

[文章编号] 1001-246X(2008)01-0058-07

一维过驱动爆轰波形成的数值研究

滕宏辉, 姜宗林

(中国科学院力学研究所高温气体动力学重点实验室, 北京 100080)

[摘 要] 利用有限速率的基元反应模型对一维过驱动爆轰波的形成过程进行数值模拟. 研究表明, 在上游高温、高压、高速来流作用下首先会形成一道强激波, 其波面方存在诱导区和放热区, 然后诱导区和放热区界面会在来流扰动的作用下发生失稳, 经过复杂的波系运动过程形成过驱动爆轰波. 通过对不同初始条件下界面失稳过程的模拟和分析, 研究了混合气体的组元、温度, 来流的压力、温度、速度对过驱动爆轰波形成的影响.

[关键词] 爆轰波; 起爆; 过驱动

[中图分类号] O 357 [文献标识码] A

0 引言

气相爆轰波运动是一个伴有化学反应能量释放的、自持的波传播过程, 涉及到激波和燃烧的耦合作用, 其形成和传播机理非常复杂. 在激波和燃烧的耦合过程中, 由于化学反应速率对温度的指数依赖关系, 爆轰波往往是不稳定的, 从而会形成各种复杂的波系结构和波动力学过程. 为了描述燃烧反应的效果, 在爆轰波的数值模拟中通常采用的化学反应模型有分步反应模型(如一步反应模型、两步反应模型、三步反应模型)和基元反应模型. 分步反应模型分别对化学反应进行了不同程度的简化, 其共同特点是假定化学反应是不可逆、局部平衡的, 通过引入化学反应度的概念将化学反应线性化. 近年来逐渐得到广泛应用的基元反应模型是将整个化学反应分为若干可逆反应, 通过各个反应的叠加求得组元和混合气体的变化, 进而得到放热量. 基元反应模型将化学反应表述为有限速率的可逆反应, 因此能够模拟爆轰化学反应区真实的非平衡流动过程, 其结果能够更真实地反应爆轰的物理本质.

化学反应诱发的流动不稳定性是爆轰动力学最基础的问题之一, 一维爆轰波是研究爆轰波起爆和传播问题的基础. He 和 Lee^[1]用一步反应模型研究了活塞驱动的爆轰波的稳定性问题, 发现随着活化能的提高, 爆轰波逐渐变得不稳定, 活化能存在两个临界值. 较小的临界值使爆轰波由稳定发展到周期振荡, 较大的临界值使爆轰波振荡周期变成无穷大, 从而不能通过自点火实现自持传播. Sharpe 和 Falle^[2]用一步反应模型模拟了高分辨率网格下理想化的 C 爆轰临界状态下的不稳定性, 发现对于较高的活化能, 爆轰波熄灭的同时会在波后产生未反应气团, 从而诱发重新点火的动力学过程. Daimon 和 Matsuo^[3]用一步反应模型研究了过爆轰的动力学问题, 对较低过爆轰度下出现的 4 种振荡进行了分析, 并通过网格加密得到了唯一的重新起爆点. Short 和 Quirk^[4]利用三步反应模型研究了爆轰波的非线性不稳定性, 通过增加离解反应的特征温度得到爆轰的单模和双模振荡, 但进一步增加特征温度则会导致爆轰波的熄灭. Short 等^[5]用三步反应模型研究了两种脉动爆轰波的不稳定性, 发现前导激波和复合反应面之间存在着复杂的有限振幅的低频波, 可能引起波面的规则脉动, 同时复合反应面在爆轰波发生熄爆后, 有可能加速形成新的爆轰波面并迅速衰减, 从而引起波面的不规则脉动. Ng 和 Lee^[6]用三步反应模型研究了利用冲击波实现直接起爆产生 C 爆轰波的问题, 发现随着起爆能量的差异, 出现了亚临界、临界和超临界 3 种情况, 研究爆轰波的不稳定性在起爆过程中的作用, 并发现柱面和球面的曲率对爆轰波的不稳定性有促进作用, 从而对直接起爆过程造成影响.

以前的研究者主要通过分步反应模型研究过驱动爆轰的传播和起爆问题. 由于化学反应模型的局限性, 简化的分步反应模型无法准确地模拟化学反应区的发展变化过程, 而且结果受模型中各个经验常数的影响.

[收稿日期] 2006-10-31; [修回日期] 2007-03-26

[作者简介] 滕宏辉(1981-), 男, 河南商丘, 博士生, 从事激波和爆轰物理研究.

特别是研究一些特殊的问题如病态爆轰^[7],往往需要对模型做特殊处理,增加了人为的不确定性.本文利用基元反应模型对一维过驱动爆轰波进行了数值模拟,主要研究过驱动爆轰波的直接起爆过程.模拟结果表明:在给定一定强度的高温、高压、高速气流的驱动作用下,能够迅速地形成过驱动爆轰波.通过对过驱动爆轰波的形成过程及影响因素的讨论,分析了基元反应模型下过驱动爆轰波的动力学特性.

1 数值方法

控制方程选用一维多组分欧拉方程组,其守恒形式可表示为

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial F}{\partial x} = S,$$

其中

$$U = \begin{bmatrix} \rho_1 \\ \vdots \\ \rho_n \\ \rho u \\ e \end{bmatrix}, \quad F = \begin{bmatrix} \rho_1 u \\ \vdots \\ \rho_n u \\ \rho u^2 + p \\ (\rho e + p) u \end{bmatrix}, \quad S = \begin{bmatrix} \dot{\rho}_1 \\ \vdots \\ \dot{\rho}_n \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix},$$

式中 $\rho_i (i=1, \dots, n)$ 为第 i 组分的质量分数,混合气体的总密度为 $\rho = \sum_{i=1}^n \rho_i$; u 为 x 方向的速度分量; e 为

单位体积总能,且有 $e = h - p + \frac{1}{2} u^2$, 其中混合气体比焓 $h = \sum_{i=1}^n \rho_i h_i / \rho$, 第 i 种组分的焓值 h_i 由多项式

拟合的方法给出; p 为理想混合气体的压力,由道尔顿分压定律和组分气体状态方程得出, $p = \sum_{i=1}^n \rho_i R_i T$, R_i 为第 i 种组分的气体常数, T 为混合气体温度; $\dot{\rho}_i$ 为第 i 组分的单位体积的质量生成率.

本文采用频散可控耗散格式(DCD)^[8]捕捉激波间断,这是一类基于修正方程频散项、控制构造并满足熵条件的 TVD 格式,具有空间二阶精度.通过二阶 Runge-Kutta 方法对半离散方程进行积分,时间达到二阶精度.对于爆轰波的化学反应,选用了 9 种组分 ($H_2, O_2, O, H, OH, HO_2, H_2O_2, H_2O, Ar$), 19 个化学反应的基元模型,采用 Chemkin 程序包处理化学反应^[9],并采用时间分裂算法处理刚性问题.该程序被用于对多种爆轰波形成和传播问题,取得了不错的结果^[10-12].初始条件选定为静止标准状态下 (101 325 Pa, 298 K) 的摩尔比为 $H_2 : O_2 : Ar = 2 : 1 : 7$ 的预混可燃气体,左端入口为 3 MPa, 3 000 K, 1 500 m·s⁻¹ 的高温高压高速气流,组分为 $2H_2O + 7Ar$.边界条件为来流入口速度不变,压力和密度通过两点线性向外插值得到,右端的边界条件为自由出口边界.计算网格密度非常重要,如果网格密度不够,可能导致错误的结果.经过多次试验,选取 2 000 网格/毫米.网格加密 1 倍时,计算结果没有产生明显差异.计算结果分别采用 1 MPa, 1 μ m, 1 μ s 对压力、长度和时间进行无量纲化.

2 过驱动爆轰波形成过程分析

在 3 MPa 和 3 000 K 的点火条件下,左端入口气流速度为 1 500 m·s⁻¹ 的过驱动爆轰波起爆过程如图 1 所示.在运动的高温高压区作用下,首先在前导波面后方形成了一个大约为 3.4 MPa 的近似压力平台,同时温度曲线出现了两个阶跃,从波前的 298 K 分别变为 2 400 K 和 3 100 K (图 1(a)).这种结构与经典的 C Γ 爆轰波的结构模型相似,温度较低的平台区通常称为诱导区,其后较高的区域称为放热区,得益于化学反应的放热,所以温度有较大的提升.由于入口处固定的来流速度大于放热区末端粒子的速度,因此来流不断扰动前方的化学反应区,成为过驱动爆轰形成的动力.在高速来流作用下,诱导区和放热区长度逐渐增加,在到达某个临界点后两者的界面会发生失稳,导致压力和温度升高.由于化学对温度的变化非常敏感,温度的升高导致界面前方化学反应放热率的增加,从而反过来诱导温度进一步升高(图 1(b)).在这种正反馈机制作用下,诱导区长度持续减小,同时诱导区末端界面附近形成的压力最大值点向前导激波面移动,逐渐形成过驱动爆轰波(图 1(c), (d)).图 1 所示的过驱动爆轰波和经典的 C Γ 爆轰波相比有几个特点:激波较强,诱导区温度

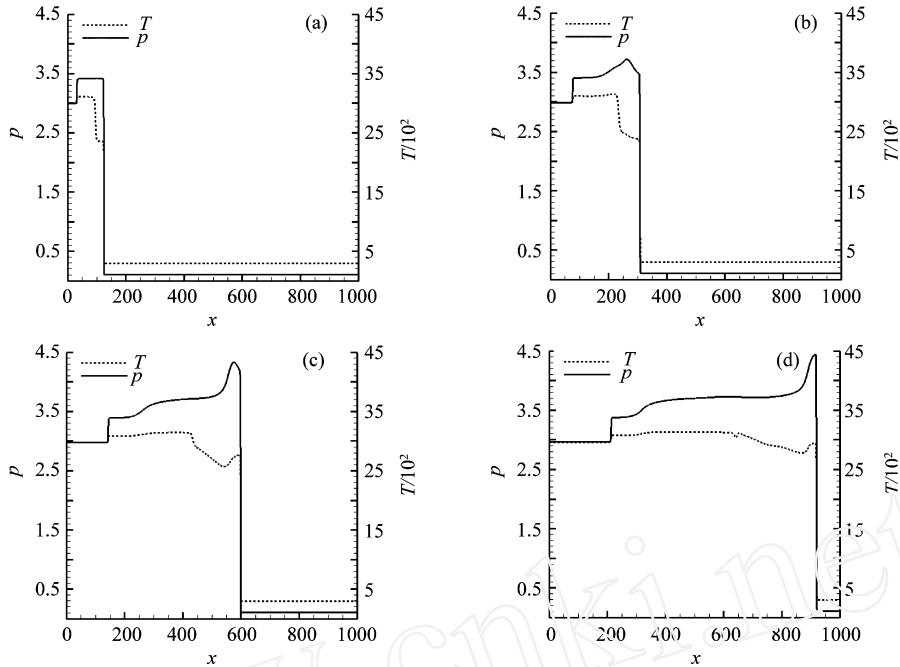


图 1 点火区参数为 3 MPa 和 3 000 K, 来流速度 $1\,500\text{ m s}^{-1}$ 的过驱动爆轰波起爆过程

Fig. 1 Initiation of a overdriven detonation at 3 MPa, 3 000 K and $1\,500\text{ m s}^{-1}$

高, 诱导区和放热区没有明显界限; 在过驱动爆轰很强的激波压缩作用下, 波后气体温度达到较高的值, 化学反应紧贴波面后方, 伴有大量离子生成, 因此波后温度有一个较短的降低区; 压力最大值点仍然是 Neumann 尖点, 但是波后的压力迅速下降, 形成一个较长的等压区, 而不存在 Taylor 稀疏波。

爆轰波起爆过程中诱导区和放热区界面失稳是诱发过驱动爆轰的关键, 其失稳的临界状态压力曲线如图 2 所示。从图 2(a) 可见, 在点火区高温高压作用下形成的压力平台并不是光滑的, 而是存在着高频的压力波动。可以发现, 在诱导区波动的振幅较大, 在放热区振幅较小, 且随着与界面距离的增大而减小。理论上这种高频的波动可能来源于两个因素: 上游高速来流诱导的扰动; 化学反应对温度的敏感性导致的扰动。由于在诱导区内温度基本没有变化而波动较强, 因此可以推断, 因素 是压力波动主要的诱发因素。由于左端入口处的高速来流在放热区末端存在推动作用, 因此会对其前方的流动产生扰动, 并通过小扰动波的形式向前传播。失稳前的爆轰波放热区密度较小而诱导区密度较大, 因此来流的扰动在通过接触面时会发生变化, 导致诱导区的压力波动振幅较大。随着爆轰波的传播, 诱导区长度增加, 同时驱动力的扰动不断从波后向前传播, 形成新的压力波动。如果驱动力的扰动比较强, 新的压力波动以较高的频率产生, 而放热区和诱导区界面速度较小, 放热区长度的增加较慢, 就会导致放热区压力波波数的增加, 从而导致压力波通过界面时, 其振幅被进一步放大。由于化学反应对温度的高度敏感性, 如果放热区的波数足够大, 界面附近的压力波就会导致温度和压力升高, 从而使爆轰波达到临界状态, 失稳后逐渐过渡到稳定的过驱动爆轰状态。

图 3 为过驱动爆轰波形成过程中压力最大值随时间的变化曲线, 其中实框内是虚框内曲线的局部放大图。可以看到, 在起爆的初始阶段, 压力存在较小的过冲, 然后形成持续时间很短的较稳定的爆轰波, 其压力最大值约为 3.4 MPa。在高速气流的驱动作用下爆轰波失稳, 压力最大值点从波面上的 Neumann 尖点向后跃迁到诱导区和放热区的界面处。在向前传播的过程中, 压力最大值迅速上升同时向波面移动, 最后形成新的 Neumann 尖点。两个点重合后, 最大压力值在原有速度冲击作用下仍然继续上升, 由于化学反应放热不足以维持如此高的波面压力, 经过一段时间后压力下降。压力的下降并不是无限制的, 而是受到上游来流的限制。在化学反应放热和上游来流驱动的双重制约作用下, Neumann 压力经过短暂的振荡之后趋向于定值, 从而形成定常的过驱动爆轰。但是对压力波型的局部放大可以看到, 宏观上定常的过爆轰仍然存在高频小幅振荡, 这是由于化学反应对温度的敏感性引起的, 在一定的条件下可能放大, 从而诱发过驱动爆轰的种种复杂的动力学行为。

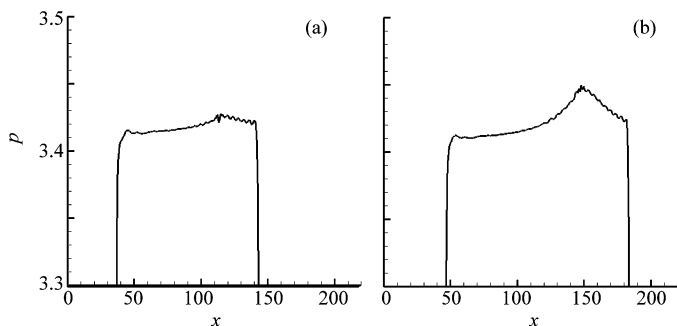


图 2 过驱动爆轰波失稳的临界状态压力曲线

Fig. 2 Pressure of an overdriven detonation near critical instability

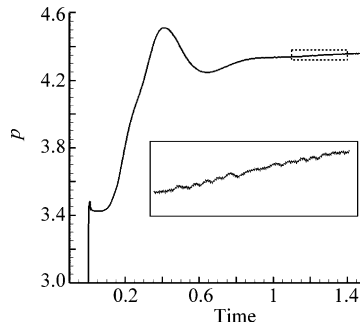


图 3 过驱动爆轰波在起爆过程中压力最大值随时间的变化

Fig. 3 Maximum pressure as a function of time during initiation of an overdriven detonation

3 过驱动爆轰起爆的控制因素

对于高速来流驱动形成的过驱动爆轰波,其起爆过程由过驱动因素的强度即来流的速度和气体的性质决定,同时来流的温度和压力对起爆同样有着较大的影响.下面分别讨论这 3 种因素对起爆过程的影响.

3.1 混合气体温度和组元的影响

由于化学应对温度非常敏感,因此混合气体的温度变化必然对过驱动爆轰波的起爆过程有较大的影响.图 4 显示了压力和组元不变的条件下,混合气体的温度分别变为 248 K 和 498 K 时,相同压力和起爆条件下临界状态的温度和压力分布.通过比较可以发现,高温气体相对于低温气体,其失稳前的压力值较小,放热区温度较低而诱导区温度较高,同时更早达到临界点,发生向过驱动爆轰的转变.这是由于混合气体温度的提高直接导致了波后诱导区温度的提高,而在提高温度的同时保持了压力不变,混合气体的密度减小,因而放热量减小,导致高温混合气体的化学反应区温度较低而诱导区温度较高,因此这种流动结构很不稳定,比低温混合气体更容易达到临界状态从而发生失稳.

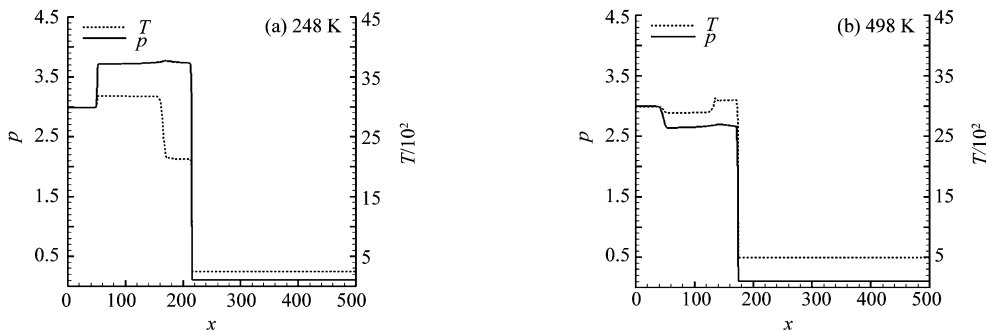


图 4 过驱动爆轰波起爆过程受混合气体温度的影响

Fig. 4 Influence of premixed gas temperature on initiation of overdriven detonation

在相同的温度和压力下,不同组元的过驱动爆轰起爆过程也不相同,如图 5 所示.随着 Ar 体积分数的增加,由于其为单原子分子,绝热系数较大,因而诱导区温度有很大的提高,进而导致了放热区温度和波后压力的提高.因此在达临界状态之前,Ar 的体积分数越大则波后相应位置的温度和压力越高.值得注意的是,2H₂-O₂-7Ar 发生临界转变的时候,诱导区的长度大约为 40.前文的讨论表明,上游来流诱导的压力波动是发生临界变化导致界面失稳的原因,对于 Ar 体积分数较小的情况,由于随着 Ar 体积分数的增加,诱导区的温度升高,因此系统变得不稳定,容易形成过驱动爆轰,因此诱导区的长度减小;对于 Ar 的体积分数较大的情况,由于随着 Ar 的体积分数的增加,诱导区的温度升高较小,而放热量以很快的速度减小,相当于混合气体的活化能提高,因此系统变得比较稳定,不容易形成过驱动爆轰,诱导区的长度增加.

3.2 来流压力和温度的影响

在混合气体组元和温度压力不变的情况下,改变点火区的压力和温度,分别得到了起爆临界状态的压力

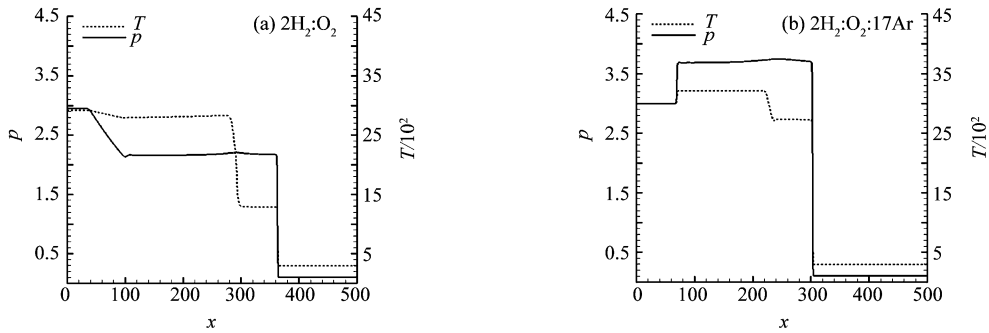


图 5 过驱动爆轰波起爆过程受混合气体组元的影响

Fig. 5 Influence of premixed gas component on initiation of overdriven detonation

和温度分布,如图 6 和图 7 所示.从图 6 可以看到,如果点火区的压力较高,则诱导区的温度会有明显的提升,如点火压力为 2 MPa 时,诱导区的温度大约为 2 000 K,而点火压力为 4 MPa 时,诱导区的温度升高到约 2 700 K.同时放热区的温度相差不大,高压点火产生的放热区温度反而较低.对于波后压力,高压点火波后压力较高,但是由于波前气体的状态相同,导致 2 MPa 时,波后压力大于点火压力,4 MPa 时,波后压力小于点火压力,即波后压力之差小于点火压力之差.由于诱导区的温度和压力较高,因此高压点火区可以有效的缩短临界状态的诱导区长度,较早的达到临界转变点.从图 7 可以看到,在相同压力下,提高点火区温度,诱导区的温度变化不大,但是可以使放热区的温度迅速升高,同时波后压力基本保持不变.由于点火温度的变化对诱导区压力和温度影响不大,因此临界状态的诱导区长度基本不受点火温度的影响而保持不变.综上所述,点火压力的变化主要影响诱导区温度和失稳前的波后压力,而点火温度的变化主要影响放热区温度,因此点火压力升高可以有效地缩短发生临界转变的时间,更容易发生向过爆轰的转变,而点火温度对临界状态影响较小.

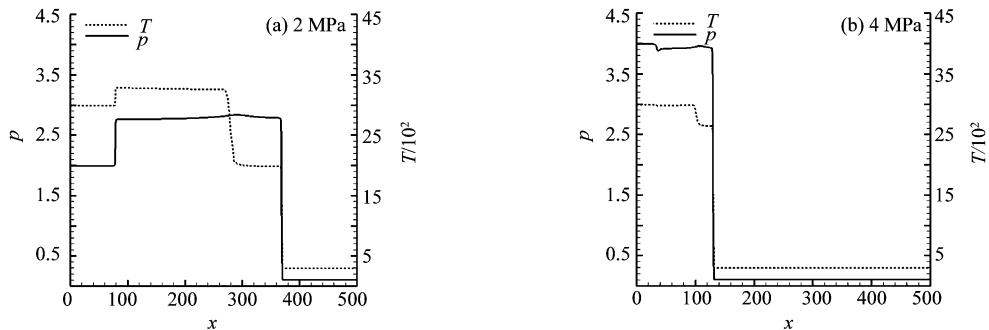


图 6 过驱动爆轰波起爆过程受点火区压力的影响

Fig. 6 Influence of ignition pressure on initiation of overdriven detonation

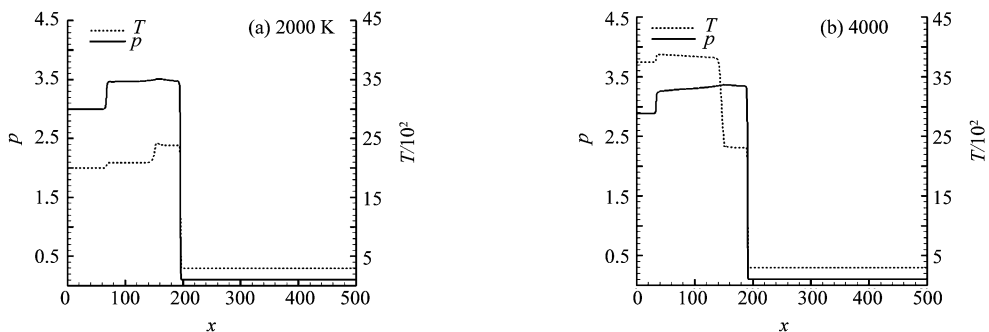


图 7 过驱动爆轰波起爆过程受点火区温度的影响

Fig. 7 Influence of ignition temperature on initiation of overdriven detonation

3.3 来流速度的影响

因为过驱动爆轰波是通过入口的高速气流实现起爆并达到稳定传播的,因此,对于一定的混合气体,来流速度决定了最终稳定的过驱动爆轰波的强度,不同的来流速度,可以得到不同强度的过驱动爆轰波.图 8 显示了不同的入口速度下过驱动爆轰波起爆过程中压力最大值随时间的变化,其中入口速度为 $3\,000\text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$ 和 $2\,000\text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$ 两种情况下,爆轰波已经基本达到稳定状态,入口速度为 $1\,500\text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$ 的情况是图 3 的一部分.通过比较可以发现,入口速度越大,过驱动爆轰波的稳态压力越大,同时越容易达到稳定状态.分析表明,起爆初期会形成相对稳定的阶段,然后在扰动下失稳趋向于过驱动爆轰.因此,可以推断,随着来流入口速度的增大,在诱导区产生压力波动的振幅越大,爆轰波越容易失稳.图 8 的计算结果证明了我们的分析,可以看到,对入口速度 $3\,000\text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$ 的情况,失稳导致压力明显增大所对应的时间为 0.01;对入口速度 $2\,000\text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$ 的情况,失稳导致压力明显增大所对应的时间为 0.04;对入口速度 $1\,500\text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$ 的情况,失稳导致压力明显增大所对应的时间为 0.12.较高的来流入口速度会导致初始的爆轰波更不稳定,但是有利于较快的形成过驱动爆轰波.比较图 8 和图 3 可以看到,来流入口速度为 $3\,000\text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$ 时,亚稳态爆轰波失稳后压力先上升,然后下降,在下降的过程中逐渐趋向于稳态值;而来流入口速度为 $1\,500\text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$ 时,亚稳态爆轰波失稳后不仅有压力上升和下降的过程,而且在下降过程之后还存在一个上升的过程,在这个过程中趋向于稳态值.因此可以说过驱动爆轰波的强度越小越难以形成过驱动爆轰波.

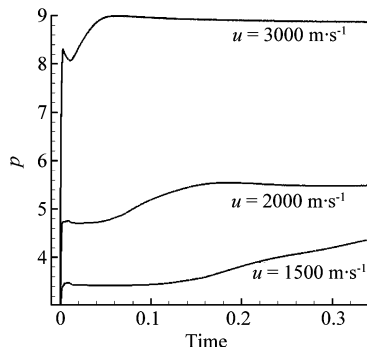


图 8 不同强度的过驱动爆轰波在起爆过程中的压力最大值随时间的变化

Fig. 8 Maximum pressure as a function of time during initiation of overdriven detonations at different velocities

我们的分析,可以看到,对入口速度 $3\,000\text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$ 的情况,失稳导致压力明显增大所对应的时间为 0.01;对入口速度 $2\,000\text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$ 的情况,失稳导致压力明显增大所对应的时间为 0.04;对入口速度 $1\,500\text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$ 的情况,失稳导致压力明显增大所对应的时间为 0.12.较高的来流入口速度会导致初始的爆轰波更不稳定,但是有利于较快的形成过驱动爆轰波.比较图 8 和图 3 可以看到,来流入口速度为 $3\,000\text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$ 时,亚稳态爆轰波失稳后压力先上升,然后下降,在下降的过程中逐渐趋向于稳态值;而来流入口速度为 $1\,500\text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$ 时,亚稳态爆轰波失稳后不仅有压力上升和下降的过程,而且在下降过程之后还存在一个上升的过程,在这个过程中趋向于稳态值.因此可以说过驱动爆轰波的强度越小越难以形成过驱动爆轰波.

4 结论

本文研究了上游高速来流作用下一维过驱动爆轰波的形成过程,通过对爆轰波结构发展变化和不同初始条件下形成过程的分析讨论,得出以下几点主要结论:

1) 在高速来流的驱动下,首先形成强激波及其后方的诱导区和放热区,然后诱导区和放热区的界面发生失稳,逐渐发展成过驱动爆轰波;

2) 诱导区和放热区界面失稳的原因是上游高速来流形成的高频压力波动,在放热反应的正反馈作用下,失稳界面附近会形成压力和温度峰值,并逐渐传播到前导波面上;

3) 界面失稳和过驱动爆轰波形成受到很多因素的影响,总体来说,较高的气体初始温度、来流速度和压力,以及合适的 Ar 比有利于过驱动爆轰波的形成.

[参 考 文 献]

- [1] He L, Lee J H S. The dynamical limit of one-dimensional detonations[J]. Phys Fluids, 1995, 7(5): 1151 - 1158.
- [2] Sharpe G J, Falle S A E G. One-dimensional numerical simulations of idealized detonations[J]. Proc R Soc Lond A, 1999, 455 (1983): 1203 - 1214.
- [3] Daimon Y, Matsuo A. Detailed features of one-dimensional detonations[J]. Phys Fluids, 2003, 15(1): 112 - 122.
- [4] Short M, Quirk J J. On the nonlinear stability and detonability limit of a detonation wave for a model three-step chair-branching reaction[J]. J Fluid Mech, 1997, 339(1): 89 - 119.
- [5] Short M, Kapila A, Quirk J. The chemical-gas dynamic mechanisms of pulsating detonation wave instability[J]. Phil Trans R Soc Lond A, 1999, 357(1764): 3621 - 3637.
- [6] Ng H D, Lee J H S. Direct initiation of detonation with a multi-step reaction scheme[J]. J Fluid Mech, 2003, 476(1): 179 - 211.
- [7] Sharpe G J, Falle S A E G. One-dimensional nonlinear stability of pathological detonations[J]. J Fluid Mech, 2000, 414(1): 339 - 366.

- [8] Jiang Z. On dispersion-controlled principles for non-oscillatory shock-capturing schemes[J]. Acta Mechanica Sinica , 2004 , **20**(1) : 1 - 15.
- [9] Kee R J , Rupley F M , et al. Chemkin : a fortran chemical kinetics package for the analysis of gas-phase chemical and plasma kinetics[R]. UC-405 , SAND96-8216 , Unlimited Release , Printed May , 1996.
- [10] Teng H , Jiang Z. Gasdynamic characteristics of toroidal shock and detonation wave converging[J]. Science in China Series G: Physics , Mechanics & Astronomy , 2005 , **48**(6) : 739 - 749.
- [11] Hu Z M , Mu Q H , Zhang D L , et al. Numerical simulation of gaseous detonation wave propagation through bend with a detailed chemical reaction model[J]. Chinese J Comput Phys , **21**(5) : 408 - 414.
- [12] Mu Q H , Hu Z M , Zhao W , et al. Numerical analyses of direct detonation initiation in PDEs with a pre-combustion jet[J]. Chinese J Comput Phys , **23**(3) : 266 - 272.

Numerical Investigation of One-dimensional Overdriven Detonation Initiation

TENG Honghui , JIANG Zonglin

(LHD , Institute of Mechanics , Chinese Academy of Sciences , Beijing 100080 , China)

Abstract: One-dimensional overdriven detonation initiation is investigated numerically within a finite rate detailed chemical reaction model. Numerical results exhibit that due to upstream inflow at high temperature , pressure and velocity , a leading shock followed by induction and heat-release zones appears. Because of inflow disturbances , the interface between induction and heat-release zones becomes unstable and overdriven detonation waves are generated. With simulation of unstable interfaces with different gas species , temperatures , inflow pressures and velocities , overdriven detonation initiation process is analyzed and illustrated.

Key words: detonation wave ; detonation initiation ; overdriven