第 17 卷 第 4 期
2003 年 12 月

高 压 物 理 学 报
CHINESE JOURNAL OF HIGH PRESSURE PHYSICS

Vol. 17, No. 4
Dec., 2003

文章编号：1000-5773(2003)04-0255-06

一维爆轰波不稳定性的数值模拟*

洪 滔，秦承森

（北京应用物理与计算数学研究所，北京 100088）

摘要：对当量比为 1 的乙烷与空气的混合气体的一维爆轰不稳定问题进行数值模拟，得到了不同大小的网格对爆轰不稳定问题数值模拟结果的影响。网格大小 Δx 由从 ZND 模型分析得到的导引长度 L_{in} 确定，网格大小从 $0.2L_{in}$ 变到 $0.0025L_{in}$。随着网格变细，没有得到振幅趋于一致的解，每一种网格尺寸得到的解的振幅都互不相同。当网格大小为 $\Delta x=0.01L_{in}$、$0.005L_{in}$ 时，得到有规则的爆轰激波阵面压力的振荡，振荡的模式是峰值一大一小的振荡。网格更细时，爆轰波的振荡在计算范围内由一些有规则的振荡和一些较不规则的振荡组成。但爆轰激波阵面压力振荡的波长最后趋于一致，为 91～93 mm，与实验得到的胞格长度 88 mm 很接近。

关键词：爆轰波；不稳定性；胞格尺寸；数值模拟

中图分类号：O381 **文献标识码**：A

1 引 言

爆轰物理研究带化学反应的超音速可压缩流体动力学过程。爆轰波是一个燃烧驱动的激波，以很快的速度运动并产生很高的压力。描述爆轰波的数学模型是带反应的欧拉方程，这是一组双曲型的偏微分方程，描述质量、动量、能量方程和流场内反应物消耗速率。

定常爆轰波容易描述，但实际上稳定的一维爆轰很少见。爆轰波在充满气体的管子中传播过程中显示出一种网格状的脉冲式的传播方式。这种传播模式由三波点在管壁上形成网格状的图案。这种传播模式是一个强烈的非线性不稳定过程，但可以看到有规则的胞格结构[1]。三维胞格结构的出现是气体爆轰的基本性质。由于这个问题的复杂性，爆轰波胞格结构的根本机制还没有完全清楚。数值模拟爆轰波的三维胞格结构是一项非常艰巨的任务，因为需要非常细的网格，因此现有的数值模拟主要是对胞格结构的整体结构进行数值模拟。对于一维的平面爆轰波，它显示出与二维、三维数值模拟时相同的振荡性质。而一维研究可以用足够细的网格对振荡的具体性质进行数值模拟。因此，研究平面一维爆轰波仍是研究爆轰波的稳定性问题的重要内容之一。研究一维爆轰波的稳定性主要有两部分内容，一部分是在相关的参数空间中定义稳定边界。这方面较早、较全面的研究是 Erpenbeck 在 20 世纪 60 年代的工作，其结果在文献[1]中有详细的介绍。1990 年 Lee 和 Stewart[2] 用简正法（Normal Mmode Approach），通过数值打靶法提供了更直接的计算稳定边界的方法。在研究稳定边界的问题中，所使用的化学反应模型通常是一步的 Arrenhius 模型。化学反应对流动的敏感性随活化能的增加而增加。另一个方面的研究是研究不稳定性的爆轰波的发展和传播，这部分研究的重要手段是直接的数值模拟。在开始的工作中由于计算工具的限制，计算延续的时间较短。随着计算机能力的提高，可以得到爆轰波传播到较长时间的结果。

* **收稿日期**：2002-10-16；**修回日期**：2003-07-15

作者简介：洪 滔（1965—），男，硕士，副研究员，主要研究方向：爆炸力学、高温高压流体力学.

在一维爆轰稳定性的大部分工作中,化学反应仍使用一步的 Arrenhius 模型[3~6]。实际上,许多化学反应不能用一步的 Arrenhius 模型有效地表示。Short 等[7]用三步链式反应模型对爆轰波稳定性问题进行了研究,对化学反应的控制参数对爆轰波的稳定性的影响进行了研究,还考察了网格大小对数值结果的影响。但他们所用的化学反应模型是定性的模型。我们用实用的三步化学反应模型描述碳氢化合物与氧的反应数值模拟一维爆轰稳定性问题。三步化学反应模型比一步的反应更接近实际情况,同时避免了使用基元反应造成计算量大增。本研究针对网格大小对爆轰波振荡结构影响的问题进行了数值模拟,得到爆轰激波阵面压力振荡的振幅和波长。

2 物理模型

数值模拟气体爆轰基于可压、非定常质量、动量、能量守恒方程。质量守恒方程

$$\partial\rho/\partial t+\partial(\rho u)/\partial x=0$$

动量守恒方程

$$\partial(\rho u)/\partial t+\partial(\rho u^2+p)/\partial x=0$$

能量守恒

$$\frac{\partial}{\partial t}\left[\rho\left(e+\frac{1}{2}u^2\right)\right]+\frac{\partial}{\partial x}\left[\rho u\left(e+\frac{1}{2}u^2\right)+pu\right]=Q_c$$

式中:ρ、u、p、e 分别表示密度、速度、压力和内能。Q_c表示化学放能项。流场中发生的化学反应表示为 $\sum_j a_{jr}x_j\leftrightarrow\sum_j b_{jr}x_j$,当量系数须满足$\sum_j(a_{jr}-b_{jr})W_j=0$,$W_j$ 是克分子量。

以下介绍本研究采用的化学反应模型。最简单的化学反应机制是以下的一步反应

$$C_nH_m+(n+m/4)O_2=nCO_2+(m/2)H_2O$$

一步反应机制简单,在数值模拟中使用方便。但由于假定反应产物为 CO_2、H_2O,因此反应释放的能量被高估了。在碳氢化合物与氧反应的产物中,实际还有 CO 存在。因此 Westbrook 和 Dryer 使用以下二步反应机制来描述碳氢化合物与氧的反应

$$C_nH_m+(n/2+m/4)O_2=nCO+(m/4)H_2O$$

$$2CO+O_2\rightleftharpoons 2CO_2$$

他们建议还需增加考虑 H_2 和 H_2O 平衡的反应。本文中增加了以下的反应,对以上的二步反应机制进行补充,来描述碳氢化合物与氧的反应,而不是采用复杂的基元反应,避免增加过多的化学反应对数值模拟带来计算量的剧增。

按照 $2H_2O\rightleftharpoons 2H_2+O_2$ 化学反应,碳氢化合物与空气反应时,气体中有 7 种组分,每一组分的浓度为 $Y_j(j=1,\cdots,N,N=7)$,这里 $j=1$ 为燃料,$j=2$ 为 O_2,$j=3$ 为 N_2,$j=4$ 为 CO_2,$j=5$ 为 H_2O,$j=6$ 为 CO,$j=7$ 为 H_2。组分的质量变化方程如下

$$\frac{\partial(\rho Y_j)}{\partial t}+\frac{\partial(\rho Y_j u)}{\partial x}=\dot{\rho}_j^c$$

$$\dot{\rho}_j^c=W_j\sum_r(b_{jr}-a_{jr})\omega_r$$

$$Q_c=\sum_r Q_r\omega_r$$

$$Q_r=\sum_j(a_{jr}-b_{jr})(\Delta h_f^0)_j$$

ω_r是每一步化学反应的速率,Q_r 是每一步化学反应释放的能量,$(\Delta h_f^0)_j$ 是 j 成分的生成热。本研究燃料用乙烷 C_2H_6,化学反应率如下

第一个反应[8]

$$\omega_1=1.2\times10^{12}[C_2H_6]^{0.25}[O_2]^{1.5}e^{-30/RT}$$

第二个反应[9]

$$\omega_{2f}=\min(1.0,7.93e^{-2.48\Phi})1.5\times10^{13}[CO]^{1.0}[O_2]^{0.25}[H_2O]^{0.5}e^{-40/RT}$$

$$\omega_{2b}=4.16\times10^{16}[CO_2]^{1.0}[O_2]^{-0.25}[H_2O]^{0.5}e^{-106.95/RT}T^{-1/2}$$

第三个反应[9]

$$\omega_{3f}=3.311\times10^{13}[H_2]^{0.82}[O_2]^{1.42}e^{-38.1/RT}$$

$$\omega_{3b}=6.12\times10^{15}[H_2]^{-0.153}[O_2]^{0.916}[H_2O]^{1.0}e^{-100.6/RT}T^{-1/2}$$

下标 f 表示正方向的反应,下标 b 表示逆方向的反应。反应率表达式中括号中的成分代表该组分的克分子浓度,单位为 mol/cm^3,活化能的单位为 4.186 kJ,Φ 为 CO 当量比。

气体的状态方程为

$$p=\rho RT\sum_{j=1}^{N}\frac{Y_j}{W_j}$$

用具有二阶精度的 MacCormack 差分格式加上 FCT 方法[10,11]求解可压缩、带化学反应的流体力学微分方程组,对非定常爆轰波发展进行数值模拟。

这里对乙烷与空气混合物在当量比为 $\Phi=1$ 时的非定常爆轰波的发展进行数值模拟。初始条件 $t=0$ 时,封闭的左端是高温高压并高速运动的气体,其他部分是将被点火的乙烷和空气的混合物,即 $0<x\leqslant L_{ign}$ 时,$p=p_{ign}$,$\rho=\rho_{ign}$,$u=u_{ign}$,$T=T_{ign}$;$x>L_{ign}$ 时,$p=p_0$,$\rho=\rho_0$,$T=T_0$,$p=p_0$,$u_0=0$,这里 $L_{ign}=18.4$ cm,$\rho_{ign}=2$ kg/m^3,$u_{ign}=800$ m/s,$T_{ign}=2800$ K,$p_{ign}=2.6$ MPa;$\rho_0=1.1825$ kg/m^3,$p_0=0.1013$ MPa,$T_0=298$ K。初始条件如图 1 所示。边界条件为:$x=0$,$u=0$。

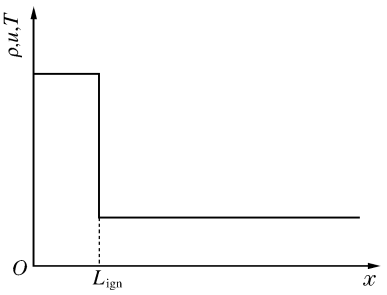


图 1　初始条件示意图

Fig. 1　Schematic map of initial condition

3　数值模拟结果

我们根据 ZND 模型分析得到的定常爆轰波的引导长度 L_{in} 来确定计算中所用网格的大小。ZND 模型假定爆轰波由 CJ 速度传播的一维前导激波后跟随着一反应区,被激波压缩和加热的燃料和氧化剂在反应区中释放能量维持爆轰波前进。在大多数混合物的爆轰波中,反应区包含一较长的压力和温度保持基本稳定的区域,然后是化学能快速释放、温度迅速上升的区域。根据受冲击的混合物的温度历史定义引导时间 τ[12]。温度历史的特点是较长时间的缓慢变化伴随着点火时的迅速增长。τ 定义为激波到达时与温度增长到它的增加峰值的一半的时间间隔。引导长度定义为 $L_{in}=\tau(D_{CJ}-v_1)$,D_{CJ} 是 CJ 速度,v_1 是激波后流体速度。计算中网格大小 Δx 分别为 $0.2L_{in}$、$0.05L_{in}$、$0.025L_{in}$、$0.01L_{in}$、$0.005L_{in}$ 和 $0.0025L_{in}$。Shelton 等人确定乙烷与空气混合物定常爆轰波的引导长度为 4.6 mm[12]。

图 2 是网格为 $0.2L_{in}$ 时爆轰波的前导激波压力随波阵面的变化曲线。从图中看出爆轰波很快就发展成稳定的爆轰波,没有出现不稳定的图像。图 3 是网格为 $0.05L_{in}$ 时爆轰波的前导激波压力随波阵面变化的曲线。初始时从高压段传入一激波,激波逐渐点燃乙烷与空气混合物。开始反应面落后于激波面,但反应面逐渐加速并追上前导激波,此时激波突然猛烈加速,压力曲线出现第一个压力峰值。这个结果与文献[13]中对高温高速气流对氢氧和惰性气体的混合气体点火的数值模拟的现象是相似的。由于这是强爆轰波,波后释放的能量不能支持它,因而逐渐衰减。随后压力曲线出现振荡。在第一个峰值后,经过一个小的振荡后,后面的振荡的振幅比较接近,再经过两次振荡后,振荡的波长也比较接近。

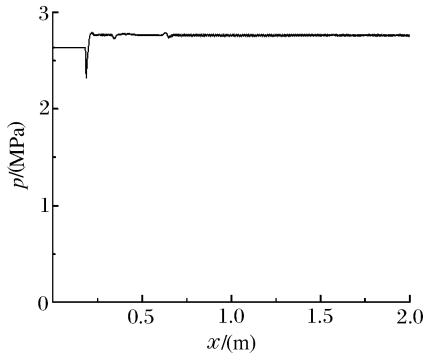


图 2 网格为 $0.2L_{in}$ 时爆轰波的前导激波压力随波阵面变化的曲线

Fig. 2 Pressure history of the leading shock front of detonation as $\Delta x=0.2L_{in}$

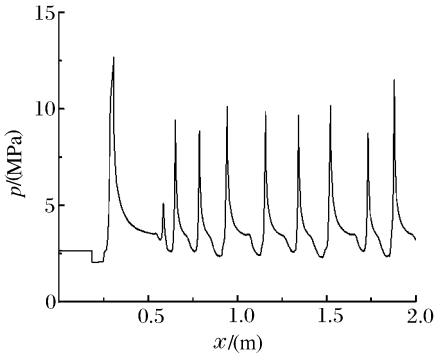


图 3 格为 $0.05L_{in}$ 时爆轰波的前导激波压力随波阵面变化的曲线

Fig. 3 Pressure history of the leading shock front of detonation as $\Delta x=0.05L_{in}$

图 4 是网格为 $0.025L_{in}$ 时爆轰波的前导激波压力随波阵面传播的变化曲线。在计算的时间范围内压力曲线很不规则。在经过几个小的振荡后，振荡的振幅和周期都没有明显规律。

图 5 是网格为 $0.01L_{in}$ 时爆轰波的前导激波压力随波阵面传播的变化曲线。图 5 的压力曲线比图 4 有规律。在第一个峰值后经历了几个小的振荡后，随即的振荡模式相同，在一个强振荡后有一个弱的振荡。强振荡的振幅比弱振荡的振幅大得多，而弱振荡的极小值比强振荡的极小值小。图 6 是网格为 $0.005L_{in}$ 时的压力曲线，在经历一些小的振荡后，振荡模式与图 5 的相同。只是具体的振幅和波长不完全一样。图 3 中的计算结果由于网格不够细，在两个强振荡之间没有出现小的振荡，只出现一个拐点。

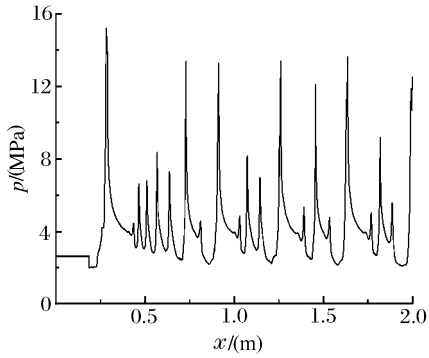


图 4 网格为 $0.025L_{in}$ 时爆轰波的前导激波压力随波阵面变化的曲线

Fig. 4 Pressure history of the leading shock front of detonation as $\Delta x=0.025L_{in}$

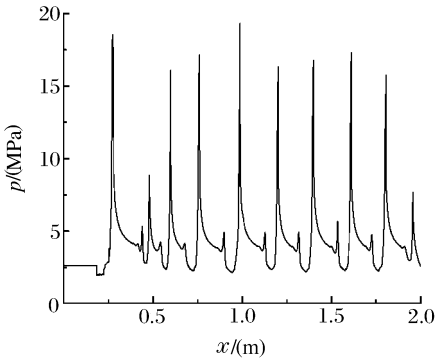


图 5 网格为 $0.01L_{in}$ 时爆轰波的前导激波压力随波阵面变化的曲线

Fig. 5 Pressure history of the leading shock front of detonation as $\Delta x=0.01L_{in}$

图 7 是网格为 $0.0025L_{in}$ 时爆轰波的前导激波压力随波阵面传播的变化曲线。图 7 中的解看起来与图 5 与图 6 中有明显的不同，在开始一些不规则的振荡后，是 7 个振幅接近的振荡，然后是 3 个振幅不同的振荡。以上的结果表明，用不同的网格计算得到的振荡的振幅解有明显的差别，我们没有得到振幅趋于一致的结果。

表 1 列出不同的网格计算得到压力振荡曲线的第一个压力极值点的位置 $x_{p_{max1}}$ 及压力 p_{max1}。从表中结果可以看出，网格大小对这点的位置的确定的影响比压力极值影响小，这点的位置趋于一致。

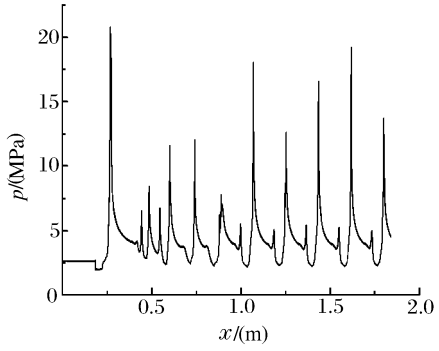


图 6　网格为 $0.005L_{in}$ 时爆轰波的前导激波压力随波阵面变化的曲线

Fig. 6　Pressure history of the leading shock front of detonation as $\Delta x=0.005L_{in}$

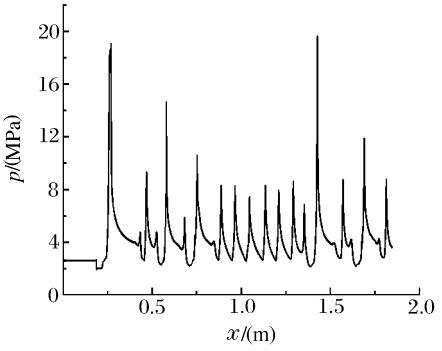


图 7　网格为 $0.0025L_{in}$ 时爆轰波的前导激波压力随波阵面变化的曲线

Fig. 7　Pressure history of the leading shock front of detonation as $\Delta x=0.0025L_{in}$

表 1　第一个压力极值点的位置及压力大小

Table 1　Position and value of the first extreme pressure

Δx	$0.05L_{in}$	$0.025L_{in}$	$0.01L_{in}$	$0.005L_{in}$	$0.0025L_{in}$
$x_{p_{max1}}$/(cm)	12.3	9.8	9.0	8.4	8.1
p_{max1}/(MPa)	13.1	15.3	18.7	20.7	18.7

图 5、图 6、图 7 中得到的爆轰激波阵面压力振荡的振幅与波长不均匀,这与烷烃类气体与空气混合物中的爆轰胞格结果比较不规则这种现象是一致的[14]。表 2 列出不同网格大小数值模拟得到压力振荡的平均波长,表中所列的图 7 中振荡的平均波长是后 10 个的振荡的平均波长。表中的结果表明压力振荡波长的平均值趋于一致。实验测得的胞格平均长度为 88 mm[14],表中用 $0.005L_{in}$ 和 $0.0025L_{in}$ 计算得到的压力振荡波长与实验得到的胞格平均长度结果较接近。这表明在目前的反应模型下,要较准确地数值模拟一维爆轰波的非定常振荡,空间步长应小于 $0.01L_{in}$。振幅与步长的关系还需要进一步的研究。另外,空间步长的选取是与化学反应时空尺度密切相关的,这是需要进一步深入研究的问题。

表 2　不同网格大小数值模拟得到的平均波长

Table 2　Average wavelength of pressure pulse

Δx	$0.05L_{in}$	$0.01L_{in}$	$0.005L_{in}$	$0.0025L_{in}$
Wavelength/(mm)	180	102	91	93

4　结　论

对乙烷与空气混合气体的一维爆轰波不稳定性问题进行了数值模拟。考察了不同大小的网格对爆轰不稳定性问题数值模拟结果的影响。由以上的结果可以得到以下一些结论,由不同的步长的解得到的压力振荡解有明显的区别,振荡的振幅没有趋于一致。当网格为 $0.005L_{in}$ 和 $0.0025L_{in}$ 时,得到的压力振荡平均波长趋于一致,并与实验得到的胞格平均长度接近。

总之,这里的工作与以往的工作不同,是用接近实际情况的三步化学反应模型对气体的碳氢化合物与空气混合物中的一维不稳定爆轰进行数值模拟。但要进一步考察这个问题,还需要对爆轰波在更长距离上的传播进行数值计算,但由于需要把网格分得很细,需要大量的机时。所以要研究爆轰波不稳定

性问题,还需要改进计算方法,采用自适应网格,减少计算的网格数。

References:

[1] Fickett W, Davis W C. Detonation [M]. California: University of California Press, 1979. 230－288.

[2] Lee H I, Stewart D S. Calculation of Linear Detonation Instability: One-Dimensional Instability of Plane Detonation [J]. J Fluid Mech, 1990, 216: 103－132.

[3] Fickett W, Jacobson J D, Schott G L. Calculated Pulsating One-Dimensional Detonation with Induction-Zone Kinetics [J]. AIAA, 1972, 10: 514－516.

[4] Abouseif G E, Toony T Y. Theory of Unstable One-Dimensional Detonations [J]. Combustion and Flame, 1982, 45: 68－94.

[5] Bourlioux A, Majda A J, Roytburd V. Theretical and Numerical Structure for Unstable One-Dimensional Detonations [J]. SIAM J Appl Maths, 1991, 51: 303－343.

[6] He L, Lee J H S. Dynamical Limit of One-Dimensional Detonations [J]. Phys Fluids, 1995, 7(5): 1151－1158.

[7] Short M, Quirk J J. On the Nonlinear Stability and Detonability Limit of a Detonation Wave for a Model Three-Step Chain-Branching Reaction [J]. J Fluid Mech, 1997, 339: 89－119.

[8] Westbrook C K, Dryer F L. Simplified Reaction Mechanisms for the Oxidation of Hydrocarbon [J]. Combust Sci Technol, 1981, 27: 31－43.

[9] Kiehne T M, Matthews R D, Wilson D E. An Eight Step Kinetics Mechanism for High Temperature Propane Flames [J]. Combust Sci Technol, 1987, 54: 1－23.

[10] Book D L, Boris J P, Hain K. Flux-Corrected Transport Ⅱ: Generalization of the Method [J]. J Comput Phys, 1975, 18: 248－283.

[11] Taki S, Fujiwara T. Numerical Simulation of Triple Shock Behavior of Gaseous Detonation [A]. Eighteenth (International) Symposium on Combustion [C]. Pittsburgh, PA: The Combustion Institute, 1981. 1671－1681.

[12] Tieszen S R, Stamps D W, Westbrook C K, et al. Gaseous Hydrocarbon-Air Detonations [J]. Combust Flame, 1991, 84: 376－390.

[13] Lefebvre M H, Oran E S, Kailasanath K, et al. The Influence of Heat Capacity and Diluent on Detonation Structure [J]. Combust Flame, 1993, 95: 207－218.

[14] Bull D C, Elsworth J E, Shuff P J. Detonation Cell Structures in Fuel/Air Mixtures [J]. Combust Flame, 1982, 45: 7－22.

Numerical Simulation of One-Dimensional Instability of Detonation Wave

HONG Tao, QIN Cheng-Sen

(*Institute of Applied Physics and Computational Mathematics, Beijing* 100088, *China*)

Abstract: The nonlinear instability of an one-dimensional detonation wave was numerically simulated in the mixture of C_2H_6 and air with equivalence of 1. The influence of mesh size on the numerical results of pulsating of shock history was analyzed. Mesh size in calculation was fixed in according to the length of induction zone L_{in}, which was determined from ZND model to be 4.6 mm for the detonation wave in the mixture of C_2H_6 and air. As the decrease of mesh size, the solutions of pressure history do not tend to be identical. Detonation shock history was very irregular as the mesh size was not fine enough. As the mesh size was $0.01L_{in}$ and $0.005L_{in}$, pulsating was regular with the mode of period-doubling mode. As the mesh size was $0.0025L_{in}$, pulsating consisted of a series of regular oscillations and three irregular oscillations in the range of calculation, but finally the average wavelength of oscillations tended to 91～93 mm which approaches to the length of cell size of 88 mm from the experiments.

Key words: detonation wave; instability; cell size; numerical simulation