

# 爆轰波在楔面上反射数值分析<sup>1)</sup>

胡宗民 高云亮 张德良 杨国伟 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** 应用基元反应模型和频散可控耗散格式 (DCD) 对氢氧爆轰波在楔面反射进行了数值模拟. 计算中氢氧混合物的化学反应采用了 8 种组分 20 个反应方程式. 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. 模拟了爆轰波在楔面反射由马赫反射向规则反射转变的过程, 得到了反射转变临界角, 同时考虑了初始压力和组分的影响, 并和实验及理论分析结果进行了比较, 结果是令人满意的.

**关键词** 爆轰波, 楔面, 反射, 基元反应模型, DCD 格式

## 引 言

爆轰波作为一种带有强烈的放热反应从而维持激波传播的具有强间断性质的物理现象, 它在楔面上的反射过程经常被人们作为研究其传播机理的基本问题, 然而由于爆轰波带有复杂的化学反应, 因此还有许多问题需要探索.

爆轰波在楔面上反射过程与激波反射有相似之处, 随着楔角的变化也存在规则反射和马赫反射的转变, 存在转变的临界角. Guo 等人<sup>[1]</sup>通过对爆轰波在楔面反射过程进行的实验研究, 得出此临界角对混合气体的初始压力不敏感而主要受楔角控制. Thomas 等人<sup>[2]</sup>通过实验研究得到的三波点轨迹恰好位于分别应用反应和无反应的三波理论得到的理论值之间. 张德良等人<sup>[3]</sup>应用化学反应简化模型(两步法)对爆轰波楔面反射进行了数值分析. 但是应用基元反应模型进行数值模拟的相关工作却并不多见.

本文应用氢氧 8 组分 20 反应模型和频散可控耗散格式 (DCD)<sup>[4,5]</sup>, 对氢氧爆轰波在楔面上反射过程进行了数值模拟, 分析了爆轰波在楔面反射时由马赫反射向正规反射的转变过程, 以及三波点轨迹角与楔角的关系, 给出了转变临界角, 并和实验以及理论分析结果进行了比较, 结果基本一致. 同时还探讨了混合物初始压力和组分构成多爆轰波反射的影响.

## 1 物理问题和数学模型

### 1.1 物理问题

2003-08-11 收到第 1 稿, 2004-05-10 收到修改稿.

1) 国家自然科学基金 (10276035) 和中国工程物理研究院联合资助项目.

爆轰波传播过程中遇到楔面障碍物并在楔面上反射, 随着楔面倾角  $\alpha$  的不同, 爆轰波在物面上的反射类型也会有所不同, 可能出现正规反射或马赫反射, 而且由马赫反射向正规反射的转变过程中存在一个临界角度  $\alpha_{crit}$ , 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, 爆轰波对楔面的作用就会有很大差异. 爆轰波的马赫反射和正规反射如图 1 所示.

本文模拟的问题如图 2 所示, 在直管的右端布

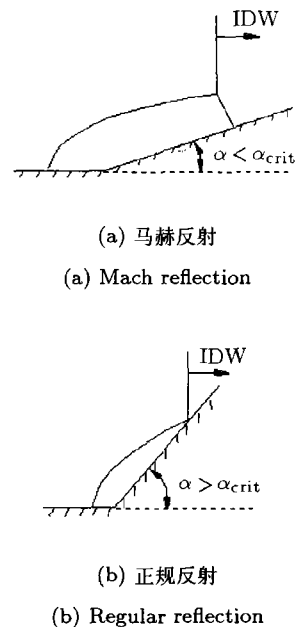


图 1 爆轰波在楔面上反射示意图 (IDW: 入射爆轰波)  
Fig.1 Sketch of detonation reflection over a wedge  
(IDW: incident detonation wave)

置一楔面, 楔角  $\alpha$  可调, 整个空间充满预混可燃气体, 初始时刻在左端很小的范围内设一个高温高压点火区直接起爆, 迅速形成稳定的爆轰波, 爆轰波运动到楔面时, 随着楔角  $\alpha$  的变化, 形成不同类型的反射.

### 1.2 控制方程

对于多组分气相爆轰波的反应与传播过程, 在不考虑扩散效应, 忽略热传导和黏性作用的条件下, 二维平面坐标系的 Euler 方程组为

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

其中矩阵  $U, F, G, S$  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, 对于由  $ns$  种反应组分组成预混气体来说, 它们分别为

$$U = \begin{bmatrix} \rho C_1 \\ \rho C_2 \\ \vdots \\ \rho C_{ns} \\ m \\ n \\ E \end{bmatrix}, \quad F = \begin{bmatrix} m C_1 \\ m C_2 \\ \vdots \\ m C_{ns} \\ m^2/\rho + p \\ mn/\rho \\ (E+p)m/\rho \end{bmatrix} \quad (2)$$

$$G = \begin{bmatrix} n C_1 \\ n C_2 \\ \vdots \\ n C_{ns} \\ mn/\rho \\ n^2/\rho + p \\ (E+p)n/\rho \end{bmatrix}, \quad S = \begin{bmatrix} \dot{w}_1 \\ \dot{w}_2 \\ \vdots \\ \dot{w}_{ns} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

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  $\rho = \sum_{i=1}^{ns} \rho_i = \sum_{i=1}^{ns} \rho C_i$ ,  $\rho_i$  为第  $i$  种组分的分密度;  $m = \rho u$ ,  $n = \rho v$ ,  $u$  和  $v$  分别为  $x$  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  $e = \rho h - p$ , 混合气体比焓  $h = \sum_{i=1}^{ns} C_i h_i$ , 第  $i$  种组分的焓值  $h_i$  由文献 [5] 中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;  $\dot{w}_i$  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对温度的拟合多项式如下

$$\frac{h_i}{R_i T} = -a_{1i} T^{-2} + a_{2i} T^{-1} \ln T + a_{3i} + \frac{a_{4i}}{2} T +$$

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

$$\frac{C_{p_i}}{R_i} = a_{1i} T^{-2} + a_{2i} T^{-1} + a_{3i} + a_{4i} T +$$

$$a_{5i} T^2 + a_{6i} T^3 + a_{7i} T^4 \quad (4)$$

其中各拟合常数  $a_{1i} \sim a_{7i}$  和  $b_{1i}$  及温度适应范围见文献 [6].

### 1.3 基元化学反应模型

对于氢氧预混气体爆轰过程, 本文采用 8 种组分 20 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

$$\sum_{s=1}^{ns} a_{ji} \chi_i \xrightleftharpoons[kb_j]{kf_j} \sum_{s=1}^{ns} b_{ji} \chi_i \quad (j=1, 2, \dots, nr) \quad (5)$$

式中  $a_{ji}, b_{ji}, \chi_i$  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, 而  $kb_j$  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

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

$[X_i]$  为第  $i$  组分的摩尔浓度,  $\lambda_{ji}$  为第  $j$  反应中组分  $i$  的三体效应系数. 基元化学反应参数见表 1.

表 1 H<sub>2</sub>+O<sub>2</sub> 8 组分 20 反应模型Table 1 Detailed reaction model for mixture of H<sub>2</sub> and O<sub>2</sub>

Reactions	C	n	Ea
1 H <sub>2</sub> +O <sub>2</sub> =2OH	1.70×10 <sup>13</sup>	0.0	47 780
2 OH+H <sub>2</sub> =H <sub>2</sub> O+H	1.17×10 <sup>9</sup>	1.3	3 626
3 O+OH=O <sub>2</sub> +H	4.00×10 <sup>14</sup>	-0.5	0
4 O+H <sub>2</sub> =OH+H	5.06×10 <sup>4</sup>	2.7	6 290
5 H+O <sub>2</sub> +M=HO <sub>2</sub> +M	3.61×10 <sup>17</sup>	-0.7	0
6 OH+HO <sub>2</sub> =H <sub>2</sub> O+O <sub>2</sub>	7.50×10 <sup>12</sup>	0.0	0
7 H+HO <sub>2</sub> =2OH	1.40×10 <sup>14</sup>	0.0	1 073
8 O+HO <sub>2</sub> =O <sub>2</sub> +OH	1.40×10 <sup>13</sup>	0.0	1 073
9 2OH=O+H <sub>2</sub> O	6.00×10 <sup>8</sup>	1.3	0
10 H+H+M=H <sub>2</sub> +M	1.00×10 <sup>18</sup>	-1.0	0
11 H+H+H <sub>2</sub> =H <sub>2</sub> +H <sub>2</sub>	9.20×10 <sup>16</sup>	-0.6	0
12 H+H+H <sub>2</sub> O=H <sub>2</sub> +H <sub>2</sub> O	6.00×10 <sup>19</sup>	-1.3	0
13 H+OH+M=H <sub>2</sub> O+M	1.60×10 <sup>22</sup>	-2.0	0
14 H+O+M=OH+M	6.20×10 <sup>16</sup>	-0.6	0
15 O+O+M=O <sub>2</sub> +M	1.89×10 <sup>13</sup>	0.0	-1 788
16 H+HO <sub>2</sub> =H <sub>2</sub> +O <sub>2</sub>	1.25×10 <sup>13</sup>	0.0	0
17 HO <sub>2</sub> +HO <sub>2</sub> =H <sub>2</sub> O <sub>2</sub> +O <sub>2</sub>	2.00×10 <sup>12</sup>	0.0	0
18 H <sub>2</sub> O <sub>2</sub> +M=2OH+M	1.30×10 <sup>17</sup>	0.0	45 500
19 H <sub>2</sub> O <sub>2</sub> +H=HO <sub>2</sub> +H <sub>2</sub>	1.60×10 <sup>12</sup>	0.0	3 800
20 H <sub>2</sub> O <sub>2</sub> +OH=H <sub>2</sub> O+HO <sub>2</sub>	1.00×10 <sup>13</sup>	0.0	1 800

Unit: mole, s, cm, K, cal

Third-body effect coefficient:

(5) H<sub>2</sub>O=18.6, H<sub>2</sub>=2.86; (10) H<sub>2</sub>O=0, H<sub>2</sub>=0;(13) H<sub>2</sub>O=5.0; (14) H<sub>2</sub>O=5.0; others=1.0.

#### 1.4 温度确定

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, 得到关于各守恒型未知变量和温度的函数关系式 (8a). 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

$$F(\rho_1, \dots, \rho_i, \dots, \rho_{ns}, m, n, E, T) = \sum_{i=1}^{ns} \rho_i h_i - \left( E - \frac{m^2 + n^2}{2\rho} \right) - \sum_{i=1}^{ns} \rho_i R_i T = 0 \quad (8a)$$

牛顿迭代法计算需要迭代函数对温度的偏导数

$$F'(\rho_1, \dots, \rho_i, \dots, \rho_{ns}, m, n, E, T) = \rho(\hat{C}_p - \hat{R}) \quad (8b)$$

其中  $\hat{C}_p, \hat{R}$  分别为混合物的定压比热和气体常数, 对于理想气体来说, 总有  $\hat{C}_p > \hat{R}$  成立, 即  $F' > 0$ . 函数  $F$  是关于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 (8a).

## 2 数值离散方法

Jiang 等人<sup>[4]</sup> 在 1995 年提出的频散可控格式 (DCS), 应用了 Steger-Warming 的矢量通量分裂技术, 从修正方程的色散控制出发构造差分格式, 无需人

为地附加黏性以处理激波等强间断, 具有格式构造简单、激波分辨率高、计算量小等优点. Jiang 后来将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. Jiang 在文献 [5] 对 DCD 格式进行了综述. 本文把该方法推广到用基元反应描述的爆轰波反应流场数值模拟. 半离散化的 DCD 格式为

$$\left( \frac{\partial U}{\partial t} \right)_{j,k}^n = -\frac{1}{\Delta x} (\bar{F}_{j+1/2,k}^n - \bar{F}_{j-1/2,k}^n) - \frac{1}{\Delta y} (\bar{G}_{j,k+1/2}^n - \bar{G}_{j,k-1/2}^n) - S_{j,k}^n \quad (9)$$

其中

$$\begin{cases} \bar{F}_{j+1/2,k}^n = F_{j+1/2L,k}^+ + F_{j+1/2R,k}^- \\ \bar{G}_{j,k+1/2}^n = G_{j,k+1/2L}^+ + G_{j,k+1/2R}^- \\ \left. \begin{aligned} F_{j+1/2L,k}^\pm &= F_{j,k}^\pm + \frac{1}{2} \Phi_A^\pm \min \text{mod} \cdot \\ &\quad \left( \Delta F_{j-1/2,k}^+, \Delta F_{j+1/2,k}^+ \right) \\ F_{j+1/2R,k}^\pm &= F_{j+1,k}^\pm - \frac{1}{2} \Phi_A^\pm \min \text{mod} \cdot \\ &\quad \left( \Delta F_{j+1/2,k}^-, \Delta F_{j+3/2,k}^- \right) \end{aligned} \right\} \\ \left. \begin{aligned} G_{j,k+1/2L}^+ &= G_{j,k}^+ + \frac{1}{2} \Phi_B^+ \min \text{mod} \cdot \\ &\quad \left( \Delta G_{j,k-1/2}^+, \Delta G_{j,k+1/2}^+ \right) \\ G_{j,k+1/2R}^- &= G_{j,k+1}^- - \frac{1}{2} \Phi_B^- \min \text{mod} \cdot \\ &\quad \left( \Delta G_{j,k+1/2}^-, \Delta G_{j,k+3/2}^- \right) \end{aligned} \right\} \\ \left. \begin{aligned} \Delta F_{j+1/2,k}^\pm &= F_{j+1,k}^\pm - F_{j,k}^\pm \\ \Delta G_{j,k+1/2}^\pm &= G_{j,k+1}^\pm - G_{j,k}^\pm \end{aligned} \right\} \\ \left. \begin{aligned} \mathbf{F}^\pm &= \mathbf{A}^\pm \mathbf{U} \\ \mathbf{G}^\pm &= \mathbf{B}^\pm \mathbf{U} \end{aligned} \right\}, \quad \left. \begin{aligned} \Phi_A^\pm &= \mathbf{I} \mp \beta \mathbf{A}_A^\pm \\ \Phi_B^\pm &= \mathbf{I} \mp \beta \mathbf{A}_B^\pm \end{aligned} \right\}$$

式中 Jacobian 矩阵  $\mathbf{A} = \partial \mathbf{F} / \partial \mathbf{U}$ ,  $\mathbf{B} = \partial \mathbf{G} / \partial \mathbf{U}$ ,  $\mathbf{I}$  为单位矩阵,  $\beta = \Delta t / \Delta r$ ,  $\mathbf{A}_A$  和  $\mathbf{A}_B$  分别为  $\mathbf{A}$  和  $\mathbf{B}$  的特征值构成的对角阵, 上标  $(\cdot)^+$  和  $(\cdot)^-$  分别为根据 Steger-Warming 通量分裂算法得到的正负通量. 在许多文献中可以找到只考虑均匀介质 (单一组分) 时的通量分裂的形式, 至于考虑多组分混合物时的 Steger-Warming 通量分裂却很少见到, 以下给出其具体形式.

在笛卡儿坐标系  $(x, y)$  下, 通量  $\mathbf{F}$  的 Steger-Warming 矢量通量分裂形式为

$$\mathbf{F}^{\pm} = \frac{\rho}{2J\hat{\gamma}} \begin{bmatrix} C_1[2(\hat{\gamma}-1)\lambda_1^{\pm} + \lambda_{ns+2}^{\pm} + \lambda_{ns+3}^{\pm}] \\ C_2[2(\hat{\gamma}-1)\lambda_1^{\pm} + \lambda_{ns+2}^{\pm} + \lambda_{ns+3}^{\pm}] \\ \vdots \\ C_{ns}[2(\hat{\gamma}-1)\lambda_1^{\pm} + \lambda_{ns+2}^{\pm} + \lambda_{ns+3}^{\pm}] \\ u[2(\hat{\gamma}-1)\lambda_1^{\pm}] + (u-a)\lambda_{ns+2}^{\pm} + (u+a)\lambda_{ns+3}^{\pm} \\ v[2(\hat{\gamma}-1)\lambda_1^{\pm}] + \lambda_{ns+2}^{\pm} + \lambda_{ns+3}^{\pm} \\ 2[(\hat{\gamma}-1)H - a^2]\lambda_1^{\pm} + (H-au)\lambda_{ns+2}^{\pm} + (H+au)\lambda_{ns+3}^{\pm} \end{bmatrix} \quad (10)$$

其中  $\lambda_i^{\pm} = \frac{1}{2}(\lambda_i \pm \sqrt{\lambda_i^2 + \varepsilon^2}) (i=1, 2, \dots, ns+3)$ , 为应用 Steger-Warming 方法分裂后的特征值,  $\varepsilon$  为一小量. Jacobian 矩阵  $\mathbf{A}$  的  $ns+3$  个特征值分别为  $\{\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_{ns}, \lambda_{ns+1}, \lambda_{ns+2}, \lambda_{ns+3}\} = \{u, u, \dots, u, u, u-a, u+a\}$ , 其中冻结声速  $a = \sqrt{\hat{\gamma} \frac{p}{\rho}}$ , 混合物的比热比

$$\hat{\gamma} = \frac{\sum_{i=1}^{ns} C_i C_{p_i}}{\left( \sum_{i=1}^{ns} C_i C_{p_i} - \sum_{i=1}^{ng} C_i R_i \right)}$$

式 (10) 中总焓  $H = \sum_{i=1}^{ns} h_i + (u^2 + v^2)/2$ . 通量  $\mathbf{G}$  的分裂计算与通量  $\mathbf{F}$  的计算过程类似.

在一般曲线坐标系  $(\xi, \eta)$  下, 控制方程为

$$\frac{\partial \tilde{U}}{\partial t} + \frac{\partial \tilde{F}}{\partial \xi} + \frac{\partial \tilde{G}}{\partial \eta} = \tilde{S} \quad (11)$$

在坐标系  $(\xi, \eta)$  和  $(x, y)$  之间存在变换关系  $\tilde{U} = U/J$ ,  $\tilde{F} = (\xi_x \mathbf{F} + \xi_y \mathbf{G})/J$ ,  $\tilde{G} = (\eta_x \mathbf{F} + \eta_y \mathbf{G})/J$ ,  $\tilde{S} = \mathbf{S}/J$ , 其中  $\xi_x, \xi_y, \eta_x, \eta_y, J$  分别为坐标变换关系以及变换 Jacobian. 矩阵  $\tilde{\mathbf{A}} = \partial \tilde{F} / \partial \tilde{U}$ , 其  $ns+3$  个特征值为  $\{\tilde{\lambda}_1, \tilde{\lambda}_2, \dots, \tilde{\lambda}_{ns}, \tilde{\lambda}_{ns+1}, \tilde{\lambda}_{ns+2}, \tilde{\lambda}_{ns+3}\} = \{\theta, \theta, \dots, \theta, \theta, \theta - a\Delta, \theta + a\Delta\}$ , 其中  $\theta = uk_x + vk_y$ ,  $k_x = \xi_x/\Delta$ ,  $k_y = \xi_y/\Delta$ ,  $\Delta = \sqrt{\xi_x^2 + \xi_y^2}$ , 通量  $\tilde{F}$  的 Steger-Warming 的矢量通量分裂形式为

$$\tilde{\mathbf{F}}^{\pm} = \frac{\rho}{2J\hat{\gamma}} \begin{bmatrix} C_1[2(\hat{\gamma}-1)\tilde{\lambda}_1^{\pm} + \tilde{\lambda}_{ns+2}^{\pm} + \tilde{\lambda}_{ns+3}^{\pm}] \\ C_2[2(\hat{\gamma}-1)\tilde{\lambda}_1^{\pm} + \tilde{\lambda}_{ns+2}^{\pm} + \tilde{\lambda}_{ns+3}^{\pm}] \\ \vdots \\ C_{ns}[2(\hat{\gamma}-1)\tilde{\lambda}_1^{\pm} + \tilde{\lambda}_{ns+2}^{\pm} + \tilde{\lambda}_{ns+3}^{\pm}] \\ u[2(\hat{\gamma}-1)\tilde{\lambda}_1^{\pm}] + (u-ak_x)\tilde{\lambda}_{ns+2}^{\pm} + (u+ak_x)\tilde{\lambda}_{ns+3}^{\pm} \\ v[2(\hat{\gamma}-1)\tilde{\lambda}_1^{\pm}] + (v-ak_y)\tilde{\lambda}_{ns+2}^{\pm} + (v+ak_y)\tilde{\lambda}_{ns+3}^{\pm} \\ 2[(\hat{\gamma}-1)H - a^2]\tilde{\lambda}_1^{\pm} + (H-a\theta)\tilde{\lambda}_{ns+2}^{\pm} + (H+a\theta)\tilde{\lambda}_{ns+3}^{\pm} \end{bmatrix} \quad (12)$$

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. 具体的做法是在每一时间步的计算中, 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, 从而求得化学反应后的流场参数.

### 3 网格生成

本文的计算区域如图 2 所示, 楔面角度为  $\alpha$ , 图中长度为无量纲量, 其参考尺度为 2 mm, 计算区域高度随着楔角的改变稍做调整, 楔角小于  $40^\circ$ , 计算区域高度 (图 2) 为 20, 楔角大于  $40^\circ$  后, 此高度

变为 35. 计算中左侧和上、下固壁边界都应用了无黏滑移边界条件. 采用了结构化网格, 先用代数网格法生成初步网格, 然后应用椭圆型偏微分方程进行网格优化. 在下壁面附近做适当的加密处理, 以便提高捕捉三波结构的分辨率.

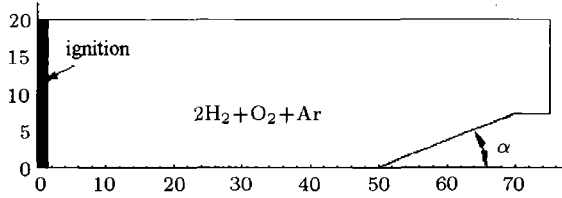


图 2 氢氧爆轰波在楔面上反射问题示意图

Fig.2 Sketch of detonation wave reflection over a wedge

### 4 数值结果与分析

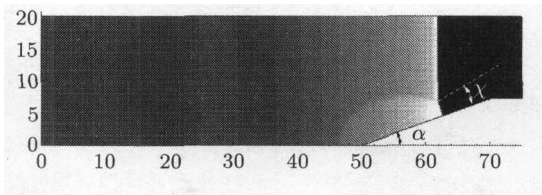
#### 4.1 数值方法的验证

首先对初始混合气体  $2H_2+O_2+Ar$ ,  $P_0 = 16 \text{ kPa}$ ,  $T_0=298 \text{ K}$  中的爆轰波形成过程进行了计算, 得到的爆速  $D = 2257 \text{ m/s}$ . Schultz 和 Shepherd<sup>[7]</sup> 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  $D_{CJ}=2240 \text{ m/s}$ , 两者是很接近的, 这在一定程度上可以作为爆轰波计算方法的验证.

#### 4.2 爆轰波在楔面反射

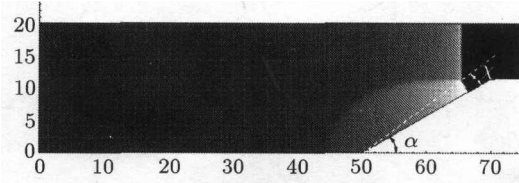
爆轰波在楔面上反射跟激波在楔面上反射有类似的特征, 随着楔角的增大也存在一个由马赫反射向规则反射的转变过程. 本文应用上述化学反应模型和 DCD 格式对爆轰波在楔面上反射过程进行了数值模拟, 并对不同楔角  $\alpha(19.3^\circ \sim 50^\circ)$  情况下, 爆轰波的反射过程进行了分析和比较.

图 3 分别给出了楔角  $\alpha$  分别为  $20^\circ, 30^\circ, 40^\circ, 46^\circ, 50^\circ$  共 5 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图 3(a)~ 图 3(d) 4 种情况均为马赫反射. 三波点的轨迹与楔面的夹角  $\chi$  随着楔角的增大逐渐减小, 依次为  $10.5^\circ, 6.5^\circ, 2.9^\circ$  和  $0.9^\circ$ ,



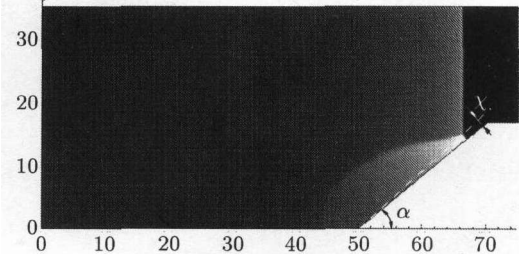
(a)  $\alpha = 20^\circ, \chi = 10.5^\circ$  时马赫反射

(a)  $\alpha = 20^\circ, \chi = 10.5^\circ$ , Mach reflection



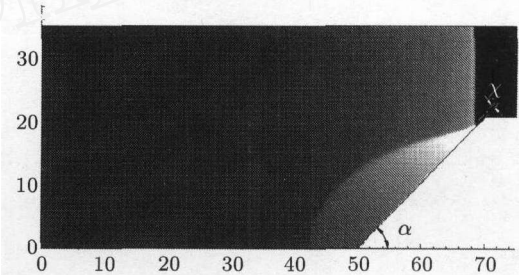
(b)  $\alpha = 30^\circ, \chi = 6.5^\circ$  时马赫反射

(b)  $\alpha = 30^\circ, \chi = 6.5^\circ$ , Mach reflection



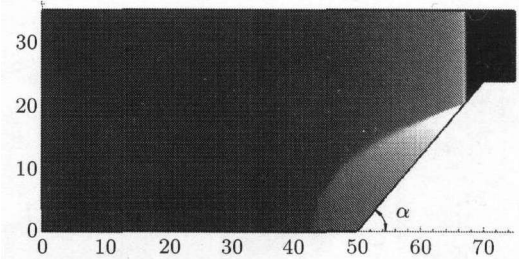
(c)  $\alpha = 40^\circ, \chi = 2.9^\circ$  时马赫反射

(c)  $\alpha = 40^\circ, \chi = 2.9^\circ$ , Mach reflection



(d)  $\alpha = 46^\circ, \chi = 0.9^\circ$  时马赫反射

(d)  $\alpha = 46^\circ, \chi = 0.9^\circ$ , Mach reflection



(e)  $\alpha = 50^\circ$  时正规反射

(e)  $\alpha = 50^\circ$ , regular reflection

图 3 爆轰波在不同楔角的楔面上的反射过程压力云图  
( $2H_2+O_2+Ar, P_0 = 16 \text{ kPa}, T_0 = 298 \text{ K}$ )

Fig.3 Pressure distribution showing the transition of Mach reflection to regular reflection of detonation waves over wedges with different inclination angles  
( $2H_2+O_2+Ar, P_0 = 16 \text{ kPa}, T_0 = 298 \text{ K}$ )

而图 3(e) 为正规反射。

爆轰波在楔面反射过程中, 马赫杆 (马赫反射) 或反射波 (正规反射) 后的压力是全流场压力和温度最高的地方. 在评估爆轰波对物面的破坏作用时, 这些地方是要特别注意的. 图 4 给出了爆轰波在楔面上反射过程中压力沿楔面的分布情况. 由图中结果可以看出, 随着楔角  $\alpha$  的增大, 马赫反射向正规反射转变, 马赫杆或反射波后的压力也越来越大, 5 种楔角对应的壁面上的最大压比  $P_{\max}/P_0$  分别为: 35, 38, 48, 59 和 90 (分别对应楔角  $\alpha = 20^\circ, 30^\circ, 40^\circ, 46^\circ, 50^\circ$  等 5 种情况), 在反射转变的临界角附近, 即在楔角  $46^\circ$  和  $50^\circ$  两种情形之间, 作用在壁面上压力变化非常剧烈.

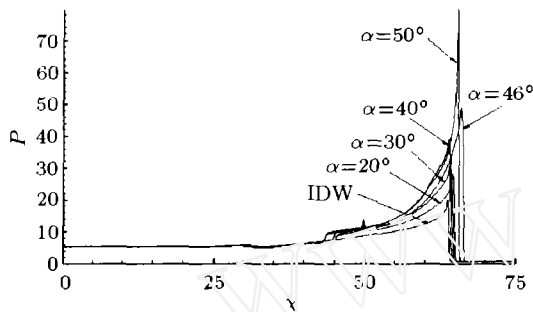


图 4 不同楔角时物面压力分布 ( $P$  为无量纲压力)  
Fig.4 Pressure distributions along wedge surfaces when  
detonation waves reflecting from wedges  
( $P$  is dimensionless pressure)

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上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  $2\text{H}_2+\text{O}_2+\text{Ar}$  ( $P_0=16\text{ kPa}$ ,  $T_0=298\text{ K}$ ) 中爆轰波在楔面上反射过程中由马赫反射向规则反射转变的临界角度在  $50^\circ\sim 53^\circ$  之间. 文献 [8] 给出相应的实验结果为  $46^\circ\sim 50^\circ$ . 应用 CCW (Chester Chisnell Whitham) 近似理论可以求得此临界角度约为  $46^\circ$ . 图 5 给出了

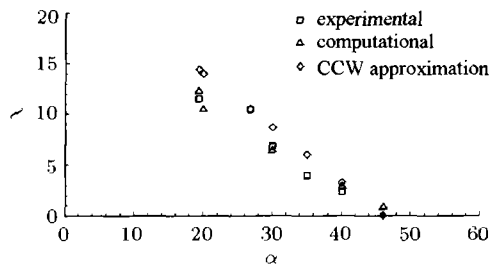


图 5 爆轰波楔面反射三波点轨迹  $\chi$  角与楔角  $\alpha$  的关系 (混合物:  
 $2\text{H}_2+\text{O}_2+\text{Ar}$ ,  $P_0 = 16\text{ kPa}$ ,  $T_0 = 298\text{ K}$ )  
Fig.5 Trajectory angle  $\chi$  vs. wedge angle  $\alpha$  for detonation  
wave in mixture of  $2\text{H}_2+\text{O}_2+\text{Ar}$ ,  $P_0 = 16\text{ kPa}$ ,  $T_0 = 298\text{ K}$

爆轰波在楔面上反射过程三波点轨迹的  $\chi$  角与楔角的关系, 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. 对于本文的初始可燃混合气体, 爆轰波楔面反射的临界角  $\alpha_{\text{crit}}$  计算结果约为  $48.5^\circ$  左右, 与文献 [2] 和文献 [9] 给出的实验和理论分析的结果基本吻合, 而且恰恰位于理论分析和实验结果之间.

#### 4.3 初始压力对爆轰波楔面反射的影响

在保持楔角  $\alpha = 19.3^\circ$  不变的条件下, 分别计算了初始压力  $P_0 = 16, 20, 24$  和  $28(\text{kPa})$  等 4 种情况, 以分析混合物初始压力对爆轰波在楔面上反射的三波点轨迹  $\chi$  角的影响. 图 6 给出了三波点轨迹  $\chi$  角与初始压力的变化关系, 其中包括实验结果、CCW 理论近似结果和数值模拟的结果. 从图中的 3 种方法得到的结果可以看出, 初始压力对  $\chi$  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  $\chi$  角主要受楔角控制. 很多实验 [1] 也得到了类似的结论.

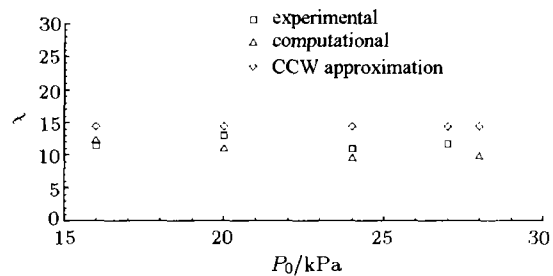


图 6 三波点轨迹角  $\chi$  与初压  $P_0$  的关系 ( $\alpha = 19.3^\circ$ )  
Fig.6 Trajectory angle  $\chi$  vs. initial pressure  $P_0$   
(wedge angle  $\alpha = 19.3^\circ$ )

本文还分别计算了初压  $P_0 = 20, 24$  和  $28(\text{kPa})$  等 3 种情况下的爆轰波楔面反射的临界角, 从目前的计算结果来看, 初始压力对爆轰波在楔面上反射的临界角也有一定的影响, 随着初压的升高, 临界角略微有所减小, 但是影响不明显. 关于这一方面的工作有待于进一步研究.

#### 4.4 混合物组分对爆轰波楔面反射的影响

为了比较可燃混合物组分对爆轰波在楔面上反射过程的影响, 在保持楔角  $\alpha = 20^\circ$  和初始压力  $P_0 = 16\text{ kPa}$  和温度  $T_0 = 298\text{ K}$  都不变的条件下, 本文简单考虑了反应组分氢和氧恰当比 ( $\text{H}_2:\text{O}_2 = 2:1$ ), 而惰性组分 Ar 的摩尔分数分别为 25%, 33.3%, 50% 和 66.7% 几种情形, 以及  $\text{Ar}:\text{O}_2 = 1:1$ . 而反应组分  $\text{H}_2$

的摩尔分数分别为 33.3%, 50%, 60% 和 66.7% 等几种情形, 计算得到的三波点轨迹  $\chi$  角见图 7. 增加 Ar 的摩尔分数实际上使得爆轰波强度减弱 (对应上述 4 种情形的爆轰波马赫数  $M_{CJ}$  分别为 5.24, 5.21, 5.1 和 4.9), 因此  $\chi$  角会逐渐增大, 而且从图 7 的变化趋势中可以看出, 越是接近低强度爆轰, Ar 摩尔分数的增加对  $\chi$  角的影响也越强烈. 相对而言, 改变  $H_2$  的摩尔分数对  $\chi$  角的影响较弱, 事实上, 只要  $H_2$  组分偏离恰当比都会使爆轰波强度减弱, 因此在本质上和增加 Ar 的摩尔分数对  $\chi$  角的影响是一样的, 只是后者的影响小一点而已.

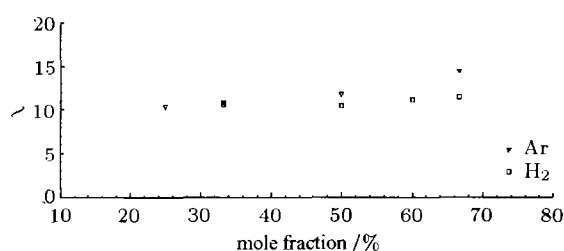


图 7 三波点轨迹角  $\chi$  与 Ar/ $H_2$  摩尔分数的关系 ( $\alpha = 20^\circ$ )  
Fig.7 Trajectory angle  $\chi$  vs. Ar/ $H_2$  mole fraction  
( $\alpha = 20^\circ$ )

## 5 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  $2H_2+O_2+Ar$  ( $P_0=16\text{ kPa}$ ,  $T_0=298\text{ K}$ ) 中的爆轰波在楔面上的反射过程进行了数值模拟, 得到以下结论:

(1) 对不同楔角的爆轰波反射过程的计算结果表明, 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  $48.5^\circ$  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, 而且计算结果恰恰位于理论分析和实验结果之间.

(2) 随着楔角的增大, 爆轰波作用在楔面上的压力也逐渐增大, 当马赫反射向正规反射转变后, 作用在楔面上的最大压力几乎成倍增加.

(3) 三波点轨迹  $\chi$  角的大小受混合物初始压力的影响不大, 而主要取决于楔角的大小.

## 参 考 文 献

- 1 Guo CM, Zhang DL, Xie W. The Mach reflection of a detonation based on soot track measurements. *Combustion and Flame*, 2001, 127: 2051~2058
- 2 Thomas GO, Williams RL. Detonation interaction with wedges and bends. *Shock Waves*, 2002, 11: 481~492
- 3 张德良, 谢巍等. 气相爆轰胞格结构和马赫反射数值模拟. 爆炸与冲击, 2001, 21(3): 161~167 (Zhang Deliang, Xie Wei, et al. Numerical simulation of cellular structures and Mach reflection of gaseous detonation waves. *Explosion and Shock Waves*. 2001, 21(3): 161~167 (in Chinese))
- 4 Jiang ZL, Takayama K, Chen YS. Dispersion conditions for non-oscillatory shock capturing schemes and its applications. *Comp Fluid Dynamics Journal*, 1995, 4: 137~150
- 5 Jiang Zonglin. On dispersion-controlled principles for non-oscillatory shock-capturing schemes. *Acta Mechanica Sinica*, 2004, 20(1): 1~15
- 6 McBride BJ, Zehe MJ, Gordon S. NASA Glenn coefficients for calculating thermodynamic properties of individual species. NASA/TP-2002-211556, 2002
- 7 Schultz E, Shepherd J. Validation of detailed reaction mechanisms for detonation simulation. Graduate Aeronautical Laboratories, California Institute of Technology, Pasadena, Ca 91125, 2000
- 8 Nettleton MA. Gaseous Detonation: Their Nature, Effects and Control. London: Chapman and Hall, 1987

## NUMERICAL SIMULATION OF GASEOUS DETONATION REFLECTION OVER WEDGES WITH A DETAILED CHEMICAL REACTION MODEL<sup>1)</sup>

Hu Zongmin Gao Yunliang Zhang Deliang Yang Guowei Jiang Zonglin

(Key Laboratory of High-Temperature Gas Dynamics, Institute of Mechanics, Chinese Academy of Sciences,  
Beijing 100080, China)

**Abstract** In this paper, the chemically reacting flow-field of detonation reflection over wedges was simulated numerically. The dispersion-controlled dissipative scheme (DCD) was adopted to solve two-dimensional Euler equations implemented with detailed chemical reaction kinetics of hydrogen-oxygen-argon mixture. The fractional step method was applied to treat the stiff problem arising from computation of chemical reaction flow. The wedge angle, initial pressure and composition of the mixture were taken into consideration respectively to evaluate their effect on the angle  $\chi$  of triple-point trajectory of detonation reflection over wedges. From the numerical results it is observed that the critical wedge angle  $\alpha_{crit}$  for the transition from Mach reflection to regular reflection of detonation wave is close to the experimental data or CCW theoretical result. The numerical results also show that the angle  $\chi$  of triple-point trajectory is mainly depend on wedge angle  $\alpha$  and is not sensitive to variation of the initial pressure  $P_0$ .

**Key words** detonation wave, wedge, reflection, detailed chemically reacting model, DCD scheme

Received 11 August 2003, revised 10 May 2004.

1) The project supported by the National Natural Science Foundation of China (10276035), the Foundation of China Academy of Engineering Physics.