

文章编号: 1001-1455(2005)05-0405-12

直管内胞格爆轰的基元反应数值研究*

王昌建^{1,2}, 徐胜利^{1,2}

(1. 中国科学技术大学力学和机械工程系, 安徽 合肥 230026;
2. 北京理工大学爆炸科学与技术国家重点实验室, 北京 100081)

摘要: 基于基元反应和二维欧拉方程, 对直管内胞格爆轰进行了数值模拟。采用 5 阶 WENO (weighted essentially nonoscillatory scheme) 求解对流项, 采用 2 阶附加半隐的龙格-库塔法处理化学反应源相引起的刚性。获得了密度、压力、温度和典型组元质量分数流场及数值胞格结构等。结果表明: 网格精度的差异明显影响胞格的规则性和爆轰的平衡模数, 随着网格尺度的减小, 胞格由不规则变为规则。预混气组成、初压、初温及管道宽度给定, 三波点数收敛为确定值。足够强度的初始扰动可再现胞格爆轰, 最终形成的自持胞格爆轰模数与初始扰动的形状、大小、位置均无关。沿胞格中心线, 爆轰波速度变化范围为 $0.88D_{CJ} \sim 1.5D_{CJ}$, 爆轰波平均速度与 CJ 爆轰速度仅偏差 0.88%。峰值压力与初压之比为 14~50。计算爆轰波平均速度、胞格宽长比与实验值基本一致, 但计算胞格宽度比实验值略小。数值模拟加深了对横波的产生和发展、未反应气囊、爆轰胞格的二次起爆等胞格爆轰特性的认识。

关键词: 爆炸力学; 基元反应; 数值模拟; 胞格爆轰; 二次起爆; 胞格结构

中图分类号: O381 **国标学科代码:** 130 · 3510 **文献标志码:** A

1 引 言

化学反应速率非线性依赖于温度。爆轰波在时间和空间上存在不稳定性, D. R. White^[1] 于 1961 年采用火花干涉技术首先发现了爆轰的不稳定性。许多实验结果^[2] 也证实: 爆轰波阵面会发展, 依赖于时间的复杂三维结构。诱导激波由弱入射激波和强马赫杆交替组成, 如图 1、2 所示。横波(即反射激波)沿波阵面以接近当地声速传播。入射波、反射波与马赫杆交汇于三波点, 三波点的迹线即为爆轰的三维胞格结构。由于三波点附近的压力和速度明显差异, 放在爆轰管壁的烟迹片能记录到类似“鱼鳞状”的图案, 即爆轰胞格图案, 如图 3 所示。

胞格爆轰数值研究的主要困难是: (1) 网格尺度小、计算量大; (2) 模拟爆轰波的精细结构, 要求高精度、低耗散的数值离散格式; (3) 流体动力学方程与化学反应之间的非线性耦合及化学反应所引起的刚性问题。由于这些原因, 直到 20 世纪 80 年代后期, 随着计算机的不断更新换代和各种高精度格式的出现, 才陆续开始胞格爆轰的数值研究。前人均采用二维欧拉方程来模拟气相爆轰波结构, 其化学反应过程通常采用一步、两步反应模型来描述^[3~9]。这两类反应模型可大大减少计算量和高效模拟多维

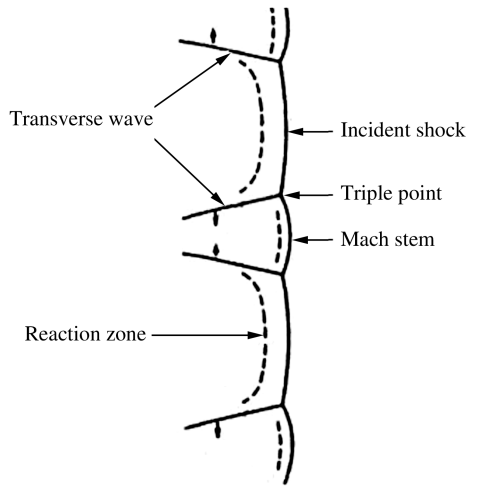


图 1 爆轰波结构示意图
Fig. 1 Schematic of detonation structure

* 收稿日期: 2004-09-23; 修回日期: 2005-04-22

基金项目: 国家自然科学基金项目(10172083); 中国工程物理研究院和国家基金委联合基金项目(10076018); 北京理工大学爆炸科学与技术国家重点实验室开放基金项目(KFJJ03-2)

作者简介: 王昌建(1975—), 男, 博士后。

爆轰波结构,且能定性反映气相爆轰的本质特点。但也存在一些缺点:(1)忽略了真实爆轰过程链式反应的复杂性和影响。(2)很难给出模型中的参数值,且所给参数应用范围非常狭窄。(3)反应结束后,由于产物的组成不正确,可能导致温度等变量的较大偏差,从而影响波阵面结构。据化学反应动力学理论,基元反应能较准确描述爆轰化学反应的本质特性,并在定量上与实验结果更吻合。国外 E. S. Oran 等^[10]及 R. Deiterding^[11]分别采用该模型对二维胞格爆轰进行了数值模拟。国内采用基元反应对气相爆轰波进行数值模拟的主要工作有:胡湘渝等^[12]模拟了一维气相爆轰的起爆、传播过程;胡宗明等^[13]模拟了平面爆轰波在楔面上的反射。

本文中从爆轰波的本质(即爆轰波存在三维结构,是非平面波)出发,采用基元反应来描述真实爆轰化学反应机制,对氩气稀释的氢氧可燃气体胞格爆轰进行数值模拟,目的是:(1)认识和探讨网格精度和初始扰动对胞格爆轰的影响;(2)认识和了解直管内胞格爆轰波的精细结构及演变特征。

75% (2H₂+O₂)+25%Ar, p₀=21.33 kPa

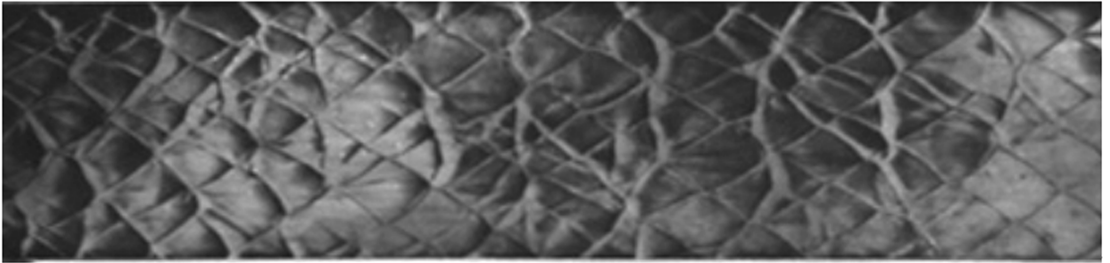


图 3 爆轰胞格结构

Fig. 3 Cellular pattern of detonation

2 控制方程和数值方法

2.1 控制方程

采用基元反应的二维 Euler 方程描述真实爆轰化学反应过程。爆轰气体采用:(1-φ)(2H₂+O₂)+φAr。假设爆轰气体是理想气体,无粘无热传导。

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

式中: $\mathbf{Q}=[\rho_1, \rho_2, \dots, \rho_{N_s}, \rho u, \rho v, \rho E]^T$; $\mathbf{F}=[\rho_1 u, \rho_2 u, \dots, \rho_{N_s} u, \rho u^2 + p, \rho uv, (\rho E + p)u]^T$; $\mathbf{G}=[\rho_1 v, \rho_2 v, \dots, \rho_{N_s} v, \rho uv, \rho v^2 + p, (\rho E + p)v]^T$; $\mathbf{S}=[S_1, S_2, \dots, S_{N_s}, 0, 0, 0]^T$ 。

气体混合物状态方程为

$$p = R_0 T \sum_{i=1}^{N_s} \frac{\rho_i}{w_i} \quad (2)$$

单位体积总能

$$\rho E = \rho \left(e + \frac{u^2 + v^2}{2} \right) \quad (3)$$

单位体积内能(包括化学能)

$$\rho e = \sum_{i=1}^{N_s} \rho_i h_i - p \quad (4)$$

第 i 组元单位静焓

$$h_i = \int_{T_{\text{ref}}}^T c_{pi} dT + h_{fi}^0 \quad (5)$$

$$c_{pi}/R_i = a_{1i} + a_{2i}T + a_{3i}T^2 + a_{4i}T^3 + a_{5i}T^4 \quad (6)$$

75% (2H₂+O₂)+25%Ar, p₀=16.00 kPa

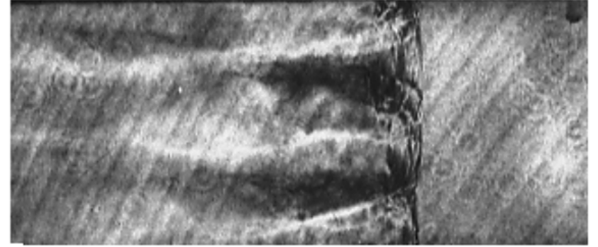


图 2 爆轰波阵面纹影图

Fig. 2 Schlieren image of detonation front

$$h_i/(R_i T) = a_{1i} + a_{2i} T/2 + a_{3i} T^2/3 + a_{4i} T^3/4 + a_{5i} T^4/5 + a_{6i}/T \quad (7)$$

式中： $\rho_1, \dots, \rho_{N_S}$ 为组元密度， ρ 为总密度， p 为压力， u, v 分别为 x, y 方向的速度， T 为温度， τ_{w_i} 为第 i 组元的摩尔质量， Y_i 为组元质量分数， R_0 为普适气体常数系数， a_{1i}, \dots, a_{6i} 取自 JANAF^[14] 表。

2.2 化学反应模型

采用 9 组元 48 基元反应模型^[15]来描述 H_2, O_2, Ar 混和气真实爆轰化学反应机制，该模型能很好地处理强弱点火。其组元为： $H_2, O_2, H, O, OH, HO_2, H_2O_2, H_2O, Ar$ 。包含 N_S 个组元、 N_R 个基元反应的化学反应一般形式为

$$\sum_{i=1}^{N_S} \nu'_{ij} M_i \xrightleftharpoons[k_{bj}]{k_{tj}} \sum_{i=1}^{N_S} \nu''_{ij} M_i \quad j = 1, \dots, N_R \quad (8)$$

由质量作用定律得到 i 组分的质量生成速率为

$$S_i = W_i \sum_{j=1}^{N_R} (\nu''_{ij} - \nu'_{ij}) (k_{tj} \prod_{l=1}^{N_S} n_l^{\nu'_{lj}} - k_{bj} \prod_{l=1}^{N_S} n_l^{\nu''_{lj}}) \quad (9)$$

式中： M_i 为第 i 组元的化学符号， ν'_{ij}, ν''_{ij} 为计量系数， n_l 为第 l 组元的摩尔浓度。

本文中采用 CHEMKIN II^[16] 计算化学反应源项，基元反应可以遵循 Arrhenius 定律

$$k_{tj} = A_j T^{\beta_j} \exp[-E_{aj}/(R_u T)] \quad (10)$$

式中： A_j, β_j, E_{aj} 分别为第 j 个基元反应的指前因子、温度指数和活化能。逆反应的速率常数 k_{bj} 由正反应常数 k_{tj} 和平衡常数 K_{cj} 确定，即

$$k_{bj} = \frac{K_{cj}}{k_{tj}} \quad (11)$$

2.3 数值方法

在计算过程中，采用附加半隐的 Runge-Kutta 法 (additive semi-implicit Runge-Kutta methods, 简称 ASIRK)^[17] 全耦合求解，该方法在时间上具有 2 阶精度，能很好处理爆轰化学反应带来的刚性问题，且具有很好的稳定性。

具体地，方程(1)可改写成

$$\frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial t} = \mathbf{f}(\mathbf{Q}) + \mathbf{S}(\mathbf{Q}) \quad (12)$$

式中： $\mathbf{f}(\mathbf{Q}) = -(\partial \mathbf{F}/\partial x + \partial \mathbf{G}/\partial y)$ 为非刚性部分；化学反应源项 $\mathbf{S}(\mathbf{Q})$ 为刚性部分。

采用 ASIRK 方法将(12)式离散

$$\begin{cases} [\mathbf{I} - \Delta t a_1 \mathbf{J}(\mathbf{Q}^n)] \mathbf{K}_1 = \Delta t [\mathbf{f}(\mathbf{Q}^n) + \mathbf{S}(\mathbf{Q}^n)] \\ [\mathbf{I} - \Delta t a_2 \mathbf{J}(\mathbf{Q}^n + c_{21} \mathbf{K}_1)] \mathbf{K}_2 = \Delta t [\mathbf{f}(\mathbf{Q}^n + b_{21} \mathbf{K}_1) + \mathbf{S}(\mathbf{Q}^n + c_{21} \mathbf{K}_1)] \\ \mathbf{Q}^{n+1} = \mathbf{Q}^n + \omega_1 \mathbf{K}_1 + \omega_2 \mathbf{K}_2 \end{cases} \quad (13)$$

式中： \mathbf{I} 为单位矩阵， $\mathbf{J} = \partial \mathbf{S}/\partial \mathbf{Q}$ ， $\mathbf{K}_1 = [k_{11}, k_{12}, \dots, k_{1N_S+3}]$ ， $\mathbf{K}_2 = [k_{21}, k_{22}, \dots, k_{2N_S+3}]$ ， $a_1 = 1/4, a_2 = 1/3, a_{21} = 5/12, \omega_1 = 0.5, \omega_2 = 0.5, b_{21} = 1$ 。

空间项采用 5 阶 WENO 格式离散^[18]；计算网格划分为均匀网格。计算域各边界采用无催化、绝热固壁边界条件。

3 计算结果与讨论

3.1 程序校核

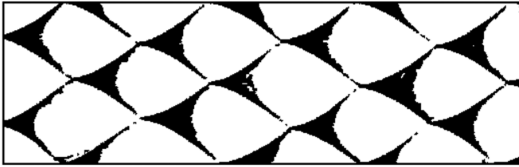
程序校核采用的计算条件与文献[10]完全一致，即：预混气组成为 30% ($2H_2 + O_2$) + 70% Ar，初压为 6.67 kPa，初温为 298 K。计算域宽为 60.16 mm， x 方向网格尺度为 0.15 mm， y 方向为 0.235 mm。表 1 和图 4 给出了本文和文献[10]的计算结果。本文结果表明：爆轰最终收敛为模数为 4 的自持胞格爆轰。胞格宽、长分别为 30 mm 和 54 mm。计算得到的平均爆轰速度 $\bar{D} = 1607$ m/s，与 CJ 爆轰速度 (1617.4 m/s)^[14] 仅偏差 0.6%。本文结果与文献[10]的结果基本一致。

表1 本文与文献[10]结果对比

Table 1 Comparison of computational results of the current study and reference [10]

| 来源 | 网格 | $\Delta x/\text{mm}$ | $\Delta y/\text{mm}$ | $\bar{D}/(\text{m/s})$ | 自持爆轰模数 | 胞格尺寸 | |
|----------|----------|----------------------|----------------------|------------------------|--------|------|------|
| | | | | | | 宽/mm | 长/mm |
| 参考文献[10] | 2048×256 | 0.15 | 0.235 | 1625 | 4 | 30 | 54 |
| 本文结果 | 2048×256 | 0.15 | 0.235 | 1607 | 4 | 31 | 54 |

(a) The current results



(b) The results from reference [10]

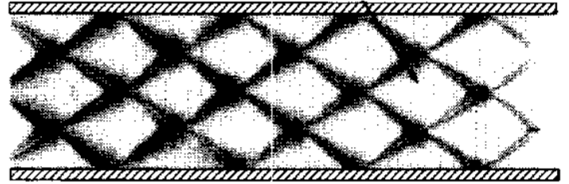


图4 数值胞格结构

Fig. 4 Numerical cellular patterns

3.2 网格精度研究

经验表明,要正确模拟气相爆轰特性,必须进行网格精度研究。本文中采用9组元48基元反应模型和均匀欧拉网格来进行网格精度研究。计算条件:预混气组成为75%(2H₂+O₂)+25%Ar,初压 $p_0 = 8.00 \text{ kPa}$,初温 $T_0 = 300 \text{ K}$ 。采用密度非均匀区放置于ZND爆轰波阵面前以产生横向扰动。计算域宽度为10 mm。表2和图5给出了不同网格精度下的计算结果。表明:网格精度的差异明显影响胞格的规则性和爆轰的平衡模数,工况4收敛为4个三波点,而工况1~3收敛为3个三波点。因此,粗网格比细网格多产生一个三波点。从工况1至工况3,随着网格尺度的增加,胞格变得更不规则。一个比较合理的解释可能是,规则爆轰波胞格表征了跨过横波诱导区内存在较大的热力学差异。如果采用低精度求解,这些热力学差异并不能获得正确求解,导致爆轰胞格的不规则性。E. S. Oran等^[10]研究表明:如果网格精度不够高,会导致在三波点碰撞过程中当地能量不能完全释放,剩下的能量随后释放导致横波马赫弯折,进而转变为三波点。因此,在粗网格精度下出现更多的三波点。

表2 网格精度计算结果

Table 2 Computational results for grid resolution study

| 工况 | $\Delta x/\text{mm}$ | $\Delta y/\text{mm}$ | 自持爆轰模数 | 胞格规则性 |
|----|----------------------|----------------------|--------|-------|
| 1 | 0.080 | 0.080 | 3 | 很好 |
| 2 | 0.100 | 0.100 | 3 | 很好 |
| 3 | 0.125 | 0.125 | 3 | 较好 |
| 4 | 0.143 | 0.143 | 4 | 不规则 |

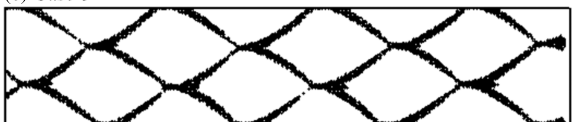
(a) Case 1



(b) Case 2



(c) Case 3



(d) Case 4

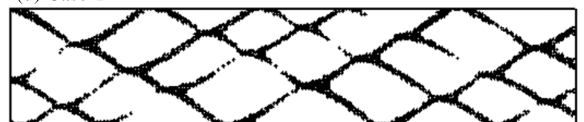


图5 不同网格精度下的数值胞格结构

Fig. 5 Numerical cellular patterns at different grid resolution

3.3 初始扰动影响

尽管胞格爆轰的横向不稳定性可由数值截断误差增长获得,但需要较长的计算域和计算时间。为加快解的收敛,通常采用加入扰动来触发横向不稳定性。我们的经验表明:如果初始扰动太弱,不能触发自持胞格爆轰;如果初始扰动太强,则产生的超驱动爆轰需要很长的时间才衰减为自持胞格爆轰。因此,选择合适强度的初始扰动在爆轰数值模拟中至关重要。

一般来说,自持胞格爆轰模数(或三波点数)与初始扰动无关,即不同强度、形状和位置的初始扰动仅影响胞格爆轰形成过程及所花费的计算时间,最后都会收敛为相同三波点数和诱导激波形状的胞格爆轰。

图 6 给出了不同初始扰动对胞格爆轰的影响(除初始扰动不同外,预混气组成、初温、初压及管道宽度等均与表 2 中工况 2 相同)。不同尺寸、形状和距离的初始扰动分别设置在波阵面之前,矩形或椭圆形的未反应气囊设置在波阵面之后。结果表明:只要所有的初始扰动能触发胞格爆轰,最后所有的自持爆轰波模数均收敛为 3。也就是说,自持胞格爆轰模数与初始扰动无关,仅有的差异在于达到自持胞格爆轰所需要的计算时间。

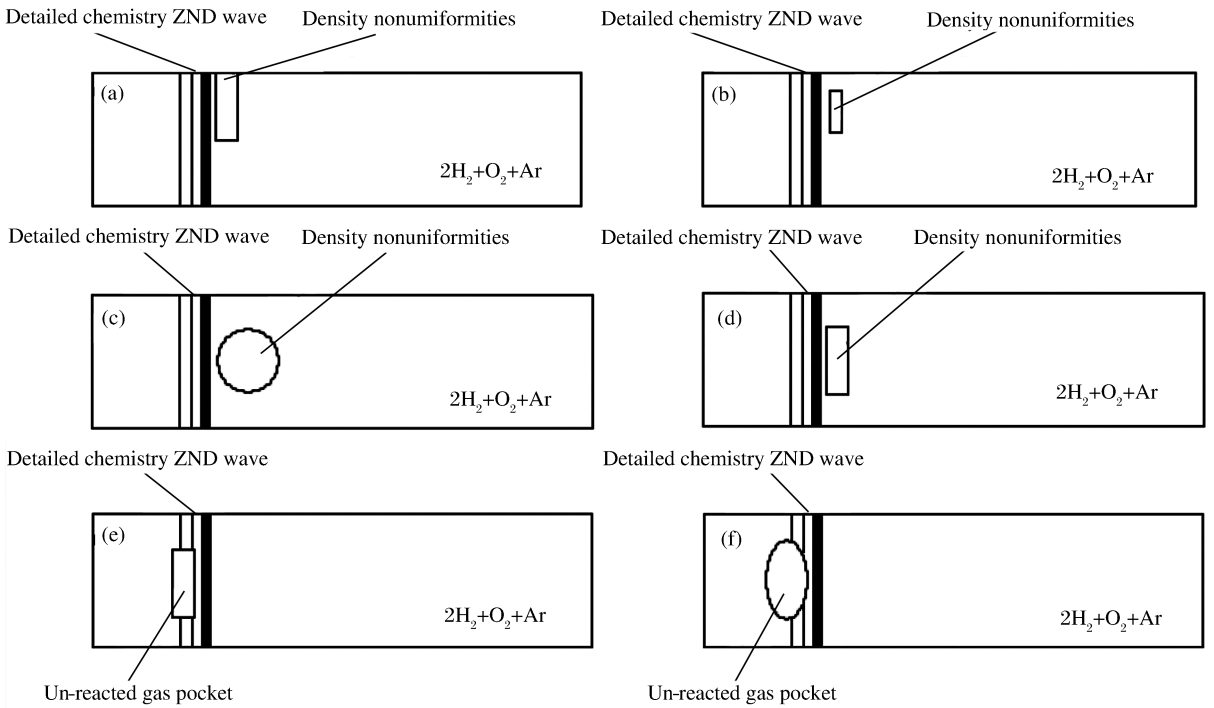


图 6 不同初始扰动设置

Fig. 6 Different settings of initial perturbations

3.4 爆轰流场特点

此处计算条件如图 6(a)所示,图 7 给出了自持胞格爆轰波流场的数值纹影图。该数值纹影是将流场密度的一阶偏导数用灰度显示^[19]。图 7 表明:由于存在横向和纵向的压力波动,引起了波阵面在空间上和时间上的周期变化。非平面的诱导激波阵面由马赫杆和入射激波交替组成,马赫杆比入射激波强。横波与入射激波、马赫杆交于三波点,并延伸进反应区。诱导激波后流场扰动是由波阵面在纵向的波动引起的。滑移线是通过马赫杆、反应相对快的介质与通过入射激波、反应相对慢的介质之间的边界。流场中存在大量射流和旋涡。

图 8 给出了初压为 8.00 kPa 的数值胞格结构。该图表明:爆轰波自持传播,并产生了周期性的爆轰胞格。由于在同一个爆轰胞格中,入射激波强度是不断衰减的,导致前半个胞格两条三波点迹线是凸

形的,而后半个胞格两条三波点迹线是凹形的。在管道宽度方向爆轰胞格不对称。胞格的平均宽度和长度分别为 7.0 mm 和 12.5 mm。其宽长比为 0.56,与实验值一致^[20~21]。

图 9 给出了爆轰波速度沿胞格中心线随距离的变化,其中 x 为横坐标, W 为计算域宽度。图 8 表明:在胞格起点(或上一个胞格终点),爆轰波速度突然增大至约 $1.5D_{CJ}$ (D_{CJ} 为 CJ 爆轰波速度),然后在同一个胞格内速度逐渐衰减,在胞格终点(即下一个胞格起点)速度最小,约为 $0.88D_{CJ}$ 。爆轰波平均速度为 2135 m/s,与 CJ 爆轰速度 2154 m/s 偏差仅 0.88%。在每一胞格内的平均速度也是不同的,偏差大约 ± 90 m/s,这可能是由于爆轰波自身的不稳定性。

图 10 给出了沿胞格中心线诱导激波峰值压力 p 随距离的变化。该图表明:在同一个胞格内,诱导激波强度明显衰减, p/p_0 变化范围为 14~50。

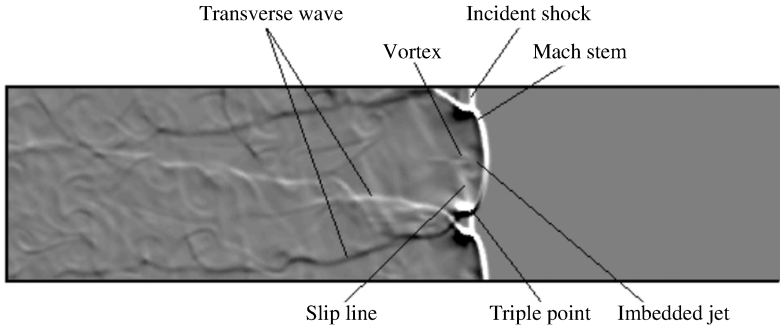


图 7 自持胞格爆轰的数值纹影图

Fig. 7 Numerical schlieren image of self-sustaining cellular detonation



图 8 数值胞格结构

Fig. 8 Numerical cellular pattern

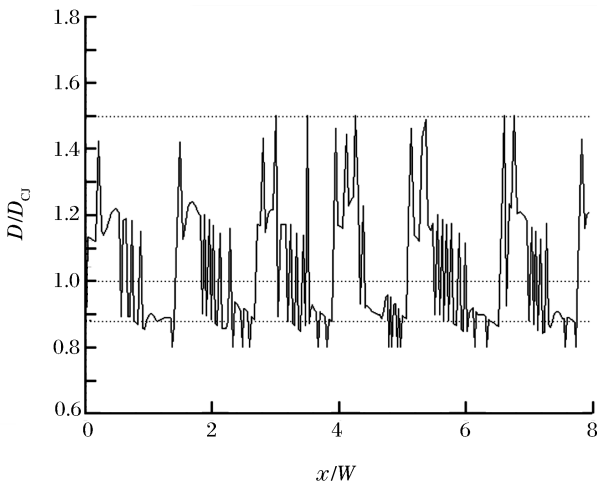


图 9 爆轰波沿胞格中心线速度与距离的关系图
Fig. 9 Detonation velocity along cell centerline versus distance

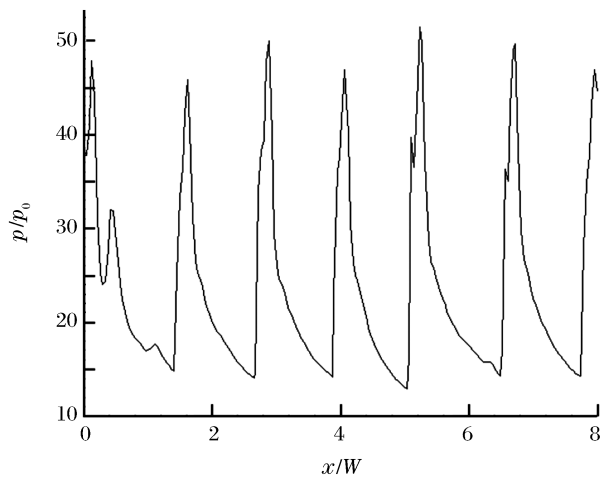


图 10 沿胞格中心线峰值压力随距离的关系
Fig. 10 Peak pressure along cell centerline versus distance

3.4.1 横波与三波点的产生与发展

横波对爆轰波三维结构的形成起了重要作用,他们的产生和维持是爆轰波不衰减的条件。但目前尚无确切的理论来解释这一实验所观察到的现象。

图 11 给出了胞格爆轰形成过程的数值纹影序列图。为形成横波,强加一密度非均匀扰动区于 ZND 爆轰波阵面之前(如图 11(a))。当爆轰波通过扰动区后,在诱导激波阵面上会产生一些小扰动,他们即为横波雏形并以接近当地声速传播,交叉点为三波点。在诱导激波后方产生了一个小旋涡,随后该旋涡不断长大(如图 11(c)),落后于诱导激波的距离也不断增大。三波点数增长为 4 个或更多,且该数目不断变化。图 11(h)表明:爆轰波自持传播,其三波点数稳定为 3。

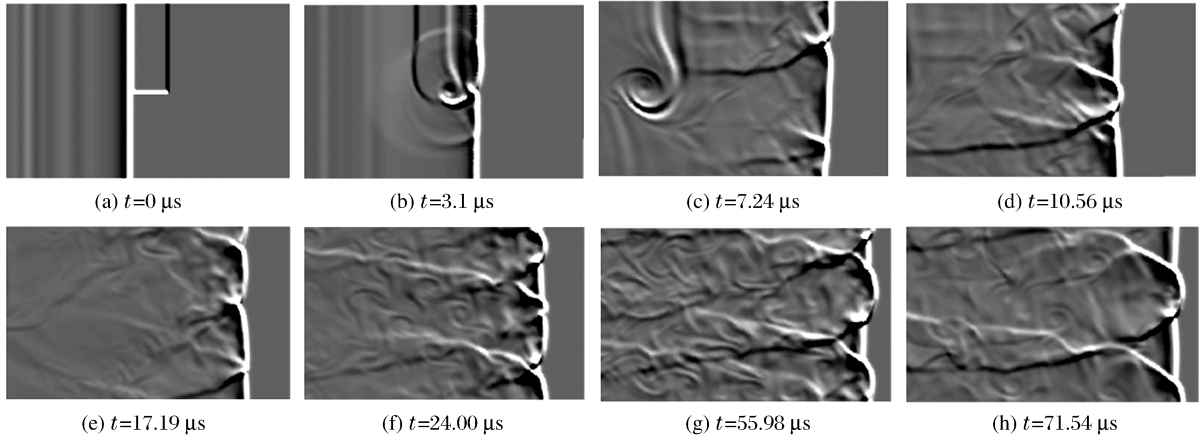


图 11 自持胞格爆轰形成过程数值纹影图

Fig. 11 Numerical schlieren images of formation of self-sustaining cellular detonation

图 12 给出了不同时刻横波和三波点在碰撞过程中的密度、压力、温度、涡量及 OH 质量分数场,其中爆轰波自左向右传播。密度场是纹影图,其他为灰度图。由于横波(或三波点)与壁面碰撞和横波(或三波点)之间的碰撞类似,本文中仅讨论靠近下壁面两横波(或三波点)之间的碰撞。图 12(a)给出了两三波点碰撞前的爆轰流场。该图表明:横波的大部分已相互碰撞,由碰撞产生的高温、高压区向诱导激波靠近。OH 质量分数场表明:入射激波与化学反应区之间有一段明显的距离,也就是说,化学反应区与入射激波分离。尽管马赫杆与化学反应区耦合在一起向前传播,但它的强度已比前时刻弱,尤其比两三波点刚碰撞后的马赫杆弱。这导致相对较低的反应速率和较长的诱导区。当两三波点碰撞后,该马赫杆转变为入射激波。

图 12(b)给出了两三波点碰撞时的爆轰流场。该图表明:两横波的交叉区正要赶上诱导激波。两三波点碰撞导致当地压力和温度非常高,化学反应速率急剧增加。在碰撞点大量的能量释放,类似于“爆炸中的爆炸”或“微爆轰”^[2]。

图 12(c)给出了两三波点碰撞后的爆轰流场。该图表明:高速反应的可燃气与其产物被挤压形成一对分别向前、向后喷射的射流。由于射流的不稳定性,在其头部形成蘑菇状的结构。向前的射流和新形成的马赫杆作用,促使马赫杆进一步向前“鼓包”。此时,马赫杆很强,反应区与其紧紧耦合在一起。

实验^[2,24]和数值结果^[10,22~23]表明:在自持爆轰波中存在弱、强两种类型横波结构。“弱型”包括一个三波点和一个向爆轰波阵面下游延伸的无反应横波;“强型”包括两个或多个三波点且横波的一部分是反应的而另一部分是无反应的。图 13 分别给出了 $t=108.35, 109.60 \mu\text{s}$ 时局部放大的压力、温度和 OH 质量分数场。图 13(a)表明:该时刻出现了双马赫反射,即“强型”横波结构。压力场中 A 点和 B 点是三波点。横波的 ABC 部分在入射激波压缩过的未燃气中传播,并诱导波后化学反应,类似于横向爆轰波。横波的另一部分在完全反应了的混合物中传播,是无反应的。温度和 OH 质量分数场也体现了上述特点。横波在点 D 弯折,可归因于滑移线和横波的作用或在横波碰撞过程中二次能量释放。图 13(b)表明:发生单马赫反射,即“弱型”横波结构。整个横波传播在完全反应了的混合物中,是无反应的。

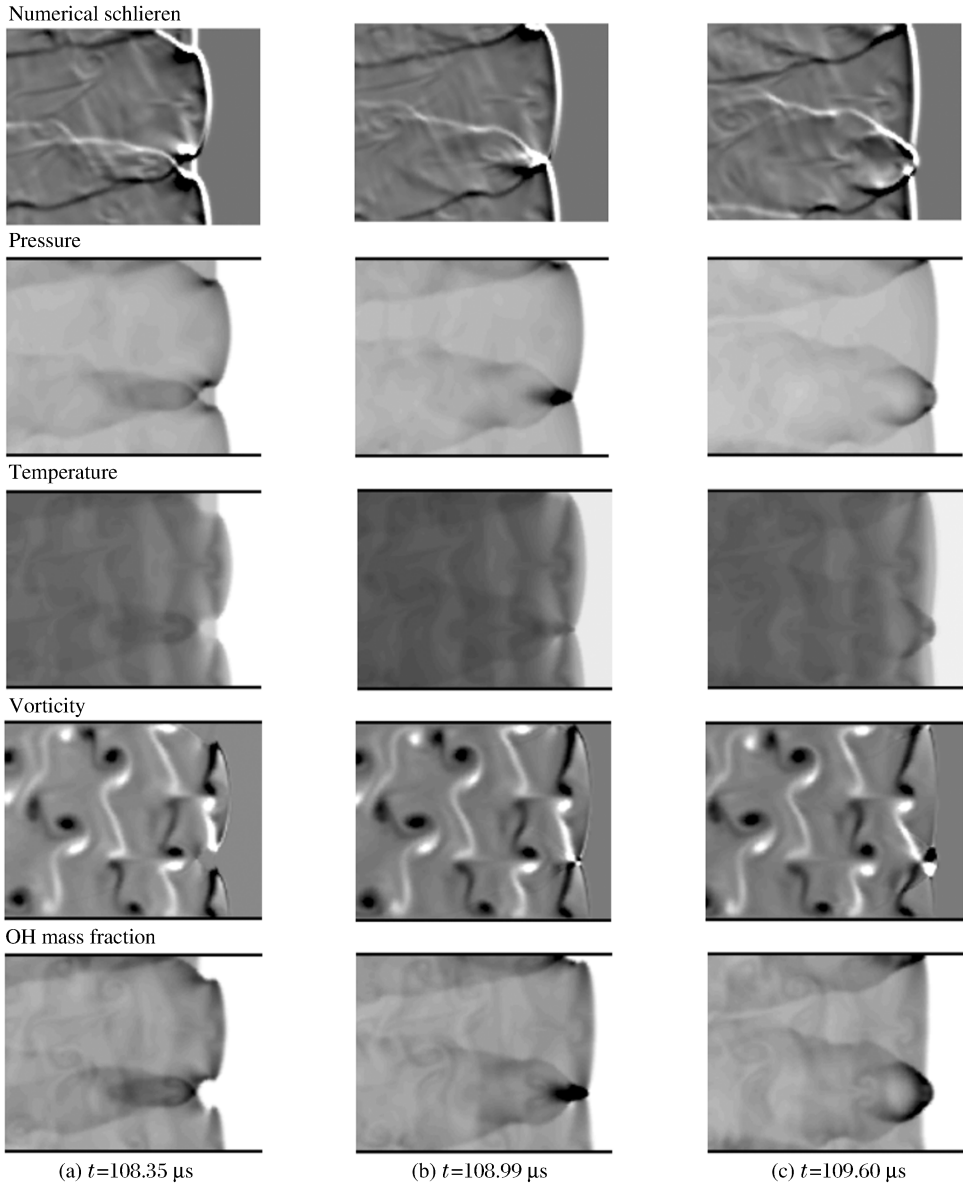


图 12 三波点碰撞前、碰撞时和碰撞后的流场

Fig. 12 Sequence of flow fields in the cycle of the collision

3.4.2 未反应气囊

V. Subbotin^[24] 实验研究初压小于 13.33 kPa 的预混气 $2\text{H}_2 + \text{O}_2 + 3\text{Ar}$ 爆轰波结构时,在纹影图中发现了爆轰波流场存在未反应气囊,并推断:未反应气囊仅存在于濒邻临界爆轰附近的爆轰流场中。V. N. Gamezo 等^[25] 数值研究表明:在胞格爆轰中普遍能观察到未反应气囊。未反应气囊形成由三波点碰撞导致,受活化能影响。D. H. Edwards 实验研究初压为 6.67~10.67 kPa,60% 氩稀释的氢氧爆轰时,也发现了未反应气囊,E. S. Oran 等数值重复了 D. H. Edwards 的实验结果^[26]。表明:在未反应气囊中的声波扰动对气囊的消失速率起了决定性作用。当三波点与壁面碰撞时,未反应气囊被切离波阵面。V. N. Gamezo 等^[6] 研究表明,有三种机理导致未反应气囊的消耗:(1)在低活化能反应系统中的未反应气囊由于诱导激波和横波的压缩而自点火所消耗;(2)对于高活化能系统,由于与相邻已反应高温区混合物通过分子扩散和湍流进行热和质量交换,导致未反应气囊消耗;(3)由于与大旋涡的作用导致未反应气囊的消耗。G. I. Sharpe^[23] 研究表明:网格精度不足加速了未反应气囊的消耗。

本文的研究也证明爆轰流场中存在未反应气囊,如图 12 的温度和 OH 质量分数场所示。在三波

点碰撞之前,由弱入射激波和化学反应区解耦形成的宽诱导区,是未反应气囊形成的前提。在碰撞前的很短时间内,两横波的交叉区通过未反应气中部,并加热反应它,导致未反应气初切成两部分。当三波点碰撞时,未反应气被切离诱导激波阵面形成未反应气囊,漂向下游。在未反应气囊内,温度和压力相对低,大约 90~100 kPa 和 1400~1500 K,与入射激波后未反应气温度和压力基本一致。由于未反应气囊不稳定,在诱导激波下游不断反应而逐渐消失。

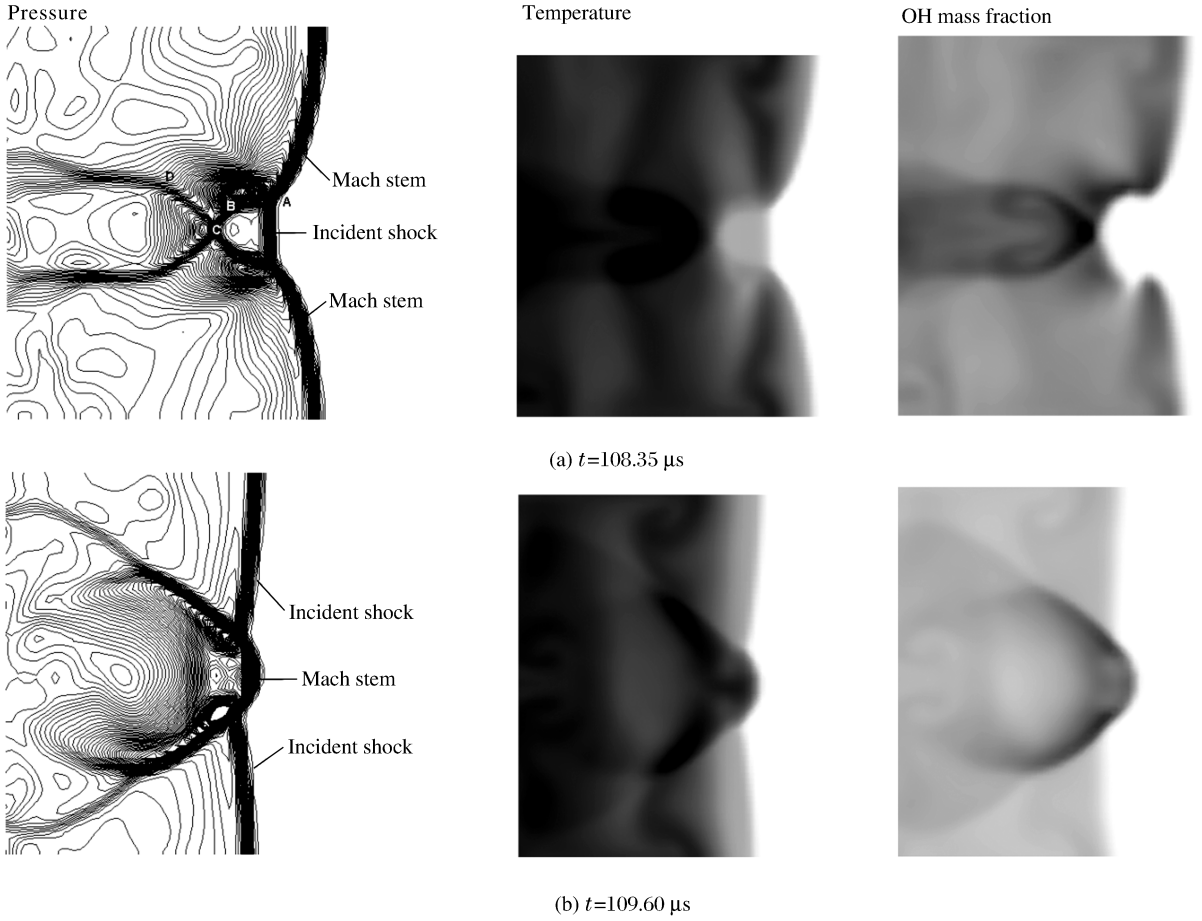


图 13 局部放大的压力、温度和 OH 质量分数场

Fig. 13 Locally enlarged pressure, temperature and OH mass fraction contours

3.4.3 爆轰胞格的二次起爆

爆轰胞格的二次起爆对其自持传播起了重要作用。J. C. Libouton 等^[27]对低初压的预混 $H_2/O_2/Ar$ 爆轰胞格内 OH 发射光强进行了测量。结果表明:由于横波的碰撞,在胞格长度 75%处发生二次起爆。E. S. Oran 等^[26]研究表明:在未反应气内由于横波的碰撞会导致二次起爆。M. H. Lefebvre 等^[28]研究表明:即使横波在胞格长度 75%处碰撞,如果该碰撞发生在完全反应混合气中,则不会导致二次起爆。M. H. Lefebvre 等^[22]指出:二次起爆提供了总释放能量的 24%。E. S. Oran 等^[10]研究表明:三波点碰撞诱导的二次起爆提供了总释放能量的 13.5%,超过了横波碰撞诱导的二次起爆。

图 12 给出了详细的二次起爆过程。该图表明:在反应阵面后的那部分横波相互碰撞,二次起爆发生在未反应气囊中,产生的压力脉冲远离诱导激波阵面,对诱导激波强度和其纵向不稳定不作贡献。当横波碰撞的交叉点跨过反应阵面,两横波在入射激波后的未燃气中碰撞诱导二次起爆。当两三波点碰撞时,二次起爆如点源微爆轰,伴随着大量的能量释放。后两个二次起爆为马赫杆的产生和向外“鼓包”及其不稳定性作贡献。

图 14 给出了能量释放沿同一个胞格中心线随距

离的变化,其中 $E_n = \sum_{i=1}^{N_s} \rho_i h_i$ 为化学能释放。该图表明:在大约胞格长度 70% 左右,二次能量释放开始。在胞格终点或下一个胞格起点,能量释放在很短的距离内急剧增加。

3.5 与实验结果对比

为对比数值和实验结果,在截面为 40 mm × 40 mm 的直爆轰管中进行实验。预混气为 75% (2H₂ + O₂) + 25% Ar,初压 $p_0 = 8.00$ kPa。记录压力时间曲线获得爆轰平均速度,同时记录了 33 mm 宽的胞格结构获得的胞格宽度和宽长比。图 15 表明:实验获得的爆轰胞格基本规则,但不如计算胞格规则。这可能是由于实验设备的限制如壁面粗糙度和预混气组成等。R. Strehlow^[29] 研究表明:对于氢氧爆轰,如果稀释剂氩的浓度小于 50%,会产生不规则的爆轰波胞格。本文中预混气稀释剂 Ar 所占比例为 25%,也就产生了尺度轻微不规则的爆轰波胞格。胞格宽度、胞格宽长比、平均爆轰速度的实验与数值结果分别为 8.2、7.0 cm,0.58、0.56,2087、2135 m/s,表明:计算胞格宽度略小于实验值,计算平均速度与实验值基本一致。

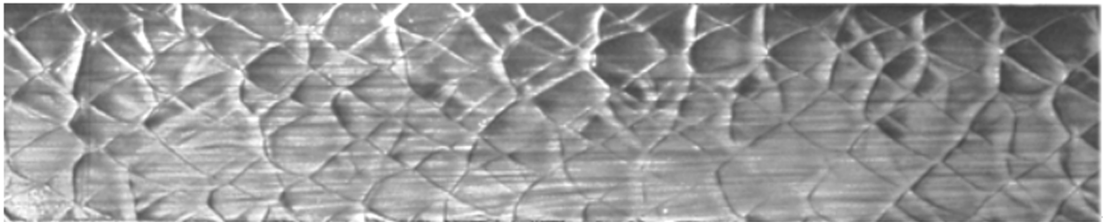


图 15 实验胞格结构

Fig. 15 Experimental cellular pattern

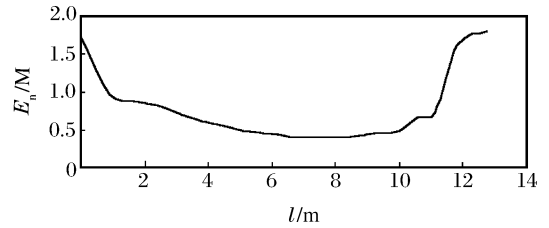


图 14 沿胞格中心线的能量释放与距离的关系

Fig. 14 Energy release along the cell centerline versus distance

4 结 论

基于二维反应欧拉方程数值研究爆轰波,采用基元反应模型描述爆轰化学反应过程。利用 5 阶 WENO 格式求解对流项,采用 2 阶附加半隐的龙格-库塔法处理化学反应源项所引起的刚性。利用文献[10]算例校核计算程序,研究了网格精度和初始扰动对计算结果的影响,并对爆轰流场(尤其是横波的产生和发展、未反应气囊及爆轰胞格的二次起爆等)进行了较深入的分析。结论如下:

(1) 网格精度研究表明,精度的差异明显影响胞格的规则性和爆轰的平衡模数,随着网格尺度减小,胞格由不规则变为规则。预混气组成、初压、初温及管道宽度给定,三波点数收敛为确定值。(2) 初始扰动研究表明,足够强度的初始扰动可再现胞格爆轰,最终胞格爆轰的模数(三波点数)与初始扰动的形状、大小、位置均无关。(3) 横波由数值初始扰动产生,但其平衡数目及结构取决于预混气组成、初温、初压及管道宽度,而与数值扰动无关。本文数值模拟得到了横波强、弱两种形态。(4) 入射激波与化应反应区解耦后,二者间的未反应气体因三波点的碰撞而切离,形成流场中的未反应气囊。(5) 沿胞格中心线,爆轰波速度变化范围为 $0.88D_{CJ} \sim 1.5D_{CJ}$,爆轰平均速度与 CJ 爆轰速度仅偏差 0.88%。峰值压力与 p_0 之比为 14~50。(6) 爆轰波胞格的二次起爆主要取决于三波点的碰撞。在三波点碰撞过程中,产生大量的能量(即第一次能量释放)。由于横波的碰撞,在胞格长度的 70% 左右产生第二次能量释放。(7) 计算爆轰波平均速度、胞格宽长比与实验值基本一致,但计算胞格宽度略比实验值略小。

参考文献:

- [1] White D R. Turbulent structure of gaseous detonation[J]. The Physics of Fluids, 1961,4(4):465-479.
- [2] Fickett W, Davis W C. Detonation[M]. Berkeley, CA: University of California Press, 1979.
- [3] Taki S, Fujwara T. Numerical analysis of two dimensional nonsteady detonations[J]. J AIAA, 1978,16(1):73-

77.

- [4] Kailasanath K, Oran E S, Boris J P, et al. Determination of detonation cell size and the role of transverse waves in two-dimensional detonations[J]. *Combustion and Flame*, 1985,61:199-209.
- [5] Bourlioux A, Majda A J. Theoretical and numerical structure for unstable two-dimensional detonations[J]. *Combustion and Flame*, 1992,90:211-229.
- [6] Gamezo V N, Desbordes D, Oran E S. Formation and evolution of two-dimensional cellular detonations[J]. *Combustion and Flame*, 1999,116:154-165.
- [7] Lian Y S, Xu K. A gas-kinetic schemes for multimaterial flows and its application in chemical reactions[J]. *Journal of Computational Physics*, 2000,163:349-375.
- [8] 张德良,谢巍,郭长铭,等.气相爆轰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 De-liang, XIE Wei, GUO Chang-ming, et al. Numerical simulation of cellular structures and Mach reflection of gaseous detonation waves[J]. *Explosion and Shock Waves*, 2001,21(3):161-167.
- [9] 刘云峰,王健平.有限谱 ENO 格式在爆轰波数值模拟中的应用[J].*爆炸与冲击*,2003,23(4):343-348.
LIU Yun-feng, WANG Jian-ping. Numerical simulation of detonation wave with finite spectral ENO scheme[J]. *Explosion and Shock Waves*, 2003,23(4):343-348.
- [10] Oran E S, Weber J W, Stefaniw E I, et al. A numerical study of a two-dimensional H_2-O_2-Ar detonation using a detailed chemical reaction model[J]. *Combustion and Flame*, 1998,113:147-163.
- [11] Deiterding R. Efficient simulation of multi-dimensional detonation phenomena[J]. *Conference on Science Computing*, 2002:94-101.
- [12] 胡湘渝,张德良,姜宗林.气相爆轰波基元反应模型数值模拟[J].*空气动力学学报*,2003,21(1):59-66.
HU Xiang-yu, ZHANG De-liang, JIANG Zong-lin. Numerical simulation of gaseous detonation with detailed chemical reaction model[J]. *Acta Aerodynamica Sinica*, 2003,21(1):59-66.
- [13] 胡宗民,高云亮,张德良,等.爆轰波在楔面上反射数值分析[J].*力学学报*,2004,36(4):385-391.
HU Zong-min, GAO Yun-liang, ZHANG De-liang, et al. Numerical simulation of gaseous detonation reflection over wedges with a detailed chemical reaction model[J]. *Acta Mechanica Sinica*, 2004,36(4):385-391.
- [14] Gordon S, McBride D J. Computer Program for a Calculation of Complex Chemical Equilibrium Compositions, Rockets Performance, Incident and Reflected Shocks, Chapman-Jouguet Detonations[R]. NASA SP-273, 1971.
- [15] Oran E S, Young T R, Boris J P, et al. Weak and strong ignition: I. Numerical simulation of shock tube experiments[J]. *Combustion and Flame*, 1982,48:135-148.
- [16] Kee R J, Miller J A. Chemkin-II: A Fortran Chemical Kinetics Package for the Analysis of Gas-Phase Chemical Kinetics[R]. SAND 89-8009B, 1989.
- [17] ZHONG Xiao-lin. Additive semi-implicit Runge-Kutta methods for computing high-speed nonequilibrium reactive flows[J]. *Journal of Computational Physics*, 1996,128:19-31.
- [18] SHU Chi-wang. Essentially non-oscillatory and weighted essentially non-oscillatory schemes for hyperbolic conservation laws[R]. NASA/CR-97-206253, 1997.
- [19] Ingram D, Jiang B, Causon D. On the role of turbulence in detonation induced by Mach stem reflection[J]. *Shock Waves*, 1998,8:327-336.
- [20] Vasiliew A A, Gavrilenko T P, Topchian M E. On the Chapman-Jouguet surface in multiheaded gaseous detonations[J]. *Astronautica Acta*, 1972,17:499.
- [21] Hanana M, Lefebvre M H, Tiggelen P J V. Preliminary experimental investigation of the pressure evolution in detonation cells[J]. *Experimental Thermal and Fluid Science*, 2000,21:64-70.
- [22] Lefebvre M H, Oran E S. Analysis of the shock structures in a regular detonation[J]. *Shock Waves*, 1995,4:277-283.
- [23] Sharpe G J. Transverse waves in numerical simulations of cellular detonations[J]. *Journal of Fluid Mechanics*, 2001,447:31-51.
- [24] Subbotin V. Two kinds of transverse wave structures in multi-front detonation[J]. *Fizika Goreniya I Vzryva*, 1975,11(1):96-102.

- [25] Gamezo V N, Desbordes D, Oran E S. Two-dimensional reactive flow dynamics in cellular detonation waves[J]. *Shock Waves*, 1999,9:11–17.
- [26] Oran E S, Yong T R, Boris J P, et al. A study of detonation structure: The formation of unreacted gas pockets [A]. Nineteenth Symposium (international) on combustion[C]. Pittsburgh: The Combustion Institute, 1982;573–582.
- [27] Libouton J C, Dormal M, Tiggelen P J V. Reinitiation progress at the end of the detonation cell[J]. *Progress in Aeronautic and Astronautic*, 1981,75:358–369.
- [28] Lefebvre M H, Oran E S, Kailasanath K, et al. Simulation of cellular structure in a detonation wave[J]. *Progress in Aeronautic and Astronautic*, 1993,153:64–77.
- [29] Strehlow R. The nature of transverse waves in detonations[J]. *Astronautica Acta*, 1969,14:539–548.

Numerical study on cellular detonation in a straight tube based on detailed chemical reaction model

WANG Chang-jian^{1,2*}, XU Sheng-li^{1,2}

(1. *Department of Mechanics and Mechanical Engineering, University of Science and Technology of China, Hefei 230026, Anhui, China;*

2. *State Key Laboratory of Explosion Science and Technology, Beijing Institute of Technology, Beijing 100081, China*)

Abstract: Cellular detonation in a straight tube was numerically studied, based on two-dimensional reactive Euler equations and detailed chemical reaction model. The 5th order WENO scheme was employed to resolve the convective terms, and the additive semi-implicit Runge-Kutta methods was used to treat the stiffness caused by the chemical source terms. The contours of density, pressure, temperature and typical species mass fraction as well as numerical cellular pattern etc. were obtained. The results show that, the different grid resolutions evidently influence the regularity of detonation cells and the equilibrium detonation mode number. As grid size increases, the detonation wave develops more irregular cells and more additional triple points. For the given gas mixtures, initial pressure, initial temperature and tube width, the final self-sustaining detonation mode number is converged to a fixed value. It is also independent of the variety of initial perturbations, provided that the initial perturbations are sufficiently strong to reproduce the self-sustaining cellular detonation. Detonation velocity ranges from $0.88D_{CJ}$ to $1.5D_{CJ}$ along the cell centerline, and the average detonation speed is only 0.88% different from the CJ value. The ratio of peak pressure to initial pressure ranges from 14 to 50 along the cell centerline. The average detonation speed and cell aspect ratio are remarkably agreeable with experimental values, but the computational cells are slightly smaller than the experimental cells. Some complicated detonation physics including transverse waves, un-reacted gas pocket, re-initiation of detonation cells etc. was recognized.

Key words: mechanics of explosion; detailed chemical reaction model; numerical simulation; cellular detonation; re-initiation; cellular pattern

* Corresponding author: WANG Chang-jian
E-mail address: chjwang@ustc.edu.cn
Telephone: 0511-3607322