

散心柱面胞格爆轰演化数值研究^{*}

王 春¹, 姜宗林¹, 胡宗民^{1,2}, 韩桂来¹

(1. 中国科学院 力学研究所, 北京 100190;

2. 庆尚国立大学 航空机部品研究中心, 晋州 660- 701, 韩国)

(周哲玮推荐)

摘要: 采用有限体积方法, 在自适应非结构网格上求解二维含化学反应 Euler 方程, 数值研究了柱面胞格爆轰波演化现象. 化学反应计算采用单步可逆总包反应模型. 数值结果演示了散心柱面胞格爆轰波演化过程中胞格结构的分裂现象, 获得了与实验结果定性一致的结果. 胞格结构的分裂演化在点火区近场和远场显示了不同的特点, 其中爆轰波传播过程中波阵面当地曲率的变化是控制胞格分裂演化行为的关键因素. 数值结果也显示胞格结构的分裂现象来自于爆轰波前锋结构中横波的自组织行为, 即沿爆轰波波面传播的小扰动发展成为横波的过程, 这种现象与胞格爆轰波的不稳定性密切相关.

关键词: 爆轰; 胞格不稳定性; 化学反应; 激波; 数值模拟

中图分类号: O381 **文献标识码:** A

引 言

在多维爆轰波的传播过程中, 通过烟迹膜技术可以观察到爆轰波波阵面后形成的胞格结构. 大量的实验和数值结果显示胞格结构的尺寸对于给定的可爆气体是一个特征参数^[1]. 爆轰波前锋中的横波传播对爆轰波胞格结构的形成和演化起到了重要的作用, 横波的运动导致了爆轰波波阵面上三波结构的传播和碰撞. 胞格尺寸的规则性强烈依赖于给定可爆气体化学动力学机制. 当可爆气体中含有较多的稀释惰性气体并起爆后, 实验中可以观察到较为规则的胞格结构. 多维爆轰波的数值模拟演示了在较高的活化能情况下, 胞格结构转化为不规则胞格. 在某些情况下, 爆轰波胞格结构的演化具有特殊的特点, 可以用于研究爆轰波胞格结构的稳定性问题. 如在散心柱面爆轰波传播过程中, 随着爆轰波波阵面面积的扩张, 胞格尺寸不能随之增加, 胞格数目必然随着波阵面面积的扩张而不断增加, 即爆轰波胞格结构发生分裂以保证胞格尺寸与相应化学反应动力学参数相匹配, 特别是对于具有规则胞格结构的散心柱面爆轰波. 这种现象通常称为胞格结构分叉. 图 1 显示 Soloukin 等于 1963 年发表的散心柱面爆轰波的一个实验结果, 研究结果显示了 C_2H_2/O_2 混合气体中心起爆后, 随着散心爆轰波的传播, 胞格结构发生了分裂演化^[2]. Lee 等进一步实验研究了散心柱面爆轰波的传播, 认为在爆轰

* 收稿日期: 2008-04-17; 修订日期: 2008-10-08

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(90205027); 中国博士后基金资助项目(200537444)

作者简介: 王春(1975-), 男, 山西大同人, 博士, 助理研究员(联系人. Tel: + 86-10-82543998; E-mail: wangchun@imech.ac.cn).

波阵面的扩张过程中,局部强爆炸波逐渐衰减的循环过程末期必须再形成多个局部爆炸点,上述现象才能发生^[3].

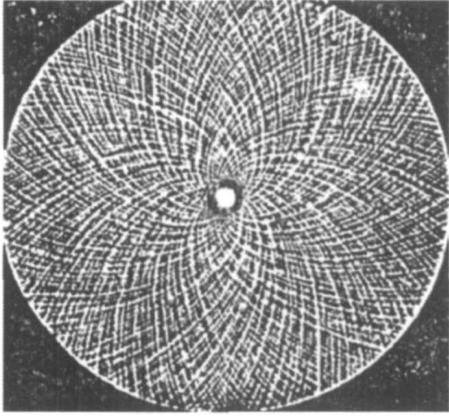


图1 C₂H₂/O₂混合气体散心柱面爆轰胞格演化实验照片

目前的爆轰波不稳定性理论主要关心平面爆轰波在小扰动作用下的失稳机制.如文献[4]通过对线性化反应水动力学方程的 Fourier 分解及 Laplace 变换分析,认为爆轰波的稳定性问题可以简化给定横波数 $\varepsilon/(2\pi)$ 的一维、时间相关的爆轰波稳定性问题.“方波模型”也被用于研究一维爆轰波的不稳定性^[5,6].对于散心的柱面或者球面爆轰波,新的横波结构的产生来自于爆轰波胞格结构的不稳定性,也就是说,爆轰波前锋结构中横波的自组织演化行为.

本文主要考虑散心柱面胞格爆轰的不稳定性及其传播过程中横波的自组织再生机制.研究方法是采用有限体积方法,在二维自适应非结构网格上数值求解含化学反应欧拉方程,获得散心柱面胞格爆轰

波传播中胞格结构及新横波结构自组织演化的行为,并分析其特点及不稳定特性.化学反应模型采用了单步可逆的总包化学反应模型.

1 模型描述

数值计算模型如图2所示,在一柱形容器内充入一定的可爆气体,在容器中心设置一个强的线爆炸源来起爆可爆混合气体.如果起爆源的能量和功率足够强,则气体起爆后先形成过驱散心爆轰波,随着散心爆轰波的传播,过驱爆轰波逐步衰减并形成一个自持传播的散心柱面爆轰波.忽略爆轰波在垂直纸面方向上的多维结构,则上述模型简化为一个二维传播的散心柱面爆轰波.

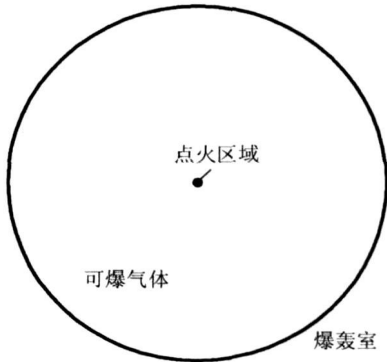


图2 数值计算模型

散心柱面爆轰波在流场扰动的作用下,波阵面失稳,形成爆轰波波阵面中的多维结构,即在爆轰波波阵面上形成横向传播的横波结构,伴随着爆轰波波阵面上横波的运动和碰撞,三波结构形成的高速剪切作用在烟迹膜上形成爆轰波特有的胞格结构,胞格结构的轮廓对应于三波结构的轨迹.数值模拟中通常通过记录当地时间历史上的压力峰值,显现爆

轰波形成的胞格结构.

2 控制方程和数值方法

我们仅研究爆轰波前锋多维结构的演化行为,则流体的粘性、热传导及组分和温度的扩散效应通常可以忽略.在这些假设条件下,散心柱面爆轰波的运动可以通过求解二维含化学反应 Euler 方程得到.为了便于分析化学动力学参数的影响,本文中的化学反应模型计算采用了单步可逆的总包化学反应模型.对于理想气体,直角坐标系下的控制方程可以表达为

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

其中

$$U = [\rho, \rho u, \rho v, \rho E, \rho \lambda]^T, F = [\rho u, \rho u^2 + p, \rho uv, (\rho E + p)u, \rho \lambda u]^T, \\ G = [\rho v, \rho uv, \rho v^2 + p, (\rho E + p)v, \rho \lambda v]^T, S = [0, 0, 0, 0, W]^T,$$

上述表达式中, ρ, p 和 E 分别代表气体密度、压力和单位质量总内能. u 和 v 为气体在 x 和 y 方向上的速度. λ 代表化学反应进程变量, W 为化学反应源项. 单位质量总内能表达为

$$E = \frac{p}{(\gamma - 1)\rho} + \frac{1}{2}(u^2 + v^2) - \lambda Q, \quad (2)$$

其中, γ 为气体多方指数, Q 为单位质量气体所释放的化学能.

对于 Mole 数不变的单步可逆化学反应模型, 化学反应源项计算可以用一个简化的 Arrhenius 公式表示:

$$W = [k_f(1 - \lambda) - k_r \lambda] e^{-E_a/(R_0 T)}, \quad (3)$$

其中, k_f 和 k_r 分别代表正向和逆向的化学反应速率, E_a, R_0 和 T 为反应活化能、通用气体常数和气体温度, 根据理想气体状态方程, 气体温度 T 和气体压力 p 、密度 ρ 有如下关系式:

$$T = p/(\rho R), \quad (4)$$

R 为反应物和生成物的气体常数. 对于可逆的化学反应, 前向反应速率系数 k_r 和逆向反应速率系数 k_f 通过化学平衡常数 π_e 相关联:

$$k_r = k_f/\pi_e. \quad (5)$$

如果不考虑粘性、热传导及扩散效应的影响, 气体的化学反应特性主要由 $k_f, \pi_e, E_a, Q, \gamma, R$ 以及气体初始的压力 p_0 和温度 T_0 来决定.

使用有限体积方法求解时, 控制方程可以转化为控制容积上的如下积分形式:

$$\iint_{\Omega} \frac{\partial U}{\partial t} dx dy + \int_{\Gamma} (F dy + G dx) = \iint_{\Omega} S dx dy, \quad (6)$$

其中, Ω 为控制容积的体积, Γ 为控制容积的边界. 控制容积采用非结构网格四边形单元, 控制变量固定在单元中心上, 如图 3 所示. 本文采用 HLLC 格式构造控制单元边界上的流动通量, 单元中心的控制变量采用二阶 MUSCLE 算法及一阶时间积分进行重构^[7-8].

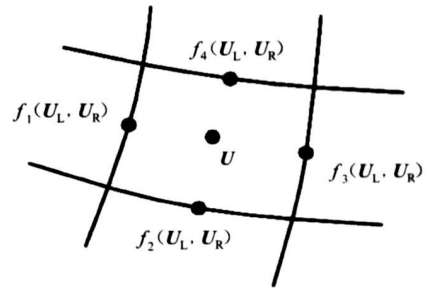


图 3 数值模拟中的控制单元

非结构网格根据流场密度梯度进行自适应加密, 最高加密层数两层, 相应的最小网格尺度可达 $\Delta = 0.02 \text{ mm}$. 网格加密通过阈值函数来控制, 当阈值函数大于设定的拆分阈值时, 控制单元通过拆分为 4 个子单元进行自适应

加密; 当阈值函数小于设定的合并阈值时, 通过拆分得到的 4 个子单元合并成为 1 个单元. 阈值函数定义为 ε_i :

$$\varepsilon_i = \max \left[\frac{|\rho_i - \rho_c|}{\alpha_f \rho_c dl + |\rho_i|}, \frac{|\rho_c - \rho_j|}{\alpha_f \rho_c dl + |\rho_j|} \right], \quad (7)$$

其中, i 和 j 代表为两个相邻的控制单元, c 代表着两个相邻控制单元之间的中心边界. ρ_i 和 dl 代表从单元 i 中心到单元 j 中心的梯度和空间尺度. α_f 为预定义函数避免在某些位置上出现数值奇异点^[7-8].

本文的数值模拟中, 可爆气体的初始温度和压力给定为: $T_0 = 300 \text{ K}, p_0 = 0.1013 \text{ MPa}$. 可爆气体及其产物的气体常数取为: $R = 287.096 \text{ J}/(\text{mol} \cdot \text{K})$. 气体多方指数取 $\gamma = 1.4$. 化

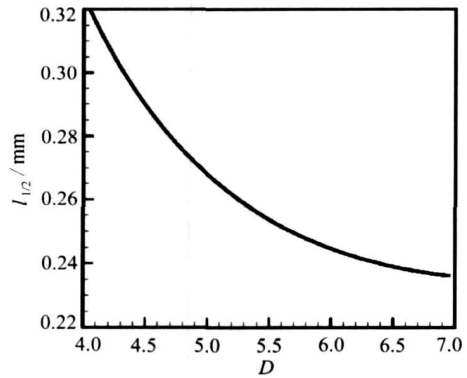
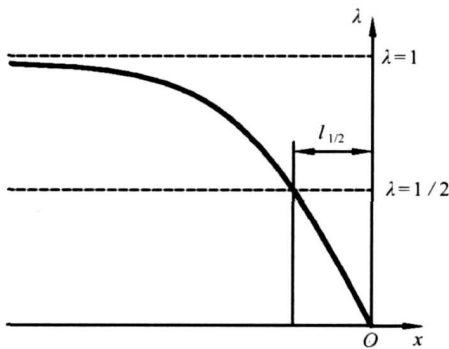
学反应的控制参数选择为: $k_f = 8.5E+8$, $\pi_c = 20$, $E_a = 1.6E+5$ J, $Q = 1.58E+6$ J.

柱形腔的内半径为 0.1 m, 考虑到计算容量和速度的限制, 本文仅取 1/4 区域进行计算. 在柱形腔的中心砍掉一个小的圆形区域避免可能出现的数值奇点. 内周(砍掉的圆型区域边界)和外周(计算域伞形外边界)取滑移壁面边界条件. 两个径向的边界都取为对称边界条件. 数值模拟中, 通过在柱形腔中心设置一小的 高温高压区 作为爆轰起爆的点火源.

3 结果和讨论

3.1 散心柱面爆轰波胞格结构的规则性

对于单步的化学反应模型, 影响爆轰波稳定性主要有 4 个无量纲参数, 气体多方指数 γ , 化学反应热 $\beta = \gamma Q / (R_0 T_s)$, 活化能 $\theta = \gamma E_a / (R_0 T_s)$ 以及爆轰波的过驱度 $f = (D/D_{CJ})^2$. 其中 T_s 为激波波后温度, D_{CJ} 为 CJ 爆轰的 Mach 数, 可以通过 Rankine-Hugoniot 条件精确计算(把爆轰波作为一个间断面处理). 已有的数值结果发现在较低的反应活化能情况下, 一维爆轰波具有规则振荡的特性, 二维爆轰波具有相对规则的爆轰胞格结构. 当反应活化能较高时, 一维爆轰波的振荡出现高频振荡(即非规则振荡)现象, 二维爆轰波胞格演化出现非规则胞格结构. 本文的数值模拟结果中, 无量纲的反应活化能约在 $\theta = 10.2$, 对应于较低的反应活化能, 因此数值获得的爆轰波胞格结构为规则胞格.



(a) 激波随体坐标下半反应区长度定义

(b) 半反应区长度随爆轰 Mach 数的变化关系

图 4 半反应区长度的定义及随爆轰波 Mach 数的变化关系

一般而言, 爆轰波反应区长度对于爆轰波动力学参数分析是一个非常重要的量. 在单步化学反应模型中, 反应区长度为一个无限大的长度, 因此通常采用半反应区长度作为化学反应的特征长度. 半反应区长度 $l_{1/2}$ 定义为从前导激波到化学反应进程变量达到 $\lambda = 1/2$ 处的距离. 在胞格爆轰的数值模拟中, 对于半反应区长度内的网格分辨率有一个最低的要求^[9], 否则数值耗散将抑制爆轰波前锋中横波的发展. 图 4(a) 显示了半反应区长度 $l_{1/2}$ 的定义, 图 4(b) 给出含化学反应激波传播时, 半反应区长度 $l_{1/2}$ 随前导激波不同运动 Mach 数的变化趋势. 在我们的数值结果中, 在半反应区长度尺度范围内, 约有 10~15 个网格点, 不需要添加强的初始数值扰动来触发横波的发展. 横波的生成主要来自于爆轰波稳定性对于小数值扰动的响应, 在爆轰波传播过程中, 横波结构没有被数值耗散所削弱.

图 5 显示了本文数值模拟得到的散心柱面爆轰波胞格结构演化图, 胞格结构通过记录当地时间历史的压力峰值得到, 每一胞格的边界与爆轰波前锋中的三波结构轨迹相对应. 在较

低的反应活化能条件下,数值胞格相对规则.由数值得到的散心柱面爆轰波胞格结构演化图可以发现,在不同的区域,胞格结构的演化显示了不同的特点.在距起爆点较近的近场区域,胞格结构迅速形成.在距起爆点较远的远场区域,新胞格结构生成的速度相对较慢.图6(a)和图6(b)分别显示了近场和远场两个典型的流场区域.在近场区域,在原有的三波结构轨迹之间,较多的新三波结构轨迹在较短的距离内快速产生;而在远场区域,新三波结构轨迹的产生相对较慢,数量也大大小于近场区域的新三波结构轨迹.换句话说,在近场附近,胞格结构的分裂速度非常快,而在远场区域,胞格结构的分裂相对较慢.显然,上述现象主要来自于近场和远场爆轰波波面当地曲率的差别.在近场区域,爆轰波波面的当地曲率相对较大;而在远场区域,爆轰波波面的当地曲率相对较小.爆轰波波面当地曲率的差异导致了胞格分裂特性的差异.

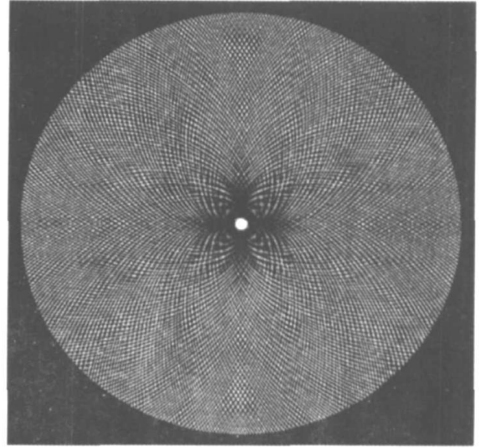


图5 数值模拟的散心柱面爆轰胞格演化图

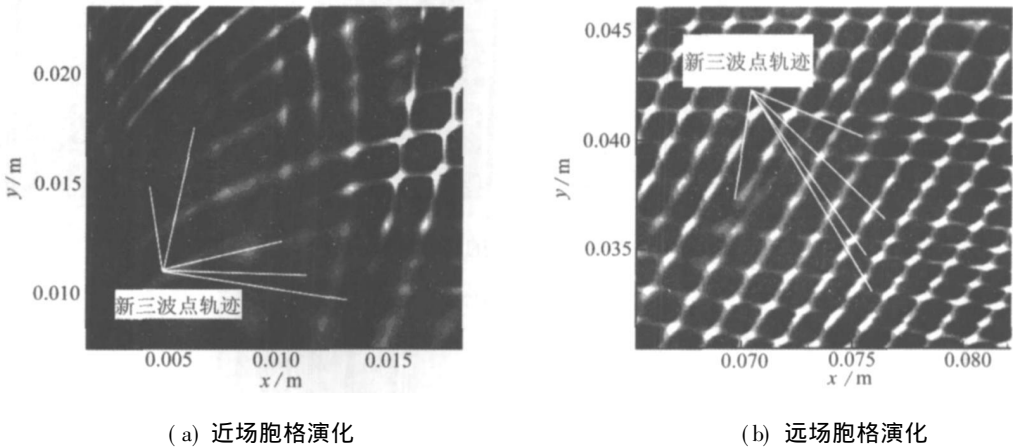


图6 散心柱面爆轰近场和远场胞格演化特征

由图5和图6我们也可以看出,爆轰波胞格结构宏观上的规则性并不代表微观尺度上新三波结构产生具有绝对的规则性.新三波结构的产生极大地依赖于爆轰波的当地特征,例如爆轰波波面曲率的变化、气体动力学特性及当地化学反应.

3.2 散心柱面爆轰波传播过程中横波的自组织现象

散心柱面胞格爆轰波的演化显示了一个周期性的过程,随着爆轰波波面面积的扩张,当胞格尺寸变的足够大时,胞格将发生分裂以保证胞格尺寸满足特定的要求,即对于给定初始气体动力学状态的给定气体爆炸物,胞格尺寸保持一个近似相等的尺寸.

Watt 和 Sharpe 与 Wang 和 Jiang 的研究结果表明,散心柱面胞格爆轰的胞格分裂模式可以归结为以下几种:爆轰波的过膨胀,爆轰波波面皱褶以及波面扭结.这几种模式较大地依赖于爆轰波的当地特征^[10-11].

显然,散心柱面爆轰波传播过程中,胞格结构的分裂机制来自于爆轰波的不稳定性,对于具有多维结构的爆轰波,爆轰波的不稳定性表现为胞格结构的不稳定性.在散心柱面胞格爆

轰波传播过程中,胞格结构的分裂的主要机制体现为沿爆轰波波面传播的小扰动波如何发展成为强横波.

图7显示了近场区域4个连续时刻流场密度分布的三维视图,在散心柱面胞格爆轰波的早期阶段,沿爆轰波波阵面传播的扰动波在较短的距离内发展成为强横波.通过三波结构的碰撞,原有和新生成的横波逐步调整它们自身,在爆轰波波面上达到适合的间隔.显然,散心柱面爆轰波的局部扩张远远快于平面爆轰波的局部扩张,特别是在点火区近场,这样的快速扩张导致了散心柱面爆轰波传播过程中胞格结构的快速分裂,通常有若干个新的横波同时产生.

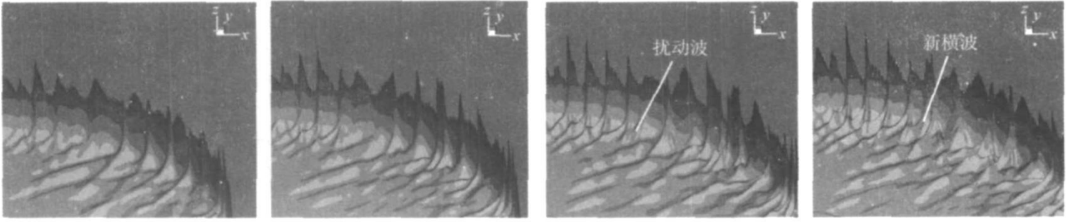


图7 近场4个连续时刻的流场密度三维视图

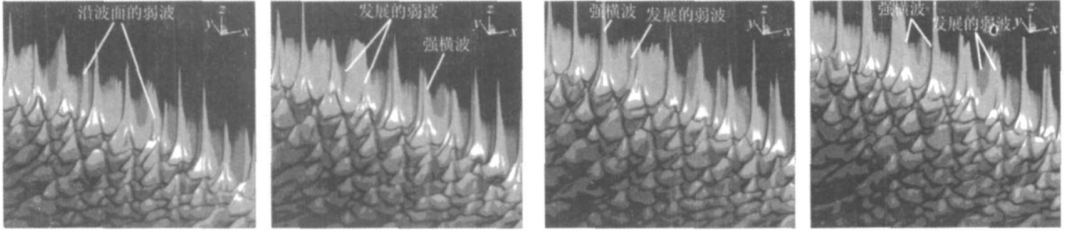


图8 远场4个连续时刻的流场密度三维视图

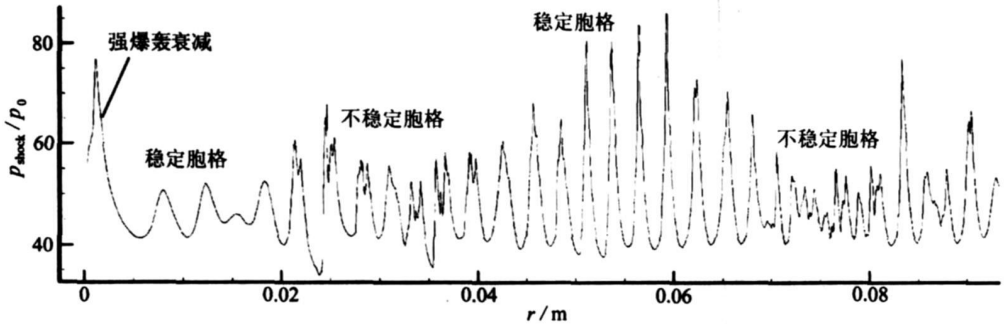


图9 无量纲激波压力随径向距离变化

图8显示了远场区域4个连续时刻流场密度分布的三维视图,在散心柱面胞格爆轰波的远场区域,散心柱面爆轰波面的局部扩张相对较慢,沿爆轰波波面传播的扰动波发展成为强横波的速度相对较慢.通过三波结构的碰撞,原有和新生成的横波也逐步调整它们自身,在爆轰波波面上达到相对较为均匀的间隔.在远场区域,散心柱面爆轰波的局部扩张相对于近场要慢得多,导致了在远场区域,胞格结构的分裂速度相对较慢,新增数量相对较少.

图9显示了沿 45° 角径向上的当地激波压力的分布(取时间历史上的当地最大压力).在起爆阶段,首先形成强的过驱爆轰波.其后,强过驱爆轰波迅速地衰减进入了一个稳定阶段,当地激波压力的振荡较为规则,此处的散心柱面爆轰对应于稳定胞格阶段.爆轰波到达 $r =$

0.02 m 位置附近, 激波压力振荡变得不规则, 有高频振荡现象出现, 此处的散心柱面爆轰波对应于不稳定胞格阶段. 通过横波的自组织演化, 在 $r = 0.04$ m 位置附近, 激波压力振荡再次变得规则, 表明散心柱面爆轰波再次进入稳定胞格阶段. 胞格结构的演化经历不稳定胞格、胞格分裂、稳定胞格的一个循环周期. 通过这个周期, 胞格的数目大量地增加.

从 $r = 0.07$ m 位置起, 胞格结构的进入下一个周期分裂阶段, 激波压力从规则振荡转变为非规则振荡, 再次通过横波的自组织, 激波压力的振荡转变为规则振荡. 所以在散心柱面爆轰波胞格结构演化过程中, 胞格的分裂具有显著的周期性特点. 在每一周期中, 发生了稳定胞格向非稳定胞格转换、非稳定胞格再向稳定胞格转换的现象, 激波压力振荡行为的变化反映了胞格演化过程中这两种机制的转换过程, 其中, 横波的自组织运动起到了关键的作用. 本文提到的横波自组织再生是散心柱面爆轰波演化过程的一个典型的特征, 它以不同于平面胞格爆轰波演化过程的方式反映了爆轰波不稳定性的一种基本机制.

3.3 横波沿爆轰波波面的传播

如前所述, 对于给定初始状态的特定可爆气体的爆轰, 胞格尺寸是一个特征参数, 它已经被广泛地用于分析爆轰的动力学参数特性, 如点火能量、临界管径等. 散心柱面爆轰波的传播总是使爆轰波波面的长度趋向于胞格尺寸的整数倍, 特别是对于具有规则胞格结构的散心柱面胞格爆轰. 从图 1 和图 5, 我们可以发现爆轰波前锋中的三波结构运动轨迹表现为绕中心起爆区的一个螺线轨迹, 这一特点与平面爆轰波不同. 不同三波结构轨迹形成的螺线非常相似, 这意味着螺线轨迹可能是散心柱面胞格爆轰波的一个特征现象.

散心柱面胞格爆轰波波阵面中三波结构形成的螺线轨迹可以由以下方程定义:

$$V_r = D, \quad V_\theta = W_d/r, \quad (8)$$

其中, D 为爆轰波的波速, W_d 为横波沿爆轰波波面传播的速度. 在散心柱面爆轰波的近场, D 和 W_d 较大地依赖于爆轰波的过驱度 f . 当爆轰波传播的距离趋于无穷大, V_θ 趋近于 0, 这表明散心柱面爆轰波趋向于平面爆轰波.

4 结 论

本文使用单步可逆的总包化学反应模型, 数值研究了散心柱面爆轰波的胞格演化现象, 研究结果表明, 在起爆近场区, 散心柱面爆轰波的胞格分裂现象受爆轰波波面当地曲率的变化影响较大. 激波压力的变化显示了强爆轰波的衰减过程以及胞格分裂演化中稳定胞格与非稳定胞格相互转化的周期性过程. 新横波结构的产生来自于小扰动沿爆轰波波面的发展及增长, 这一现象与爆轰波的不稳定性相关. 本文建立了一个描述散心柱面胞格爆轰中三波结构运动轨迹的螺线方程, 与平面胞格爆轰相比具有特殊性.

致谢 本文得到了国家自然科学基金(90205027)以及中国博士后基金(2005037444)的资助. 中国科学技术大学的李辉煌博士提供了部分计算程序, 在此表示感谢.

[参 考 文 献]

- [1] Lee J H S, Lee B. Cylindrical Imploding Shock Waves[J]. *Physics of Fluids*, 1965, **8**(12): 2148-2152.
- [2] 孙承纬, 卫玉章, 周之奎. 应用爆轰物理[M]. 北京: 国防工业出版社, 2000, 90-94.
- [3] Lee J H S. Initiation of gaseous detonation[J]. *Ann Rev Phys Chem*, 1977, **28**(3): 75-104.

- [4] Erpenbeck J J. Detonation stability for disturbance of small transverse wavelength[J]. *Physics of Fluids*, 1966, **9**: 1293-1306.
- [5] Zaidel R M, Zeldovich Y B. One-dimensional instability and attenuation of detonation[J]. *Zh prikl Mekh Tekh Fiz*, (English Translation: Wright-Patterson Airforce Base, Dayton, Ohio, FTD-MT-64-66, p85), 1963(6): 59-65.
- [6] Alpert RL, Toong T Y. Periodicity in exothermic hypersonic flows about blunt projectiles[J]. *Astronaut Acta*, 1962, **17**: 539-560.
- [7] Sun M. Numerical and experimental studies of shock wave interaction with bodies[D]. PhD thesis. Japan: Tohoku University, 1998.
- [8] Li H H. Experimental and numerical study on unsteady complex flow and wave interaction[D]. PhD thesis. Hefei: University of Science and Technology of China, 2005.
- [9] Christiane Helzel, Randall J Leveque, Gerald Warnecke. A modified fractional step method for the accurate approximation of detonation waves[J]. *SIAM J Sci Comput*, 2000, **22**(4): 1489-1510.
- [10] Watt S D, Sharpe G J. Linear and nonlinear dynamics of cylindrically and spherically expanding detonation waves[J]. *Journal of Fluid Mechanics*, 2005, **522**(1): 329-356.
- [11] Wang C, Jiang Z L. Numerical simulation of the cellular structure evolution in cylindrically diverging detonation[A]. In: Hannemann Klaus, Seiler Friedrich, Eds. *Proceeding of 26th International Symposium on Shock Waves* [C]. Gottingen, Germany: Springer-Verlag, 2007.

Numerical Investigation on the Evolution of the Cylindrical Cellular Detonation

WANG Chun¹, JIANG Zong-lin¹, HU Zong-min^{1,2}, HAN Gui-lai¹

(1. Institute of Mechanics, Chinese Academy of Sciences,

Beijing 100190, P. R. China;

2. ReCAPT, Gyeongsang National University,

Jinju, Kyeongnam 660-701, South Korea)

Abstract: Cylindrical cellular detonation was numerically investigated by solving the two-dimensional reactive Euler equations with finite volume method on a two-dimensional self-adaptive unstructured mesh. The one-step reversible chemical reaction model was used to simplify the control parameters of chemical reaction. Numerical results demonstrate the evolution of cellular cell splitting of cylindrical cellular detonation which has been explored by experimental results. The splitting of cellular structures shows different features in the near and far field from the initiation zone. The variation of the local curvature is a key factor for behaviors of cell splitting of cylindrical cellular detonation in propagation. Numerical results also show that the splitting of cellular structures is dominated by from the self-organization of transverse waves which correspond to the development of small disturbances along the detonation front related to detonation instability.

Key words: detonation; cellular instability; chemical reaction; shock; numerical simulation