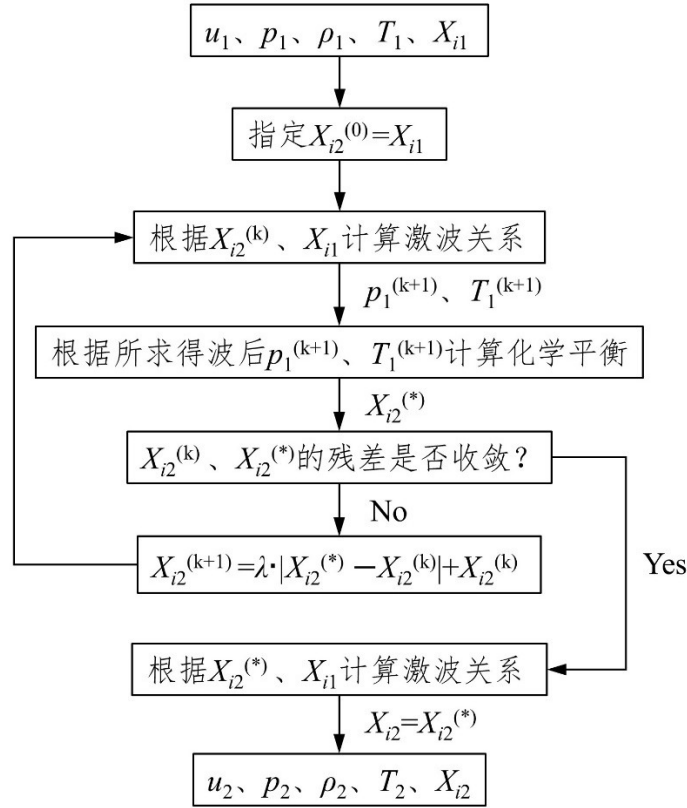


图 8 化学平衡激波求解流程

2.1.1 激波关系求解

考虑积分形式的一维定常流动控制方程：

$$\rho_1 u_1 = \rho_2 u_2 \quad (2-1-1)$$

$$p_1 + \rho_1 u_1^2 = p_2 + \rho_2 u_2^2 \quad (2-1-2)$$

$$h_1(T_1) + \frac{u_1^2}{2} = h_2(T_2) + \frac{u_2^2}{2} \quad (2-1-3)$$

注意与公式(1-1-3)不同，上式中焓值为比焓。此外，还需要理想气体状态方程封闭方程组：

$$p_1 = \rho_1 R_1 T_1, \quad p_2 = \rho_2 R_2 T_2 \quad (2-1-4)$$

注意到比焓和比热都是温度的非线性函数，由式(1-3-13)~(1-3-17)确定，因此上式无法求得解析解。方程的迭代求解主要在于(2-1-3)中非线性函数 $h(T)$ 的处理上，据此我们考虑一种针对温度 T 的牛顿迭代方法：

将式(2-1-2)除以式(2-1-1)，并代入式(2-1-4)，得到：

$$\frac{R_1 T_1}{u_1} + u_1 = \frac{R_2 T_2}{u_2} + u_2 \quad (2-1-5)$$

整理得到用 u_2 表达的 T_2 ：

$$T_2(u_2) = \frac{1}{R_2} \left(\frac{R_1 T_1}{u_1} + u_1 - u_2 \right) u_2 \quad (2-1-6)$$

上式(2-1-3)联立，能唯一确定 u_2 和 T_2 两个变量。(2-1-3)将(2-1-6)代入中：

$$f(u_2) = h_2(T_2(u_2)) + \frac{u_2^2}{2} - h_1(T_1) - \frac{u_1^2}{2} = 0 \quad (2-1-7)$$

原方程组的求解转化为求函数 $f(u_2)$ 零点的问题，采用牛顿迭代法，构造迭代函数：

$$u_{2,k+1} = u_{2,k} - \frac{f(u_{2,k})}{f'(u_{2,k})} \quad (2-1-8)$$

上式中， $u_{2,k}$ 是第 k 次的迭代值。 $f'(u_2)$ 是 $f(u_2)$ 对 u_2 的导数，具体形式为：

$$f'(u_2) = \frac{c_{p2}(T_2)}{R_2} \left(\frac{R_1 T_1}{u_1} + u_1 - 2u_2 \right) + u_2 \quad (2-1-9)$$

上式中 $c_{p2}(T_2) = dh_2/dT_2$ 是波后混合物的定压比热，它需要指定波后气体组分并通过式(1-3-21)进行计算。对于冻结激波而言，则应当采用波前组分计算。

2.1.2 化学平衡组分的求解

本文化学平衡组分的求解与文献[9]相同，采用 NASA Gibbs 自由能最小化方法^[11]。给定压力 P_a 和温度 T ，混合气吉布斯自由能为：

$$\frac{G}{R_u T} = \sum_{i=1}^{ns} \left(\frac{x_i G_i^0}{R_u T} + x_i \ln \frac{x_i}{\sum x_i} + x_i \ln p_a \right) \quad (2-1-10)$$

式中, x_i 为组分 i ($i = 1 \dots ns$) 的摩尔数, 尤其需要注意 p_a 的单位为 **atm**。标准摩尔吉布斯自由能 G_i^0 根据式(1-3-16)计算, 当混合气体处于化学平衡态时, G/R_uT 取最小值。这是一个多元函数条件极值问题, 其约束条件为元素守恒:

$$\sum_{i=1}^{ns} a_{ij} x_i - b_j = 0 \quad (j = 1, \dots, ne) \quad (2-1-11)$$

式中, b_j 为元素 j 的总摩尔数, 由反应物的组成给出; 系数 a_{ij} 为组分 i 的分子式中含元素 j 的原子个数; ne 为混合气体中元素的个数。作者建议在编程时创建一个元素矩阵, 比如, 对于 H_2O-O_2 气混合气 $\begin{pmatrix} a_{1,j} \\ a_{2,j} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 0 & 2 \end{pmatrix} \begin{matrix} H \\ O \end{matrix}$, 这样在后续计算时较为方便。

为求解式(2-1-10)在的条件(2-1-11)下的极值问题, 引入 ne 个拉格朗日乘子 λ_j ($j = 1 \dots ne$), 并定义函数 F 为

$$F = \sum_{i=1}^{ns} \left(\frac{x_i G_i^0}{R_u T} + x_i \ln \frac{x_i}{\sum x_i} + x_i \ln p_a \right) - \sum_{j=1}^{ne} \lambda_j \sum_{i=1}^{ns} (a_{ij} x_i - b_j) \quad (2-1-12)$$

通过拉格朗日乘子法式(2-1-10)和式(2-1-11)的条件极值问题被转化为式()关于组分摩尔 x_i 和拉格朗日乘子 λ_j 的多元函数无条件极值问题, 当函数 F 对组分摩尔数 x_i 的各偏导数 $\partial F / \partial x_i$ 均为零时, 函数达到极值, 即:

$$\frac{\partial F}{\partial x_i} = \frac{G_i^0}{R_u T} + \ln \frac{x_i}{\sum x_i} + \ln p_a - \sum_{j=1}^{ne} \lambda_j a_{ij} \quad (2-1-13)$$

采用迭代方法求解式(2-1-13)所示的非线性方程组的解 x_i 。给定迭代初值 y_i 为 x_i 的一个估计值, 则偏导数 $\partial F / \partial x_i$ 在 x_i 处的值可用 y_i 附近的一阶泰勒展开式估计, 即:

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial F}{\partial x_i} &\approx \frac{d_i}{y_i} - \sum_{j=1}^{ne} \lambda_j a_{ij} + \frac{x_i}{y_i} - \frac{\sum x_i}{\sum y_i} \\ d_i &= y_i \left(\frac{G_i^0}{R_u T} + \ln \frac{y_i}{\sum y_i} + \ln p_a \right) \end{aligned} \right\} \quad (i = 1, \dots, ns) \quad (2-1-14)$$

为求函数 F 的极小值, 令式(2-1-14)中 $\partial F / \partial x_i = 0$, 得到:

$$x_i = -d_i + y_i \left(\frac{\sum x_i}{\sum y_i} + \sum_{j=1}^{ne} \lambda_j a_{ij} \right) \quad (i = 1, \dots, ns) \quad (2-1-15)$$

等式左端的 x_i 就是经历一次迭代后新的平衡组分的估计值。等式右端的 $\sum x_i / \sum y_i$ 和 λ_j 为以下线性方程组的解：

$$\begin{cases} \sum_{i=1}^{ne} \lambda_j \sum_{i=1}^{ns} y_i a_{ij} = \sum_{i=1}^{ns} d_i \\ \sum_{i=1}^{ns} -a_{ij} d_i + \frac{\sum x_i}{\sum y_i} \sum_{i=1}^{ns} y_i a_{ij} + \sum_{k=1}^{ne} \lambda_k \sum_{i=1}^{ns} a_{ik} y_i a_{ij} - b_j = 0 \quad (j=1, \dots, ne) \end{cases} \quad (2-1-16)$$

上式中第一式可通过对式(2-1-15)进行求和得到，而第二式可通过将式(2-1-15)代入式(2-1-11)得到。该式看起来非常不清晰，我们将它写成矩阵形式，以某两种元素构成 i 种组分的混合气为例，式(2-1-16)表示为：

$$\begin{pmatrix} \sum a_{i,1} y_i & \sum a_{i,2} y_i & 0 \\ \sum a_{i,1} y_i a_{i,1} & \sum a_{i,1} y_i a_{i,2} & \sum a_{i,1} y_i \\ \sum a_{i,2} y_i a_{i,1} & \sum a_{i,2} y_i a_{i,2} & \sum a_{i,2} y_i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda_1 \\ \lambda_2 \\ \sum x_i / \sum y_i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum d_i \\ \sum a_{i,1} d_i + b_1 \\ \sum a_{i,2} d_i + b_2 \end{pmatrix}$$

这就清晰多了。需要注意的是，线性方程组(2-1-16)的系数矩阵容易是病态的，求解时需要采取预条件处理的方法。

事实上，该迭代方法几乎不能直接求解，这个迭代过程是非常不稳定的，受初值 y_i 影响非常大，Gibbs 自由能往往不难随迭代过程逐步减小，且元素守恒条件会被破坏，还容易出现所得组分摩尔分数 $x_i < 0$ 的解（这在数学上是允许的）。因此，我们考虑一种松弛迭代的方法^[12]：

令 $z_i = y_i + \varphi(x_i - y_i)$ 作为松弛处理后的新的计算值替代 y_i ，在每一步的迭代中采取一下处理：

(1) 减幅因子 φ

选取一个 φ ，使得每一步迭代达到以下目的：1. 新的的计算值 z_i 满足元素守恒的约束条件；2. 满足 $F(z_i) < F(y_i)$ ，使每一步迭代确实是向自由能减小的方向进行；3. $z_i > 0$ 。

设置一个误差值 ε_1 ，令

$$\varphi_i = \begin{cases} (\varepsilon_1 - y_i) / (x_i - y_i) & \text{if } x_i \leq 0 \\ 1 & \text{if } x_i > 0 \end{cases} \quad (2-1-17)$$

$$\varphi = \min\{\varphi_i\}$$

这首先保证了 $z_i > 0$ ，但无法保证吉布斯自由能下降的条件。为此，需要计算出 $z_i = y_i + \varphi(x_i - y_i)$ 的值，并将代入自由能公式(2-1-10)，进行迭代计算：

$$z_i = \begin{cases} y_i + \varphi(x_i - y_i) & \text{if } F(z_i) < F(x_i) \\ y_i + 0.99^k \varphi(x_i - y_i) & \text{if } F(z_i) \geq F(x_i) \end{cases} \quad (2-1-18)$$

如果 φ 满足 $F(z_i) < F(y_i)$ 的条件, 则当前的 z_i 计算成功。否则, 使 $k=1, 2 \dots$, 直到 $F(z_i) < F(y_i)$ 为止。

(2) x_i 近零值的处理

从式 $z_i = y_i + \varphi(x_i - y_i)$ 容易看出, 当某一 x_i 的真值为零或非常接近 0 时, 为了保证 $z_i > 0$, φ 将变得很小, 这使得其它组分的迭代将陷入停滞, 这是我们不能接受的。为此, 设定一个误差值 ε_2 , 对于

$$-\varepsilon_2 \leq x_i < 0$$

的组分, 将不参与的选取, 令其对应的 $\varphi_i=1$, 同时令该 $x_i = \varepsilon_3$ 。

假设迭代方法求解 Gibbs 自由能的残差精度设置为 ε , 则当

$$\varepsilon > \varepsilon_1 > \varepsilon_2 > \varepsilon_3$$

时, 能够实现迭代过程的稳定进行。其计算逻辑如图 12 所示。

2.1.3 C-J 爆轰速度的求解

采用激波化学平衡方法可以计算出更加真实的 C-J 爆轰速度, 考虑到 C-J 爆轰的波后声速条件:

$$u_2 = \sqrt{\gamma_2 R_2 T_2} \quad (2-1-19)$$

整理式(1-1-1)~(1-1-4), 消去 u 、 ρ , 得到方程:

$$\frac{1}{2}(p_2 - p_1) \left(\frac{R_2 T_2}{p_2} - \frac{R_1 T_1}{p_1} \right) = h_2 - h_1 \quad (2-1-20)$$

上式不包含放热量 q , 因为这里的 h 是比焓。 p_1 、 T_1 、 R_1 、 h_1 是已知的, R_2 和 h_2 都与波后气体组分有关, 而波后气体组分则与 p_2 、 T_2 有关。因此, 求解 C-J 爆轰速度的问题被转化为求解 p - T 平面上满足守恒方程(2-1-20)、声速关系(2-1-19)和化学平衡关系的解点(p_2 、 T_2)问题。为了找到这样一个解点, 本文改进了一种逐次逼近的方法^[13]:

拆分式(2-1-20)的左右两端:

$$U_1 = h_2 - h_1 \quad (2-1-21)$$

$$U_2 = \frac{1}{2}(p_2 - p_1) \left(\frac{R_2 T_2}{p_2} - \frac{R_1 T_1}{p_1} \right) \quad (2-1-22)$$

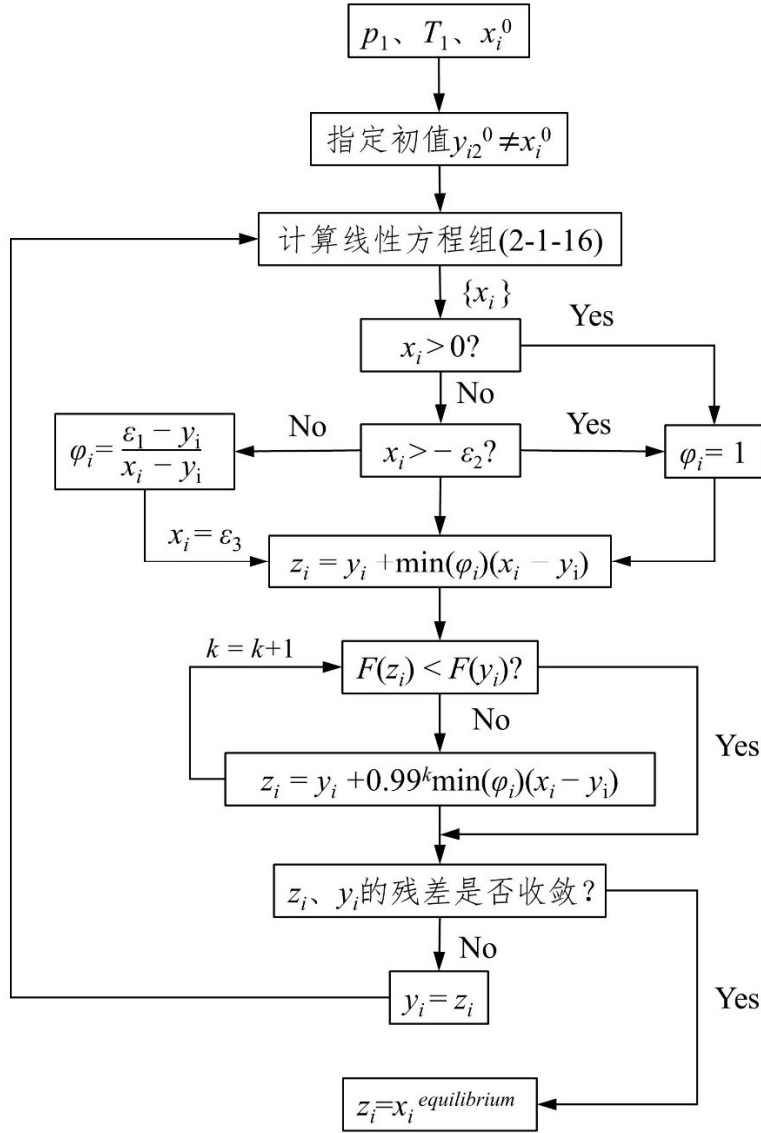


图 9 化学平衡计算流程

计算开始时，我们假定一个初值 p_2 、 T_2 (以及组分含量 X_{i2})。首先固定压强 p_2 ，通过对温度和化学平衡关系进行迭代，求 $U_1 - U_2 = 0$ 的零点，这样可以得到一个满足方程(2-1-20)的温度 T_2^* 和组分 X_{i2}^* 。该过程称为温度 T 的逼近，其计算逻辑如图 10 所示。

图中温度的逼近过程采用二分法，收敛过程利用了 U_1 、 U_2 的物理性质：在平衡温度和平衡组分附近 $U_1 - U_2$ 是单调的，当 $U_1 - U_2 > 0$ 时，当前计算的温度 $T_2^{(k)}$ 偏高于平衡温度 T_2^* ，需要降低 $T_2^{(k)}$ 重新计算，反之则需要升高。因此，人为设定初始温度区间 $T_{\max}^{(0)}$ 、 $T_{\min}^{(0)}$ ，通过二分法的方式可以使得区间逐步逼近当前压力 $p_2^* = p_2$ 和平衡温度 T_2^* 。经检验，指定 $T_{\max}^{(0)} = 5000$ ， $T_{\min}^{(0)} = 1000$ 时可满足绝大多数气相爆轰的计算要求。

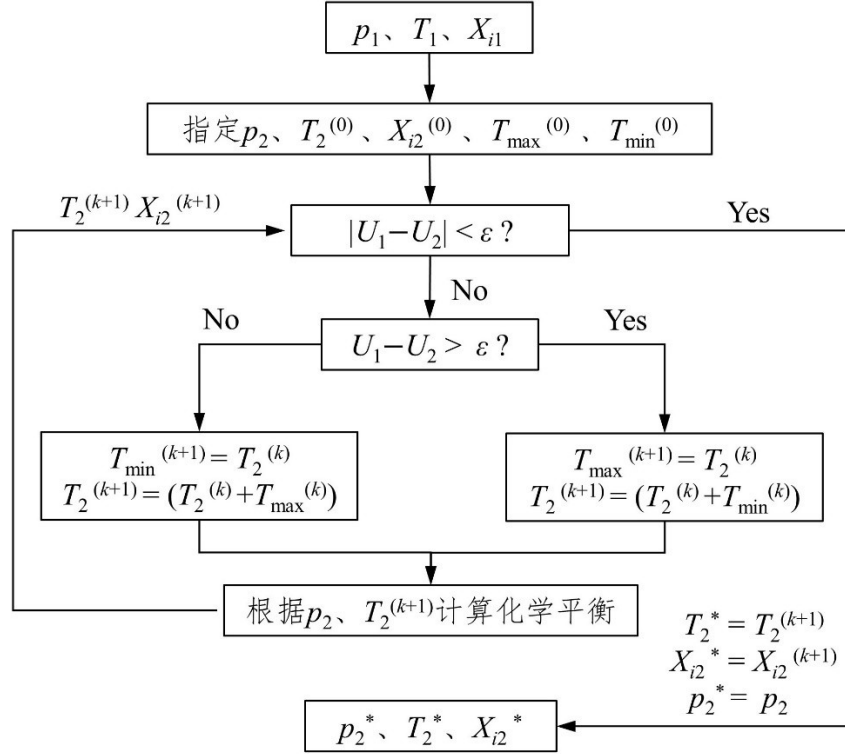


图 10 温度逼近的二分法计算流程

注意到计算 p_2^* 下的平衡温度 T_2^* 时我们没有考虑 C-J 爆轰声速关系式(2-1-19)，因此需要检验 p_2^* 是否满足该关系式。为此，将方程(1-1-1)代入(2-1-19)：

$$\frac{\rho_2}{\rho_1} = \frac{\sqrt{\gamma_2 R_2 T_2}}{u_1} \quad (2-1-23)$$

将式(2-1-23)代入气体状态方程(1-1-4)，得到压强关系：

$$p_2' = \left(\frac{\rho_2 R_2 T_2}{\rho_1 R_1 T_1} \right) p_1 \quad (2-1-24)$$

上式中 $T_2 = T_2^*$ ， γ_2 和 R_2 由 T_2^* 和 X_{iz}^* 计算得到。通过式(2-1-24)检验 p_2^* 与 p_2' 之间的大小关系，如果不满足所设定的计算误差，令下一次迭代的压强：

$$p_2 = p_2' + \phi(p_2' - p_2^*)$$

并重复上述温度逼近过程和压强计算过程，直至收敛为止。上式中 ϕ 收敛因子，经检验，指定 $\phi=0.4$ 时有较好的收敛效果。

上述基于化学平衡关系求解 C-J 爆轰速度的迭代计算流程如图 11 所示。关于该方法计算收敛性质的讨论可参考文献[13]

关于迭代初值的 p_2 、 T_2 、 X_{iz} 的指定问题，本文提供一种较为简单的方案：首先人为假设一个 C-J 爆轰速度 u ，可以取得稍微大一些。令 $X_{iz} = X_{il}$ ，通过

2.1.1 激波关系求解方法计算在 p_1 、 T_1 、 u 下的冻结激波关系，得到的波后压强 p_2 、温度 T_2 作为迭代初值。

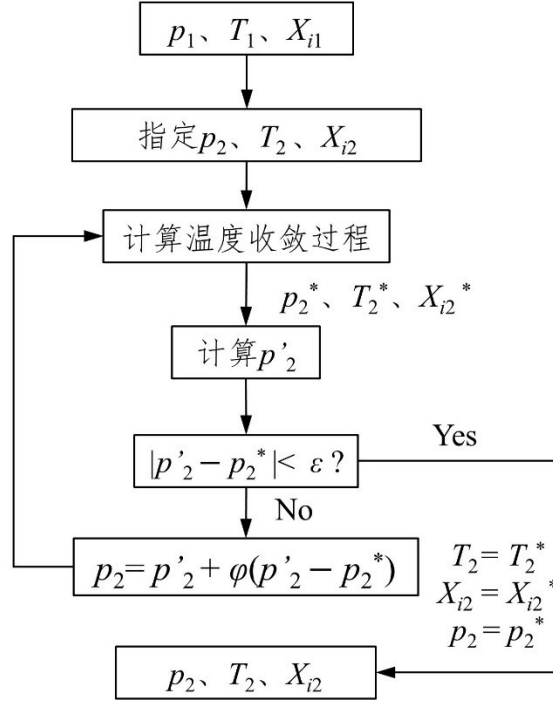


图 11 C-J 爆轰速度的迭代计算流程

2.2 斜爆轰波的求解与极曲线

2.2.1 斜爆轰波求解模型

斜激波的求解与正激波是类似的，这里只介绍激波关系求解部分的模型。在斜激波波面上取一个控制体，考虑其控制方程：

$$\rho_1 u_{1n} = \rho_2 u_{2n} \quad (2-2-1)$$

$$\begin{cases} p_1 + \rho_1 u_{1n}^2 = p_2 + \rho_2 u_{2n}^2 \\ u_{1t} = u_{2t} \end{cases} \quad (2-2-2)$$

$$h_1(T_1) + \frac{u_{1n}^2}{2} = h_2(T_2) + \frac{u_{2n}^2}{2} \quad (2-2-3)$$

几何关系式：

$$u_{1n} = u_1 \sin \beta, \quad u_{2n} = u_2 \sin(\beta - \theta) \quad (2-2-4)$$

以及气体状态方程式(2-1-4)。

上述符号的物理含义见图 12。注意到方程中已知量为 u_1 、 p_1 、 ρ_1 、 T_1 、 θ ，未知量为 u_2 、 p_2 、 ρ_2 、 T_2 、 β ，五个方程组求解五个未知量是合理的。类似正激波

迭代方法，我们需要把上述方程组转化为某个函数的求零点问题。

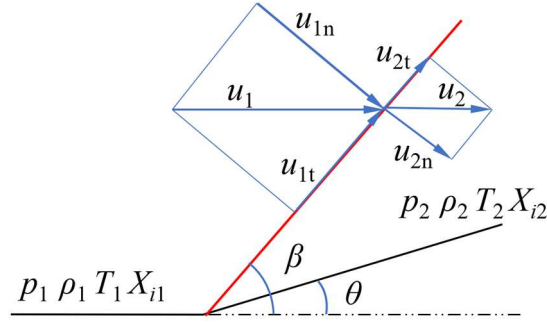


图 12 多组分气体化学平衡斜激波关系示意图

利用几何关系式(2-2-4)对式(2-1-6)作改造：

$$T_2(u_{2n}, \beta) = \frac{1}{R_2} \left(\frac{R_1 T_1}{u_1 \sin \beta} + u_1 \sin \beta - u_{2n} \right) u_{2n} \quad (2-2-5)$$

根据式(2-2-2)和(2-2-4)，得将 u_{2n} 表达成 β 的函数：

$$u_{2n}(\beta) = u_1 \cos \beta \tan(\beta - \theta) \quad (2-2-6)$$

将式(2-2-6)、(2-2-5)代入(2-2-3)，得到关于激波角 β 的函数 f 。

$$f(\beta) = f(\beta, u_{2n}(\beta), T_2(u_{2n}(\beta))) = h_1(T_1) + \frac{u_1^2 \sin \beta}{2} - h_2(T_2) + \frac{u_{2n}^2}{2} = 0 \quad (2-2-7)$$

原斜激波方程组转化为求函数 $f(\beta)$ 零点问题，构造牛顿迭代法迭代函数：

$$\beta_{k+1} = \beta_k - \frac{f(\beta_k)}{f'(\beta_k)} \quad (2-2-8)$$

式中， β_k 为第 k 个迭代值； $f'(\beta)$ 为函数 f 关于变量 β 的导数，通过复合函数求导法则由式(2-2-5)-(2-2-7)得到：

$$\left. \begin{aligned} f'(\beta) &= \frac{\partial f}{\partial \beta} + \frac{\partial f}{\partial u_{2n}} \frac{du_{2n}}{d\beta} + \frac{\partial f}{\partial T_2} \left(\frac{\partial T_2}{\partial \beta} + \frac{\partial T_2}{\partial u_{2n}} \frac{du_{2n}}{d\beta} \right) \\ \frac{\partial f}{\partial \beta} &= -u_1 \sin \beta \cos \beta, \quad \frac{\partial f}{\partial u_{2n}} = u_{2n}, \quad \frac{\partial f}{\partial T_2} = \frac{dh_2}{dT_2} = c_{p2}(T_2) \\ \frac{du_{2n}}{d\beta} &= u_1 \left(\frac{\cos \beta}{\cos^2(\beta - \theta)} - \sin \beta \tan(\beta - \theta) \right) \\ \frac{\partial T_2}{\partial \beta} &= \frac{u_{2n}}{R_2} \left(u_1 \cos \beta + \frac{R_1 T_1 \cos \beta}{u_1 \sin^2 \beta} \right) \\ \frac{\partial T_2}{\partial u_{2n}} &= \frac{1}{R_2} \left(\frac{R_1 T_1}{u_1 \sin \beta} + u_1 \sin \beta - 2u_{2n} \right) \end{aligned} \right\} \quad (2-2-9)$$

关于迭代初值的指定,对于斜激波的强解,可以直接指定 $\beta^{(0)}=90^\circ$ 。但斜激波一般以弱解的形式存在。考虑其物理特性,斜激波角 β 往往大于楔角 θ 和来流马赫角 $\mu_1 = \arcsin(1/Ma_1)$ 。因此,建议将迭代的初值 $\beta^{(0)}$ 设在和 μ_1 两者的最大值附近,比如 $\beta^{(0)}=\max(\theta, \mu_1)+0.1^\circ$ 。

对于在上述化学平衡正激波、斜激波的求解过程中,化学平衡主要影响波后混合气的比热 $c_{p2}(T_2)$ 和焓值 $h_2(T_2)$ 。如果计算的是冻结激波,则应当采用与波前相同的组分 Y_i ,根据式(1-3-21)计算混合气的 c_{p2} 和 h_2 。如果是化学平衡激波(或爆轰波),则应当采用化学平衡组分 $Y_i^{equilibrium}$ 计算混合气的 c_{p2} 和 h_2 。

关于上述正激波、斜激波迭代方法合理性的讨论,以及计算案例的验证,详见参考文献[9]。

2.2.2 斜爆轰波极曲线

楔面上的斜爆轰波具有“驻定”的特性,类似斜激波在楔面上的驻定:当楔面上产生了斜激波以后,不论马赫数如何增大,斜激波会始终停留在楔面上,而不会像正激波一样由于来流动压过大被“吹”去下游。对于超燃冲压发动机而言,不论是正激波诱导燃烧、正爆轰燃烧还是爆燃燃烧,要将火焰控制在燃烧室内都是比较困难的,尤其是在燃烧室进流马赫数偏离设计点时。如美国陆军的“SLRC”(Strategic Long Range Cannon)超燃冲压炮弹研究项目,就遭遇了空域、速域变化时燃烧波的稳定控制问题,最终宣告研究失败。这也就体现了斜爆轰波的潜在应用价值——对于一个特定的楔面,只要来流速度不低于某个下限,都会产生一道斜爆轰波,并且是驻定的,它可以作为稳定的燃烧源。

考虑一种简单的情况,即一个无限长的楔面诱导产生斜激波,我们研究的问题就是,在某个来流马赫数 Ma 下,角度为 θ 的楔面上能否产生斜爆轰波,如果产生了斜爆轰波, θ 与波角 β 之间具有什么样的关系,这样的分析我们通过斜爆轰波极曲线来研究。

如图 13 为当量比氢气—空气混合气爆轰极曲线图,来流 $T=300K, p=1\text{atm}$ 。每条曲线上 β 最小点为 θ_{CJ} 点,此时斜爆轰波波阵面法向方向上发生 C-J 爆轰,即波阵面后法相方向上 $Ma_{2n}=1$,这也是该马赫数下最小起爆楔面角度。曲线上小于 θ_{CJ} 的部分也有解,但这个解是欠驱爆轰波的解,目前被认为是不存在的。每条曲线上 θ 最大点为 θ_{\max} 点,大于该角度的楔面上不会产生驻定的斜爆轰波。

对于无限长的楔面，爆轰波会脱体并向上游传播。从 θ_{CJ} 到 θ_{max} 的范围内，称为爆轰波的驻定窗口。

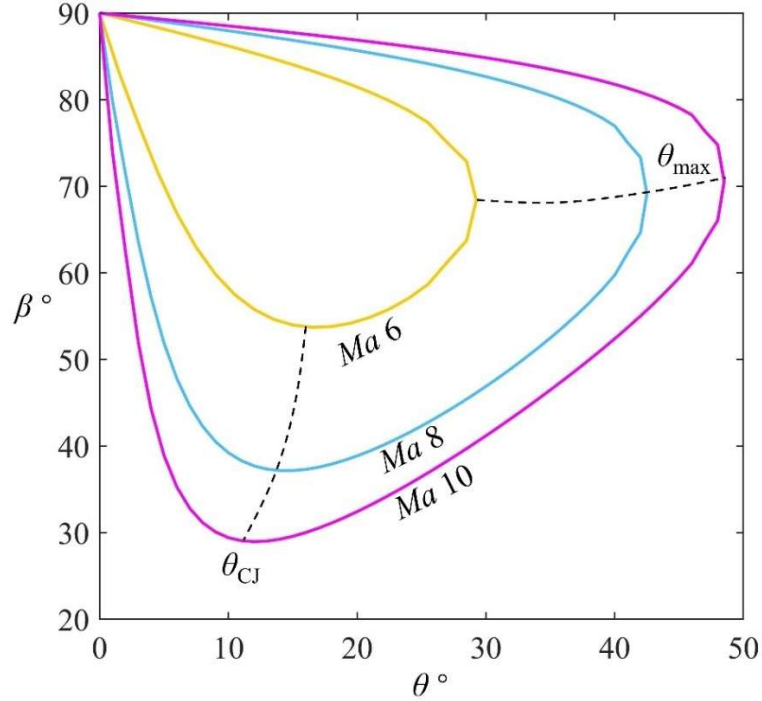


图 13 当量比 H_2 -Air 混合气爆轰极曲线

显然，爆轰波的驻定窗口相比同马赫数下冻结激波的驻定窗口要小得多。为了提高斜爆轰发动机起爆楔面的可控制范围，保障发动机的稳定运行，在工程设计时需要提高设计点马赫数来扩大爆轰波的驻定窗口。

当然，在更加真实的斜爆轰燃烧室内，斜爆轰波的驻定问题并不像斜爆轰波极曲线讨论的那样简单。斜爆轰发动机内的爆轰波会在发动机进气道压缩面一侧的壁面上发生反射，产生更为复杂的流动现象。根据 Zhang, Z.等人的研究，爆轰波会与壁面发生马赫反射，产生马赫杆和正激波后的亚声速区，波后亚声速区会将下游的扰动前传，因此爆轰波在燃烧室内多次反射产生的压力增益会推动马赫杆向上游移动，引起斜爆轰波的脱体。再比如，斜爆轰波会引起非常强的激波边界层干扰，使进气道压缩面一侧发生流动分离，同样形成马赫反射，产生大面积的亚声速区，最终引起斜爆轰波的脱体。在工程设计时，还需要采取边界层泄除、流量控制等方法来保证斜爆轰波的驻定，该内容详细讨论可参见文献[15]。

本文所附程序中， θ_{max} 附近计算时容易发散，因此 θ_{max} 附近的曲线片段采用了多项式拟合， θ_{max} 的求解实际并不准确，还有待进一步解决。

2.3 斜爆轰冲压发动机理论推力计算模型

张子健提出了一种斜爆轰冲压发动机的理论推力计算模型^[9]，将斜爆轰发动机的工作过程分为斜激波压缩、等截面混合、斜爆轰燃烧、等熵膨胀四个过程，并基于该模型对斜爆轰冲压发动机比冲随飞行马赫数、飞行高度、大气参数、斜爆轰楔面角度、燃料当量比的变化规律进行了定量分析，证明了斜爆轰发动机比冲性能的优越性。杨鹏飞等^[14]在该模型的基础上进一步并对比分析了不同燃烧模式对发动机比冲性能的影响，获得了不同来流参数、燃烧室参数和进排气参数等对发动机推力的影响规律，提出了斜爆轰发动机燃烧室的设计方向。

作者认为，该理论推力模型将斜爆轰发动机的工作过程抽象成了经典的力学模型，其建模思想很巧妙，因此在本文中进行介绍，并结合现有的超燃冲压发动机气动特性建模程序提出作者的一点思考。

2.3.1 理论推力计算模型的构建

如图 14 为斜爆轰发动机简化模型，图中序号所表示的物理化学过程如表格 2 所示。 θ_b 为进气道压缩角， θ_w 为斜爆轰楔面角。该理论推力计算模型不考虑粘性（摩擦阻力）的影响。

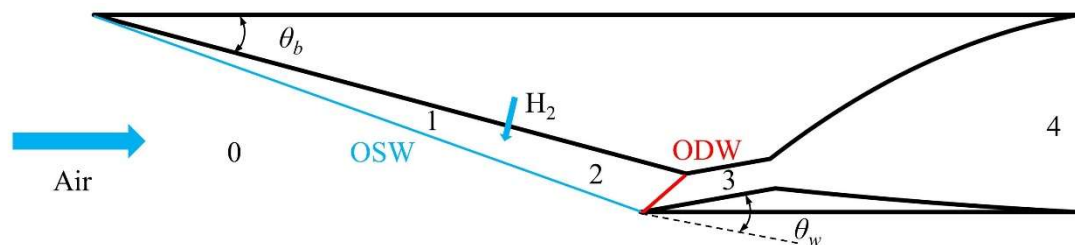


图 14 斜爆轰发动机理论推力计算模型

表格 2 斜爆轰发动机简化工作过程及求解方法

流动过程	物理化学过程	计算方法
0—1	斜激波压缩	冻结激波求解
1—2	等截面混合	等截面混合求解
2—3	斜爆轰燃烧	化学平衡激波求解
3—4	等熵膨胀	化学平衡等熵过程求解

关于冻结激波求解、化学平衡激波求解已经在本章中给出了计算方法，等截面混合求解、化学平衡等熵过程求解并不是本文气相爆轰计算主题的相关内容，

因此不作过多介绍，相关模型的建立及求解方法详见文献[9]。

计算单位推力时采用动量方法求解，文献[9]给出的公式为：

$$T_{engine} = (\rho_4 u_4^2 + p_4) \cdot A_4 - (\rho_1 u_1^2 + p_1) \cdot A_1 \quad (2-3-1)$$

注意到 u_4 所表示的是燃烧室出口速度为 u_3 的气体经等熵膨胀后达到的速度，而 u_3 经历了斜爆轰楔面后，流动方向已经发生了改变，其动量方向不再是与来流方向一致的，而是产生了垂直分量。基于此考虑，作者认为公式(2-3-1)应当修正为：

$$\left. \begin{aligned} T_{engine} &= (\rho_4 u_{4n}^2 + p_4) \cdot A_4 - (\rho_1 u_1^2 + p_1) \cdot A_1 \\ u_{4n} &= u_4 \cdot \cos(\theta_w - \theta_b) \end{aligned} \right\} \quad (2-3-2)$$

另外，文献[9]假设 3—4 等熵膨胀过程从燃烧室出口压强一直膨胀到指定压强，设置为大气压，这在高空飞行时是不够现实的，将导致尾喷管面积远远大于飞行器的正投影面积。因此，本文所附程序还提供了另一种化学平衡等熵膨胀求解的模型，即指定膨胀面积比 A_t （尾喷管扩张比）。这样便可以人为指定喷管出口的大小，如喷管出口面积与进气道捕获面积相等。

在这里给出指定面积比的等熵膨胀过程求解方法，仿照文献[9]，将控制方程的求解化简成求等熵方程 $f(T_2)$ 的零点问题：

$$f(T_2) = \sum_{i=1}^{ns} \left[X_{i2} \frac{S_i^0(T_2)}{R_u} \right] - \sum_{i=1}^{ns} \left[X_{i1} \frac{S_i^0(T_2)}{R_u} \right] + \ln \frac{p_1}{p_2} \quad (2-3-3)$$

采用牛顿迭代法，构造迭代函数：

$$T_{2,k+1} = T_{2,k} - \frac{f(T_{2,k})}{f'(T_{2,k})} \quad (2-3-4)$$

注意到在我们的假设里，出口压力并不是恒定的，它是温度 T_2 的函数。为此，将变换等熵过程的控制方程组：

$$\begin{cases} u_2 = \sqrt{2[h_1(T_1) + u_1^2/2 - h_2(T_2)]} \\ \rho_2 = \rho_1 A_t \frac{u_1}{u_2} \\ p_2 = \rho_2 R_2 T_2 \end{cases} \quad (2-3-5)$$

不难看出， p_2 是 T_2 的单值函数，应用复合函数求导法则， $f'(T_2)$ 表示为：

$$f'(T_2) = \sum_{i=1}^{ns} \frac{X_{i2} C_{pi}^0(T_2)}{T_2 R_u} + \frac{1}{T_2} \left(\sum_{i=1}^{ns} X_{i2} C_{pi}^0(T_2) \frac{T_2}{u_2^2} - 1 \right) \quad (2-3-6)$$

如图 15 为斜爆轰发动机尾喷管膨胀到大气压($p_4=p_0$)和膨胀到进气道入口面积($A_4=A_0$)两种等熵过程下比冲随马赫数变化曲线图。飞行工况 $H = 30 \text{ km}$, $\theta_b = 7.5^\circ$, $\theta_w = 18^\circ$, $T_f = 600 \text{ K}$, $Ma_f = 2$ 。

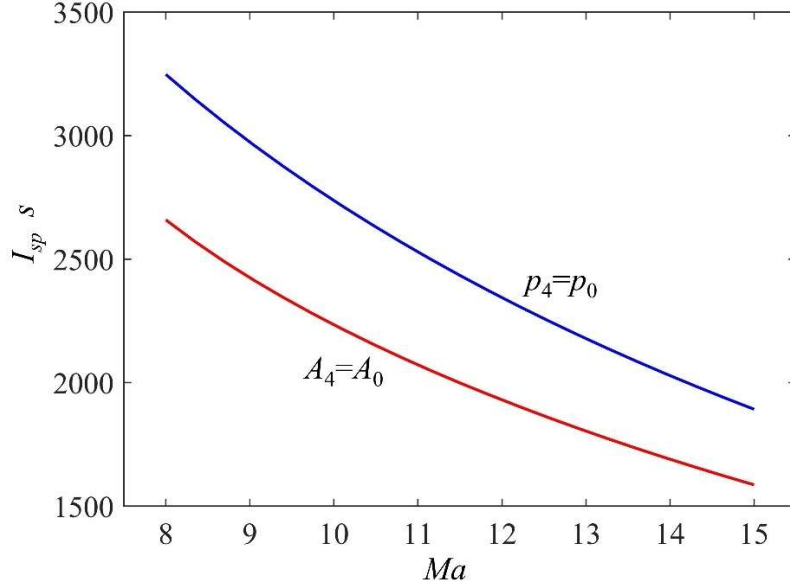


图 15 斜爆轰发动机比冲随飞行马赫数变化曲线

对于膨胀到进气道入口面积的等熵过程,由于出口射流欠膨胀导致了一定程度的比冲损失。但当飞行马赫数提高后,比冲损失相对减小。为探究其原因,绘制喷管膨胀面积比、出口压强随马赫数变化曲线,如图 16 所示

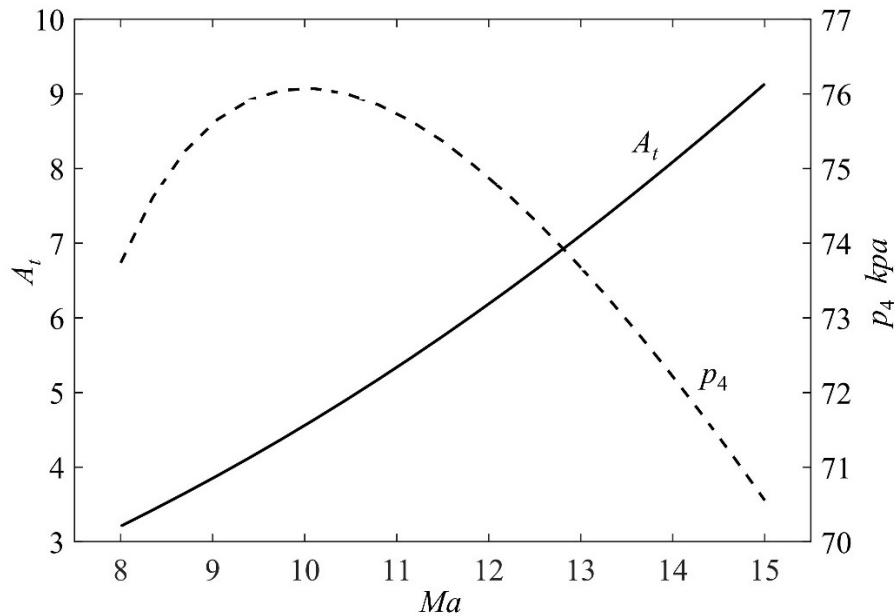


图 16 等熵过程膨胀面积比及出口压强随马赫数变化曲线

当飞行马赫数提高，斜爆轰波波角减小，为了保证斜爆轰波入射点恰好在斜爆轰燃烧室进气道压缩面一侧的拐角顶点上，燃烧室将变得狭窄，因此喷管膨胀面积比随马赫数增大。而斜爆轰燃烧室中压强也随马赫数增大，使得喷管出口压强最终呈现先增大后减小的变化趋势，因此其比冲损失也在高马赫数下降低。

2.3.2 对理论推力模型进一步的思考

作者编程复现了斜爆轰冲压发动机的理论推力计算模型，并对斜爆轰冲压发动机的简单模型进行了 CFD 仿真，如图 17，经对比后认为理论推力模型主要存在以下不足：

(1) 理论推力模型仅能针对某一标准工况进行斜爆轰发动机的单点设计，无法进行某一固定构型发动机模型在不同工况下的性能分析，也无法考虑发动机攻角特性；

(2) 忽视了壁面摩擦、粘性、斜爆轰燃烧室内、喷管内激波交互的影响，理论推力计算数值与 CFD 计算结果相差较大；

基于上述因素，斜爆轰发动机还难以开展动力学仿真，与斜爆轰发动机所配套的高超飞行器其它系统还缺乏研究空间。受密歇根空军超燃发动机程序 (Michigan Air force scramjet in vehicle, MASIV)^{[16][17]} 的启发，作者认为斜爆轰冲压发动机的理论推力计算模型还可以从以下角度进行改进。

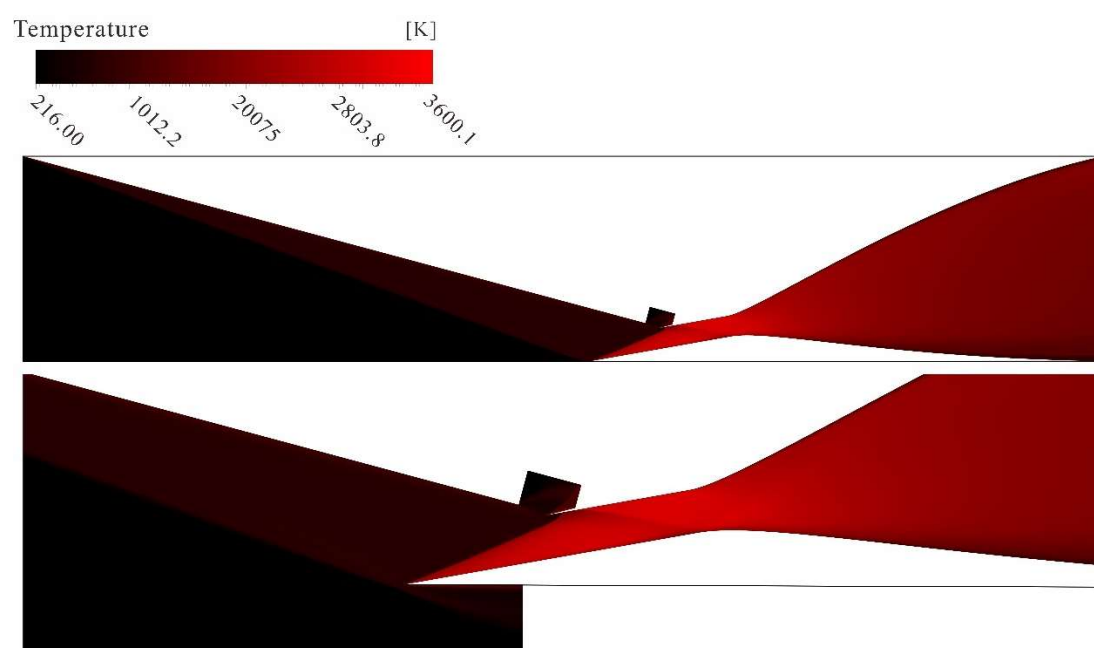


图 17 某斜爆轰发动机内流道温度云图($Ma = 10$)

(1) 内流场的计算

目前超声速进气道的快速设计与工程计算已经较为成熟，根据文献[17]MASIV 程序所给出的建模方法，不考虑激波的马赫反射与马赫相交，仅考虑激波的规则相交、激波规则反射、Prandtl-Meyer 膨胀波以及二维 Riemann 问题，能够实现进气道流场在飞行器动力学过程中的快速计算，并且与无粘流动 CFD 求解结果具有较好的一致性。

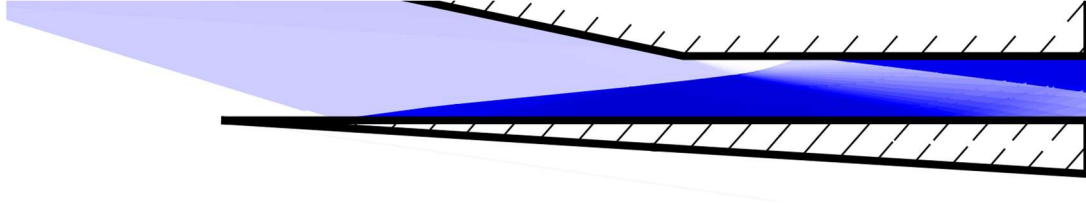


图 18 MASIV 程序计算得到的进气道流场云图

从斜爆轰发动机内流场 CFD 仿真结果来看，斜爆轰燃烧室内会发生多次斜激波的规则反射，带来斜爆轰燃烧室内的压力速度变化，最终斜激波与喷管入口的膨胀拐角相交或进入喷管内，影响到燃烧室出口流场的品质，从而影响喷管流场的计算精度，降低了斜爆轰发动机理论推力计算模型的可参考性。

考虑到斜爆轰波有较高的燃烧效率，波后将不再发生二次燃烧，因此斜爆轰波后的流动状态(图 19 中 A 区)，就类似于进气道内的冻结气流流动状态。基于这样的考虑，作者认为对类似结构的斜爆轰燃烧室，可采取类似 MASIV 程序的建模方法进行工程计算，获得更加真实的内流场。这样一来，还可以计算一定程度上偏离设计点的发动机内流场(燃烧室内不发生马赫反射)、考虑更复杂型面，如带有微扩结构的燃烧室，进一步贴近实际工程需求。

(2) 尾喷管的建模

现代高超声速飞行器的喷管大多不是对称的消波喷管，而是具有较长的上壁面。首先，考虑到(1)中关于燃烧室出口流动品质的讨论，采用平均方法^[16]将燃烧室出口的气流转换为尾喷管入口气流参数(图 19 中 B 区)，这里简单介绍相关方法。考虑燃烧室出口密度通量 Φ_ρ 动量通量 Φ_u 总焓通量 Φ_h ：

$$\begin{aligned}\Phi_\rho &= \sum \rho_{1i} u_{1i} A_{1i} = \rho_2 u_2 A_2 \\ \Phi_u &= \sum \rho_{1i} u_{1i}^2 A_{1i} = \rho_2 u_2^2 A_2 \\ \Phi_h &= \sum \rho_{1i} u_{1i} h_{1i}^{total} A_{1i} = \rho_2 u_2 h_2^{total} A_2\end{aligned}\quad (2-3-7)$$

式中下标“1”和“2”分别表示燃烧室出口和尾喷管入口的气流参数，后者是被平均过的。下标 i 表示流场分区，即流场被激波/膨胀波所划分出的区域， A_i 则表示该分区所占的面积。计算出 Φ_ρ 、 Φ_u 、 Φ_h 后， $u_2 = \Phi_u/\Phi_\rho$ ； $h_2^{\text{total}} = \Phi_h/\Phi_\rho$ ； $\rho_2 = \Phi_\rho/(u_2 A_2)$ 也就相应求出了。

尾喷管上下壁面的压强参数即当地马赫数可以通过膨胀波关系求出。对于上壁面(后体)、下尾流剪切层的喷管段(如图 19C 处)，其喷管面积等效为上壁面和尾流剪切层围成的面积。可以参考文献[18]中数值离散尾流计算的方法。该方法将后体及剪切层离散为 N 段。每段由直线段的后体及尾流剪切层作为边界，且段内气流为等熵流动。

对于第 k 段气流， $k=0,1,\dots,N$ ，首先基于等熵流假设，根据后体膨胀角 τ ，尾流迹线角度 β_k 和每段线性尾流的宽度 $L_{a,i}$ 计算每段面积扩张比 A_t ：

$$\left. \begin{aligned} A_t &= \frac{A_{k+1}}{A_k} \\ A_{k+1} &= A_k + L_{a,i} \tan \tau + L_{a,i} \tan \beta_k \end{aligned} \right\} \quad (2-3-8)$$

定义函数 $f(Ma) = 1 + (\gamma_a - 1)Ma^2/2$ ，扩散马赫数满足：

$$\frac{f(Ma_{k+1})^{\frac{\gamma+1}{\gamma-1}}}{Ma_{k+1}^2} = A_t \frac{f(Ma_k)^{\frac{\gamma+1}{\gamma-1}}}{Ma_k^2} \quad (2-3-9)$$

进而根据等熵流关系可以求得当地气流压强以及后体表面的压强分布。

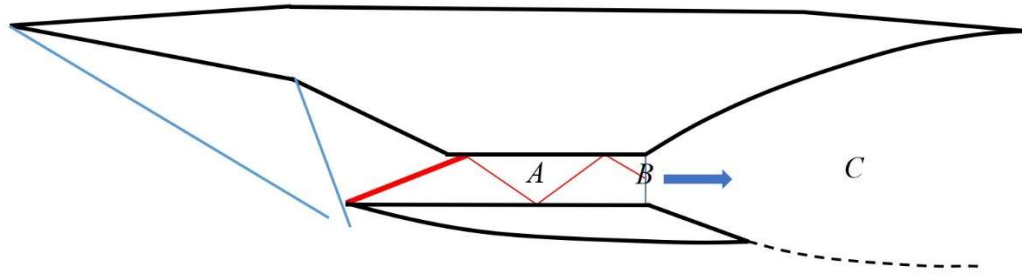


图 19 斜爆轰发动机建模分区示意图

(3) 摩擦阻力的计算

摩擦阻力对高超飞行器净推力的影响不容忽视，尤其是对有较长前体压缩面、尾喷管，以及燃烧室内有高速高温气体流动的斜爆轰冲压发动机而言。当计算出了发动机表面每一部分的流场参数(包括温度、马赫数、压强)后，可以采取高超飞行器摩擦阻力系数工程算法进行求解，如参考焓法^[18]：

对于平板上可压缩湍流，其局部表面摩擦系数 $C_{f,x}$ 可近似为：

$$C_{f,x} = \frac{0.0592}{(\text{Re}_x^*)^{0.2}} \quad (2-3-10)$$

式中

$$\text{Re}_x^* = \frac{\rho^* x}{\mu^*} \quad (2-3-11)$$

为根据参考温度 T^* 计算的雷诺数， x 是距平板起始点的距离，密度 ρ^* 根据参考温度及状态方程计算，粘性系数 μ^* 采用 Sutherland 公式计算。参考温度是计算选取的边界层内某处的温度：

$$\frac{T^*}{T_{e,x}} = 1 + 0.032 Ma_{e,x}^2 + 0.58 \left(\frac{T_w}{T_{e,x}} - 1 \right) \quad (2-3-12)$$

式中， T_w 为人为给定的当地壁面温度，一般为常值，可以在进气道、爆轰燃烧室及尾喷管选取不同的壁面温度； $T_{e,x}$ ， $Ma_{e,x}$ 是 x 点处边界层外缘气流的温度与马赫数，根据前述流场计算方法确定。

(4) 非设计点下的计算

根据 Niu^[19]等人的研究，爆轰波与膨胀拐角的相互作用会发生比较复杂的物理现象，与膨胀拐角的上游壁面相交发生马赫反射，与膨胀拐角下游发生膨胀波-爆轰波干扰，发生边界层分离并出现回流区。爆轰波在受限壁面内的非定常性质限制了(1)中所讨论计算方法的允许使用范围。

当开展斜爆轰发动机非设计点性能计算时，必须保证斜爆轰波向进气道一侧入射时没有发生马赫反射，也没有发生很强的激波-边界层干扰。这意味着斜爆轰波波角不能太大（否则与进气道压缩面相交发生马赫反射），也不能太小（否则爆轰燃烧室上壁面的边界层已经充分发展），仅能考虑在设计点附近小范围的变化情况。因此，开展斜爆轰发动机非设计点下的性能计算需要通过 CFD 数值仿真或试验方法事先限制斜爆轰波的波角范围，以保证(1)中讨论的快速计算方法是有效的，而不是仅仅通过极曲线给出脱体角限制。

3. 化学动力学方法

3.1 一维非平衡反应流动方程与化学动力学方法

爆轰波的控制方程可以通过对可压 N-S 方程添加化学反应源项得到，而化学反应源项与原方程之间的联系则是反应动力学模型。本章简单介绍含化学反应源项的一维 N-S 方程的求解方法，同时不考虑粘性及粘性带来的扩散效应。

化学动力学方法涉及符号及单位众多，极易混淆，大量文献存在符号错误或不明确的地方。本文尽量保证单位与符号的统一和正确，同时推荐 Chemkin 软件手册^[20]作为标准参考。

3.1.1 一维无粘非平衡反应流方程

给出一维无粘非平衡反应流动控制方程：

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}(\mathbf{U})}{\partial x} = \mathbf{S}(\mathbf{U}) \quad (3-1-1)$$

式中， \mathbf{U} 为守恒变量矢量， \mathbf{F} 为 x 方向上的对流通量矢量， \mathbf{S} 为源项矢量。参考

1.3 混合气热力学基本性质与符号表示，各矢量量具体形式为：

$$\mathbf{U} = \begin{bmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho e_t \\ \rho_1 \\ \vdots \\ \rho_{ns-1} \end{bmatrix} \quad \mathbf{F} = \begin{bmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ (\rho e_t + p)u \\ \rho_1 u \\ \vdots \\ \rho_{ns-1} u \end{bmatrix} \quad \mathbf{S} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \omega_1 \\ \vdots \\ \omega_{ns-1} \end{bmatrix} \quad (3-1-2)$$

式中 e_t 为气体的总内能，包含了混合气体的比内能(1-3-8)和动能项：

$$e_t = \sum_{i=1}^{ns} Y_i e_i + \frac{1}{2} u^2 = \sum_{i=1}^{ns} Y_i h_i - \sum_{i=1}^{ns} Y_i R_i T + \frac{1}{2} u^2 \quad (3-1-3)$$

3.1.2 化学反应模型

在含 ns 个组分和 nr 个可逆基元反应的化学反应模型中，定义 v'_{ir} 和 v''_{ir} 分别为第 r 个基元反应中组分 i 在反应物和生成物中的化学计量系数； k_{fr} 和 k_{br} 分别为第 r 个基元反应的正向反应速率和逆向反应速率。

用 \mathbf{X}_i 表示组分 i 的化学名称，则基元反应的一般表达式为：



$[X_i]$ 表示组分 i 的摩尔浓度，其定义为：

$$[X_i] = \frac{\rho Y_i}{W_i} \quad (3-1-5)$$

给出组分 i 的浓度变化率：

$$\frac{d[X_i]_r}{dt} = (v'_{ir} - v''_{ir}) \left(k_{fr} \prod_{j=1}^{ns} [X_j]^{v'_{jr}} - k_{br} \prod_{j=1}^{ns} [X_j]^{v''_{jr}} \right) \quad (3-1-6)$$

考虑一种特殊的基元反应，如：



M 表示反应体系中某个分子，第三体净效应表示为：

$$[M]_r = \sum_{i=1}^{ns} M_{ir} [X_i] \quad (3-1-8)$$

式中， M_{ir} 为第 r 个基元反应中组分 i 的三体增强系数。如未特别指出，默认增强系数未 1.0。考虑三体反应后，组分 i 的浓度变化率为：

$$\frac{d[X_i]_r}{dt} = [M]_r (v'_{ir} - v''_{ir}) \left(k_{fr} \prod_{j=1}^{ns} [X_j]^{v'_{jr}} - k_{br} \prod_{j=1}^{ns} [X_j]^{v''_{jr}} \right) \quad (3-1-9)$$

根据式(3-1-5)、(3-1-9)，给出组分 i 质量变化率的一般表达式：

$$\omega_i = W_i \sum_r^{nr} \left\{ [M]_r^{v_{Mr}} (v'_{ir} - v''_{ir}) \left(k_{fr} \prod_{j=1}^{ns} [X_j]^{v'_{jr}} - k_{br} \prod_{j=1}^{ns} [X_j]^{v''_{jr}} \right) \right\} \quad (3-1-10)$$

式中，对于三体反应， $v_{Mr} = 1$ ，非三体反应 $v_{Mr} = 0$ 。

式(3-1-10)中的正向反应速率 k_{fr} 由 Arrhenius 方程给出：

$$k_{fr} = A_r T^{\beta_r} \exp \left(-\frac{Ea_r}{R_c T} \right) \quad (3-1-11)$$

其中， A 称为指前因子、 β 称为温度指数和 Ea 为反应活化能。务必需要注意，当使用 Chemkin 格式的机理文件时， Ea 的单位是 cal/mole，而非 J/mole，相应的普适气体常数 R_u 需要进行单位转换，为区别于 $R_u = 8.31446$ [J/(mole·K)]，我们使用符号 R_c 表示， $R_c = 1.9872036$ [cal/(mole·K)]。

定义第 r 个反应的压力平衡常数 K_{pr} ：

$$K_{pr} = \exp \left\{ \sum_{i=1}^{ns} (v'_{ir} - v''_{ir}) \left(\frac{s_i^0}{R_i} - \frac{h_i}{R_i T} \right) \right\} \quad (3-1-12)$$

浓度平衡常数与压力平衡常数之间的关系为：

$$K_{cr} = K_{pr} \exp \left\{ \sum_{i=1}^{ns} (v'_{ir} - v''_{ir}) \ln \left(\frac{p_a}{R_u T} \right) \right\} \quad (3-1-13)$$

尤其需要注意 $\frac{p_a^*}{R_u T}$ 一项，这里 $p_a = 101325$ [pa]，而 $R_u = 8.31446$ [J/(mole·K)] = 8.31446 [m³·pa/(mole·K)]，两者相除后量纲为[mole/m³]，而我们讨论的浓度单位为[mole/cm³]，因此在实际编程时需要进行单位转换。在其它文献上还可能看到该项其它定义，比如

$$\frac{p_a}{R_u T} = \frac{1}{R_a T} \quad (3-1-14)$$

这里的 1 是指一个大气压，单位为[atm]，相应的气体常数 $R_a = 82.057338$ [cm³·atm/(mole·K)]。又或者，还有定义：

$$\frac{p_a}{R_u T} = \frac{\sum [X_i]}{p/p_a} \quad (3-1-15)$$

本文所附程序采取了式(3-1-14)的定义。

反应速率 k_{br} 由相应的正向反应速率 k_{fr} 和化学反应浓度平衡常数 K_{cr} 给出：

$$k_{br} = \frac{k_{fr}}{K_{cr}} \quad (3-1-16)$$

其次，在实际编程时，还需要注意式(3-1-5)、(3-1-10)都存在单位转换问题，需要将流动方程求解后得到的浓度单位[mole/m³]转换为求解化学反应方程的浓度单位[mole/cm³]。关于压力平衡常数 K_{cr} 的单位为什么要采用大气压以及式(3-1-15)的推导可参考文献[4]。

3.2 等容爆炸与爆轰波 ZND 结构

等容爆炸（或零维燃烧）与爆轰波 ZND 结构(或一维定常反应流)的控制方程都是对一维含化学反应源项 Euler 方程的降维形式，都可以通过推导将方程组简化为一维非线性常微分方程组。根据化学反应方程的数学性质，这样的微分方程组都具有“刚性”性质，若采用显式求解方法则当反应趋近平衡时迭代步长需要无穷小才能保证求解的稳定性，因此一般通过隐式方法求解，如隐式 Runge-

Kutta 方法。本文中采用一种专门针对化学反应源项进行计算的局部线性化的半隐式方法，称 α -QSS 方法^{[21][22]}。

3.2.1 等容爆炸的控制方程

改造式(3-1-2)，令 $\frac{\partial}{\partial x} = 0$ ，并将矩阵分开写作：

$$\left\{ \begin{array}{ll} \frac{d\rho}{dt} = 0 & (a) \\ \frac{d\rho u}{dt} = 0 & (b) \\ \frac{d\rho e_t}{dt} = 0 & (c) \\ \frac{d\rho_i}{dt} = \omega_i \quad (i=1, \dots, ns-1) & (d) \end{array} \right. \quad (3-2-1)$$

利用函数求导法则，将(3-2-1)(a)、(3-2-1)(b)改写为：

$$\frac{du}{dt} = 0 \quad (3-2-2)$$

考虑 e_t 的定义式(3-1-3)，代入(3-2-1)(c)，并利用式(3-2-2)消去 u ，得到新的微分方程组：

$$\left\{ \begin{array}{ll} \frac{d\rho}{dt} = 0 & (a) \\ \frac{d}{dt} \rho \left(\sum_{i=1}^{ns} Y_i h_i - \sum_{i=1}^{ns} Y_i R_i T \right) = 0 & (b) \\ \frac{d\rho_i}{dt} = \omega_i \quad (i=1, \dots, ns-1) & (c) \end{array} \right. \quad (3-2-3)$$

(3-2-3)方程组仍然不能直接积分，涉及到代数方程的求解问题，为此需要进一步化简。将(3-2-3)(a)代入(b)中：

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \left[\rho \left(\sum_{i=1}^{ns} Y_i h_i - \sum_{i=1}^{ns} Y_i R_i T \right) \right] &= 0 = \frac{d}{dt} \left(\sum_{i=1}^{ns} Y_i h_i - \sum_{i=1}^{ns} Y_i R_i T \right) \\ &= \frac{d}{dt} \left(\sum_{i=1}^{ns} Y_i h_i \right) - T \frac{d}{dt} \left(\sum_{i=1}^{ns} Y_i R_i \right) - \sum_{i=1}^{ns} Y_i R_i \frac{dT}{dt} \\ &= \sum_{i=1}^{ns} \left(h_i \frac{dY_i}{dt} \right) + \sum_{i=1}^{ns} (Y_i c_{pi}) \frac{dT}{dt} - T \sum_{i=1}^{ns} \left(R_i \frac{dY_i}{dt} \right) - \sum_{i=1}^{ns} Y_i R_i \frac{dT}{dt} \end{aligned} \quad (3-2-4)$$

整理(3-2-4)，得到关于温度的微分方程：

$$\frac{dT}{dt} = \frac{\sum_{i=1}^{ns} (h_i - TR_i) \frac{dY_i}{dt}}{\sum_{i=1}^{ns} Y_i (c_{pi} - Y_i R_i)} \quad (3-2-5)$$

将质量分数定义式(1-3-3)代入(3-2-3)(c)，得到组分质量分数微分方程：

$$\frac{dY_i}{dt} = \frac{1}{\rho} \omega_i (i=1, \dots, ns) \quad (3-2-6)$$

注意这里的 i 多出来了第 ns 项，这是由于我们消去了封闭组元微分方程组的(3-2-3)(a)。联立(3-2-5)和(3-2-6)，利用化学动力学方程(3-1-10)即可求解等容爆炸方程(3-2-1)。

3.2.2 α -QSS 方法

变换组元方程(3-2-5)，在这一节里我们以小写的 y_i 来表示质量分数：

$$\frac{dy_i}{dt} = q_i - p_i y_i, \quad y_i(t_0) = y_i^0 \quad (i=1, \dots, ns) \quad (3-2-7)$$

q_i 和 $p_i y_i$ 分别表示组元 i 的质量生成率和消耗率。现在对 y_i 的变化率采取线性假设，或者说对方程(3-2-7)采取拟稳态假设，假设 q_i 和 p_i 在一个积分步长内为常数时， y_i 的变化率是 y_i 的线性函数，式(3-2-7)具有精确解：

$$y_i(t) = y_i^0 e^{-p_i t} + \frac{q_i}{p_i} (1 - e^{-p_i t}) \quad (3-2-8)$$

式(3-2-8)就是一种一阶的、最简单的 QSS 算法，也是 QSS 方法的数学基础。

Mott^[21]等人提出了一种 α -QSS(Quasi-Steady-State)方法，该方法是一种求解刚性微分方程的拟稳态方法，通过预测-校正的形式逼近渐进解求解微分方程组。该方法对于线性问题是 A-稳定的，具有二阶精度，但不能完全保证组分质量分数的非负性和守恒性。

首先，根据我们组元方程组的定义，给出 q_i 和 p_i 的表达式：

$$\begin{aligned} q_i &= \frac{W_i}{\rho} \sum_r^{nr} \left\{ [M]_r^{v_{Mr}} \left(v_{ir}'' k_{fr} \prod_{j=1}^{ns} [X_j]^{v_{jr}'} + v_{ir}' k_{br} \prod_{j=1}^{ns} [X_j]^{v_{jr}''} \right) \right\} \\ p_i &= \frac{1}{[X_i]} \sum_r^{nr} \left\{ [M]_r^{v_{Mr}} \left(v_{ir}' k_{fr} \prod_{j=1}^{ns} [X_j]^{v_{jr}'} + v_{ir}'' k_{br} \prod_{j=1}^{ns} [X_j]^{v_{jr}''} \right) \right\} \end{aligned} \quad (3-2-9)$$

根据文献[21]的方法，式(3-2-8)改写为：

$$y_i(\Delta t) = y_i^0 + \frac{(q_i - p_i y_i) \Delta t}{1 + \alpha_i p_i \Delta t} \quad (3-2-10)$$

式中 α_i 是 $p_i \Delta t$ 的函数，具有表达式：

$$\alpha_i(p_i \Delta t) = \frac{1 - (1 - e^{-p_i \Delta t}) / p_i \Delta t}{1 - e^{-p_i \Delta t}} \quad (3-2-11)$$

$\alpha \rightarrow 1$ 时对应于一个相对于 Δt 的无限快变化的 p_i ， $\alpha=1/2$ 对应于一个无限慢变化的 p_i 。由于我们把(3-2-7)拆成了非负的 q_i 和 $p_i y_i$ 两项，因此只需要考虑 p_i 为正的情况。

基于式(3-2-11)构建一种预测-校正算法：

$$y_i^p = y_i^0 + \frac{(q_i^0 - p_i^0 y_i^0) \Delta t}{1 + \alpha_i^0 p_i^0 \Delta t} \quad (3-2-12)$$

$$y_i^c = y_i^0 + \frac{(q_i^* - p_i^* y_i^*) \Delta t}{1 + \alpha_i^* p_i^* \Delta t} \quad (3-2-13)$$

(3-2-12)为预测步，(3-2-13)为校正步，上标“0”表示这一个迭代步的初值，“p”表示预测值(Predictor)，“c”表示校正值(Corrector)。修正值采用如下方法计算，令 p_i^* 为初始值 p_i^0 和预测值 p_i^p 的算数平均值：

$$p_i^* = \frac{1}{2}(p_i^0 + p_i^p) \quad (3-2-14)$$

p_i^* 代入 α_i 的定义式后得到 α_i^* ：

$$\alpha_i^* = \alpha_i(p_i^* \Delta t) \quad (3-2-15)$$

利用 α_i^* 对 q_i 的预测值 q_i^p 和初始值 q_i^0 作加权平均得到 q_i^* ：

$$q_i^* = \alpha_i^* q_i^p + (1 - \alpha_i^*) q_i^0 \quad (3-2-16)$$

式(3-2-14)~(3-2-16)的校正过程可以多次迭代以提高精度，在迭代时采取上一步迭代的修正值作为下一步迭代的预测值。但作者经实践后认为进行一次校正即可获得可观的计算精度。

此外，在实际计算式为提高计算效率，文献[21]给出了式(3-2-11)的多种多项式逼近函数，本文采取一种二阶 Pade 逼近形式：

$$\alpha_i(p_i \Delta t) \approx \frac{180(p_i \Delta t)^3 + 60(p_i \Delta t)^2 + 11(p_i \Delta t) + 1}{360(p_i \Delta t)^3 + 60(p_i \Delta t)^2 + 12(p_i \Delta t) + 1} \quad (3-2-17)$$

文献并未给出温度方程的求解方法，文献[23]对相关内容进行了补充。本文仅采取最为简单的线性化方法求解温度方程：

$$T^{k+1} = T^k + \Delta t \frac{dT}{dt}(T^k, y_i^{k,c}) \quad (3-2-18)$$

当求解出了第 k 步的质量分数校正值 $y_i^{k,c}$ 以后，代入温度方程(3-2-5)求得变化率，即可计算出下一步的温度。

Mott 在文献[22]中提出了确定 α -QSS 算法迭代时间步长的方法。如果某步的预测值和修正值满足条件：

$$|y_i^c - y_i^p| = \epsilon y_i^c \quad (3-2-19)$$

则这一步计算成功，否则需要减小时间步长重新计算，这是为了限制每次迭代的组分变化率来保证稳定性。一般设置重新计算的步长减小为原来的 $1/2$ 。

当这一步计算成功，可以进一步确定下一步的迭代时间步长。设上一步的时间步长为 $(\Delta t)_{old}$ ，则新的时间步长表示为：

$$(\Delta t)_{new} = (\Delta t)_{old} \frac{1}{\sqrt{\sigma}} \quad (3-2-20)$$

式中

$$\sigma = \max \left(\frac{|y_i^c - y_i^p|}{\epsilon y_i^c} \right) \quad (3-2-21)$$

$\epsilon = \epsilon/c$ ($c > 1$) 为另一个精度控制常数，根据文献[24]的算法验证结果， ϵ 一般需要在 10^{-2} 以下， c 可取 $c = 2$ 。

根据作者实践结果，在计算接近反应平衡时式(3-2-21)可能出现 σ 非常大，导致时间步长非常小使迭代无法进行下去的情况。为了避免这种情况，式(3-2-21)可以修正为：

$$\sigma = \max \left(\frac{|y_i^c - y_i^p|}{\epsilon(y_i^c + 0.001)} \right) \quad (3-2-22)$$

另外还有可能出现 σ 非常小的情况，建议人工限制迭代步长的增长。这种情况不影响计算稳定性，但有可能导致时间步长一次跨越太大影响精度，尤其是在反应的诱导阶段，一种直接的做法是：

$$(\Delta t)_{new} = (\Delta t)_{old} \min \left(\frac{1}{\sqrt{\sigma}}, 2 \right) \quad (3-2-23)$$

3.2.3 ZND 结构的控制方程

改造式(3-1-2)，令 $\frac{d}{dt} = 0$ ，并将矩阵分开写作：

$$\left\{ \begin{array}{ll} \frac{d\rho u}{dx} = 0 & (a) \\ \frac{d(\rho u^2 + p)}{dx} = 0 & (b) \\ \frac{d(\rho e_t + p)u}{dx} = 0 & (c) \\ \frac{d\rho_i u}{dx} = \omega_i \quad (i=1, \dots, ns-1) & (d) \end{array} \right. \quad (3-2-24)$$

将内能定义式(3-1-3)代入(3-2-24)(c)中，求微分得到：

$$-u \frac{du}{dx} = \frac{dh}{dx} = \sum_{i=1}^{ns} h_i \frac{dY_i}{dx} + \sum_{i=1}^{ns} c_{pi} Y_i \frac{dT}{dx} \quad (3-2-25)$$

我们最终的目的是得到组分和速度的微分，注意到 $\frac{dT}{dx}$ 一项需要被消去，为此对状态方程 $p = \rho RT$ 两边对 x 求导数：

$$\frac{dp}{dx} = \rho R \frac{dT}{dx} + \rho T \frac{dR}{dx} + RT \frac{d\rho}{dx} \quad (3-2-26)$$

这里出现了 $\frac{dT}{dx}$ ，但还要消去 $\frac{d\rho}{dx}$ 和 $\frac{dp}{dx}$ 。化简式(3-2-24)(a)：

$$\frac{d\rho}{dx} = -\frac{\rho}{u} \frac{du}{dx} \quad (3-2-27)$$

将式(3-2-24)(a)代入(b)中：

$$\frac{dp}{dx} = -\rho u \frac{du}{dx} \quad (3-2-28)$$

将式(3-2-27)和(3-2-28)代入式(3-2-26)中，并代入 R 的定义式(1-3-5)：

$$\rho u \frac{du}{dx} = \rho \sum_{i=1}^{ns} Y_i R_i \frac{dT}{dx} + \rho T \sum_{i=1}^{ns} R_i \frac{dY_i}{dx} - \sum_{i=1}^{ns} Y_i R_i T \frac{\rho}{u} \frac{du}{dx} \quad (3-2-29)$$

联立式(3-2-25)、(3-2-29)，消去 $\frac{dT}{dx}$ 一项，得到速度微分方程：

$$\frac{du}{dt} = \frac{\sum_{i=1}^{ns} h_i \frac{dY_i}{dt} - \frac{c_p T}{R} \cdot \sum_{i=1}^{ns} R_i \frac{dY_i}{dt}}{\frac{c_p u}{R} - \frac{c_p T}{u} - u} \quad (3-2-30)$$

将质量分数定义式(1-3-3)代入(3-2-30)(c)，得到组分质量分数微分方程：

$$\frac{dY_i}{dx} = \frac{1}{\rho u} \omega_i \quad (i=1, \dots, ns) \quad (3-2-31)$$

这里的 i 多出来了第 ns 项，这是由于我们消去了封闭组元微分方程组的 (3-2-24)(a)。联立(3-2-30)和(3-2-31)，利用化学动力学方程(3-1-10)即可求解 ZND 结构的控制方程(3-2-24)。

这是一个一阶非线性常微分方程组的初值问题，初值即 ZND 结构中 von-Neumann 面冻结激波后的流场参数。采用 α -QSS 方法可以求解 ZND 结构控制方程，其求解过程是与求解等容爆炸的控制方程是类似，不再作进一步推导。

3.3 一维无粘流基础

本文所附一维理想气体无粘流动方程(一维 Euler 方程)求解程序采用守恒形式的有限差分方法，数值通量的重构采用 5 阶 WENO 格式或 2 阶 TVD 格式，流通矢量分裂采用 Steger-Warming 方法，时间推进采用三阶 Runge-Kutta 方法。

一维无粘流求解属于 CFD 方法的基础知识，本文推荐力学研究所李新亮的网络录像课程及配套 ppt，同时推荐文献[25]作为标准参考。关于数值格式理论本文不作展开，仅围绕本文所附程序简单介绍一维无粘流动方程的求解过程。

给出一维理想气体无粘流动方程组

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}(\mathbf{U})}{\partial x} = 0 \quad (3-3-1)$$

其中

$$\mathbf{U} = \begin{bmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho e_i^* \end{bmatrix} \quad \mathbf{F} = \begin{bmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ (\rho e_i^* + p)u \end{bmatrix} \quad (3-3-2)$$

参考 1.3.2 热完全气体的热力学参数的定义，式中 e_i^* 为气体热焓 h^* 表示的总内能：

$$e_i^* = e^* + \frac{1}{2}u^2 = h^* - RT + \frac{1}{2}u^2 \quad (3-3-3)$$

并且定义气体比热比是恒定的，将 γ 定义式 (1-3-25)和气体状态方程(1-3-6)代入式(3-3-3)，得到内能与压强之间的关系式：

$$e_i^* = \frac{p}{\rho(\gamma-1)} + \frac{1}{2}u^2 \quad (3-3-4)$$

这样就完成了对方程组的封闭。

求解一维 Euler 方程(3-3-1)的基本逻辑是将原方程转化为标准双曲型偏微分方程组，进而使用双曲方程组的求解方法对变换后的原方程求解。双曲型偏微分方程组的一般表达式为：

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \mathbf{A} \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial x} = 0 \quad (3-3-5)$$

为了得到这样的形式，需要将(3-3-2)中的 $\mathbf{F}(\mathbf{U})$ 用 \mathbf{U} 表出，设：

$$\mathbf{U} = \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho e^* \end{bmatrix} \quad (3-3-6)$$

于是：

$$\mathbf{F}(\mathbf{U}) = \begin{bmatrix} f_1 \\ f_2 \\ f_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ u(\rho e + p) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} u_2 \\ (\gamma - 1)u_3 + \frac{3 - \gamma}{2} \frac{u_2^2}{u_1} \\ \gamma \frac{u_2 u_3}{u_1} - \frac{\gamma - 1}{2} \frac{u_2^3}{u_1^2} \end{bmatrix} \quad (3-3-7)$$

对 $\mathbf{F}(\mathbf{U})$ 中的矢量变量 \mathbf{U} 求导，得到 Jacobian 矩阵 \mathbf{A} ：

$$\mathbf{A} = \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{U}} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -(3 - \gamma)u^2 / 2 & (3 - \gamma)u & \gamma - 1 \\ \frac{(\gamma - 2)u^3}{2} - \frac{uc^2}{\gamma - 1} & \frac{c^2}{\gamma - 1} + \frac{3 - 2\gamma}{2} u^2 & \gamma u \end{bmatrix} \quad (3-3-8)$$

(3-3-6)~(3-3-8)代入(3-3-5)，就将原 Euler 方程(3-3-1)转换为了标准形式。

将 \mathbf{A} 对角化处理

$$\mathbf{A} = \mathbf{K} \mathbf{\Lambda} \mathbf{K}^{-1} \quad (3-3-9)$$

其中

$$\mathbf{\Lambda} = \begin{bmatrix} u - c & 0 & 0 \\ 0 & u & 0 \\ 0 & 0 & u + c \end{bmatrix} \quad \mathbf{K} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ u - c & u & u + c \\ \frac{1}{\rho} \left(\frac{\gamma p}{\gamma - 1} \right) + \frac{1}{2} u^2 - uc & 0 & \frac{1}{\rho} \left(\frac{\gamma p}{\gamma - 1} \right) + \frac{1}{2} u^2 + uc \end{bmatrix} \quad (3-3-10)$$

由此构建 Steger-Warming 分裂格式

$$\mathbf{A}^+ = \mathbf{K} \frac{\Lambda + |\Lambda|}{2} \mathbf{K}^{-1}; \quad \mathbf{A}^- = \mathbf{K} \frac{\Lambda - |\Lambda|}{2} \mathbf{K}^{-1} \quad (3-3-11)$$

将(3-3-5) 写成离散形式，并根据双曲方程的性质构建迎风格式：

$$\frac{\mathbf{U}_j^{i+1} - \mathbf{U}_j^i}{\Delta t} + \mathbf{A}^- \frac{\mathbf{U}_{j+1}^i - \mathbf{U}_j^i}{\Delta x} + \mathbf{A}^+ \frac{\mathbf{U}_{j-1}^i - \mathbf{U}_j^i}{\Delta x} = 0 \quad (3-3-12)$$

上标 i 表示时间的离散，下标 j 表示空间离散。进一步改写式(3-3-12)：

$$\mathbf{U}_j^{i+1} = \mathbf{U}_j^i + \frac{\Delta t}{\Delta x} (\mathbf{A}^- (\mathbf{U}_{j+1}^i - \mathbf{U}_j^i) + \mathbf{A}^+ (\mathbf{U}_{j-1}^i - \mathbf{U}_j^i)) \quad (3-3-13)$$

这就得到了一种最简单的一阶迎风格式的守恒型有限差分格式。但这样的格式对分辨爆轰波来说是远远不够的，它只具有一阶精度，带有很大的人工粘性，还需要构造更高精度的数值格式。

定义等式：

$$\left. \frac{\partial \mathbf{F}(\mathbf{U})}{\partial x} \right|_j = \frac{\hat{\mathbf{F}}_{j+1/2} - \hat{\mathbf{F}}_{j-1/2}}{\Delta x} \quad (3-3-14)$$

式中 $\hat{\mathbf{F}}_{j+1/2}$ 和 $\hat{\mathbf{F}}_{j-1/2}$ 为 j 点两侧的数值通量，在这里我们假设(3-1-14)是解析相等的。所谓数值格式，就是要通过一系列网格点上的 $\mathbf{F}(\mathbf{U})$ 来构造 $\hat{\mathbf{F}}_{j+1/2}$ 和 $\hat{\mathbf{F}}_{j-1/2}$ ，

使得所构造的 $\frac{\hat{\mathbf{F}}_{j+1/2} - \hat{\mathbf{F}}_{j-1/2}}{\Delta x}$ 成为 $\left. \frac{\partial \mathbf{F}(\mathbf{U})}{\partial x} \right|_j$ 的高阶逼近，即：

$$\frac{\hat{\mathbf{F}}_{j+1/2} - \hat{\mathbf{F}}_{j-1/2}}{\Delta x} = \left. \frac{\partial \mathbf{F}(\mathbf{U})}{\partial x} \right|_j + O(\Delta x^k) \quad (3-3-15)$$

式中 k 为精度的阶数，而构造数值通量的过程称为重构。

显然，对于我们构造的式(3-3-13)：

$$\hat{\mathbf{F}}_{j+1/2}^+ = \mathbf{A}^+ \mathbf{U}_{j-1}^i; \quad \hat{\mathbf{F}}_{j-1/2}^+ = \mathbf{A}^+ \mathbf{U}_j^i \quad (3-3-16)$$

是一阶精度的数值通量。

更高阶的构造方法，如高阶迎风、高阶 WENO 格式等不再在本文中进一步展开，本文所附程序提供 2 阶迎风 TVD 和 5 阶 WENO 两种格式的数值通量求解器。

在求得对流通量后，令(3-3-1)的半离散形式为：

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} = \mathbf{L}(\mathbf{U}) \quad (3-3-17)$$

在时间推进上，本文程序采用 3 步 3 阶 Runge-Kutta 方法进行显示求解：

$$\begin{cases} \mathbf{U}^{(1)} = \mathbf{U}^n + \Delta t \mathbf{L}(\mathbf{U}^n) \\ \mathbf{U}^{(2)} = \frac{3}{4} \mathbf{U}^n + \frac{1}{4} [\mathbf{U}^{(1)} + \Delta t \mathbf{L}(\mathbf{U}^{(1)})] \\ \mathbf{U}^{n+1} = \frac{1}{3} \mathbf{U}^n + \frac{2}{3} [\mathbf{U}^{(2)} + \Delta t \mathbf{L}(\mathbf{U}^{(2)})] \end{cases} \quad (3-3-18)$$

3.4 基于时间项分裂的解耦方法

刘君提出了一种化学非平衡流解耦算法^[26]，其算法核心在于对非平衡反应流方程组(3-1-1)进行变换，并通过时间项分裂的方法将非平衡流控制方程的求解分为量热气体和等容爆炸两部分。刘瑜^{[24][23]}采用刘君的化学非平衡流解耦算法开展了二维爆轰波、激波诱导燃烧现象的数值模拟，并阐述了该算法的具体实施步骤，解读了该算法的物理含义。

本节对刘君非平衡流解耦算法的物理思想不再重复解读，而是从数学逻辑上给出一种具有合理性的推导过程。

3.4.1 算子分裂法

直接求解非平衡流控制方程是不经济的，这是因为化学反应过程和流动过程的时间尺度存在数量级差距，因此我们采用算子分裂方法。算子分裂方法将对流项和源项解耦考虑，认为守恒项的变化分别是由对流项和源项引起的，因此分别求出这两项引起的变化量，最终将这些变化量以某种数学形式组合起来，得到守恒量的近似解。

对于控制方程(3-1-1)，其算子分裂具有一般形式，即，
对流项：

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} = - \frac{\partial \mathbf{F}(\mathbf{U})}{\partial x} \quad (3-4-1)$$

源项：

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} = \mathbf{S} \quad (3-4-2)$$

本文采用的 Strang 算子分裂方法表示为：

$$\begin{aligned}
\text{Step 1} \quad & \frac{\mathbf{U}^{f(t),s\left(t+\frac{1}{2}\Delta t\right)} - \mathbf{U}^{f(t),s(t)}}{\frac{1}{2}\Delta t} = \mathbf{S}^{f(t),s(t)} \\
\text{Step 2} \quad & \frac{\mathbf{U}^{f(t+\Delta t),s\left(t+\frac{1}{2}\Delta t\right)} - \mathbf{U}^{f(t),s\left(t+\frac{1}{2}\Delta t\right)}}{\Delta t} = -\frac{\partial \mathbf{F}(\mathbf{U}^{f(t),s\left(t+\frac{1}{2}\Delta t\right)})}{\partial x} \\
\text{Step 3} \quad & \frac{\mathbf{U}^{f(t+\Delta t),s(t+\Delta t)} - \mathbf{U}^{f(t+\Delta t),s\left(t+\frac{1}{2}\Delta t\right)}}{\frac{1}{2}\Delta t} = \mathbf{S}^{f(t+\Delta t),s\left(t+\frac{1}{2}\Delta t\right)}
\end{aligned} \tag{3-4-3}$$

式中上标“ f ”，“ s ”分别表示守恒量 \mathbf{U} 对对流项和源项的变化，该 Strang 算子分裂方法具有二阶时间精度。

3.4.2 解耦方法的数学推导

假设对方程不作任何变换，直接进行算子分裂(3-4-1)~(3-4-2)，会得到以下形式的对流项方程和源项方程，

对流项：

$$\frac{\partial}{\partial t} \begin{bmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho e_t \\ \rho_1 \\ \vdots \\ \rho_{ns-1} \end{bmatrix} + \frac{\partial}{\partial x} \begin{bmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ (\rho e_t + p)u \\ \rho_1 u \\ \vdots \\ \rho_{ns-1} u \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} \tag{3-4-4}$$

源项

$$\frac{\partial}{\partial t} \begin{bmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho e_t \\ \rho_1 \\ \vdots \\ \rho_{ns-1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \omega_1 \\ \vdots \\ \omega_{ns-1} \end{bmatrix} \tag{3-4-5}$$

显然，(3-4-5)就是等容爆炸的控制方程(3-2-1)，这是一个好的性质，因为我们在 3.2.2 α -QSS 方法中已经知道等容爆炸方程该如何求解。现在的问题是求解对流项方程(3-4-4)。

注意(3-4-4)对流项方程在本质上与一维无粘量热气体流动方程(3-3-2)不应

该存在任何区别，如果有区别也只是表达形式不同。因此，要求解(3-4-4)只需要把它变换成(3-3-2)的形式，使用一维无粘量热气体的求解方法即可。

回顾 3.3 一维无粘流基础中的讨论，量热完全气体便于求解的原因在于，它可以用比热比 γ 封闭方程组，从而将内能 e_t^* 从方程中以非守恒量 ρ 、 u 、 p 表达。依据这种求解思路，现在我们对(3-4-4)进行变换。

注意热焓表示的总比内能和比焓表示的总比内能之间的关系：

$$\begin{aligned} e_t^* &= h^* - RT + \frac{1}{2}u^2 = (h - \Delta h_{f,0}^0) - RT + \frac{1}{2}u^2 = \left(h - RT + \frac{1}{2}u^2 \right) - \Delta h_{f,0}^0 \\ &= e_t - \Delta h_{f,0}^0 \end{aligned} \quad (3-4-6)$$

式中 $\Delta h_{f,0}^0$ 为 $T=0\text{ K}$ 时混合气体的热完全气体生成能：

$$\Delta h_{f,0}^0 = \sum_{i=1}^{ns} Y_i \Delta h_{f,i,0}^0$$

将(3-4-4)中能量方程的比内能 e_t 用 e_t^* 替代，得到：

$$\frac{\partial \rho e_t}{\partial t} + \frac{\partial (\rho e_t + p)u}{\partial x} = \frac{\partial \rho e_t^*}{\partial t} + \frac{\partial (\rho e_t^* + p)u}{\partial x} + \sum_i^{ns} \Delta h_{f,i,0}^0 \left(\frac{\partial \rho_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho_i u}{\partial x} \right) \quad (3-4-7)$$

注意到(3-4-4)中 $\frac{\partial \rho_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho_i u}{\partial x} = 0$ ，因此对于对流项方程(3-4-4)，存在关系式：

$$\frac{\partial \rho e_t}{\partial t} + \frac{\partial (\rho e_t + p)u}{\partial x} = \frac{\partial \rho e_t^*}{\partial t} + \frac{\partial (\rho e_t^* + p)u}{\partial x} \quad (3-4-7)$$

到这里为止，我们分别得出来了对流项方程(3-4-4)和源项方程(3-4-5)的求解方法，已经能够求解解耦的非平衡反应流动方程(3-3-1)了。现在通过(3-4-7)式的变换，把它们写作算子分裂法(3-4-1)~(3-4-2)的形式，

对流项方程：

$$\frac{\partial}{\partial t} \begin{bmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho e_t^* \\ \rho_1 \\ \vdots \\ \rho_{ns-1} \end{bmatrix} + \frac{\partial}{\partial x} \begin{bmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ (\rho e_t^* + p)u \\ \rho_1 u \\ \vdots \\ \rho_{ns-1} u \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} \quad (3-4-8)$$

源项方程：

$$\frac{\partial}{\partial t} \begin{bmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho e_i^* \\ \rho_1 \\ \vdots \\ \rho_{ns-1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \sum_i^{ns} \Delta h_{f,i,0}^0 \omega_i \\ \omega_1 \\ \vdots \\ \omega_{ns-1} \end{bmatrix} \quad (3-4-9)$$

这就得到了刘君所提解耦算法的标准形式。

3.4.3 解耦算法的具体实施

在实际求解时，并不需要按照 **Strang** 算子分裂方法的标准形式实施编程求解，而是求解源项方程，得到压力 p 、温度 T 、以及气体成分 Y_i ，然后通过混合气体热力学基本关系式，求出密度 ρ 、速度 u 、比内能 e_i^* ，传递给对流项方程。当求解完对流项方程，得到新的 ρ 、 u 、 e_i^* 后，再通过混合气热力学基本关系式，求出 p 、 T 传递给源项方程进行求解。

用 p 、 T 、 Y_i 可以直接计算 ρ 、 u 、 e_i^* ，它们的计算式是显式表达的，可以直接计算。而通过 ρ 、 u 、 e_i^* 计算 p 、 T 则要稍微复杂一些。从表达式(3-3-3)：

$$e_i^* = e^* + \frac{1}{2}u^2 = h^* - RT + \frac{1}{2}u^2 \quad (3-3-3)$$

得到 u 、 e_i^* 后，可以算出 $e^* = e_i^* - \frac{1}{2}u^2$ ，进而通过 e^* 去求解温度 T 。这一过程不能显式计算出来，需要迭代求解。

在求解对流项方程(3-4-8)时，我们使用了量热气体的求解方法，认为在当前时刻 t 下气体比热比 γ 是不变的，具有关系式(1-3-25)

$$\gamma = \frac{h^*}{e^*} \quad (1-3-25)$$

然而，在我们计算完这一时刻 t ，将对流项推进到了 $t+\Delta t$ 时，不能再使用 t 时刻的比热比 γ 去计算 h^* 与 e^* 之间的关系并得到 T 。对于 T 的计算，本文给出一种牛顿迭代法。

构造迭代函数：

$$T_{k+1} = T_k - \frac{f(T_k)}{f'(T_k)} \quad (3-4-10)$$

式中

$$\begin{cases} f(T) = h^*(T) - RT - e^* \\ f'(T) = c_p(T) - R \end{cases} \quad (3-4-11)$$

此外，文献[24]还给出了温度计算的二分法、文献[23]则采用更高效的 **zeroin** 算法。

算法的验证工作可以采用反射激波诱导爆轰波的算例^[27]进行比较验证，对此本文不作展开。

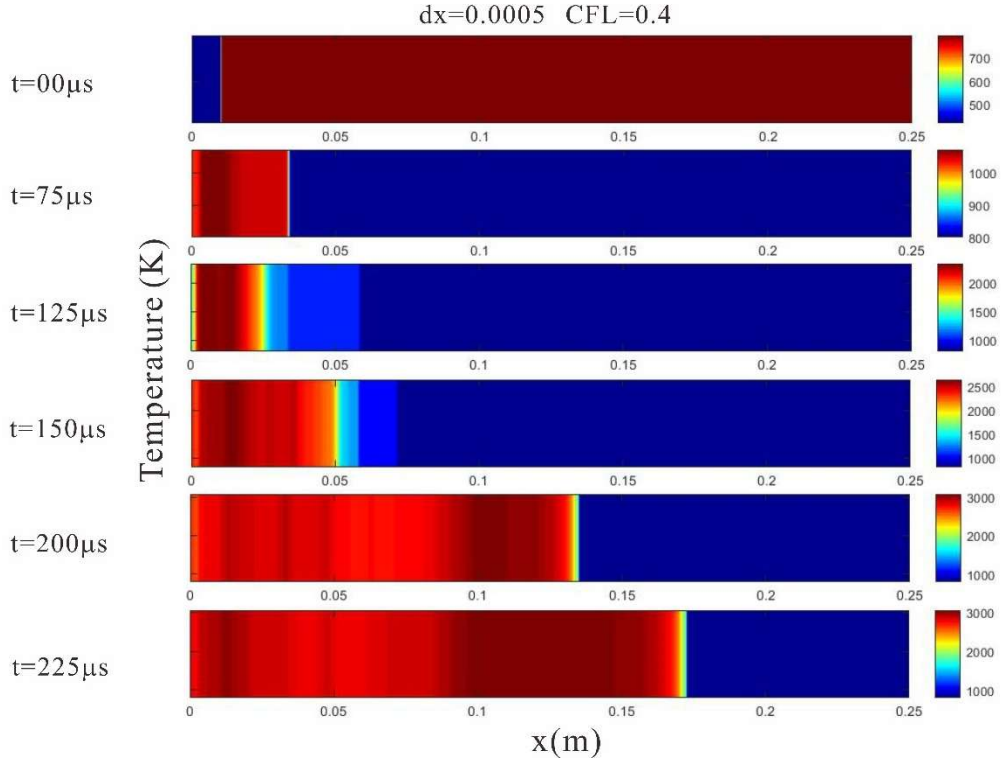


图 20 当量比 H₂-Air 混合气反射激波诱导爆轰波过程

参考文献

- [1] 姜宗林等, 气体爆轰物理及其统一理论[M]. 科学出版社, 2020.
- [2] 张博, 白春华. 气相爆轰动力学[M]. 科学出版社, 2012.
- [3] H. D. 格鲁什卡, F. 韦肯(周光全等译). 爆轰的气体动力学理论[M]. 科学出版社, 1986.
- [4] Zucrow, M.J. and Hoffman, J. D. Gas Dynamic, John Wiley & Sons, Inc. New York, 1976.
- [5] 徐旭, 陈兵, 徐大军. 冲压发动机原理及技术[M]. 北京航空航天大学出版社, 2014.
- [6] Zonglin JIANG , Zijian ZHANG , Yunfeng LIU et. al. Criteria for hypersonic airbreathing propulsion and its experimental verification[J]. Chinese Journal of Aeronautics, (2021), 34(3): 94-104.
- [7] Fickett W, Davis W C. Detonation [M]. Berkeley, Los Angeles: University of California Press, 1979.
- [8] McBride B J, Zehe M J, Gordon S. NASA Glenn coefficients for calculating thermodynamic properties of individual species [R]. NASA/TP-2002-211556, 2002.
- [9] 张子健. 斜爆轰推进理论、技术及其实验验证[D]. 中国科学院大学, 2020.
- [10] Zhang, Z., Wen, C., Zhang, W., Liu, Y., Jiang, Z. A theoretical method for solving shock relations coupled with chemical equilibrium and its applications. *Chinese Journal of Aeronautics*, 2022, 25(6), 47–62.
- [11] Gordon S, McBride B J. Computer program for calculation chemical equilibrium compositions and applications: I Analysis [R]. NASA RP-1311, 1994
- [12] 宋寿春. 最小自由能法火药示性数计算[J]. 火炸药学报, 1978, 01(1):55-61.
- [13] 张奇, 白春华, 梁慧敏. 燃烧与爆炸[M]. 北京理工大学出版社, 2019.
- [14] 杨鹏飞, 张子健, 杨瑞鑫, 滕宏辉, 姜宗林. 斜爆轰发动机的推力性能理论分析. 力学学报, 2021, 53(10): 2853-2864.
- [15] Zhang, Z., Liu, Y., Wen, C.* Mechanisms of the destabilized Mach reflection of inviscid oblique detonation waves before an expansion corner. *Journal of Fluid*

-
- Mechanics, 2022, 940, A29.
- [16] Sean M. Torrez, James F. Driscoll, Derek J. Dalle et. al. Scramjet Engine Model MASIV: Role of Mixing, Chemistry and Wave Interactions[J]. 45th AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference & Exhibit 2 - 5 August 2009, Denver, Colorado.
- [17] Derek J. Dalle. Interactions between Flight Dynamics and Propulsion Systems of Air-Breathing Hypersonic Vehicles [D]. University of Michigan, 2013.
- [18] 陈柏屹. 空天飞行器面向控制一体化的建模及多系统关联特性分析[D]. 南京航空航天大学, 2019.
- [19] Niu, S.; Yang, P.; Wang, K.; Teng, H. Unsteady Oblique Detonation Waves in a Tunnel Induced by Inflow Mach Number Variation. *Aerospace* 2023, 10, 330. <https://doi.org/10.3390/aerospace10040330>
- [20] R. J. Kee, F. M. Rupley, J. A. Miller, M. E. Coltrin, J. F. Grcar, E. Meeks, H. K. Moffat, A. E. Lutz, G. Dixon Lewis, M. D. Smooke, J. Warnatz, G. H. Evans, R. S. Larson, R. E. Mitchell, L. R. Petzold, W. C. Reynolds, M. Caracotsios, W. E. Stewart, P. Glarborg, C. Wang, and O. Adigun, CHEMKIN Collection, Release 3.6, Reaction Design, Inc., San Diego, CA (2000).
- [21] Mott D R, Oran E S, Leer B v. A quasi-steady-state solver for the stiff ordinary differential equations of reaction kinetics[J]. *Journal of Computational Physics*, 2000, 164: 407-428.
- [22] D. R. Mott, E. S. Oran, CHEMEQ2: A Solver for the Stiff Differential Equations of Reaction Kinetics[R]. NRL Memorandum Report (Naval Research Laboratory, Washington, DC), 2001.
- [23] 刘瑜. 量热完全气体/化学非平衡气体流动 ALE 有限体积计算方法研究[D]. 国防科技大学, 2014.
- [24] 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]. 国防科技大学, 2008.
- [25] Eleuterio F. Toro. Riemann Solvers and Numerical Methods for Fluid Dynamics[M]. Springer Berlin, Heidelberg, <https://doi.org/10.1007/b79761>.

-
- [26] 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]. 国防科技大学出版社, 2008.
- [27] Oran E S, Boris J P. Numerical methods in reacting flows[R]. AIAA-87-0057, 1987.

后记

本文所附程序是在 **Matlab** 平台上实现的, **Matlab** 适合处理矩阵运算, 对于第二章激波化学平衡方法的相关计算, 通过向量化编程获得了很可观的求解速度。然而 **Matlab** 处理大量 **for** 循环的计算效率很低, 对于第三章化学非平衡反应流动则求解速度较慢。如需要扩展本文第三章的程序, 建议采用如 **Fortran**、**C++** 语言编程。

本文所附程序将气体分子热力学数据、分子量数据均存储在 **.mat** 文件中, 能通过气体分子化学式直接调用。然而气体分子元素符号、原子数量还需要根据气体分子式手动输入; 化学反应机理需要通过 **Excel** 表输入, 还未能实现 **Chemkin** 机理文件的直接读取, 这些方面仍然需要优化。

作者是火箭总体与航天专业的学生, 由于对爆轰理论的兴趣完成了上述程序的编写和文章整理。这半年的学习, 要感谢姜宗林、张子健、刘君、刘瑜等老师们的学术研究成果, 能站在前辈的肩膀上一窥爆轰理论和数值计算的奥妙, 我感到非常幸运, 希望自己以后能像前辈们一样对理论和技术做出贡献。

其次, 感谢 **HEU** 的李博士对我学习路线的指导, 这半年的自学没有太走偏, 收获良多。感谢 **NUAA** 的陈老师、王老师、黄老师、秦老师对我这一年多以来, 尤其是出国以后的关心、帮助和指点。感谢 **HUST** 的高同学在编程方面的讨论和帮助。

感谢李新亮、刘建新老师的录像课, 让我这个外行人能入门计算流体力学, 感受它的奥妙, 老师们学术共享的精神是我所崇尚的。

姜宗林老师在《气体爆轰物理及其统一框架理论》的最后引用了屈原的名句“路漫漫其修远兮, 吾将上下而求索”。我感觉自己在力学方面的天赋有限, 因此未来很难在爆轰理论在这条路上继续走下去。但这条路上一定会有很多有天赋、有爱好的力学人“上下而求索”, 为方便他们的学习, 我将本文及相关程序开源发布。

https://github.com/boss-monkey/Detonation_Toolbox/

Bai Haotong

2023.06.04