

气相爆轰波基元反应模型数值模拟

胡宗民, 张德良, 刘长礼, 姜宗林

(中国科学院力学研究所, 北京 100080)

摘要: 应用频散可控格式和基元反应模型计算了氢气-氧气和氢气-空气混合物的爆轰波一维结构, 并对爆轰波在二维轴对称突扩截面管内的传播过程进行了数值模拟。采用算子分裂的方法来处理化学反应的刚性问题。计算结果表明, 频散可控格式可以精确捕捉爆轰波及其反射过程。爆轰波在突扩截面处绕射, 由于稀疏波的作用而引起局部熄爆现象。数值结果还反应出, 在一定条件下, 熄爆区域可以二次起爆, 而且二次起爆过程与可燃混合气体的敏感度有关, 对于敏感度高的可燃气体, 由于爆轰波具有较强的自持能力, 其波阵面在绕射过程中所产生的局部熄爆区后会自动再次起爆, 维持爆轰波的自持耦合结构; 而敏感度较低的可燃气体, 只有爆轰波在壁面反射形成局部高温高压区后才会重新起爆。

关键词: 爆轰波; 基元反应模型; 频散可控格式; 数值模拟

Numerical Simulation of Gaseous Detonation Wave with Detailed Chemical Reaction Model

HU Zong-min, ZHANG De-liang, LIU Chang-li, JIANG Zong-lin

(LHD Institute of Mechanics CAS, Beijing 100080)

Abstract: In this paper, the transition of a detonation from deflagration was investigated numerically while a detonation wave propagates in a tube with a sudden change in cross section, referred to as the expansion cavity. The dispersion-controlled scheme was adopted to solve Euler equations of axis-symmetric flows implemented with detailed chemical reaction kinetics of hydrogen-oxygen (or hydrogen-air) mixture. The fractional step method was applied to treat the stiff problems of chemical reaction flow. For validation and verification, computational results were compared with experimental results firstly, and nice agreement was obtained. It is observed that phenomena of detonation quenching and reigniting appear when the planar detonation front diffracts at the vertex of the expansion cavity entrance. In order to illustrate the effects of sensitivity of detonable mixture on the process of quenching and reigniting, five kinds of mixture of different composition or of various initial pressures were considered as the initial combustible gas. Numerical results show that detonation front in mixture of higher sensitivity reignites directly when it propagates into the expansion cavity and keeps its substantial coupled structure all along. However, the leading shock wave decouples with the combustion zone if mixture of lower sensitivity was set as the initial gas. In addition, the computation demonstrated that the dispersion-controlled scheme is capable of simulating the detonation wave well, which has virtues of simple structure, high resolution and saving-time.

Key words: detonation wave; detailed reaction model; dispersion-controlled scheme; CFD

1 引言

爆轰波是一种激波和化学反应耦合的强间断, 它和结构物的相互作用机理一直是国防、工业安全和基础实验研究中的一项重要课题, 国内外对它已做了实验研究^[1, 2]和数值模拟工作^[3]。

描述爆轰波的简化模型主要有 CJ 模型和 ZND 模型。前者把爆轰波简化为反应物和产物之间的强间

断, 认为反应速率无限大, 即不考虑爆轰波的反应机制, 反应物和产物都处于平衡状态; 而后者则把爆轰波处理为前导激波和紧跟其后的反应区的耦合结构, 并认为反应在声速面 (CJ 面) 达到平衡。ZND 模型比 CJ 模型更为精确, 它引入了爆轰波的有限速率反应机制和自维持传播机制, 即前导激波压缩反应物诱导强烈的放热反应, 反应放热反过来又提供能量维持前导激波传播, 爆轰波结构存在一个由化学反应速率决定的特征尺度, 即反应区厚度。真实的爆轰波阵面具有复杂的三维结构, 并且具有内在的不稳定性。

爆轰波数值模拟的特点是要考虑化学反应的机制, 其中有早期的单步反应和二步反应模型, 以及近年来发展起来的基元反应模型。前两者能够较好地描述爆轰波的结构, 而且计算量较小, 但很难说明真实化学反应的具体机制; 而后者则能描述真实的反应过程, 能够解释许多爆轰反应现象, 但是由于描述同一混合物反应过程的中间组分数目和反应个数难以确定, 同时又存在着刚性问题 (即各基元反应的特征时间尺度相差悬殊, 以及基元反应与流动的时间尺度也可能相差很大), 计算的难度很大。为了处理化学反应刚性问题, 必须应用特殊的计算方法, 其中有解耦算法 (算子分裂算法)、点隐法和全隐法, 这些方法都使计算量相应加大。随着计算机性能的迅速提高, 以及对可燃气体混合物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]计算了一维爆轰波结构, 文献[5]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的影响。

本文应用频散可控格式和 11 组分、23 个反应的基元反应模型首先对氢气-空气混合物爆轰波的一维结构进行了数值模拟, 并和实验结果作了比较; 然后计算了爆轰波在二维轴对称突扩截面管中的传播过程, 根据爆轰波反应区和前导激波的分离和耦合机理, 讨论了爆轰波在突扩截面处, 因为绕射而发生局部熄爆和二次起爆的现象, 并分析了可燃混合气体的敏感度对熄爆和二次起爆现象的影响。

2 物理和数值模型

2.1 物理问题

爆轰波在突扩截面管内传播问题如图 1 所示, 直径为 $d=20\text{mm}$, 长为 40mm 的爆轰管的尾部连接一个直径为 $D=60\text{mm}$, 长为 100mm 的扩容腔, 在爆轰管和扩容腔内充满可燃气体如氢气-氧气或氢气-空气混合物, 不考虑可燃气体的 DDT 过程, 利用高温高压点火区直接点爆可燃混合气体, 在爆轰管内很快形成一稳定传播的平面爆轰波。在扩容腔入口, 由于截面突然变大, 爆轰波在拐角绕射, 平面波阵面逐渐演变为球面波阵面。

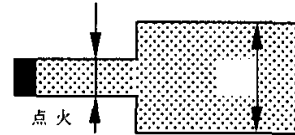


图 1. 计算区域示意图

Fig.1 the computational domain

2.2 控制方程

对于多组分气相爆轰反应与传播过程, 可以不考虑组分扩散、热传导和粘性作用, 此时, 在二维轴对称坐标系下的 Euler 方程组可以统一写为:

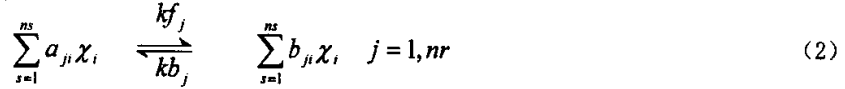
$$\frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial F(U)}{\partial x} + \frac{\partial G(U)}{\partial r} + \frac{1}{r} S_g(U) = S(U) \quad (1)$$

式中: $U = (\rho_1, \rho_2, \dots, \rho_{ns}, \rho u, \rho v, E)^T$, $F(U) = (\rho_1 u, \rho_2 u, \dots, \rho_{ns} u, \rho u^2 + p, \rho uv, (E + p)u)^T$, $G(U) = (\rho_1 v, \rho_2 v, \dots, \rho_{ns} v, \rho uv, \rho v^2 + p, (E + p)v)^T$, $S(U) = (w_1, w_2, \dots, w_1, 0, 0, 0)^T$, 在以上各式中 $\rho_i (i=1, \dots, ns)$ 为第 i 组分的分密度, $\rho = \sum_{i=1}^{ns} \rho_i$; u 、 v 为 x 、 r 向的速度; E 为单位体积总能, $E = e + \rho(u^2 + v^2)/2$, e 为单位体积内能, $e = \rho h - p$, $h = \sum_{i=1}^{ns} h_i$, 组分 i 的焓值 h_i 由文献[6]中的多项式拟和的方法给出; p 为理想混合气体的压力, $p = \sum_{i=1}^{ns} \rho_i R_i T$, R_i 为第 i 种组分的气体常数; w_i 为

第 i 组分的单位体积的质量生成率。

2.3 基元化学反应模型

对于氢氧相爆轰，本文采用 11 种组分 23 个基元反应模型其化学反应机制，相关组分为： H_2 、 O_2 、 O 、 H 、 OH 、 HO_2 、 H_2O_2 、 H_2O 、 N_2 、 N 、 NO ，其化学反应式可以统一写为：



式中 a_{ji} 、 b_{ji} 、 χ_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 一般根据反应平衡常数 ke_j 和 kf_j 求出。

$$kf_j = C_j T^{n_j} \exp[-E_j / RT] \quad (3)$$

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：

$$w_i = \left\{ \sum_{j=1}^{nr} \lambda_{ji} [X_i] \right\} \left(kf_j \prod_{i=1}^{ns} [X_i]^{a_{ji}} - kb_j \prod_{i=1}^{ns} [X_i]^{b_{ji}} \right) \quad (4)$$

$[X_i]$ 为第 i 组分的摩尔浓度， λ_{ji} 为第 j 反应中组分 i 的三体效应系数。基元化学反应参数见表 1。

2.4 数值方法

Z. L. Jiang 等在 1995 年提出的频散可控格式^[7]，并应用单步化学反应进行了爆轰波数值计算^[8,9]，该格式基于 Steger & Warming 的矢量通量分裂技术，具有格式构造简单、激波分辨率高、计算量小等优点。本文把该方法推广到用基元反应描述的爆轰波流场数值模拟。由于化学反应的时间尺度比流动时间尺度小得多，故采用算子分裂的方法来解决微分方程的刚性问题，可以把求解对流偏微分方程的时间步长进一步细分后，作为在积分化学反应刚性常微分方程的时间步长。

2.5 初边值条件

本文对 5 种不同的混合气体进行了计算，它们的初始条件为：爆轰管和扩容腔内充入可燃混合气体，有 (1) $2H_2+O_2+4N_2$ ， $P_0=101.3\text{kPa}$ ， $T_0=298\text{K}$ ；(2) $4H_2+O_2+4N_2$ ， $P_0=60\text{kPa}$ ， $T_0=298\text{K}$ ；(3) $2H_2+O_2$ ， $P_0=60\text{kPa}$ ， $T_0=298\text{K}$ ；(4) $4H_2+O_2+4N_2$ ， $P_0=50\text{kPa}$ ， $T_0=298\text{K}$ ；(5) $4H_2+O_2+4N_2$ ， $P_0=40\text{kPa}$ ， $T_0=298\text{K}$ 共 5 种情况，点火区为高温高压区，给定温度 $P=30P_0$ ， $T=10T_0$ 。边界条件为：所有壁面均采用无催化、滑移刚壁条件，轴对称中心线采用对称条件。其中加入 N_2 作为缓冲气体可以使气体的敏感度降低，而提高初始压力 P_0 又可以提高混合气体的敏感度。

表 1 H_2/Air 11 组分 23 反应模型

| | 基元反应式 | 速率常数 A | 温度指数 n | 活化能 Ea |
|----|------------------------|-----------------------|--------|---------|
| 1 | $H_2+O_2=2OH$ | 1.70×10^{13} | 0.0 | 47780.0 |
| 2 | $OH+H_2=H_2O+H$ | 1.17×10^{13} | 1.3 | 3626.0 |
| 3 | $O+OH=O_2+H$ | 4.00×10^{13} | -0.5 | 0.0 |
| 4 | $O+H_2=OH+H$ | 5.06×10^{13} | 2.7 | 6290.0 |
| 5 | $H+O_2+M=HO_2+M$ | 3.61×10^{13} | -0.7 | 0.0 |
| 6 | $OH+HO_2=H_2O+O_2$ | 7.50×10^{13} | 0.0 | 0.0 |
| 7 | $H+HO_2=2OH$ | 1.40×10^{13} | 0.0 | 1073.0 |
| 8 | $O+HO_2=O_2+OH$ | 1.40×10^{13} | 0.0 | 1073.0 |
| 9 | $2OH=O+HO_2$ | 6.00×10^{13} | 1.3 | 0.0 |
| 10 | $H+H+M=H_2+M$ | 1.00×10^{13} | -1.0 | 0.0 |
| 11 | $H+H+H_2=H_2+H_2$ | 9.20×10^{13} | -0.6 | 0.0 |
| 12 | $H+H+H_2O=H_2+H_2O$ | 6.00×10^{13} | -1.3 | 0.0 |
| 13 | $H+OH+M=H_2O+M$ | 1.60×10^{13} | -2.0 | 0.0 |
| 14 | $H+O+M=OH+M$ | 6.20×10^{13} | -0.6 | 0.0 |
| 15 | $O+O+M=O_2+M$ | 1.89×10^{13} | 0.0 | -1788.0 |
| 16 | $H+HO_2=H_2+O_2$ | 1.25×10^{13} | 0.0 | 0.0 |
| 17 | $HO_2+HO_2=H_2O_2+O_2$ | 2.00×10^{13} | 0.0 | 0.0 |
| 18 | $H_2O_2+M=OH+OH+M$ | 1.30×10^{13} | 0.0 | 45500.0 |
| 19 | $H_2O_2+H=HO_2+H_2$ | 1.60×10^{13} | 0.0 | 3800.0 |
| 20 | $H_2O_2+OH=H_2O+HO_2$ | 1.00×10^{13} | 0.0 | 1800.0 |
| 21 | $O+N_2=NO+N$ | 1.40×10^{13} | 0.0 | 75800.0 |
| 22 | $N+O_2=NO+O$ | 6.40×10^{13} | 1.0 | 6280.0 |
| 23 | $OH+N=NO+H$ | 4.00×10^{13} | 0.0 | 0.0 |

单位: mole、s、cm、K、cal

三体效应系数: (5) $H_2O=18.6$, $H_2=2.86$, $N_2=1.26$; (10) $H_2O=0$, $H_2=0$;

3 数值计算结果

3.1 一维计算结果

为了验证数值方法和程序的可靠性,对第(1)种可燃混合气体 $2\text{H}_2+\text{O}_2+4\text{N}_2$, $P_0=101.3\text{kPa}$, $T_0=298\text{K}$ 中的爆轰波一维结构进行了数值模拟,得到压力曲线和温度曲线(如图2),计算得到爆速 $D=1941\text{m/s}$,爆轰波的峰值压力 $P_{\text{pk}}=2.5\text{MPa}$,文献[10]中给出的相应值分别为 1971.4m/s 和 2.8MPa ,数值和实验结果符合得较好。由图2(b)可以看出,可燃混合气体在前导激波后的反应区内的浓度很高,此处的温度也很高,因此化学反应主要集中在该区,得以迅速放出热量维持爆轰波的自持耦合结构。

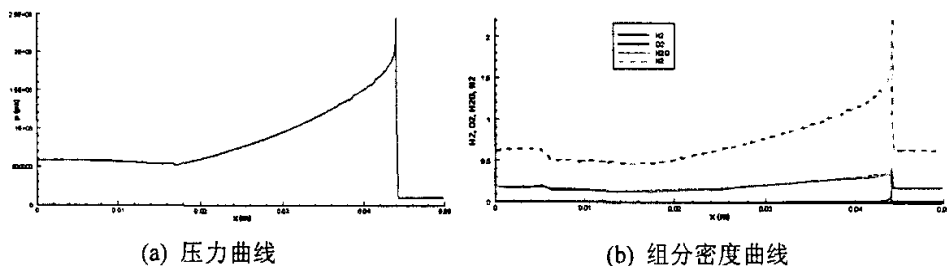


图2. 一维爆轰波结构

Fig.2 Structure of 1-D detonation wave (a) pressure (b) partial density of species

3.2 二维计算结果

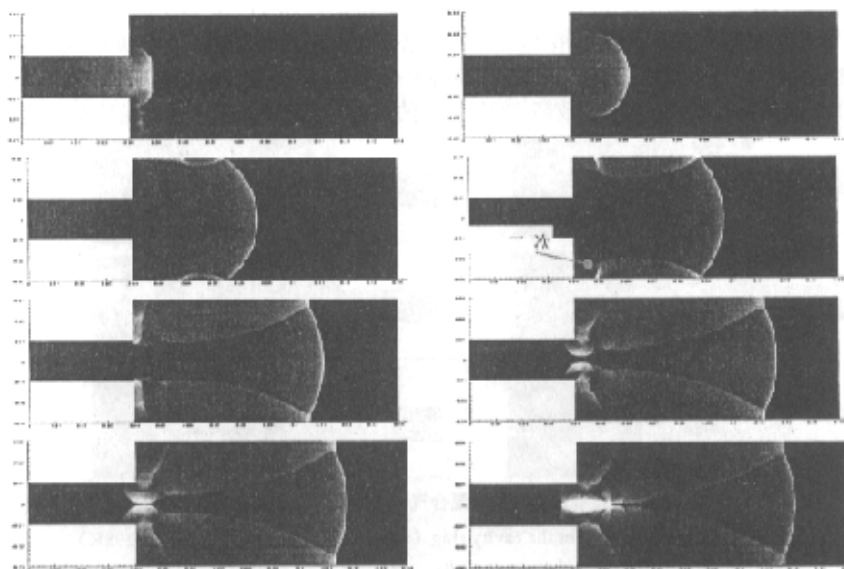


图3. 爆轰波传播过程压力分布(混合气体: $2\text{H}_2+\text{O}_2+4\text{N}_2$, $P_0=60\text{kPa}$, $T_0=298\text{K}$)

Fig.3 Pressure distribution in the cavity ring(mixture: $2\text{H}_2+\text{O}_2+4\text{N}_2$, $P_0=60\text{kPa}$, $T_0=298\text{K}$)

平面爆轰波由爆轰管向扩容腔传播,由于截面突然扩大,爆轰波在拐角绕射,其波阵面发生弯曲,引起爆轰波的强度瞬间减弱,使得前导激波和化学反应区分离解耦。如果可燃气体的敏感度较低,上述解耦过程将逐步积累,造成爆轰波局部熄爆。

为了说明前导激波和化学反应区局部分离解耦过程,我们以第(2)种混合气体 $2\text{H}_2+\text{O}_2+4\text{N}_2$, $P_0=60\text{kPa}$, $T_0=298\text{K}$ 作为初始可燃气体,图3给出了其中的爆轰波由爆轰管向扩容腔传播过程的压力分布。由于加

入了大量的氮气作为缓冲气体，混合气体的敏感度较低，爆轰波在扩容腔入口绕射后，在拐角处由于

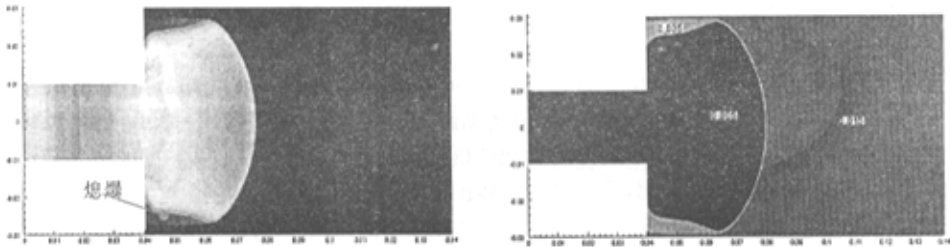


图 4. 爆轰波传播过程温度(a)和氢气密度(b)分布(混合气体:2H₂+O₂+4N₂, P₀=60kPa, T₀=298K)

Fig.4 temperature (a) and H₂(b) distribution (mixture:2H₂+O₂+4N₂, P₀=60kPa, T₀=298K)

稀疏波的作用而使拐角附近的爆轰波强度降低，前导激波和反应区逐渐分离解耦，在波后留下了一个未反应气体区，这从图 4a 温度和图 4b 氢气密度分布情况可以看得很清楚，在解耦部分，前导激波后的未反应气体区温度很低，几乎等于波前的环境气体的温度，而此区已被前导激波压缩，反应物密度相对较高，图 4b 中给出此区 H₂ 的密度为 0.035kg/m³，比波前值 0.015kg/m³ 高很多。爆轰波的中心部分没有退化和解耦，保持其耦合结构，但是爆轰波的强度有所降低。爆轰波向扩容腔内继续传播，继而在扩容腔侧壁反射，此反射波逐渐由规则反射转变为马赫反射，反射波再次引爆前导激波后已被压缩过的未反应气体，于是，在扩容腔侧壁面附近形成一个环形爆轰波（见图 3c 和 d），该爆轰波逆行上行到达扩容腔左侧端壁后反射，并在扩容腔入口处与涡环相互作用（见图 3e 和 f），形成局部高压区，此后在管心附近汇聚碰撞，使此处温度和压力急剧提高（见图 3g 和 h），足以引起氮气的离解反应。

对于没有氮气稀释而敏感度较高的第(3)种混合气体 2H₂+O₂, P₀=60kPa, T₀=298K, 爆轰波传播过程的压力分布在图 5 中给出。爆轰波在扩容腔入口绕射初期，前导激波和化学反应区也有瞬间分离的过程，但是由于此种可燃气体的敏感度较高，经过短暂的调整后，迅速恢复其耦合结构（见图 5a 和 b），

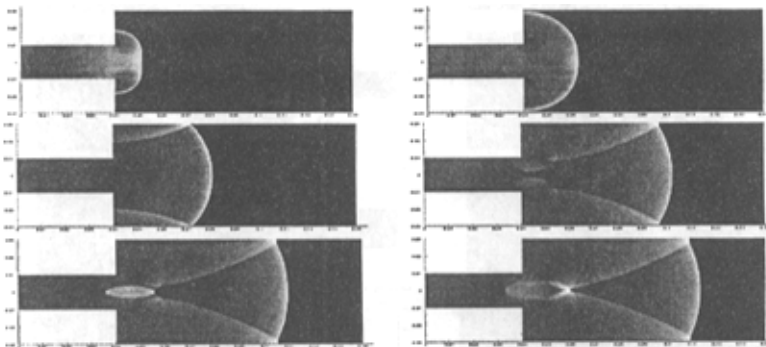


图 5. 爆轰波传播过程压力分布（混合气体:2H₂+O₂, P₀=60kPa, T₀=298K）

Fig.5 pressure distribution in the cavity ring (mixture:2H₂+O₂, P₀=60kPa, T₀=298K)

由此可见，在此种情况下没有局部熄爆想象发生。爆轰波前行，波阵面逐渐演变为球面，并在扩容腔侧壁反射，此反射波也逐渐由规则反射转变为马赫反射，使得爆轰波边缘处强度提高，球面波阵面逐渐向平面转变。

图 6 和图 7 分别给出了第(4)种混合气体 (2H₂+O₂+4N₂, P₀=50kPa, T₀=298K) 和第(5)种混合气体 (2H₂+O₂+4N₂, P₀=40kPa, T₀=298K) 为初始气体的爆轰波传播过程，从图 6 和图 7 压力和温度分布情况可以看出，由于初始压力降低而使可燃气体的敏感度降低，因此爆轰波在扩容腔入口绕射后，其边缘部分因稀疏波作用而减弱，出现了爆轰波的局部解耦，前导激波后留下大块未反应气体区，形成局部熄爆区。对于混合气体(4)，这个解耦过程只发生在局部，爆轰波中心的波头部分一直保持着耦合结构（见图 6）；而对于混合气体(5)，前导激波和化学反应区的解耦从爆轰波两侧向中心扩展，直到整个前导激

波阵面与其后的化学反应完全解耦分离，爆轰波完全熄爆，退化为爆燃波（见图7）。

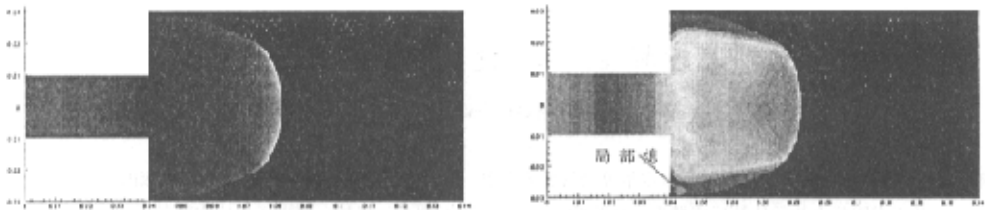


图6 爆轰波局部熄爆过程压力(a)和温度(b)分布 (可燃混合气体: $2\text{H}_2+\text{O}_2+4\text{N}_2$, $P_0=50\text{kPa}$, $T_0=298\text{K}$)

Fig.6 Process of detonation partial quench (mixture: $2\text{H}_2+\text{O}_2+4\text{N}_2$, $P_0=50\text{kPa}$, $T_0=298\text{K}$)

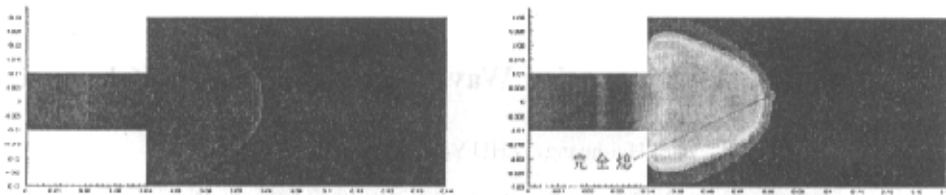


图7 爆轰波全熄爆过程压力(a)和温度(b)分布 (可燃混合气体: $2\text{H}_2+\text{O}_2+4\text{N}_2$, $P_0=40\text{kPa}$, $T_0=298\text{K}$)

Fig.7 Process of detonation entire quench (mixture: $2\text{H}_2+\text{O}_2+4\text{N}_2$, $P_0=40\text{kPa}$, $T_0=298\text{K}$)

4 结束语

本文首次将文献[7]提出的数值格式推广到用基元反应描述的爆轰波流场的数值模拟，得到了比较好的计算结果，说明该格式具有格式简单、分辨率高、计算精度高和计算速度快等优点。本文还比较了不同成分和不同敏感度可燃混合气体的爆轰波在变截面管内传播过程，说明了爆轰波传播过程中熄爆和二次起爆的形成机理，这可以加深理解爆轰波在管道内传播特性和相关物理现象，并对工业中的灾害预报有一定的指导作用。

参考文献:

- [1] G.O. Thomas, R.L. Williams, Detonation interaction with wedges and bends, *Shock Waves*. 2002. 11 481-492
- [2] C.M. Guo, D.L. Zhang, W. Xie, The mach reflection of a detonation based on soot track measurements, *Combustion and Flame*, 2001, 127:2051-2058(2001)
- [3] 张德良, 郭长铭, 谢巍. 气相爆轰波胞格结构及其马赫反射数值模拟, *爆炸与冲击*, Vol.21-3, 2001
- [4] 胡湘渝, 张德良. 易燃混合气体爆炸—完全基元反应模型数值模拟, *安全与环境学报*, Vol.2-4, 2001
- [5] 胡湘渝. 气相爆轰波结构研究. 北京: 中国科学院力学研究所博士后工作报告, 2001
- [6] B.J. McBride, M.J. Zehe, Sanford Gordon, NASA Glenn coefficients for calculating thermodynamic properties of individual species. NASA/TP-2002-211556.
- [7] Z.L. Jiang, K. Takayama, Y.S. Chen. Dispersion conditions for non-oscillatory shock capturing schemes and its applications. *Comp Fluid Dynamics Journal*, 1995, 2(4): 137-150
- [8] Z.L. Jiang, J. Falcovit & K. Takayama, Numerical simulation of detonation in converging chambers. *JSME International Journal, Series B*. Vol.40, No.3 1997
- [9] Z.L. Jiang, W. Zhao, C. Wang. Forward-running detonation drivers for high-enthalpy shock tunnels. *AIAA Journal*. 2002. 40 (10)
- [10] E. Schultz, J. Shepherd. Validation of detailed reaction mechanisms for detonation simulation. *Explosion Dynamics Laboratory Report FM99-5*. Graduate Aeronautical Laboratories California Institute of Technology. 2000