

球面聚心气相爆轰波传播过程的数值研究¹⁾

常利娜^{*,†,2)} 姜宗林[†]

^{*}(北京应用物理与计算数学研究所计算物理实验室, 北京 100088)

[†](中国科学院力学研究所 LHD 实验室, 北京 100080)

摘要 应用频散可控耗散格式对球面聚心气相爆轰波的传播过程进行了数值模拟研究. 通过跟踪波阵面上压力和温度变化, 分析这些参数在爆轰波传播过程中的演变规律, 及其与几何尺度和初始条件之间的依赖关系. 研究表明, 仅在远场波面压力的变化近似只依赖于 r/R , 对称中心附近则需要考虑初始半径 R 的影响; 波面压力与初始压力的变化呈线性关系; 汇聚过程中温度升高比压力慢得多.

关键词 气相爆轰波, 球面聚心, 过爆轰, 基元反应模型, 频散可控耗散格式

中图分类号: O381 **文献标识码:** A **文章编号:** 0459-1879(2006)03-0296-06

引 言

球面爆轰波在向对称中心传播的过程中, 由于能量汇聚, 波阵面后介质压力和温度不断升高, 从理论上说, 如果忽略黏性, 当波阵面到达球对称中心时, 温度和压力趋于无限. 尽管由于黏性和真实气体效应的作用, 对称中心处的状态参数实际上为有限值, 但在中心附近仍能够获得动态超高压区. Terao 等^[1] 实验研究了球面聚心爆轰波在化学当量比的丙烷与氧气中的传播规律, 在有效半径为 500mm 的半球内, 观测到的汇聚温度高达 $10^7 \sim 10^8$ K. 该特点使聚心爆轰波在兵器技术、材料合成和人工热核反应方面有重要的应用价值. 球面聚心爆轰波本身是一种过爆轰传播过程, 伴有化学放热、气体解离、激波汇聚及其相互作用等物理现象, 在爆轰物理的研究中占有重要地位. 早在 20 世纪 40,50 年代, 聚心爆轰波问题就受到广泛关注, 研究主要集中在如何给出近似解析解. 得到近似解析解需要对问题作简化: 不考虑化学反应区细节, 假设混合气体比热比是常量等. 在此基础上, 分阶段给出问题的解析解. 例如, Zeldovich^[2] 假定爆轰波在汇聚传播的初始阶段, 偏离 CJ 爆轰不远, 给出了初始阶段的近似解; Guderley^[3] 假设对称中心附近区域, 聚心爆轰波可以看作聚心激波, 给出波阵面上物理量的增长规律. 另外, 为避免数学公式过于复杂, 解析解往往

只取变量的一阶近似, 这些简化因素在不同程度上都会影响到解的精度. 为了提高研究结果的精度并给出整个流场完整的数值结果, 需要直接应用数值方法求解这一复杂的物理化学过程, 但目前尚没有看到国内外相关研究结果的报道.

本文应用基元化学反应模型和较精确的热力学参数计算方法, 对聚心气相爆轰波进行了数值模拟, 研究其传播规律, 对 $H_2/O_2/Ar$ 混合可燃气体, 采用 9 组份和 20 个反应的基元反应模型描述化学反应机制; 热力学参数是基于 NASA Glenn 研究中心^[4] 给出的热力学数据库建立的, 单组份的定压比热是温度的多项式函数, 混合气体的定压比热是温度与组分密度的函数. 文中计算格式采用了 Jiang^[5] 给出的频散可控耗散格式 (dispersion controlled dissipative scheme, DCD). 该格式能自动捕捉激波而无须再附加人工黏性.

1 控制方程

主要考察爆轰波的传播过程, 气体黏性的作用可以忽略. 再假设爆轰波运动是球对称的, 因此应用多组份一维球对称 Euler 方程描述爆轰波运动过程

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

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

2004-09-23 收到第 1 稿, 2006-03-16 收到修改稿.

1) 国家自然科学基金资助项目 (90205027).

2) E-mail: changln@iapcm.ac.cn

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

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

其中, ρ_i 为混合气体中第 i 种组份密度, n_s 为组份数, $\rho = \sum_{i=1}^{n_s} \rho_i$ 为混合气体总密度; v 为速度; E 为单位体积总能

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

由道尔顿分压定律和组份气体状态方程可给出混合气体压力 p

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

其中, R_i 为第 i 种组份气体常数, T 为混合气体温度. $e = \rho h - p$ 是单位体积内能, 其中, h 是单位质量焓. 本文处理多组份化学反应流气体, 每一组份被当作热完全气体, 即定压比热 c_{pi} 为变量, 但仅是温度的函数, 用多项式拟合得到

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

对 $c_{pi}(T)$ 做积分, 得到组份单位质量焓 h_i

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

式 (4) 和式 (5) 系数 a_{1i}, \dots, a_{7i} 和 b_{1i} 参见文献 [4]. 混合气体的单位质量焓 h

$$h = \sum_{i=1}^{n_s} Y_i h_i, \quad Y_i = \rho_i / \rho \quad (6)$$

方程组 (1) 中, \dot{w}_i 为第 i 种组份单位体积质量生成率, 由质量作用定律得到

$$\dot{w}_i = W_i \sum_{k=1}^{NR} (v''_{ik} - v'_{ik}) \left[K_{f,k} \prod_{j=1}^{n_s} (C_j)^{v'_{jk}} - K_{b,k} \prod_{j=1}^{n_s} (C_j)^{v''_{jk}} \right] \quad (7)$$

式中 i 或 j 表示混合气体组份数, 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 种组份的摩尔质量; v'_{ik} 和 v''_{ik} 分别表示在第 k 个正向和逆向化学反应中 i 组份的化学反应计量系数; C_j 表示第 j 种组份的摩尔浓度; $K_{f,k}$ 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.

本文讨论 $H_2/O_2/Ar$ 混合气体的聚爆过程, 采用的基元反应模型包含了 9 种组份和 20 个化学反应, 其中 Ar 是掺混气体, 不参与化学反应, 反应模型参数见文献 [6].

2 数值方法

采用分裂算法将方程 (1) 的化学反应源项和对流项解耦: 即先不考虑化学反应源项, 采用频散可控耗散格式 [5] 对方程进行离散, 然后用基元反应模型处理化学反应源项. 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. 流动计算的时间步长应用 CFL 条件得到; 基元反应时间步长根据化学反应的特征时间尺度取固定值, 文中取 $10^{-4} \mu s$. 一般地, 流动时间步长约为基元反应时间步长的 10~100 倍.

采用 DCD 格式对方程 (1) 离散, 得到显式差分格式如下

$$U_j^{n+1} = U_j^n - \frac{1}{r_j^2} \frac{\Delta t}{\Delta r} \left(Q_{j+\frac{1}{2}}^n - Q_{j-\frac{1}{2}}^n \right) + \frac{\Delta t}{r_j^2} S_j \quad (8)$$

其中

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

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

$$Q_{j+\frac{1}{2}} = r_{j+\frac{1}{2}}^2 \left(F_{j+\frac{1}{2}L}^+ + F_{j+\frac{1}{2}R}^- \right)$$

$$F_{j+\frac{1}{2}L}^+ = F_j^+ + \frac{1}{2} \Phi_A^+ \min \text{mod} \left(\Delta F_{j-\frac{1}{2}}^+, \Delta F_{j+\frac{1}{2}}^+ \right)$$

$$F_{j+\frac{1}{2}R}^- = F_{j+1}^- - \frac{1}{2} \Phi_A^- \min \text{mod} \left(\Delta F_{j+\frac{1}{2}}^-, \Delta F_{j+\frac{3}{2}}^- \right)$$

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

上标 $(\cdot)^+$ 和 $(\cdot)^-$ 表示由 Steger-Warming 方法得到的数值通量分量.

本文算例采用均匀分布的计算网格, 网格间距为 0.01875 cm. 球心处采用对称边界条件, 外边界处采用固壁条件.

3 计算模型的验证

本文选取两个已知近似解析解的算例检验计算方法和物理模型: 算例 1 为平面爆轰波在直管道中的传播问题, 用于检验化学反应模型; 算例 2 为球面

爆轰波的散心传播问题, 用于检验控制方程解法. 可燃气体为掺混了 20%Ar 的化学当量比氢氧混合气体, 初压 P_0 为 0.1 MPa, 初温 T_0 为 295 K.

表 1 中, D 表示爆轰波传播速度, P_{CJ}/P_0 表示 C-J 压力与初始压力的比值, T_{CJ} 和 D_{CJ} 是 C-J 面上的压力和温度. 本文中, C-J 面位置是根据 C-J 条件 $D_{CJ} = a_{CJ} + u_{CJ}$ 确定的. 比较本文以及 Shepherd^[7] 采用 ZND 模型计算得到的相应参数. 可以看出: 两者的爆速 D 以及 CJ 温度符合得很好, 误差不超过 1%; 压力偏差略大一些, 但也不超过 6%. 上述结果表明本文计算所用的化学反应模型是合理可靠的.

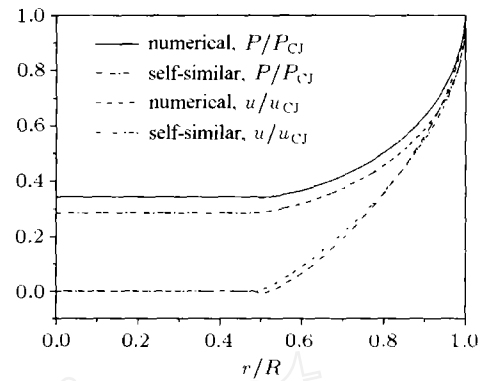
表 1 球面散心爆轰波和平面爆轰波的 CJ 参数 (掺混 20%Ar 的化学当量比氢氧混合气体)

Table 1 CJ parameters for spherical and planar C-J detonations (a stoichiometric oxyhydrogen mixture with 20% Ar dilution)

	$D/(\text{m}\cdot\text{s}^{-1})$	P_{CJ}/P_0	T_{CJ}/K	$u_{CJ}/(\text{m}\cdot\text{s}^{-1})$
spherical C-J detonation	2 249.3	17.6	3 530	955.1
planar C-J detonation	2 350.3	18.0	3 567	1 007.6
planar C-J detonation (Shepherd's)	2 357.3	19.1	3 594	

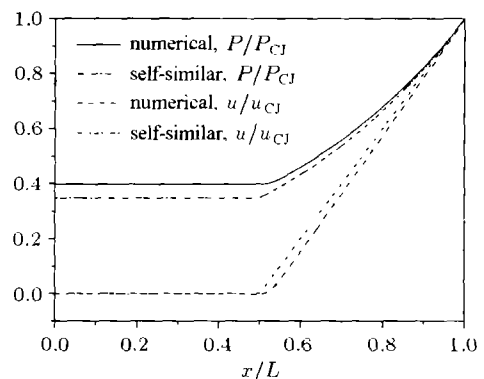
与平面爆轰波类似, 发散球面爆轰波在传播了一定距离之后, 也能够以稳定速度自持传播, 并且不同时刻压力、速度等参数的分布曲线是自相似的, 形成球面 C-J 爆轰波. 比较球面和平面 C-J 爆轰波的计算结果可知, 两者的爆轰波传播速度以及 C-J 面上的参数值基本相符, 只是球面 C-J 爆轰波的相应参数值都略有下降. 原因是球面爆轰波在传播过程中, 几何扩散效应导致波后流动区域不断扩大, 与平面爆轰波相比, 其波后的 Taylor 稀疏波更强一些, 图 1 所给的波后参数分布也证实了这一点, 比较图 1(a) 和图 1(b), 球面爆轰波后的压力和速度比平面爆轰波下降更快一些, 从而减弱了前导激波强度.

不考虑化学反应区结构, 假设爆轰波后产物运动是一维等熵的, 而且爆轰波阵面满足 C-J 条件, 可求得以上问题的自相似解^[8,9]. 图 1 给出了自相似解与本文计算结果的比较, 其中图 1(a) 是球面散心爆轰, 图 1(b) 是平面爆轰. 图中虚线表示理想条件下的自相似解, 实线表示本文数值解. 比较可见:



(a) 球面 C-J 爆轰波

(a) Spherical C-J detonation



(b) 平面 C-J 爆轰波

(b) Planar C-J detonation

图 1 本文的计算结果与自相似解比较

Fig.1 Comparison between numerical results and the self-similar solution

数值解与自相似解反映出的参数变化趋势是一致的, 但具体数值有一些差别. 二者的速度值符合得较好, 但是数值解的压力略高于相似解. 原因是 CJ 平面后化学反应还没有完全结束, 仍释放出小部分反应能, 数值解中考虑到了这一反应能, 自相似解却假定 CJ 面后没有反应能的进一步释放. 另外, 自相似解是作了简化后得到的, 这些因素使得两种结果的绝对数值有一些差异.

4 计算结果分析

本文重点研究了球面聚心爆轰波的传播过程、波阵面热力学参数变化规律及几何尺度和初始条件的影响. 所研究问题的初场如图 2 所示. $t = 0$ 时刻, $r < R$ 的区域内充满掺混了 25%Ar 的化学当量

比氢氧混合气体，其压力为 p_0 、温度为 T_0 ； $r > R$ 的区域为起爆区，考虑到聚爆初期，面积收缩效应不显著，因此为避免起爆过程对聚心爆轰传播过程的影响，本文以稳定传播后的平面爆轰波曲线作为 $r > R$ 区域内参数分布的初始曲线。平面爆轰波的波阵面位于 $r = R$ 处，波前条件与 $r < R$ 区域内氢氧混合气体的初始条件相同，平面爆轰波的另一端设为固壁，固壁与波阵面之间的距离为 $L = 25$ cm。

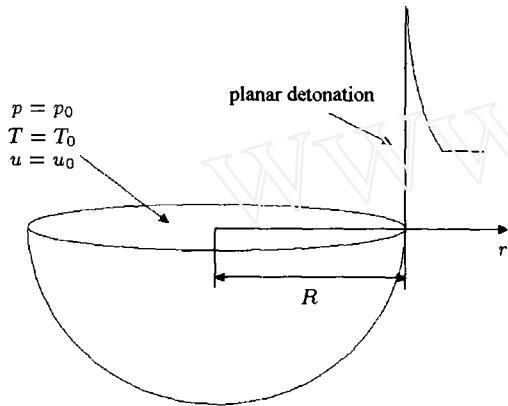


图 2 球面聚心爆轰计算域及初始条件示意图

Fig.2 Scheme for computational domain and initial conditions for spherically imploding detonations

4.1 聚心爆轰波传播过程

初始半径 $R = 15$ cm, $P_0 = 0.02$ MPa, $T_0 = 298$ K. 图 3 给出了聚心爆轰波传播过程中各个时刻的压力 (图 3(a)) 和温度 (图 3(b)) 分布. 图 3 最大计算时间的尺度为 $58\mu\text{s}$, 此时爆轰波阵面传播至 $r = 0.3$ cm ($r/R = 0.02$) 处, 波阵面附近的温度已经超过了 4500 K, 随着波阵面的传播, 温度将进一步急剧升高, 本文所用的热力学模型将不再适用, 因此未继续计算. 图 3 表明: 爆轰波向球心传播的过程中, 波阵面附近的压力和温度不断提高, 尤其当 $t > 56\mu\text{s}$ 后, 压力和温度急剧增加. $t = 56\mu\text{s}$ 时, 波阵面传播至 $r/R = 0.08$ 处, 波阵面附近温度为 4109 K, 压力为 3.33 MPa; $2\mu\text{s}$ 之后, 即 $t = 58\mu\text{s}$ 时, 波阵面传播至 $r/R = 0.02$ 处, 波阵面附近温度为 4860 K, 增加了 751 K, 约 0.18 倍; 压力为 10.54 MPa, 增加了 2.17 倍. 与压力升高相比, 温度升高要慢一些. 原因是随着温度的升高, 气体解离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. 由图 3 所示的变化趋势可以看出, 对称中心附近 ($r/R < 0.08$) 区域将出现高温高压区.

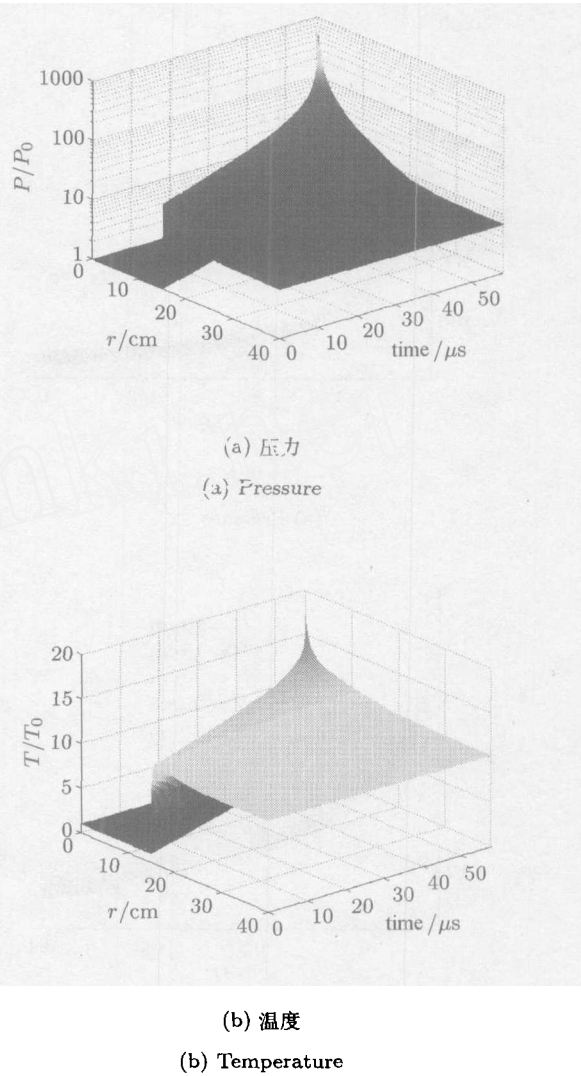


图 3 聚心爆轰波传播过程中参数分布随时间的变化

Fig.3 Time evolution of parameter variation with radius during implosion

4.2 球面半径影响

图 4 给出了 R 分别为 10 cm, 15 cm, 20 cm, 25 cm 和 30 cm 时, $P_{\max}(r)/P_0$ 和 $T_{\max}(r)/T_0$ 随 r/R 的变化曲线, 其中 P_0 取 0.02 MPa, T_0 取 298 K; $P_{\max}(r)$ 和 $T_{\max}(r)$ 分别表示在爆轰波聚心过程中半径 r 处达到的最大压力和最高温度.

由图 4 可见, 对应不同初始半径, P_{\max}/P_0 和 T_{\max}/T_0 的分布具有基本相同的形状, 具体数值差别不大. 表 2 列出了 $R = 15$ cm 和 $R = 30$ cm 时, 不同半径处的参数值. 从表 2 可以看出, R 从 15 cm 增加至 30 cm, P_{\max}/P_0 的最大差别不超过 15%, T_{\max}/T_0 的最大差别不超过 2%. 但是这一差别随着 r/R 的减小会有所增加.

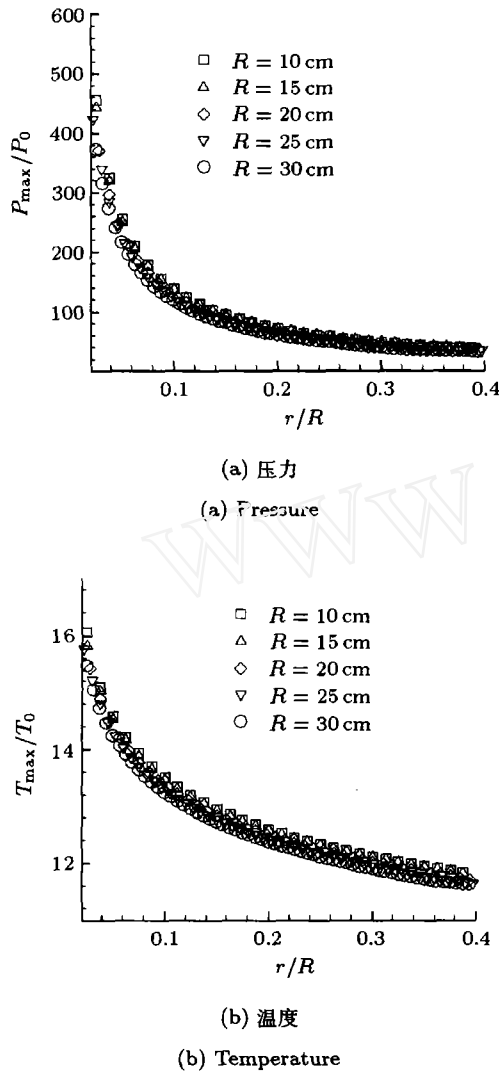


图 4 对应于不同初始球面半径, 爆轰波传播过程中参数最大值随径向位置的分布

Fig.4 Relation between maximum values and radial distance during implosion with various initial radius

表 2 球面聚心爆轰波传播过程中不同半径处的最大压力和最高温度

Table 2 Maximum pressure and temperature at different radial distance during implosion

r/R	P_{max}/P_0			T_{max}/T_0		
	0.4	0.1	0.02	0.4	0.1	0.02
$R=15\text{ cm}$	37.416 2	136.218	526.915	11.787 8	13.469 2	16.308 8
$R=30\text{ cm}$	34.462	118.254	449.539	11.609 6	13.243 9	16.034 5

4.3 初始压力影响

以初始球面半径 30 cm 为例, 本文考察了初压影响. 图 5(a) 和图 5(b) 分别给出了 P_0 为 0.02 MPa, 0.04 MPa, 0.06 MPa, 0.08 MPa 和 0.1 MPa 时, P_{max}/P_0 以及 T_{max}/T_0 随 r/R 的变化曲线. 图 5(a)

表明, 对应于不同 P_0 , P_{max}/P_0 的分布曲线是基本重合的, 这表明最大压力随着初压成正比增加. 图 5(b) 表明, 随着始压增加, T_{max}/T_0 也会相应提高, 但远不如压力升高显著. 初压从 0.02 MPa 升高至 0.1 MPa, 在 $r/R = 0.02$ 处的 T_{max} 从 4 778 K 增加到 5 448 K, 仅升高了 670 K.

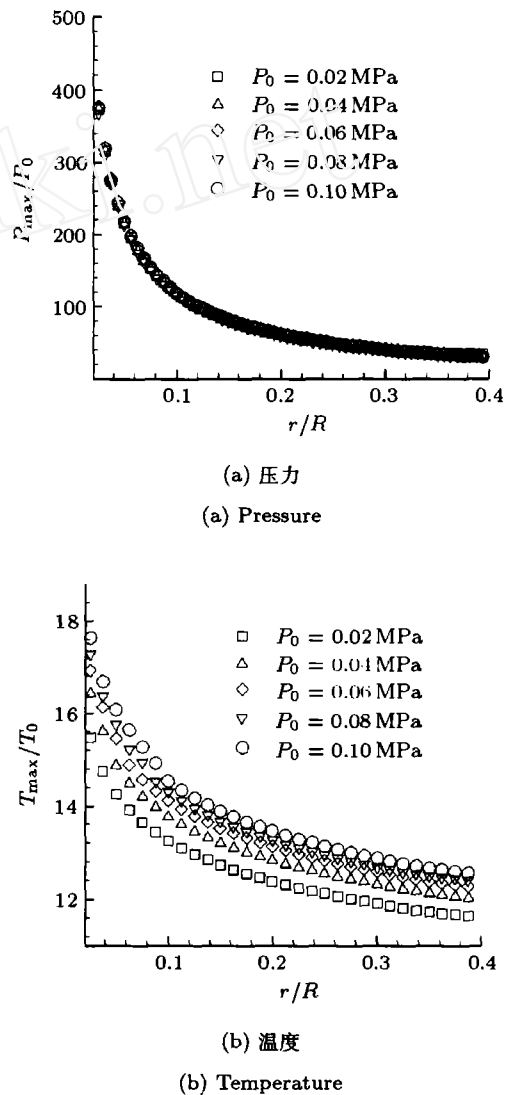


图 5 对应于不同初始压力, 爆轰波传播过程中参数最大值随径向位置的分布

Fig.5 Relation between maximum values and radial distance during implosion with various initial pressures

5 结 论

(1) 聚心爆轰波向球心传播过程中, 在对称中心附近 $r/R < 0.08$ 的区域, 随着阵波面半径减少, 压力急剧升高, 温度也提高较快, 产生一瞬态高温高压区.

(2) 随着波阵面半径减小, 聚心爆轰波面附近的温度升高要比压力升高慢得多。原因是: 随着温度升高, 离解反应开始变得越来越活跃, 吸收更多热量, 从而影响了温度的进一步升高。

(3) 给定初始条件, 对不同的初始半径 R , 最大压力和最高温度随着 r/R 改变有相同的变化趋势。在给定的 r/R 处, 具体数值有一定的偏差, 随着 r/R 的减小, 偏差逐渐增大。

(4) 增大初始压力, 聚心爆轰波传播过程中不同半径处所能达到的最大压力线性增大; 最高温度的提高较压力慢。

参 考 文 献

- 1 Terao K, Akaba H, Shirahishi H. Spherically imploding detonation waves initiated by a two-step divergent detonation. *Shock Waves*, 1995, 4: 187~193
- 2 Barenblatt GI, Zeldovich Ya B. Self-similar solutions as intermediate asymptotics. *Annu Rev Fluid Mech*, 1972, 4: 285~312
- 3 Guderley G. Powerful spherical and cylindrical compression shocks in the neighborhood of the center of the sphere and of the cylinder axis. *Luftfahrtforsch*, 1942, 19: 302~312
- 4 Bonnie J. McBride, Michael J. Zehe, Sanford Gordon. NASA Glenn Coefficients for Calculating Thermodynamic Properties of Individual Species, National Aeronautics and Space Administration Glenn Research Center Cleveland, Ohio, NASA/TP—2002-211556, 2002
- 5 Jiang Zonglin, Takayama Kazuyoshi, Chen Yaosong. Dispersion conditions for non-oscillatory shock capturing schemes and its applications. *Computational Fluid Dynamics J*, 1995, 4(2): 137~150
- 6 常利娜, 张德良, 胡宗民等. 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, 2005, 22(3): 189~196 (Chang Lina, Zhang Deliang, Hu Zongmin, et al. A general form of the dispersion-controlled dissipative scheme and its application in detonation problem. *Chinese Journal of Computational Physics*, 2005, 22(3): 189~196)
- 7 Schultz E, Shepherd J. Validation of Detailed Reaction Mechanisms for Detonation Simulation, Graduate Aeronautical Laboratories, California Institute of Technology, Pasadena, Ca 91125, Explosion Dynamics Laboratory Report FM99-5, 2000
- 8 李维新. 一维不定常流与冲击波. 北京: 国防工业出版社, 2003. 466~467 (Li Weixin. One Dimensional Unsteady Flow and Shock Waves. Beijing: National Defence Industry Press, 2003. 466~467 (in Chinese))
- 9 Michael A. Nettleton, Gaseous Detonations: Their Nature, Effects and Control. New York: Chapman and Hall Ltd, 1987. 37~40

NUMERICAL INVESTIGATIONS ON PROPAGATION OF SPHERICALLY IMPLoding GAS DETONATION¹⁾

Chang Lina^{*,†,2)} Jiang Zonglin[†]

^{*}(National Key Laboratory of Computational Physics, Institute of Applied Physics and Computational Mathematics, Beijing 100088, China)

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

Abstract This paper reports numerical simulations of the propagation of spherically imploding detonations in H_2/O_2 mixture. One-dimensional Euler equations in spherical coordinates were solved with the dispersion controlled dissipative (DCD) scheme, coupled to an elementary chemical reaction model. The pressure and temperature behind the detonation wave were traced to show their change tendency. Its dependency on the geometrical size and initial conditions were also numerically examined. It is found that the variation of front pressure is representable in terms of approximate functions of r/R only outside the central zone. Linear relations exist between the front and initial pressure. The front temperature increases much slower than the pressure during implosion.

Key words gas detonation, spherically imploding, overdriven, elementary reaction model, dispersion controlled dissipative scheme

Received 23 September 2004, revised 16 March 2006.

1) The project supported by the National Natural Science Foundation of China (90205027)

2) E-mail: changln@iapcm.ac.cn