维普资讯 http://www.cqvip.com

第 38 卷 第 5 期 力 学 学 报 Vol. 38, No. 5
2006 年 9 月 Chinese Journal of Theoretical and Applied Mechanics Sep., 2006

多障碍物通道中激波诱导气相爆轰的数值研究 1)

王 春 2) 张德良 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 应用数值模拟方法, 研究了直通道中激波经过多块矩形障碍物时诱导 H_2/O_2 混合气体起爆的物理机制. 研究表明: 在前导激波强度不足以诱导波后气体直接起爆的条件下, 经过激波压缩的可燃气体也可能在远离激波的障碍物之间的凹槽部位起爆; 障碍物表面产生的压缩波、膨胀波和气流滑移面对可燃气体的起爆、爆轰波的形成和传播过程有重要的影响; 添加不同稀释比的氮气可以影响爆轰波后流场的温度分布; 增加障碍物的间距可以改变可燃气起爆位置.

关键词 爆轰起爆, 多块障碍物, 壁面凹槽, 数值模拟

中图分类号: V211.3 **文献标识码:** A **文章编号:** 0459-1879(2006)05-0586-07

引 言

激波诱导起爆是利用激波压缩改变可燃气体的热力学状态, 从而诱导化学反应并导致爆轰起爆. 由于激波强度和实验装置的不同, 起爆模式有激波直接诱导、反射激波和激波聚焦诱导等等. Chan[1] 在激波管中研究了激波经过楔形物后对 H_2/O_2 可燃混合气体的引燃现象. 实验结果显示激波经过障碍物时, 激波的聚焦、绕射和反射在流场中形成局部热点, 导致了可燃混合气体的起爆, 并观察到在障碍物斜面上发生的爆轰 DDT 过程. Gelfand 等 [2] 在激波管中采用了二维抛物形、圆柱形和对称双楔内腔等多种结构型式, 研究了 $H_2/Air(O_2)$ 可燃混合气体在激波聚焦方式下的起爆、爆燃和爆轰过程. Brown 等 [3] 和 Thomas 等 [4] 实验研究了激波经过单块矩形障碍物时激波反射和绕射诱导的可燃混合气体爆燃转爆轰过程. Dorofeev 等 [5] 研究了尺度效应对可燃气起爆临界条件的影响. Ingram 等 [6] 数值模拟了激波经过通道中设置的挡板时激波反射诱导的可燃气直接起爆现象.

上述文献研究的可燃气起爆都是利用激波, 激波会聚或者激波反射来实现的, 点火区通常发生在紧随前导激波波后的位置, 一般要求较强的入射激波. 本文的工作则是研究前导激波强度不足以诱导波后气体直接起爆的情况下, 经过激波压缩的可燃气体在远离激波的障碍物之间的凹槽部位起爆的问题. 此问题涉及到亚临界起爆模式和爆轰 DDT 过程, 在爆轰推进的应用研究中有重要的应用.

1 数值计算方法

入射激波在直通道中经过多块矩形障碍物诱导可燃气体起爆的物理模型如图 1 所示. 由于入射激波的马赫数较低, 不能形成可燃气体的直接起爆. 但是当激波经过障碍物时, 在障碍物表面发生的激波反射和绕射在流场中形成局部高温和高压区域, 并在高温高压区诱导出活跃的化学反应. 如果温度和压力满足一定的条件, 可燃混合气体发生燃烧, 进而发展成为爆轰.

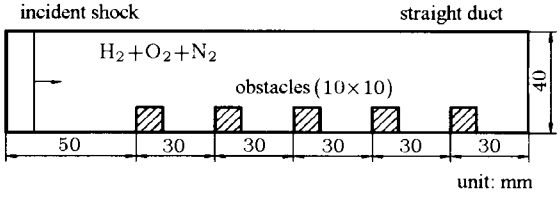


图 1 直通道中运动激波经障碍物点燃可燃气体爆轰的计算模型
Fig.1 Scetch of shock-induced detonation initiation in a duct with multi-obstacles

由于本文主要研究目的是考察爆轰波直接起爆以及激波和爆轰波传播现象, 假设流场的三维效应

2005-02-04 收到第 1 稿, 2006-03-07 收到修改稿.
1) 国家自然科学基金 (90205027) 及中国博士后基金 (2005037444) 资助项目.
2) E-mail: wangchun@imech.ac.cn

维普资讯 http://www.cqvip.com

可以不计，并忽略黏性对爆轰波点火及运动激波和爆轰波传播现象的影响，可以应用二维多组分的 Euler 方程来描述上述现象．采用有限速率多步基元反应模型，控制方程为

$$\frac{\partial \boldsymbol{U}}{\partial t}+\frac{\partial \boldsymbol{F}}{\partial x}+\frac{\partial \boldsymbol{G}}{\partial y}=\dot{\omega}$$

其中

$$\boldsymbol{U}=[\rho,\rho u,\rho v,\rho E,\rho f_1,\rho f_2,\cdots,\rho f_{ns}]^{\mathrm{T}}$$

$$\boldsymbol{F}=[\rho u,\rho u^2+p,\rho uv,(\rho E+p)u,\rho uf_1,\rho uf_2,\cdots,\rho uf_{ns}]^{\mathrm{T}}$$

$$\boldsymbol{G}=[\rho v,\rho uv,\rho v^2+p,(\rho E+p)v,\rho vf_1,\rho vf_2,\cdots,\rho vf_{ns}]^{\mathrm{T}}$$

$$\dot{\omega}=[0,0,0,0,\dot{\omega}_1,\dot{\omega}_2,\cdots,\dot{\omega}_{ns}]$$

化学反应速率表达式为

$$\dot{\omega}_i=W_i\sum_{j=1}^{nr}\Big[(v''_{j,i}-v'_{j,i})\big(k_{fj}\prod_{l=1}^{ns}[n_l]^{v'_{j,i}}-k_{bj}\prod_{l=1}^{ns}[n_l]^{v''_{j,i}}\big)\Big]\quad(i=1,2,\cdots,ns)$$

其中 W_i 为组分摩尔质量，$\{v'_{ij}\}$ 和 $\{v''_{ij}\}$ 分别为正向和逆向化学反应计量系数矩阵，$[n_l]$ 为组分 l 的摩尔浓度，k_f 和 k_b 为正向和逆向的化学反应速率系数，由阿累尼乌斯公式得到．

可燃气为固定比例 $H_2/O_2/N_2$ 混合气，其反应过程采用 11 组分 23 步的基元反应模型． 11 组分为 H_2, H, O_2, O, OH, HO_2, H_2O_2, H_2O, N, N_2, NO, 23 步化学反应模型见文献 [7]．数值方法采用具有空间二阶精度的迎风 TVD 差分格式，时间推进采用预估 / 校正两步法，具有二阶时间精度．化学反应源项求解采用“点隐式”处理．离散后无量纲化的控制方程可以写成如下差分形式

$$\frac{\Delta\hat{\hat{U}}}{\Delta t}=CONV^n+S^{n+1}$$

其中，对流通量项 $CONV$ 为

$$CONV^n=-\frac{1}{2}\big[(\hat{F}^n_{i+1,j}-\hat{F}^n_{i-1,j}+R^n_{i+1/2,j}\phi^n_{i+1/2,j}-R^n_{i-1/2,j}\phi^n_{i-1/2,j})\big]-\frac{1}{2}\big[(\hat{G}^n_{i,j+1}-\hat{G}^n_{i,j-1}+R^n_{i,j+1/2}\phi^n_{i,j+1/2}-R^n_{i,j-1/2}\phi^n_{i,j-1/2})\big]$$

“点隐”格式对化学反应源项 S^{n+1} 处理如下

$$\hat{S}^{n+1}=\hat{S}^n+H\Delta\hat{\hat{U}}^n$$

其中 $\boldsymbol{H}$ 为化学反应源项雅可比矩阵，最后得到差分方程

$$(I-\Delta t\cdot H)(\hat{\hat{U}}^{n+1}-\hat{\hat{U}}^n)=\Delta t(CONV^n+S^n)$$

2 数值计算验证

为了检验计算程序和数值方法的可靠性，本文计算了直管道中， H_2/O_2 为恰当比时，不同 N_2 稀释比情况下的稳定气相爆轰过程．计算得到的爆轰波波速与 C-J 理论结果的对比如表 1 所示．其中 u_D 为计算的爆轰波波速， u_{CJ} 为 C-J 理论值， E_r 为相对误差，定义为 $E_r=(u_D-u_{\mathrm{CJ}})/u_{\mathrm{CJ}}$．混合气体初始压力 $p_0=0.0101\,\mathrm{MPa}$, 初始温度 $T_0=300\,\mathrm{K}$.

由表 1 的结果对比可知，计算的爆轰波速与 C-J 理论值非常接近．考虑不同 N_2 稀释比的结果，最大计算误差在 ±1.3% 以内．由此可知，本文计算结果是比较可靠的．

表 1　不同 N_2 稀释比 H_2/O_2 混合气的爆轰波速计算值与 C-J 理论值的对比 ($ER=1.0$)

Table 1　The comparison of detonation speed by computation and C-J theory ($ER=1.0$)

N_2(%)	$u_D/(\mathrm{m\cdot s^{-1}})$	$u_{CJ}/(\mathrm{m\cdot s^{-1}})$	$E_r/(\%)$
0	2828.0	2842.8	−0.52
20	2464.1	2476.4	−0.50
50	2044.0	2052.1	−0.39
70	1701.3	1722.9	−1.25

3 可燃气起爆过程与分析

计算条件如下：入射激波马赫数 $Ms=2.9$, N_2 稀释比 70%, H_2/O_2 化学当量比 $ER=1.0$；设定波前预混可燃气体参数：压力 $p_0=0.0101\,\mathrm{MPa}$, 温度 $T_0=300\,\mathrm{K}$, 数值模拟得到的不同时刻压力分布如图 2 所示．

由图 2(a) 和图 2(b) 可见，入射激波进入多障碍物通道后，在第 1 和第 2 块障碍物表面发生了激波的反射和绕射．由于波后气流的温度和压力提升不足或者活性基元浓度不够高，激波在此两块障碍物表面的反射没有触发可燃气体的直接起爆．但在第 1 块障碍物后角点处形成膨胀波系和滑移面，在第 2

维普资讯 http://www.cqvip.com

块障碍物前角点处形成片状的激波. 由于这些波系的形成和相互作用, 激波波后的流场参数非常不均匀. 当入射激波继续向前运动到达图 2(c) 所示的位置时, 在第 2 块障碍物前角点的片状激波附近形成了局部点火区, 并在点火区附近形成局部爆炸波, 此爆炸波引燃可燃预混气体, 并诱导了在可燃气体中传播的爆轰波.

至图 2(d) 所示的 0.070 2 ms 时刻, 爆轰波迅速向其周围的未燃气体传播. 此刻爆轰波下部处于第 1 块和第 2 块障碍物之间的凹槽里, 上半部分进入通道的主流区内. 受来流和第 1 块障碍物上表面形成的滑移面的影响, 曲面爆轰波的前后波面发生变形, 表现为爆轰波的后半部分向下游方向加速拱起, 扫过第 2 块障碍物的上表面; 而爆轰波前半部分呈平面向上游运动, 并在壁面凹槽里发展.

图 3 显示了 0.070 2 ms 时刻凹槽区局部放大的流场参数图. 由图可见, 爆轰波后气体的温度约在 2 300 K~2 400 K 之间, 爆轰波前凹槽内因气流滞止带来的温度提升为 1 000 K, 为可燃气诱导的化学反应和起爆提供了必要条件.

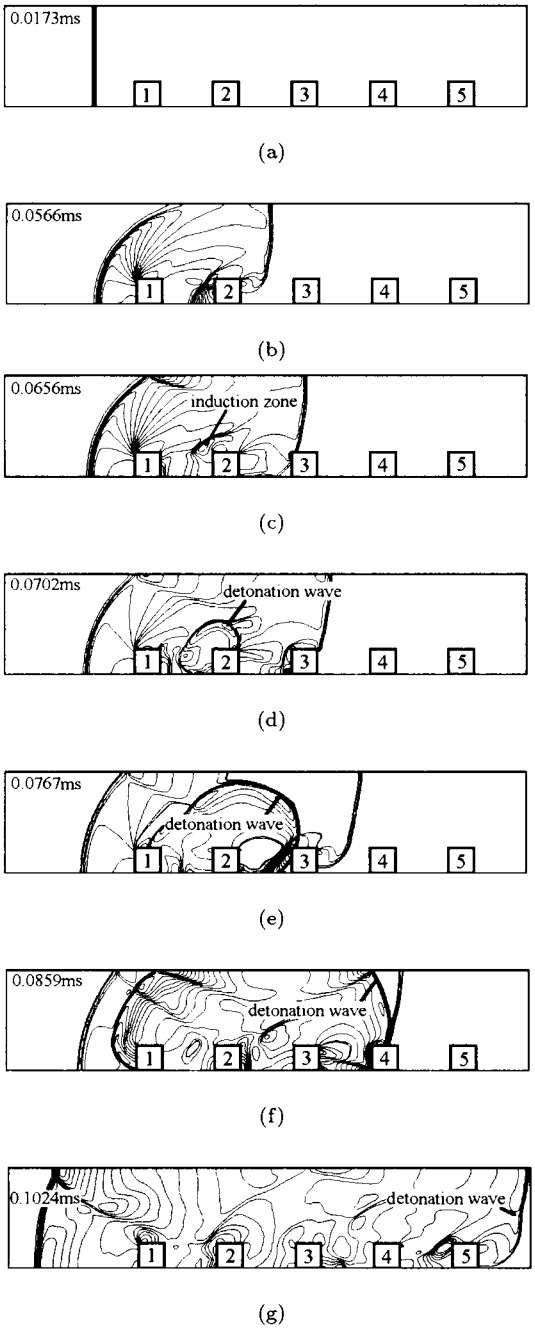
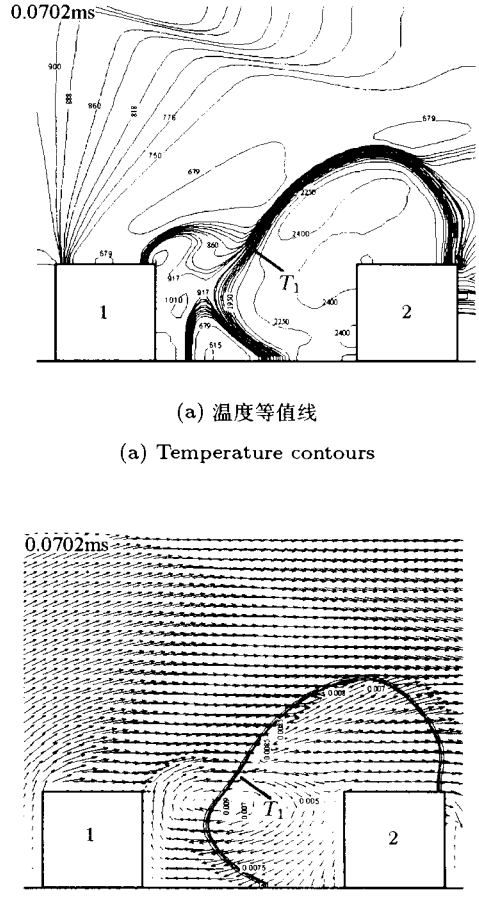


图 2 入射激波在多障碍物通道中诱导可燃气体起爆的压力分布图

Fig.2 The pressure contours of shock-induced detonation initiation in a straight duct with multi-obstacles

($p_0 = 0.010\,1$ MPa, $T_0 = 300$ K, N_2=70%, $ER = 1.0$, $Ms = 2.9$)



(a) 温度等值线

(a) Temperature contours

(b) OH 质量分数等值线和速度矢量

(b) OH mass fraction contours and vectors

图 3 流场局部区域参数分布

Fig.3 Detailed parameter profiles of flowfield (0.070 2 ms)

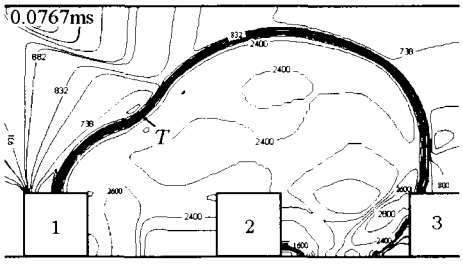
维普资讯 http://www.cqvip.com

爆轰波上下部分之间的分界点如图 3 中 T_1 点所示，此点在速度矢量图上对应于第 1 块障碍物之后主涡偏上剪切效应最强的位置. 通常来讲，OH 组分浓度最大的位置代表燃烧火焰面的位置，图 3(b) 表明燃烧火焰面与激波波面耦合在一起.

当流场发展至图 2(e) 所示的 0.076 7 ms 时刻，在第 1 和第 2 块障碍物之间凹槽里发展的爆轰波向其周围的预混可燃气体迅速传播，越出凹槽的范围，在上游方向扫过第 1 块障碍物的表面，在下游方向进入第 2, 第 3 块障碍物之间的壁面凹槽，并在此凹槽里发生波的反射和相互作用，到达第 3 块障碍物表面.

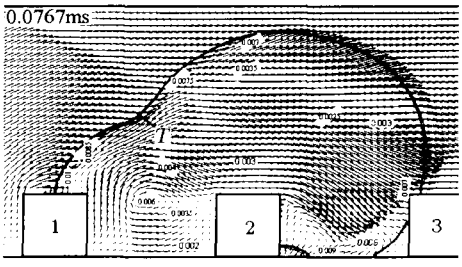
图 4 显示了 0.076 7 ms 时刻障碍物之间局部放大的流场参数图，由图 4(a) 可见，在爆轰波的传播过程中，爆轰波后维持了较高的温度. 由于爆轰波后压力的提高，对上游来流气流形成了较强的逆压梯度，导致上游气体流过爆轰波后速度矢量向上方偏转. 第 1, 第 2 块障碍物之间凹槽里回流区作用范围也大大地增加，进入主流区. 在离回流区较远的位置，爆轰波维持着较为稳定的曲面形状加速传播，回流区的作用造成了爆轰波面上有明显的波面转折点，如图 4 中 T 点所示. 在气流传播方向的下游，爆轰波进入第 2, 第 3 块障碍物之间的凹槽，并与第 3 块障碍物的前缘发生碰撞. 由 OH 质量分数的分布图可以看出，在爆轰波的上游部分， OH 质量分数等值线较为密集，表明这里的燃烧反应与激波耦合较强，而在第 2, 第 3 块障碍物之间的壁面凹槽里，燃烧反应与激波耦合相对较弱.

图 2(f) 和图 2(g) 表示了 0.085 9 和 0.102 4 ms 时刻的流场状态，爆轰波在上下游两个方向逐渐赶上反射激波和入射激波，最后会合为向两个方向传播的单一爆轰波. 不同时刻通道上壁面的温度分布如图 5 所示. 图 2(f) 和图 2(g) 所示时刻爆轰波后的温度在 2 400 K~3 000 K 的范围之内，上游爆轰波后由于流动被滞止，温度较高，下游爆轰波后温度偏低. 波后流场的温度分布也非常不均匀，受稀疏波的影响，有整体降低的趋势.



(a) 温度等值线

(a) Temperature contours



(b) OH 质量分数等值线和速度矢量

(b) OH mass fraction contours and vectors

图 4 流场局部区域参数分布

Fig.4 Detailed parameter profiles of flowfield (0.076 7 ms)

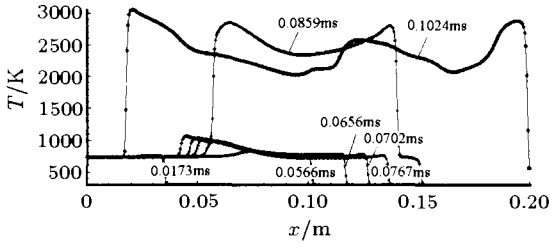
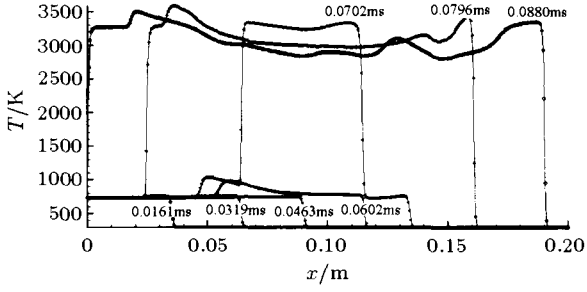


图 5 不同时刻通道上壁面温度分布图

Fig.5 The upper wall temperature profile (p_0 = 0.010 1 MPa, T_0 = 300 K, N_2=70%, ER = 1.0, Ms = 2.9)

图 6 显示了在相同入射激波马赫数和波前压力温度条件下，不同 N_2 稀释比可燃气起爆后通道上壁面温度分布曲线，其中图 6(a) 所示混合气体 N_2 体积比 50%, H_2/O_2 化学当量比 $ER = 1$; 图 6(b) 所示

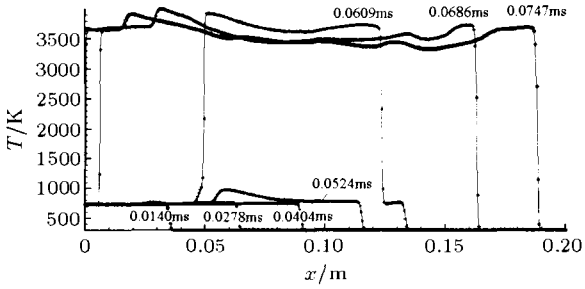


(a) p_0 = 0.010 1 MPa, T_0 = 300 K, N_2=50%, ER = 1.0, Ms = 2.9

图 6 不同 N_2 稀释比的通道壁面温度分布曲线

Fig.6 The upper wall temperature profiles with different N_2 dilution

维普资讯 http://www.cqvip.com



(b) $p_0 = 0.0101$ MPa, $T_0 = 300$ K, N_2=20%, $ER = 1.0$, $Ms = 2.9$

图 6 不同 N_2 稀释比的通道壁面温度分布曲线 (续)

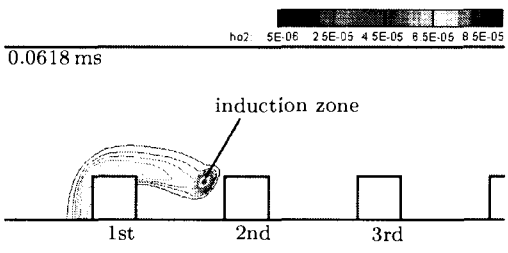
Fig.6 The upper wall temperature profiles with different N_2 dilution (continued)

混合气体 N_2 的体积比 20%, H_2/O_2 化学当量比 $ER = 1.0$. 由这些壁面温度分布的对比可以看出, 当降低预混可燃气体中 N_2 的稀释比时, 爆轰波后气体的温度增加, 且波后的温度分布变得更为均匀.

4 多障碍物通道中激波诱导起爆特征

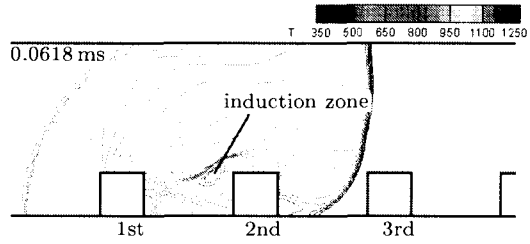
4.1 激波诱导点火机制分析

由前面的计算结果可知, 对于在多障碍物通道中传播的激波, 其诱导可燃混合气体起爆的突出的特点是: 激波在首块障碍物表面发生的反射没有诱导起爆过程, 但它在此障碍物后的凹槽里诱导出强烈的化学反应, 并导致可燃气起爆. 对于可燃气体的起爆, 需要满足一定的温度和压力条件, 也需要一定的化学反应条件. 当激波经过障碍物时, 激波反射可在障碍物前角点附近形成局部的高温区域, 成为触发化学反应的条件. 另一方面, 激波诱导的波后气流运动可以把在高温区里形成的化学反应自由基带到下游; 这部分气体受第 2 块障碍物的影响; 它的温度和压力再提升, 使化学反应加强, 最后导致起爆. 图 7 表示了可燃气起爆时刻的 HO_2 分布和温度分布. 由图 7(a) 可见在第 1 块障碍物反射区形



(a) HO_2 质量分数等值线

(a) HO_2 mass fraction contours



(b) 温度等值线

(b) Temperature contours

图 7 点火时刻流场参数分布

Fig.7 The parameter contours in flowfield just before ignition ($p_0 = 0.0101$ MPa, $T_0 = 300$ K, N_2=70%, $ER = 1.0$, $Ms = 2.9$, Distance: 30 mm)

成的 HO_2 和化学反应自由基的很大一部分被气流带向下游, 这部分气流作用于第 2 块障碍物表面产生温升, 导致更强的化学反应, 释放更多的化学反应热, 进一步提高了气体的温度 (图 7(b)), 最后诱导了起爆过程.

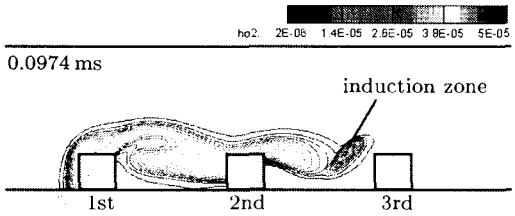
综上所述, 在激波及其反射波的强度不足以诱导可燃混合气直接起爆的条件下, 被压缩可燃气体延迟起爆的主要机制是气体热力学状态的变化和化学反应自由基的不断积累. 另外, 流场中形成能够滞留气体的高温高压区域 (点火诱导区) 也是激波成功诱导可燃气起爆的重要因素. 其中, 障碍物之间壁面凹槽的存在非常有益于化学反应自由基的积累, 高速气流在障碍物前角点的滞止造成了气流温度的提升, 这两个因素是此模型下点火诱导区形成的主要原因. 因此, 温度的提升逐步诱导出化学反应, 运动的诱导反应区进一步受到扰动的强化作用, 最终形成了爆轰的直接起爆.

4.2 障碍物间距对起爆的影响

为了进一步考察凹槽尺寸对于激波诱导可燃气起爆过程的影响, 本文对增加障碍物间距的模型进行了计算. 初始可燃气体参数取: 压力 $p_0 = 0.0101$ MPa; 温度 $T_0 = 300$ K; 入射激波马赫数 $Ms = 2.9$; N_2 稀释比 70%; H_2/O_2 当量比 $ER = 1.0$. 障碍物之间的间隔从前面计算模型的 30 mm 增加至 40 mm, 矩块障碍物的尺寸不变. 计算结果显示爆轰起爆点移至第 3 块障碍物前角点的片状激波附近, 图 8(a) 表示可燃气起爆时刻的 HO_2 的分布, 图 8(b) 表示温度分布.

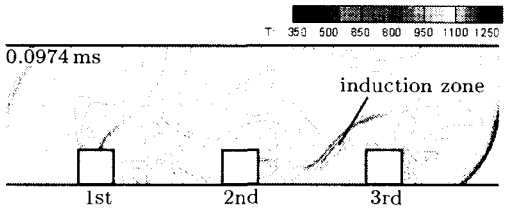
由图 8 结果可见, 激波在首块障碍物上反射诱

维普资讯 http://www.cqvip.com



(a) HO_2 质量分数分布

(a) HO_2 mass fraction contours



(b) 温度分布

(b) Temperature contours

图 8　点火前时刻流场参数分布

Fig.8 The parameter contours in flowfield just before ignition ($p_0 = 0.010\,1$ MPa, $T_0 = 300$ K, N_2=70%, $ER = 1.0$, $Ms = 2.9$, Distance: 40 mm)

导形成的化学反应自由基被波后的高速气流带向下游，进入第 1 个凹槽里；由于在此凹槽里还不能满足起爆条件，化学反应自由基继续跟随着高速气流运动，进入第 2 个凹槽里；最后在第 2 个凹槽内的第 3 块障碍物前角点处达到起爆所需的条件，可燃气体发生起爆．和小障碍物间距计算结果相比，可燃混合气体的起爆位置被进一步推迟．由图 8(b) 所示的温度分布图可以看出来自第 1 块障碍物的反应气团，经历了两个温度的起伏变化后达到第 3 块障碍物前角点处，化学反应增强，形成高温区域．由上述分析可知：凹槽尺度的增加，导致第 1 块障碍物后气流的进一步膨胀，降低了反应气团的热力学状态，减缓气体的活化反应，推迟了可燃气的起爆过程．

5 结　论

本文数值研究了入射激波进入带有多块矩形障碍物的直通道时诱导的可燃气体起爆现象，获得如下结果：在一定的条件下，入射激波在有障碍物的通道中传播时，即使在障碍物上首次反射后不能造成可燃气体的直接起爆，在后继障碍物之间的凹槽里可燃气体的燃烧反应可能被诱导并形成爆轰起爆，这种情况下，起爆区位于远离入射激波之后的位置．激波波后可燃气温度和压力的提升、活化基元的积累，后继障碍物诱导气体状态的再提升、凹槽气流回滞区的形成都是影响可燃气起爆的重要因素．当降低可燃气体中 N_2 的稀释比时，爆轰波后温度提高，温度场分布更为均匀．多障碍物通道中凹槽间距对可燃混合气体的起爆位置有影响．

参　考　文　献

1 Chan CK. Collision of a shock wave with obstacles in a combustible mixture. *Combustion and Flame*, 1995, 100: 341~348

2 Gelfand BE, Khomik SV, Bartenev AM, et al. Detonation and deflagration initiation at the focusing of shock waves in combustible gaseous mixture. *Shock Waves*, 2000, 10(3): 197~204

3 Brown CJ, Thomas GO. Experimental studies of ignition and transition to detonation induced by the reflection and diffraction of shock waves. *Shock Waves*, 2000, 10(1): 23~32

4 Thomas GO, Ward SM, Williams RL, et al. On critical conditions for detonation initiation by shock reflection from obstacles. *Shock Waves*, 2002, 12(2): 111~119

5 Dorofeev SB, Sidorov VP, Kuznetsov MS, et al. Effect of scale on the onset of detonations. *Shock Waves*, 2000, 10(2): 137~149

6 Ingram D, Jiang B, Causon D. On the role of turbulence in detonation induced by Mach stem reflection. *Shock Waves*, 1998, 8(6): 327~336

7 岳朋涛. 超燃冲压发动机燃烧室若干问题的研究. [博士论文]. 合肥：中国科学技术大学, 2002 (Yue Pengtao. Study on some topics of scramjet combustor. [Ph D Thesis]. Hefei: University of Science & Technology of China, 2002(in Chinese))

维普资讯 http://www.cqvip.com

NUMERICAL INVESTIGATION ON SHOCK-INDUCED GASEOUS DETONATION IN A DUCT WITH MULTI-OBSTACLES [1)]

Wang Chun[2)] Zhang Deliang Jiang Zonglin

(Key Laboratory of High Temperature Gas Dynamics (LHD), Institute of Mechanics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100080, *China)*

Abstract Numerical simulation was carried out to investigate the shock-induced detonation initiation of the premixed $H_2/O_2/N_2$ gas mixture in a duct with multi-rectangular-shaped obstacles. Numerical results show that even if the incident shock is not strong enough to induce a direct initiation of combustible mixtures behind the shock, the onset of detonation may take place in the cavity between obstacles which are far behind the shock front. Compression waves, expansion waves and contact surfaces generated from the obstacles surface play important roles on the chemical reaction that triggers the DDT process. Increasing N_2 dilution of combustible mixtures, the wall temperature distribution behind detonations becomes non-uniform and increasing the distance between obstacles results in a delay of detonation initiation.

Key words detonation initiation, multi-obstacles, cavities, numerical simulation

Received 4 February 2005, revised 7 March 2006.

1) The project supported by the National Natural Science Foundation of China (90205027) and the China Postdoctoral Science Foundation (2005037444).

2) E-mail: wangchun@imech.ac.cn