

文章编号: 1001-1455(2004)05-0385-06

# 氢氧爆轰波在变截面扩张管道中传播的数值模拟\*

孙宇峰, 张德良, 胡宗民, 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:** 采用二阶精度频散控制耗散格式(DCD)和 8 组分 20 个方程的基元反应模型, 对轴对称变截面管道中氢氧爆轰波传播进行数值模拟。结果表明, 爆轰波传播至突变截面扩张管道时, 由于稀疏波的作用可能会使爆轰波局部熄爆甚至完全熄爆, 对于某些敏感度高的反应气体爆轰波可以二次起爆。而在渐变截面扩张管道爆轰波相对不易熄爆。

**关键词:** 爆炸力学; 爆轰波传播; DCD; 扩张管道; 敏感度

**中图分类号:** O381

**国标学科代码:** 130 3510

**文献标志码:** A

## 1 引 言

爆轰波在管道中的传播一直是国防、工业生产和安全中十分关注的问题, 针对其机理性研究国内外已经有一些实验结果和数值模拟工作<sup>[1~3]</sup>。随着人们对爆轰波反应机制认识的加深和计算机计算能力的加强, 爆轰波的数值模拟也从早期的采用单步反应和两步反应模型, 发展到基元反应模型。由于基元反应模型真实地反映了爆轰反应过程, 能够更好地发现和解释爆轰的现象。但是基元反应计算中也存在着一些困难, 如基元反应式的确定及其反应参数的准确性、计算中的刚性问题、计算量大、计算时间太长等。

本文中应用频散可控格式<sup>[4~6]</sup>和 8 组分 20 个反应的基元反应模型计算了爆轰波在二维轴对称突扩截面管和渐扩截面管中的传播过程, 根据爆轰波反应区和前导激波的分离和耦合机理, 讨论了爆轰波在绕射扩张截面时发生局部熄爆和二次起爆的现象, 并分析了可燃混合气体的敏感度对熄爆和二次起爆现象的影响。

## 2 物理化学模型与计算格式

### 2.1 物理问题

爆轰波在突扩截面管内的传播问题见图 1, 直径  $d$  为 20mm、长为 40mm 的爆轰管尾部连接一个直径  $D$  为 60mm、长为 100mm 的扩容腔, 爆轰管和扩容腔内充满可燃气体氢-氧或氢-空气混合物。不考虑可燃气体的 DDT 过程, 利用高温高压点火区直接引爆可燃混合气体, 在爆轰管内很快形成一稳定传播的平面爆轰波。在扩容腔入口, 由于截面突然变大, 爆轰波在拐角绕射, 平面波阵面逐渐演变为球面波阵面。

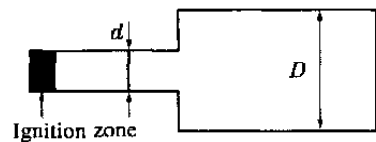


图 1 计算区域示意图

Fig. 1 The computational domain

### 2.2 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

\* 收稿日期: 2003-12-05; 修回日期: 2004-05-29

基金项目: 国家自然科学基金委员会和中国工程物理研究院联合基金项目(10276035)

作者简介: 孙宇峰(1978—), 男, 硕士。

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

$$U = \begin{bmatrix} C_1 \\ C_2 \\ \dots \\ C_{n_s} \\ m \\ n \\ E \end{bmatrix}, F = \begin{bmatrix} m C_1 \\ m C_2 \\ \dots \\ m C_{n_s} \\ m^2/ + p \\ mn/ \\ (E + p) m/ \end{bmatrix}, G = \begin{bmatrix} n C_1 \\ n C_2 \\ \dots \\ n C_{n_s} \\ mn/ \\ n^2/ + p \\ (E + p) n/ \end{bmatrix}, S_g = \begin{bmatrix} n C_1 \\ n C_2 \\ \dots \\ n C_{n_s} \\ mn/ \\ n^2/ \\ (E + p) n/ \end{bmatrix}, S = \begin{bmatrix} \dot{w}_1 \\ \dot{w}_2 \\ \dots \\ \dot{w}_{n_s} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (2)$$

### 2.3 基元化学反应模型

对于氢氧气相爆轰,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 $H_2$ 、 $O_2$ 、 $O$ 、 $H$ 、 $OH$ 、 $HO_2$ 、 $H_2O_2$ 、 $H_2O$ ,其化学反应式可以统一写为

$$\sum_{i=1}^8 a_{ji} \xrightleftharpoons[k_{bj}]{k_{fj}} \sum_{i=1}^8 b_{ji} \quad j = 1, \dots, 20 \quad (3)$$

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计量数和元素符号,  $k_{fj}$ 、 $k_{bj}$  分别为正、逆反应速率常数,  $k_{fj}$  由 Arrhenius 公式  $k_{fj} = A_j T^{n_j} \exp[-E_{aj}/RT]$  给出, 式中以 mol、s、cm、g、K 为基本单位,  $A_j$ 、 $n_j$ 、 $E_{aj}$  分别为第  $j$  个反应的 Arrhenius 公式中的指前系数、温度指数和反应活化能, 基元化学反应的基本参数见表 1。  $k_{bj}$  一般根据反应平衡常数  $k_{ej}$  和  $k_{fj}$  求出,  $k_{ej}$  可以由热力学数据计算得到。由基元反应的质量作用定律可以得到第  $i$  组分单位体积的质量生成率

$$\dot{w}_i = W_i \sum_{j=1}^{20} (b_{ji} - a_{ji}) \left( \prod_{i=1}^8 [X_i]^{a_{ji}} \right) \left( k_{fj} \prod_{i=1}^8 [X_i]^{a_{ji}} - k_{bj} \prod_{i=1}^8 [X_i]^{b_{ji}} \right) \quad (4)$$

式中:  $W_i$ 、 $[X_i]$  分别为第  $i$  组分的摩尔质量 (g/mol) 和摩尔浓度 (mol/cm<sup>3</sup>),  $j_i$  为第  $j$  反应中组分  $i$  的三体 (M) 效应系数。

表 1 氢氧气相爆轰 20 个基元反应模型

Table 1  $H_2/O_2$  reaction model

| $j$ | 基元反应式                        | $A_j$                 | $n_j$ | $E_{aj} / \text{kJ}$ |
|-----|------------------------------|-----------------------|-------|----------------------|
| 1   | $H_2 + O_2 = 2OH$            | $1.70 \times 10^{13}$ | 0     | 199.720              |
| 2   | $OH + H_2 = H_2O + H$        | $1.17 \times 10^9$    | 1.3   | 15.165               |
| 3   | $O + OH = O_2 + H$           | $4.00 \times 10^{14}$ | -0.5  | 0                    |
| 4   | $O + H_2 = OH + H$           | $5.06 \times 10^4$    | 2.7   | 26.292               |
| 5   | $H + O_2 + M = HO_2 + M$     | $3.61 \times 10^{17}$ | -0.7  | 0                    |
| 6   | $OH + HO_2 = H_2O + O_2$     | $7.50 \times 10^{12}$ | 0     | 0                    |
| 7   | $H + HO_2 = 2OH$             | $1.40 \times 10^{14}$ | 0     | 4.485                |
| 8   | $O + HO_2 = O_2 + OH$        | $1.40 \times 10^{13}$ | 0     | 4.485                |
| 9   | $2OH = O + H_2O$             | $6.00 \times 10^8$    | 1.3   | 0                    |
| 10  | $H + H + M = H_2 + M$        | $1.00 \times 10^{18}$ | -1.0  | 0                    |
| 11  | $H + H + H_2 = H_2 + H_2$    | $9.20 \times 10^{16}$ | -0.6  | 0                    |
| 12  | $H + H + H_2O = H_2 + H_2O$  | $6.00 \times 10^{13}$ | -1.3  | 0                    |
| 13  | $H + OH + M = H_2O + M$      | $1.60 \times 10^{23}$ | -2.0  | 0                    |
| 14  | $H + O + M = OH + M$         | $6.20 \times 10^{16}$ | -0.6  | 0                    |
| 15  | $O + O + M = O_2 + M$        | $1.89 \times 10^{13}$ | 0     | -7.474               |
| 16  | $H + HO_2 = H_2 + O_2$       | $1.25 \times 10^{13}$ | 0     | 0                    |
| 17  | $HO_2 + HO_2 = H_2O_2 + O_2$ | $2.00 \times 10^{12}$ | 0     | 0                    |
| 18  | $H_2O_2 + M = 2OH + M$       | $1.30 \times 10^{17}$ | 0     | 190.190              |
| 19  | $H_2O_2 + H = HO_2 + H_2$    | $1.60 \times 10^{12}$ | 0     | 15.884               |
| 20  | $H_2O_2 + OH = H_2O + HO_2$  | $1.00 \times 10^{13}$ | 0     | 7.524                |

## 2.4 数值方法

Z. L. Jiang 等在 1995 年提出了频散控制耗散格式<sup>[4]</sup>, 并应用单步化学反应进行了爆轰波数值计算<sup>[5~6]</sup>, 该格式基于 Steger 和 Warming 的矢通量分裂技术, 具有格式构造简单、激波分辨率高、计算量小等优点。

化学反应的时间尺度比流动时间尺度小得多, 故采用算子分裂的方法来解决微分方程的刚性问题, 可以把求解对流偏微分方程的时间步长进一步细分后, 作为求积化学反应刚性常微分方程的时间步长。

## 2.5 初边值条件

对 3 种不同的混合气体进行了计算。它们的初始条件为: (1)  $2\text{H}_2 + \text{O}_2$ ,  $p_0 = 60\text{kPa}$ ,  $T_0 = 298\text{K}$ ; (2)  $4\text{H}_2 + \text{O}_2 + 4\text{N}_2$ ,  $p_0 = 60\text{kPa}$ ,  $T_0 = 298\text{K}$ ; (3)  $4\text{H}_2 + \text{O}_2 + 4\text{N}_2$ ,  $p_0 = 40\text{kPa}$ ,  $T_0 = 298\text{K}$ 。点火区为高温高压区, 给定温度为  $10 T_0$ , 压力为  $30 p_0$ 。边界条件为: 所有壁面均采用无催化、滑移刚壁条件, 轴对称中心线采用对称条件。其中加入  $\text{N}_2$  或  $\text{Ar}$  作为稀释气体可以使气体的敏感度降低, 但提高初始压力  $p$  又可以提高混合气体的敏感度。

## 3 数值验证

图 2 为可燃混合气体 ( $2\text{H}_2 + \text{O}_2 + \text{Ar}$ ,  $p_0 = 20\text{kPa}$ ,  $T_0 = 298\text{K}$ ) 中爆轰波在楔面反射的数值结果和实验纹影的比较, 图 2(a) 对应楔角  $30^\circ$ , 为马赫反射, 图 2(b) 对应楔角  $60^\circ$ , 为规则反射。图的上半部分是实验结果<sup>[2]</sup>, 下半部分是计算结果。通过比较可以看出, 两者吻合较好。图 2(a) 中给出了爆轰波马赫反射的三波点轨迹。结果表明数值计算结果和实验结果吻合很好, 计算程序的可靠性很好。

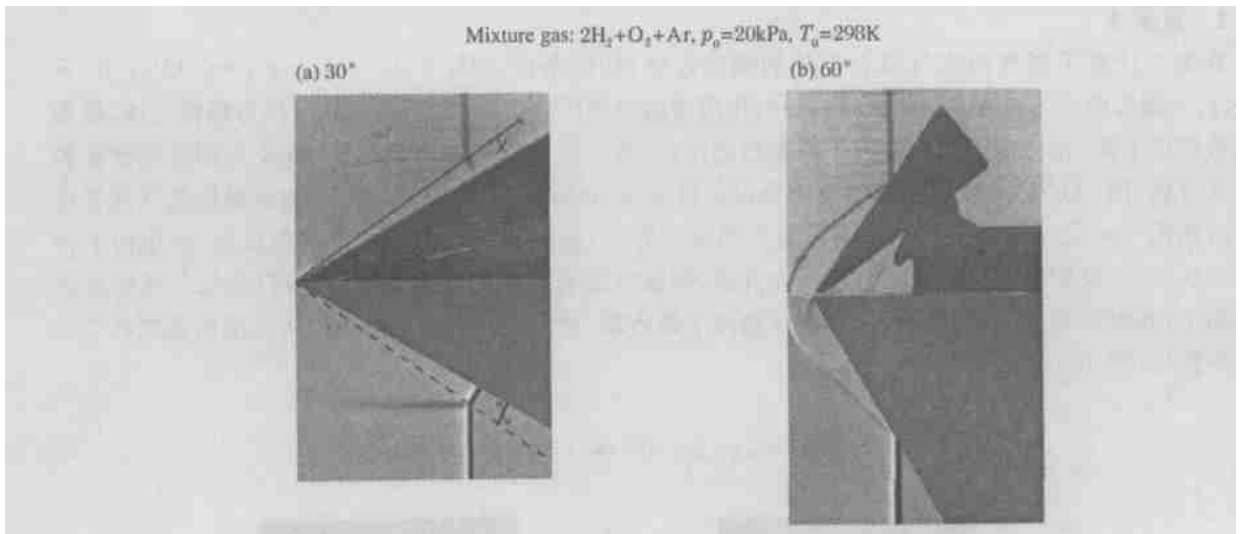


图 2 爆轰波楔面反射数值(下)和实验纹影(上)

Fig. 2 Numerical (lower part) and experimental (upper part) schlieren of detonation reflection over wedge angles

## 4 数值结果及讨论

### 4.1 不同敏感度爆轰气体数值结果

爆轰气体的组份不同, 起爆敏感度也不同, 纯氢氧爆轰气体一旦起爆很难熄爆, 但若充入氮气加以稀释, 气体敏感度下降, 此时爆轰在一定的条件下有可能熄爆。下面针对不同敏感度气体的爆轰波在突扩张管道中的传播进行比较。

#### 4.1.1 算例 1

图 3 给出了爆轰波传播过程的压力、密度分布(初始条件为:  $2\text{H}_2 + \text{O}_2$ ,  $p_0 = 60\text{kPa}$ ,  $T_0 = 298\text{K}$ ), 每幅图中上半部为压力分布图, 下半部分为氢气的密度分布图。当爆轰波刚刚进入扩容腔时产生绕射, 前

导激波和化学反应区有瞬间分离(图3(a));由于此时的爆轰气体为纯氢氧混合气,敏感度较高,经过短暂调整迅速恢复耦合(图3(b));爆轰波在向下游传播过程中逐渐变成球面波,碰到扩容腔的侧壁发生规则反射(图3(c));随着爆轰波的继续传播,规则反射演变为马赫反射(图3(d))。在整个传播过程中爆轰波没有熄灭。

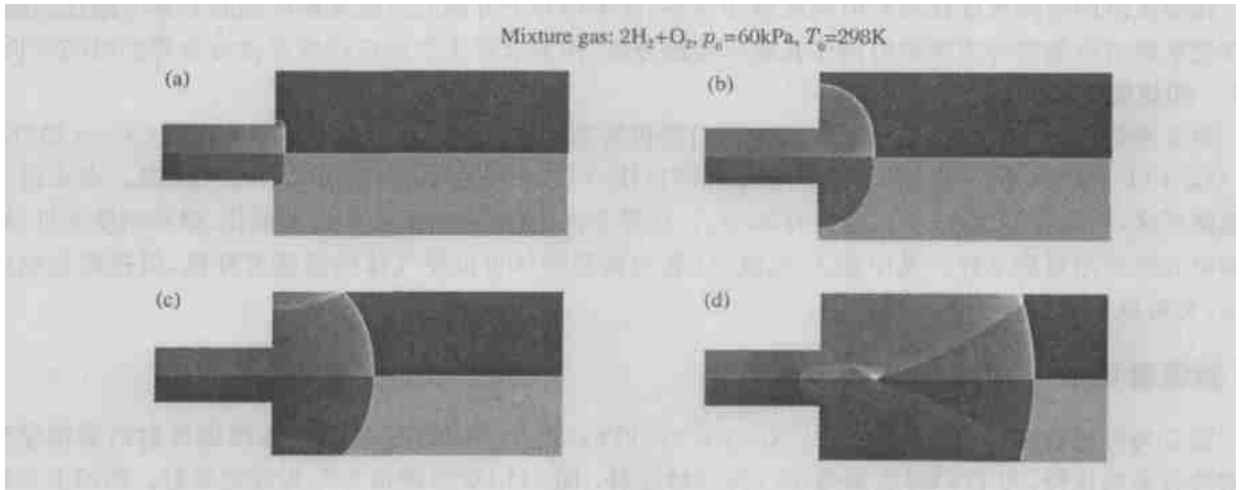


图3 爆轰波传播过程压力(上)和密度(下)分布

Fig. 3 Pressure (upper part) and density (lower part) distribution in the cavity ring

#### 4.1.2 算例2

算例2计算了氢气与空气混合气体的爆轰过程(初始条件: $2\text{H}_2 + \text{O}_2 + 4\text{N}_2$ ,  $p_0 = 60\text{kPa}$ ,  $T_0 = 298\text{K}$ ),当爆轰波进入扩容腔(图4(a)),绕射作用使温度和压力下降,由于加入氮气作为稀释气体,爆轰气体敏感度下降,在局部温度和压力下降剧烈的地区,波后的反应气体不能起爆,致使局部前导激波和反应区分离,图4(b)的氢气密度图中左下角白色区域即为经过前导激波压缩但未能起爆的氢气高密度区。对照图4(c)上半部压力图和下半部氢气密度图看出,前导激波在侧壁面上发生反射,产生向上游传播的反射波,反射波扫过的区域温度压力升高,使波后原未反应的气体二次起爆,白色氢气高密度区不断缩小,同时前导激波和反应区保持耦合地向下游传播,最终原波后由于熄爆而未反应的氢气在二次爆轰中耗尽(图4(d))。

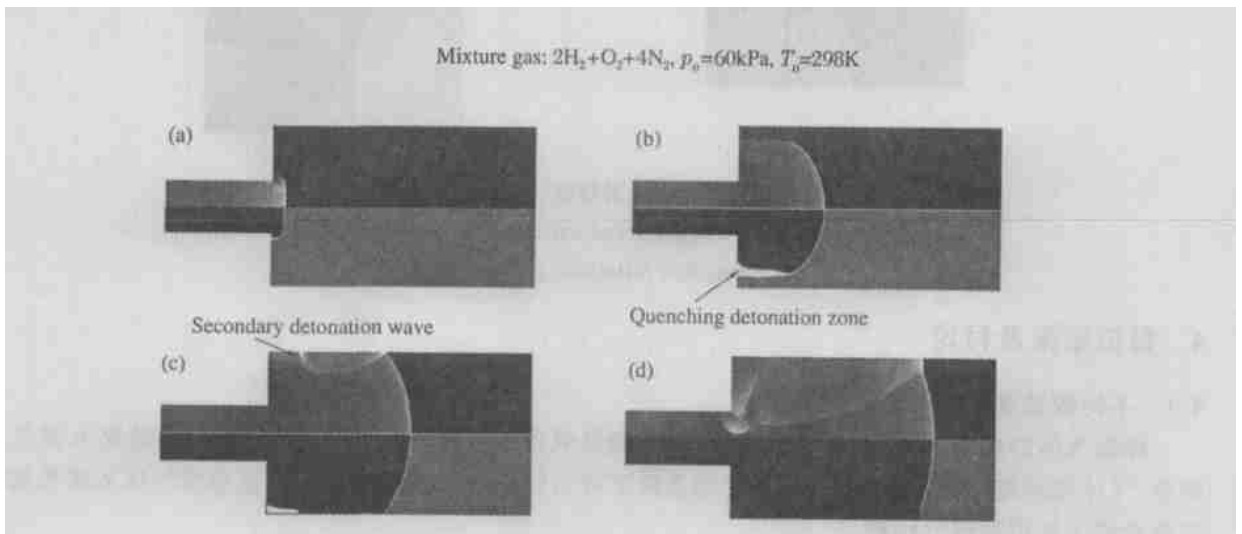


图4 爆轰波传播过程压力(上)和密度(下)分布

Fig. 4 Pressure (upper part) and density (lower part) distribution in the cavity ring

### 4.1.3 算例 3

算例 3 将算例 2 中爆轰混合气体的初始压力降至 40kPa(初始条件:  $2\text{H}_2 + \text{O}_2 + 4\text{N}_2$ ,  $p_0 = 40\text{kPa}$ ,  $T_0 = 298\text{K}$ ) 来进一步降低爆轰气体的敏感度。爆轰波传播至扩容腔内出现局部熄爆, 随着时间推移, 熄爆区域从弧形波肩部区域向波头区域扩展(图 5(b)、图 5(c)), 最终导致整个前导激波和反应区完全解耦, 爆轰波完全退化为爆燃波(图 5d)。即使前导激波在壁面上发生反射, 压力温度有所升高, 由于爆轰气体敏感度低, 也未能使波后气体再次起爆。

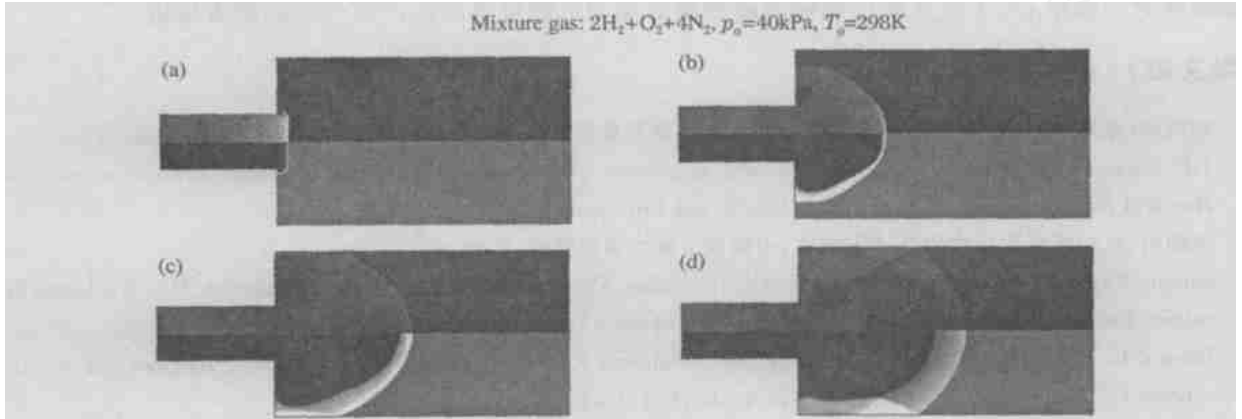


图 5 爆轰波传播过程压力(上)和密度(下)分布

Fig. 5 Pressure (upper part) and density (lower part) distribution in the cavity ring

### 4.2 渐变扩张管道数值结果

以上结果都是爆轰波在突变截面管道中传播的情况, 但在工业防护以及在脉冲爆轰发动机的尾喷管设计中会遇到爆轰波在渐变扩张管道中传播的问题, 而不同外形的几何约束对爆轰这样对温度和压力很敏感的物理现象必有重要影响。图 6 为爆轰波在扩张角为  $45^\circ$  管道中传播的压力和密度图(初始条件:  $2\text{H}_2 + \text{O}_2 + 4\text{N}_2$ ,  $p_0 = 40\text{kPa}$ ,  $T_0 = 298\text{K}$ ), 与算例 3 对比看出, 在突变扩张管中爆轰波完全熄爆(图 5)而在渐变扩张管中爆轰波却依然自持向下游传播(图 6), 这说明在渐变扩张管中由于膨胀使温度压力下降不如在突变扩张管中剧烈, 不足使爆轰熄灭, 但估计在  $45^\circ \sim 90^\circ$  存在一个能使爆轰波传播熄灭的临界扩张角。

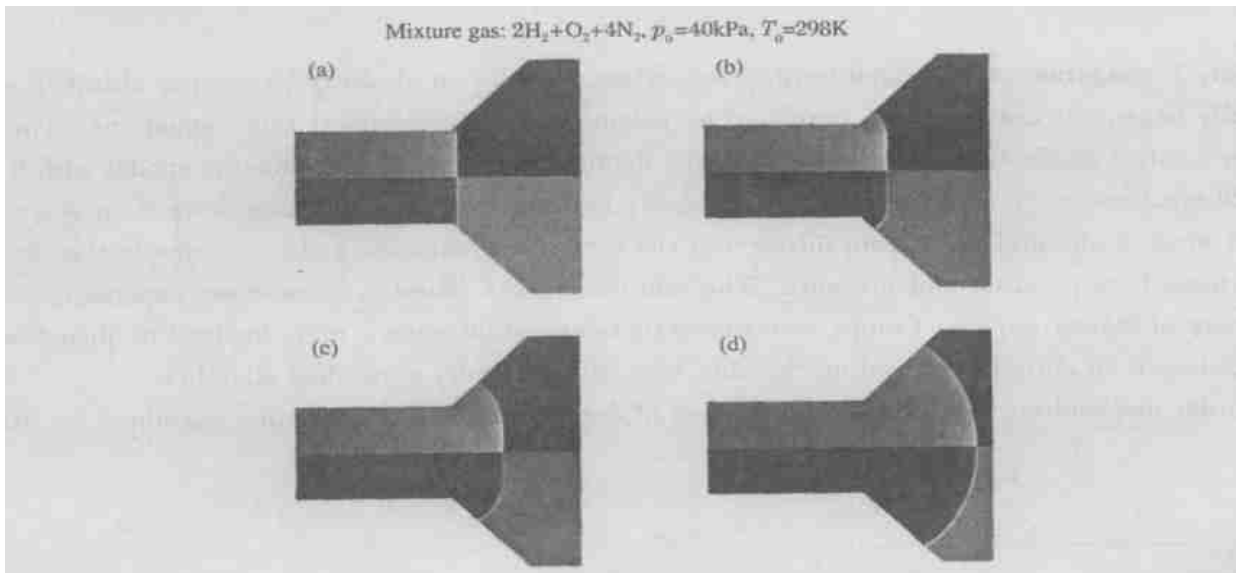


图 6 爆轰波传播过程压力(上)和密度(下)分布

Fig. 6 Pressure (upper part) and density (lower part) distribution in the cavity ring

## 5 结 束 语

采用了文献[4]中提出的数值格式对爆轰波在变截面扩张管道中的传播进行了数值模拟,还比较了不同敏感度可燃混合气体的爆轰波在截面突变和渐变扩张管道中的传播过程。爆轰气体的敏感度对爆轰波绕射中发生的熄爆和二次起爆现象起重要作用,同时扩张管道的几何形状对于爆轰波能否自持传播也有影响。数值模拟结果和实验结果符合很好。这能够加深对爆轰波在变截面管道内传播特性和相关物理现象的理解,对工业灾害的预防及脉冲爆轰发动机燃烧室的设计有一定的参考价值。

### 参 考 文 献 :

- [1] 胡湘渝,张德良. 易燃混合气体爆炸-完全基元反应模型数值模拟[J]. 安全与环境学报, 2001, 1(5): 22 - 27.  
HU Xiang-yu, ZHANG De-liang. Numerical simulation of explosion of combustible gaseous mixture with detailed chemical reaction model[J]. Journal of Safety and Environment, 2001, 1(5): 22 - 27.
- [2] 胡湘渝. 气相爆轰波结构研究[R]. 北京:中国科学院力学研究所, 2001.
- [3] Schultz E, Shepherd J. Validation of Detailed Reaction Mechanisms for Detonation Simulation[R]. Explosion Dynamics Laboratory Report FM99-5, Graduate Aeronautical Laboratories California Institute of Technology, 2000.
- [4] Jiang ZL, Takayama K, Chen YS. Dispersion conditions for non-oscillatory shock capturing schemes and its applications [J]. Computation Fluid Dynamics Journal, 1995, 2(4): 137 - 150.
- [5] Jiang ZL, Falcovitz J, Takayama K. Numerical simulation of detonation in converging chambers [J]. JSM International Journal, Series B. 1997, 40(3): 422 - 431.
- [6] Jiang ZL, Zhao W, Wang C. Forward-running detonation drivers for high-enthalpy shock tunnels[J]. AIAA Journal, 2002, 40(10): 2009 - 2016.

## Numerical simulation of hydrogen-oxygen detonation wave propagation in an expansion chamber

SUN Yu-feng<sup>\*</sup>, ZHANG De-liang, HU Zong-min, JIANG Zong-lin  
(Institute of Mechanics, Chinese Academy of Science, Beijing 100080, China)

**Abstract :** Propagation of hydrogen-oxygen detonation wave in an abruptly expanding chamber and a gradually expanding chamber was simulated by solving the axisymmetrical Euler equations. The dispersion control dissipation scheme (DCD) and a detailed chemical reaction kinetics model with 8 sections 20 reactions were adopted. Numerical results indicate that in some cases detonation wave may quench when detonation wave front diffracts at the entrance of expanding chamber due to the extreme declination of temperature and pressure. The reinitiation was found in some cases depending on the sensitivity of detonation gas. Comparison shows that detonation wave is more inclined to quench when propagating in an abruptly expanding chamber than in a gradually expanding chamber.

**Key words :** mechanics of explosion ; propagation of detonation ; DCD ; expanding chamber ; sensitivity

\* Corresponding author : SUN Yu-feng

E-mail address : windycloud127@hotmail.com

Telephone : 010-62657747