

[文章编号] 1001-246X(2007)03-0301-06

化学反应和球面聚心爆轰波的相互作用

常利娜¹, 姜宗林², 秦承森¹

(1. 北京应用物理与计算数学研究所, 北京 100088; 2. 中国科学院力学研究所, LHD 实验室, 北京 100080)

[摘 要] 考察球面爆轰波聚心传播过程中, 波阵面附近压力和温度不断升高引起化学反应进程的改变; 对比氢氧可燃气体与氮气的数值模拟结果, 分析化学反应对波面温度和压力的影响, 从而考察 Zeldovich 理论预测聚心爆轰波后参数的精确性. 数值结果表明, 爆轰波聚心传播初期, 放热的燃烧反应对波后热力学参数起主导作用; 传播后期, 波阵面趋近于对称中心时, 吸热的气体解离反应变得非常活跃, 解离反应对后期的汇聚压力影响不大, 但在很大程度上限制汇聚温度的升高.

[关键词] 聚心爆轰波; 基元反应模型; 高温解离效应

[中图分类号] O381

[文献标识码] A

0 引言

爆轰波是激波与化学反应紧密耦合的高速燃烧现象, 其发展、形成和自持传播机理是爆轰物理和燃烧动力学研究的基本对象. 以球对称或柱对称方式聚心传播的爆轰波, 能够在对称中心附近区域产生极高温度和压力的等离子体. Terao, et al^[1] 通过实验观测到, 有效半径为 500 mm 的球内, 丙烷-氧气体中的爆轰波在汇聚中心温度可高达 $10^7 \sim 10^8$ K. 聚爆的这一特点使其在材料合成与受控热核聚变等工程领域具有重要的应用背景.

早期研究中, 聚心爆轰波初始阶段的运动常用平面爆轰波近似, 汇聚末期波阵面半径趋近于零时, Zeldovich^[2] 认为, 与几何收聚效应相比化学反应能对波面参数的贡献可以忽略, 能够将爆轰波近似看作强激波, 用 Guderley^[3] 的自相似理论进行描述. 上述模型成为之后预测聚爆运动规律的主要理论依据^[1,4,5]. 为了更精确地描述聚心爆轰波在各个阶段的运动, 文[6,7]对描述变截面激波强度变化规律的 CCW 模型进行修正, 给出了爆轰波的 CCW 模型, 使其可用于描述聚心爆轰波的变化规律. 该模型假定化学反应能在波阵面附近是完全释放的, 在整个过程中是一个固定值, 近似地用 C-J 反应能来代替. 爆轰波 CCW 模型考虑到了化学反应的影响, 对聚心传播过程给出了更好的估计, 但是不足之处也是明显的. 如在实际的汇聚过程中, 由于波后压力和温度随着波面半径的减小不断升高, 波面附近的化学反应进程也随之改变, 包括早期放热的燃烧反应和后期吸热的解离反应. 所以, 用固定的 C-J 反应能描述整个汇聚过程中的化学反应热是不适当的.

本文采用基元反应模型数值模拟氢氧爆轰波的聚心传播过程, 以便考察已有理论的局限性, 为建立更精确的模型提供依据. 计算采用 Jiang^[8] 给出的频散可控耗散格式 (DCD), 该格式能自动捕捉激波而无须再附加人工粘性; 采用包含 9 种组分和 20 个化学反应的基元反应模型, 模拟 $H_2/O_2/Ar$ 混合可燃气体的化学反应机制; 基于 NASA Genn 研究中心^[9] 给出的数据库, 将每一组分的定压比热 c_p 等热力学参数看作温度的多项式函数, 更精确地描述热力学过程. 为考察化学反应的影响, 首先数值模拟聚心氢氧爆轰波的传播过程, 然后在相同的初始和边界条件下, 模拟聚心激波在氮气中的传播过程, 氮气在高温情况下的化学反应机制也采用基元反应模型^[13] 描述. 与氢氧混合气体不同, 氮气中不会发生燃烧反应, 氮分子开始解离的温度也远高于氢氧, 对实验气体分别为氢氧和氮气时的计算结果进行比较, 一定程度上能够反映燃烧反应和解离反应对波面参数变化规律的影响, 显示聚心爆轰波与聚心激波传播规律的不同. 并进一步分析了聚心爆轰波面附近组分的变化规律, 以考察在聚心传播的不同阶段, 上述两类化学反应对温度和压力改变所起的不同作用.

[收稿日期] 2006-01-04; [修回日期] 2006-09-12

[基金项目] 国家自然科学基金(90205027)和中国工程物理研究院科学技术基金(20060645)资助项目.

[作者简介] 常利娜(1973-), 女, 陕西延安, 博士, 主要从事计算流体力学研究.

1 计算模型和方法

本文研究的主要目的是考察爆轰波汇聚传播过程中波后热力学参数的变化,粘性作用和爆轰波的多波结构可以忽略,因此可以应用一维球对称多组分 Euler 方程来描述爆轰波运动过程,

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial F}{\partial r} = S, \quad (1)$$

这里

$$\begin{aligned} U &= r^2 (\rho_1, \rho_2, \dots, \rho_{n_s}, u, E)^T, \\ F &= r^2 (\rho_1 u, \rho_2 u, \dots, \rho_{n_s} u, u^2 + p, (E + p) u)^T, \\ S &= r^2 (\dot{w}_1, \dot{w}_2, \dots, \dot{w}_{n_s}, 2p/r, 0)^T, \end{aligned}$$

其中 ρ_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, u 为速度, E 为单位体积总能,

$$E = e + u^2/2, \quad (2)$$

$e = h - p$ 是单位体积内能,其中 h 是单位质量焓.由道尔顿分压定律和组分气体状态方程可以给出混合气体的压力

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

其中 R_i 为第 i 种组分的气体常数, T 为混合气体温度.热力学模型和化学反应模型参见文[10,11,13].

本文采用分裂算法将流动项与反应项解耦.应用 DCD 格式^[8] 计算流动效应,得到冻结化学反应以后的过渡值 \bar{U} ;然后冻结流场,基于基元反应模型求解化学反应;最后将化学反应的贡献叠加到 \bar{U} 上,得到每一时间步最终的 U .时间步长则根据基元反应的特征时间尺度取固定值,本文取 $10^{-4} \mu\text{s}$.文[11]选取了平面爆轰波及球面散心爆轰波的算例检验上述计算模型和方法,验证了其在模拟平面及球面问题时的可靠性.

2 计算结果及分析

图 1 为初始条件示意图.初始时刻, $r < R$ 的球形区域内给定氢氧混合气体或不可燃的氮气.为避免起爆过程及边界条件对聚心传播过程的影响, $r > R$ 的区域内以稳态平面爆轰波的数值解作为初始条件.聚心初期几何汇聚效应不明显,因此以平面爆轰波近似作为初始条件在物理上是合理的.计算采用一维均匀网格,尺寸为 0.01875 cm.球心处应用对称边界条件,外边界处应用固壁条件.若无特别声明,半径 $R = 15$ cm,球内混合气体初始压力 $P_0 = 0.02$ MPa,初始温度 $T_0 = 298$ K.

2.1 汇聚传播过程

为考察爆轰波汇聚过程中化学反应与波后温度及压力变化的相互作用,比较了 2 个算例在相同初边值条件下的计算结果.

算例 1 球形区域内给定恰当化学当量比的氢氧混合气体,其中掺混了 25% 的 Ar.

算例 2 球形区域内给定氮气.

前者描述聚心爆轰波的传播规律,后者描述聚心激波的传播规律,两者的比较反映了不同的化学反应进程对波面参数变化规律的影响.

图 2,3 分别给出了两算例汇聚过程中的压力和温度分布.图中 x 轴表示径向距离, y 轴表示计算时间.图 2 的 z 轴表示当地压力与初始压力的比值 p/p_0 ;图 3 的 z 轴表示当地温度与初始温度的比值 T/T_0 .本文的化学反应模型考虑了高温解离反应,但未考虑电离反应,因此当波阵面传播至 $r/R = 0.01$ 处时,计算终止,否

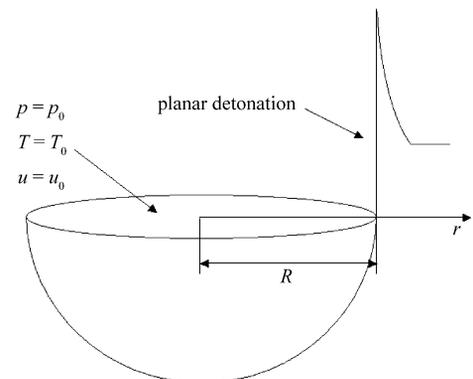


图 1 球面聚心爆轰问题的初始条件

Fig.1 Schematic of initial conditions in a spherically converging detonation

则随着波面半径的继续缩小, 波后温度将达上万度, 文中的化学反应模型不再适用。

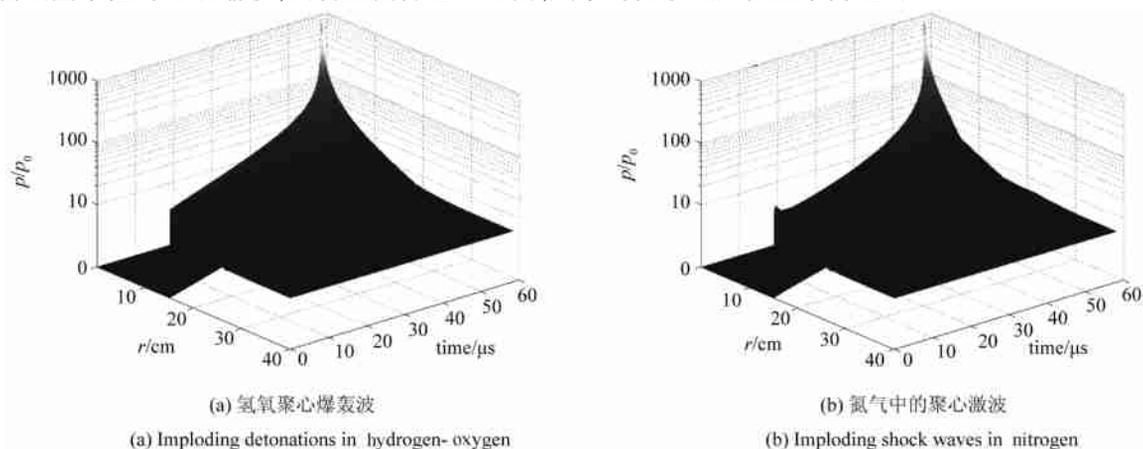


图2 汇聚过程中各个时刻的压力分布
Fig. 2 Time evolution of pressure distribution during implosion

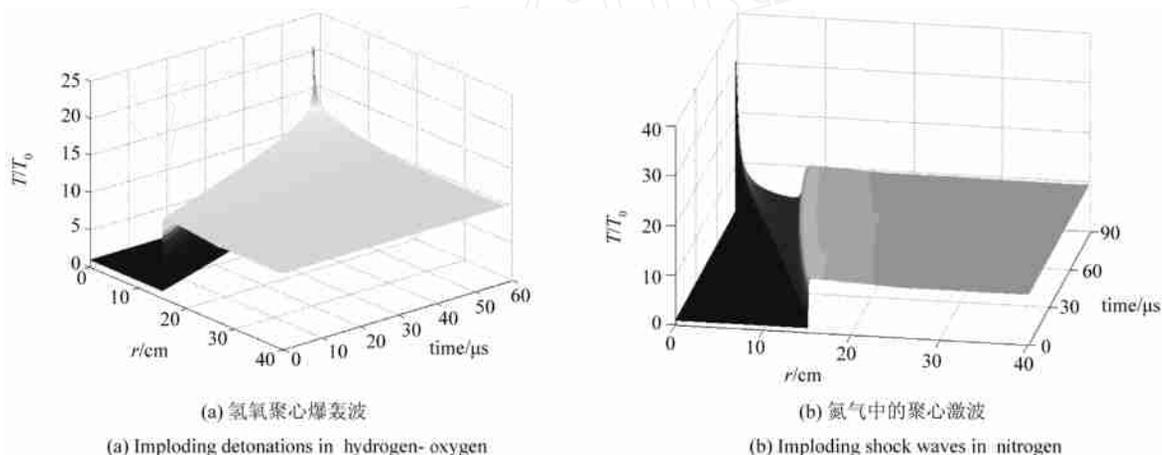


图3 汇聚过程中各个时刻的温度分布
Fig. 3 Time evolution of temperature distribution during implosion

比较图2(a)和(b)可以看出, 聚心爆轰波与聚心激波的压力分布曲线只是在汇聚初期有所不同, 传播一定距离后两者就十分类似了. 由图3给出的温度分布曲线可以看出: 球内气体为氢氧时, 不同时刻的温度分布曲线具有与初始曲线相似的形状; 但球内给定氮气时, 温度分布曲线中出现了间断. 这一间断是燃烧产物与氮气之间的接触间断, 是前导激波与燃烧产物分离后形成的. 另外, 比较图3(a)和(b)可以看出, 汇聚初期, 氮气中的前导激波面温度较低, 但随着波面半径的减小, 氮气中的波面温度上升比氢氧更快, 并在接近对称中心时超过了氢氧爆轰波面温度.

2.2 波阵面压力和温度的变化规律

为了考察汇聚过程中波阵面温度和压力的变化规律, 图4给出了球面半径分别取15 cm和30 cm时, 波面压力和温度随半径的变化曲线. 可以看出, 不同半径的球表现出的变化规律类似, 因此这一规律能够近似看作与几何尺度无关. 需要说明的是, H_2/O_2 中波面是指爆轰波阵面, N_2 中波面是指前导激波阵面, 相应的计算结果均在图4中给出.

从图4(a) H_2/O_2 爆轰波面压力分布曲线可以看出, 在 $r/R > 0.4$ 的区域内, 聚心爆轰波面的压力变化不大, 接近于平面爆轰波, 这也验证了本文初始条件的合理性. 另外, 比较 H_2/O_2 与 N_2 的计算结果可见, 在 $r/R > 0.4$ 的区域内, N_2 中因为不会发生燃烧反应, 波面压力要略低于 H_2/O_2 . 但是, 随着 r/R 的减小, N_2 中的波面压力曲线开始接近 H_2/O_2 , 在球心附近区域, 两者基本重合. H_2/O_2 与 N_2 的波面汇聚压力基本相当, 表明化

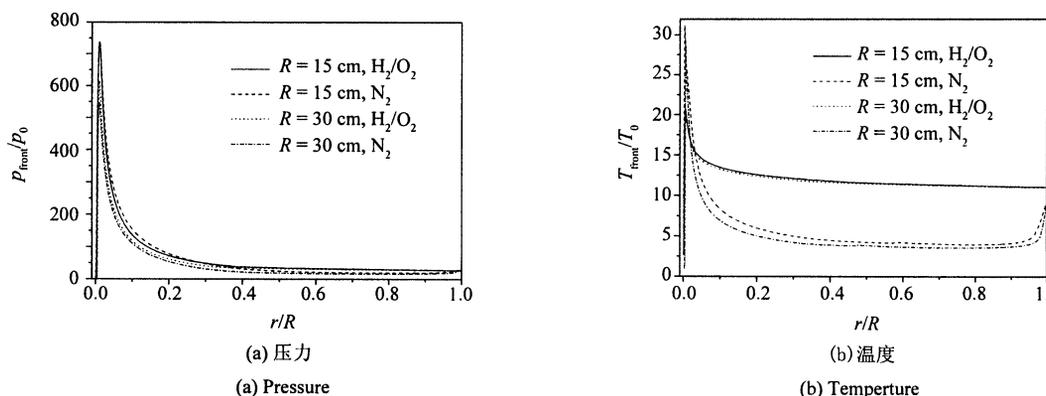


图 4 汇聚过程中,波面压力和温度随半径的变化

Fig. 4 Variation of the front pressure and temperature with radius during implosion

学反应对波面汇聚压力影响不大,研究汇聚后期压力变化规律时,爆轰波可以近似看作激波,Zeldovich^[2]的假设是合理的.

从图 4(b) 所给 H_2/O_2 爆轰波面温度分布曲线可以看出,与压力变化相类似,爆轰波面温度在初始阶段变化不大.但在中心附近区域,波面温度随着半径的减小迅速升高,并且 N_2 中波面温度升高要比 H_2/O_2 快.当波阵面推进至 $r/R=0.01$ 时, N_2 中波面温度达 8 851 K,明显高于 H_2/O_2 中的 6 201 K.这是因为与氮气相比,氢氧混合气体中的解离反应更加活跃,而解离反应吸收热量使温度上升减缓.该结果表明,研究汇聚过程温度的变化规律时,需要考虑化学反应的影响,Zeldovich 的假设未考虑到这一点.

2.3 化学反应的影响

为了考察氢氧爆轰波在聚心传播过程中波面附近发生的化学反应,图 5 给出了氢氧爆轰波聚心传播过程中,波面处组分 H_2O , OH , H 和 O 质量百分比随半径的变化曲线.可以看出,随着波面半径的减小,燃烧最终产物 H_2O 的波面浓度在减少(图 5(a)),而解离产物 OH (图 5(b)), H (图 5(c)) 和 O (图 5(d)) 的波面浓度在增加,表明这一过程中,燃烧反应的主导地位在下降,而解离反应变得活跃,尤其在汇聚后期,这一趋势更加明显.

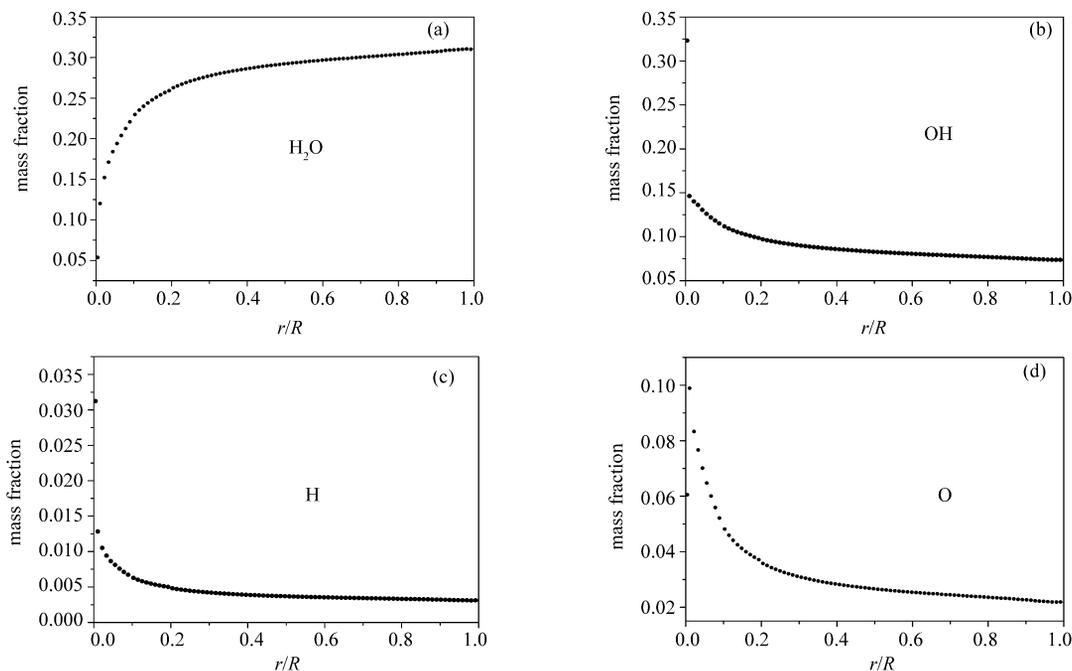


图 5 爆轰波聚心传播过程中,波面处各组分的质量百分比随波面半径的变化(算例 1)

Fig. 5 Variation of mass fractions of H_2O , OH , H and O with radius behind detonation fronts in Case 1

化学对温度的影响较直观, 燃烧反应放热, 有利于温度升高, 而解离反应吸热, 限制温度升高. 化学对压力的影响则比较复杂. 在含有化学反应的流动中, 压力的变化是由两种因素引起的, 一部分是绝热压缩或膨胀, 另一部分是化学反应项, 可以表示为^[12]

$$\dot{p} = c^2 \dot{\rho} + c^2 \dot{\rho} \quad (4)$$

其中 c 是冻结声速, $\dot{\rho}$ 是化学反应速率, ρ 是无量纲系数,

$$\rho = \nu/\nu - H/c_p \quad (5)$$

$$(\partial/\partial \rho)_{T,p} \quad (6)$$

式中 ν 是比容, H 是焓, β 是热膨胀系数, c_p 是定压比热. 考察(4)式中右边第2项, 对正向反应有 $\dot{\rho} > 0$, 因此化学反应是否会使压力增加取决于 ρ 的正负. ρ 的表达式(5)中, 右边第1项代表化学反应前后摩尔数改变引起的体积变化, 若摩尔数增加, 则 $\nu > 0$; 第2项代表反应热, 若化学反应放热, 则 $H < 0$. 因此化学对压力的贡献取决于摩尔数的增加量以及反应放热量两个因素.

聚心爆轰波传播过程中, 主要包括两种类型的化学反应, 燃烧反应和高温解离反应. 燃烧反应式可以简化表示为



这是一个摩尔数减少的放热反应, 即 $\nu < 0$, $H < 0$. 从式(4), (5)知道, 这两种因素对压力的贡献是相反的, 所起作用互相抑制, 使得燃烧对压力的影响不大. 类似地, 分析解离对压力的影响. H_2 (或 O_2) 解离生成 H 原子(或 O 原子)的反应是一个摩尔数增加的吸热反应, 即 $\nu > 0$, $H > 0$, 这也是对压力变化起相反作用的两种因素, 最终使得解离对爆轰波的汇聚压力影响也不大.

3 结论

对数值结果的分析讨论可得如下结论:

- 1) 聚心爆轰波在传播过程中, 随着波后温度和压力的升高, 化学反应进程也随之改变. 汇聚初期燃烧反应起主导作用, 而汇聚末期波阵面趋近于对称中心时, 解离反应活跃. 解离反应限制了汇聚温度的升高.
- 2) 比较氢氧可燃气体与氮气的计算结果可知, 聚心爆轰波与聚心激波的波面压力变化规律类似, 但波面温度变化规律有所不同. 这一结果凸显了聚心爆轰波经典理论的局限性, 表明 Zeldovich 理论和现有的爆轰波 CCW 模型能够近似描述压力的变化规律, 但难以正确描述温度的变化规律.
- 3) 在工程应用中, 若在汇聚中心附近区域采用不易发生解离反应的气体, 例如氮气, 与氢氧可燃气体相比, 获得的汇聚压力相当, 但汇聚温度将更高.

[参 考 文 献]

- [1] Terao K, Akaba H, Shiraiishi H. Spherically imploding detonation waves initiated by a two-step divergent detonation[J]. Shock Waves, 1995, 4: 187 - 193.
- [2] Zeldovich YB. Converging cylindrical detonation wave[J]. Sov Phys JETP, 1959, 36:550.
- [3] Guderley G. Powerful spherical and cylindrical compression shocks in the neighborhood of the center of the sphere and of the cylinder axis[J]. Luftfahrtforsch, 1942, 19: 302 - 312.
- [4] Terao K, Wagner H G. Experimental study on spherically imploding detonation waves[J]. Shock Waves, 1991, 1: 27 - 34.
- [5] Lee J H, Lee B H K. Cylindrical imploding shock waves[J]. Phys Fluids, 1965, 8(12): 2148 - 2152.
- [6] DeVore C R, Oran E S. The stability of imploding detonations in the geometrical shock dynamics (CCW) model[J]. Physics of Fluids, 1992, 4(4): 835 - 844.
- [7] Li H, Berr-Dor G. A modified CCW theory for detonation waves[J]. Combustion and Flame, 1998, 113: 1 - 12.
- [8] Jiang Zonglin, Takayana Kazuyoshi, Chen Yaosong. Dispersion conditions for non-oscillatory shock capturing schemes and its applications[J]. Computational Fluid Dynamics J, 1995, 4:137 - 150.
- [9] Bonnie J McBride, Michael J Zehe, Sanford Gordon. NASA Genn coefficients for calculating thermodynamic properties of individual species[R]. National Aeronautics and Space Administration Genn Research Center Cleveland, Ohio, NASA/TP-2002-211556, 2002.
- [10] Chang Lina, Zhang Deliang, Hu Zongmin, Jiang Zonglin. A general form of the dispersion-controlled dissipative scheme and its

- application in detonation problem[J]. Chinese J Comput Phys, 2005, 22(3): 189 - 196.
- [11] Chang Lina, Jiang Zonglin. Numerical investigations on propagation of spherically imploding gas detonation[J]. Chinese Journal of Theoretical and Applied Mechanics, 2006, 38(3): 296 - 301.
- [12] Fickett W, Davis W. Detonation[M]. University of California Press, 1979:91.
- [13] Stefan Selle, Uwe Riedel. Transport coefficients of reacting air at high temperatures[R]. AIAA 2000-0211, 38th Aerospace Sciences Meeting & Exhibit, 2000.

Interaction Between Chemical Reactions and Spherically Imploding Detonation Waves

CHANGLina¹, JIANG Zonglin², QIN Chengsen¹

(1. Institute of Applied Physics and Computational Mathematics, Beijing 100088, China;

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

Abstract: Numerical simulation of spherically imploding detonation waves in hydrogen-oxygen is carried out in an elementary chemical reaction model. Compared with numerical results of imploding shock waves in nitrogen, the discrepancies of gas dynamic characteristics between shock and detonation waves are investigated during implosion. The effect of chemical reactions, combustion and dissociation on detonation waves is revealed. As the wave fronts converge toward the center of symmetry, the front pressures at different radii are almost the same in the two cases. However the front temperatures are different. The temperature increases more rapidly in nitrogen than in hydrogen-oxygen mixture. Higher temperature is reached near the focal point in nitrogen due to its higher dissociation temperature. The energy released at the wave front is negligible in predicting pressure, while it needs to be considered in predicting temperature.

Key words: imploding detonation; elementary chemical reaction model; gas dissociation