文章编号：1000-5773(2011)05-0395-06

基于基元反应模型的 H_2-O_2-N_2 爆轰数值模拟*

宁建国，李　健，王　成，赵　慧

（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：采用 12 组分、23 个化学反应的基元化学反应模型，用 5 阶加权本质无震荡格式（WENO）、3 阶 TVD Runge-Kutta 格式，对 H_2-O_2-N_2 混合气体胞格爆轰进行了数值模拟。研究了一维 ZND 爆轰、自维持爆轰的详细结构以及三波点附近的流动结构。计算结果表明：由横波的压力可以显著促进二维爆轰波波阵面的形成；横波的运动生成三波点，三波点造成了爆轰的自维持传播。

关键词：爆轰；加权本质无震荡格式；三波点；基元化学反应模型

中图分类号：O347.1　　**文献标识码**：A

1　引　言

气相爆轰由于流体动力学和化学反应的高度耦合，其很多相关的现象很难理解。爆轰是激波诱导的燃烧波，由前导的激波和紧跟的化学反应区组成。在自维持爆轰中，激波和反应区以 CJ 速度向前传播，并符合 Chapman-Jouguet 理论[1]。目前，普遍认为 ZND 模型能够正确地描述一维爆轰结构。对于多维的情况，由于胞格结构和三波点的存在，ZND 模型已不再适用[2-3]。

气相爆轰的数值模拟，存在数值计算格式和物理模型两方面的难点。近年来 Harten[2]、Shu[3-5] 等人提出了各种高精度格式，使得强间断的处理格式得到了很大的发展。而在物理模型方面，简单的化学反应模型[6-8]对于真实情况下的气相爆轰过程，特别是三波结构和爆轰胞格，不是很适用。基元化学反应模型能够更好地描述爆轰波的特性，但是方程源项存在刚性，处理刚性问题的方法主要有 Time-Spliting算法、点隐法和全隐法。随着计算机性能的迅速提高，人们已经开始应用基元反应来模拟爆轰过程，对氢氧混合气体的爆轰进行深入的研究[9-10]。

本研究采用 12 组分、23 个化学反应的基元化学反应模型，应用化学动力学计算方法、加权本质无震荡差分格式（WENO）和温度的处理方法，对一维和二维情况下的氢氧爆轰波进行数值模拟，并将得到的结果与已有的计算结果进行对比。

2　计算模型

2.1　控制方程

对于多组分气相爆轰波反应的研究，采用二维平面坐标系的 Euler 方程组。计算的混合气体为符合化学当量比的氢气 H_2、氧气 O_2，外加氮气 N_2 作为稀释气体。假设气体为热力学理想气体[11]，无粘性，忽略热传导和扩散，控制方程和相关的热力学方程为

$$\boldsymbol{U}_t + [\boldsymbol{F}(U)]_x + [\boldsymbol{G}(U)]_y = \boldsymbol{S}(U) \tag{1}$$

其中矩阵 $\boldsymbol{U}$、$\boldsymbol{F}$、$\boldsymbol{G}$、$\boldsymbol{S}$ 分别为守恒型变量、x 和 y 方向的通量向量和化学反应源项，具体形式如下

* **收稿日期**：2010-07-25；**修回日期**：2010-10-09

基金项目：国家自然科学基金（10972040）；国家重点基础研究发展计划（2010CB832706）

作者简介：宁建国（1963—），男，博士，教授，主要从事爆炸与毁伤技术、材料和结构动态力学研究. E-mail：jgning@bit.edu.cn

$$\boldsymbol{U}=\begin{pmatrix}\rho\\ \rho u\\ \rho v\\ E\\ \rho y_1\\ \vdots\\ \rho y_N\end{pmatrix},\ \boldsymbol{F}(U)=\begin{pmatrix}\rho u\\ \rho u^2+p\\ \rho uv\\ (E+p)u\\ \rho u y_1\\ \vdots\\ \rho u y_N\end{pmatrix},\ \boldsymbol{G}(U)=\begin{pmatrix}\rho v\\ \rho uv\\ \rho v u^2+p\\ (E+p)v\\ \rho v y_1\\ \vdots\\ \rho v y_N\end{pmatrix},\ \boldsymbol{S}=\begin{pmatrix}0\\ 0\\ 0\\ 0\\ \dot{\omega}_1(T,p,y_1,y_2,\cdots,y_N)\\ \vdots\\ \dot{\omega}_N(T,p,y_1,y_2,\cdots,y_N)\end{pmatrix} \tag{2}$$

$$E=\rho h-p+\frac{\rho(u^2+v^2)}{2} \tag{3}$$

$$\frac{h_i}{R_iT}=a_{1i}+\frac{a_{2i}}{2}T+\frac{a_{3i}}{3}T^2+\frac{a_{4i}}{4}T^3+\frac{a_{5i}}{5}T^4+\frac{a_{6i}}{T},R_i=\frac{R}{\omega_i} \tag{4}$$

式中：E 为总能量密度，ω_i 为气体组分 i 的化学反应生成率，N 为组分数，h 为比焓，h_i 为第 i 种组分的比焓，R 为普适气体常数，R_i 为气体组分 i 的气体常数。

2.2 基元化学反应模型

采用 12 组分、23 种基元化学反应模型(表 1)对氢-氧气体爆轰波进行计算，具体的化学反应和计算所需的参数如表 1 所示，表 1 中 A_k、n_k 为指前因子，E_{ak}为化学反应的活化能。其化学反应的一般形式可以写为以下形式

$$\sum_{i=1}^{N}\nu_{ik}^{'}\chi_i\Leftrightarrow\sum_{i=1}^{N}\nu_{ik}^{''}\chi_i \tag{5}$$

式中：$\nu_{ik}^{'}$、$\nu_{ik}^{''}$分别表示正向和逆向反应各组分的化学计量系数；χ_i 为反应中的化学组分。各个化学组分的反应生成率由基元化学反应的动力学模型给出

$$\dot{\omega}_i=W_i\sum_{k=1}^{N}(\nu_{ik}^{''}-\nu_{ik}^{'})\left(\sum_{i=1}^{N}\alpha_{ik}C_{\chi i}\right)\left[K_{f,k}\prod_{i=1}^{N}(C_{\chi i})^{\nu_{ik}^{'}}-K_{b,k}\prod_{i=1}^{N}(C_{\chi i})^{\nu_{ik}^{''}}\right] \tag{6}$$

式中：$C_{\chi i}=\rho_i/W_i$ 为第 i 组分的摩尔浓度，W_i 为第 i 种组分的摩尔质量，α_{ik} 为第三体效应系数，$K_{f,k}$、$K_{b,k}$ 分别为正、逆化学反应的反应常数。

表 1 化学反应和反应参数

Table 1 Chemical reactions and parameters

No.	Reaction equations	A_k	n_k	E_{ak}/(kJ)	No.	Reaction equations	A_k	n_k	E_{ak}/(kJ)
1	$H_2+O_2=2OH$	1.70×10^{13}	0.0	47.780	13	$H+OH+M=H_2O+M$	1.60×10^{22}	−2.0	0.000
2	$OH+H_2=H_2O+H$	1.17×10^{9}	1.3	3.626	14	$H+O+M=OH+M$	6.20×10^{16}	−0.6	0.000
3	$O+OH=O_2+H$	4.00×10^{14}	−0.5	0.000	15	$O+O+M=O_2+M$	1.89×10^{13}	0.0	−1.788
4	$O+H_2=OH+H$	5.06×10^{4}	2.7	6.290	16	$H+HO_2=H_2+O_2$	1.25×10^{13}	0.0	0.000
5	$H+O_2+M=HO_2+M$	3.61×10^{17}	−0.7	0.000	17	$HO_2+HO_2=H_2O_2+O_2$	2.00×10^{12}	0.0	0.000
6	$OH+HO_2=H_2O+O_2$	7.50×10^{12}	0.0	0.000	18	$H_2O_2+M=OH+OH+M$	1.30×10^{17}	0.0	45.500
7	$H+HO_2=2OH$	1.40×10^{14}	0.0	1.073	19	$H_2O_2+H=HO_2+H_2$	1.60×10^{12}	0.0	3.800
8	$O+HO_2=O_2+OH$	1.40×10^{13}	0.0	1.073	20	$H_2O_2+OH=H_2O+HO_2$	1.00×10^{13}	0.0	1.800
9	$2OH=O+H_2O$	6.00×10^{8}	1.3	0.000	21	$O+N_2=NO+N$	1.40×10^{14}	0.0	75.800
10	$H+H+M=H_2+M$	1.00×10^{18}	−1.0	0.000	22	$N+O_2=NO+O$	6.40×10^{9}	1.0	6.280
11	$H+H+H_2=H_2+H_2$	9.20×10^{16}	−0.6	0.000	23	$OH+N=NO+H$	4.00×10^{13}	0.0	0.000
12	$H+H+H_2O=H_2+H_2O$	6.00×10^{19}	−1.2	0.000					

2.3 数值方法

采用 Steger-Warming 矢通量分裂的方法[12]对物理通量 F、G 进行分解，按照分裂后的物理通量构

造迎风型差分格式,其方程为

$$\frac{\partial U}{\partial t}+\frac{\partial F^{+}}{\partial x}+\frac{\partial F^{-}}{\partial x}+\frac{\partial G^{+}}{\partial y}+\frac{\partial G^{-}}{\partial y}=S \tag{7}$$

半离散守恒格式为

$$\left(\frac{\partial U}{\partial t}\right)_{i,j}=-\frac{1}{\Delta x}(\hat{F}^{+}_{i+1/2,j}-\hat{F}^{+}_{i-1/2,j})-\frac{1}{\Delta x}(\hat{F}^{-}_{i+1/2,j}-\hat{F}^{-}_{i-1/2,j})-$$
$$\frac{1}{\Delta y}(\hat{G}^{+}_{i,j+1/2}-\hat{G}^{+}_{i,j-1/2})-\frac{1}{\Delta y}(\hat{G}^{-}_{i,j+1/2}-\hat{G}^{-}_{i,j-1/2})+S_{i,j} \tag{8}$$

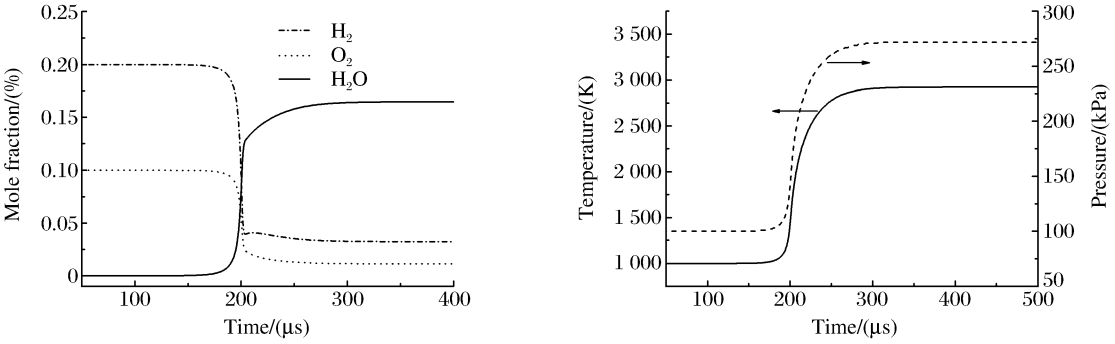
式中:$\hat{F}^{\pm}_{i\pm1/2,j}$、$\hat{G}^{\pm}_{i,j\pm1/2}$ 是 x、y 方向上的数值半通量,通过 WENO 格式,根据模板扩展和迎风思想可以构造各个方向上的数值半通量。

对时间方向采用三阶 TVD Runge-Kutta 格式进行离散。采用 CHEMKIN 程序包[13]积分化学反应方程组,CHEMKIN 为单步格式 ,能较好地处理刚性问题。

3 数值模拟结果分析

3.1 等容爆炸

在等容爆炸过程中,混合气体的体积和密度均保持不变,计算得到的混合气体等容爆炸的结果如图 1所示。



(a) Mole fraction (b) Temperature and pressure

图 1 等容爆炸时气体的摩尔分数、温度和压力随时间的变化曲线

Fig. 1 Gas mole fraction, temperature and pressure versus time curve for constant volume explosion

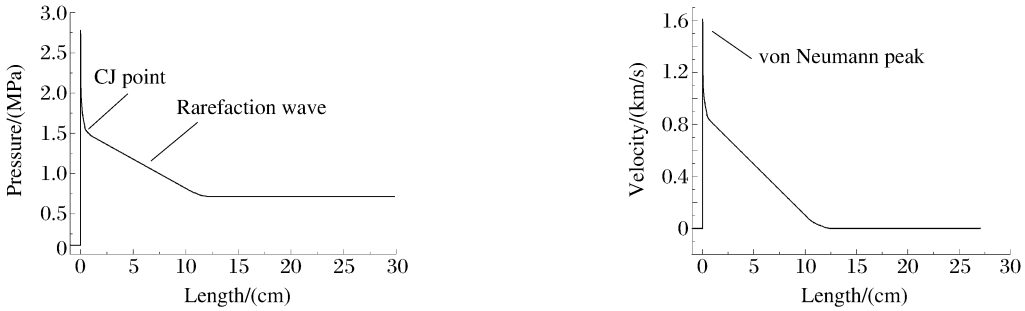
3.2 一维 ZND 爆轰

图 2 给出了计算得到的 ZND 爆轰波压力和粒子速度的空间分布图。从图 2 中可以看出,前导激波和紧跟其后的化学反应区构成爆轰波阵面,然后是稀疏波区,计算结果与 CJ 模型的自相似解符合得很好。本研究计算出的稳态爆轰波的速度为 1 976.5 m/s,与文献[14]给出的理想 CJ 爆速相差不大;CJ 爆轰压力为 1.51 MPa,前导激波的 von-Neumann 峰值压力为 2.77 MPa。

图 3 是计算得到的一维爆轰波直接起爆并形成稳态爆轰波的压力分布图。初始条件为:一段高温高压区,区域内的混合气体发生剧烈的化学反应,形成很高的压力,同时克服左壁面的稀疏作用,逐渐形成爆轰。由于爆轰是在冲击波后的区域产生的,首先形成的是过驱爆轰(强爆轰),其爆速大于 CJ 爆速,因此爆轰波很快追赶上冲击波,其后爆压逐渐下降并形成稳定的 CJ 爆轰。

3.3 胞格结构

爆轰波的波阵面结构复杂,如图 4 所示,它包括爆轰波传播方向的入射激波和垂直于爆轰传播方向的横向激波,而前导激波由入射激波和马赫杆组成。入射激波、马赫干和横波三者交汇于三波点,三波点的运动变化规律即为所谓的胞格结构(Cellular Structure)。



(a) Pressure (b) Particle velocity

图 2 一维 ZND 爆轰波的压力和粒子速度分布

Fig. 2 Pressure and particle velocity distribution of one-dimensional ZND detonation

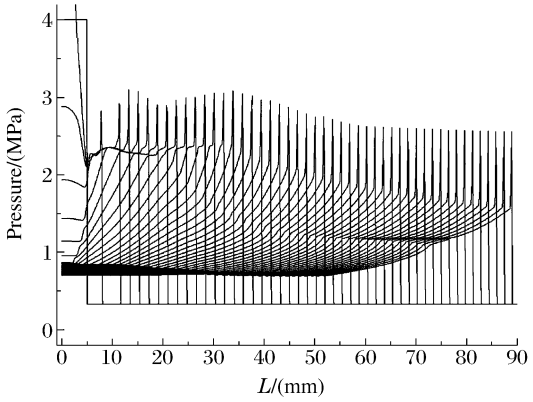


图 3 计算得到的一维爆轰波传播的压力分布曲线

Fig. 3 Pressure profiles in simulations of one-dimensional detonation wave propagation

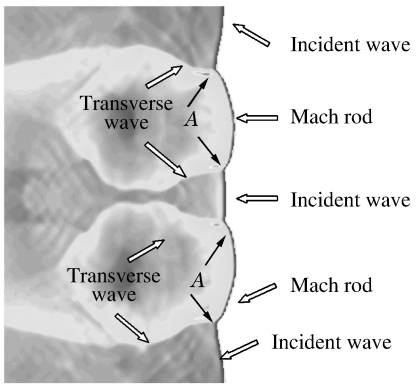
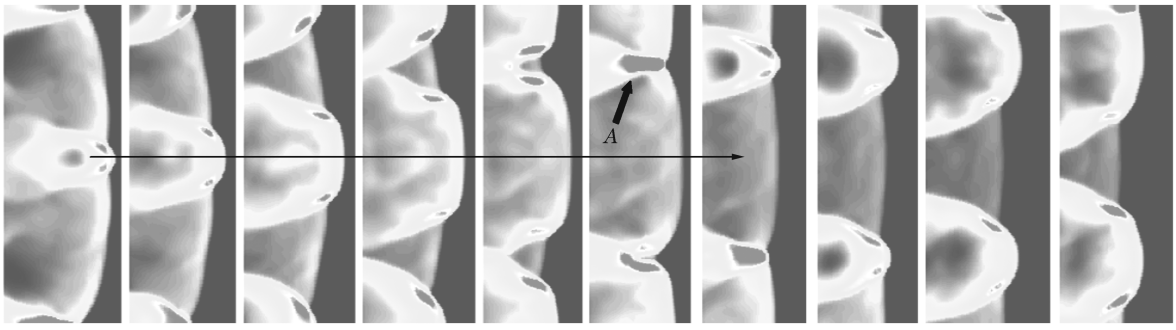


图 4 爆轰波三波结构(A 为三波点)

Fig. 4 Structure of triple wave structure (A—Triple wave point)

气相爆轰波在向前传播的过程中,爆轰波阵面的各区域不断交替表现为入射激波和马赫杆,这种形式是通过相邻三波点的对撞实现的。如图 5 所示,当爆轰波在从图 5(a)的位置运动到图 5(f)位置的过程中,入射激波不断衰减,其相邻的两个马赫杆不断逼近,然后相撞(如图 5 中的 A 点)。相撞后,在对撞点出现新的马赫杆,速度也突然增加。另一方面,与入射激波相邻的马赫杆不断扩张,冲击压力也不



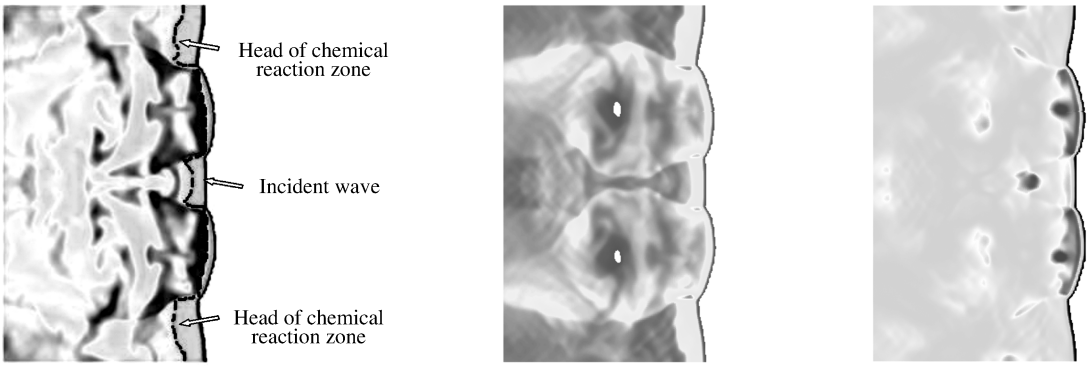
(a) (b) (c) (d) (e) (f) (g) (h) (i) (j)

图 5 胞格演化过程

Fig. 5 Evolvement of cellular structure

断衰减(沿图 5 中长箭头方向)。在三波点对撞、产生新的马赫杆的同时，原先的马赫杆衰减为入射冲击波，完成一次从马赫杆到入射激波的交替。

从图 6(a)可以看出，在前导激波和化学反应阵面之间存在反应诱导区，即图 6 中前导激波后的浅颜色区域。马赫杆后的化学反应与入射激波后的不一样。前者的诱导时间短；而后者和入射激波直接是解耦的，特别是在胞格的末段，由于入射激波的不断衰减，入射激波后的化学反应诱导时间更长并且诱导区域更宽。这种情况在温度分布图上表现为入射激波后的化学反应阵面比马赫杆后的反应阵面滞后很多。



(a) Temperature　　(b) Density　　(c) Transverse velocity

图 6　爆轰波波阵面结构

Fig. 6　Structure of detonation wave front

4　结　论

应用 12 组分、23 个化学反应的基元化学反应模型，对一维和二维情况下的氢氧爆轰波进行了数值模拟，并将得到的结果与已有的计算结果进行对比，证明所采用的化学动力学计算方法、WENO 差分格式和温度的处理方法是有效并可行的，得到了以下结论。

(1) 采用基元反应模型，反应物的分解、生成物的形成以及一系列的链分支反应的机理和作用过程明晰，能量释放过程不依赖于经验参数。可见，基元化学反应模型更加适合于研究各种爆炸过程问题。

(2) 数值模拟能够描述爆轰波阵面的横波结构和三波对撞过程，得到了完整的胞格结构，其特点是波阵面由马赫杆和入射激波交替构成，马赫杆的爆轰状态是超驱的，而入射激波是欠驱的。

(3) 横波的压力可以显著促进二维爆轰波波阵面的形成。横波的运动生成三波点，三波点造成了爆轰的自维持传播。

References:

[1] Williams F A. Combustion Theory [M]. 2nd ed. Reading, Massachusetts: Addison-Wesley, 1985.

[2] Harten A, Engquist B, Osher S, et al. Uniformly High Order Accurate Essentially Non-Oscillatory Schemes, Ⅲ [J]. J Comput Phys, 1987, 71(2): 231-303.

[3] Shu C W, Osher S. Efficient Implementation of Essentially Non-Oscillatory Shock-Capturing Schemes [J]. J Comput Phys, 1988, 77(2): 439-471.

[4] Shu C W, Osher S. Efficient Implementation of Essentially non-Oscillatory Shock-Capturing Schemes, Ⅱ [J]. J Comput Phys, 1989, 83(1): 32-78.

[5] Jiang G L, Shu C W. Efficient Implementation of Weighted ENO Schemes [J]. J Comput Phys, 1996, 126(1): 200-212.

[6] Schoffel S U, Ebert F. Numerical Analysis Concerning the Spatial Dynamics of an Initially Plane Gaseous ZND Detonation [J]. Shock Waves, 1988, 114: 3-31.

[7] Gaki S, Fujiwara T. Numerical Analysis of Two-Dimensional No Steady Detonations [J]. AIAA Journal, 1978, 16: 73-77.

[8] Lefebvre M H. Simulation of Cellular Structure in a Detonation Wave [J]. Shock Waves, 1991, 153: 64-77.

[9] Hu X Y. On the Structures of Gaseous Detonation Waves [R]. Beijing: The Institute of Mechanics, Chinese Academy of Sciences, 2001. (in Chinese)
胡湘渝. 气相爆轰波结构研究 [R]. 北京: 中国科学院力学研究所, 2001.

[10] Zhang D L, Xie W, Guo C M, et al. Numerical Simulation of Cellar Structures and Mach Reflection of Gaseous Detonation Waves [J]. Explosion and Shock Waves, 2001, 21(3): 161-167.

[11] Anderson J D. Hypersonic and High Temperature Gas Dynamics [M]. New York: McGraw-Hill, 1989.

[12] Steger J L, Warming R F. Flux Vector Splitting of the Inviscid Gasdynamic Equations with Application to Finite-Difference Methods [J]. J Comput Phys, 1981, 40(2): 263-293.

[13] Kee R J. Chemkin: A General Purpose Problem Independent, Transportable Fortran Chemical Kinetics Code Package [R]. SAND28028003, 1989.

[14] Zhang B P, Zhang Q M, Huang F L. Explosion Physics [M]. Beijing: Weapon Industry Press, 2001.

A Numerical Simulation of H_2-O_2-N_2 Gaseous Detonation Based on Detailed Chemical Reaction Model

NING Jian-Guo, LI Jian, WANG Cheng, ZHAO Hui

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

Abstract: Numerical simulation has been performed to study the cellular detonation wave in a mixture using a detailed chemical reaction model with 12 species and 23 elementary reactions and a fifth-order weighted essentially non-oscillatory (WENO) scheme with a third-order TVD Runge-Kutta time stepping method. We study one-dimensional ZND detonation, the detailed structure of self-sustained detonation and flow structure around a triple point. The simulation results suggest that two-dimensional detonation wave front formations are greatly enhanced by the presence of transverse waves. The motion of transverse waves generates triple points, which cause the detonation propagation to become self-sustained.

Key words: detonation; weighted essentially non-oscillatory (WENO); triple point; detailed chemical reaction model