

# 气相球面聚心爆轰波的研究

常利娜 姜宗林

中国科学院 力学研究所 LHD 实验室 北京 100080

**摘要:** 本文用数值的方法模拟了球面爆轰波向球心传播汇聚的过程。通过跟踪波阵面上压力和温度的变化,分析了各参数在爆轰波传播过程中的演变规律,及其与几何尺度与初始条件的依赖关系。结果表明,在球心附近区域,将产生一高温高压区,这一区域的大小取决于球面半径,而其中的参数值则与初始条件有关。计算以一维球面坐标系下的多组分 Euler 方程为控制方程,采用频散可控格式进行离散求解,化学反应机制的模拟则是以基元反应为模型。

## 1. 引言

球面爆轰波在向球对称中心传播的过程中,由于能量汇聚,阵面后介质压力和温度不断升高,从理论上说,如果忽略粘性,当波阵面到达对称中心时,温度和压力趋于无限。尽管实际由于粘性和真实气体效应的作用,这一点状态参数为有限值,仍能够在对称中心附近获得一动态超高压区域。这一特点使其在兵器技术、材料合成和人工热核反应方面有重要的应用价值。

球面波汇聚的问题,理论分析方面已经有一些研究,并在不考虑反应区细节的情况下,给出了某种近似解[1];而在数值模拟研究方面,尚无相关的研究报告。本文以  $H_2/O_2/Ar$  混合气体为例,应用包含 9 种组分和 20 个化学反应的基元反应模型,对球面聚心爆轰波的运动过程进行了数值模拟。计算格式采用了 Jiang[2]给出的频散可控耗散格式(dispersion controlled dissipative scheme, 简称 DCD),DCD 与基元反应模型通过分裂算法与结合起来。

文中以爆轰波在直管道中传播的问题为例,验证了计算程序的可靠性。通过改变球面半径的大小,文中研究了几何尺度对汇聚效果的影响,结果表明,增大球面半径,能够有效的扩大高温高压区,这一结果是与理论分析[1]的结果是一致的。该区域内的参数值主要与初始条件有关,文中研究了初始压力的影响,从计算结果看出,提高初始压力,能够有效提高汇聚区内压力,温度值也会相应地有所提高。

## 2. 控制方程组

忽略粘性、热传导和重力的作用,多组分化学反应理想气体的一维球对称 Euler 方程组可统一写成:

$$\frac{\partial W}{\partial t} + \frac{\partial P}{\partial r} = S \quad (1)$$

$$W = r^2(\rho_1, \rho_2, \dots, \rho_{n_s}, \rho v, E)^T$$

$$P = r^2(\rho_1 v, \rho_2 v, \dots, \rho_{n_s} v, \rho v^2 + p, (E + p)v)^T$$

$$S = r^2(\dot{w}_1, \dot{w}_2, \dots, \dot{w}_{n_s}, 2p/r, 0)^T$$

其中,  $\rho_i$  为混合气体中第  $i$  种组分的密度,  $n_s$  为总的组分数,  $\rho = \sum_{i=1}^{n_s} \rho_i$  为混合气体的总密度;  
 $v$  为速度;  $E$  为单位体积总能:

$$E = e + \rho v^2 / 2 \quad (2)$$

$e = \rho h - p$  是单位体积内能, 其中  $h$  是单位质量焓。  $p$  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, 表达式为:

$$p = \sum_{i=1}^{n_s} \rho_i R_i T \quad (3)$$

(3)式中,  $R_i$  为第  $i$  种组分的气体常数,  $T$  为混合气体温度。

$\dot{w}_i$  为第  $i$  种组分的单位体积的质量生成率, 在基元反应模型中,  $\dot{w}_i$  由基元反应的质量作用定律得到:

$$\dot{w}_i = W_i \sum_{k=1}^{NR} (v_{ik}'' - v_{ik}') \left( K_{f,k} \prod_{j=1}^{n_s} (C_j)^{\nu_{jk}'} - K_{b,k} \prod_{j=1}^{n_s} (C_j)^{\nu_{jk}''} \right) \quad (4)$$

式中  $i$  或  $j$  表示混合气体组分数,  $k$  为基元反应模型中的化学反应数,  $NR$  为总的化学反应数;  $W_i$  表示第  $i$  种组分的摩尔质量;  $v_{ik}'$  和  $v_{ik}''$  分别表示在第  $k$  个正向和逆向化学反应中  $i$  组分的化学反应计量系数;  $C_j$  表示第  $j$  种组分的摩尔浓度;  $K_{f,k}$  和  $K_{b,k}$  分别表示正反应速率常数和逆反应速率常数,  $K_{f,k}$  由 Arrhenius 公式给出,  $K_{b,k}$  由反应平衡常数和  $K_{f,k}$  求出。

### 3. 数值算法

数值计算分为两部分: 首先, 不考虑方程(1)中的化学反应源项, 采用 Jiang[2]给出频散可控耗散格式对方程进行离散, 其次用基元反应模型处理化学反应源项, 并用分裂算法将二者结合起来。基元反应和流动的特征时间尺度相差悬殊, 需要采用不同的时间步长。文中流动的时间步长是采用 cfl 条件计算得到的, cfl 数取 0.1; 基元反应的时间步长取固定值, 文中取  $10^{-4} \mu s$ , 流动时间步长约为基元反应时间步长的 10~100 倍。本文主要讨论了反应气体为  $H_2/O_2/Ar$  混合气体的情形, 相应的基元反应模型包含了 8 种组分和 20 个化学反应, 反应模型参数见[3]。

采用 DCD 格式对控制方程(1)进行离散, 得到如下显式有限差分格式:

$$U_j^{n+1} = U_j^n - \frac{1}{r_j^2} \frac{\Delta t}{\Delta r} (Q_{j+\frac{1}{2}}^n - Q_{j-\frac{1}{2}}^n) + \frac{\Delta t}{r_j^2} S_j \quad (5)$$

其中

$$U = (\rho_1, \rho_2, \dots, \rho_n, \rho v, E)^T$$

$$F = (\rho_1 v, \rho_2 v, \dots, \rho_n v, \rho v^2 + p, (E + p)v)^T$$

$$\begin{cases} Q_{j+\frac{1}{2}} = r_{j+\frac{1}{2}}^2 \left( F_{j+\frac{1}{2}L}^+ + F_{j+\frac{1}{2}R}^- \right) \\ F_{j+\frac{1}{2}L}^+ = F_j^+ + \frac{1}{2} \min \text{mod}(\Delta F_{j-\frac{1}{2}}^+, \Delta F_{j+\frac{1}{2}}^+) \\ F_{j+\frac{1}{2}R}^- = F_{j+1}^- - \frac{1}{2} \min \text{mod}(\Delta F_{j+\frac{1}{2}}^-, \Delta F_{j+\frac{3}{2}}^-) \end{cases}$$

$$\Delta F_{j+\frac{1}{2}}^\pm = F_{j+1}^\pm - F_j^\pm$$

上述方程中, 上标  $(\cdot)^+$  和  $(\cdot)^-$  表示由 Steger-Warming 方法得到的矢量通量分裂的两个分量。

在本文算例中, 计算网格点是均匀分布的, 在球心处应用对称边界条件, 外边界处应用固壁条件。考虑到球面半径足够大, 在球面爆轰波的初始阶段, 波的汇聚效应较小, 聚心爆

衰波的运动非常接近于平面爆轰波，所以本文以稳定传播后的平面爆轰波的参数分布，近似地作为聚心爆轰波的初始条件。

#### 4. 计算方法和程序的验证

作为算法的验证和计算程序的检验，本文选取了两个算例，一个算例为平面爆轰波在直管道中的传播问题，另一个算例为球面爆轰波的散心传播问题。可燃混合气体为化学当量比的氢氧混合气体，掺混了 20% 的 Ar，初始压力为 1bar，温度为 295K。

##### 4.1 平面爆轰问题

表 1. 比较本文计算结果和 Shepherd 的计算结果 (掺混 20% 的 Ar 的化学当量比的氢氧混合气体)

	$D(m/s)$	$P_{CJ}/P_i$	$T_{CJ}(K)$
球面散心爆轰波(本文)	2249.3	17.6	3530
平面爆轰波(本文)	2350.3	18.0	3567
平面爆轰波(Shepherd)	2357.3	19.1	3594

本文首先对一维平面爆轰波问题作了计算。表 1 列出了本文计算得到的  $U_{CJ}$ 、 $P_{CJ}/P_i$  和  $T_{CJ}$ ，以及 Shepherd[4]采用 ZND 模型计算得到的相应参数，比较两者结果可以看出，速度与温度的 CJ 值符合得很好，误差不超过 1%，压力偏差略大一些，但误差也不超过 6%。

##### 4.2 散心爆轰问题

第一个算例验证了本文一维化学反应流计算程序的正确性，第二个算例用散心爆轰问题来检验本文的一维球对称计算程序。假设有一个充满氢氧混合气体的球，在中心处起爆，在理想情况下，爆轰波将以同心球面的形式向外传播，这一问题存在自相解[1]。

表 1 还给出了球面爆轰波稳定传播以后一些相关的参数值。与相同初始条件下，平面爆轰波的计算结果相比较，可以看出，球面爆轰波的传播速度、CJ 平面上的压力和温度，略有下降。这是因为散心爆轰波在传播过程中，由于几何效应使得波后流动区域在不断扩大，因此与平面爆轰波相比，爆轰释放的能量要维持相对多物质的运动，这就减弱了运动强度。

图 1 给出了一维球对称等熵流解析解与本文计算结果的比较，其中图 1(a)是压力分布，图 1(b)是速度分布。从图中可以看出，解析解与近似解有着类似的形状，但二者符合得不够好，尤其是在压力曲线中，计算解与解析解的稀疏波平台压力有较大偏离。这可能是因为解析解在计算过程中，需要假设从 CJ 点开始，产物流动为等熵流；而本文在计算中采用了基元反应模型，这一假设并不能严格保证。

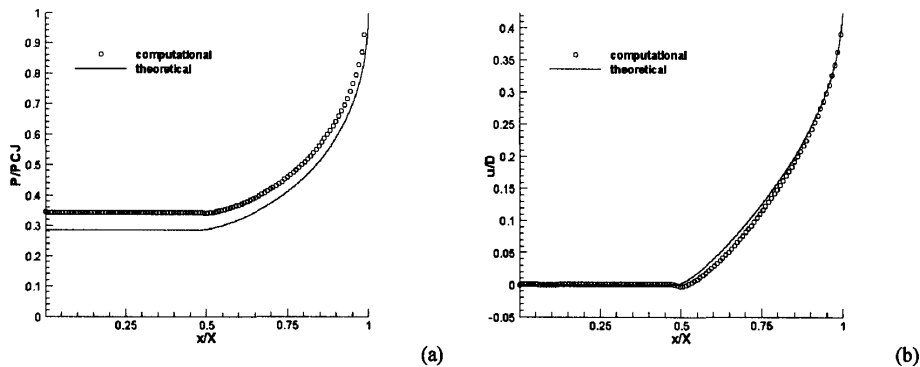


图 1 本文的计算结果与解析解的比较(a)爆轰产物中的压力分布(b)爆轰产物中的温度分布

### 5. 聚心爆轰的计算结果

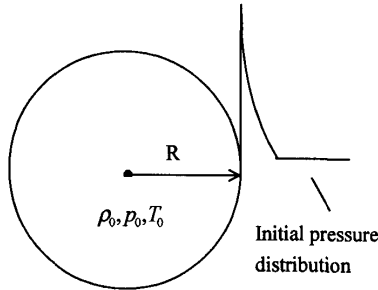


图2 球面聚心爆轰问题中，计算初始条件示意图

图2描述了本文在计算中如何给定初始条件。初始时刻，在  $r < R$  的球形区域，充满了可燃混合气体，混合气体的组分为化学当量比的氢和氧，掺混25%的  $Ar$ ；在  $r > R$  的区域，参数分布指定为同样初始条件下，波阵面位于  $R$  处的稳定传播的平面爆轰波曲线。在计算中，采用了一维均匀网格，网格密度为  $0.01875\text{cm}$ 。

#### 5.1 聚心爆轰波的传播过程

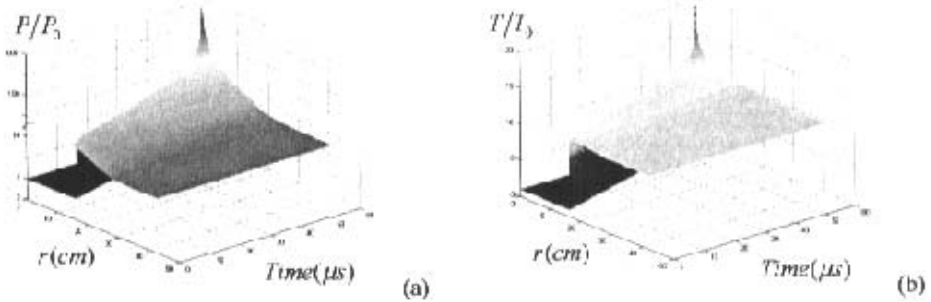


图3 聚心爆轰波在传播过程中，各个时刻的参数分布 (a)压力 (b)温度

图3给出了初始压力为  $0.2 \times 10^5 \text{pa}$ ，初始温度为  $298\text{K}$  时，聚心爆轰波在传播过程中各个时刻的参数分布，图中  $x$  轴表示径向位置  $r$ ， $y$  轴表示计算时间  $\text{Time}$ ，图3(a)为压力分布图， $z$  轴为当地压力与初始压力的比值  $P/P_0$ ；图3(b)为温度分布图， $z$  轴为当地温度与初始温度的比值  $T/T_0$ 。在这一算例中，计算区域的初始半径  $R$  取  $15\text{cm}$ 。图中计算时刻的最大值为  $58 \mu\text{s}$ ，此时爆轰波阵面传播至  $r = 0.3\text{cm}$  处，阵面附近的温度已经超过了  $4500\text{K}$ ，随着波阵面的传播，温度将进一步升高，本文所用的热力学模型将不再适用，因此没有作进一步计算。

表2. 球面聚心爆轰波传播过程中，波面参数  $P/P_0$  和  $T/T_0$  随波面半径的变化

$r/R$	1.	0.8	0.6	0.4	0.3	0.2	0.1	0.05	0.025
$P/P_0$	26.4407	29.606	32.2906	37.0208	41.716	51.2899	93.3494	157.149	327.349
$T/T_0$	9.68165	10.2026	10.5981	11.2216	11.6727	12.2885	13.1627	14.1609	15.5823

从图3可以看出，随着波面半径的减小，波面附近的压力和温度在不断提高。表2列出了部分具体的计算结果， $r/R$  从  $0.8$  减少到  $0.4$ ，压力增加了  $25\%$ ，温度增加了  $10\%$ ； $r/R$  从  $0.2$  减少到  $0.1$ ，压力增加了  $82\%$ ，温度增加了  $7\%$ ； $r/R$  从  $0.05$  减少到  $0.025$ ，压力增加了  $108\%$ ，温度增加了  $10\%$ 。可以看出，波面传播至球心附近时，压力急剧增加，相比之下，温度升高则要慢一些，这是因为，随着温度的升高，离解反应也开始变得越来越活跃，吸收更多的热量，从而影响了温度的进一步升高。

在这一算例中，当波阵面传播至  $r/R = 0.1$ ，阵面附近温度接近  $4000\text{K}$ ，压力超过了  $18$  个

大气压，形成了一个的高温高压区。5.2 和 5.3 讨论了球面半径和初始条件对这一高温高压区的影响。

## 5. 2 球面半径的影响

图 4 和图 5 给出了球面半径  $R$  分别为 15cm、20cm、25cm 和 30cm 时，在爆轰波传播过程中，各个位置的最大压力与初始压力的比值  $P_{\max}/P_0$  和最高温度和初始温度的比值  $T_{\max}/T_0$ ，表 3 列出了部分计算值。可以看出，给定初始条件，各点处的  $P_{\max}/P_0$  和  $T_{\max}/T_0$  可以近似地看作  $r/R$  的函数，而  $R$  的具体数值对  $P_{\max}$  和  $T_{\max}$  影响较小， $R$  从 15cm 增加至 30cm， $P_{\max}/P_0$  相差不超过 15%， $T_{\max}/T_0$  相差不超过 2%。

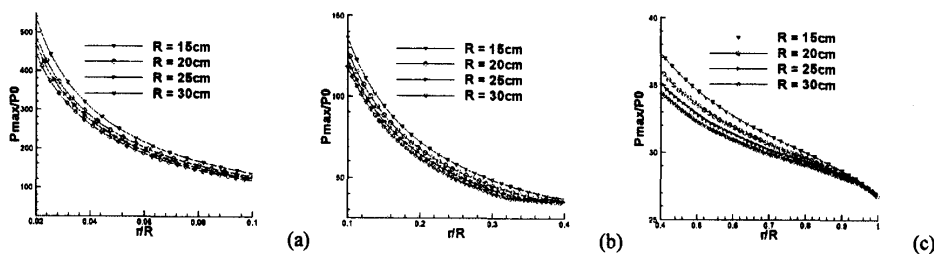


图 4 对应于不同球面半径，爆轰波传播过程中各个位置的最大压力值

(a)  $0.02 < r/R < 0.1$  (b)  $0.1 < r/R < 0.4$  (c)  $0.4 < r/R < 1$ .

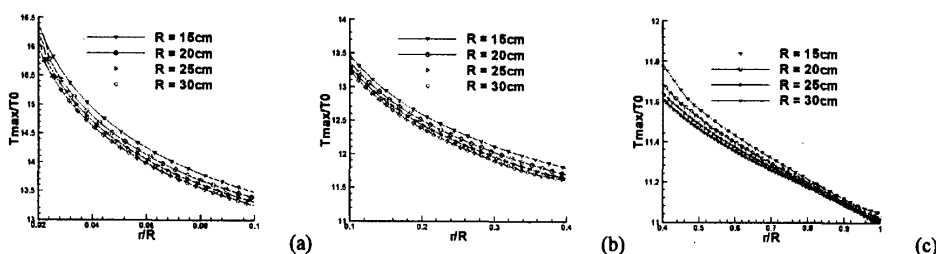


图 5 对应于不同球面半径，爆轰波传播过程中各个位置的最大温度值

(a)  $0.02 < r/R < 0.1$  (b)  $0.1 < r/R < 0.4$  (c)  $0.4 < r/R < 1$ .

另一方面，这一计算结果也表明，可以通过增加初始球面半径来提高指定区域内最高压力和温度的值。假设指定区域的半径是  $r_0$ ，在爆轰波向球心的传播过程中， $r_0$  处的最高压力和温度分别为  $P_{\max}^0$  和  $T_{\max}^0$ ，则在  $r < r_0$  定义的球形区域内，每一点所能达到的最高压力和温度都不低于  $P_{\max}^0$  和  $T_{\max}^0$ 。表 4 列出了对应于不同初始半径  $R$ ， $r_0$  分别指定为 2cm、1cm 和 0.6cm 时  $P_{\max}^0$  和  $T_{\max}^0$  的值。从表中可以看出，当初始球面半径增加一倍时，压力增加近 50%，但是温度升高较少，只有 200K~300K。

表 3. 球面聚心爆轰波传播过程中， $P/P_0$  和  $T/T_0$  的最大值

$r/R$	$P_{\max}/P_0$			$T_{\max}/T_0$		
	0.4	0.1	0.02	0.4	0.1	0.02
$R = 15\text{cm}$	37.4162	136.218	526.915	11.7878	13.4692	16.3088
$R = 20\text{cm}$	36.0652	127.7	480.402	11.6911	13.3645	16.3198
$R = 25\text{cm}$	35.1483	122.928	460.82	11.6393	13.3029	16.1616
$R = 30\text{cm}$	34.462	118.254	449.539	11.6096	13.2439	16.0345

表 4. 指定半径  $r_0$  处的最大压力  $P_{\max}^0$  和最高温度  $T_{\max}^0$  与初始半径的关系

$r_0$ (cm)	$P_{\max}^0$ ( $\times 1.0e^5 Pa$ )			$T_{\max}^0$ (K)		
	2	1	0.6	2	1	0.6
R = 15cm	21.0722	39.2742	60.411	3901.39	4193.4	4443.44
R = 20cm	25.54	47.0132	70.6388	3982.62	4293.64	4559.1
R = 25cm	29.8604	54.298	80.5696	4053.63	4381.08	4662.87
R = 30cm	34.0368	60.3142	87.8876	4118.03	4453.91	4778.28

### 5.3 初始压力的影响

以初始波阵面位于 30cm 的情形为例，本文考察了初始压力的影响。图 6 给出初始压力分别为  $0.4 \times 10^5 Pa$ ,  $0.6 \times 10^5 Pa$ ,  $0.8 \times 10^5 Pa$  和  $1.0 \times 10^5 Pa$  时，爆轰波传播过程中各个位置处参数的最大值，其中图 6(a) 为不同位置处压力最大值的分布图；图 6(b) 和 (c) 为不同位置处温度最大值。

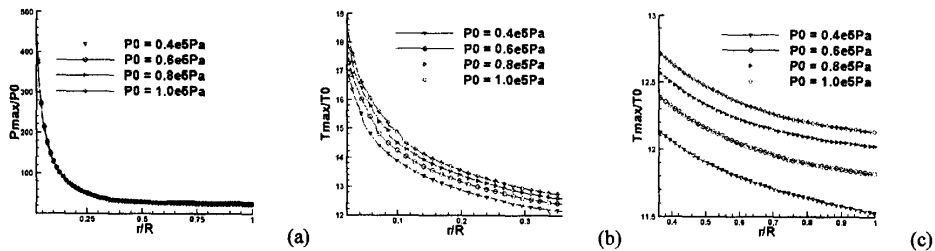


图 6 对应于不同初始压力，爆轰波传播过程中各个位置处参数的最大值

(a)最大压力 (b)最高温度,  $0.02 < r/R < 0.36$  (c)最高温度,  $0.36 < r/R < 1$

从图 6(a) 中可以看出，对应于不同初始压力的  $P_{\max}/P_0$  的分布曲线基本重合，由此表明，提高初始压力，各个位置处的最高压力值将随之线性增长。从图 6(b) 和 (c) 给出的  $T_{\max}/T_0$  的分布曲线可以看出，随着初始压力的提高，波阵面上的温度  $T_{\max}/T_0$  的值也会相应提高，初始压力从  $0.4e5 Pa$  升高至  $1.0e5 Pa$  时，球心附近的  $T_{\max}$  升高了 400K 左右。

## 6. 结论

1. 聚心爆轰波在向球心的传播过程中，由于能量的汇聚作用，可以在球心附近获得一动态高温高压区，这一区域的大小主要取决于初始球面半径；
2. 这一高温高压区的动态压力值与初始压力接近于正比关系；
3. 提高初始压力同时也可以提高这一高温高压区的温度值，但是提高较少。

### 参考文献

- [1]李维新，一维不定常流与冲击波，北京：国防工业出版社，2003
- [2]Zonglin Jiang, Kazuyoshi Takayana, Yaosong Chen. Dispersion conditions for non-oscillatory shock capturing schemes and its applications [J], Computational Fluid Dynamics J., 1995, 4(2): 137~150.
- [3]常利娜，张德良，胡宗民，姜宗林，频散可控格式的一种推广形式及其在爆轰波马赫反射中应用，计算物理，已接受
- [4] E.Schultz, J.Shepherd. Validation of detailed reaction mechanisms for detonation simulation [R], Graduate Aeronautical Laboratories, California Institute of Technology, Pasadena, Ca 91125, 2000.