

文章编号: 0258-1825(2005)02-0178-05

气相爆轰波传播特性的数值模拟及实验对照

胡宗民¹, 孙宇峰², 郭长铭³, 张德良¹

(1. 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;

2. ME Dept. University of Connecticut, Storrs, CT06268, USA; 3. 中国科学技术大学, 合肥 230027)

摘要: 本文应用基元反应模型和频散可控耗散格式(DCD)对氢氧爆轰波进行了二维数值模拟。氢氧混合物的化学反应模型考虑了8种组分20个反应方程式。在处理化学反应引起的刚性问题时采用了时间算子分裂的方法。本文首先对爆轰波数值结果和实验结果进行了对照验证, 然后对爆轰波在楔面反射由马赫反射向规则反射转变的过程进行了数值分析, 得到了反射转变临界角, 并和实验结果及理论分析进行了比较, 结果是令人满意的; 本文还对爆轰波的多波结构进行了初步的数值分析。

关键词: 爆轰波; 楔面; 胞格; 烟迹; 基元反应模型

中图分类号: V211.3 **文献标识码:** A

0 引言

爆轰波是一种激波和化学反应耦合而且能够自持传播的具有强间断性质的物理现象, 关于爆轰波传播机理的理论分析与实验研究已相当成熟, 例如 Guo 等人对爆轰波在楔面反射过程进行了实验研究^[1], 指出爆轰波在楔面上反射过程与激波有相似之处, 随着楔角的变化也发生马赫反射向规则反射的转变, 存在一个转变的临界角。Thomas 等人实验研究了气相爆轰波与楔面和弯管等结构物的相互作用^[2], 分析了爆轰波的横波等多波结构对爆轰波传播过程的影响。Nettleton 应用 CCW (Chester-Chisnell - Whitham) 理论详细分析了爆轰波与约束的相互作用^[3]。

随着计算机性能的迅速提高, 以及对可燃气体基元反应认识的进一步深入, 人们已经开始应用基元反应来模拟爆轰过程, 如文献[4]应用9组分19反应模型对氢氧氩气混合气体 ($2\text{H}_2 + \text{O}_2 + 7\text{Ar}$, $P_0 = 6.67\text{kPa}$) 的爆轰胞格进行了数值分析, 并阐述了横波结构以及未反应气团对爆轰波阵面结构的影响。张德良等人应用二阶段化学反应模型和时空守恒格式对爆轰波在楔面反射过程进行了数值模拟^[5], 并分析了爆轰胞格结构的变化。

本文应用氢氧8组分20反应模型和频散可控耗散格式(DCD), 对爆轰波在预混气体中的传播过程以及与楔面的相互作用进行了数值模拟, 并和实验结果

进行了比较。

1 物理和数学模型

1.1 物理问题

如图1所示, 在一管内充满可燃气体混合物, 左端设一个起爆源, 在右端放置一楔面。利用高温高压点火区直接点爆可燃混合气体, 形成稳定传播的平面爆轰波, 此爆轰波到达楔面后将发生马赫发射或规则反射。

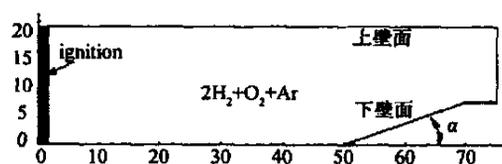


图1 氢氧爆轰波在楔面上反射问题示意图

Fig. 1 Sketch of detonation wave reflecting over a wedge

1.2 控制方程

对于多组分气相爆轰波的反应与传播过程, 在不考虑扩散效应, 忽略热传导和粘性作用的条件下, 二维平面坐标系中的 Euler 方程组为:

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

* 收稿日期: 2003-10-12; 修订日期: 2004-01-05.

基金项目: 国家自然科学基金和中国工程物理研究院联合资助(10276035).

作者简介: 胡宗民(1970-), 男, 博士生, 主要从事高温气动实验研究.

其中矩阵 U、F、G、S 分别为守恒型变量、x 和 y 方向的通量向量和化学反应源项,对包含 ns 种反应组分的可燃气体来说,它们分别为:

$$\begin{aligned}
 U &= \begin{bmatrix} C_1 \\ C_2 \\ \dots \\ C_{ns} \\ m \\ n \\ E \end{bmatrix} & F &= \begin{bmatrix} mC_1 \\ mC_2 \\ \dots \\ mC_{ns} \\ m^2/ + p \\ mn/ \\ (E + p) m/ \end{bmatrix} \\
 G &= \begin{bmatrix} nC_1 \\ nC_2 \\ \dots \\ nC_{ns} \\ mn/ \\ n^2/ + p \\ (E + p) n/ \end{bmatrix} & S &= \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ \dots \\ ns \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (2)
 \end{aligned}$$

在以上各式中 $C_i (i = 1, \dots, ns)$ 、 ρ_i 分别为第 i 组分的质量分数和分密度,且有 $\sum_{i=1}^{ns} C_i = 1, C_i = \rho_i / \rho$; $m = u, n = v, u, v$ 分别为 x 和 y 方向的速度分量;单位体积总能 $E = h - p + (u^2 + v^2)/2$,其中, h, p 分别为混合气体的比焓和压力, R_i 为第 i 种组分的气体常数, T 为混合气体温度; \dot{w}_i 为第 i 组分的单位体积质量生成率。组分 i 的无量纲焓值以及后面用到的定压比热的温度多项式拟合公式如下:

$$\begin{aligned}
 h_i / R_i T &= - a_{1i} T^{-2} + a_{2i} T^{-1} \ln T + a_{3i} + a_{4i} T/2 + \\
 &+ a_{5i} T^2/3 + a_{6i} T^3/4 + a_{7i} T^4/5 + b_{1i} T^{-1} \quad (3)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 C_p / R_i &= a_{1i} T^{-2} + a_{2i} T^{-1} + a_{3i} + \\
 &+ a_{4i} T + a_{5i} T^2 + a_{6i} T^3 + a_{7i} T^4 \quad (4)
 \end{aligned}$$

其中各拟合常数及温度适应范围见文献[6]。

1.3 基元化学反应模型

对于氢氧预混气体的爆轰反应过程,本文采用 8 种组分 20 个基元反应模型描述其化学反应机制,相关组分为: $H_2, O_2, O, H, OH, HO_2, H_2O_2, H_2O$, 另外还加入了 Ar 作为缓冲气体,化学反应式可以统一写为:

$$\sum_{s=1}^{ns} a_{ji} \overset{kf_j}{\underset{kb_j}{\rightleftharpoons}} \sum_{s=1}^{ns} b_{ji} \quad i \quad j = 1, nr \quad (5)$$

式中 a_{ji}, b_{ji}, i 分别为第 j 反应中第 i 组分作为反应物或产物的化学反应计量系数和元素符号, kf_j, kb_j 分别为正、逆反应速率常数, kf_j 由 Arrhenius 公式给出,而 kb_j 根据反应平衡常数 ke_j 和正反应速率常数 kf_j 求出,其中 A_j, n_j, Ea_j 分别为第 j 反应的指前系数、温度指数和反应活化能,

$$kf_j = A_j T^{n_j} \exp[-Ea_j / RT] \quad (6)$$

由基元反应的质量作用定律可以得到第 i 组分的单位体积的质量生成率:

$$\begin{aligned}
 \dot{w}_i &= W_i \sum_{j=1}^{nr} (b_{ji} - a_{ji}) \left\{ \prod_{i=1}^{ns} [X_i]^{j_i} \right\} \cdot \\
 &\left[kf_j \prod_{i=1}^{ns} [X_i]^{a_{ji}} - kb_j \prod_{i=1}^{ns} [X_i]^{b_{ji}} \right] \quad (7)
 \end{aligned}$$

其中 $[X_i]$ 为第 i 组分的摩尔浓度, j_i 为第 j 反应中组分 i 的三体效应系数。基元化学反应动力学参数见表 1。其中相关单位为 mole、s、cm、K、cal, 三体效应系数: (5) $H_2O = 18.6, H_2 = 2.86$; (10) $H_2O = 0, H_2 = 0$; (13) $H_2O = 5.0$; (14) $H_2O = 5.0$; 其它为 1.0。

表 1 $H_2 + O_2$ 8 组分 20 反应模型

Table 1 $H_2 + O_2$ detailed chemical reacting model with eight species and twenty reaction

基元反应式	A	n	Ea	基元反应式	A	n	Ea
1 $H_2 + O_2 = 2OH$	1.70×10^{13}	0.0	47780	11 $H + H + H_2 = H_2 + H_2$	9.20×10^{16}	-0.6	0
2 $OH + H_2 = H_2O + H$	1.17×10^9	1.3	3626	12 $H + H + H_2O = H_2 + H_2O$	6.00×10^{19}	-1.3	0
3 $O + OH = O_2 + H$	4.00×10^{14}	-0.5	0	13 $H + OH + M = H_2O + M$	1.60×10^{23}	-2.0	0
4 $O + H_2 = OH + H$	5.06×10^4	2.7	6290	14 $H + O + M = OH + M$	6.20×10^{16}	-0.6	0
5 $H + O_2 + M = HO_2 + M$	3.61×10^{17}	-0.7	0	15 $O + O + M = O_2 + M$	1.89×10^{13}	0.0	-1788
6 $OH + HO_2 = H_2O + O_2$	7.50×10^{12}	0.0	0	16 $H + HO_2 = H_2 + O_2$	1.25×10^{13}	0.0	0
7 $H + HO_2 = 2OH$	1.40×10^{14}	0.0	1073	17 $HO_2 + HO_2 = H_2O_2 + O_2$	2.00×10^{12}	0.0	0
8 $O + HO_2 = O_2 + OH$	1.40×10^{13}	0.0	1073	18 $H_2O_2 + M = 2OH + M$	1.30×10^{17}	0.0	45500
9 $2OH = O + H_2O$	6.00×10^8	1.3	0	19 $H_2O_2 + H = HO_2 + H_2$	1.60×10^{12}	0.0	3800
10 $H + H + M = H_2 + M$	1.00×10^{18}	-1.0	0	20 $H_2O_2 + OH = H_2O + HO_2$	1.00×10^{13}	0.0	1800

1.4 温度迭代求解

在化学反应流的计算中,温度不能显式地给出,它需要根据能量方程和混合物状态方程联合求解,由此两方程消去压力,可以得到关于各守恒型未知变量和温度的函数关系式(8),因为组分焓值是温度的超越函数,该方程无法直接求解,需要迭代计算,迭代函数为

$$F(1, \dots, i, \dots, ns, m, n, E, T) = \sum_{i=1}^{ns} i h_i - \left(E - \frac{m^2 + n^2}{2} \right) - \sum_{i=1}^{ns} i R_i T = 0 \quad (8)$$

采用牛顿迭代法计算时需要迭代函数对温度的偏导数

$$F = \sum_{i=1}^{ns} i C_{p_i} - \sum_{i=1}^{ns} i R_i = \sum_{i=1}^{ns} C_i C_{p_i} - \sum_{i=1}^{ns} C_i R_i = (C_p - R) \quad (9)$$

其中 C_p , R 分别为混合物的定压比热和气体常数,由于 $C_p > R$, 则 $F > 0$, 函数 F 为单调递增函数,因此温度解是唯一的,可以应用牛顿迭代算法来求解方程(8)。

1.5 数值方法

Jiang 等人在 1995 年提出的频散可控格式(DCS)^[7],该格式应用了 Steger-Warming 的矢通量分裂技术,从修正方程的色散控制出发构造差分格式,具有格式构造简单、激波分辨率高、计算量小等优点。后来 Jiang 给该格式重新命名为频散可控耗散格式(DCD),以便与传统的耗散格式加以区别。由于化学反应的特征时间尺度比流动小得多,计算时通常出现刚性问题,处理刚性问题的方法有很多,本文采用时间算子分裂的方法。

2 数值结果的验证

图 2 给出了在直管中爆轰波的直接起爆并形成稳定爆轰的过程,混合气体为 $2H_2 + O_2 + Ar$, $P_0 = 16kPa$, $T_0 = 298K$ 。在 $t = 6.5\mu s$ 时刻,爆轰迅速建立,但是还不稳定,爆压缓慢增长,并逐渐趋于一个平稳值,形成稳定传播的爆轰波。计算得到的爆速 $D = 2257m/s$,这和 C-J 爆速 $D_{CJ} = 2240m/s$ 是很接近的,表明计算结果是合理的。

图 3 给出了可燃混合气体 ($2H_2 + O_2 + Ar$, $P_0 = 20kPa$, $T_0 = 298K$) 中爆轰波在楔面反射的数值纹影

和实验纹影的比较,其中图 3 (a) 对应楔角为 30° 的情况,图 3 (b) 对应楔角为 60° 的情况,前者为马赫反射,而后者为规则反射。图中,上半部分是实验结果,下半部分为计算结果,通过比较可以看出,两者吻合较好。图 3(a) 中给出了爆轰波马赫反射的三波点轨迹角。

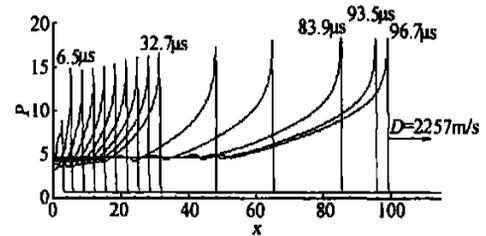


图 2 爆轰的起爆过程(图中 P 为无量纲压力)

Fig. 2 The numerical detonation setup process

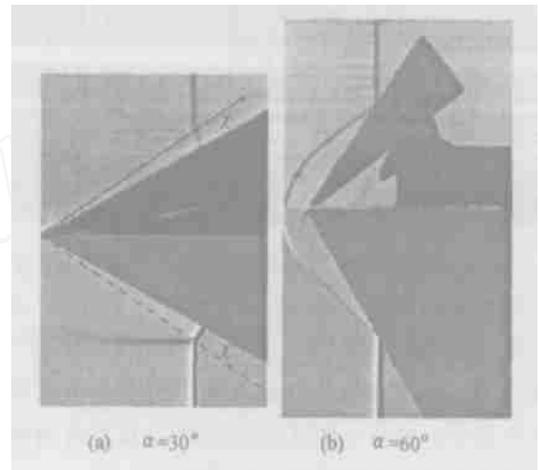


图 3 爆轰波楔面反射数值纹影(下)和实验纹影(上)^[2]

Fig. 3 Numerical (lower half) and experimental^[2](upper half) schlieren of detonation reflection over a wedge

3 数值结果与分析

数值计算区域见图 1,计算中左端和上、下壁面边界应用了滑移边界条件,而在管出口处则为超声速出口条件。在初始时刻,整个区域内充满可燃混合气体 $2H_2 + O_2 + Ar$,同时在最左端设置一高温高压点火区, $P_{ign} = 18 P_0$, $T_{ign} = 11 T_0$,在较短的时间内,形成稳定传播的爆轰波。

3.1 爆轰波在楔面反射

爆轰波在楔面上反射过程中,随着楔角的增大将由马赫反射向规则反射转变,本文首先选用可燃混合气体 $2H_2 + O_2 + Ar$ ($P_0 = 16kPa$, $T_0 = 298K$),对此过程进行了数值模拟,分别考虑了 20° 、 30° 、 40° 、 46° 、 50° 共

5 种楔角。计算结果表明,前四种情况为马赫反射,三波点的轨迹与楔面的夹角随着楔角的增大逐渐减小,依次为 10.5°、6.5°、2.9° 和 0.9°,而最后一种为规则反射。这说明,爆轰波由马赫反射向规则反射转变的临界角 α_c 约在 46 与 50 之间。

文献 [1] 应用烟迹实验技术对氢氧混合气体的爆轰波在楔面上反射进行了大量的实验,分析了马赫反射的三波点轨迹,测得转变临界角约在 50 到 53 之间。文献 [3] 应用 CCW (Chester-Chisnell-Whitham) 近似理论给出了转变临界角约在 46°~50 之间。图 4 给出了爆轰波在楔面上反射过程三波点轨迹的 χ 角与楔角的关系,并对实验结果、计算结果和理论分析 (CCW) 的结果进行了比较,结果表明三者基本一致。由于数值计算的精度有限,而且受化学反应模型的限制,计算结果和实验还存在一些差距,特别是小楔角情形,但是,数值模拟比近似理论更接近实验结果。

在保持楔角 $\alpha = 19.3^\circ$ 不变的条件下,本文分别计算了初始压力 $P_0 = 16、20、24$ 和 28 (kPa) 四种情况,以分析混合物初始压力对爆轰波在楔面上反射的三波点轨迹 χ 角的影响。图 5 给出了三波点轨迹 χ 角与初始压力的变化关系,其中包括实验结果、CCW 理

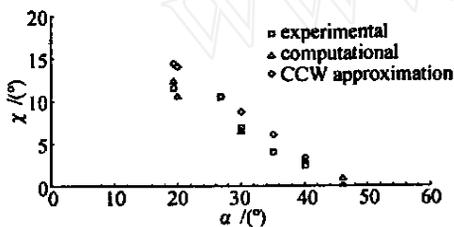


图 4 爆轰波楔面反射三波点轨迹 χ 角与楔角的关系
(混合物: $2H_2 + O_2 + Ar$, $P_0 = 16\text{kPa}$, $T_0 = 298\text{K}$)

Fig. 4 Trajectory angle vs. wedge angle for detonation waves reflection over wedges in mixture of $2H_2 + O_2 + Ar$, $P_0 = 16\text{kPa}$, $T_0 = 298\text{K}$

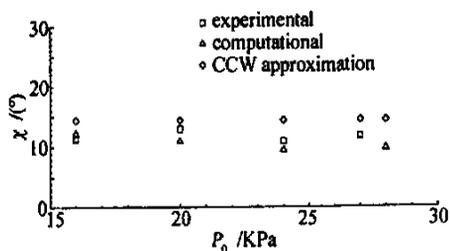


图 5 三波点轨迹角 χ 与初压 P_0 (kPa) 的关系

Fig. 5 Trajectory angle (χ) vs. initial pressure P_0 (kPa)

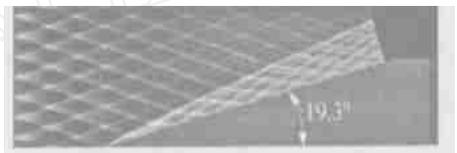
论近似结果和数值模拟的结果。从图中的三种方法得到的结果可以看出,初始压力对 χ 角有一些影响,但影响不大;对于相同成分的可燃混合气体来说,三波点轨迹 χ 角主要受楔角控制,实验 [1] 也有类似的结论。

3.2 爆轰波细微结构和胞格结构

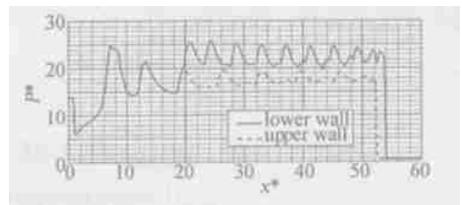
大量的实验表明实际的爆轰波具有复杂的横波结构和三波对撞过程,爆轰波经过烟熏膜片会留下“菱形”或“鱼鳞形”的痕迹,这就是爆轰胞格 (Detonation Cell) ——三波点轨迹,见图 6(a)。爆轰波阵面结构由前导激波与横波构成,前导激波又包括入射激波和马赫杆。在爆轰波的传播过程中,形成前导激波的入射激波和马赫杆通过三波对撞过程交替转换,构成



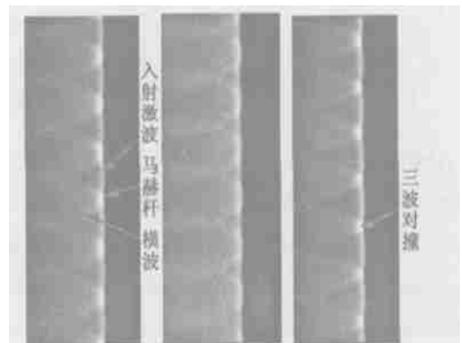
(a) 爆轰波马赫反射实验烟迹图



(b) 爆轰波马赫反射数值胞格结构 ($t = 67.1\mu\text{s}$)



(c) 沿上、下壁面附近贯穿各胞格的压力分布



(d) 爆轰波传播过程的阵面结构演化

(时间间隔依次为 $0.8\mu\text{s}$ 、 $1.8\mu\text{s}$)

图 6 爆轰波的多波结构

(混合物: $2H_2 + O_2 + Ar$, $P_0 = 24\text{kPa}$, $T_0 = 298\text{K}$, 楔角 $\alpha = 19.3^\circ$)

Fig. 6 Multi-wave structure of detonation wave

爆轰胞格的重复性图案。

图6(b)给出了爆轰波在楔面上反射过程的数值胞格结构,与实验烟迹图6(a)基本一致;图6(c)是沿上下壁面贯穿胞格的极值压力的分布,可以看出在下壁面附近由于马赫反射的影响,在马赫杆扫过的区域内,压力明显升高,数值胞格结构更加细致,并且与未受马赫杆影响的区域之间存在着明显的过渡线——三波点轨迹;图6(d)则给出了爆轰波阵面的演化过程,可以看出与同一入射激波相交的相邻两横波迎面运动,而与同一马赫杆相交的两横波则相互远离,三波不断汇聚对撞,对撞后马赫杆演变为新的入射激波,原来的入射激波则演变为新的马赫杆,如此交替转变,不断重复。

4 结论

本文应用基元反应模型和频散可控耗散格式(DCD)对可燃混合气体 $2\text{H}_2 + \text{O}_2 + \text{Ar}$ 的爆轰波在楔面上反射过程进行了数值模拟并与实验结果进行了比较,得到以下结论:(1)计算结果表明,随着楔角的增大,爆轰波在楔面上反射由马赫反射向正规反射转变,其转变临界角在 46° 与 50° 之间,计算结果和理论分析以及实验结果进行了比较,三者基本一致。(2)三波点轨迹角的大小受混合物初始压力的影响不大,而主要取决于楔角。(3)数值模拟能够描述爆轰波阵面的横波结构和三波对撞过程。

参 考 文 献:

- [1] GUO C M, ZHANG D L, XIE W. The Mach reflection of a detonation based on soot track measurements[J]. *Combustion and Flame*, 2001, 127:2051-2058.
- [2] THOMAS G O, WILLIAMS R L. Detonation interaction with wedges and bends [J]. *Shock Waves*, 2002, 11: 481-492.
- [3] NETTLETON M A. Gaseous detonation: Their nature, effects and control [M]. Chapman and Hall, London, 1987, 136-172.
- [4] 胡湘渝. 气相爆轰波结构研究[D]. [博士后工作报告], 中国科学院力学研究所, 2001, 11. (HU Xiangyu. On the structures of gaseous detonation waves [D]. [Post doctor work report]. The Institute of Mechanics, Chinese Academy of Sciences, 2001.
- [5] 张德良, 谢巍, 郭常铭, 胡湘渝. 气相爆轰波胞格结构和马赫反射数值模拟[J]. 爆炸与冲击, 2001, 21(3): 161-167. (ZHANG Deliang, XIE wei, GUO Changming, HU Xiangyu. Numerical simulation of cellular structures and Mach reflection of gaseous detonation waves [J], *Explosion and Shock Waves*, 2001, 21(3): 161-167.)
- [6] MCBRIDE B J, ZEHLE M J, SANFORD G. Genn coefficients for calculating thermodynamic properties of individual species [R]. NASA/TP-2002-211556, 2002.
- [7] JIANG Z L, TAKAYAMA K, CHEN Y S. Dispersion conditions for non-oscillatory shock capturing schemes and its applications [J]. *Comp. Fluid Dynamics Journal*, 1995, 4: 137-150.

Numerical simulation of gaseous detonation waves propagation and comparison with experimental results

HU Zong-min¹, SUN Yu-feng², GUO Chang-ming³, ZHANG De-liang¹

(1. Key laboratory of High Temperature Gas Dynamics, Institute of Mechanics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100080, China; 2. ME Dept. University of Connecticut, Storrs, CT06268, USA; 3. University of China Science and Technology, Hefei 230027, China)

Abstract: In this paper, the chemically reacting flow-field induced by detonation waves propagation is simulated with CFD methods. The dispersion-controlled dissipative scheme (DCD) is adopted to solve two-dimensional Euler equations implemented with detailed chemical reaction kinetics of hydrogen-oxygen-argon mixture. The fractional step method is applied to treat the stiff problem. For validation and verification, computational results are compared with experimental schlieren and nice agreement is obtained. The triple-point trajectories and the critical wedge angle θ_{cr} are measured experimentally, analytically and numerically. From numerical results it is observed that the critical wedge angle θ_{cr} for the transition from

(下转第 194 页)

Experimental investigations of lateral jet interaction in hypersonic flows

ZHAO Gui-lin , PENG Hui , HU Liang , ZHANG Mian-chun

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

Abstract : Experimental investigations of the lateral jet interaction have been performed in hypersonic flows ($M = 6$) to study the effects of jet pressures , angle of attacks , leeward side jet or windward side jet on the jet interaction characteristics. The results indicated that the interaction flowfields of the lateral jet in hypersonic flows included the high pressure region and shock waves before the lateral jet , the low pressure region induced by the jet after the lateral jet and the wraparound effect region , these regions determined the interaction characteristics of the lateral jet . In hypersonic flow , with increasing of jet pressures , the jet bow shock intersected with the freestream bow shock , the high pressure region before lateral jet extended forward , but the low pressure region almost unchanged , so the jet interaction control were enhanced. In the case of angle of attacks , the high pressure region before the leeward jets enlarged , and the jet interaction control of leeward jet was more effective than the windward jets.

Key words : lateral jet ; jet control ; jet interaction ; hypersonic flow

(上接第 182 页)

Mach reflection to regular reflection is very close to the experimental data. The numerical results also show that the angle () of triple-point trajectory mainly depends on wedge angle () and is not sensitive to variation of the initial pressure P_0 . In addition , the detailed cellular structures are also simulated to demonstrate the evolution of multi-wave front structure of a detonation wave and the mechanism of the formation of triple-point when a detonation front reflects over a wedge.

Key words : detonation wave ; wedge ; cell ; soot ; detailed chemically reacting model