

[文章编号] 1001-246X(2004)05-0408-07

爆轰波在弯管内传播过程数值分析

胡宗民, 牟乾辉, 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] 应用基元反应模型和频散可控耗散格式 (DCD) 对氢氧爆轰波在弯管内的传播过程进行了数值模拟. 计算中氢氧混合物化学反应采用了 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. 计算结果表明, 在弯管小曲率半径壁面附近, 由于膨胀稀疏作用, 爆轰波强度减弱, 在局部出现前导激波与放热反应区的解藕以及二次起爆现象; 在弯管大曲率半径壁面上爆轰波在马赫反射和正规反射之间相互转变, 使爆轰波加强. 弯管内的爆轰现象与弯管曲率半径有关.

[关键词] 爆轰波; 弯管; 基元反应模型; DCD 格式

[中图分类号] O357 [文献标识码] A

0 引言

爆轰波是一种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. 在输送可燃气体的管道或者化工厂的反应气体管道系统中, 经常需要一些弯管结构, 在安全评估时需要考虑意外事故条件下爆轰波和弯管的相互作用. 爆轰波在弯管内的传播过程中, 由于在小曲率半径壁面附近的稀疏波以及在大曲率半径壁面上压缩波对爆轰波的作用不同, 会分别发生局部熄爆和过驱等爆轰物理现象. Thomas 等人实验研究了气相爆轰波与楔体、弯管等约束的相互作用^[1], 详细阐述了爆轰波传播过程的横波等细微结构及其对爆轰波传播特性的影响.

描述爆轰波的简化物理模型主要有 C-J 模型和 ZND 模型, 前者没有考虑化学反应机制, 而后者则引入了有限速率反应机制. 描述爆轰波后化学反应机制的模型主要有单步反应模型或分别考虑了诱导反应和放热反应的二步反应模型, 以及基元反应模型. 由于考虑了详细的化学反应动力学过程, 基元反应模型能够更好地描述爆轰波传播特性, 但是也带来了刚性问题, 即化学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方法有时间算子分裂算法、点隐法和全隐法. 随着计算机性能的迅速提高, 人们已经开始应用基元反应来模拟爆轰过程, 文[2]应用 9 组分 19 反应模型对氢氧混合气体 ($2\text{H}_2 + \text{O}_2 + 7\text{Ar}$, $P_0 = 6.67 \text{ kPa}$) 的爆轰胞格进行了数值分析.

本文应用氢氧 8 组分 20 反应模型和频散可控耗散格式 (DCD), 对爆轰波在弯管内的传播过程进行了数值模拟, 并对弯管中发生的马赫反射和正规反射之间的相互转变、爆轰波退化熄爆以及二次起爆等爆轰物理现象进行了分析和探讨.

1 物理和数学模型

1.1 物理问题

如图 1 所示, 在一弯管内充满可燃气体混合物, 左端设一个起爆源. 本文利用高温高压点火区直接点燃可燃混合气体, 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. 爆轰波在弯管内传播, 在

[收稿日期] 2003 - 08 - 18; [修回日期] 2003 - 12 - 24

[基金项目] 国家自然科学基金和中国工程物理研究院(10276035)资助项目

[作者简介] 胡宗民(1970 -), 男, 山东日照, 博士生, 从事化学反应流数值模拟以及超声速混合增强方面的研究, 海淀区北四环西路 15 号, 100080.

上壁面(小曲率半径壁面)上由于膨胀稀疏作用,爆轰波强度有所衰减,甚至熄爆;而在下壁面(大曲率半径壁面)上,发生马赫反射,爆轰波加强,使得爆轰波传播速度加快,进而在弯管下游形成新的平面波阵面(见图 1)。

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,忽略热传导和粘性作用的条件下二维平面坐标系的 Euler 方程组为

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial F}{\partial x} + \frac{\partial G}{\partial y} = S. \tag{1}$$

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 种反应组分组成的预混气体来说,它们为

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

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 $\rho = \sum_{i=1}^{ns} \rho_i = \sum_{i=1}^{ns} C_i \rho_i$, 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, $E = e + (u^2 + v^2)/2$, 单位体积内能 $e = h - p$, 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[3]中的多项式拟合方法给出, 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, $p = \sum_{i=1}^{ns} p_i = \sum_{i=1}^{ns} C_i R_i T$, 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对温度的拟合多项式为

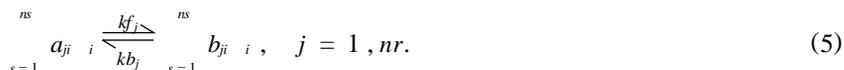
$$\frac{h_i}{R_i T} = - a_{1i} T^{-2} + a_{2i} T^{-1} \ln T + a_{3i} + \frac{a_{4i}}{2} T + \frac{a_{5i}}{3} T^2 + \frac{a_{6i}}{4} T^3 + \frac{a_{7i}}{5} T^4 + \frac{b_{1i}}{T}, \tag{3}$$

$$\frac{C_{p_i}}{R_i} = a_{1i} T^{-2} + a_{2i} T^{-1} + a_{3i} + a_{4i} T + a_{5i} T^2 + a_{6i} T^3 + a_{7i} T^4, \tag{4}$$

其中各拟合常数及温度适应范围见文[3].

1.3 基元化学反应模型

对于氢氧预混气体的爆轰反应过程,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



式中 a_{ji}, b_{ji}, 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, k_f, k_b 分别为正、逆反应速率常数, k_f 由 Arrhenius 公式给出,而 k_b 根据反应平衡常数 ke_j 和正反应速率常数 k_f 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,

$$k_f = C_j T^{n_j} \exp[- Ea_j / RT]. \tag{6}$$

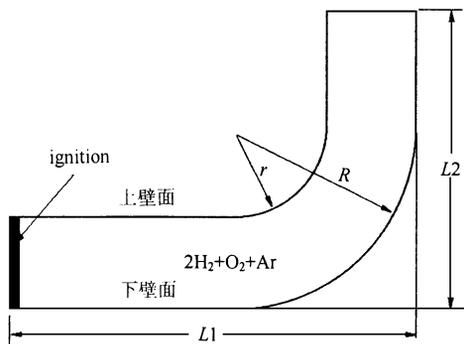


图 1 爆轰波在弯管传播计算区域

Fig. 1 Computational domain for a bend

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

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

其中 M_i , $[X_i]$, b_{ji} 分别为为第 i 组分的摩尔质量、摩尔浓度和第 j 反应中组分 i 的 3 体效应系数. 基元化学反应参数见表 1.

1.4 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(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

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

采用牛顿迭代法计算时需要迭代函数对温度的偏导数,

$$F = \sum_{i=1}^{ns} i C_p i - \sum_{i=1}^{ns} i R_i = \sum_{i=1}^{ns} C_i C_p i - \sum_{i=1}^{ns} C_i R_i = (C_p - R), \quad (8b)$$

其中 C_p, 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 $C_p > R$, 即 $F > 0$, 函数 F 为单调递增函数,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).

1.5 数值方法

Jiang 等人在 1995 年提出频散可控格式(DCS)^[4],该格式应用了 Steger-Warming 的矢通量分裂技术,从修正方程的色散控制出发构造差分格式,无需人为地附加粘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.后来 Jiang 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.Jiang 在文[5]中利用流场显示技术对该格式进行了验证,对比结果是非常好的.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

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

式中

$$\begin{cases} \bar{F}_{j+1/2}^n = F_{j+1/2L,k}^+ + F_{j+1/2R,k}^-, & \begin{cases} F_{j+1/2L,k}^+ = F_{j,k}^+ + \frac{1}{2} \bar{A} \min \text{mod}(F_{j-1/2,k}^+, F_{j+1/2,k}^+), \\ F_{j+1/2R,k}^- = F_{j+1,k}^- - \frac{1}{2} \bar{A} \min \text{mod}(F_{j+1/2,k}^-, F_{j+3/2,k}^-), \end{cases} \\ \bar{G}_{j,k+1/2}^n = G_{j,k+1/2L}^+ + G_{j,k+1/2R}^-, & \begin{cases} G_{j,k+1/2L}^+ = G_{j,k}^+ + \frac{1}{2} \bar{B} \min \text{mod}(G_{j,k-1/2}^+, G_{j,k+1/2}^+) \\ G_{j,k+1/2R}^- = G_{j,k+1}^- - \frac{1}{2} \bar{B} \min \text{mod}(G_{j,k+1/2}^-, G_{j,k+3/2}^-), \end{cases} \end{cases}$$

表 1 H₂ + O₂ 8 组分 20 反应模型

Table 1 Detailed reaction model for mixture of H₂ and O₂

基元反应式	$C_j/[\text{mole cm}^{-3}]^{1-\sum_{i=1}^{ns} a_{ji}} \text{s}^{-1}$	n	$E_a/\text{cal mole}^{-1}$
1 H ₂ + O ₂ = 2OH	1.70 × 10 ¹³	0.0	47 780
2 OH + H ₂ = H ₂ O + H	1.17 × 10 ⁹	1.3	3 626
3 O + OH = O ₂ + H	4.00 × 10 ¹⁴	-0.5	0
4 O + H ₂ = OH + H	5.06 × 10 ⁴	2.7	6 290
5 H + O ₂ + M = HO ₂ + M	3.61 × 10 ¹⁷	-0.7	0
6 OH + HO ₂ = H ₂ O + O ₂	7.50 × 10 ¹²	0.0	0
7 H + HO ₂ = 2OH	1.40 × 10 ¹⁴	0.0	1 073
8 O + HO ₂ = O ₂ + OH	1.40 × 10 ¹³	0.0	1 073
9 2OH = O + H ₂ O	6.00 × 10 ⁸	1.3	0
10 H + H + M = H ₂ + M	1.00 × 10 ¹⁸	-1.0	0
11 H + H + H ₂ = H ₂ + H ₂	9.20 × 10 ¹⁶	-0.6	0
12 H + H + H ₂ O = H ₂ + H ₂ O	6.00 × 10 ¹⁹	-1.3	0
13 H + OH + M = H ₂ O + M	1.60 × 10 ²²	-2.0	0
14 H + O + M = OH + M	6.2 × 10 ¹⁶	-0.6	0
15 O + O + M = O ₂ + M	1.89 × 10 ¹³	0.0	-1 788
16 H + HO ₂ = H ₂ + O ₂	1.25 × 10 ¹³	0.0	0
17 HO ₂ + HO ₂ = H ₂ O ₂ + O ₂	2.00 × 10 ¹²	0.0	0
18 H ₂ O ₂ + M = 2OH + M	1.30 × 10 ¹⁷	0.0	45 500
19 H ₂ O ₂ + H = HO ₂ + H ₂	1.60 × 10 ¹²	0.0	3 800
20 H ₂ O ₂ + OH = H ₂ O + HO ₂	1.00 × 10 ¹³	0.0	1 800

三体效应系数:(5) H₂O = 18.6, H₂ = 2.86; (10) H₂O = 0, H₂ = 0; (13) H₂O = 5.0; (14) H₂O = 5.0; 其它为 1.0.

$$\begin{cases} F_{j+1/2,k}^{\pm} = F_{j+1,k}^{\pm} - F_{j,k}^{\pm}, & \begin{cases} F^{\pm} = A^{\pm} U, \\ G^{\pm} = B^{\pm} U, \end{cases} & \begin{cases} \lambda_A^{\pm} = I \mp \lambda_A^{\pm}, \\ \lambda_B^{\pm} = I \mp \lambda_B^{\pm}, \end{cases} \\ G_{j,k+1/2}^{\pm} = G_{j,k+1}^{\pm} - G_{j,k}^{\pm} \end{cases}$$

其中 Jacobian 矩阵 $A = \partial F / \partial U, B = \partial G / \partial U, I$ 为单位矩阵, $\lambda = t / r, \lambda_A$ 和 λ_B 分别为 A 和 B 的特征值构成的对角阵,上标 $(\cdot)^+$ 和 $(\cdot)^-$ 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,考虑多组分混合物时的 Steger-Warming 通量分裂却较少见到,以下给出其具体形式.

在笛卡尔坐标系 (x, y) 下,通量 F 的 Steger-Warming 的矢通量分裂形式为

$$F^{\pm} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} C_1 [2(\lambda - 1) u_1^{\pm} + \lambda_{ns+2}^{\pm} + \lambda_{ns+3}^{\pm}] \\ C_2 [2(\lambda - 1) u_1^{\pm} + \lambda_{ns+2}^{\pm} + \lambda_{ns+3}^{\pm}] \\ \dots \\ C_{ns} [2(\lambda - 1) u_1^{\pm} + \lambda_{ns+2}^{\pm} + \lambda_{ns+3}^{\pm}] \\ u [2(\lambda - 1) u_1^{\pm}] + (u - a) \lambda_{ns+2}^{\pm} + (u + a) \lambda_{ns+3}^{\pm} \\ v [2(\lambda - 1) u_1^{\pm} + \lambda_{ns+2}^{\pm} + \lambda_{ns+3}^{\pm}] \\ 2[(\lambda - 1) H - a^2] \lambda_1^{\pm} + (H - au) \lambda_{ns+2}^{\pm} + (H + au) \lambda_{ns+3}^{\pm} \end{bmatrix}, \quad (10)$$

其中 $\lambda_i^{\pm} = (u_i \pm \sqrt{u_i^2 + v^2}) / 2, i = 1, 2, \dots, ns + 3$, 为 Steger-Warming 分裂后的特征值, a 为一小量. Jacobian 矩阵 A 的 $ns + 3$ 个特征值分别为

$$\{\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_{ns+3}\} = \{u, \dots, u, u - a, u + a\},$$

其中冻结声速 $a = \sqrt{p/\rho}$, 而混合物的比热比可以写为 $\gamma = \frac{\sum_{i=1}^{ns} C_i C_{p_i}}{\sum_{i=1}^{ns} C_i C_{p_i} - \sum_{i=1}^{ns} C_i R_i}$. (10) 式中总

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

在一般曲线坐标系 (ξ, η) 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 (ξ, η) 和 (x, y) 之间存在关于守恒量、通量和反应生成项的变换关系 $\tilde{U} = U / J, \tilde{F} = (\xi F + \eta G) / J, \tilde{G} = (\eta F + \xi G) / J, \tilde{S} = S / J$, 其中 ξ, η, x, y, J 为坐标变换关系以及变换 Jacobian. 矩阵 $\tilde{A} = \partial \tilde{F} / \partial \tilde{U}$, 其 $ns + 3$ 个特征值为

$$\{\tilde{\lambda}_1, \tilde{\lambda}_2, \dots, \tilde{\lambda}_{ns+3}\} = \{\tilde{u}, \dots, \tilde{u}, -a, +a\},$$

其中 $\tilde{u} = uk_x + vk_y, k_x = x / J, k_y = y / J, \tilde{\lambda} = \sqrt{\tilde{u}^2 + v^2}$, 通量 \tilde{F} 的 Steger-Warming 的矢通量分裂形式为

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

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

由于化学反应的特征时间尺度比流动小得多,数值计算时通常出现刚性问题,本文采用时间算子分裂的方法来处理,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,然后迭代求解温度.

2 数值结果与分析

数值计算区域见图 1,计算中左端和上、下壁面边界应用了滑移边界条件,而在管出口则为超声速出口条件.采用了结构化贴体网格.在初始时刻整个区域充满可燃混合气体 $2\text{H}_2 + \text{O}_2 + \text{Ar}$ ($P_0 = 16 \text{ kPa}$, $T_0 = 298 \text{ K}$),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 $P_{\text{ign}} = 18 P_0$, $T_{\text{ign}} = 11 T_0$,在此条件下可以在较短的时间内完成爆燃转爆轰的 DDT 过程,形成稳定传播的爆轰波.

2.1 数值方法验证

图 2 给出了在直管中爆轰波的直接起爆并形成稳定爆轰的过程.在 $t = 6.5 \mu\text{s}$ 时刻,爆轰迅速建立,但是还不稳定,爆压缓慢增长,并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 $D = 2257 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$,这和 C-J 爆速 $D_{\text{CJ}} = 2240 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$ 是很接近的,表明计算结果是合理的.本算例在一定程度上已作为验证爆轰计算方法的一个简单范例.

2.2 爆轰波在弯管内的传播过程

首先计算的弯管尺寸为大小圆弧半径 $R = 80 \text{ mm}$, $r = 40 \text{ mm}$, $L_1 = 180 \text{ mm}$, $L_2 = 130 \text{ mm}$,格点数为 1201×101 .

图 3 为爆轰波在弯管内传播过程不同时刻沿上下壁面上的压力分布.计算结果表明,在 $t = 52.7 \mu\text{s}$ 时爆轰波阵面已经进入弯管,爆轰波在弯管内传播过程中沿上、下壁面有所不同.从图中可以看到在上壁面附近由于截面膨胀,波阵面后稀疏波的作用使爆轰波强度逐渐衰减,壁面压力开始减小;而在下壁面则由于截面压缩而逐步发生马赫反射,壁面压力在逐渐提高.

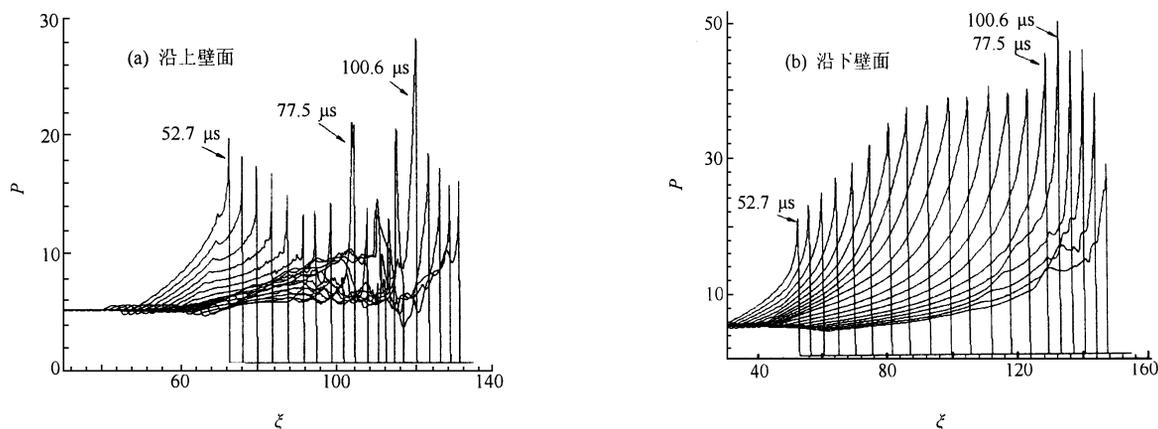


图 3 不同时刻沿上、下壁面压力分布

Fig. 3 Sequential pressure distributions along upper (a) and lower (b) wall

图 4 给出了此过程的压力分布曲线以及压力和氢气密度分布云图,亮度高处对应着较高的压力或密度值.由图 3(a)和图 4(a)可以看出,爆轰波由直管进入到弯管后的一段时间内,沿上壁面爆轰波强度虽然有所衰减,但是还保持着化学反应区与前导激波的耦合结构,此后,由于稀疏波的作用越来越强,使得在上壁面附近出现局部的化学反应和前导激波的解耦分离(图 3(a)中 $52.7 \mu\text{s}$ 到 $77.5 \mu\text{s}$ 之间).从图 4(b)氢气密度分布图中我们看到的亮点对应着局部解耦区域,数值计算结果表明在该亮点附近组分 H_2 被前导激波压缩,但是并没有进行反应,在解耦区内只有反应物 H_2 与 O_2 和稀释气体 Ar ,没有生成物.

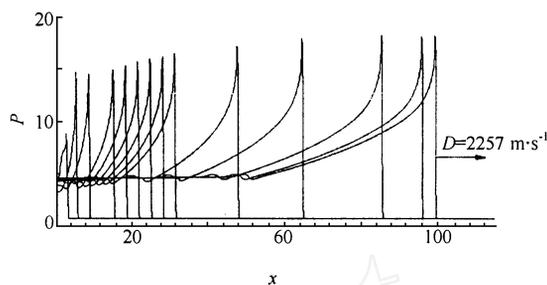


图 2 爆轰的起爆过程(图中 P 为无量纲压力)

Fig. 2 The detonation setup process in the numerical simulation

由于解耦区的激波没有能量支持,因而落后于与其相连的尚未解耦的爆轰波,在二者衔接点附近,爆轰波局部阵面曲率变大(见图 4(b)),由于爆轰波的强烈作用,它压迫解耦区并使此区内的未反应的可燃气体再次起爆,称为二次爆轰.二次爆轰波阵面向壁面运动并与之相撞,得到在图 3(a)中 $t = 77.5 \mu\text{s}$ 和 $100.6 \mu\text{s}$ 两时刻对应的高压力脉冲, P_{max}/P_0 分别为 26 和 36. 正是因为局部二次爆轰和波阵面与壁面的碰撞产生的局部高温高压区诱导了剧烈的放热反应,才得以维持爆轰波的强度使其能够沿弯管上壁面继续传播.

2.3 弯管几何尺寸的影响

实验表明,弯管的几何尺寸对爆轰波的传播特性影响很大^[6]. 为了考察弯管尺寸对爆轰波在弯管内传播过程的影响,本文计算了小尺寸弯管的情形,其尺寸为:大小圆弧半径分别为 $R = 40 \text{ mm}$, $r = 20 \text{ mm}$, $L_1 = 140 \text{ mm}$, $L_2 = 90 \text{ mm}$. 计算用到的格点数为 1001×51 ,其它计算条件同上.

计算得到上、下壁面上的压力分布见图 5,组分 H_2 密度

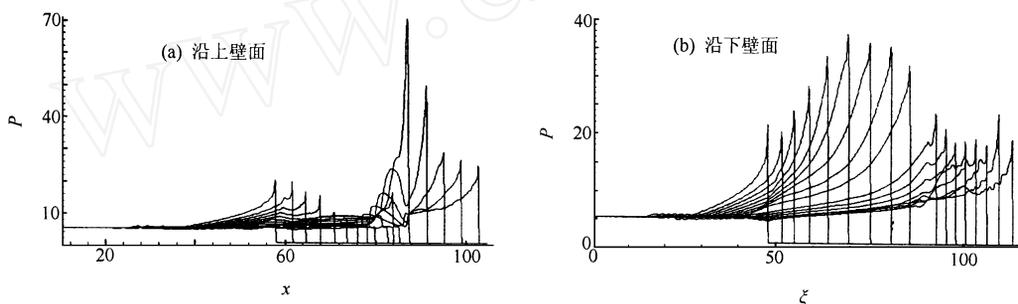


图 5 不同时刻沿上、下壁面压力分布

Fig. 5 Sequential pressure distributions along upper and lower wall

分布见图 6. 计算结果表明,由于弯管尺寸的减小,下壁面的反射波和马赫杆已经影响到上壁面的爆轰反应.

从图 5 压力曲线可以看出,由于弯管曲率半径小,爆轰波阵面在上壁面附近受到强烈的稀疏波作用,爆轰波很快衰减退化,反应区与前导激波解耦,出现大面积的熄爆区,在图 6 中也可以看到在前导激波后的高亮度的解耦区内 H_2 未发生反应. 沿着下壁面,爆轰波形成马赫反射,马赫杆加速并追上爆轰波阵面,使得爆轰波得到强化,形成过驱爆轰波,并在离开弯管段后超过前导波阵面. 从图 6(a) ~ (c) 可以看出局部解耦区从上壁面向下壁面扩展,但是一旦在下壁面形成的过驱爆轰和上壁面解耦区相遇(图 6(d)),解耦区内的未反应气体被再次引爆(图 6(e)). 由于解耦区的可燃气体在前导激波作用下预压缩,温度和压力升高,加上过驱爆轰的压力和温度也远比 C-J 爆压和温度高,二者相遇后产生的二次爆轰波将在上壁面反射,反射后的压力会很大, P_{max}/P_0 约为 88, 远比下壁面的极值压力高很多. 直到 $t = 90 \mu\text{s}$ 左右,上壁面附近的二次爆轰波追上前面的爆轰波,使整个爆轰波阵面趋于平面波阵面,如图 6(f) 所示.

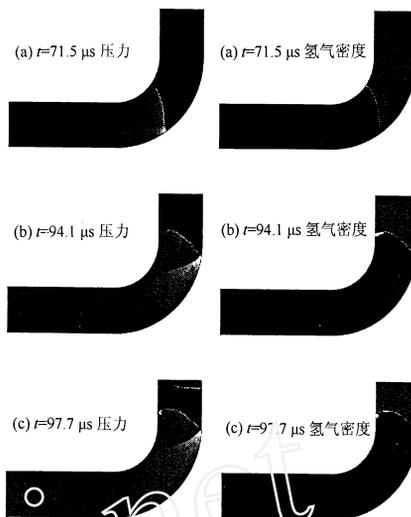


图 4 爆轰波在弯管内传播过程压力和 H_2 密度分布

Fig. 4 Distributions of pressure and H_2 density during detonation propagating through a bend pipe

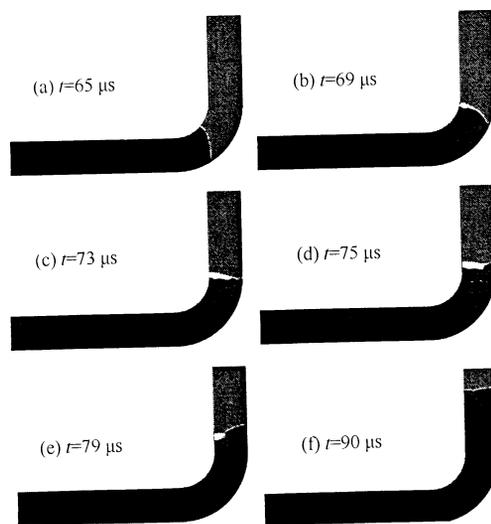


图 6 爆轰波在弯管内传播过程 H_2 密度分布

Fig. 6 Distribution of H_2 density during detonation wave propagating through a bend pipe

3 结论

本文应用基元反应模型和频散可控耗散格式(DCD)对气相爆轰波在弯管内的传播过程进行了数值模拟. 计算表明爆轰波在弯管内传播过程会在上壁面附近出现局部熄爆, 其传播特性与弯管的曲率半径有关, 曲率半径越小, 稀疏波的作用越强, 熄爆越严重. 在爆轰波沿下壁面的马赫反射的作用下, 熄爆区域可能发生二次起爆, 二次起爆后作用在壁面上的压力很高, 对管道的破坏作用更强. 而在下壁面则发生马赫反射与正规反射之间的相互转变. 这些对爆轰波传播机理研究以及爆炸灾难预报都有一定的指导作用.

[参 考 文 献]

- [1] Thomas G O , Williams R L. Detonation interaction with wedges and bends [J]. Shock Waves , 2002 , 11 : 481 - 492.
- [2] 胡湘渝. 气相爆轰波结构研究[R]. 博士后工作报告, 中国科学院力学研究所. 2001. 11.
- [3] McBride B J , Zehe M J , Sanford Gordon. NASA Genn coefficients for calculating thermodynamic properties of individual species [R]. NASA/TP-2002-211556 ,2002.
- [4] Jiang Z L , Takayama K , Chen Y S. Dispersion conditions for non-oscillatory shock capturing schemes and its applications [J]. Comp Fluid Dynamics Journal , 1995 , 4 : 137 - 150.
- [5] Jiang Zonglin. Reliable validation based on optical flow visualization for CFD simulations [J]. ACTA MECHANICA SINICA ,2003 ,19 (3) :193 - 203.
- [6] Nettleton M A. Gaseous Detonation : Their Nature , Effects and Control [M]. London : Chapman and Hall , 1987. 136.

Numerical Simulation of Gaseous Detonation Wave Propagation Through Bends with a Detailed Chemical Reaction Model

HU Zong-min , MU Qiann-hui , ZHANG De-liang , JIANG Zong-lin

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

Abstract: The chemically reacting flow-field of a detonation wave in a bend is simulated by CFD method. The dispersion-controlled dissipative scheme(DCD) is adopted to solve two-dimensional Euler equations implemented with detailed chemical reaction kinetics of hydrogen-oxygen-argon mixture. The fractional step method is applied to treat the stiff problem arising from computation of chemical reaction flow. From the numerical results it is observed that as the curvature of the bend changes, different detonation phenomena occurred along the wall of the bended pipe. If detonation wave propagating through bend with little curvature, the affection of the expansion wave is then stronger to induce the decouple process of the reaction zone and the leading shock. Re-setup of detonation can be completed when the overdriven detonation from another wall reignites the gas mixture in the decoupled zone, and then high overpressure impacts on the bend wall.

Key words: detonation wave; bend; detailed chemically reacting model; DCD scheme