文章编号：1000-5773(2006)02-0133-06

矩形管内临界爆轰动力学数值分析*

王昌建，徐胜利

（中国科学技术大学力学与机械工程系，安徽合肥 230026）

摘要：对矩形管内临界爆轰动力学特征进行了数值分析。采用基元反应描述爆轰化学反应过程，采用二阶附加半隐的龙格-库塔法和 5 阶 WENO 格式求解二维反应欧拉方程。对于 25％氩稀释化学计量比的氢氧预混气体，当管道宽度为 30 mm、初温为 300 K 时，产生临界爆轰的预混气体初压为 3.5 kPa。在此临界条件下，获得了临界爆轰胞格结构、沿壁面的速度和峰值压力曲线及流场波系演变特征。着重对比分析了矩形管内临界爆轰与普通爆轰在爆轰波速度、平均速度、胞格宽长比、横波结构、未反应气囊及旋涡结构之间的差异，深入认识了临界爆轰的不稳定性和化学反应动力学特征。

关键词：临界爆轰；基元反应；数值模拟；横波；旋涡；未反应气囊

中图分类号：O381 **文献标识码**：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。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，是非平面波。横波（即反射激波）与入射激波、马赫杆相交于三波点，由波阵面延伸至反应区内，沿波阵面横向以接近当地声速传播。爆轰的这种横波结构通常有强、弱两种类型。“强型”横波包括两个或两个以上的三波点，且部分横波波后是反应的，而另一部分是无反应的。“弱型”横波中仅一个三波点，波后是无反应的[1-2]。

临界爆轰是指爆轰波在可燃气体中以临界状态传播。所谓临界状态为，如果初压再低一点或管道再小一点，爆轰将熄灭。临界爆轰的模数为 1，即在波阵面上只有一个三波点和一个横波。当三波点与管道壁面刚相碰后，其横波结构首先是弱型的，但很快会转为强型。强型横波结构的一部分在经入射激波压缩后的未燃气体中传播，诱导了波后剧烈的化学反应，则该部分横波可称为横向爆轰波。而另一部分横波在完全反应的气体中传播，是无反应横波。Gamezo 等[3]研究表明：该横向爆轰波的存在是导致临界爆轰波自持传播的唯一机理。对于圆管中传播的螺旋爆轰是临界爆轰的一种，已有大量的研究[1,4-6]。图 1 给出了典型的螺旋爆轰胞格结构[7]。带状迹线有力证实了强型横波结构的存在。



图 1 螺旋爆轰胞格结构

Fig. 1 Cellular pattern of spinning detonation

对矩形管道内临界爆轰传播进行二维数值模拟，目的是认识和搞清临界爆轰所涉及的不稳定性、波系演变、化学反应动力学及其与普通爆轰之间的差异。

* **收稿日期**：2005-12-12；**修回日期**：2006-03-14

基金项目：国家自然科学基金(10172083)；中国博士后科学基金(2005037167)

作者简介：王昌建(1975—)，男，博士，主要研究方向为爆炸、爆轰及化学反应流场激光诊断. E-mail：chjwang@ustc.edu.cn

2 控制方程与数值方法

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:$(1-\varphi)(2H_2+O_2)+\varphi Ar$。假设爆轰气体是理想气体,无粘、无热传导、无辐射。

$$\frac{\partial Q}{\partial t}+\frac{\partial F}{\partial x}+\frac{\partial G}{\partial y}=S \tag{1}$$

其中

$$Q=\{\rho_1,\rho_2,\cdots,\rho_{NS},\rho u,\rho v,\rho E\}^T,F=\{\rho_1 u,\rho_2 u,\cdots,\rho_{NS}u,\rho u^2+p,\rho uv,(\rho E+p)u\}^T$$

$$G=\{\rho_1 v,\rho_2 v,\cdots,\rho_{NS}v,\rho uv,\rho v^2+p,(\rho E+p)v\}^T,S=\{S_1,S_2,\cdots,S_{NS},0,0,0\}^T$$

式中:$\rho=\sum_{i=1}^{NS}\rho_i$,$\rho_1$、$\cdots$、$\rho_{NS}$ 为组元密度,ρ 为总密度,u、v 分别为 x、y 方向速度,p、E 分别为压力和单位质量总能,S_i 为第 i 组元的质量生成速率。

采用 9 组元 48 基元反应模型[8]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。

采用二阶附加半隐的龙格-库塔法(Additve Semi-Implicit Runge-Kutta Methods)[9]全耦合求解,能较好处理爆轰化学反应所引起的刚性问题。为避免物理振荡和数值耗散,准确高阶求解临界爆轰流场精细结构,如入射激波、马赫杆、横波、旋涡和滑移线等,空间项采用 5 阶 WENO 格式离散[10]。本文计算程序的校核详见文献[2],本文计算程序已广泛应用于研究爆轰波在直管、分叉管、半圆形弯管、心形管中的传播[11]及爆轰马赫反射等[12]。

3 计算结果与讨论

本文计算域宽度为 30 mm,在其内充满 25%氩稀释化学计量比的氢氧预混气体,即 $2H_2+O_2+Ar$。当初压 $p_0=3.5$ kPa 和初温 $T_0=300$ K 时,计算得到临界爆轰,波阵面上三波点数为 1。其理由是:提高初压 5.7%,爆轰波三波点数增加,转为濒临临界状态的普通爆轰;初压降低 5.7%,爆轰熄灭。图 2 以流场峰值压力的灰度方式给出了临界爆轰的胞格结构。尽管爆轰波在临界状态传播且在波阵面上只有一个三波点,但产生了周期性的规则胞格结构。在单个爆轰半胞格中,入射激波强度是不断衰减的,导致前半部分三波点迹线是凸形的,而后半部分三波点迹线是凹形的。临界爆轰胞格的平均长度为 105 mm,半宽度为管道宽度,即 30 mm。其宽长比约为 0.58。

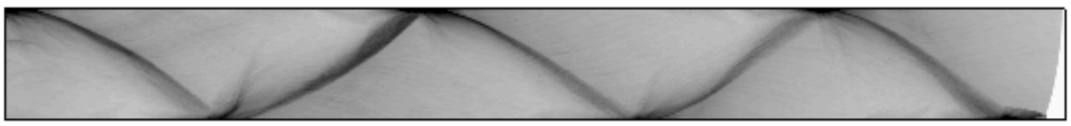


图 2 临界爆轰胞格结构

Fig. 2 Numerical cellular pattern of marginal detonation

图 3 给出了沿管道下壁面的临界爆轰波速度随波阵面位置的变化关系。图 3 表明:临界爆轰波速度在胞格的前半部分衰减较快,在后半部分衰减相对较慢。值得注意的是:在整个爆轰波胞格中,当诱导激波由马赫杆交替为入射激波后,即在胞格的后半部分,爆轰波速度曲线上出现了高频振荡。可能的原因是:入射激波是不断衰减的,在给定网格尺度为 Δx 的情况下,导致计算波阵面位置的误差增大。表 1 给出了临界爆轰与普通爆轰参数对比。表明:临界爆轰波速度变化范围为 $0.62D_{CJ}\sim1.50D_{CJ}$(D_{CJ} 为 Chapman-Jouguet 爆轰波速度),而普通爆轰波速度变化范围为 $0.85D_{CJ}\sim1.2D_{CJ}$。临界爆轰的平均速度为 1844 m/s,明显低于 CJ 值($D_{CJ}=2118$ m/s);而普通爆轰的平均速度接近 CJ 值。图 4 给出了沿管道下壁面的临界爆轰波阵面峰值压力随波阵面位置的变化关系。表明:峰值压力在胞格前半部分几乎成指数衰减,而在后半部分衰减相对较慢。其变化范围约为 $20p_0\sim114p_0$。

图 5 给出了图 2 局部放大的临界爆轰胞格结构。迹线 3 是波阵面的三波点(即主三波点)迹线;迹

线 4 为次三波点迹线,即横向爆轰波、诱导激波后的反应阵面和无反应横波的交点。在三波点与壁面碰撞前后产生了弱纵向迹线 1 和横向迹线 2。

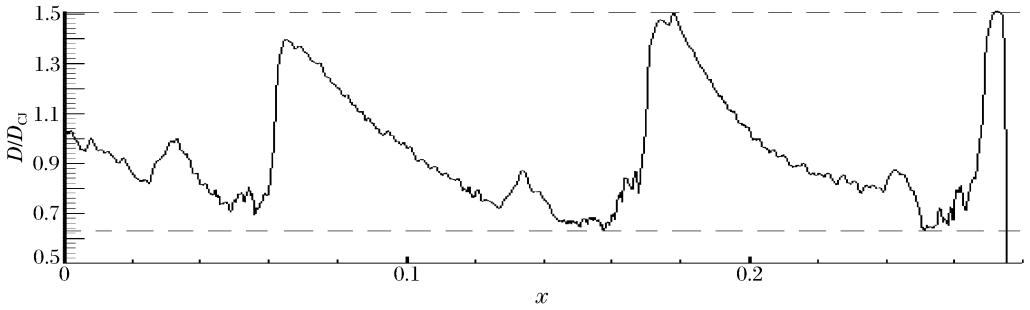


图 3　沿下壁面临界爆轰波速度

Fig. 3　Marginal detonation velocity along the bottom wall

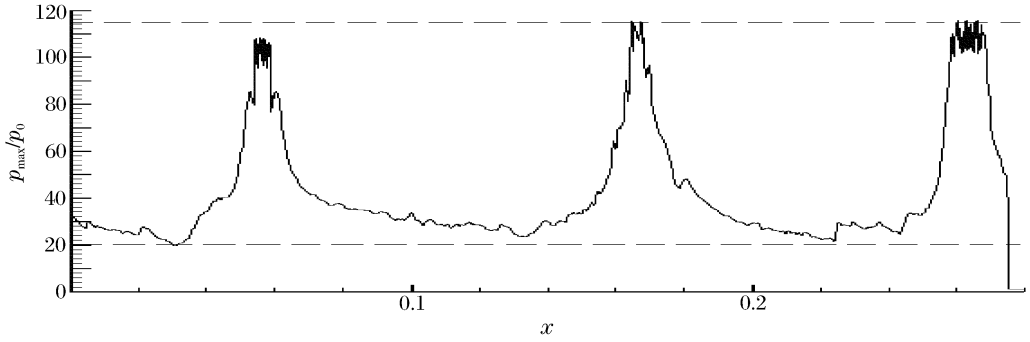


图 4　沿下壁面临界爆轰波峰值压力

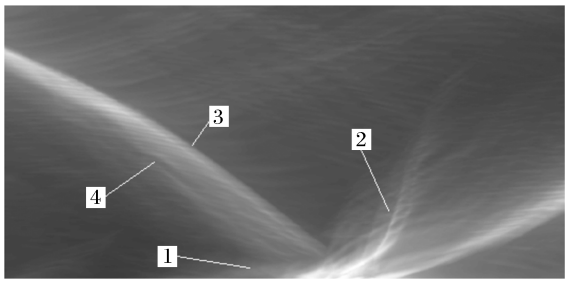
Fig. 4　Maximum pressure of marginal detonation along the bottom wall

表 1　临界爆轰与普通爆轰参数对比

Table 1　Comparison of some typical parameters between marginal and ordinary detonations

Detonation	D/D_{CJ}	$\overline{D}$/(m/s)	$\overline{D}/D_{CJ}$	Cell aspect ratio
Marginal detonation	0.62～1.5	1844	0.87	0.58
Ordinary detonation	0.85～1.2		≈1	≈0.55

为解释图 5 中迹线如何产生和深入分析横波精细动力学结构,图 6 给出了三波点与壁面碰撞前后临界爆轰波演变的温度和 OH 质量分数场。图 6(a)表明:横向爆轰波在经入射激波压缩后的未燃气体中传播,波后可燃气体基本完全反应,仅少部分未反应气体沿滑移线延伸进反应气体中。在横向爆轰波和马赫杆后能看到许多细小的未反应气囊(即次未反应气囊)。在这些次未反应气囊中,压力和温度相对较低,分别约为 $18p_0$ 和 $6T_0$。无反应横波已完全反射离开壁面,由于反射波后(尤其在横波与壁面的交点附近)的压力相对较高,产生弱纵向迹线 1。图 6(b)表明:主三波点正与壁面相碰,切下一个未反应气囊(即主未反应气囊),该主未反应气囊比次

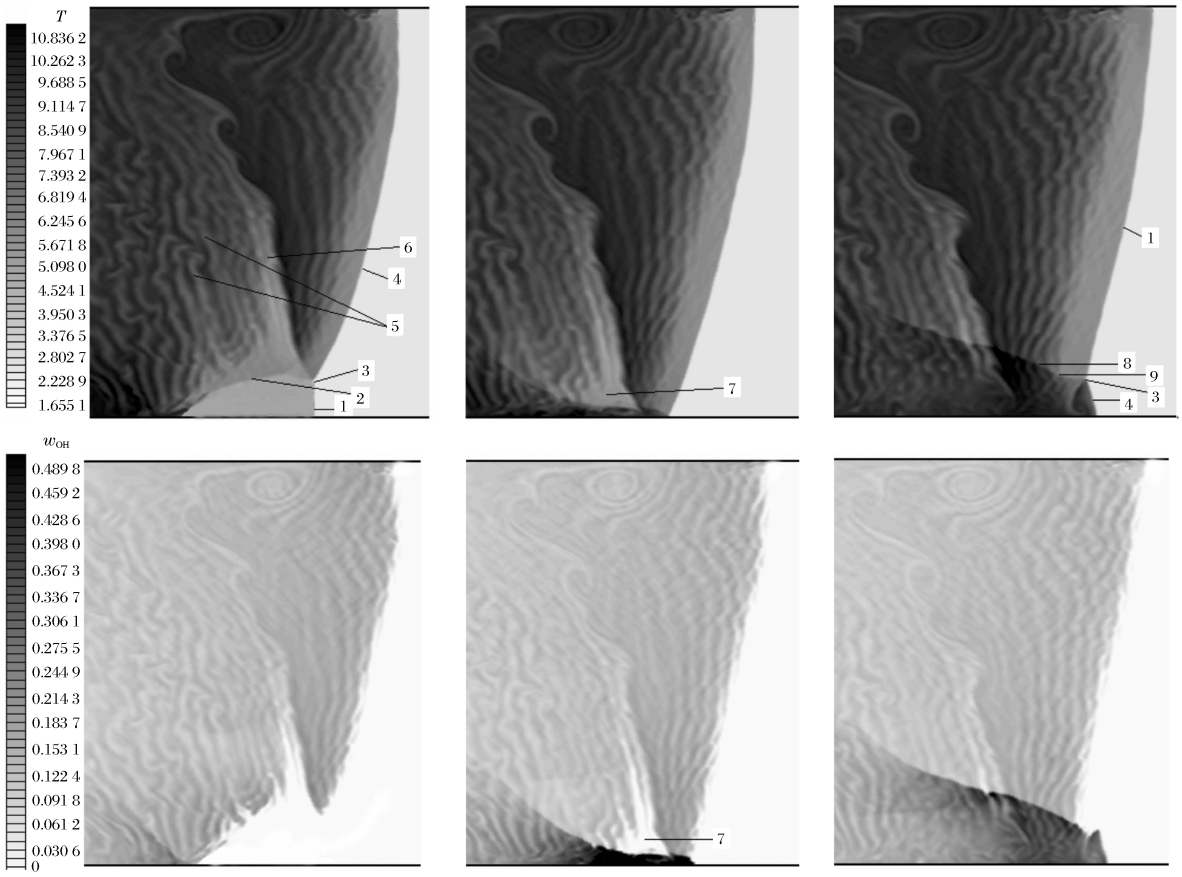


1. Weak longitudinal track; 2. Transverse tracks; 3. First triple-point track; 4. Second triple-point track

图 5　局部放大的临界爆轰胞格结构

Fig. 5　Locally enlarged cellular pattern of marginal detonation

未反应气囊和普通爆轰的未反应气囊(见图 7)大得多,其内的温度、压力相对较低,分别约为 $15p_0$ 和 $4.5T_0$。当横波在该主未反应气囊中传播,波后化学反应速率加快,反应区与横波迅速耦合,进而横波转变为横向爆轰波。该横向爆轰波是超趋动爆轰,波后压力非常高,导致迹线 2 的形成。迹线 2 形成的另一个可能的原因是:三波点与壁面碰撞,导致当地压力和温度非常高,化学反应速率也急剧增加。在碰撞点释放大量的能量,类似于"爆炸中的爆炸"(Explosion within the explosion)或"微爆轰"(Micro-detonation)[1],从而产生大量的压缩波或弱激波,形成迹线 2。此时,如果不考虑主未反应气囊对横波的影响,由于诱导激波后的诱导区很短,可以说横波是弱型结构。但实际上,横波同时在主未反应气囊和完全反应气体中传播,出现横向爆轰波结构和更多的三波点,因此横波是强型结构。图 6(c)表明:横波离开下壁面一定距离,由于入射激波后的诱导区相对较宽,在其后的反应阵面与横波交叉处形成新的三波点,其为强型结构。总的来说,在三波点与壁面碰撞前后,横波始终为强型结构。

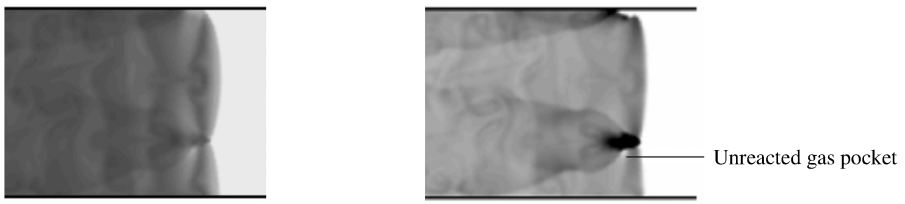


(a) $t=295.21\ \mu s$ (b) $t=298.31\ \mu s$ (c) $t=301.19\ \mu s$

1. Incident shock; 2. Transverse detonation; 3. First triple point; 4. Mach stem; 5. Secondary unreacted gas pockets; 6. Unreacted tail; 7. Unreacted gas pocket; 8. Transverse shock; 9. Secondary triple point

图 6 不同时刻的温度(上)和 OH 质量分数(下)分布

Fig. 6 Temperature and OH mass fraction fields at different time

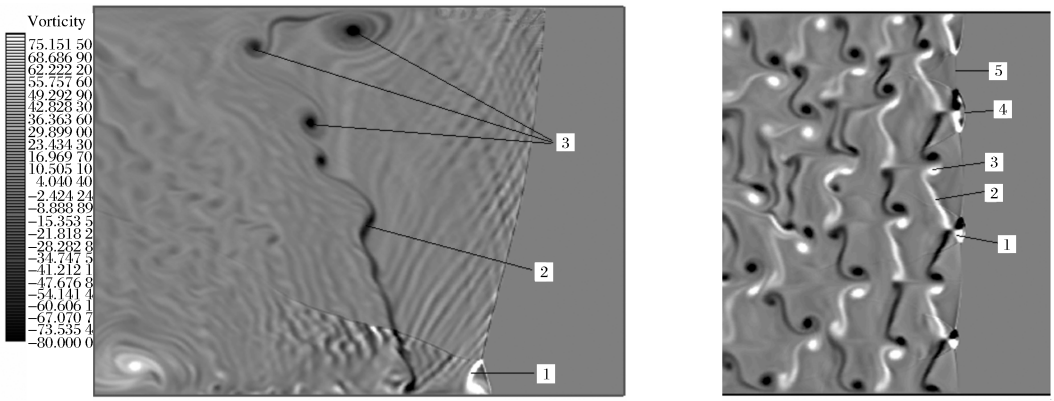


(a) Temperature (b) OH mass fraction

图 7 三波点碰撞时的温度和 OH 质量分数分布

Fig. 7 Contours of temperature and OH mass fraction when two triple points collides

图 8 给出了临界爆轰和普通爆轰的涡量场。图 8 表明:在临界爆轰流场中,当三波点与壁面碰撞后,由于滑移线的 Kelvin-Helmholtz 不稳定性,在当前循环的滑移线产生一个小旋涡;而在上一个循环的滑移线产生了 4 个或更多的旋涡。在普通爆轰流场中,不管是当前循环还是上一个循环的单个滑移线,仅有一个旋涡与之相连。这说明:临界爆轰的滑移线比普通爆轰更不稳定,产生更多的旋涡。



(a) Marginal detonation　　(b) Ordinary detonation

1. Slip line in current cycle; 2. Slip line in last cycle; 3. Vortices; 4. Mach stem; 5. Incident shock

图 8　临界与普通爆轰涡量场

Fig. 8　Vorticity fields of marginal and ordinary detonations

4　结　论

基于本文的数值结果,结论如下:

(1) 临界爆轰波速度变化范围为 $0.62D_{CJ}$～$1.5D_{CJ}$,其平均速度为 $0.87D_{CJ}$。胞格的宽长比为 0.58。

(2) 在临界爆轰波整个传播过程中,考虑未反应气囊对横波的影响,则横波始终是强型结构。

(3) 与普通爆轰相比,临界爆轰流场中的滑移线更不稳定,产生更多的旋涡。在三波点与壁面碰撞后,在流场中能清晰地看到相对较大的未反应气囊。

References:

[1] Fickett W, Davis W C. Detonation [M]. California: University of California Press, 1979: 307-337.

[2] Wang C J, Xu S L. Numerical Study on Cellular Detonation in a Straight Tube Based on Detailed Chemical Reaction Model [J]. Explosion and Shock Waves, 2005, 25(5): 405-416. (in Chinese)
王昌建,徐胜利. 直管内胞格爆轰的基元反应数值研究 [J]. 爆炸与冲击, 2005, 25(5): 405-416.

[3] Gamezo V N, Vasil'ev A A, Khokhlov A M, et al. Fine Cellular Structures Produced by Marginal Detonations [J]. Proceedings of the Combustion Institute, 2000, 28: 611-667.

[4] Bone W A, Fraser R P, Wheeler W H. A Photographic Investigation of Flame Movements in Gaseous Explosive [J]. Philos Trans Roy Soc, London, A, 1935, 235: 29-78.

[5] Campbell C, Woodhead D W. The Ignition of Gases by an Explosive Wave [J]. J Chem Soc, 1927, 130: 1572-1578.

[6] Fay J A. A Mechanical Theory of Spinning Detonation [J]. J Chem Phys, 1952, 20: 942-950.

[7] Huang Z W, Lefebvre M H, Tiggelen P J V. Experiments on Spinning Detonations with Detailed Analysis of the Shock Structure [J]. Shock Waves, 2000, 10: 119-125.

[8] Oran E S, Young T R, Boris J P, et al. Weak and Strong Ignition(Ⅰ): Numerical Simulation of Shock Tube Experiments [J]. J Combust Flame, 1982, 48: 135-148.

[9] Zhong X L. Additive Semi-Implicit Runge-Kutta Methods for Computing High-Speed Noneqilibrium Reactive Flows [J]. J Comp Phys, 1996, 128: 19-31.

[10] Shu C W. Essentially Non-Oscillatory and Weighted Essentially Non-Oscillatory Schemes for Hyperbolic Conservation Laws [R]. ICASE Report 97-65,1997.

[11] Wang C J. Study on Gaseous Detonation Propagation Through Tubes with Complex Geometry [D]. Hefei: University of Science and Technology of China,2004. (in Chinese)
王昌建. 气相爆轰波在复杂管道中传播的研究 [D]. 合肥:中国科学技术大学,2004.

[12] Wang C J,Xu S L. Numerical Simulation on Mach Reflection of Cellular Detonation [A]. //Special Group of Shock Wave and Shock Tube of the Chinese Society of Theoretical and Applied Mechanics. Proceedings of the 11th Chinese National Symposium on Shock Wave [C]. Mianyang,2004:115-119. (in Chinese)
王昌建,徐胜利. 胞格爆轰马赫反射数值模拟 [A]. //中国力学学会直属激波与激波管专业组. 第十一届全国激波与激波管学术会议文集 [C]. 绵阳,2004:115-119.

Numerical Analysis of Marginal Detonation Dynamics in a Rectangular Tube

WANG Chang-Jian, XU Sheng-Li

(*Department of Mechanics and Mechanical Engineering, University of Science and Technology of China, Hefei* 230026, *China*)

Abstract: Marginal detonation dynamics in a rectangular tube was numerically analyzed in this paper. The detailed chemical reaction model was employed to describe the heat release of detonation chemical reactions. The 2nd additive semi-implicit Runge-Kutta method and 5th order Weighted Essentially Non-Oscillatory (WENO) scheme were used to integrate the two-dimensional time-dependent reactive Euler equations. For the stoichiometric hydrogen and oxygen mixture diluted by 25% argon, as the channel width is 30 mm and the initial temperature is 300 K, the critical initial pressure for marginal detonation is 3.5 kPa. Under this critical condition, the cellular pattern, the velocity and maximum pressure along the wall and the wave evolution of marginal detonation were obtained. The difference between the marginal and ordinary detonation was discussed including the detonation velocity, average velocity, the ratio of cell width to length, transverse wave structure, unreacted gas pocket and vortex structure. The intrinsic instability and chemical dynamics characteristics of marginal detonation were deeply recognized.

Key words: marginal detonation; detailed chemical reaction model; numerical simulation; transverse wave; vortex; unreacted gas pocket