

文章编号: 1001-1455(2001)03-0161-07

气相爆轰胞格结构和马赫反射数值模拟

张德良¹, 谢 巍¹, 郭长铭², 胡湘渝¹

(1. 中国科学院力学研究所高温气体动力学开放实验室, 北京 100080;

2. 中国科学技术大学力学与机械工程系, 安徽 合肥 230027)

摘要: 采用简化二阶段化学反应模型和改进的高精度时空守恒方法(CE/SE)对二维可燃气体 DDT 过程和爆轰波在楔面上的马赫反射进行了数值模拟, 计算和实验结果的比较令人满意。

关键词: DDT 过程; 爆轰波; 马赫反射; CE/SE 方法; 胞格结构

* 中图分类号: O381 文献标识码: A

1 引 言

自然界中含能物质存在两种燃烧方式: 爆燃和爆轰。爆燃是燃烧进行最快的一种特殊方式。在一定条件下, 爆燃可以转变成爆轰, 爆轰也可能衰减为爆燃。形成爆轰后, 流场中会产生胞格结构, 爆轰波在传播过程中遇到障碍物时会发生马赫反射, 在马赫反射前后的胞格结构会发生明显变化, 因此爆轰波胞格结构和马赫反射使流动变得十分复杂, 无论是实验研究还是数值模拟都十分困难。

60 年代人们从实验中已发现了爆轰波胞格结构。长期以来, 众多学者对爆轰波胞格结构和传播规律进行了研究。研究主要通过实验手段进行, 已取得了一定的进展, 许多问题已从实验上得到解决, 但是, 对爆轰波胞格结构形成的机理在认识上至今仍未取得实质性突破, 至于爆轰波和障碍物相互作用的研究只是近年来才刚刚开始, 目前, 这一课题已引起国内外学者注意, 深入的研究正在进行中。

80 年代以来随着计算流体力学的迅猛发展, 爆轰波胞格结构的数值模拟也得到了发展, 可以通过各种物理和数学模型来进行。然而, 关于爆轰波马赫反射的数值模拟仍处于起步阶段, 目前, 很少见到有关这方面的研究进展的报导。

综上所述, 可以看出, 关于爆轰波胞格结构和马赫反射问题, 无论是实验研究还是数值模拟都有待更深入的研究。这是一个具有挑战性的课题, 在工程应用和科学研究上具有重要的价值。

带有化学反应的流动可以采用不同的数学模型来描述, 作为第一步, 采用简化的二阶段化学反应模型。为了提高数值模拟精度, 我们采用了一种全新的时空守恒方法(CE/SE)。首先对时空守恒方法进行改进, 然后用来数值模拟氢氧混合可燃气体的爆轰波胞格结构和马赫反射, 计算和实验结果的比较令人满意。这一突破为以后深入研究爆轰波胞格结构和马赫反射创造了良好的基础。最后, 我们对计算结果作了初步分析, 得到一些有用的结论。

2 物理问题与数学模型

如图 1 所示, 考虑一管状容器, 内部充满着静态的可燃气体混合物, 当在管状容器的左端点火后, 可燃气体被点燃, 并形成一燃烧波。当燃烧波在管内传播时引起波后可燃气体发生化学反应, 释放大能量, 使燃烧波不断加速, 最后形成爆轰波。这就是典型的 DDT 过程^[1]。在横向扰动的作用下爆轰波会形成复杂的胞格结构(见图 2)。

* 收稿日期: 2000-11-14; 修回日期: 2001-02-15

基金项目: 国家自然科学基金项目(19872086)

作者简介: 张德良(1939—), 男, 研究员。

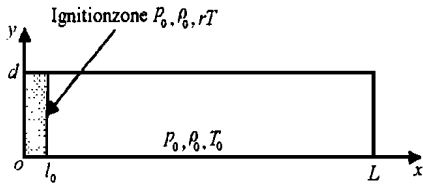


图 1 激波管内 DDT 模型示意图
($d = 0.04\text{m}, l_0 = 0.5\text{m}, L = 5.6\text{m}$)

Fig. 1 Scheme of DDT model in shock tube



图 2 典型爆轰波的胞格结构

Fig. 2 Typical cellular structure of detonation wave

燃烧过程中具有复杂的化学反应,二阶段化学反应模型是一种简化的描述化学反应过程的模型,它将复杂的基元反应过程简化为两个阶段:诱导阶段和放热阶段。诱导阶段是使气体活化的阶段,在这个阶段中,没有任何的热量放出,只是生成各种活化的原子基团。诱导阶段完成后,化学反应进入放热阶段,放热阶段生成最终的反应产物和放出大量的热量^[2]。在诱导阶段中,我们用无量纲量 (α, β) 来表示诱导反应进行的程度,称为诱导进行度。 α 的物理意义为:未活化的物质占有所有物质的比例。诱导反应没有发生时 $\alpha = 1$,随着诱导反应的进行, α 逐渐减小,到诱导反应结束时(即反应气体已全部活化), α 的值变为 0。为表示诱导反应进行的快慢,定义诱导反应进行的速度(α 的变化速度)

$$\frac{d\alpha}{dt} = -k \exp(-E/RT) \quad (1)$$

式中: k 为诱导反应速率常数, ρ, T, R 分别为参加反应的可燃气体的密度,温度和气体常数, E 为诱导反应的活化能。

同样,在放热阶段用无量纲变量 (β, γ) 来表示放热反应进行的程度,称为反应进行度。

β 的物理意义为:反应物占有所有物质的比例。放热反应没有发生时(即混合气体中全部为反应物), $\beta = 1$,当反应物全部转化为生成物时, $\beta = 0$ 。 β 变化的速率用 $\frac{d\beta}{dt}$ 来表示,对应于不同的简化模型, $\frac{d\beta}{dt}$ 具有不同的形式。

二阶段化学反应模型所描述的过程可以用图 3 表示:在反应没发生时, α, β 的值均为 1;反应开始后,首先进行诱导反应, α 以速率 $\frac{d\alpha}{dt}$ 从 1 减小至 0, β 仍为 1;当 $\alpha = 0$ 时,诱导阶段完成,反应进入放热阶段, β 以速率 $\frac{d\beta}{dt}$ 从 1 开始减小,直至反应达到平衡。

3 控制方程和初边值条件

根据上述物理模型,在笛卡尔坐标系中,若不考虑输运过程,可得到二维非定常无量纲的控制方程

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial F(U)}{\partial x} + \frac{\partial G(U)}{\partial y} = S(U) \quad (2)$$

$$U = \begin{pmatrix} u \\ v \\ e \end{pmatrix}, F = \begin{pmatrix} u \\ u^2 + p \\ uv \\ (e + p)u \\ u \\ u \end{pmatrix}, G = \begin{pmatrix} u \\ uv \\ v^2 + p \\ (e + p)v \\ v \\ v \end{pmatrix}, S = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

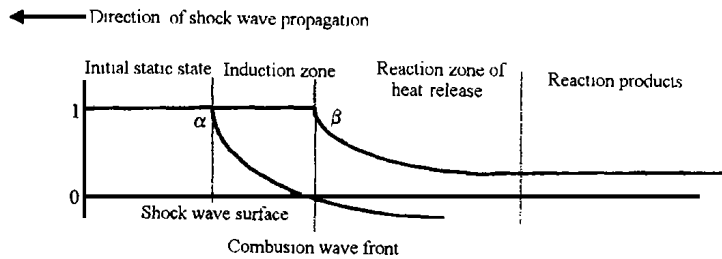


图 3 二阶段化学反应模型示意图

Fig. 3 Scheme of two-step chemical reaction model

为气体密度, u, v 为 Euler 坐标系中水平、竖直方向速度, e 为内能, p 为压力。

根据上面的物理模型, 边界条件采用固壁, 即无穿透条件

$$\begin{cases} x = 0, L: & u = v = 0, \partial T / \partial x = 0, \partial / \partial x = 0 \\ y = 0, d: & u = v = 0, \partial T / \partial y = 0, \partial / \partial y = 0 \end{cases} \quad (3)$$

初始时刻, 我们在 $0 < x < l_0$ 段即点火区 (如图 1 所示) 点火, 产生一段高温气体, 形成激波来驱动反应进行, 即

$$\begin{aligned} t = 0: & 0 < x < l_0, 0 < y < d: T = rT_0, \quad = 0 \\ & l_0 < x < L, 0 < y < d: T = T_0, \quad = 0 \end{aligned} \quad (4)$$

式中: T_0 为初温, rT 为点火温度, r 是与 l_0 的长度有关的系数。点火区必须保持有足够的能量, 为此, 在本计算过程中 r 值一般取 40 ~ 50 之间。在点火区, $= 0, = 1$ 。

为了在数值模拟中得到清晰的胞格结构, 必须在点火区前方设置一个很小的人工扰动区 (约 0.02L), 以便产生横向扰动, 扰动是通过改变 u 值来实现的。要引发稳定的爆轰波, 除了点火区前方的扰动区和点火区外, 其他部分, $= 1, = 1$ 。

4 数值方法简介

1995 年, 美国 NASA Lewis 研究中心的 S. C. Chang 提出了一种全新的数值方法——时间-空间守恒元和解元方法 (the method of space-time conservation element and solution element), 一般称为时空守恒方法或 CE/SE 方法^[3]。这种方法无论从概念上还是从格式的构造方法上, 都与传统的数值方法有很大不同, 它将时间和空间完全统一起来同等对待, 并从守恒律积分型方程出发, 通过设立守恒元和解元, 使格式局部和全局都严格保证其物理意义上的守恒律; 其次, 它将流场变量及其对空间的偏导数都作为独立变量同时进行求解, 而且它不但可以求解连续流场, 还可以求解间断、不光滑流场。

时空守恒方法首先构造了解元 (solution element, 简称为 SE) 和守恒元 (conservation element, 简称为 CE)。解元是指某个网格点附近的影响区域, 在这个区域内的参变量和流通量向量分布可以表示为该网格点上的参变量和流通量向量的某种简单的光滑函数, 如可以用该网格点上的参变量和流通量向量进行 Taylor 展开得到。守恒元是指满足守恒律的区域, 在这个区域内质量、动量、能量均满足守恒律, 其概念类似于有限体积法中的控制体, 不过是整个时空域上的控制体。

基于以上特点, 时空守恒方法具有以下优点: 结构简单, 局部性好, 便于边界处理; 方法简单, 通用性好, 计算量小, 便于推广到多维情形; 计算结果精度高, 激波分辨率高; 除了利用简单的台劳展开外, 无需任何其他数值逼近技术, 也不需要任何单调性限制或特征技术。

5 二维 Euler 方程的时空守恒格式

在笛卡尔坐标系下, 二维 Euler 方程的无量纲形式为

$$\partial Q / \partial t + \partial E / \partial x + \partial F / \partial y = 0 \quad (5)$$

令 $x_1 = x, x_2 = y, x_3 = t$ 为三维 Euclid 空间 E_3 的坐标。在 E_3 空间中运用 Gauss 散度定理, 可将微分形式的 Euler 方程 (5) 写成如下的积分形式

$$\int_{S(V)} \mathbf{H} \cdot d\mathbf{s} = 0 \quad (6)$$

式中: $S(V)$ 为 E_3 空间中任一区域 V 的边界, $d\mathbf{s} = d\mathbf{r} \cdot \mathbf{n}$, d 为 $S(V)$ 上的微元表面的面积, \mathbf{n} 为指向 $S(V)$ 外侧的单位法向量, \mathbf{H} 为 E_3 空间中的流通量向量。

通过 E_3 空间中积分形式的 Euler 方程 (6), 空间和时间被紧密地结合起来, 并被同等地看成是 E_3 空间中的坐标。方程 (6) 是构造二维 CE/SE 格式的基础。

在 E_3 空间中, 设所有网格点的集合为 Ω , 对每一个网格点 $P \in \Omega$, 构造解元 $SE(P)$ 如图 4 所示, 解元 $SE(P)$ 由相交于网格点 P 的三个相互垂直的平面及其邻域组成, 这三个平面分别垂直于 x, y, t 坐

标轴。在任意一个解元上,以解元的网格点为基点,用 Taylor 展开式来表示物理量的分布。对图 4 所示的解元 SE(P),在其上任意一点(x, y, t)处,参变量 Q 可用 Taylor 展开式近似表示为

$$Q(x, y, t)_P = Q_P + (Q_x)_P x + (Q_y)_P y + (Q_t)_P t \tag{7}$$

其中: $x = x - x_P, y = y - y_P, t = t - t_P$ 。

将流量 E、F 在解元 SE(P) 上的分布用 Taylor 展开式分别表示为

$$E(x, y, t)_P = E_P + (E_x)_P x + (E_y)_P y + (E_t)_P t \tag{8}$$

$$F(x, y, t)_P = F_P + (F_x)_P x + (F_y)_P y + (F_t)_P t \tag{9}$$

式中: $Q_P, (Q_x)_P, (Q_y)_P$ 作为未知量,同时进行求解,其余各量均可从 $Q_P, (Q_x)_P, (Q_y)_P$ 中导出。

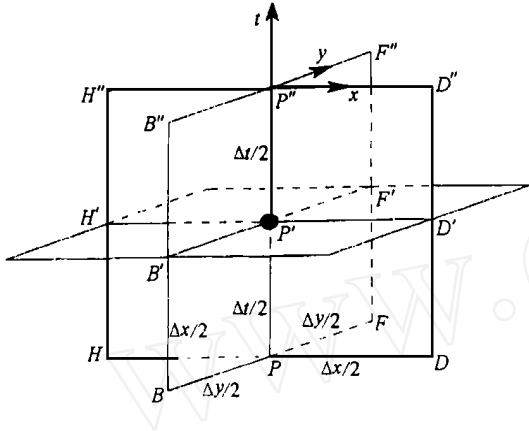


图 4 二维 CE/SE 格式的解元 SE(P)

Fig. 4 Solution element SE(P) of 2D CE/SE method

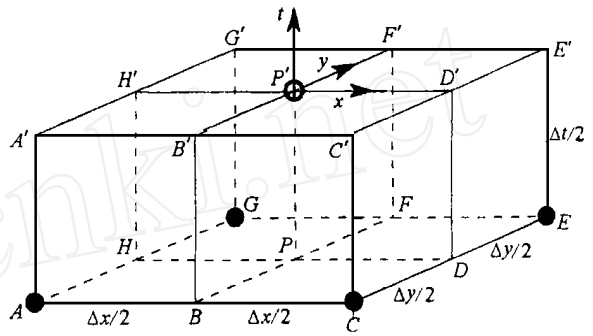


图 5 二维 CE/SE 格式的守恒元 CE(P)

Fig. 5 Conservation element CE(P) of 2D CE/SE method

如图 5 所示,假设在守恒元 CE(P) 上,积分形式的 Euler 方程(6)成立,即

$$\int_{S(CE(P))} \mathbf{H} \cdot d\mathbf{s} = \int_{ACEGA} \mathbf{H} \cdot d\mathbf{s} = 0 \tag{10}$$

积分上式得

$$\int_{ACEG} \mathbf{H} \cdot d\mathbf{s} = \int_{ACEG} x y \cdot Q(0,0,0) = \int_{ACEG} x y \cdot Q_P \tag{11}$$

$$\int_{ACEG} \mathbf{H} \cdot d\mathbf{s} = - \int_{ACEG} \frac{x y}{4} \bar{Q} \tag{12}$$

$$\int_{AGGA + CEEC} \mathbf{H} \cdot d\mathbf{s} = - \int_{AGGA + CEEC} \frac{y t}{4} \bar{E} \tag{13}$$

$$\int_{ACCA + GEEG} \mathbf{H} \cdot d\mathbf{s} = - \int_{ACCA + GEEG} \frac{x t}{4} \bar{F} \tag{14}$$

式中:

$$\bar{Q} = Q \left(\frac{-x}{4}, \frac{-y}{4}, 0 \right)_A + Q \left(-\frac{x}{4}, \frac{-y}{4}, 0 \right)_C + Q \left(-\frac{x}{4}, -\frac{-y}{4}, 0 \right)_E + Q \left(\frac{-x}{4}, -\frac{-y}{4}, 0 \right)_G \tag{15}$$

$$\bar{E} = E \left(0, \frac{-y}{4}, \frac{-t}{4} \right)_A - E \left(0, \frac{-y}{4}, \frac{-t}{4} \right)_C - E \left(0, -\frac{-y}{4}, \frac{-t}{4} \right)_E + E \left(0, -\frac{-y}{4}, \frac{-t}{4} \right)_G \tag{16}$$

$$\bar{F} = F \left(\frac{-x}{4}, 0, \frac{-t}{4} \right)_A + F \left(-\frac{-x}{4}, 0, \frac{-t}{4} \right)_C - F \left(-\frac{-x}{4}, 0, \frac{-t}{4} \right)_E - F \left(\frac{-x}{4}, 0, \frac{-t}{4} \right)_G \tag{17}$$

将式(11) ~ (14)相加,可得出参变量 Q_P 的方程

$$Q_P = Q/4 + t \cdot E/(4x) + tF/(4y) \quad (18)$$

对于参变量的导数 $(Q_x)_P$ 、 $(Q_y)_P$ 在守恒元 CE(P) 内,假定在点 A、C、E、G 处的参变量连续,即

$$Q_A = Q\left(0, 0, \frac{t}{2}\right)_A = Q\left(-\frac{x}{2}, -\frac{y}{2}, 0\right)_P = Q_P - \frac{x}{2}(Q_x)_P - \frac{y}{2}(Q_y)_P \quad (19)$$

$$Q_C = Q\left(0, 0, \frac{t}{2}\right)_C = Q\left(+\frac{x}{2}, -\frac{y}{2}, 0\right)_P = Q_P + \frac{x}{2}(Q_x)_P - \frac{y}{2}(Q_y)_P \quad (20)$$

$$Q_E = Q\left(0, 0, \frac{t}{2}\right)_E = Q\left(+\frac{x}{2}, +\frac{y}{2}, 0\right)_P = Q_P + \frac{x}{2}(Q_x)_P + \frac{y}{2}(Q_y)_P \quad (21)$$

$$Q_G = Q\left(0, 0, \frac{t}{2}\right)_G = Q\left(-\frac{x}{2}, +\frac{y}{2}, 0\right)_P = Q_P - \frac{x}{2}(Q_x)_P + \frac{y}{2}(Q_y)_P \quad (22)$$

对式(19)~(22)作以下运算

$$(Q_x)_P^- = -\frac{1}{x}\left[Q\left(0, 0, \frac{t}{2}\right)_A + Q\left(0, 0, \frac{t}{2}\right)_G - 2Q_P\right] \quad (23)$$

$$(Q_x)_P^+ = +\frac{1}{x}\left[Q\left(0, 0, \frac{t}{2}\right)_C + Q\left(0, 0, \frac{t}{2}\right)_E - 2Q_P\right] \quad (24)$$

$$(Q_y)_P^- = -\frac{1}{y}\left[Q\left(0, 0, \frac{t}{2}\right)_A + Q\left(0, 0, \frac{t}{2}\right)_C - 2Q_P\right] \quad (25)$$

$$(Q_y)_P^+ = +\frac{1}{y}\left[Q\left(0, 0, \frac{t}{2}\right)_E + Q\left(0, 0, \frac{t}{2}\right)_G - 2Q_P\right] \quad (26)$$

分别对式(23)和(24)的 $(Q_x)_P^-$ 、 $(Q_x)_P^+$, 以及式(25)、(26)中的 $(Q_y)_P^-$ 、 $(Q_y)_P^+$ 作加权平均,即可得出参变量的导数 $(Q_x)_P$ 、 $(Q_y)_P$ 的方程

$$(Q_x)_P = W[(Q_x)_P^-, (Q_x)_P^+, J] \quad (27)$$

$$(Q_y)_P = W[(Q_y)_P^-, (Q_y)_P^+, J] \quad (28)$$

$$W[x, y, J] = \begin{cases} (|x|/y + |y|/x)/(|x| + |y|) & (|x| + |y| \neq 0) \\ 0 & (|x| + |y| = 0) \end{cases} \quad (29)$$

二维 CE/SE 格式的稳定性条件为

$$(c + \sqrt{u^2 + v^2}) \cdot t/\min(x, y) \leq 1 \quad (30)$$

式中: $c = \sqrt{p/\rho}$ 为当地音速。

6 计算结果的验证

用简化的二阶段化学反应模型和改进的高精度时空守恒方法,对氢氧混合可燃气体 ($2\text{H}_2 + \text{O}_2 + \text{Ar}$, $p_0 = 16\text{kPa}$) 的二维 DDT 过程及爆轰波在楔面上的马赫反射(楔角为 19.3°)进行了数值模拟,计算结果列在图6和图7中。计算结果和实验结果^[4]的比较,结果如下:

结果表明

(1) 计算结果显示:可燃气体被点燃后,燃烧波不断加速,最后得到一个稳定的爆轰波和清晰的胞格结构。爆轰波的胞格形状呈现鱼鳞状,胞格尺寸与初压有关,本计算中初压为 16kPa ,胞格尺寸约为 12mm ,与实验结果^[4]吻合较好。因此,采用时空守恒方法数值模拟氢氧混合可燃气体的 DDT 过程是成功的。

(2) 燃烧加速过程与 rT_0 中的 r 有关。 r 越大,加速过程越短。为了尽快得到稳定的爆轰波和清晰的胞格结构,在本计算中 r 取 $40 \sim 50$ 是合适的。

(3) 从计算结果可以看出:当稳定的爆轰波向右传播时,爆轰波在楔面上发生马赫反射,在楔面顶点附近,马赫反射前后有一条明显的分界线。分界线和楔面之间有一个夹角,分界线两侧,即马赫反射前后,胞格形状和尺寸发生明显变化,马赫反射后胞格尺寸减小,这一计算结果和实验现象相吻合。由

此表明,时空守恒方法的精度完全满足数值模拟爆轰波在楔面上马赫反射的要求。

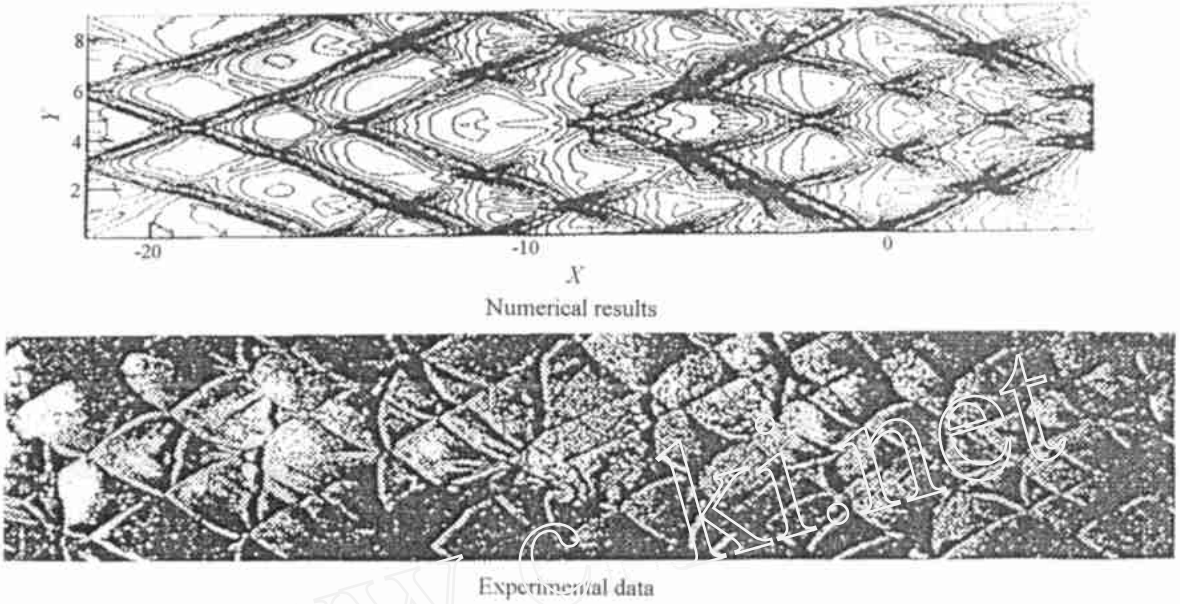


图 6 氢氧可燃气体 ($2H_2 + O_2 + Ar$, 初压 16kPa) 的 DDT 过程数值模拟和实验结果比较
 Fig. 6 Comparison of numerical results with experimental data for DDT process of H_2-O_2 combustible gas ($2H_2 + O_2 + Ar$, initial pressure 16kPa)

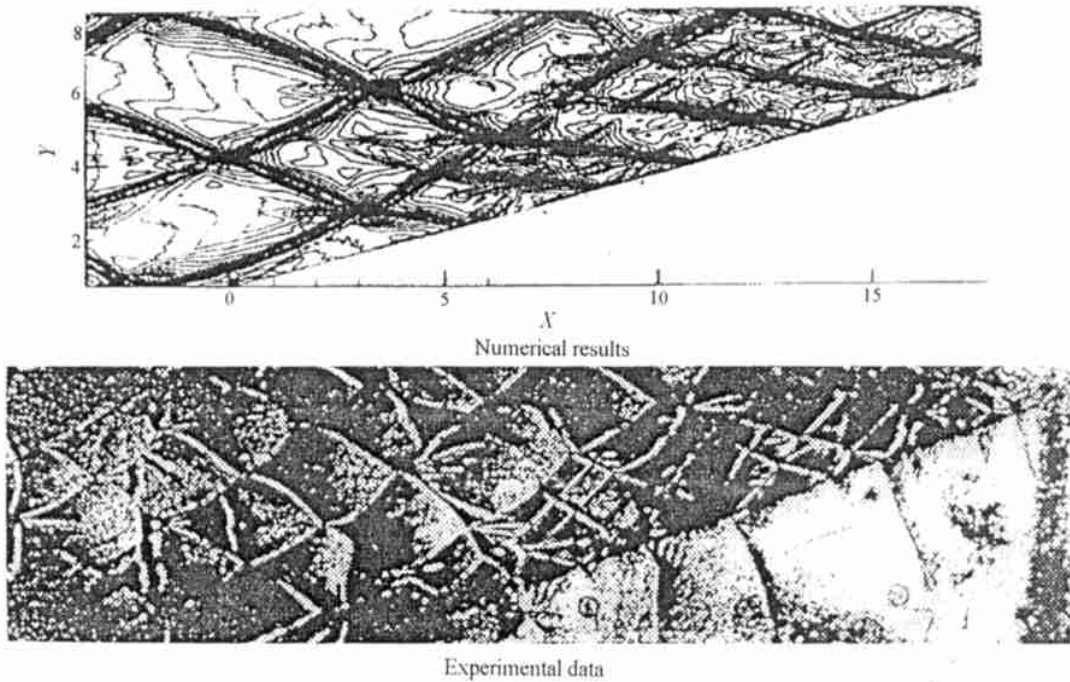


图 7 爆轰波在楔面上马赫反射(楔角为 19.3°) 数值模拟和实验结果比较
 Fig. 7 Comparison of numerical results with experimental data for Mach reflection of a detonation wave on a wedge (wedge angle 19.3°)

(4) 数值模拟表明:爆轰波胞格结构尺寸与分界线和楔面之间夹角是与初压及楔角有关的。初压为 16kPa 时,得到的爆轰波胞格结构和分界线最清晰。楔角越大,分界线和楔面之间夹角越小,爆轰波胞格尺寸越小。在本计算中初压为 16kPa,楔角为 19.3° ,马赫反射后的爆轰波胞格尺寸约为马赫反射前

的40%,这一计算结果和实验结果也基本吻合。当楔角大于35°时,分界线和楔面之间夹角变得非常小,波胞格尺寸就变得模糊不清。

(5) 这是首次采用时空守恒方法成功模拟带有化学反应的流动,特别是模拟了复杂的爆轰波胞格结构和马赫反射,结果表明,时空守恒方法能够在数值模拟化学反应流方面得到广泛应用。

参考文献:

- [1] SHEPHERD E, S Lee J H S. On the Transition from Deflagration to Deonation [A]. Hussaini M Y, Kumer A, Voigt R G. Major Research Topics in Combustion [M]. New York Springer-Verlag, 1992. 439—490.
- [2] TAKI S, FUJIWARA T. Numerical Simulation on the Establishment of Gaseous Detonation [J]. Progress in Aeronautics and Astronautics, 1986, 94:186—200.
- [3] CHANG S C. The Method of Space-Time Conservation Element and Solution Element—A New Approach for Solving the Navier-Stokes and Euler Equations [J]. Journal of Computational Physics, 1995, 119:295—334.
- [4] 郭长铭,张德良,谢巍. 气相爆轰波在障碍物上马赫反射的实验验证 [J]. 实验力学, 2000, 15(3):299—305.

Numerical Simulation of Cellular Structures and Mach Reflection of Gaseous Detonation Waves

ZHANG De-liang¹, XIE Wei¹, GUO Chang-ming², HU Xiang-yu¹

(1. LHT Institute of Mechanics Chinese Academy of Sciences, Beijing 100080, China;

2. University of Science and Technology of China, Hefei 230027, Anhui, China)

Abstract: In this paper the Deflagration to Detonation Transition (DDT) process of combustible gases and Mach Reflection of a detonation wave on a wedge have been numerically simulated with a simplified two-step model (ZND) of chemical reaction and the improved method of space-time conservation element and solution element (CE/SE). The computational results were primarily analyzed. The numerical results were compared with experimental results. Compared results are satisfactory. This is the first time to apply the CE/SE method to the chemical reaction flow, especially to the simulation of the DDT process of combustible gases and the Mach reflection of detonation waves.

Key words: DDT process; detonation wave; cellular structure; CE/SE method; mach reflection