文章编号：1000-5773(2013)05-0691-08

爆轰波在60°光滑弯管中传播的动力响应过程研究*

李　健，赵　慧，宁建国

（1.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：采用显-隐式附加 Runge-Kutta 方法和5阶精度的加权本质无震荡(WENO)格式以及基元反应模型，对规则爆轰波在60°弯管中的传播过程进行了数值模拟研究。基元反应模型采用9组分48反应模型，反应气体为满足化学当量比的 H_2-O_2 混合气体，并用氩气稀释。数值模拟结果表明：弯管上壁面的衍射效应使得爆轰压力减小，胞格尺寸增大并伴有局部熄爆；下壁面的反射使得马赫杆后区域压力增大、温度升高，胞格尺寸减小；在弯管段，爆轰胞格的规则性很差，离开弯管大约0.45 m后恢复规则性；由于拐弯角的影响，爆轰波在下壁面存在马赫反射和规则反射两种模式；弯管出口端，反射横波受到爆轰波阵面固有横波的追赶压缩，形成了一道向上运动的爆轰横波。

关键词：附加 Runge-Kutta 方法；反射；衍射；弯管；气相爆轰

中图分类号：O383　　**文献标识码**：A

1　引　言

气相爆轰的数值模拟在过去几十年一直是一个重要而且活跃的研究领域。气相爆轰是化学反应与气体动力学的强耦合过程，非常复杂，直至今日仍然有很多问题没有得到彻底解决，包括湍流燃烧、燃烧转爆轰、爆轰控制等。气相爆轰波由前导激波和其后的化学反应区组成，相对于燃烧，是一种反应更剧烈、破坏力更强的能量释放形式[1]。

在天然气输运管道或者核反应堆的管道系统中，经常有一些弯管法兰结构，突发的管道内部爆炸将对其构成巨大威胁。为了评估意外事故发生时爆轰波对整个管道的破坏效应，需要重点研究弯管不同位置处的压力响应过程，以及造成这些力学现象的原因[2]。爆轰波在弯管中的传播是一个前沿性课题，因为在弯管中同时存在马赫反射和衍射这两种对爆轰波的稳定传播来说截然相反的效应。Thomas 等人[3]实验研究了气相爆轰波与楔体、弯管等约束的相互作用过程，详细阐述了爆轰波在不同尺寸的弯管中传播时横波结构对爆轰波传播特性的影响，并发现对于小曲率的弯管，弯管内侧爆轰波的行为受弯管出口端的重新起爆所支配。Deiterding[4]对 H_2-O_2 混合物爆轰波在光滑弯管中的精细爆轰结构进行了数值模拟，结果表明：在弯管出口端，沿着爆轰横波有新的三波点出现，并且它会向着该横波所参与构成的三波点移动。Frolov 等[5]研究了激波和爆轰波在充满丙烷-空气混合气体的 U 型管道中传播的情况，并讨论了 U 型管道对爆轰波起爆和传播的重要影响。Uchida 等[6]对爆轰波在90°弯管中传播时管道壁面的压力效应进行了实验研究，结果发现在弯管外侧壁面处出现压力峰值，同时由于横波的影响，

* **收稿日期**：2012-10-20；**修回日期**：2012-11-26

基金项目：国家重点基础研究计划(2010CB832706)；国家自然科学基金(11032002)

作者简介：李　健(1985—)，男，博士研究生，主要从事反应流数值研究. E-mail：10802005@bit.edu.cn

通讯作者：赵　慧(1984—)，女，博士研究生，主要从事反应流数值研究. E-mail：zhaohui338@bit.edu.cn

弯管下游处也会出现两个压力峰值。

本研究对规则爆轰波在 60°光滑弯管中的传播过程进行了数值模拟，重点研究了爆轰波与弯管的相互作用和动力响应过程。数值模拟采用显-隐式附加 Runge-Kutta 方法和加权本质无震荡(WENO)格式，反应模型为 9 组分 48 反应模型。

2 控制方程和数值方法

2.1 控制方程

对于爆轰波在预混气体中传播的问题，在不考虑粘性、热传导和扩散效应的情况下，控制方程采用反应 Euler 方程。在笛卡尔坐标系下，在使用规则的矩形网格进行复杂外形计算时，难以给定壁面边界条件。故在曲线坐标系下生成贴体网格，通过将曲线坐标变换到等距划分的计算坐标上，容易解决边界条件处理的几何困难。在曲线坐标系下，反应 Euler 方程写成守恒形式

$$\frac{\partial \tilde{\boldsymbol{U}}}{\partial \tau}+\frac{\partial \tilde{\boldsymbol{F}}}{\partial \zeta}+\frac{\partial \tilde{\boldsymbol{G}}}{\partial \eta}=\tilde{\boldsymbol{S}} \tag{1}$$

$$\tilde{\boldsymbol{U}}=\frac{\boldsymbol{U}}{J},\tilde{\boldsymbol{F}}=\frac{1}{J}(\xi_x\boldsymbol{F}+\xi_y\boldsymbol{G}),\tilde{\boldsymbol{G}}=\frac{1}{J}(\eta_x\boldsymbol{F}+\eta_y\boldsymbol{G}),\tilde{\boldsymbol{S}}=\frac{\boldsymbol{S}}{J} \tag{2}$$

$$\boldsymbol{U}=\begin{pmatrix}\rho\\ \rho u\\ \rho v\\ E\\ \rho Y_1\\ \vdots\\ \rho Y_N\end{pmatrix},\boldsymbol{F}(\boldsymbol{U})=\begin{pmatrix}\rho u\\ \rho u^2+p\\ \rho uv\\ (E+p)u\\ \rho uY_1\\ \vdots\\ \rho uY_N\end{pmatrix},\boldsymbol{G}(\boldsymbol{U})=\begin{pmatrix}\rho v\\ \rho uv\\ \rho v^2+p\\ (E+p)v\\ \rho vY_1\\ \vdots\\ \rho vY_N\end{pmatrix},\boldsymbol{S}=\begin{pmatrix}0\\ 0\\ 0\\ 0\\ \omega_1(T,\rho,Y_1,Y_2,\cdots Y_N)\\ \vdots\\ \omega_N(T,\rho,Y_1,Y_2,\cdots Y_N)\end{pmatrix} \tag{3}$$

式中：τ 为时间；$J=|\partial(\xi,\eta)/\partial(x,y)|$ 为雅各比行列式，ξ、η 为曲线坐标，x、y 为计算坐标；ζ_x、ζ_y、η_x、η_y 为曲线坐标和计算坐标的变换系数；ω_i 为第 i 组分的质量生成率；ρ、u、v 分别为混合气体的密度、x 方向运动速度和 y 方向运动速度；E 为单位体积混合气体的总能，并且有 $E=\rho h-p+\rho(u^2+v^2)/2$；$e$、$p$、$h$ 分别为比内能、压力和比焓，并且满足 $h=e+p/\rho$；N 为反应模型的组分数；Y_i 为第 i 组分的质量分数；S 表示刚性反应源项。

2.2 基元反应模型

采用 9 组分 48 反应模型[7]描述 H_2-O_2 预混气体的爆轰反应过程，相关组分分别为 H_2、O_2、O、H、OH、HO_2、H_2O_2、H_2O，并用氩气稀释。稀释气体的加入可以减缓波后能量释放的速率，使爆轰波更加规则。化学反应式可统一写为

$$\sum_{i=1}^{9}\upsilon_{ik}^{'}x_i\underset{K_{b,k}}{\overset{K_{f,k}}{\rightleftharpoons}}\sum_{i=1}^{9}\upsilon_{ik}^{''}x_i,k=1,2,3,\cdots,48 \tag{4}$$

式中：$\upsilon_{ik}^{'}$ 和 $\upsilon_{ik}^{''}$ 分别为第 k 个反应的反应物和产物中第 i 种组分的化学计量系数；x_i 表示第 i 种组分的摩尔分数；$K_{f,k}$ 和 $K_{b,k}$ 分别为第 k 个反应的正向和逆向反应速率常数，两者均通过阿伦尼乌斯定律得出，并满足下面的关系式

$$K_{f,k}=A_kT^{n_k}\exp\left(-\frac{E_{ak}}{RT}\right) \tag{5}$$

$$K_{b,k}=K_{f,k}/K_{c,k} \tag{6}$$

$$K_{c,k}=K_{p,k}\left(\frac{p_{atm}}{RT}\right)^{\sum_{i=1}^{9}(\upsilon_{ik}^{''}-\upsilon_{ik}^{'})} \tag{7}$$

$$K_{p,k}=\exp\left\{\sum_{i=1}^{9}\left[(\upsilon_{ik}^{''}-\upsilon_{ik}^{'})\left(\frac{s_i^0}{R_i}-\frac{h_i}{R_iT}\right)\right]\right\} \tag{8}$$

式中:$K_{c,k}$和$K_{p,k}$分别是第 k 个反应的反应平衡常数和压力平衡常数;$R_i=R/W_i$,R 是通用气体常数,W_i 是第 i 种组分的的摩尔质量;p_{atm}是标准大气压;s_i^0 是标准熵,h_i 是比焓;A_k、n_k、E_{ak}分别表示阿伦尼乌斯公式中的指前系数、温度指数和活化能。第 i 种组分的生成率 ω_i 通过下述公式得出

$$\omega_i = W_i \sum_{k=1}^{48} (\upsilon_{ik}'' - \upsilon_{ik}') \left(\sum_{i=1}^{9} \alpha_{ik} C_{\mathrm{x}i} \right) \left[K_{\mathrm{f},k} \prod_{i=1}^{9} (C_{\mathrm{x}i})^{\upsilon_{ik}'} - K_{\mathrm{b},k} \prod_{i=1}^{9} (C_{\mathrm{x}i})^{\upsilon_{ik}''} \right] \tag{9}$$

式中:$C_{\mathrm{x}i}$表示第 i 种组分的摩尔分数,并且满足公式 $C_{\mathrm{x}i}=\rho_i/W_i$;$\alpha_{ik}$表示第 k 个反应中、第 i 种组分的三体效应系数。

2.3 数值方法

气相爆轰数值模拟的最大困难在于多组分欧拉方程的化学反应源项存在很强的刚性。这种刚性一方面体现在流动和化学反应的时间尺度不同;另一方面,基元反应模型中各个子反应的时间尺度也存在巨大差异。基于这方面的考虑,本研究采用附加 Runge-Kutta(ARK)方法耦合方程中的非刚性对流项和刚性反应源项。反应 Euler 方程可以写成如下形式

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{U}}{\mathrm{d}t} = \boldsymbol{L}(\boldsymbol{U}) + \boldsymbol{S}(\boldsymbol{U}) \tag{10}$$

式中:对流项 $\boldsymbol{L}(\boldsymbol{U})$和反应项 $\boldsymbol{S}(\boldsymbol{U})$分别为非刚性项和刚性项。ARK 方法是一种显-隐式方法,由显式 Runge-Kutta(ERK)方法和对角隐式 Runge-Kutta(ESDIRK)方法组合在一起使用,ERK 方法积分非刚性项,ESDIRK 方法积分刚性项[10-13]。对流项的空间离散采用 5 阶精度的加权本质无震荡(WENO)格式[8-9],能够较好地处理各种间断,并具有较小的数值粘性,已经广泛应用到激波、爆轰波等的数值计算中。

ARK 方法的具体使用过程如下

$$\begin{cases} \boldsymbol{U}^{(i)} = \boldsymbol{U}^n + \Delta t \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} \boldsymbol{L}(\boldsymbol{U}^{(j)}) + \Delta t \sum_{j=1}^{i} \hat{a}_{ij} \boldsymbol{S}(\boldsymbol{U}^{(j)}), i = 2,3,\cdots,s \\ \boldsymbol{U}^{n+1} = \boldsymbol{U}^n + \Delta t \sum_{j=1}^{i-1} b_j \boldsymbol{L}(\boldsymbol{U}^{(j)}) + \Delta t \sum_{j=1}^{s} \hat{b}_j \boldsymbol{S}(U^{(j)}) \end{cases} \tag{11}$$

式中:Δt 为时间增量;$U^{(i)}$和 U^{n+1}分别表示中间物理量和最终物理量;Butcher 系数 a_{ii}和 $\hat{a}_{ij}$、b_i 和 $\hat{b}_j$ 由精度条件和稳定性条件得出,详见文献[14]。每一个时间步,方程(10)都需要应用 s 步的 Runge-Kutta 法进行积分。

在第 i 步计算中,如果反应源项 $\boldsymbol{S}$ 是变量 $\boldsymbol{U}$ 的隐函数,则 $\boldsymbol{U}^{(i)}$需要通过牛顿迭代法进行求解。因此(11)式的第一项可以写为如下形式

$$(\boldsymbol{I} - \Delta t \hat{a}_{ii} \boldsymbol{J}) \boldsymbol{U}^{(i)} = \boldsymbol{U}^n + \Delta t \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} \boldsymbol{L}(\boldsymbol{U}^{(j)}) + \Delta t \sum_{j=1}^{i-1} \hat{a}_{ii} \boldsymbol{S}(\boldsymbol{U}^{(j)}) \tag{12}$$

式中:$\boldsymbol{I}$ 是单位矩阵,$\boldsymbol{J}=\partial \boldsymbol{S}(\boldsymbol{U})/\partial \boldsymbol{U}$ 是雅各比矩阵。

2.4 初始和边界条件

本研究主要对规则爆轰波在 60°光滑弯管中的传播机理进行数值模拟研究。反应气体为满足化学当量比的 H_2-O_2 混合气体,并用氩气进行稀释,初始压力和温度分别为 6.67 kPa 和 298 K。图 1 给出了光滑弯管的结构和尺寸,整个管道由水平直管段、弯管段和斜直管段 3 部分组成,管道的宽度均为 5λ(λ 为数值胞格的宽度),弯管段的弧长(下边界)为 6.66λ,下壁面弧线外切线与水平线的夹角为拐弯角 θ。计算过程中采用的网格尺寸为 0.2 mm。

为了快速得到规则的二维胞格爆轰波,将一维 ZND 爆轰波置于二维直管道内,并在波阵面后适当位置均匀布置若干个未反应气团,其初始条件与波前未反应区相同。一段时间后,ZND 爆轰波能够迅速发展为稳定的二维胞格爆轰波。然后将得到的二维胞格爆轰波布置到水平直管段作为初始条件,如图 2 所示。左边界和右边界分别为入流条件和出流条件,上、下边界均为固壁条件。

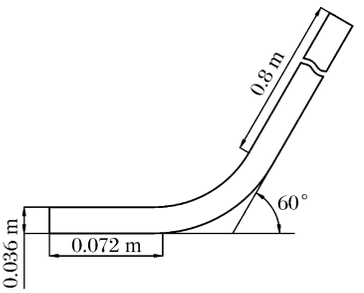


图 1 计算域(不按比例)

Fig. 1 Computational domain (Not to scale)

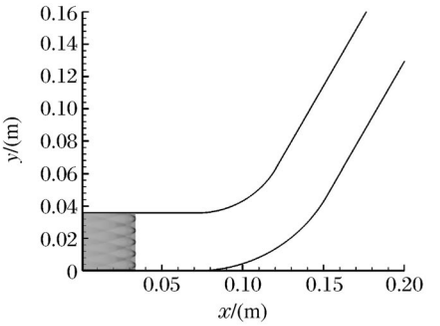


图 2 初始压力分布

Fig. 2 Initial pressure distribution

3 结果和讨论

3.1 爆轰胞格模式

图 3 给出了爆轰波在整个管道内传播过程中形成的数值胞格结构。根据图 3 中胞格的变化模式,可以将整个区域从左到右分为 4 部分,分别以 A、B、C、D 表示。区域 A 内的爆轰胞格形状规则,长、宽分别约为12.96和7.2 mm。但是在区域 B,由于弯管上壁面衍射效应和下壁面马赫反射效应的双重影响,该区域内的胞格失去了它的规则性。在区域 B 的上半部分,爆轰波在上壁面的绕射使该处压力降低,导致爆轰胞格尺寸增大;与此相反,在区域 B 的下半部分,由于爆轰波在下壁面发生马赫反射,马赫杆后的压力和温度都相应增加,使胞格尺寸的变化呈减小趋势。爆轰波进入区域 C后,由于强、弱三波结构的相互作用,爆轰波的胞格结构也不规则,大胞格和小胞格同时存在且尺寸相差较大。经过一段距离后,由于三波结构的相互碰撞以及波与管道壁面的相互作用,在区域 D 胞格恢复了规则性,但尺寸比区域 A 内的要小一些。因此区域 C 可以认为是胞格恢复规则性的过渡区域,该区域的长度大约为 0.45 m。

规则爆轰波在弯管中传播时,受到下壁面的压缩,局部最大压力由直管道处的 0.25 MPa 增大到 0.35 MPa(见图 4)。而在弯管上壁面处,连续的稀疏作用使得局部最大压力降到 0.10 MPa 以下,这个值远小于混合气体二维胞格爆轰波的最小压力值,因此爆轰波在弯管上壁面附近熄爆。但是随着爆轰波离开弯管段向上移动,上壁面附近出现一个很高的压力峰值,约为 0.72 MPa,意味着在这个位置爆轰波已经重新起爆(具体原因将在 3.2 节中详细解释)。重新起爆后的爆轰波是过驱动的,不能维持稳定传播,经过一段距离后才恢复成稳定的胞格爆轰波。

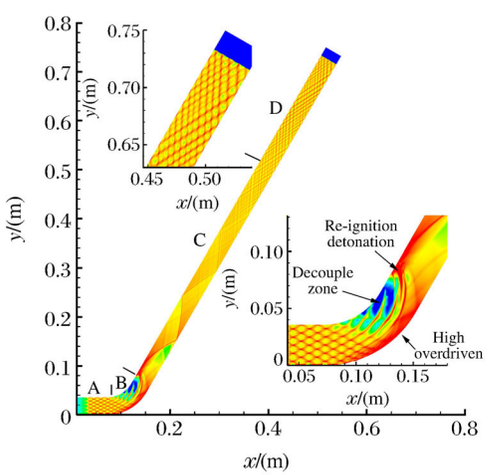


图 3 爆轰胞格模式

Fig. 3 Detonation cells pattern

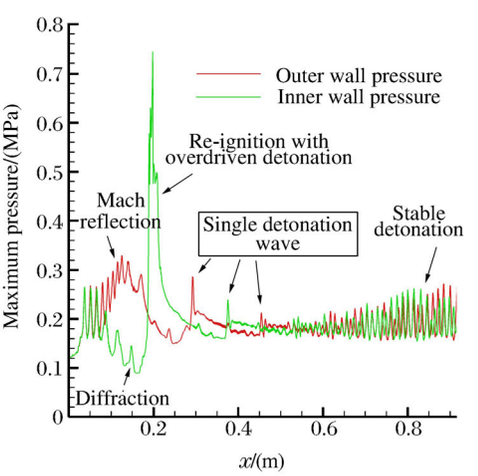


图 4 内外边界处最大压力历史曲线

Fig. 4 Maximum pressure histories on inner and outer walls

3.2　管道中的衍射和马赫反射

对于激波或者爆轰波在楔面上的反射问题,前人已经进行了广泛深入的研究[15-17],包括波阵面的动力响应、横波的作用和转变机理等。如图 5 所示,激波作用在 50°楔面上,同时产生一道反射波。这种双激波结构通常被认为是规则反射,多发生在楔面角度较大时;随着楔面角度的减小,上述双激波结构不再出现,这是因为反射激波后的气流速度已不能平行于楔面,此时会出现三波结构,又称马赫反射。因此在规则反射和马赫反射之间存在一个临界楔面角,即转变角 θ_c。爆轰波在斜面上的反射与激波类似。规则的胞格爆轰波本身存在三波结构,与楔面作用时也会发生马赫反射或规则反射。双激波和三激波结构的理论同样可以应用到爆轰波楔面反射的分析中[18]。不同于楔面反射的情形,爆轰波在凹面上的反射更为复杂,这是由于凹面上任意一点的切线与水平线的角度都是变化的,但同样可以应用上述理论进行类比分析。

图 6 为弯管段的胞格模式详图,从中可以观察到区域 A 和区域 B 之间存在清晰的分界,同时区域 B 也分为上、下两部分 B1 和 B2,其分界均已用红线标出。由前文分析得知,爆轰波与斜面碰撞时将发生规则反射还是马赫反射取决于临界角 θ_c。根据 Qu 等[19]的工作,在初压、初温分别为6 670 Pa和 298 K的情况下,$\theta_c=46°$。一条曲线可看作是由多条短直线连接而成的,故可以认为弯管的凹面是由多个楔角不断增大的楔面组成(见图 5)。因此可以得出结论:若拐弯角小于 46°,爆轰波在弯管下壁面发生马赫反射;若大于 46°则发生规则反射。从图 6 中可以看出,拐弯角小于 46°时,下壁面附近的胞格形状较为规则,但尺寸比区域 A 的要小;拐弯角大于 46°后,爆轰胞格变得不规则,最终消失。同时也能够观察到马赫反射区三波点的轨迹是汇聚的,即随着拐弯角度的增加,三波点轨迹线与水平面的角度也在增加。

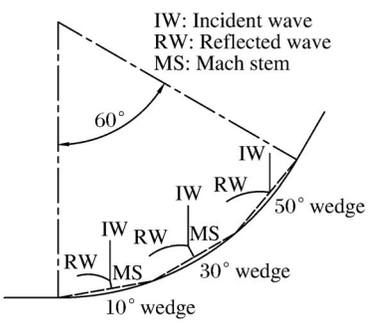


图 5　楔面反射与凹面反射示意图

Fig. 5　Schematic figure of reflection from wedge and concave surface

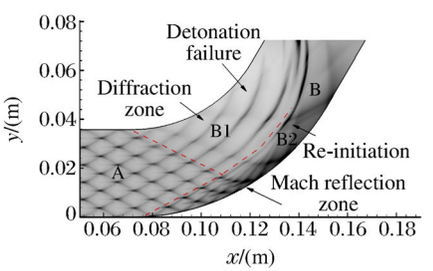


图 6　弯管段内部胞格模式图

Fig. 6　Detonation cells pattern in the pipe bend

弯管处爆轰波阵面结构随时间的演化过程如图 7(a)～图 7(w)所示。为了区分反射形成的三波结构和爆轰波阵面上固有的三波结构,将前者命名为反射三波结构 RTWC(Reflected Triple Wave Configuration),RTWC 由 RMS(Reflected Mach Stem)、RIW(Reflected Incident Wave)和 RTW(Reflected Transverse Wave)组成,三者汇聚于反射三波点 RTP(Reflected Triple Point);将后者命名为三波结构 TWC(Triple Wave Configuration),TWC 由 MS(Mach Stem)、IW(Incident Wave)和 TW(Transverse Wave)组成,三者汇聚于三波点 TP(Triple Point)。从图 7(a)～图 7(d)可以看出,在爆轰波进入弯管之前,波阵面上存在 5 对规则的 TWC,总的横波数为 20。图 7(e)中,爆轰波在弯管下壁面发生反射,产生 RTWC,RTWC 向上移动与相邻 RIW 中的 TWC 发生对撞(见图 7(f)),并继续向上与下一个 TWC 发生对撞(见图 7(h))。可以看到,在 RMS 上出现了一对相向运动的 TWC,这时 RMS 的长度大于胞格宽度,马赫反射的自相似性开始建立。如图 7(j)～图 7(u)所示,RIW 中的 TWC 不断与 RTWC 碰撞,进入反射区后再与 RMS 中的 TWC 碰撞,最后在下壁面处被反射继而向上运动。最终 RMS 中的 TWC 不断增多,意味着马赫反射区内胞格数目的不断增加;但同时拐弯角也不断增大,导致大部分

的 TWC 都在向上壁面运动。当拐弯角达到临界角 $\theta_c=46°$时，下壁面处爆轰波的马赫反射结束，规则反射开始，如图 7(t)～图 7(v)所示。在弯管出口处，可以观察到所有 TWC 都朝着上壁面的方向运动(见图 7(w))。

当爆轰波从弯管段中出来后，所有的 TMC 都紧跟 RTMC 一起向上运动并追赶 RTMC，如图 8(a)所示。RTW 被 TW 追赶并压缩后，在其延伸段开始扭曲，一个新的三波点 STP 随之形成，并向 RTP 移动；同时另一个新的扭曲出现在 STP 之后的 RTW 上(见图 8(c)和图 8(d))。最终 STP 与 RTP 融合为一，RTW 演化成一道向上移动的、更强的爆轰横波(见图 8(e))。在爆轰横波与上壁面碰撞之前，可以看到又一个新的三波点产生在爆轰横波的延长段上。从上述分析可以得出结论：横波的同向碰撞压缩，可以使横波延长段产生扭曲，进而形成更强的爆轰横波。

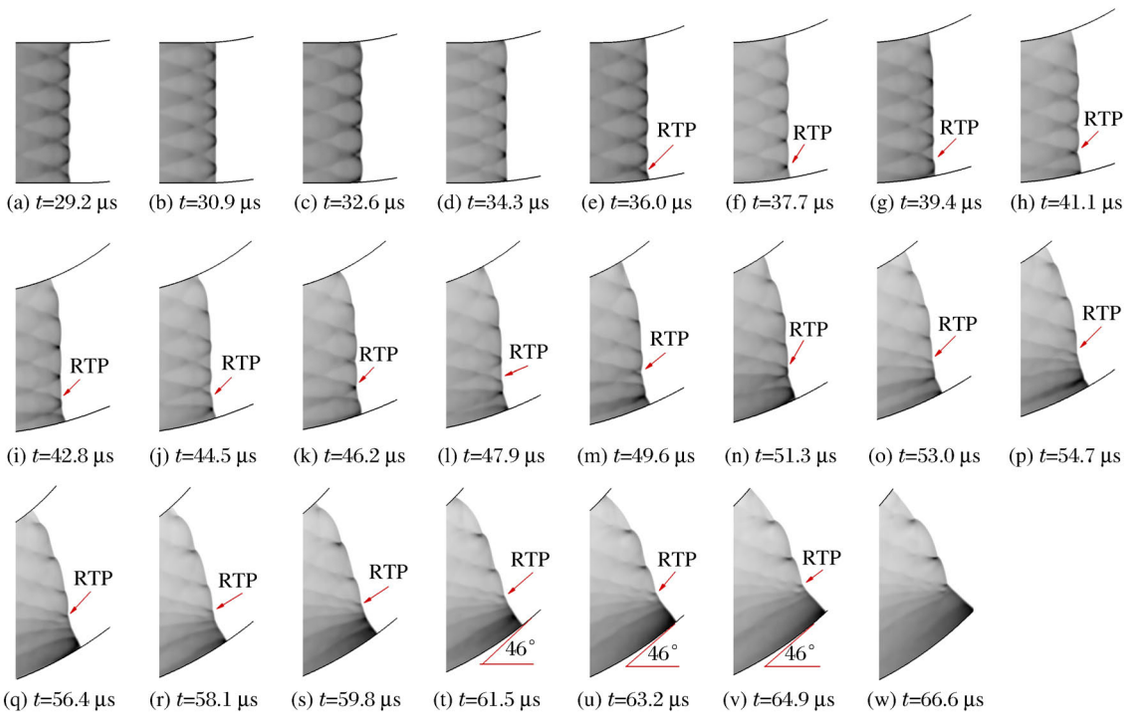


图 7 不同时刻爆轰波在弯管内传播过程中的波阵面压力云图

Fig. 7 Pressure counters of detonation front at different time as the detonation moves through the pipe bend

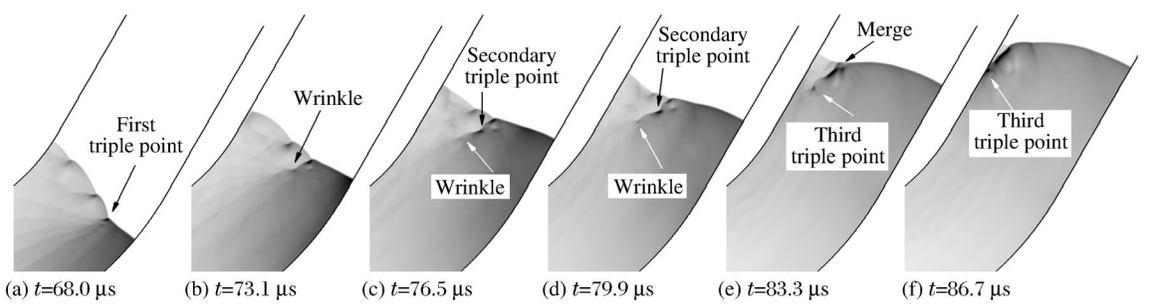


图 8 爆轰横波形成过程中的压力纹影图形

Fig. 8 Schlieren graphics of pressure during the formation of detonation transverse wave

图 9 是 STP 形成时的流场云图，可以明显看出，在弯管上壁面处激波阵面与反应阵面已经完全解耦，意味着在该区域内爆轰波已经熄爆。爆轰横波与上壁面碰撞时压力高达 0.74 MPa，约为区域 A 内稳态爆轰波最大压力的 3 倍，反射后形成一道过驱动的单头爆轰波，如图 10 所示。

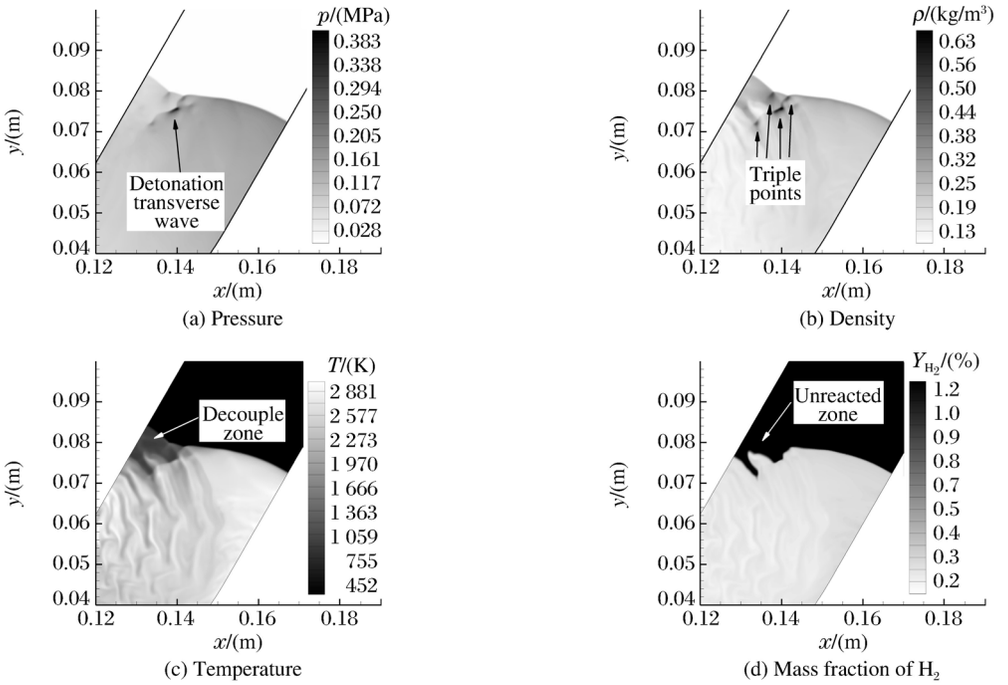


图 9　$t=79.9\ \mu s$ 时的压力、密度、温度和 H_2 的质量分数纹影图

Fig. 9　Schlieren plot of pressure, density, temperature and mass fraction of H_2 at $t=79.9\ \mu s$

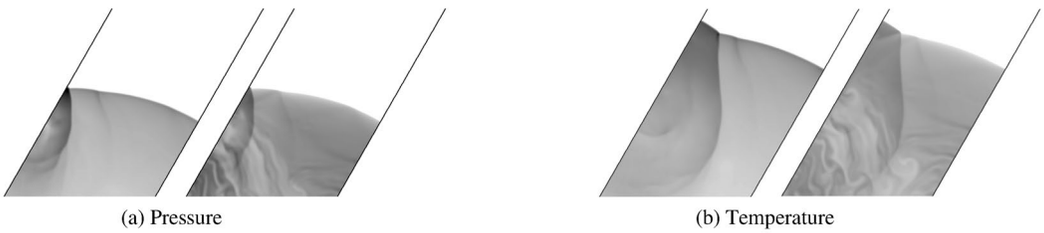


图 10　$t=90.1\ \mu s$ 和 $t=94.5\ \mu s$ 两个时刻的压力、温度纹影图

Fig. 10　Schlieren plot of pressure and temperature at $t=90.1\ \mu s$ and $t=94.5\ \mu s$

4　结　论

采用显-隐式的附加 Runge-Kutta 方法和加权本质无震荡(WENO)格式以及 9 组分 48 反应模型，对规则爆轰波在 60°弯管中的传播过程进行了数值模拟，重点研究了爆轰波与弯管的相互作用和动力响应过程，并得到了以下结论：

(1) 爆轰波在光滑弯管中传播时受到衍射和反射的共同作用，上壁面的衍射使得爆轰胞格增大，下壁面的反射使该区域内胞格的尺寸减小；

(2) 对于爆轰波在弯管下壁面的反射，存在一个临界角度值 $\theta_c=46°$，当拐弯角 $\theta<\theta_c$ 时发生马赫反射，$\theta>\theta_c$ 时发生规则反射，这与爆轰波在楔面上的反射情况类似；

(3) 在弯管的出口端，反射横波由于受到波阵面固有横波的追赶压缩作用，在其延长段上形成了新的三波点，进而形成更强的爆轰横波并向上壁面移动；

(4) 爆轰波离开弯管一段距离后，在区域 D 内胞格恢复了规则性，但尺寸比区域 A 内的要小一些。

References:

[1]　Oran E S, Boris J P. Numerical Simulation of Reactive Flow [M]. New York: Elsevier Science Publishing, 1987.

[2]　Nettleton M A. Recent work on gaseous detonation [J]. Shock Waves, 2002, 12(1): 3-12.

[3] Thomas G O, Williams R L. Detonation interaction with wedges and bends [J]. Shock Waves, 2002, 11(6): 481-492.
[4] Deiterding R. A parallel adaptive method for simulating shock-induced combustion with detailed chemical kinetics in complex domains [J]. Comput Struct, 2009, 87(11): 769-783.
[5] Frolov S M, Aksenov V S, Shamshin I O. Reactive shock and detonation propagation in U-bend tubes [J]. J Loss Prev Process Ind, 2007, 20(4): 501-508.
[6] Uchida M, Suda T, Fujimori T, et al. Pressure loading of detonation waves through 90-degree bend in high pressure H_2-O_2-N_2 mixtures [J]. Proc Combust Inst, 2011, 33(2): 2327-2333.
[7] Westbrook C K. Chemical kinetics of hydrocarbon oxidation in gaseous detonations [J]. Combust Flame, 1982, 46: 191-210.
[8] Jiang G S, Shu C W. Efficient implementation of weighted ENO schemes [J]. J Comput Phys, 1996, 126(1): 202-228.
[9] Liu X D, Osher S, Chan T. Weighted essentially non-oscillatory schemes [J]. J Comput Phys, 1994, 115(1): 200-212.
[10] Alexander R, Coyle J J. Runge-Kutta methods and differential-algebraic systems [J]. SIAM J Numer Anal, 1990, 27(3): 736-752.
[11] Hosea M E, Shampine L F. Analysis and implementation of TR-BDF2 [J]. Appl Numer Math, 1996, 20(1): 21-37.
[12] Alexander R. Diagonally implicit Runge-Kutta methods for stiff ODE's [J]. SIAM J Numer Anal, 1977, 14(6): 1006-1021.
[13] Hairer E, Wanner G. Solving Ordinary Differential Equations II: Stiff and Differential-Algebraic Problems [M]. 2nd ed. Berlin: Springer-Verlag, 1991.
[14] Kennedy C A, Carpenter M H. Additive Runge-Kutta schemes for convection-diffusion-reaction equations [J]. Appl Numer Math, 2003, 44(1-2): 139-181.
[15] Li H, Ben-Dor G. Reconsideration of pseudo-steady shock wave reflections and the transition criteria between them [J]. Shock Waves, 1995, 5(1-2): 59-73.
[16] Guo C M, Zhang D L, Xie W. The Mach reflection of a detonation based on soot track measurements [J]. Combust Flame, 2001, 127(3): 2051-2058.
[17] Nettleton M A. Gaseous Detonation: Their Nature, Effects and Control [M]. London: Chapman and Hall, 1987.
[18] Hornung H. Regular and Mach reflection of shock waves [J]. Annu Rev Fluid Mech, 1986, 18: 33-58.
[19] Qu Q, Khoo B C, Dou H S, et al. The evolution of a detonation wave in a variable cross-sectional chamber [J]. Shock Waves, 2008, 18(3): 213-233.

Dynamic Processes of Detonation Waves Propagating through a 60° Smooth Pipe Bend

LI Jian, ZHAO Hui, NING Jian-Guo

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

Abstract: Implicit-explicit additive Runge-Kutta (ARK) methods and 5-th order weighted essentially non-oscillatory (WENO) schemes are employed to simulate on cellular detonation wave propagating through a smooth pipe bend with a 60° bending angle. A detailed elementary chemical reaction model comprised of 9 species and 48 elementary reactions is implemented with a stoichiometric H_2-O_2 mixture diluted with argon. The numerical results show that in the bend, diffraction near the inner wall causes the pressure decrease resulting in both the growth of detonation cell size and detonation failure, but near the outer wall detonation reflection diminishes the cell size. A transition length of about 0.45 m long exists before the detonation regains its regularity after leaving the bend. There are two different modes of reflection due to different turning angles. The transverse detonation waves evolve into a detonation owing to continuous compression by other transverse waves running after at the end of the bend.

Key words: additive Runge-Kutta methods; reflection; diffraction; bend; gaseous detonation