

激波与火焰相互作用的化学动力学模拟*

董刚 范宝春 叶经方 江强

南京理工大学动力工程学院, 南京 210094

摘要 利用改进的 Van Leer 格式, 通过求解带化学反应的 Euler 方程, 对 $\text{CH}_4/\text{O}_2/\text{N}_2$ 混合气中激波与火焰相互作用过程进行了二维数值模拟, 其中使用了 $\text{CH}_4/\text{O}_2/\text{N}_2$ 的化学动力学反应机理描述化学反应过程. 计算结果与实验结果进行了比较, 定性上符合得较好. 讨论了不同激波 Mach 数和不同初始组分对激波导致火焰失稳的影响, 结果表明激波 Mach 数的增加或初始混合气中 CH_4 和 O_2 的增加会促进火焰的变形、膨胀、乃至爆轰. 从化学反应速率的角度揭示高反应活性的混合气能够加速反应体系的反应速率, 促使火焰在变形的同时, 加快燃烧过程并向爆轰状态转变.

关键词 激波 火焰 失稳 化学反应速率

许多燃烧系统中都会发生激波与火焰的相互作用, 例如超燃发动机中产生的激波会改变燃烧特性. 在工业灾害中(如瓦斯爆炸和建筑物火灾中), 激波作用于火焰会进一步加快燃烧速度, 甚至产生燃烧向爆轰转换(deflagration detonation transition, DDT)的现象. 由于激波与火焰的相互作用会改变整个燃烧过程, 因而引起人们的广泛关注.

Markstein^[1]首先通过实验观察了激波与火焰的相互作用, 实验表明火焰在激波的作用下会发生变形, 系统的放热率明显增加; 近期 Thomas 的实验^[2]则进一步表明, 在反射激波的作用下, 球形火焰的燃烧速度会加快, 并导致爆轰的产生. 除实验研究外, 国外学者针对这些现象进行了大量的数值研究, Picone 等^[3]首先模拟了惰性低密度高温球与激波的相互作用, 该研究没有考虑系统的燃烧放热而主要探讨激波与火焰相互作用所导致的涡的形成; Ton 等^[4]则进一步考虑了相互作用的化学反应过程, 并讨论了反应放热对涡的影响. Khokhlov 等^[5~7]采用数值计算的方法详细研究了 $\text{C}_2\text{H}_2/\text{O}_2/\text{N}_2$ 混合物的火焰与激波的相互作用过程, 并指出 Richtmyer-Meshkov 不稳定是导致火焰失稳变形的

主要原因, 而且失稳火焰中压力波动会形成所谓的热点(hot spot), 从而引发 DDT 过程的发生. 上述数值研究没有或采用了简单的化学反应模型, 因而不能考虑到真实的化学反应过程对火焰失稳变形乃至 DDT 现象的影响. 总体来讲, 激波与火焰的相互作用是一个比较复杂的过程, 对激波导致火焰的失稳过程的影响因素还需要作仔细的研究.

不同于上述研究, 本文的研究对象为 $\text{CH}_4/\text{O}_2/\text{N}_2$ 混合气, 采用了更接近实际的 $\text{CH}_4/\text{O}_2/\text{N}_2$ 化学反应动力学机理来数值模拟激波与火焰相互作用的过程, 其中考虑了不同激波 Mach 数和不同初始组分等参数变化对火焰失稳及 DDT 过程的影响. 由于考虑了更接近实际的化学反应, 因而可从化学动力学的角度对激波导致火焰失稳的规律进行分析.

1 数学模型

为模拟激波与火焰的相互作用过程, 本文使用了带有化学反应的二维可压缩流动的 Euler 方程

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial F}{\partial x} + \frac{\partial G}{\partial y} + S = 0, \quad (1)$$

2003-07-21 收稿, 2003-09-08 收修改稿

* 国家自然科学基金资助项目(批准号: 10172047)

E-mail: dgvehicle@yahoo.com

其中

$$U = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ E \\ \rho Y_1 \\ \vdots \\ \rho Y_K \end{pmatrix}, F = \begin{pmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ \rho uv \\ u(E + p) \\ \rho u Y_1 \\ \vdots \\ \rho u Y_K \end{pmatrix},$$

$$G = \begin{pmatrix} \rho v \\ \rho uv \\ \rho v^2 + p \\ v(E + p) \\ \rho v Y_1 \\ \vdots \\ \rho v Y_K \end{pmatrix}, S = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \rho \omega_1 \\ \vdots \\ \rho \omega_K \end{pmatrix},$$

式中 ρ 为密度, p 为压力, u 和 v 分别为 X 和 Y 方向的速度分量, Y_k 为组分 k 的质量分数 ($k=1, \dots, K$), E 为单位体积的总内能 $E = (e_t + \frac{u^2 + v^2}{2})\rho$, 其中总的比内能 $e_t = C_v T + \sum Y_k h_k^0$, 混合物定容比热 $C_v = \sum Y_k C_{v,k}$, $C_{v,k}$ 为组分 k 的定容比热, h_k^0 为组分 k 的生成焓, 组分的这些热力学数据来自文献 [7]. ω_k 为组分 k 质量为单位的化学反应速率, 可表达为

$$\omega_k = \sum_{i=1}^1 (\gamma'_{ki} - \gamma''_{ki}) \left(k_{fi} \prod_{k=1}^K [X_k]^{\gamma'_{ki}} - k_{bi} \prod_{k=1}^K [X_k]^{\gamma''_{ki}} \right), \quad (2)$$

其中 γ'_{ki} , γ''_{ki} 分别表示第 i 个基元反应中第 k 种物质正、逆反应计量系数; $[X_k]$ 为第 k 种物质的摩尔分数; k_{fi} , k_{bi} 分别表示第 i 个基元反应的正、逆反应速率常数, 它们遵循 Arrhenius 形式.

为了避免不同过程特征时间的差异而引起的方程刚性, 本文采用分裂格式, 将化学反应项与对流项分开处理. 化学反应项采用基于 Gear 算法的隐式方法求解以消除反应刚性的影响. 对流项采用矢量通量分裂格式 (flux splitting), 该格式根据特征值的正负号, 将矢量通量 F 和 G 分裂成两部分, 即 $F = F^+$

$+ F^-$, $G = G^+ + G^-$, 其中 F^+ 和 G^+ 对应正特征值, F^- 和 G^- 对应负特征值, 采用迎风格式有

$$U_{i,j}^{n+1} = U_{i,j}^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} (F_{i+1,j}^- - F_{i,j}^- + F_{i,j}^+ - F_{i-1,j}^+) - \frac{\Delta t}{\Delta y} (G_{i,j-1}^- - G_{i,j}^- + G_{i,j}^+ - G_{i,j+1}^+). \quad (3)$$

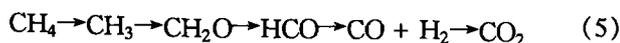
为防止 Steger-Warming 通量矢分裂格式在滞止点和跨音速点出现导数间断, 本文采用了 Van Leer 通量矢分裂格式 (VLS), 并利用冻结绝热指数和引进生成焓, 从而将其推广至化学反应流动, 以矢量通量 F 为例, 有

$$F^+ = \begin{cases} F & M_x \geq 1 \\ 0 & M_x \leq -1 \\ f^+ & |M_x| < 1 \end{cases} \text{ 和 } F^- = \begin{cases} 0 & M_x \geq 1 \\ F & M_x \leq -1 \\ f^- & |M_x| < 1 \end{cases}, \quad (4)$$

$$f_0^\pm = \begin{pmatrix} f_0^\pm \\ f_0^\pm \frac{(\gamma - 1)u + 2a}{\gamma} \\ f_0^\pm v \\ f_0^\pm \left[\frac{(\gamma - 1)u + 2a}{2(\gamma^2 - 1)} \right]^2 + \frac{v^2}{2} + \sum Y_k h_k^0 \\ f_0^\pm Y_1 \\ \vdots \\ f_0^\pm Y_K \end{pmatrix}, \quad f_0^\pm = \pm \rho a \left(\frac{M_x \pm 1}{2} \right)^2,$$

其中 γ 为冻结绝热指数; $M_x = u/a$, a 为当地声速.

为描述真实的 CH_4 氧化反应过程, 本文使用了作者构造的 $\text{CH}_4/\text{O}_2/\text{N}_2$ 反应的半详细动力学机理, 它由 19 个基元反应和 14 种组分构成^[8], 该机理反映了甲烷氧化成 CO_2 的反应途径:



此外, 活性自由基 OH , H 和 O 作为链传播物质始终贯穿于反应过程中.

2 计算结果与讨论

设无限长管内充满 $\text{CH}_4/\text{O}_2/\text{N}_2$ 混合物, 初始

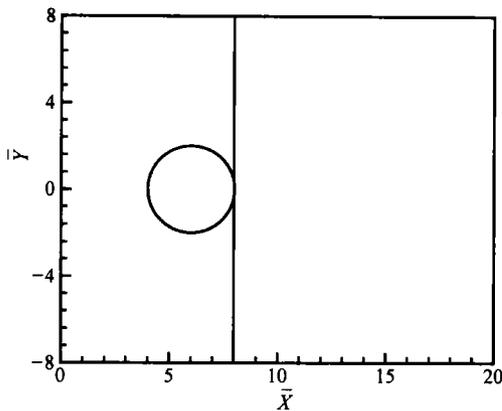


图1 计算初始区域示意图

状态为环境状态. 采用无量纲单位 $\bar{X} = X/L$ 和 $\bar{Y} = Y/L$ (L 为特征长度), 则激波坐标中的计算域如图1所示, $\bar{X} = 0$ 和 $\bar{X} = 20$ 分别为流场进口和出口边界条件, $\bar{Y} = -8$ 和 $\bar{Y} = 8$ 分别采用绝热刚性的固壁边界条件.

计算初始的激波阵面位于 $\bar{X} = 8$ 处, $\bar{X} < 8$ 为波前状态, 激波前中心位于 $\bar{X} = 6$, $\bar{Y} = 0$ 处 $r/L = 2$ 的火团在瞬间完全燃烧. 计算考虑了不同入射激波 Mach 数以及不同的初始 $\text{CH}_4/\text{O}_2/\text{N}_2$ 配比(质量分数比)的变化, 以考察这些计算初始参数对激波与火焰相互作用的影响.

2.1 计算结果与试验结果比较

为验证数值计算的有效性, 采用自制的卧式燃烧管对激波与火焰相互作用过程进行了实验研究, 实验装置的测试段见图2.

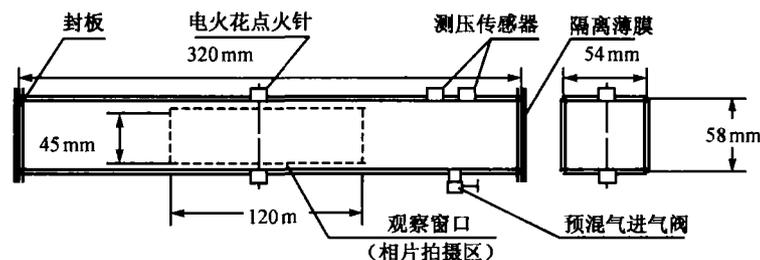
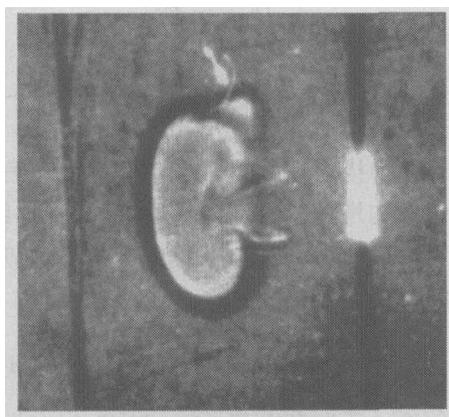


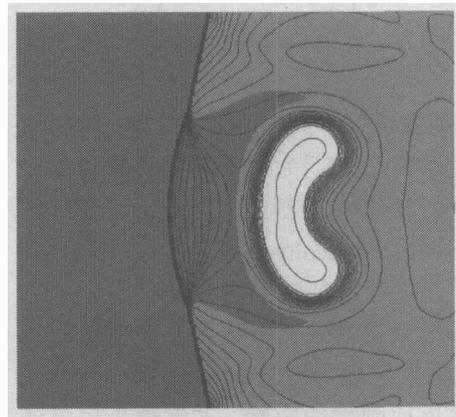
图2 实验测试段示意图

初始 $\text{CH}_4/\text{O}_2/\text{N}_2$ 混合物以一定配比在预混器预混 24 h 以上, 使用时通过配气系统经进气阀灌入

真空状态的试验段内. 流场显示由 YA-16 (C. Cranz & H. Schardin) 多闪光高速照相机拍摄. 两个压力测



(a) 实验结果



(b) 计算结果

图3 相同时刻下, 实验结果与计算结果的对比

$Y_{\text{CH}_4} : Y_{\text{O}_2} : Y_{\text{N}_2} = 0.06 : 0.22 : 0.72$, 质量分数比, $M_x = 1.2$, $\bar{t} = 5.67$

点分布在试验段上壁，两相距 25 mm. 测压高速数据采集处理系统由 kistler 211B 型压电传感器、kistler 211B 型放大器、JV5200 瞬态记录仪组成. 根据两点压力 $p-t$ 数据计算进入试验段的激波 Mach 数.

图 3 为同一无量纲时刻下，相同条件下实验结果与数值计算结果的对比. 其中无量纲时间定义为 $\bar{t} = ta_0/L$, t 为真实时刻 (s), a_0 为初始声速 ($m \cdot s^{-1}$), L 为特征长度 (m). 图 3(b) 的计算结果中, 明暗背景代表了温度变化 (越明表示温度越高, 以此可反映出火焰的形状), 线条代表了压力等值线 (左端的密集区表示激波). 由此可以看出, 在激波穿过火球之后的与实验结果大致相同的位置时, 计算的球形火焰的变形显示出扁的弯曲的“哑铃形”, 这与相同条件下实验拍摄的球形火焰的变化定性地一致 (图 3(a)), 从而表明了计算的合理性.

2.2 不同初始参数的计算结果与讨论

图 4 给出了相同的无量纲时刻 ($\bar{t} = 2.83$), 不同 Mach 数下的温度和压力的二维变化, 其中, 明暗背景以及等值线的含义与图 3(b) 中的相同. 可以看出在初始组分不变的条件下, 激波 Mach 数越大, 火焰越趋向于两头大中间细的弯曲“哑铃形”, 即火焰变形越明显, 且火焰随激波 Mach 数的增加有不断膨胀的趋势. 压力等值线结果显示, 在所有 Mach 数的计算条件下, 激波穿过火焰后, 入射激波在火焰附近发生分叉, 形成 λ 波, 这一现象在 Thomas 等的实验结果^[2]中可以得到证实. 随着激波 Mach 数的增加, 波后及火焰相应位置处的压力有所增大. 图 5 则给出了相同无量纲时刻 ($\bar{t} = 2.83$), 3 种不同初始 $CH_4/O_2/N_2$ 配比下的温度和压力的二维变化, 其中这些配比为 $Y_{CH_4} : Y_{O_2} : Y_{N_2} = 0.02 : 0.08 : 0.90$, $0.03 : 0.12 : 0.85$ 和 $0.04 : 0.16 : 0.80$ (质量分数比), 即当量比均为 1, 但燃料和氧化剂 (CH_4 和 O_2) 占整个混合气的比例不断增加. 可以看出, 在相同初始激波 Mach 数的条件下, 初始组分配比对计算结果有很大的影响: 当 CH_4 和 O_2 的含量较低时, 入射激波使得火焰变成很细的弯曲“哑铃形” (图 5(a)); 当 CH_4 和 O_2 的含量进一步增加时, 火焰则有所膨胀, 但仍为弯曲的“哑铃形” (图 5(b)); 当 CH_4 和 O_2 的含量增加至 $Y_{CH_4} : Y_{O_2} :$

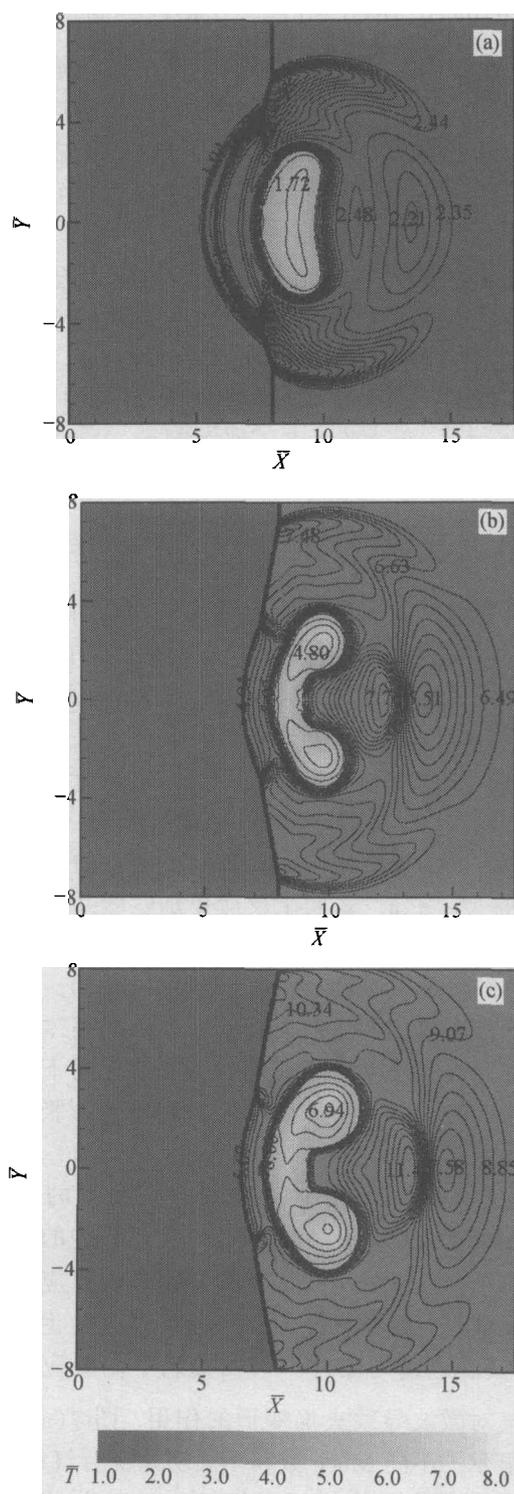


图 4 不同激波 Mach 数时, 压力 (等值线) 和温度 (阴影图) 的变化
 $\bar{t} = 2.83, Y_{CH_4} : Y_{O_2} : Y_{N_2} = 0.03 : 0.12 : 0.85$
 (a) $M_x = 1.5$; (b) $M_x = 2.5$; (c) $M_x = 3.0$

$Y_{N_2}=0.04:0.16:0.80$ 时, 火焰则急剧膨胀(图 5(c)), 同时压力等值线也表明其激波与火焰相互作用后所导致的波系结构也较为复杂, 其波后及火焰相应位置处的压力也有所增加, 这些现象表明激波在反应活性强的介质中会诱导火焰向爆轰的状态发展.

图 4 和 5 的计算结果表明, 初始混合气的配比, 即反应活性的大小, 对激波导致火焰变形要比激波初始 Mach 数的影响来得大. 图 6 给出了与图 5 相同条件下, 轴线位置处不同初始混合气配比时, 反应物 CH_4 、主产物 CO_2 、副产物 CO 及自由基 OH 浓度的变化关系. 可以看出, 当初始 CH_4 和 O_2 浓度较低时, CH_4 的消耗相对较少, 而 CO_2 的生成也较少, 副产物 CO 已经产生, 而 OH 则没有明显生成, 表明此时体系内的反应活性较弱(见图 6(a)); 随着初始 CH_4 和 O_2 浓度的增加, 在火焰内 CH_4 明显消耗, CO_2 生成量增加, CO 在火焰迎风面(右边)和背风面(左边)有一峰值产生, 在火焰内部也有峰值产生, OH 也有明显产生, 并显示了与 CO 相似的规律(图 6(b)); 当初始 CH_4 和 O_2 浓度进一步增大时, CH_4 消耗则明显加宽, CO_2 的生成量及范围进一步增加, 表明了反应更加剧烈并开始向爆轰的状态发展, 同时 CO 和 OH 也有所增加, 且在火焰内的峰值更靠近迎风面一侧(图 6(c)), 上述结果说明, 燃料和氧化剂比例的增加会提高体系的反应活性, 因而使得火焰在入射激波的作用下, 在不断向弯曲的“哑铃形”变形的同时不断膨胀, 并开始向爆轰过程过渡.

由于 $CH_4/O_2/N_2$ 体系中, 本文使用的基元反应 $CO+OH=CO_2+H$ 是 CH_4 氧化过程中的速率决定步骤^[9], CO_2 的生成量越大, 则表明反应放热越多, 反应进行得越剧烈, 因此考察 CO_2 的生成速率 $\dot{\omega}_{CO_2}$ (其表达式见(2)式)可以揭示不同反应活性的混合气对激波导致火焰变形的作用. 图 7(a)和(b)分别显示了不同 Mach 数和不同初始混合气组分下, CO_2 生成速率的变化, 可以看出, CO_2 生成速率的两个峰值分别出现在火焰与未燃混合气的迎风与背风的交界面上, 表明在这些交界面上化学反应迅速发生. 图 7(a)表明, 在背风面(左边峰值), CO_2 的生成速率随 Mach 数的增加有所增加, 表明在该侧

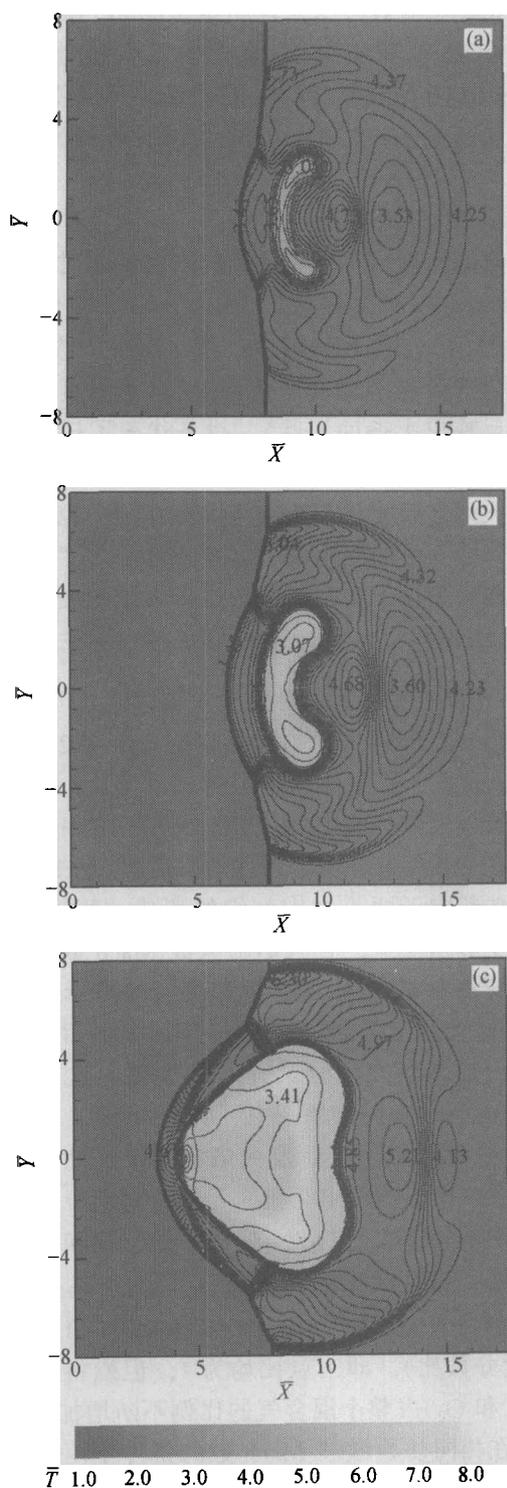


图 5 不同初始组分时, 压力(等值线)和温度(阴影图)的变化

$\bar{t}=2.83$, $M_x=2.0$, $Y_{CH_4}:Y_{O_2}:Y_{N_2}$ 为(a) 0.02:0.08:0.90; (b) 0.03:0.12:0.85; (c) 0.04:0.16:0.80

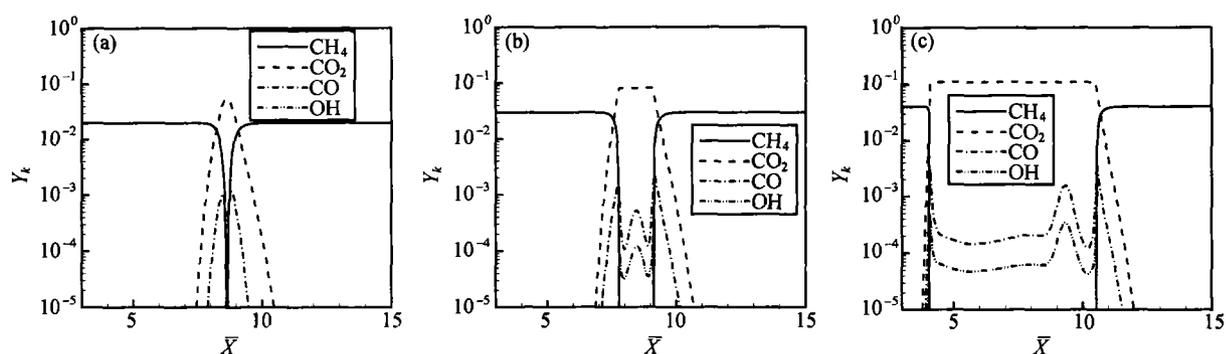


图 6 不同初始组分时, $\bar{Y} = 0$ (轴线) 处的组分质量分数变化

$\bar{t} = 2.83$, $M_x = 2.0$, $Y_{CH_4} : Y_{O_2} : Y_{N_2}$ 为 (a) 0.02:0.08:0.90; (b) 0.03:0.12:0.85; (c) 0.04:0.16:0.80

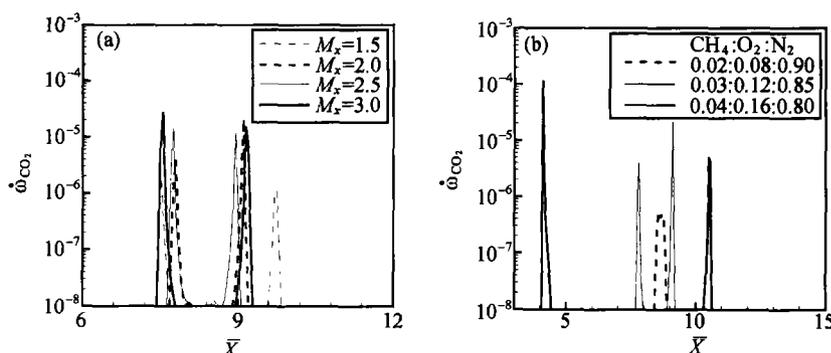


图 7 $\bar{Y} = 0$ (轴线) 处 CO_2 生成速率的变化

(a) 不同 Mach 数; (b) 不同初始组分

的化学反应有所增强; 在迎风面(右边峰值), 除了 Mach 数较小 ($M_x = 1.5$) 的情况以外, CO_2 的生成速率变化不明显, 表明这一侧化学反应受激波 Mach 数影响不大. 而图 7(b) 的计算结果则显示, 不同初始混合气配比下, CO_2 的生成速率有显著差异, 其中当 $Y_{CH_4} : Y_{O_2} : Y_{N_2} = 0.04 : 0.16 : 0.80$ 时, 火焰背风面的 CO_2 的生成速率比其他两种配比下的要大一个数量及以上, 表明在该处, 其化学反应十分剧烈, 这是导致燃烧向爆轰过渡的主要原因, 而迎风面其 CO_2 的生成速率比 $Y_{CH_4} : Y_{O_2} : Y_{N_2} = 0.03 : 0.12 : 0.85$ 的要小, 表明在该处其化学反应稍弱, 而 $Y_{CH_4} : Y_{O_2} : Y_{N_2} = 0.02 : 0.08 : 0.90$ 时只显示了一个较小的 CO_2 生成速率峰, 说明此时的化学反应最弱, 反应活性不强.

3 结论

(1) 利用带化学反应的 Euler 方程, 采用改进

的 Van Leer 矢量通量分裂格式, 对激波与火焰相互作用的过程进行了二维数值模拟, 计算结果与相同条件下的实验结果进行了对比, 定性上的一致表明了计算的合理性.

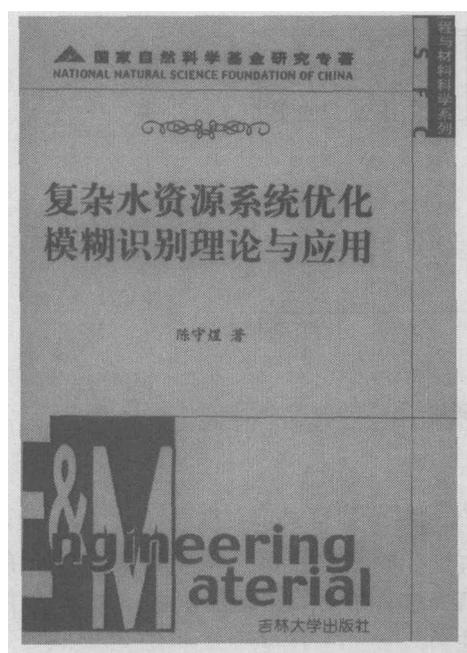
(2) 数值研究了不同激波 Mach 数和不同初始 $CH_4/O_2/N_2$ 混合气组分对激波诱导火焰失稳的影响. 结果表明, 球形火焰在激波的作用下变成弯曲的“哑铃形”, 其中, 激波 Mach 数的增加, 使得这一趋势更加明显, 火焰也略有膨胀, 而初始组分中, CH_4 和 O_2 浓度的增加, 则使火球膨胀加快, 并导致爆轰的形成.

(3) 化学反应浓度和 CO_2 生成速率的研究表明, 反应活性强的初始混合气, 其化学反应进行的更为深入和迅速, 这是导致火焰在激波作用下变形的过程中, 不断膨胀并导致爆轰形成的主要原因.

参 考 文 献

- 1 Markstein G H. Nonsteady Flame Propagation. New York:

- MacMillan, 1964
- 2 Thomas G, et al. Experimental observations of flame acceleration and transition to detonation following shock-flame interaction. *Combust Theory Modelling*, 2001, 5: 573
 - 3 Picone J M, et al. Dynamics of shock wave, explosions and detonations. *Prog Astro Aero*, 1984, 94: 429
 - 4 Ton V T, et al. Numerical simulations of high speed chemically reactive flow. *Theoret Comput Fluid Dynamics*, 1994, 279: 217
 - 5 Khokhlov A M, et al. Interaction of a shock with a sinusoidally perturbed flame. *Combust Flame*, 1999, 117: 99
 - 6 Khokhlov A M, et al. Numerical simulation of deflagration-to-detonation transition: The role of shock-flame interactions in turbulent flames. *Combust Flame*, 1999, 117: 323
 - 7 Khokhlov A M, et al. Numerical simulation of detonation initiation in a flame brush: The role of hot spot. *Combust Flame*, 1999, 119: 400
 - 8 董刚, 等. 通用甲烷-空气层流预混火焰的半详细化学动力学机理. *燃烧科学与技术*, 2002, 8 (1): 44
 - 9 Westbrook C K, et al. Chemical kinetic modeling of hydrocarbon combustion. *Prog Energy Combust Sci*, 1994, 10: 1



国家自然科学基金研究专著

《复杂水资源系统优化模糊识别理论与应用》陈守煜 著
科学出版社 定价: 18.00 元

本书是笔者 20 世纪 80 年代提出创建新学科——模糊水文水资源学——研究课题的一本标志性成果, 它标志着新学科已从建立走向发展的新阶段。

全书共 19 章, 前 9 章为理论部分。第 1 章相对隶属度理论是本书的数学基础; 第 2 至 9 章建立了工程模糊集与神经网络、遗传算法相结合的智能决策与智能预测(预报)的理论、模型与方法等新内容。第 10 至 19 章为应用部分, 系统地论述了这些理论、模型与方法在松辽流域北水南调调水量方案决策, 松花江流域蓄滞洪区优选, 可持续发展系统以及非水资源系统优化决策中的应用。

本书可供水文水资源学科工程技术人员、研究人员与高等院校教师阅读与参考, 可作为水文水资源专业研究生的教材与教学参考书。书中第 1 至 9 章内容亦可供从事模糊集理论与应用研究人员、

高等院校有关模糊系统专业教师与研究生的阅读与参考。