

文章编号: 1001-1455(2003)06-0488-05

激波与火焰的相互作用过程*

范宝春, 强, 董刚, 叶经方

(南京理工大学动力工程学院, 江苏 南京 210094)

摘要: 基于带化学反应的 Navier-Stokes 方程和有关的热力学和反应动力学数据, 利用改进的 VLS 格式, 对甲烷-空气混合物中激波与火焰的相互作用进行了数值模拟。根据计算结果, 讨论了激波掠过火焰时的变形、分叉和发展, 以及激波作用下火焰的失稳、变形、破碎和相应的带旋涡的流场。

关键词: 爆炸力学; 稳定性; 数值计算; 激波; 火焰

中图分类号: O382 国标学科代码: 130°3510 文献标志码: A

1 引 言

许多燃烧过程涉及到激波与火焰的相互作用, 如爆炸波在障碍物上反射后与火焰的碰撞等。火焰穿越激波时会失稳, 诱发湍流, 甚至可能出现燃烧转爆轰现象。总之激波的作用会改变燃烧过程, 因此引起人们的关注。

G. H. Markstein^[1]首次拍摄了激波作用下火焰失稳的照片, 形象地显示了火焰在入射激波和反射激波作用下的变化过程。此后, 有了对该现象进行的理论分析和数值模拟^[2~5], 但这些研究大都集中在激波作用后火焰和流场的变化上, 忽略了激波与火焰的作用过程。此外, 已经进行的理论研究对于化学反应的处理也较为简单, 反应速率和反应热具有一定的可调性和不确定性。

本文中对 VLS 格式(Van Leer Splitting Scheme)^[6]进行了改进, 使之适用于二维化学反应流动, 并用来求解带化学反应的 Navier-Stokes 方程, 模拟激波与火焰的相互作用现象。化学热力学和反应动力学常数均取自文献[7~8]。根据计算结果, 本文中讨论了激波与火焰迎风面、激波与火焰背风面以及激波波后流场与火焰这三个不同作用阶段的流场变化, 讨论了火焰的稳定性和旋涡生成机理。

2 守恒方程

Lewis 数 $L = 1$ 时, 二维可压缩化学反应流的 Navier-Stokes 守恒方程为

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

式中

$$\mathbf{U} = \begin{bmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ E \\ \rho \varphi \end{bmatrix}, \quad \mathbf{F} = \begin{bmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ \rho uv \\ u(E + p) \\ \rho u \varphi \end{bmatrix}, \quad \mathbf{G} = \begin{bmatrix} \rho v \\ \rho uv \\ \rho v^2 + p \\ v(E + p) \\ \rho v \varphi \end{bmatrix}, \quad \mathbf{S} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \lambda_k \end{bmatrix},$$
$$\tau_{xx} = \mu \left[\frac{4}{3} \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{2}{3} \frac{\partial v}{\partial y} \right], \quad \tau_{xy} = \tau_{yx} = \mu \left[\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right], \quad \tau_{yy} = \mu \left[\frac{4}{3} \frac{\partial v}{\partial y} - \frac{2}{3} \frac{\partial u}{\partial x} \right],$$

* 收稿日期: 2003-01-07; 修回日期: 2003-05-06

基金项目: 国家自然科学基金项目(19832030, 10172047)

作者简介: 范宝春(1945—), 男, 教授。

$$F_D = \begin{pmatrix} 0 \\ -\tau_{xx} \\ -\tau_{xy} \\ -\frac{k}{c_p} \frac{\partial h_t}{\partial x} - u\tau_{xx} - v\tau_{xy} \\ -D\rho \frac{\partial \varphi}{\partial x} \end{pmatrix}, \quad G_D = \begin{pmatrix} 0 \\ -\tau_{yx} \\ -\tau_{yy} \\ -\frac{k}{c_p} \frac{\partial h_t}{\partial y} - u\tau_{yx} - v\tau_{yy} \\ -D\rho \frac{\partial \varphi}{\partial y} \end{pmatrix},$$

ρ 为密度, p 为压力, u 和 v 分别为 x 和 y 方向的速度分量, φ 为组元 k 的质量分数, μ 为粘性系数, k 为热传导系数, D 为扩散系数。单位体积的总内能 $E = \left[e_t + \frac{u^2 + v^2}{2} \right] \rho$, 比总内能 $e_t = c_v T + \sum \varphi h_k^0$, 比总焓 $h_t = c_p T + \sum \varphi h_k^0$, 混合物定容比热 $c_v = \sum \varphi c_{vk}$, 定压比热 $c_p = \sum \varphi c_{pk}$, c_{vk} 和 c_{pk} 分别为组元 k 的定容比热和定压比热, h_k^0 为组元 k 的生成焓, 他们可以从相关数据表中查得出^[7]。 λ_k 为组元 k 的基于质量的化学反应速率。

3 数值方法

为了避免不同过程特征时间的差异而引起的方程刚性, 采用分裂格式, 即将化学反应项与对流项分开处理。对应于一个流场步长, 化学反应项可在许多适合的步长下利用 Runge-Kutta 法循环计算。

对流项采用矢量通量分裂格式, 该格式根据特征根的正负号, 将矢量通量 F 和 G 分裂成两部分, 即 $F = F^+ + F^-$, $G = G^+ + G^-$, 其中 F^+ 和 G^+ 对应正特征根, F^- 和 G^- 对应负特征根, 然后用迎风格式

$$U_{i,j}^{n+1} = U_{i,j}^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} (F_{i+1,j}^- - F_{i,j}^- + F_{i,j}^+ - F_{i-1,j}^+) - \frac{\Delta t}{\Delta y} (G_{i,j+1}^- - G_{i,j}^- + G_{i,j}^+ - G_{i,j-1}^+) \quad (2)$$

Steger-Warming 通量矢分裂格式 (SWS) 会在滞止点和跨音速点出现导数间断, Van Leer 对此进行了修正, 称为 VLS。基于 VLS, 采用冻结绝热指数并引进生成焓, 从而将其推广至化学反应流动, 以矢量通量 F 为例, 有

$$F^+ = \begin{cases} F & M_x \geq 1 \\ 0 & M_x \leq -1 \\ f^+ & |M_x| < 1 \end{cases}, \quad F^- = \begin{cases} 0 & M_x \geq 1 \\ F & M_x \leq -1 \\ f^- & |M_x| < 1 \end{cases} \quad (3)$$

式中: $M_x = \frac{u}{a}$, a 为声速,

$$f^\pm = \begin{pmatrix} f_0^\pm \\ f_0^\pm \frac{(\gamma-1)u + 2a}{\gamma} \\ f_0^\pm v \\ f_0^\pm \left[\frac{(\gamma-1)u + 2a}{2(\gamma^2-1)} \right]^2 + \frac{v^2}{2} + \sum \varphi h_k^0 \\ f_0^\pm \varphi \end{pmatrix}, \quad f_0^\pm = \pm \rho a \left[\frac{M_x \pm 1}{2} \right]^2$$

扩散项采用中心差分。

4 算例

设无限长管内充满 CH_4 、 O_2 、 N_2 混合物, 初始质量分数 $\varphi_{CH_4} = 0.04$, $\varphi_{O_2} = 0.16$, $\varphi_{N_2} = 0.8$ 。计算域如图 1 所示, 即 $0 < x/L < 50$, $-8 < y/L < 8$, 其中 L 为特征长度。两端为敞开端, 采用梯度为零条件, $x/L = \pm 8$ 处的上下边界采用固壁边界条件。

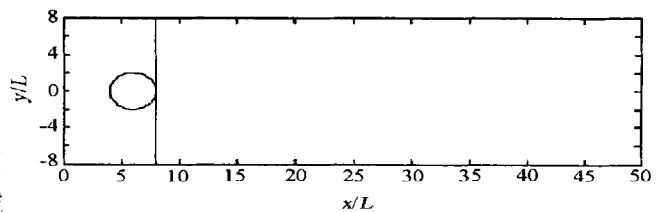
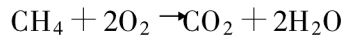


图 1 计算的初始流场

Fig. 1 Computational domain and initial conditions

初始时刻, $x/L=6$, $x/L=0$ 处有一半半径 $r/L=2$ 的已完全燃烧的静止火团, 其状态由等容燃烧决定。 $x/L=8$ 处, 有一个 Mach 数 $Ma=1.5$ 的平面激波, $r/L < 8$ 为波前, 其状态为环境状态。

燃烧采用单步化学反应模型^[8]



以摩尔为单位的化学反应速率

$$\Lambda = AT^n \exp\left[-\frac{E_a}{RT}\right] (C_{\text{CH}_4})^a (C_{\text{O}_2})^b \quad (4)$$

式中: C_{CH_4} 和 C_{O_2} 分别为甲烷和氧气的分子浓度。根据文献[8], 有关常数为: 指前因子 $A = 1.3 \times 10^8$, 活化能 $E_a = 202.5 \text{ kJ/mol}$, 普适气体常数 $R = 8.3143 \text{ J/(K} \cdot \text{mol)}$, $n = 0$, $a = -0.3$, $b = 1.3$ 。

5 结果讨论

图2为激波与火焰相互作用时, 密度和压力分布图。图中, $\bar{t} = Ut/L$, U 为入射波传播速度。背景是与密度有关的阴影图, 愈暗处密度愈低; 白色线条为压力等位线。图2(a)~2(b)对应于激波与火焰迎风面的作用, 2(c)~2(d)对应于激波与火焰背风面的作用。将已经燃烧和正在燃烧的区域称为火团, 由于燃烧产物的膨胀, 火团内为高温低密度介质, 其声速阻抗小于周围未燃烧介质的值。因此, 激波与其作用时, 在未燃与已燃的物质界面上, 即火团表面, 分叉形成前引激波和后传激波, 称为 λ 波。前引激波的传播速度大于入射波未变形部分的速度, 后传激波则与旋涡区相连。火团中的透射波, 在对称轴上汇聚碰撞, 形成 Mach 干(见图2(a)和图3), 其中图3为压力等位线图, 与图2(a)对应。Mach 干传播速度较快, 逐渐追上前引激波, 形成圆形弱激波(见图2(b))。激波扫过火团子午面后, 以大于 90° 的入射角与火团作用, 波后的旋涡区明显增大(见图2(c))。低密度的已燃介质(图中黑色阴影)以弯曲哑铃的形状逐渐离开激波阵面(见图2(d))。

图4为压力梯度线、密度梯度线和涡量的分布图, 其中图4(b)为图4(a)的局部放大图。背景为涡量分布阴影图, 愈深处涡量愈大。显然激波作用下, 火团内部的涡量显著增强, 特别在 λ 激波的下方, 出现两个相邻的高涡量区域。图中黑线的切线方向为密度梯度方向, 称为密度梯度线, 白线则为压力梯度线。在高涡量区域, 两类梯度线明显趋于正交。根据方程

$$\frac{d\Omega}{dt} = \frac{\nabla \rho \times \nabla p}{\rho^2} \quad (5)$$

式中: Ω 为涡量, ∇ 表示梯度。它表示压力梯度与密度梯度斜交会在流场中产生旋涡, 称此为斜压效应。激波与火团作用时, 斜压效应是旋涡生成的重要因素。

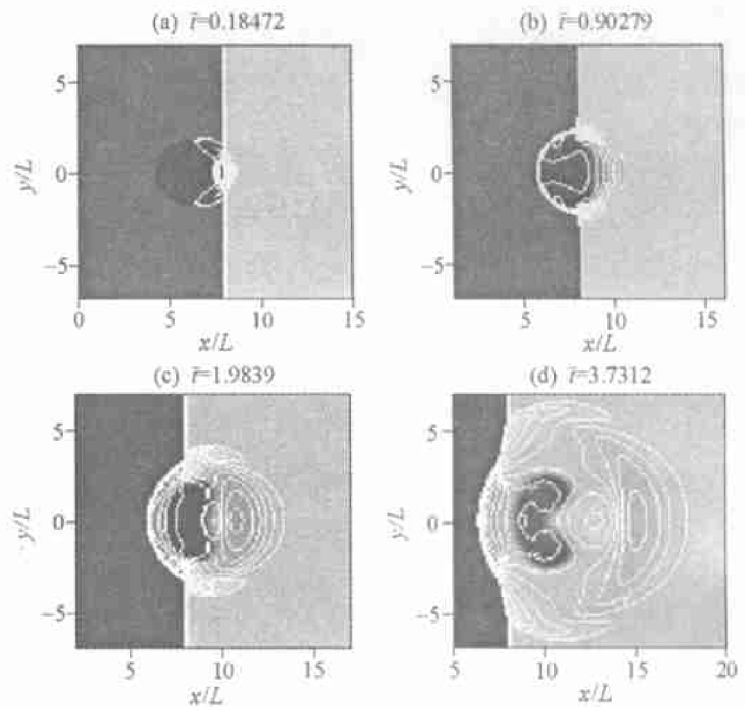


图2 压力等位线和密度阴影图

Fig.2 Pressure contours (lines) and density variation (shade)

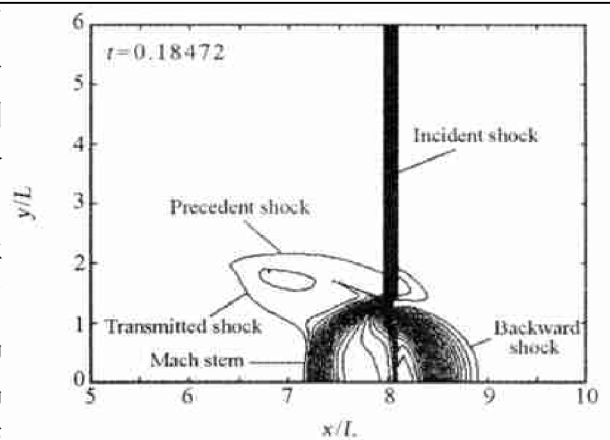


图3 压力等位线

Fig.3 Pressure contours

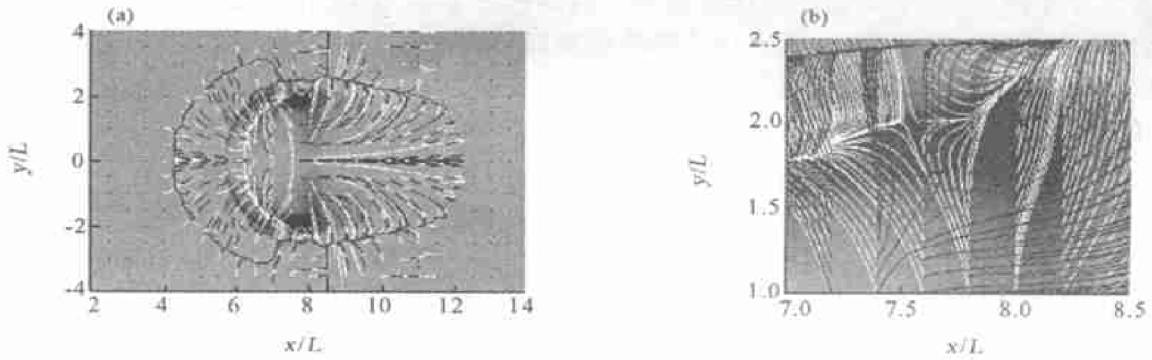


图 4 压力梯度线、密度梯度线和涡量阴影图

Fig.4 Pressure gradient lines (white), density gradient lines (black) and vorticity variation (shade)

图 5 为火焰阵面形状与密度分布图。背景为密度阴影图，两条封闭等组分线围成的区域为正在燃烧的化学反应区，称为火焰阵面。内曲线所围区域为已燃区域，外曲线以外区域为未燃区域。未与激波作用的火焰阵面向四周自由传播扩张，而已与激波作用的火焰阵面，则因压缩而变平。火团左侧反应区的密度高于右侧，宽度则较右侧窄。由于激波的分叉，分叉波附近，火焰阵面向左部扩张(见图 5(a)~5(c))。激波掠过火团子午面后，火团外部未燃区域受到圆形激波的予压缩，轴心附近火焰阵面开始弯曲(见图 5(d))。

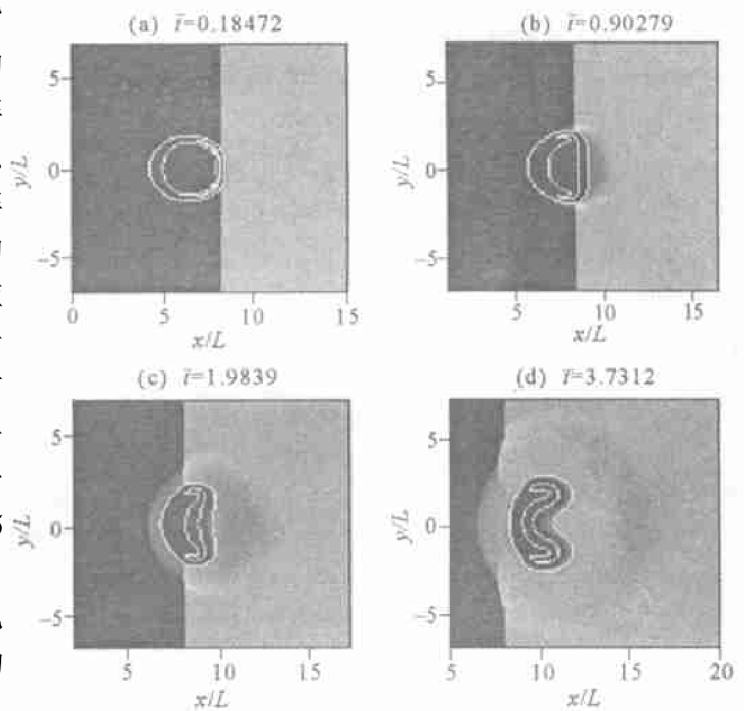


图 5 火焰阵面和密度阴影图

Fig.5 Flame fronts (lines) and density variation (shade)

图 6 为激波作用后火焰阵面形状变化图。火团与未燃物之间可视作不同密度的物质界面，激波作用下，该界面加速，出现 Richtmyer-Meshkov 不稳定。这种不稳定是无条件的，首先使火焰迎风面在轴线附近出

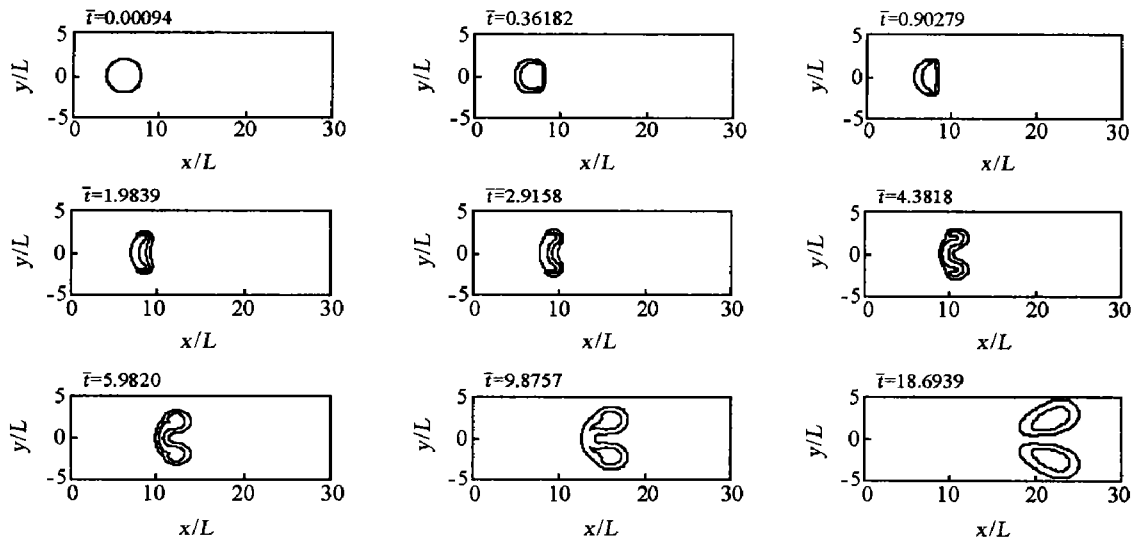


图 6 激波作用后的火焰形状图

Fig.6 Evolution of flame fronts after shock-flame interaction

现凹槽。激波作用后,这种不稳定性会继续增长。随凹槽的加深,侧面出现斜压效应和 Helmholtz 不稳定,从而加快火焰阵面的变形,以至形成火焰前沿的喇叭口和不断向火团内部深入的尖锥。两端的燃烧区也迅速扩大。火焰阵面逐渐呈弯曲的哑铃状,且最终破碎。火焰的失稳还在局部区域导致湍流燃烧。旋涡、火焰严重变形、火焰破碎和湍流燃烧都将大大提高火团的燃烧和扩展速率,改变燃烧过程。

6 小 结

基于带化学反应的 Navier-Stokes 方程,利用改进的 VLS 格式,对激波与火焰的作用过程进行了数值模拟,结果表明:

(1) 激波掠过火团时,分叉形成 λ 波。前引激波在火团内透射并在轴线处碰撞形成 Mach 干,进而发展为球形激波。 λ 波下部分存在两相邻涡旋区,该区的生成与斜压效应有关。

(2) 火焰在激波作用下先后出现 Richtmyer-Meshkov 不稳定和 Helmholtz 不稳定,火焰逐渐变形以致破碎。燃烧速率因此剧增。

参考文献:

- [1] Markstein G H. Non-steady flame propagation [M] . New York: MacMillan, 1964.
- [2] Batley G A, McIntosh A C, Brindley J B, et al. A numerical study of the vorticity field generated by the baroclinic effect due to the propagation of a planar pressure wave through a cylindrical premixed laminar flame [J] . Fluid Mech, 1994, 279:217—337.
- [3] Edwards N R, McIntosh A C, Brindley J B. The development of pressure induced instabilities in premixed flames [J] . Combust Sci and Tech, 1994, 99:179—199.
- [4] Khokhlov A M, Oran E S, Chelkanova A Y, et al. Interaction of a shock wave with a sinusoidally perturbed flame [J] . Combustion and Flame, 1999, 117:99—116.
- [5] Khokhlov A M, Oran E S, Thomas G O. Numerical simulation of deflagration-to-detonation transition: the role of shock-flame interactions in turbulent flames [J] . Combustion and Flame, 1999, 117:323—339.
- [6] Van Leer B. Flux-vector splitting for the Euler equations [R] . I CASE Report 82-30, 1982.
- [7] Gordon S, McBride B J. Computer program for calculation of complex chemical equilibrium compositions, rocket performance, incident and reflected shocks and Chapman-Juget detouation [R] . NASA-SP-273, 1971.
- [8] Westbrook C R, Dryer F L. Simplified reaction mechanisms for the oxidation of hydrocarbor fule in flames [J] . Combust Sci and Tech, 1981, 27:31—43.

The time evolution of shock-flame interaction

FAN Bao-chun^{*}, GANG Qiang, DONG Gang, YI Jin-fang

(Nanjing University of Science and Technology, Nanjing 210094, Jiangsu, China)

Abstract: Based on the Navier-Stokes equations coupling with chemical reactions, the phenomena of shock-flame interactions in the methane-air mixture are numerically studied by using VLS scheme. The evolution of flow patterns are presented at different interaction stages and the bifurcate shock waves, distorted flame fronts and induced vortices are discussed according to the calculated results.

Key words: mechanics of explosive; stability; numerical simulations; shock waves; flame

^{*} Corresponding author: FAN Bao-chun

E-mail address: bcfan@mail.njust.edu.cn