

文章编号: 1001-1455(2006)06-0556-06

# 爆轰波平掠惰性气体界面及其解耦现象的数值研究\*

王 春, 张德良, 姜宗林

(中国科学院力学研究所, 北京 100080)

**摘要:** 采用基元化学反应模型和迎风 TVD 格式, 数值研究了爆轰波平掠惰性气体界面时的物理现象及其作用机制, 并用点隐方法克服化学反应源项引起的计算刚性。数值结果显示, 当爆轰波平掠过惰性气体界面时, 形成了爆轰波、界面、透射激波以及稀疏波相互作用的现象。在高  $N_2$  比例稀释的可燃混合气体情况下, 当爆轰波平掠过特定惰性气体界面时, 它与惰性气体界面相互作用产生的稀疏波可以导致爆轰波的解耦。

**关键词:** 爆炸力学; 爆轰现象; 基元化学反应模型; 惰性气体

**中图分类号:** O381

**国标学科代码:** 130 · 1510

**文献标志码:** A

## 1 引 言

爆轰波在非均匀可燃混合气体中的传播受到一定限制, 并可能熄灭。该现象涉及爆轰波与非均匀可燃混合气体中惰性气团的相互作用、爆轰的退化和二次起爆过程, 因此, 研究爆轰波与惰性气体界面的相互作用, 以及此过程中爆轰波的熄灭机制, 对于工程应用中爆轰利用和隔爆具有重要意义。

爆轰波在界面上发生的反射以及产生的透射激波已经得到了研究, 如文献[1]中给出了基于 C-J 理论爆轰的爆轰波与界面相互作用的计算方法, 但并没有涉及到爆轰波在此过程中可能发生的退化现象。赵伟等[2]数值和实验研究了爆轰驱动激波管中爆轰波与卸爆气体界面的相互作用, 通过使用卸爆段来改善爆轰驱动激波管的性能。I. Sochet 等[3]实验研究了有浓度梯度的非均匀可燃混合气体中爆轰起爆的特征, 并对比了非均匀可燃混合气体以及可燃均匀混合气体的临界起爆能量。S. M. Aksamentov 等[4]数值求解并研究了给定非均匀初始温度和浓度分布的爆轰波退化条件。M. Short[5]研究了初始非均匀速度、压力、温度和浓度分布下的化学反应演化问题, 认为在大梯度非均匀气体中高速传播的燃烧波可以发展成为爆轰波。M. S. Kuznetsov 等[6]实验研究了爆轰驱动管中爆轰波经过非均匀混合区域进入低反应混合气体接收室时爆轰波的传播、退化和二次起爆过程, 实验结果显示爆轰波的行为极大地依赖于非均匀混合区的浓度梯度。

爆轰波与惰性气体界面的相互作用引起的爆轰退化和二次起爆现象, 目前的研究还不充分。本文中爆轰波平掠过惰性气体界面时的物理现象以及可能发生的爆轰退化过程进行数值模拟研究。

## 2 计算的物理模型

物理模型如图 1 所示, 直通道内存在着两个性质不同的区域, 区域①为  $H_2/O_2/N_2$  可燃混合气体, 区域②为惰性的氩气(Ar), 他们之间存在以直线段 AB 和 BC 为边界的分界面。虽然这种截然隔开的分界面实际上难以实现, 但这样的简化模型, 有助于

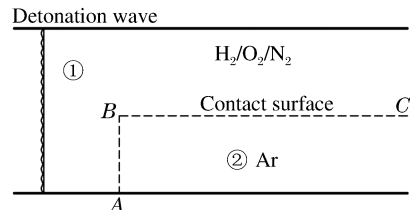


图 1 计算的物理模型

Fig. 1 The model for numerical simulation

\* 收稿日期: 2005-09-12; 修回日期: 2006-06-09

基金项目: 国家自然科学基金项目(90205027); 中国博士后基金项目(2005037444)

作者简介: 王 春(1975—), 男, 博士后, 助理研究员。

分析爆轰波与惰性气体相互作用的基本特征,并了解其物理本质和控制机制。

可燃混合气体瞬时起爆形成爆轰波,并向下游方向传播。当爆轰波平掠惰性气体区域时,发生爆轰波与惰性气体界面的相互作用。此时,爆轰波一方面在可燃混合气体中继续传播,另一方面在惰性气体中形成透射的激波。上述过程中,受流场中非定常波系相互作用的影响,爆轰波可能继续在可燃混合气体中传播,也可能发生爆轰波的解耦甚至熄灭现象。

### 3 数值计算方法

本研究的主要目的是考察爆轰波与惰性气体界面的相互作用现象,因此作以下假设:(1)忽略实际爆轰波传播过程中多维胞格结构;(2)粘性效应忽略不计。上述爆轰波运动可应用二维多组分 Euler 方程描述。采用有限速率多步基元反应模型,可燃气体为 H<sub>2</sub>/O<sub>2</sub>/N<sub>2</sub>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<sub>2</sub>、H、O<sub>2</sub>、O、OH、HO<sub>2</sub>、H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>、H<sub>2</sub>O、N、N<sub>2</sub>、NO,23 步化学反应模型如表 1 所示,用到的基本单位有 g, mol, K, cm; A 为化学反应速率系数, n 为温度指数, E<sub>a</sub> 为化学反应活化能;第 5 个基元反应中 H<sub>2</sub>O、H<sub>2</sub>、N<sub>2</sub> 的三体系数分别为 18.6, 2.86, 1.26;第 10 个基元反应中 H<sub>2</sub>O、H<sub>2</sub> 的三体系数分别为 0.0, 0.0;第 13 个基元反应中 H<sub>2</sub>O 的三体系数为 5.0;第 14 个基元反应中 H<sub>2</sub>O 的三体系数为 5.0。

表 1 H<sub>2</sub>/O<sub>2</sub>/N<sub>2</sub> 11 组分 23 步化学反应模型

Table 1 The 23-step chemical reaction kinetics of H<sub>2</sub>/O<sub>2</sub>/N<sub>2</sub> with 11 species

步骤	基元反应	A	n	E <sub>a</sub> /(cal/mol)
1	H <sub>2</sub> + O <sub>2</sub> = 2OH	1.70 × 10 <sup>13</sup>	0.0	47 780
2	OH + H <sub>2</sub> = H <sub>2</sub> O + H	1.17 × 10 <sup>9</sup>	1.3	3 626
3	O + OH = O <sub>2</sub> + H	4.00 × 10 <sup>14</sup>	-0.5	0
4	O + H <sub>2</sub> = OH + H	5.06 × 10 <sup>4</sup>	2.7	6 290
5	H + O <sub>2</sub> + M = HO <sub>2</sub> + M	3.61 × 10 <sup>17</sup>	-0.7	0
6	OH + HO <sub>2</sub> = H <sub>2</sub> O + O <sub>2</sub>	7.50 × 10 <sup>12</sup>	0.0	0
7	H + HO <sub>2</sub> = 2OH	1.40 × 10 <sup>14</sup>	0.0	1 073
8	O + HO <sub>2</sub> = O <sub>2</sub> + OH	1.40 × 10 <sup>13</sup>	0.0	1 073
9	2OH = O + H <sub>2</sub> O	6.00 × 10 <sup>8</sup>	1.3	0
10	H + H + M = H <sub>2</sub> + M	1.00 × 10 <sup>18</sup>	-1.0	0
11	H + H + H <sub>2</sub> = H <sub>2</sub> + H <sub>2</sub>	9.20 × 10 <sup>16</sup>	-0.6	0
12	H + H + H <sub>2</sub> O = H <sub>2</sub> + H <sub>2</sub> O	6.00 × 10 <sup>19</sup>	-1.3	0
13	H + OH + M = H <sub>2</sub> O + M	1.60 × 10 <sup>22</sup>	-2.0	0
14	H + O + M = OH + M	6.20 × 10 <sup>16</sup>	-0.6	0
15	O + O + M = O <sub>2</sub> + M	1.89 × 10 <sup>13</sup>	0.0	-1 788
16	H + HO <sub>2</sub> = H <sub>2</sub> + O <sub>2</sub>	1.25 × 10 <sup>13</sup>	0.0	0
17	HO <sub>2</sub> + HO <sub>2</sub> = H <sub>2</sub> O <sub>2</sub> + O <sub>2</sub>	2.00 × 10 <sup>12</sup>	0.0	0
18	H <sub>2</sub> O <sub>2</sub> + M = OH + OH + M	1.30 × 10 <sup>17</sup>	0.0	45 500
19	H <sub>2</sub> O <sub>2</sub> + H = HO <sub>2</sub> + H <sub>2</sub>	1.60 × 10 <sup>12</sup>	0.0	3 800
20	H <sub>2</sub> O <sub>2</sub> + OH = H <sub>2</sub> O + HO <sub>2</sub>	1.00 × 10 <sup>13</sup>	0.0	1 800
21	O + N <sub>2</sub> = NO + N	1.40 × 10 <sup>14</sup>	0.0	75 800
22	N + O <sub>2</sub> = NO + O	6.40 × 10 <sup>9</sup>	1.0	6 280
23	OH + N = NO + H	4.00 × 10 <sup>13</sup>	0.0	0

二维控制方程可写为

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial x} + \frac{\partial \mathbf{G}}{\partial y} = \dot{\mathbf{w}} \tag{1}$$

式中:  $\mathbf{G} = [\rho v, \rho uv, \rho v^2 + p, (\rho E + p)v, \rho v f_1, \rho v f_2, \dots, \rho v f_{ns}]^T$ ,  $\dot{\mathbf{w}} = [0, 0, 0, 0, \dot{\omega}_1, \dot{\omega}_2, \dots, \dot{\omega}_{ns}]^T$ ,  $\mathbf{U} = [\rho, \rho u, \rho v, \rho E, \rho f_1, \rho f_2, \dots, \rho f_{ns}]^T$ ,  $\mathbf{F} = [\rho u, \rho u^2 + p, \rho uv, (\rho E + p)u, \rho u f_1, \rho u f_2, \dots, \rho u f_{ns}]^T$ 。

化学反应速率表达式为

$$\dot{\omega}_i = W_i \sum_{j=1}^{n_f} [(\nu''_{j,i} - \nu'_{j,i})(k_{fj} \prod_{l=1}^{n_s} [n_l]^{\nu'_{j,l}} - k_{bj} \prod_{l=1}^{n_s} [n_l]^{\nu''_{j,l}})] \quad i = 1, 2, \dots, n_s \quad (2)$$

式中： $W_i$ 为组分摩尔质量， $\nu'$ 和 $\nu''$ 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 $k_b$ 分别为正向和逆向的化学反应速率系数，由 Arrhenus 公式得到。

数值方法采用空间二阶精度的迎风 TVD 差分格式，时间推进采用预估/矫正两步法。化学反应源项求解采用点隐方法处理，以克服化学反应源项计算引起的数值刚性。离散后量纲一的控制方程写为

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

其中对流通量项

$$\mathbf{V}^n = \frac{1}{2}(\hat{\mathbf{F}}_{i+1/2,j}^n - \hat{\mathbf{F}}_{i-1/2,j}^n + R_{i+1/2,j}^n \phi_{i+1/2,j}^n - R_{i-1/2,j}^n \phi_{i-1/2,j}^n) + \frac{1}{2}(\hat{\mathbf{G}}_{i,j+1}^n - \hat{\mathbf{G}}_{i,j-1}^n + R_{i,j+1/2}^n \phi_{i,j+1/2}^n - R_{i,j-1/2}^n \phi_{i,j-1/2}^n)$$

点隐格式对化学反应源项  $\mathbf{S}^{n+1}$  处理如下

$$\hat{\mathbf{S}}^{n+1} = \hat{\mathbf{S}}^n + \mathbf{H} \Delta \hat{U}^n \quad (3)$$

式中： $\mathbf{H}$ 为化学反应源项雅可比矩阵， $\mathbf{H} = \partial \hat{\mathbf{S}} / \partial \hat{U}^n$ ，最后求解如下差分方程

$$(\mathbf{I} - \Delta t \mathbf{H})(\hat{U}^{n+1} - \hat{U}^n) = \Delta t(\mathbf{V}^n + \mathbf{S}^n) \quad (4)$$

### 4 数值计算验证

为了检验计算程序和数值方法的可靠性，计算了直管道中， $H_2/O_2$ 当量比  $\phi = 1.0$  时，不同  $N_2$  稀释比例得到的稳定气相爆轰过程。计算得到的爆轰波波速与 C-J 理论结果的对比见表 2，其中  $\chi$  为  $N_2$  稀释比例， $u_D$  为计算的爆轰波波速， $u_{C-J}$  为 C-J

表 2 不同比例  $N_2$  稀释  $H_2/O_2$  混合气的爆轰波速计算值与 C-J 理论值的对比  
Table 2 The detonation speeds of numerical results vs. that of C-J theory for gas mixture of  $H_2/O_2$  with different  $N_2$  dilution proportion

$\chi/\%$	$u_D/(m/s)$	$u_{C-J}/(m/s)$	$\epsilon_r/\%$
0	2 828.0	2 842.8	-0.52
20	2 464.1	2 476.4	-0.50
50	2 044.0	2 052.1	-0.39
70	1 701.3	1 722.9	-1.25

理论值，相对误差  $\epsilon_r = (u_D - u_{C-J})/u_{C-J} = 1.0$ 。混合气体初始压力  $p_0 = 10^5$  Pa，初始温度  $T_0 = 300$  K。

由表 2 的结果对比可知，计算的爆轰波速与理论值非常接近。考虑不同比例  $N_2$  稀释的结果，最大的计算误差在  $\pm 1.3\%$  以内。由比较可知，本文中对于平面爆轰波的计算结果是可靠的。图 2 显示了典型的一维爆轰波数值模拟结果，其中  $H_2/O_2$ 当量比  $\phi = 1.0$ ， $N_2$  稀释比例  $\chi = 70\%$ 。

### 5 计算结果与讨论

#### 5.1 低 $N_2$ 比例稀释条件下爆轰波平掠惰性气体界面

图 3 显示了  $N_2$  稀释比例  $\chi = 0$  时的流场数值模拟结果，可燃混合气体当量比  $\phi = 1.0$ ，初始压力  $p_0 = 10^5$  Pa，初始温度  $T_0 = 300$  K。

由图 3 可见，当爆轰波平掠过惰性气体界面时，爆轰波上半部分继续在可燃混合气体中传播，下半

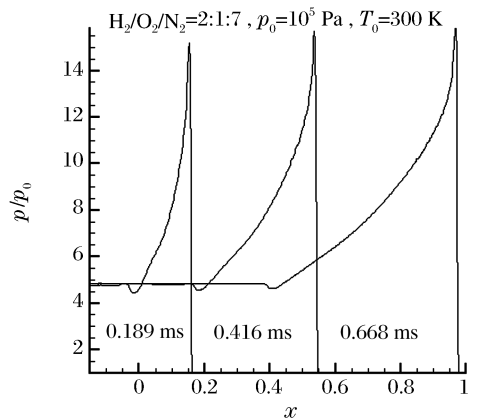


图 2 典型的一维爆轰波数值模拟结果  
Fig. 2 The typical pressure profile of one-dimensional detonation of numerical simulation

部分形成在惰性气体中传播的透射激波。爆轰波、透射激波的作用使波后气体界面方向发生了偏转，同时形成激波与激波以及激波与壁面上的反射波之间的相互作用。由于惰性气体的衰减作用，使透射激波的运动速度低于可燃混合气体中爆轰波的速度。因而在惰性气体界面上，表现为爆轰波与非正常斜激波相连接。受激波波后气流的诱导作用，爆轰波后已燃气体与惰性气体的界面向下倾斜。由图 3(a)和图 3(b)可以看出流场中波系相互作用过程，由图 3(c)和图 3(d)可以较明显地看出爆轰波和透射激波波后界面的位置，同时也表明，爆轰波中的反应火焰前锋面与前导激波紧密地耦合在一起(图 3 中 Detonation 所指位置)。

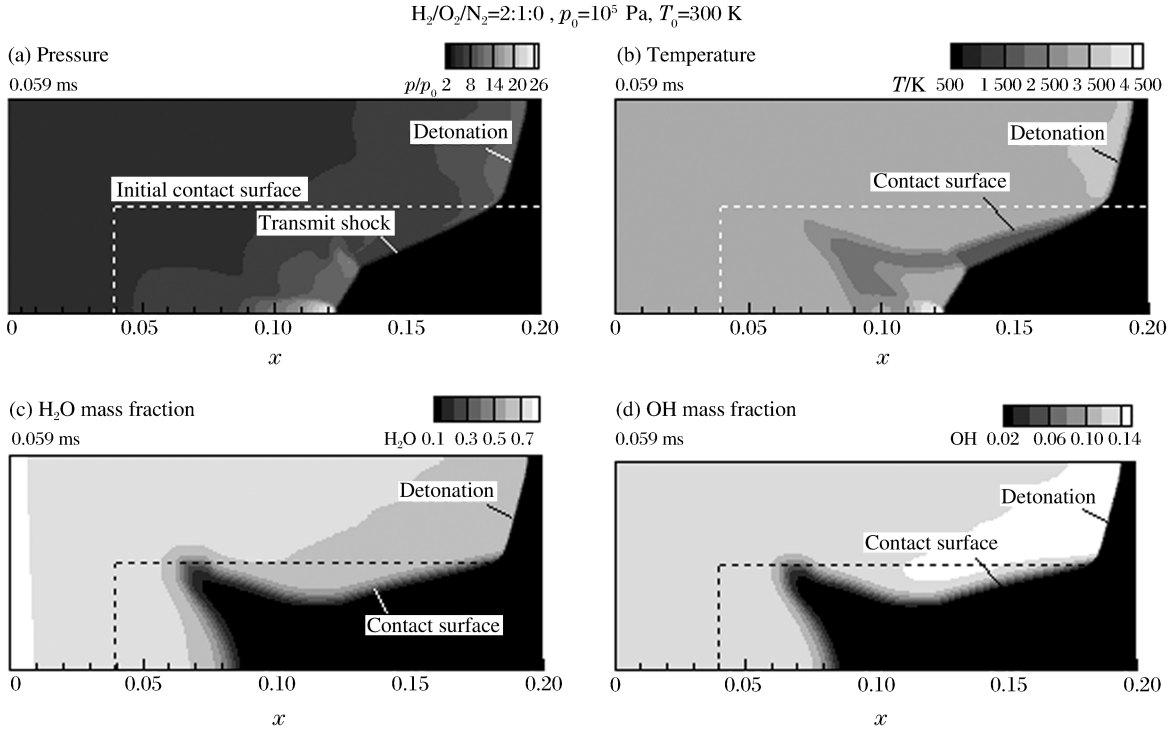


图 3 爆轰波掠过惰性气体界面的流场参数图

Fig. 3 The flowfield contours of detonation sweeping a contact surface of inert gas

### 5.2 爆轰波平掠惰性气体界面的物理作用机制

在本文的计算条件下，当爆轰波平掠过惰性气体界面时，发生了如图 4 所示的波系相互作用现象(选择坐标原于爆轰波与界面相交的位置)。由于惰性气体中的透射激波波后压力低于爆轰波后的压力，在爆轰波一侧形成了稀疏波。稀疏波追赶前面的爆轰波，使它不断衰减。因此，在惰性气体界面附近，爆轰波速度有所降低，波阵面落后于可燃混合气体主流区域的爆轰波阵面。同时，稀疏波的作用使爆轰波波后的气流方向发生转折，满足爆轰波和透射激波波后的压力和速度方向相匹配的条件。

### 5.3 高比例 N<sub>2</sub> 稀释条件下爆轰波平掠惰性气体界面

为了进一步考察爆轰波与惰性气体界面相互作用对爆轰波传播过程的影响，进一步开展了高比例 N<sub>2</sub> 稀释条件下数值研究工作。

图 5 显示了 N<sub>2</sub> 稀释比例  $\chi=72.7\%$  情况下，爆轰波与惰性气体界面相互作用的数值模拟结果。可燃混合气体当量比  $\phi=1$ ，初始压力  $p_0=10^5$  Pa，初始温度  $T_0=300$  K。

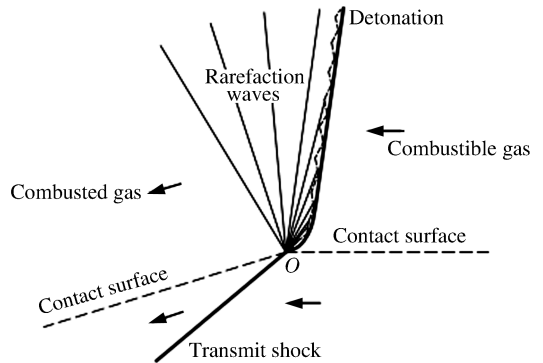


图 4 爆轰波平掠惰性气体界面时的波系作用机制  
Fig. 4 The wave structures of detonation sweeping a contact surface of inert gas

$H_2/O_2/N_2=2:1:8, p_0=10^5 \text{ Pa}, T_0=300 \text{ K}$

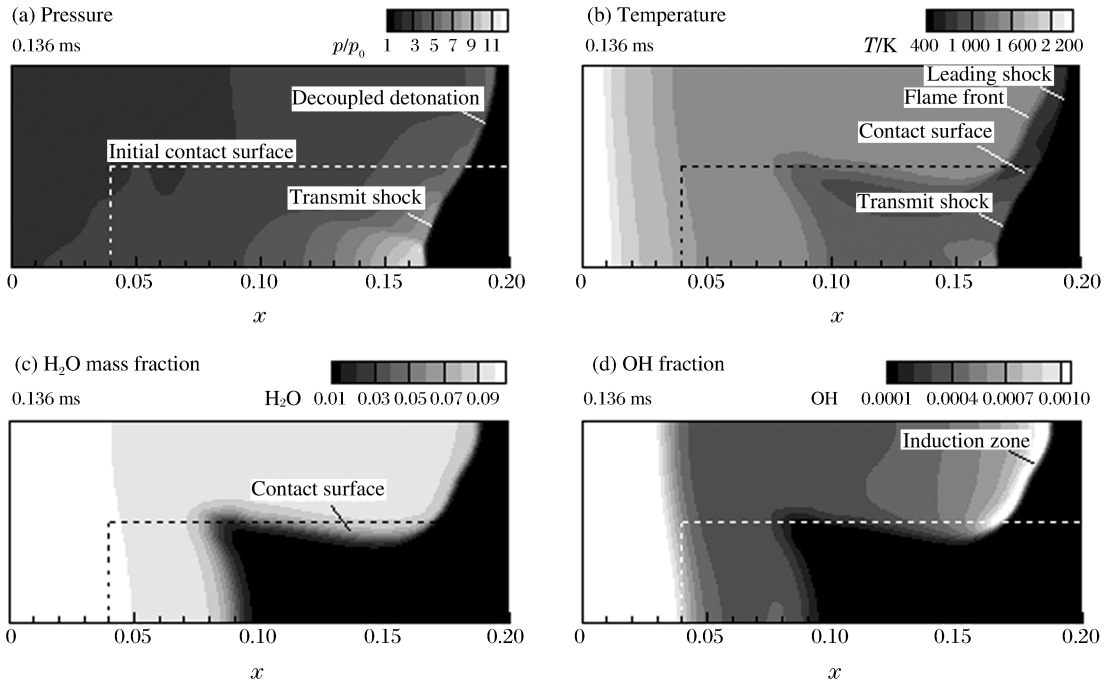


图5 爆轰波掠过惰性气体界面的流场参数图

Fig. 5 The flowfield contours of detonation sweeping a contact surface of inert gas

数值模拟结果显示,在高比例  $N_2$  稀释条件下,爆轰波起爆后平掠惰性气体界面时,可燃混合气体中传播的爆轰波发生了解耦现象,即火焰锋面逐渐与前导激波相分离。由图 5(b) 的温度云图可以看出可燃混合气体中,温度升高分为两个阶段,第一阶段是前导激波形成的温度提升,范围较小;第二阶段是越过前导激波波后火焰锋面后形成的温度提升。由图 5(d) 的 OH 质量分数云图可见,前导激波波后的反应诱导区长度增加(OH 作为过渡反应的中间产物,通常用来确定火焰锋面的位置)。上述结果表明在高比例  $N_2$  稀释条件下,爆轰波平掠过惰性气体界面时,发生爆轰波解耦现象。紧随其后的稀疏波引起爆轰波解耦,稀疏波使爆轰波后的温度降低,反应速率放慢,最终使爆轰波阵面发生解耦。

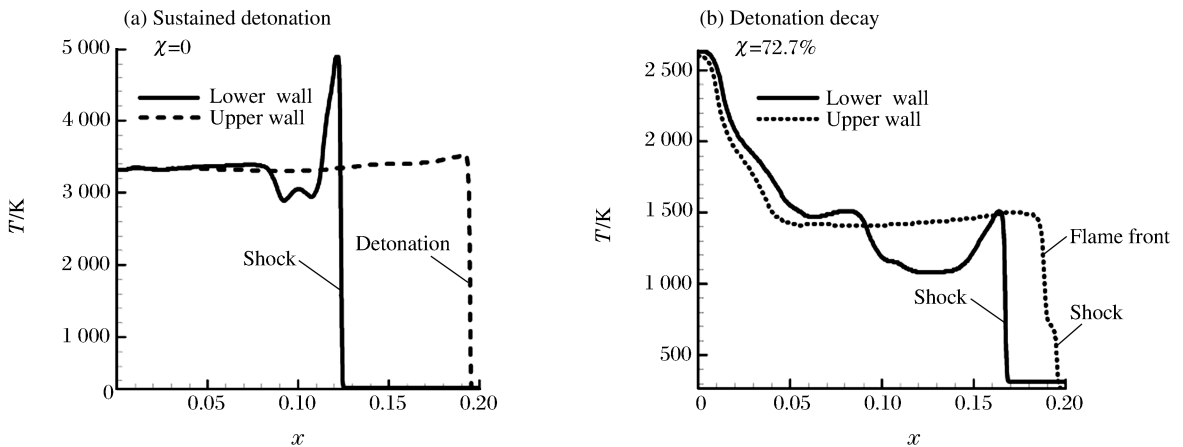


图6 持续爆轰和爆轰退化的壁面温度分布对比

Fig. 6 Comparison of the wall temperature profiles of sustained detonation and detonation decay

图 6 显示了两种计算条件下的壁面温度分布,其中图 6(a) 为  $N_2$  稀释比例  $\chi=0$  时的壁面温度分布,图 6(b) 为  $N_2$  稀释比例  $\chi=72.7\%$  时的壁面温度分布。下壁面为惰性气体侧壁面温度分布,主要表现为



在惰性气体中透射的运动激波衰减过程,其中激波与激波、壁面的相互作用是壁面局部温度升高的主要原因。上壁面为可燃混合气体侧的壁面温度分布,在低比例  $N_2$  稀释条件下,爆轰波在可燃混合气体中的传播比较稳定,而在高比例  $N_2$  稀释条件下,可燃混合气体中前导激波与火焰前锋面发生了解耦。

对于爆轰波起爆及其熄爆机制,目前还是需要进一步研究的课题,本文数值模拟结果中的稀疏波作用则是爆轰波在非均匀可燃混合气体中传播时发生退化,并可能发生熄爆现象的一种控制机制。

## 6 结 束 语

本文使用数值研究方法,研究了爆轰波平掠惰性气体界面时的相互作用机制。结果显示,当爆轰波平掠惰性气体界面时,形成了在惰性气体中传播的透射激波,并在流场中出现了爆轰波、透射激波、界面以及稀疏波相互作用的现象。在高比例  $N_2$  稀释条件下,爆轰波与气体界面相互作用形成的稀疏波可最终导致爆轰波阵面中前导激波与火焰前锋面的解耦,并导致爆轰波的退化。

## 参考文献:

- [1] 孙承纬,卫玉章,周之奎. 应用爆轰物理[M]. 北京:国防工业出版社,2000:543—551.
- [2] 赵伟,李仲发,谷笏华,等. 氢氧爆轰波与界面的相互作用[J]. 气动实验与测量控制,1996,10(2):41—46.  
ZHAO Wei, LI Zhong-fa, GU Jia-hua, et al. The interaction of hydrogen-oxygen detonation waves with interface [J]. Aerodynamic Experiment and Measurement & Control, 1996,10(2):41—46.
- [3] Sochet I, Lamy T, Brossard J. Experimental investigation on the detonability of non-uniform gaseous mixtures[J]. Shock Waves, 2000,10(5):363—376.
- [4] Aksamentov S M, Kiselev I A, Matsukov D I. Decay of detonation in a region with an inhomogeneous temperature and concentration distribution[J]. Combustion Explosion and Shock Waves, 1991,27(5):635—640.
- [5] Short M. The initiation of detonation from general nonuniformly distributed initial conditions[J]. Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences, 1998(353):173—203.
- [6] Kuznetsov M S, Alekseev V I, Dorofeev S B, et al. Detonation propagation, decay, and reinitiation in nonuniform gaseous mixtures[A]. Burgess A R, Dryer F L. Proceedings of the 27th International Symposium on Combustion [C]. Boulder, Colorado, USA: The Combustion Institute, 1998:2241—2247.

## Numerical investigation of detonation sweeping an interface of inert gas and its decoupling

WANG Chun<sup>\*</sup>, ZHANG De-liang, JIANG Zong-lin

(Institute of Mechanics of China Academy of Sciences, Beijing 100080, China)

**Abstract:** Numerical investigations were carried out to study the phenomena of detonation sweeping a contact surface of inert gas and its decoupling. The control-equations were solved with upwind TVD algorithm and elemental chemical reaction model, with the point-implicit used to overcome the numerical stiffness of chemical reaction source term. The results show that, when detonation sweeps a contact surface of inert gas, interactions of detonation, transmit shock and contact surface take place; in condition of high  $N_2$  dilution proportion, detonation is decoupled by rarefaction waves.

**Key words:** mechanics of explosion; detonation phenomena; elemental reaction model; inert gas

<sup>\*</sup> Corresponding author: WANG Chun

E-mail address: wangchun@imech.ac.cn

Telephone: 010-62657747