

气相爆轰波化学反应流场数值模拟

胡宗民 杨国伟 张德良 姜宗林

(中国科学院力学研究所高温气动重点实验室, 北京 100080)

摘要 本文应用基元反应模型和频散可控耗散格式(DCD)对氢氧爆轰波波后化学反应流场进行了数值模拟, 计算中氢氧混合物的化学反应考虑了8种组分20个反应式。在处理化学反应引起的刚性问题时采用了时间算子分裂的方法。分析了爆轰波在楔面上反射由马赫反射向正规反射的转变过程。

关键词: 爆轰波; 相互作用; 约束; 基元反应模型; DCD 格式

1 引言

爆轰波是一种前导激波和化学反应耦合能够自持传播的具有强间断性质的物理现象, 关于它的传播特性以及传播过程中与约束的相互作用过程一直是国防、工业安全和基础实验研究中的一项重要课题。长期以来, 这一方面的数值和实验研究已有不少的研究报告, 然而由于爆轰波带有复杂的化学反应, 其后的化学反应与流动相互耦合的复杂流场还有许多问题需要探索。

关于爆轰现象的研究起始于一百多年前人们对煤矿瓦斯爆炸原因的探索, 而化学工业中频繁发生的爆炸事故更加引起人们对爆轰研究的关注。当时人们很难理解究竟是什么原因使可燃气体的燃烧产生如此巨大的破坏力, 为什么伴随爆炸产生的冲击波竟能以五、六倍声速在可燃气体中传播而且不随着传播距离而衰减?

为了揭示爆轰的物理本质, 从二十世纪初开始相继诞生了两个著名的爆轰理论, 分别是 C-J 理论和 ZND 理论。虽然 C-J 理论与 ZND 理论在一定程度上成功描述了爆轰现象的重要性质, 给人们直观的解释, 但实际的爆轰波远比以上理论模型复杂得多, 在实验中, 爆轰波经过烟熏膜留下的痕迹就构成了爆轰胞格结构, 这表明它具有复杂的横波结构和三波对撞过程。目前, 描述爆轰波波后化学反应机制的模型主要有三种, 其中包括早期的单步反应模型和分别考虑了诱导反应和放热反应的二步反应模型, 以及近年来得到广泛应用的基元反应模型。在应用上述模型进行爆轰波数值模拟时, 前两者能够较好地描述爆轰波的总体结构以及爆速等宏观参数, 而且计算量较小, 但是应用了化学反简化模型; 而后者则考虑了详细的反应过程。应用基元反应模型模拟爆轰波也存在一些问题和困难, 首先是描述混合物反应过程的基元反应难以准确给出, 其次剧烈的化学反应也带来了数值计算的刚性问题, 即各基元反应之间以及反应和流动之间的特征尺度相差悬殊。处理化学反应刚性问题的主要方法有解耦算法(算子分裂算法)、点隐法和全隐法。

Thomas 等人实验研究了气相爆轰波与楔体和弯管等约束的相互作用^[1], 分析了爆轰波传播过程中的横波等细微结构。文献[2]应用烟迹实验技术研究了爆轰波在楔面反射过程由规则反射和马赫反射的转变过程, 比较三波点轨迹角和转变临界角与初始爆轰气体的关系。对于气相爆轰波化学反应流场, 虽然已有大量的实验工作, 但是应用基元反应模型进行数值模拟的工作并不多见。本文应用频散可控耗散格式(DCD)和氢氧基元反应模型, 对氢氧爆轰波波后化学反应流场进行了数值分析。

基金: 本文部分工作由国家自然科学基金和中国工程物理研究院联合资助(10276035)。

2 物理和数学模型

2.1 物理问题

可燃气体混合物的起爆存在一个燃烧转爆轰的过程 (DDT), 本文利用高温高压点火区直接点爆可燃混合气体, 在较短的时间内迅速完成 DDT 过程, 形成稳定传播的平面爆轰波。爆轰波绕射刚性楔面的过程见示意图 1, 随着入射爆轰波与楔面的夹角不同, 或楔面倾角 α 的不同, 爆轰波在楔面上的反射类型也会发生变化, 其中有正规反射或马赫反射, 而且由马赫反射到正规反射的转变过程存在 α 一个临界角度 α_{crit} , 当 $\alpha < \alpha_{crit}$ 时为马赫反射, 而当 $\alpha > \alpha_{crit}$ 时为正规反射。反射类型不同, 爆轰波在楔面上反射后的流场特性就会有很大的差异。

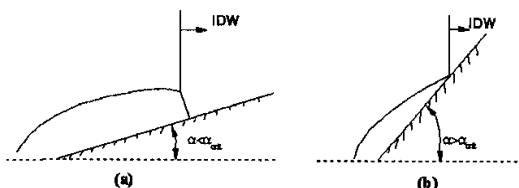


图 1. 爆轰波物面反射示意图 (a) 马赫反射 (b) 正规反射 (IDW: Incident detonation wave)

2.2 控制方程

对于预混可燃气体混合物中的气相爆轰波的反应与传播过程, 在不考虑组分扩散效应, 忽略热传导和粘性作用的条件下, 在二维平面坐标系中的 Euler 方程组为:

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial F}{\partial x} + \frac{\partial G}{\partial y} = S \quad (1)$$

式中矩阵 U 、 F 、 G 、 S 分别为守恒型未知变量、 x 和 y 方向的通量向量和化学反应源项, 对于由 ns 种反应组分组成预混气体来说, 它们为:

$$U = \begin{bmatrix} \rho C_1 \\ \rho C_2 \\ \vdots \\ \rho C_{ns} \\ m \\ n \\ E \end{bmatrix} \quad F = \begin{bmatrix} mC_1 \\ mC_2 \\ \vdots \\ mC_{ns} \\ m^2/\rho + p \\ mn/\rho \\ (E+p)m/\rho \end{bmatrix} \quad G = \begin{bmatrix} nC_1 \\ nC_2 \\ \vdots \\ nC_{ns} \\ mn/\rho \\ n^2/\rho + p \\ (E+p)n/\rho \end{bmatrix} \quad S = \begin{bmatrix} \dot{w}_1 \\ \dot{w}_2 \\ \vdots \\ \dot{w}_{ns} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (2)$$

在以上各式中 $C_i (i=1, \dots, ns)$ 为第 i 组分的质量分数, 混合气体的总密度为 $\rho = \sum_{i=1}^{ns} \rho_i = \sum_{i=1}^{ns} \rho C_i$, ρ_i 为第 i 种组分的分密度; $m = \rho u$, $n = \rho v$, u 、 v 为 x 和 y 方向的速度分量; E 为单位体积总能, $E = e + \rho(u^2 + v^2)/2$, 单位体积内能 $e = \rho h - p$, $h = \sum_{i=1}^{ns} C_i h_i$, 第 i 种组分的焓值 h_i 由文献中[4] 的多项式拟合的方法给出; p 为理想混合气体的压力, 由道尔顿分压定律和组分气体状态方程给出

$p = \sum_{i=1}^{ns} \rho_i R_i T$, R_i 为第 i 种组分的气体常数, T 为混合气体温度; w_i 为第 i 组分的单位体积的质量生成

率。组分 i 的无量纲焓值与定压比热关于温度的拟合多项式如下:

$$\frac{h_i}{R_i T} = -a_{1i} T^{-2} + a_{2i} T^{-1} \ln T + a_{3i} + \frac{a_{4i}}{2} T + \frac{a_{5i}}{3} T^2 + \frac{a_{6i}}{4} T^3 + \frac{a_{7i}}{5} T^4 + \frac{b_{1i}}{T} \quad (3)$$

$$\frac{C_{p,i}}{R_i} = a_{1i} T^{-2} + a_{2i} T^{-1} + a_{3i} + a_{4i} T + a_{5i} T^2 + a_{6i} T^3 + a_{7i} T^4 \quad (4)$$

2.3 基元化学反应模型

对于氢氧相爆轰, 本文采用 8 种组分 18 个基元反应模型描述其化学反应机制, 相关组分为: H_2 、 O_2 、 O 、 H 、 OH 、 HO_2 、 H_2O_2 、 H_2O , 另外还加入了 Ar 作为缓冲气体, 化学反应式可以统一写为:



式中 a_{ji} 、 b_{ji} 、 χ_i 分别为第 j 反应中第 i 组分作为反应物或产物的化学反应计量系数和元素符号, kf_j 、 kb_j 分别为正、逆反应速率常数, kf_j 由 Arrhenius 公式给出, kb_j 可根据反应平衡常数 ke_j 和正反应速率常数 kf_j 求出, 其中 C_j 、 n_j 、 Ea_j 分别为第 j 反应的指前系数、温度指数和反应活化能,

$$kf_j = C_j T^{n_j} \exp[-Ea_j / RT] \quad (6)$$

由基元反应的质量作用定律可以得到第 i 组分的单位体积的质量生成率:

$$w_i = W_i \sum_{j=1}^{nr} (b_{ji} - a_{ji}) \left\{ \sum_{i=1}^m \lambda_{ji} [X_i] \right\} \left(kf_j \prod_{i=1}^m [X_i]^{a_{ji}} - kb_j \prod_{i=1}^m [X_i]^{b_{ji}} \right) \quad (7)$$

$[X_i]$ 为第 i 组分的摩尔浓度, λ_{ji} 为第 j 反应中组分 i 的三体效应系数。

2.4 温度迭代求解

在化学反应流的计算中, 温度不能显式地给出, 它需要根据能量方程和混合物状态方程联合求解, 由此两方程联立消去压力, 可以得到关于各守恒型未知变量和温度的函数关系式(8.1), 因为组分焓值是温度的超越函数, 该方程无法直接求解, 需要迭代计算, 迭代函数为

$$F(\rho_1, \dots, \rho_i, \dots, \rho_m, m, n, E, T) = \sum_{i=1}^{ns} \rho_i h_i - \left(E - \frac{m^2 + n^2}{2\rho} \right) - \sum_{i=1}^{ns} \rho_i R_i T = 0 \quad (8.1)$$

牛顿迭代法计算需要迭代函数对温度的偏导数, 见(8.1)式, 其中 \hat{C}_p 、 \hat{R} 分别为混合物的定压比热和气体常数, 对于理想气体总有 $\hat{C}_p > \hat{R}$, 即 $F' > 0$, 函数 F 为温度的单调递增函数, 因此温度解是唯一的, 可以应用牛顿迭代算法来求解方程(8.1)。

$$F'(\rho_1, \dots, \rho_i, \dots, \rho_m, m, n, E, T) = \sum_{i=1}^{ns} \rho_i C_{p,i} - \sum_{i=1}^{ns} \rho_i R_i = \sum_{i=1}^{ns} \rho C_i C_{p,i} - \sum_{i=1}^{ns} \rho C_i R_i = \rho(\hat{C}_p - \hat{R}) \quad (8.2)$$

2.5 数值方法

Jiang 等在 1995 年提出的频散可控格式(DCS)^[3], 该格式应用了 Steger-Warming 的矢量通量分裂技术, Jiang 后来给该格式重新命名为频散可控耗散格式(DCD), 以便与传统的耗散格式加以区别。本

文把该方法推广到多组分基元反应流的数值模拟。

以下给出在一般曲线坐标系 (ξ, η) 下考虑多组分混合物时的 Steger-Warming 通量分裂形式。在一般曲线坐标系 (ξ, η) 下有 $\tilde{U} = U/J$, $\tilde{F} = (\xi_x F + \xi_y G)/J$, $\tilde{G} = (\eta_x F + \eta_y G)/J$, $\tilde{S} = S/J$, 矩阵 $\tilde{A} = \partial \tilde{F} / \partial \tilde{U}$, 它有 $ns+3$ 个特征, 它们分别为

$$\{\tilde{\lambda}_1, \tilde{\lambda}_2, \dots, \tilde{\lambda}_{ns}, \tilde{\lambda}_{ns+1}, \tilde{\lambda}_{ns+2}, \tilde{\lambda}_{ns+3}\} = \{\theta, \theta, \dots, \theta, \theta, \theta - a\Delta, \theta + a\Delta\}, \text{ 其中 } \theta = uk_x + vk_y, \quad k_x = \xi_x / \Delta, \quad k_y = \xi_y / \Delta,$$

$\Delta = \sqrt{\xi_x^2 + \xi_y^2}$, 则通量 \tilde{F} 的 Steger-Warming 矢通量分裂形式为

$$\tilde{F}^{\pm} = \frac{\rho}{2\tilde{F}} \begin{bmatrix} C_1 [2(\tilde{\gamma}-1)\tilde{\lambda}_1^{\pm} + \tilde{\lambda}_{ns+2}^{\pm} + \tilde{\lambda}_{ns+3}^{\pm}] \\ C_2 [2(\tilde{\gamma}-1)\tilde{\lambda}_1^{\pm} + \tilde{\lambda}_{ns+2}^{\pm} + \tilde{\lambda}_{ns+3}^{\pm}] \\ \vdots \\ C_{ns} [2(\tilde{\gamma}-1)\tilde{\lambda}_1^{\pm} + \tilde{\lambda}_{ns+2}^{\pm} + \tilde{\lambda}_{ns+3}^{\pm}] \\ u [2(\tilde{\gamma}-1)\tilde{\lambda}_1^{\pm}] + (u-ak_x)\tilde{\lambda}_{ns+2}^{\pm} + (u+ak_x)\tilde{\lambda}_{ns+3}^{\pm} \\ v [2(\tilde{\gamma}-1)\tilde{\lambda}_1^{\pm}] + (v-ak_y)\tilde{\lambda}_{ns+2}^{\pm} + (v+ak_y)\tilde{\lambda}_{ns+3}^{\pm} \\ 2(\tilde{\gamma}-1)H - a^2\tilde{\lambda}_1^{\pm} + (H-a\theta)\tilde{\lambda}_{ns+2}^{\pm} + (H+a\theta)\tilde{\lambda}_{ns+3}^{\pm} \end{bmatrix} \quad (9)$$

通量 \tilde{G} 的分裂计算与 \tilde{F} 的计算过程类似。

由于化学反应的时间尺度比流动时间尺度小得多, 数值计算时通常出现刚性问题, 处理刚性问题的方法有很多, 本文采用时间算子分裂的方法来解决, 即把求解流动偏微分方程时采用的由 CFL 条件限制的时间步长进一步细分后, 作为求解化学反应刚性常微分方程的时间步长, 计算化学反应的贡献, 见式(10)。具体的做法是先冻结化学反应求得流场参数, 然后把化学反应看作一个等容放热过程, 计算各组分的质量变化率, 并根据反应前后总能和动能不变来迭代求解温度。

$$L(\Delta t) = L_{conv} \left(\frac{\Delta t}{2} \right) \left[\sum_{n=1}^N L_{chem} \left(\frac{\Delta t}{N} \right) \right] L_{conv} \left(\frac{\Delta t}{2} \right) \quad (10)$$

3 数值结果与分析

3.1 数值方法验证

图 2 给出了在可燃混合气体 $2H_2+O_2+Ar$ ($P_0=16kPa$, $T_0=298K$) 中爆轰波的直接起爆以及形成稳定爆轰的过程。在 $t=6.5\mu s$ 时刻, 爆轰迅速建立, 但是还不稳定, 爆压缓慢增长, 到 $t=93.5\mu s$ 逐渐趋于一个平稳值, 形成稳定传播的爆轰波。计算得到的爆速 $D=2257m/s$, E.Schultz & J.Shepherd^[4]在一篇关于爆轰模拟基元反应模型验证的报告中给出爆速

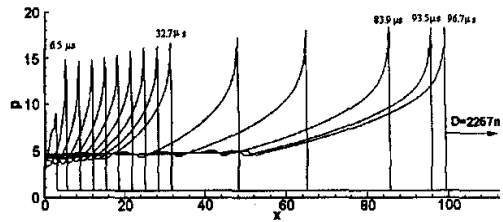


图 2. 爆轰的起爆过程(图中 P 为无量纲压力)

$D_{C1}=2240m/s$, 两者是很接近的。这可以在一定程度上说明化学反应模型的准确性。本文还计算了没有稀释气体的纯氢氧混合气体 $2H_2+O_2(P_0=60kPa, T_0=298K)$ 的爆速 $D=2827m/s$, 而相应的 C-J 爆速 $D_{C1}=2814m/s$, 由于爆轰波数值计算的验证非常困难, 以上关于爆速的比较可以作为爆轰波计算的粗略验证。

图3给出了可燃混合气体($2H_2+O_2+Ar, P_0=20kPa$)中爆轰波在楔面反射的数值和实验纹影的比较,其中图3(a)对应楔角为 30° 的情况,图3(b)对应楔角为 60° 的情况,前者为马赫反射,而后者为规则反射。其中,上半部分是实验结果,下半部分为计算结果,通过比较可以看出,两者吻合较好。图3(a)中给出了爆轰波马赫反射的三波点轨迹 α 角。

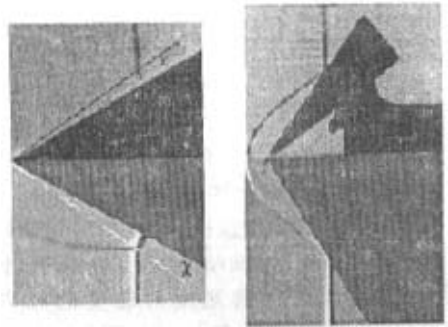


图3. 爆轰波楔面反射数值(下)和实验(上)纹影^[1], 楔角(a) 30° , (b) 60° (混合物: $2H_2+O_2+Ar, P_0=20kPa$)

3.2 爆轰波在楔面反射问题

本算例的二维平面计算区域如图4所示,楔面角度为 α ,参考尺度为2mm,计算区域的高度随着楔角的改变稍做调整,楔角小于 40° ,计算区域高度如图所示为40mm,楔角大于 40° 后,此高度改为70mm。计算中所有固壁边界都应用了无滑移条件。采用了结构化贴体网格,格点数为 601×101 ,并在下壁面附近进行了适当的加密处理。假定在初始时刻整个区域充满可燃气体混合 $2H_2+O_2+Ar$ ($P_0=16kPa, T_0=298K$),同时在区域最左端设置一高温高压点火区,此区的压力和温度分别为 $P_{ign}=18P_0, T_{ign}=11T_0$,以便瞬时完成爆燃转爆轰的DDT过程,形成稳定传播的爆轰波。

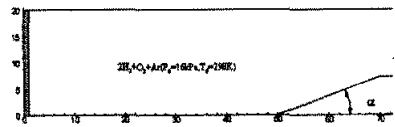


图4. 爆轰波楔面反射计算区域(单位2mm)

爆轰波在楔面反射跟激波在楔面的反射过程有共性,随着楔角的增大也存在一个由马赫反射向规则反射的转变过程。本文应用上述化学反应模型和DCD格式对爆轰波在楔面反射过程进行了数值模拟,并对不同楔角 α ($19.3^\circ \sim 50^\circ$)情况下,爆轰波的反射过程进行了分析和比较。图5分别给出了楔角 α 分别为 20° 、 30° 、 46° 和 50° 共4种情况下的爆轰波的反射波结构,由图中计算结果可以看出(a)-(c)三种情况为马赫反射,三波点的轨迹角 α 随着楔角的增大逐渐减小,依次为 10.5° 、 6.5° 和 0.9° ,而(d)为正规反射。

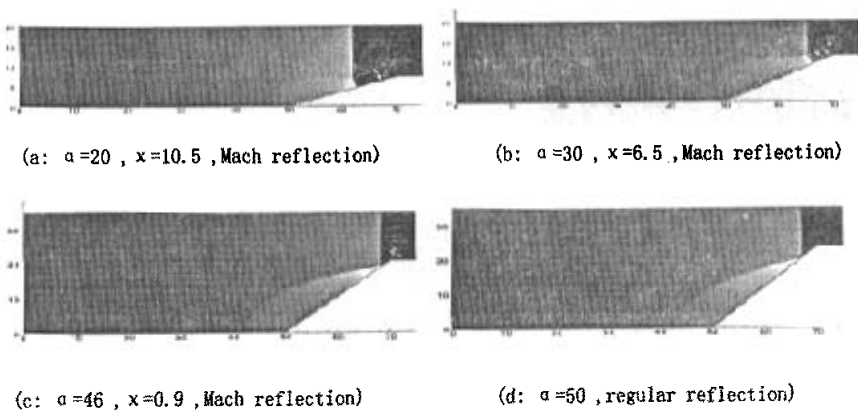


图5 爆轰波楔面上的反射时的压力云图, (α 为楔角, x 为三波轨迹与楔面的夹角)
($2H_2+O_2+Ar, P_0=16kPa, T_0=298K$)

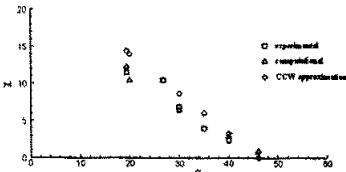


图 7. 爆轰波楔面反射三波点轨迹 x 角与楔角的关系(混合物: $2H_2+O_2+Ar$, $P_0=16kPa$, $T_0=298K$)

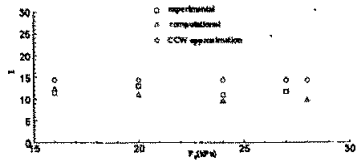


图 8. 三波点轨迹与初压 $P_0(kPa)$ 的关系 (楔角 $\alpha=19.3$)

文献[2]应用烟迹实验技术对氢氧混合气体的爆轰波在楔面反射进行了大量的实验, 分析了马赫反射的三波点轨迹, 实验结果给出了在混合气体 $2H_2+O_2+Ar$ ($P_0=16kPa$, $T_0=298K$) 中爆轰波楔面绕射过程中由马赫反射向规则反射转变的临界角度大约为 50 到 53 之间。文献[5]应用 CCW(Chester-Chisnell-Whitham)近似理论给出了相应的爆轰波楔面反射转变临界角度范围是 46 到 50 之间。在图 7 中给出了爆轰波在楔面反射过程三波点轨迹与楔角的关系, 并对实验结果、计算结果和理论分析(CCW)的结果进行了比较, 结果表明三者基本一致。爆轰波楔面反射的临界角 α_{crit} , 对于本文的初始可燃混合气体, 计算结果约为 48, 与文献[2]、[5] 给出的实验和理论分析的结果也基本一致, 而且从图 7 中还可以看出, 应用基元反应模型的计算结果比 CCW 更接近实验值。

在保持楔角 $\alpha=19.3$ 不变的条件下, 分别计算了初始压力 $P_0=16、20、24$ 和 $28(kPa)$ 四种情况, 以分析混合物初始压力对爆轰波在楔面反射三波点轨迹角 x 的影响。图 8 给出了三波点轨迹角 x 与初始压力的变化关系, 其中实验结果、CCW 理论近似结果和数值模拟的结果。从图中的三种方法得到的结果可以看出, 初始压力对 x 角有一些影响, 但影响不大; 对于相同成分的可燃混合气体来说, 三波点轨迹角 x 主要受楔角控制。很多实验^[2]也得到了类似的结论。

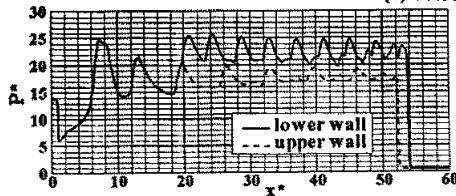
3.3 爆轰波楔面反射过程的多波结构

大量的实验表明实际的爆轰波具有复杂的横波结构和三波对撞过程, 爆轰波经过烟熏膜片会留下“菱形”或“鱼鳞形”的痕迹, 这就是爆轰胞格(Detonation Cell)——三波点轨迹。气相爆轰波的阵面结构由前导激波与横波构成, 其中前导激波又包括入射激波和马赫杆。入射激波、马赫杆和横波相交于三波点, 构成三波结构, 因此, 可以说爆轰胞格结构就是由多个三波结构构成的。在爆轰波的传播过程中, 构成前导激波的入射激波和马赫杆通过三波对撞过程交替转换, 构成爆轰胞格的重复性图案。



(a) 爆轰波马赫反射实验烟迹图

(b) 爆轰波马赫反射数值胞



(c) 沿上、下壁面附近贯穿各胞格的压力分布

图 9. 爆轰波的多波结构(混合物: $2H_2+O_2+Ar$, $P_0=24kPa$, $T_0=298K$, 楔角 $\alpha=19.3$)

图 9(b)给出了爆轰波在楔面上反射过程的数值胞格结构,与实验烟迹图 9(a)基本一致;9(c)是沿上下壁面贯穿胞格的极值压力的分布,可以看出在下壁面附近由于马赫反射的影响,在马赫杆扫过的区域内,极值压力明显升高,数值胞格结构更加细致,并且与未受马赫杆影响的区域之间存在着明显的过渡线——三波点轨迹。

4 结论

本文应用基元反应模型和频散可控耗散格式(DCD)对可燃混合气体 $2\text{H}_2+\text{O}_2+\text{Ar}$ 的爆轰波在楔面上反射过程的化学反应流场进行了数值模拟并与实验结果进行了比较,得到以下结论:(1)计算结果表明,随着楔角的增大,爆轰波在楔面上反射由马赫反射向正规反射转变,其转变临界角在 48.5° 左右,计算结果和理论分析以及实验结果进行了比较,三者基本一致。(2)三波点轨迹 α 角的大小受爆轰气体初始压力的影响不大,而主要取决于楔角。(3)本文数值模拟了爆轰波楔面反射的多波结构,计算结果可以与实验结果进行比较。

参考文献

- 1 G.O.Thomas, R.L.Williams. Detonation interaction with wedges and bends [J]. Shock Waves, 2002, 11: 481 - 492.
- 2 C.M.Guo, D.L.Zhang, and W.Xie, The mach reflection of a detonation based on soot track measurements [J]. Combustion and Flame, 2001, 127:2051-2058.
- 3 Z.L.Jiang, K.Takayama, Y.S.Chen. Dispersion conditions for non-oscillatory shock capturing schemes and its applications [J]. Comp Fluid Dynamics Journal, 1995,4:137-150
- 4 E.Schultz, J.Shepherd. Validation of detailed reaction mechanisms for detonation simulation. Graduate Aeronautical Laboratories, California Institute of Technology, Pasadena, Ca 91125, 2000.
- 5 Nettleton M.A. Gaseous Detonation: Their Nature, Effects and Control [M]. Chapman and Hall, London, 1987, 136-172.