

文章编号: 1001-1455(2005)06-0512-07

用环形激波聚焦实现爆轰波直接起爆的数值模拟*

滕宏辉¹, 张德良¹, 李辉煌², 姜宗林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. 中国科学技术大学力学和机械工程系, 合肥 230026)

摘要: 利用基元反应模型和有限体积法对环形激波在可燃气体中聚焦实现爆轰波直接起爆进行了数值模拟。研究表明, 标准状态下的氢气-空气混合气体在马赫数为 3.1 以上的环形激波聚焦产生的高温高压区作用下会诱发可燃气体的直接起爆形成爆轰波, 爆轰波与激波和接触间断相互作用产生了复杂的波系结构; 爆轰波爆点位置在对称轴上并不是固定的点, 而是随着初始激波马赫数的变化而发生移动; 可燃气体初始温度和压力对起爆临界马赫数都有影响, 但是初始温度的影响大得多。

关键词: 爆炸力学; 直接起爆; 激波聚焦; 爆轰波; 数值模拟

中图分类号: O381

国标学科代码: 130 · 3510

文献标志码: A

1 引 言

爆轰是一种前导激波和化学反应耦合自持传播的具有强间断的现象。爆轰波形成是非常复杂的过程, 一直是爆轰学中被关注的问题。目前通常认为爆轰波的形成可分为爆燃转爆轰(DDT)和直接起爆(direct initiation)两种, 前者是由于流动过程中各种非线性不稳定性导致低速爆燃向高速爆轰的转变, 而后者是直接形成过驱动爆轰波并逐渐过渡到 C-J 爆轰, 对点火区的能量密度要求较高。在爆轰驱动^[1]和爆轰推进等领域中, 要求在尽可能短的距离和时间内形成稳定的爆轰波, 因此采用直接起爆的方法是未来的发展方向。目前在实验中经常采用的有电熔丝熔断点火、火花放电点火、高能起爆炸药点火等, 但是由于点火区的能量密度不足, 很难实现直接起爆而通常是 DDT 过程。由于激波聚焦^[2~3]可以在聚焦点附近产生高温高压区, 这个区域可以通过增加激波马赫数获得很高的能量密度, 因此理论上可以作为高能点火区实现爆轰波的直接起爆。直接起爆的问题以前主要是研究流动中的动力学参数^[4]及其相关的流体力学和物理-化学机制^[5], 偏重于基础理论研究。B. E. Gelfand 等^[6]和 A. M. Bartenev 等^[7]首先利用激波聚焦实现了爆轰波的点火, 在激波管道末端设置具有不同形状的反射面, 研究了激波在反射后聚焦产生高温高压并点燃可燃气体的情况, 观察到了点火后爆轰波和爆燃波分别形成和传播的过程, 并分析了反射面形状和初始条件等因素对聚焦点的影响。王春等^[8]在设置内楔面的分部式激波管中, 实现了激波聚焦产生的射流前向点燃高速运动的气流。

环形激波聚焦^[9]是轴对称激波聚焦的一种, 通过激波绕射后在对称轴上产生聚焦并在聚焦点附近形成高温高压区。环形激波聚焦具有聚焦前后波的传播方向不发生改变, 聚焦发生在对称轴上没有壁面边界层的干扰的特点, 是一种比较有特色的聚焦方式, 因此对利用其实现直接起爆的研究是有意义的。本文中通过拟采用基元反应模型和有限体积法对环形激波聚焦直接起爆过程进行数值模拟, 研究爆轰波形成和发展的过程, 揭示直接起爆对流场和聚焦的影响, 讨论起爆点的位置受气体温度的影响而发生的变化, 计算、分析温度和压力对起爆的临界马赫数的影响。

* 收稿日期: 2004-10-21; 修回日期: 2005-03-08

基金项目: 国家自然科学基金项目(10276035)

作者简介: 滕宏辉(1981—), 男, 博士研究生。

2 物理问题和数值方法

本文中所讨论的流动区域如图 1 所示。在外半径 $R=0.05\text{ m}$ 、内半径 $r=0.04\text{ m}$ 的环形截面管道中的中有一正激波向右传播,由于传播截面的突然变化在圆截面管道中激波发生绕射形成向对称轴传播的绕射激波,绕射激波会聚到对称轴上形成高温高压的聚焦区。由于管道中充满了可燃气体,在一定的条件下聚焦区能够诱发可燃气体的化学反应实现直接起爆。通常利用数值模拟再现实验中的爆轰形成过程是非常困难的,因为通过瞬态能量释放形成的点火区的初始条件在计算中很难确定,因此数值模拟结果的可信度不高。本文中采用激波绕射聚焦形成直接起爆,而且在聚焦过程中无壁面反射,因此流场的重复性很好,数值模拟的结果是有意义的。

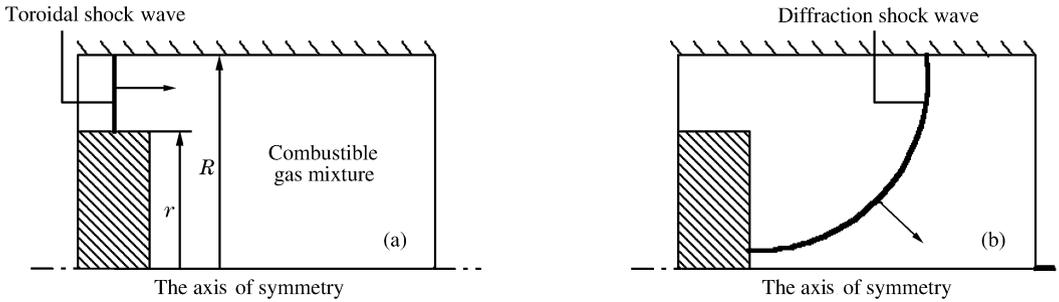


图 1 环形激波聚焦实现起爆的示意图

Fig. 1 The sketch of the initiation induced by toroidal shock waves focusing

由于本文的主要目的是研究可燃气体中的聚焦诱发直接起爆,粘性在流动和起爆过程中的作用很小,因此可以忽略粘性耗散的影响,控制方程选用轴对称多组分守恒型 Euler 方程组

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial x} + \frac{\partial \mathbf{G}}{\partial r} + \frac{1}{r} \mathbf{S} = \mathbf{S}_c$$

式中

$$\begin{cases} \mathbf{U} = [\rho_1, \rho_2, \dots, \rho_n, \rho u, \rho v, e]^T \\ \mathbf{F} = [\rho_1 u, \rho_2 u, \dots, \rho_n u, \rho u^2 + p, \rho uv, (e + p)u]^T \\ \mathbf{G} = [\rho_1 v, \rho_2 v, \dots, \rho_n v, \rho uv, \rho v^2 + p, (e + p)v]^T \\ \mathbf{S} = [\rho_1 v, \rho_2 v, \dots, \rho_n v, \rho uv, \rho v^2, (e + p)v]^T \\ \mathbf{S}_c = [\dot{\omega}_1, \dot{\omega}_2, \dots, \dot{\omega}_n, 0, 0, 0]^T \end{cases}$$

在以上各式中 $\rho_i (i=1, \dots, n)$ 为第 i 组分的质量分数,混合气体的总密度为 $\rho = \sum_{i=1}^n \rho_i$; u, v 为 x 和 r 方向的速度分量; e 为单位体积总能,且有 $e = \rho h - p + \frac{1}{2} \rho (u^2 + v^2)$,混合气体比焓 $h = \sum_{i=1}^n \frac{\rho_i h_i}{\rho}$,第 i 种组分的焓 h_i 由多项式拟合的方法给出^[10]; p 为理想混合气体的压力,由道尔顿分压定律和组分气体状态方程得出 $p = \sum_{i=1}^n \rho_i R_i T$, R_i 为第 i 种组分的气体常数, T 为混合气体温度; $\dot{\omega}$ 为基元反应模型中第 i 组分的单位体积的质量生成率。

本文中采用时间分裂算法将流动和化学反应解耦后分别求解^[11]。首先在自适应四边形无结构网格^[12]上离散控制方程,并选用了 MUSCL-Hancock 格式和 HLLC 格式求解流动过程。流场中的化学反应对起爆过程影响很大,通常的化学反应模型有多步反应模型和基元反应模型,前者对体系的化学反应人为的进行了线性化从而使计算效率得到了提高,而后者具有更高的计算精度。为了提高数值结果的可靠性,选用了 11 种组分 ($\text{H}_2, \text{O}_2, \text{O}, \text{H}, \text{OH}, \text{HO}_2, \text{H}_2\text{O}_2, \text{H}_2\text{O}, \text{N}_2, \text{N}, \text{NO}$) 23 个反应的基元反应模型,利用 CHEMKIN 程序包求解化学反应^[13]。计算区域如图 1 所示,初始时刻激波位于环形管道中向左方的静止气体传播。上边界和后台阶为固壁,下边界为对称轴,在 Euler 方程的计算中统一给成无

反射滑移壁面,并且不考虑壁面对化学反应的影响,即给定化学非平衡流动的非催化壁面条件。在计算中所有的初始激波马赫数都大于 2.068,因此非定常正激波后方是超声速流动,左边界指定为超声速来流边界。对右边界采用自由出口边界,同时确保计算结束时波面尚未到达右边界,以减小误差。在数值模拟中采用了均匀正交网格,网格尺度为 0.5 mm,网格加密 1 倍的计算试验发现数值结果几乎没有差异,说明网格密度足够大网格相关性很小。本文中数值模拟结果的输出压力利用波前压力无量纲化,空间坐标单位为米。

3 计算程序的初步验证

研究目的是利用数值方法来模拟激波聚焦实现爆轰波直接起爆的过程,因此问题的关键是能否正确的模拟可燃气体在高温高压作用下的力学和化学行为。为了对计算程序进行初步的可靠性检验,首先计算了一维静止的高温高压区诱导可燃气体的起爆过程。模拟结果表明,对标准状态下的氢气-空气可燃气体(化学当量比 $H_2 : O_2 : N_2 = 2 : 1 : 4$, $T = 298 \text{ K}$, $p = 0.1 \text{ MPa}$)在 $x = 0$ 处的高能点火区(网格数大于 5, $T = 3\ 000 \text{ K}$, $p = 3.0 \text{ MPa}$)作用下会迅速的产生稳定自持传播的爆轰波,图 2 显示了不同时刻爆轰波传播到不同位置的的压力分布,可以看到计算所得到的爆轰波的压力分布与 C-J 爆轰的自相似解基本符合。同时通过图 2 的波面位置与计算得到的传播时间联合得到爆轰波的传播速度为 1 958.1 m/s,无量纲 C-J 压力为 16.2,在几乎相同条件下经典的基元反应模型的验证报告^[14]给出相应的值分别为 1 971.4 m/s 和 15.8,相对误差均在 3% 之内。因此,本文的反应模型和数值算法可以用来模拟可燃气体高温高压作用下直接起爆问题,计算结果是可信的。

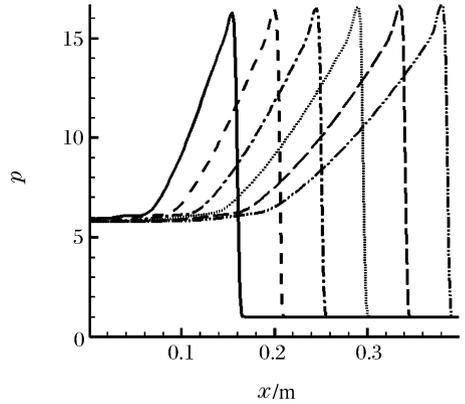


图 2 一维爆轰压力分布曲线

Fig. 2 The pressure distribution of one dimensional detonation wave

4 计算结果讨论

4.1 聚焦实现直接起爆的流场分析

图 3 给出了标准状态下马赫数为 3.6 的环形激波聚焦后,在氢气-空气混合气体(化学当量比为 $H_2 : O_2 : N_2 = 2 : 1 : 4$, $T = 298 \text{ K}$, $p = 0.1 \text{ MPa}$)中直接起爆的不同时刻的流场。从图 3(a)中可以看出,由于入射环形激波马赫数比较大,因此绕射过程中发生了非均匀膨胀,弧形波面在后台阶壁面附近向内凹陷形成很弱的马赫杆。在绕射激波向对称轴传播过程中,台阶壁面前方的激波随着波面面积的减小,波后压力不断增大,而且增加越来越快,最终在对称轴上实现聚焦^[9]。聚焦点附近的可燃气体在高温高压作用下发生了放热反应,局部温度明显升高,可达 3 615 K,而且化学反应面耦合激波向外传播,如图 3(b)所示。通过传播时间和距离的计算,发现化学反应开始时向前传播的对称轴附近的激波马赫数高达 9.7 以上,随着传播距离的增加马赫数逐渐下降但始终保持在 5.2 以上,因此可以得出结论,激波聚焦诱发了直接起爆形成了爆轰波。爆轰波在向前方传播的过程中发生了马赫反射,马赫杆和反射激波均与化学反应耦合传播,最后形成了轴对称椭球形的爆轰波,如图 3(c)所示。爆轰波面在传播中马赫杆在对称轴附近会向前倾斜,同时由于受到环形管道出口滑移面的影响会形成向内收缩的凹面反射爆轰波,如图 3(d)所示。在图 3(e)中,台阶壁面附近的反射爆轰波在环形管道的入口发生绕射形成上行的爆轰波,而反射爆轰波的波阵面形状则由于滑移面的影响进一步从初始时刻的弧形面发展成为两段直线爆轰波,在连接两段爆轰波的拐点处形成了一道新的激波,这个拐点也就成为新的三波点。最后形成的流场如图 3(f)所示,有一道向前传播的近似为平面的爆轰波,在波面后存在一道横波往复运动,此时波面后的圆截面管道中已经不存在可燃气体,从而完成了激波聚焦和爆轰波直接起爆的过程。

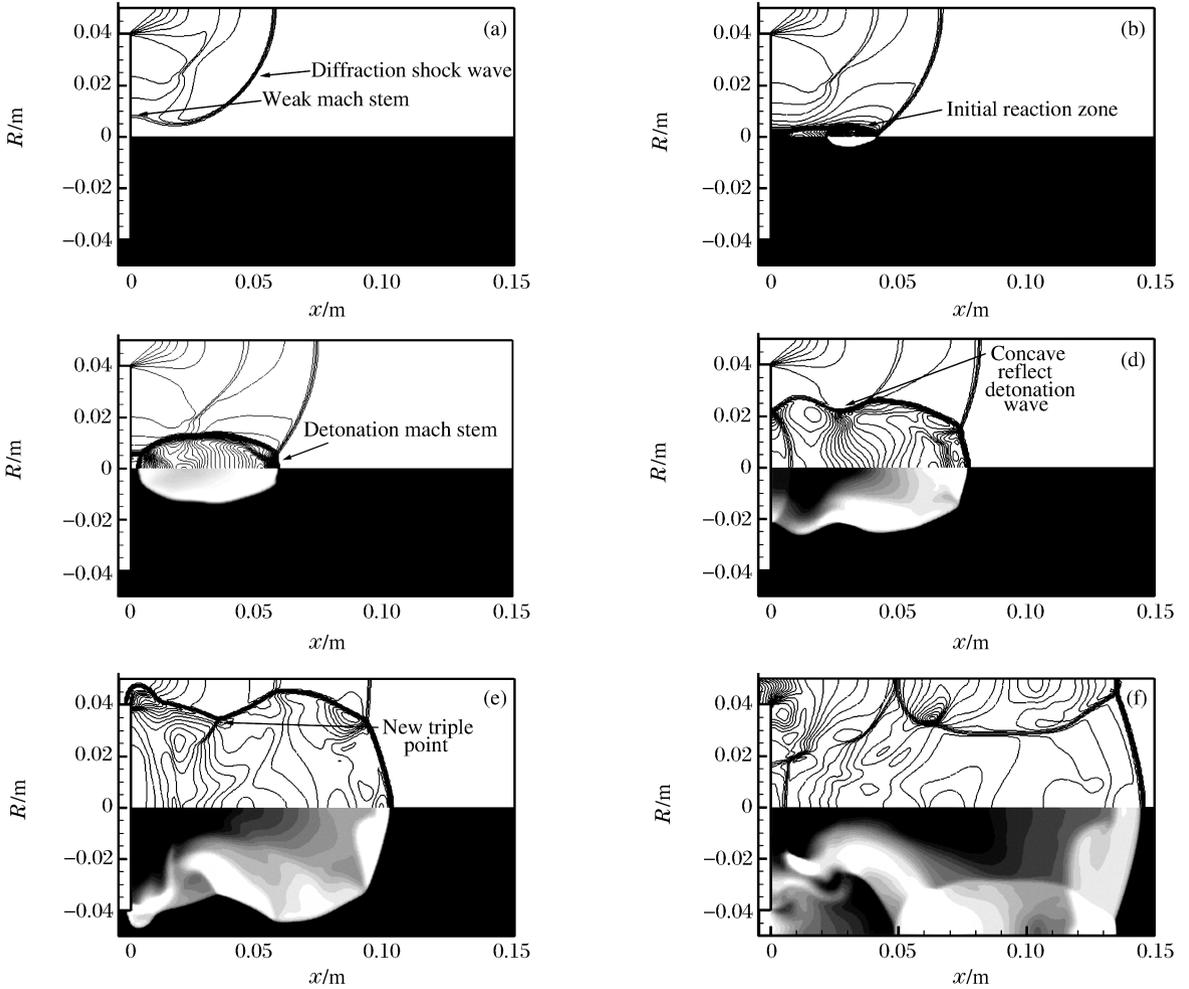


图 3 马赫数为 3.6 的激波聚焦实现起爆的压力等值线(对称轴上方)和温度云图(对称轴下方)
 Fig. 3 The pressure contour lines (up the axis) and temperature contour flood (below the axis) of direct initiation induced by shock focusing with the Mach number 3. 6

4.2 激波在惰性气体和可燃气中聚焦的比较

为了研究化学反应对聚焦过程的影响,模拟了环形激波在惰性气体中聚焦的流动,如图 4 所示。图 4(a)所示的环形激波绕射,绕射激波向对称轴传播的情况与可燃气中的流动完全相同。但是在对称轴上发生聚焦后,聚焦点附近的温度和压力随着反射激波的传播而迅速下降,而且在对称轴上发生了马赫反射,如图 4(b)所示。随着激波的传播,三波点远离对称轴,同时马赫杆变长,由于对称轴附近的马赫杆的马赫数较大,马赫杆在对称轴附近向前凸起,如图 4(c)所示。仔细观察可以发现,激波的马赫杆上存在一个拐点连接对称轴附近的弧形马赫杆和外围的直线马赫杆,在该点的后方内侧存在一个低压涡区,这种结构即为球面双马赫反射^[3],而激波聚焦的起爆过程中形成的爆轰波不会出现这种流动结构。通过比较可以发现,激波聚焦诱发的化学反应在聚焦点形成起爆源,从而完成了可燃气中的直接起爆过程,同时使原有的波系结构发生了很大的改变。

激波到达对称轴后聚焦点附近的无量纲压力分布曲线如图 5 所示,从图 5(a)显示的压力曲线可以看到,激波聚焦在对称轴上的最早到达点两侧产生了两个极大值从而形成 U 型曲线,聚焦的几何聚焦点(绕射聚焦激波面在对称轴上的最早到达点)和有效聚焦点(压力极大值点)是不重合的。这是由波阵面马赫数随绕射角的分布和聚焦波阵面入射角的关系决定的,详细的讨论见文献[9]。在本文的算例中,惰性气体中的 U 型曲线第一个有效聚焦点位于几何聚焦点前方,其压力为 160. 8;第二个有效聚焦点位于几何聚焦点的后方壁面上,其压力为 108. 2。聚焦从几何聚焦点发展到有效聚焦点的

过程中,最大压力不断升高。如果聚焦发生在可燃气体中,在第一个有效聚焦点附近就会诱发可燃气体剧烈的化学反应,化学反应使波后压力值在聚焦高压的基础上又产生了明显的增加,达到 189.4,如图 5 (b)所示。通过比较图 5(a)和图 5(b)中相应位置的曲线可以看到,惰性气体的聚焦会在前导激波后方产生一道稀疏波,而可燃气体中爆轰波的起爆使压力在原来的稀疏波区产生了一个近似的压力平台,压力维持在 120 左右,提升了由于激波反射形成的波后稀疏波造成的压力下降。

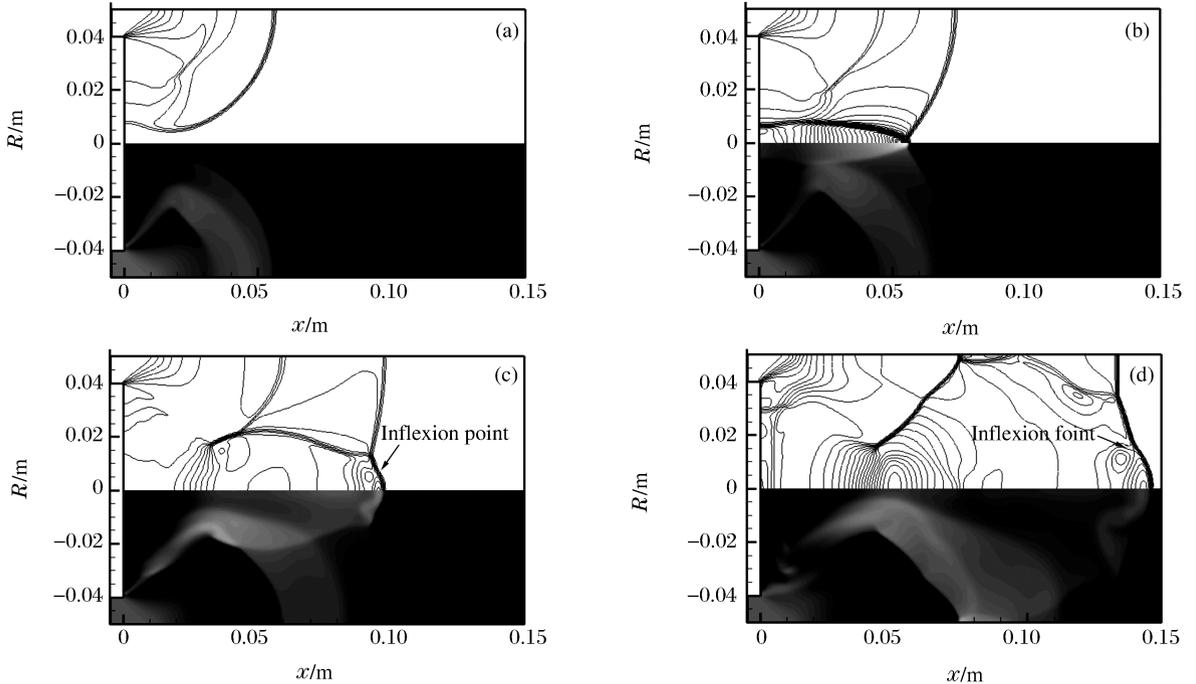


图 4 马赫数为 3.6 的激波在惰性气体中聚焦的压力等值线(对称轴上方)和温度云图(对称轴下方)

Fig. 4 Pressure contour lines (up the axis) and temperature contour flood (below the axis) of the shock focusing with Mach number 3.6 in the inert gases

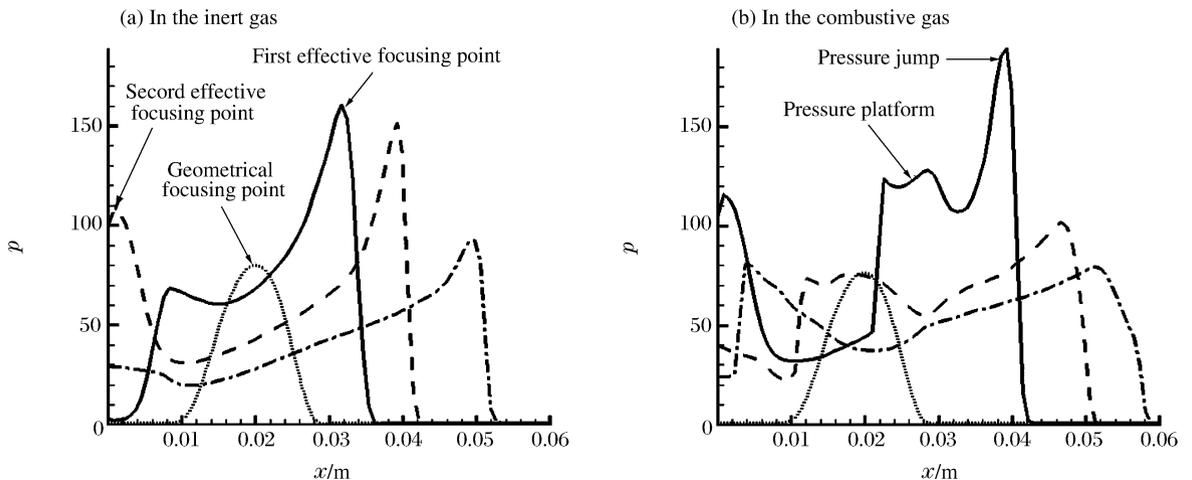


图 5 马赫数为 3.6 的激波在惰性和可燃气体中聚焦点附近的压力分布

Fig. 5 Pressure distribution around the focusing point in the inert and combustible gas with shock Mach number 3.6

4.3 不同初始温度和压力对起爆的影响

数值模拟的结果表明,环形激波聚焦实现爆轰波的直接起爆实际上发生在几何聚焦点前方的某一点,其位置并不是固定的,而是随着聚焦能量的变化而改变。相同组分和压力下的可燃气体中马赫数为 3.6 的入射激波起爆点的位置随可燃气体的温度变化,如图 6 所示。可以看到高温下的起爆发生在几何聚

焦点附近,起爆点随着初始温度的降低沿着对称轴向前方移动,趋向于第一个有效聚焦点,而且在较低的温度($T < 298$ K)下起爆点由于流动和点火延迟的作用甚至可能移动到第一个有效聚焦点的前方。起爆点的位置随着气体温度的变化而改变,是环形激波聚焦形成爆轰波直接起爆的一个重要特征,它的形成是由于环形激波聚焦参数的提高有一个渐增的过程,是环形聚焦几何和有效聚焦点的分离这一特性的体现。

直接起爆本质上是利用高温高压来实现的,因此初始压力和温度对点火区能量的影响是最重要的因素。表 1 列出了在不同初始温度和压力下起爆的临界马赫数,如果马赫数小于这个值,则聚焦不能形成直接起爆。从表 1 中可以看出,起爆的临界马赫数受初始压力变化的影响较小,而受温度变化影响很大。对于一定初始温度下的可燃气体,其初始压力变化对某一马赫数下起爆与否影响不大,而对于一定初始压力下的可燃气体,其初始温度变化对某一马赫数下起爆与否有很大的影响,随着温度的升高临界马赫数迅速下降。同时数值结果表明,不同初始温度下临界马赫数随着压力变化也有着相似的规律,比如 0.05 MPa 时起爆的临界马赫数最小,压力的增大或减小都会导致马赫数的增加。可以肯定的是,压力的影响要比温度的影响小得多,而压力对起爆临界马赫数的影响机理还需要进一步研究。

5 结 论

对环形激波在可燃气体中聚焦实现直接起爆的问题进行了数值模拟,研究结果表明:

- (1) 利用环形激波聚焦产生的高温高压区可以在可燃气体中实现直接起爆形成爆轰波,爆轰波在流场中传播,与激波和接触间断相互作用产生了复杂的波系结构;
- (2) 爆轰波起爆点位置在对称轴上并不是固定的点,而是随着初始激波马赫数的变化而发生移动;
- (3) 可燃气体初始温度和压力对起爆临界马赫数都有影响,但是初始温度的影响大得多。

参考文献:

[1] 姜宗林, 赵伟, 林贞彬, 等. 爆轰驱动高焓激波风洞及其瞬态测试技术的研究与进展[J]. 力学进展, 2001, 31(2): 312—317.
 JIANG Zong-lin, ZHAO Wei, LIN Zhen-bin, et al. Some advancement of the investigation on the detonation driving high enthalpy shock tunnel and its instantaneous measurement technology[J]. Advances in Mechanics, 2001, 31(2): 312—317.

[2] Grönig H. Past, present and future of shock wave focusing research[A]. Proceeding of the International Workshop on Shock Wave Focusing[C]. Sendai, Japan, 1989: 1—37.

[3] Jiang Z L, Takayama K. Reflection and focusing of toroidal shock waves from coaxial annular shock tubes[J]. Computers and Fluids, 1998, 27(5—6): 553—562.

[4] Lee J. Dynamic parameters of gaseous detonations[J]. Annual review of fluid mechanics, 1984, 16: 311—336.

[5] Radulescu M I, Higgins A J, Murray S B, et al. An experimental investigation of the direct initiation of cylindrical

表 1 不同压力和温度下实现聚焦起爆的临界马赫数
 Table 1 Critical Mach number which can induce direct initiation at different initial pressure and temperature

p/MPa	临界马赫数		
	$T=298.15\text{ K}$	$T=373.15\text{ K}$	$T=473.15\text{ K}$
0.50	3.2	2.8	2.4
0.20	3.2	2.8	2.3
0.10	3.1	2.7	2.2
0.05	3.0	2.6	2.2
0.01	3.1	2.7	2.4

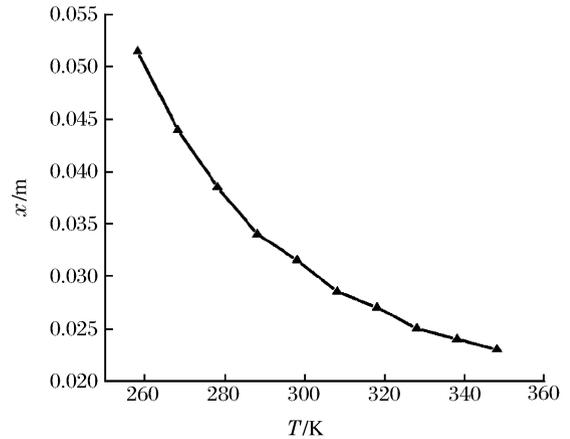


图 6 马赫数为 3.6 的激波聚焦起爆点在不同温度下的位置分布

Fig. 6 The position of the initiation point as function of temperature

- detonations[J]. *Journal of Fluid Mechanics*, 2003, 480(1): 1—24.
- [6] Gelfand B E, Khomik S V, Bartenev A M, et al. Detonation and deflagration initiation at the focusing of shock waves in combustible gaseous mixture[J]. *Shock Waves*, 2000, 10(3): 197—204.
- [7] Bartenev A M, Khomik S V, Gelfand B E, et al. Effect of reflection type on detonation initiation at shock-wave focusing[J]. *Shock Waves*, 2000, 10(3): 205—215.
- [8] 王春. 激波聚焦点燃高速可燃混合气流的实验研究[D]. 合肥: 中国科学技术大学, 2004.
WANG Chun. Experimental Study on Ignition of High-speed Combustible Mixed Gas Flow by Shock Focusing[D]. Hefei: University of Science of Technology of China, 2004.
- [9] 滕宏辉, 姜宗林, 韩肇元. 环形激波绕射、聚焦和反射的数值模拟和分析[J]. *力学学报*, 2004, 36(1): 9—15.
TENG Hong-hui, JIANG Zong-lin, HAN Zhao-yuan. Numerical investigation of diffraction, focusing and reflection of toroidal shock waves[J]. *Acta Mechanica Sinica*, 2004, 36(1): 9—15.
- [10] McBride B J, Zehe M J, Gordon S. NASA Glenn Coefficients for Calculating Thermodynamic Properties of Individual Species[R]. NASA TP 2002-211556, 2002.
- [11] Toro E F. Riemann solvers and numerical methods for fluid dynamics[M]. Second ed. Berlin: Springer, 1999.
- [12] Sun M, Takayama K. Conservative smoothing on an adaptive quadrilateral grid[J]. *Journal of Computational Physics*, 1999, 150(1): 143—180.
- [13] Kee R J, Rupley F M, et al. Chemkin-III: A fortran chemical kinetics package for the analysis of gas-phase chemical and plasma kinetics[R]. UC-405, USA: Sandia National Laboratories, 1996.
- [14] Schultz E, Shepherd J. Validation of Detailed Reaction Mechanisms for Detonation Simulation[R]. Explosion Dynamics Laboratory Report FM99-5, California: California Institute of Technology, 1999.

Numerical investigation of detonation direct initiation induced by toroidal shock wave focusing

TENG Hong-hui^{1*}, ZHANG De-liang¹, LI Hui-huang², JIANG Zong-lin¹

(1. *Key Laboratory of High Temperature Gas Dynamics, Institute of Mechanics, Chinese Academy of Science, Beijing 100080, China;*

2. *Department of Modern Mechanics, University of Science and Technology of China, Hefei 230026, Anhui, China*)

Abstract: Detailed chemical reaction model and finite volume method are used to numerically investigate detonation direct initiation induced by the toroidal shock wave focusing in combustible gas mixture. Numerical results show that detonation direct initiation will be initiated by toroidal shock wave focusing in the standard hydrogen-air gas mixture if the incident Mach number is above 3.1. Then the detonation wave interacts with shock waves and contact surfaces, which results in complex wave system. The initiation point is not fixed on the focusing point but varies with the incident shock Mach number. The critical Mach number is influenced by the initial pressure and temperature, but the temperature is the main factor.

Key words: mechanics of explosion; direct initiation; shock wave focusing; detonation; numerical simulation

* Corresponding author: TENG Hong-hui
E-mail address: hhteng@ustc.edu
Telephone: 010-62657877