

气相爆轰波胞格尺度与点火延迟时间关系研究¹⁾

张薇²⁾ 刘云峰 姜宗林

(高温气体动力学国家重点实验室, 中国科学院力学研究所, 北京 100190)

摘要 讨论点火延迟时间和爆轰波胞格尺度的内在关系, 将点火延迟时间作为特征参量来模拟胞格尺度. 分别对两个总包单步化学反应模型和一个基元反应模型的点火延迟时间进行了数值模拟研究. 对于满足当量比的氢气/空气混合气体, 分析了不同初始压力下点火延迟时间随初始温度的变化关系. 研究表明: 总包单步反应模型的点火延迟时间不随压力变化, 且与初始温度呈线性关系. 基元反应模型的点火延迟时间随压力变化, 而且存在理论上的 S 型曲线, 但是在拐点区域和低温区域与 CHEMKIN 计算的结果相差 1~3 个量级. 现有模型模拟的胞格尺度普遍偏小, 其相应的点火延迟时间也偏小, 胞格尺度与点火延迟时间具有正相关性. 入射激波后的气体的点火延迟时间与三波点的运动周期一致, 是量化模拟胞格的关键因素.

关键词 爆轰波, 胞格, 点火延迟时间, 化学反应模型

中图分类号: O381 文献标识码: A doi: 10.6052/0459-1879-14-046

引言

胞格结构在爆轰波的传播中扮演着重要的角色, 对研究爆轰波的非定常传播过程具有重要意义, 也是评价爆轰计算模型化学反应动力学特性的重要标志^[1-3]. 爆轰波的胞格尺度是爆轰物理中一个非常重要的尺度参数, 并且被成功的应用于一些维像的起爆理论和传播过程^[4]. 但是胞格尺度和气体性质之间的内在物理关系还没有建立.

现有关于爆轰波胞格的研究主要集中在对胞格尺度定性的规律上, 数值模拟结果无法和实验结果进行定量比较. 现有的化学动力学模型计算得到的胞格尺度都偏小, 究其原因, 要么是某些重要的物理机理被忽略了, 要么是化学动力学模型在机理描述上仍存在问题^[5]. 现有的爆轰计算模型都只能给出形似的胞格结构. 对于胞格的研究, 需要更进一步的量化界定^[6-7].

作者认为, 鉴于爆轰波的实质是燃烧波, 而在燃烧理论中, 自点火机制控制火焰的稳定性^[8]. 点火延迟时间在自点火机制中是一个很重要的参数. 绝大多数燃烧模型都以点火延迟时间为参考标准, 以此来确定模型的可靠性^[8]. 在爆轰波传播的过程中, 点火延迟时间将直接影响爆轰波的波面结构^[5].

本研究将点火延迟时间作为关键特征参数引入爆轰胞格的研究中, 以点火延迟时间作为特征参数来模拟胞格尺度. 从化学反应模型的角度出发探索胞格量化的关键机理.

1 控制方程和数值方法

控制方程采用二维守恒形式的欧拉方程和有限速率化学反应模型, 忽略黏性项和分子扩散项. 点火延迟时间是通过等容燃烧过程计算得到的.

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial x} + \frac{\partial \mathbf{G}}{\partial y} = \mathbf{S}$$
$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ \rho e \\ \rho Z \end{pmatrix}, \quad \mathbf{F} = \begin{pmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ \rho uv \\ (\rho e + p)u \\ \rho uZ \end{pmatrix}$$
$$\mathbf{G} = \begin{pmatrix} \rho v \\ \rho uv \\ \rho v^2 + p \\ (\rho e + p)v \\ \rho vZ \end{pmatrix}, \quad \mathbf{S} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \dot{\omega} \end{pmatrix}$$

2014-05-03 收到第 1 稿, 2014-08-21 收到修改稿.

1) 国家自然科学基金资助项目 (31021002).

2) 张薇, 博士研究生, 主要研究方向: 爆轰物理. E-mail: zhangwei@imech.ac.cn

$$p = (\gamma - 1)\rho \left[e - (u^2 + v^2)/2 - Zq \right]$$

在空间方向上采用三阶的基本无震荡格式离散, 对矢量通量进行斯蒂格-瓦尔明 (Steger-Warming) 分解. 在时间方向上采用三阶龙格-库塔 (Runge-Kutta) 法. 爆轰气体选择满足化学反应当量比的氢气与空气的混合气体. 在胞格的数值模拟中, 每个胞格宽度中有 100 个网格即可保证数值结果与网格无关^[9]. 对于初始压力 0.1 MPa、初始温度 300 K、满足化学当量比的氢气/空气混合气体, 实验得到的胞格宽度为 8 mm^[10]. 因此, 本研究中, 网格长度为 $dx = dy = 10 \mu\text{m}$, 可以保证网格无关性. 点火延迟时间 τ 基于温度的变化来定义, 为温度变化率 dT/dt 最大点所对应的时间.

2 化学反应模型

本研究中共使用了 3 个化学反应模型. 模型 1 是传统的总包单步反应模型^[1], 其化学反应速率采用单步的阿累尼乌斯 (Arrhenius) 公式, 在该模型中, 混合气体的比热比和气体常数都为常数. 模型 2 是在模型 1 的基础上修正的总包单步反应模型^[1], 化学反应速率仍采用阿累尼乌斯公式的形式, 采用变化的比热比和气体常数, 同时引入新的活化能形式. 模型 3 是基元反应模型, 选取的是 11 种组分 20 个化学反应的基元化学反应模型^[11].

3 结果与讨论

3.1 总包单步反应模型点火延迟时间

首先讨论单步反应模型的点火延迟时间特性. 图 1 给出了模型 1, 2 在 1.01 MPa 下点火延迟时间随温度的变化规律, 并与 CHEMKIN 的计算结果^[12]进行了比较.

计算中发现, 这两个模型的点火延迟时间都仅随温度变化, 而与压力无关, 这是由单步反应模型的控制方程决定的. CHEMKIN 计算的点火延迟时间曲线是 S 型曲线, 分成 3 个部分: 高温段、拐点区域以及低温段. 拐点区域的曲线斜率最大, 低温段次之, 高温段最为平缓. 模型 1 得到的直线斜率更接近 CHEMKIN 计算的高温段的斜率, 模型 2 的斜率则更接近低温段的斜率. 在相同的温度下, 模型 2 的点火延迟时间比模型 1 要长一个量级还要多, 且更接近 CHEMKIN 计算的结果.

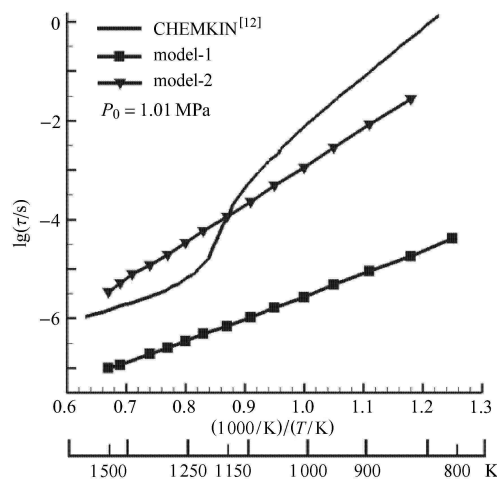


图 1 模型 1 和模型 2 的点火延迟时间

Fig. 1 Ignition delay times for model-1 and model-2

3.2 基元反应模型的点火延迟时间

图 2 给出的是模型 3 计算的在 1.01 MPa 下点火延迟时间随初始温度的变化曲线. 基元反应模型可以得到 CHEMKIN 计算的点火延迟时间 S 型曲线. 在高温段, 计算结果比 CHEMKIN 计算的结果略小, 可以认为具有较好的精度. 在拐点区域, 计算结果比 CHEMKIN 计算的结果小 1~2 个数量级, 差别较大. 在低温段, 计算结果比 CHEMKIN 计算的结果大 1~2 个数量级, 这一段二者曲线的斜率是一致的. 这一研究表明, 不同的基元反应模型计算得到的点火延迟时间定量上是不同的, 相差非常大.

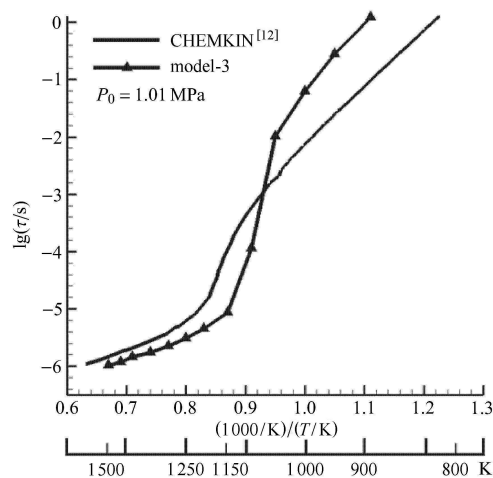


图 2 模型 3 的点火延迟时间随温度的变化

Fig. 2 Ignition delay times for model-3

3.3 计算结果与实验结果比较

图 3 中给出 0.1 MPa 下 3 个模型的计算结果与实验结果^[13]的对比. 模型 1 的点火延迟时间与实验

结果相差很大. 模型 3 在高温段与实验值吻合较好, 在拐点区域和低温段, 计算值比实验值要长, 且对温度的变化更为敏感. 模型 2 的点火延迟时间曲线最接近实验结果.

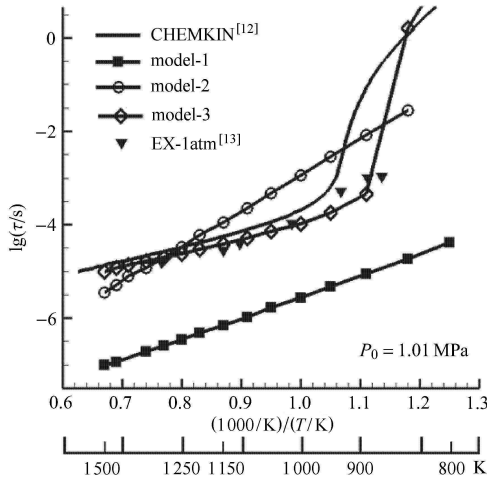


图 3 模型点火延迟时间与实验结果比较

Fig. 3 Comparison of the ignition delay times measured from experiments and predicted by models

3.4 高压下点火延迟时间的特性

根据经典的 ZND 理论, 爆轰波面分为诱导区和反应区, 本研究中初始状态为 0.1 MPa, 300 K 诱导区内的气体温度和压力约为 1400 K 和 2.02 MPa. 因此, 比较诱导区内气体状态参数下的点火延迟时间更有意义.

图 4 给出不同初始压力下的用 CHEMKIN 计算点火延迟时间与模型 2 的比较. CHEMKIN 计算结果

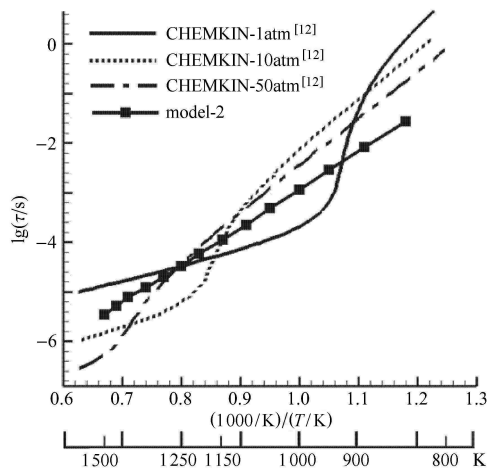


图 4 模型 2 的点火延迟时间与 CHEMKIN 计算结果比较

Fig. 4 Comparison of the ignition delay time predicted by CHEMKIN and model-2

显示, 随着初始压力的升高, 点火延迟时间随温度的变化由 S 型曲线逐渐变为直线. 有研究表明, 在 1~10 MPa 的压力范围内, 压力对点火延迟时间的影响是可以忽略的 [14]. 由于单步反应模型的点火延迟时间与压力无关, 模型 2 计算得到的诱导区内的气体在 1400 K 的点火延迟时间约为 7 μs, 而用 CHEMKIN 计算在 1.01 MPa, 1400 K 下的点火延迟时间为 1 μs, 比模型 2 小很多.

3.5 单步反应模型的胞格与点火延迟时间

对于满足当量比氢气/空气混合气体, 在压力 0.1 MPa 和温度 300 K 的初始条件下, 实验得到的胞格宽度大约为 8 mm [5]. 该状态下, 用模型 1 模拟得到的胞格宽度约为 0.8 mm, 仅为实验值的十分之一. 而用模型 2 模拟得到的胞格宽度约为 8 mm, 跟实验值一致. 模型 2 能够较好地模拟爆轰波的胞格大小, 关键在于计算得到的点火延迟时间在关键状态更接近于实验值. 模型 1 的点火延迟时间比模型 2 小一个量级, 胞格也比模型 2 的胞格小一个量级, 胞格尺度和点火延迟时间具有正相关性.

在燃烧过程中, 点火延迟时间是一个必要的关键参数. 在爆轰波传播过程中, 前导激波压缩混合气体, 使其压力、温度升高达到可燃条件, 经过该状态对应的点火延迟时间, 这部分气体开始燃烧. 从这个角度分析, 爆轰模型的化学反应的特征时间, 对应的就是经过前导激波压缩后的气体的点火延迟时间. 而单步反应模型的点火延迟时间与压力无关, 其化学反应特征时间对应的是波后气体温度最低的状态对应的点火延迟时间. 在所有的波后气体状态中, 三波点碰撞时距离碰撞位置最远处的激波最弱, 也就是在三波点碰撞时壁面附近的入射激波波后气体的温度最低. 本研究中这一温度为 1400 K 左右, 模型 2 相应的点火延迟时间为 $\tau = 7.72 \mu\text{s}$.

图 5 给出了一对三波点在一个周期内的运动的 4 个时刻, 每个时刻间隔为 2 μs, 三波点的运动周期约为 6 μs, 图 5(a) 中区域 B 即为一对碰撞中的三波点, 此刻对应的区域 A 则为最弱激波, 波后的气体温度约为 1400 K, 压力约为 2.02 MPa. 该状态下的点火延迟时间与三波点的运动周期基本相等, 亦即三波点的运动周期与化学反应的特征时间尺度一致.

模型 2 能够准确地模拟胞格尺度, 说明这一模型抓住了胞格形成的关键状态, 也就是自点火的关键温度. 模型 1 得到的胞格偏小, 是由于其点火延迟时间短, 在 1400 K 下的点火延迟时间约为 0.5 μs. 在

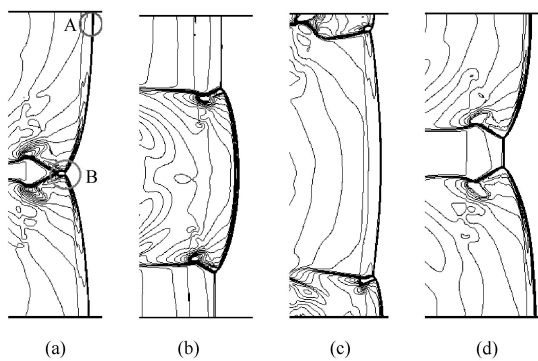


图 5 一对三波点在一个周期内的运动

Fig. 5 Movement within a period of a pair of triple points

模拟爆轰波传播的过程中,诱导区内的气体提前燃烧,得到的胞格自然要比实际小。

4 结 论

本文对 3 个化学反应模型的点火延迟时间进行了研究. 研究表明,总包单步反应模型计算的点火延迟时间得到的是线性曲线,点火延迟时间只随温度变化而与压力无关. 传统的单步模型的点火延迟时间比修正后的单步模型的结果要小 1~3 个数量级. 基元反应模型的点火延迟时间规律在定性上接近实验结果,但定量上相差很多. 修正后的总包单步模型的结果定量上更接近实验测量结果.

用两个单步反应模型模拟了爆轰波的传播规律和胞格大小. 研究发现,对于初始压力为 0.1 MPa、初始温度为 300 K、当量比的氢气/空气混合气体,模型 2 模拟得到的爆轰波三波点的运动周期刚好是入射激波波后气体的压力温度所对应的点火延迟时间,该温度为 1400 K 左右. 此时模拟得到的胞格宽度与实验值相等. 模型 1 相同状态下的点火延迟时间比模型 2 小一个量级,其模拟得到的胞格宽度比实验值也小一个量级. 这表明,点火延迟时间是控制爆轰波传播的关键参数.

致谢 作者特别感谢中国科学院力学研究所张德良研究员对本文提出的宝贵修改意见.

参 考 文 献

- 1 刘云峰,姜宗林. 详细化学反应模型中温度修正项特性研究. 中国科学, 2011, 41: 1-11 (Liu Yunfeng, Jiang Zonglin. Study on the chemical reaction kinetics of detonation models. *Sci Sin-PhyMech Astron*, 2011, 41: 1-11 (in Chinese))
- 2 戴旭刚,张德良,胡宗民等. 爆轰波与激波对撞爆轰状态演化机理研究. 力学学报, 2012, 44(6): 953-961 (Dai Xugang, Zhang Deliang, Hu Zongmin, et al. Investigation into mechanisms underlying head-on collision of detonations with shock waves. *Chinese Journal of Theoretical and Applied Mechanics*, 2012, 44(6): 953-961 (in Chinese))
- 3 韩桂来,姜宗林,张德良. 激波与爆轰波对撞的数值模拟研究. 力学学报, 2008, 40(2): 154-161 (Han Guilai, Jiang Zonglin, Zhang Deliang. Numerical investigation on the collision between detonations and shocks. *Chinese Journal of Theoretical and Applied Mechanics*, 2008, 40(2): 154-161 (in Chinese))
- 4 滕宏辉. 气相爆轰波形成和传播机制的基础问题研究. [博士论文]. 中国科学院力学研究所, 2008 (Teng Honghui. Investigation on some basic problems in the gaseous detonation initiation and propagation mechanisms. [PhD Thesis]. Beijing: Institute of Mechanics, CAS, 2008 (in Chinese))
- 5 Oran ES. Numerical simulations of hydrogen detonations with detailed chemical kinetics. *Proceedings of the Combustion Institute*, 2013, 34: 2009-2016
- 6 Liu YF, Jiang ZL. Reconsideration on the role of the specific heat ratio in Arrhenius law. *Applications Acta Mech Sin*, 2008, 24: 261-266
- 7 Jiang ZL, Teng HH. Research on some fundamental problems of the universal framework for regular gaseous detonation initiation and propagating. *Sci Sin-Phy, Mech, Astron*, 2012, 42: 421-435
- 8 Merci B. Analysis of auto-ignition of heated hydrogen-air mixtures with different detailed reaction mechanisms. *Combustion Theory and Modeling*, 2011, 15: 409-436
- 9 Choi JY, Ma FH. Some numerical issues on simulation of detonation cell structures. *Combustion, Explosion, and Shock Waves*, 2008, 44(5): 560-578
- 10 Shepherd JE. Detonation database. Technical Report FM97-8, GALCIT, July 1997
- 11 Turns SR. An Introduction to Combustion Concepts and Applications, Second Edition ISBN978-7-302-18762-2
- 12 Zhao ZL, Chen Z. Correlations for the ignition delay times of hydrogen/air mixtures. *Chinese Science Bulletin*, 2010, 55: 1063-1069
- 13 Golovitchev VI. Computer and experimental evaluation of drag reduction of blunt bodies at supersonic speeds by counterflow combustion-concept of a "flame" spike. Chalmers University of Technology, Department of Thermo and Fluid Dynamics.
- 14 Gel'f BE, Medvedev SP. Self-ignition of hydrogen-oxygen mixtures at high initial pressures: Numerical modelling and experiment. Semenov Institute of Chemical Physics, Russian Academy of Sciences

(责任编辑: 陆夕云)

(责任编辑: 刘希国)

STUDY ON THE RELATIONSHIP BETWEEN IGNITION DELAY TIME AND GASEOUS DETONATION CELL SIZE¹⁾

Zhang Wei²⁾ Liu Yunfeng Jiang Zonglin

(The State Key Laboratory of High Temperature Gasdynamics, Institute of Mechanics, CAS, Beijing 100190, China)

Abstract In this paper, the intrinsic relationships between ignition delay times and the detonation cell size are analyzed, simulated from two one-step chemical kinetic models and one detailed chemical kinetic model. Ignition delay time for mixtures of hydrogen and air at 0.1 MPa and 1.01 MPa over the temperature range 800 K to 1 500 K is investigated. The results demonstrate that the ignition delay time for one-step chemical kinetic model is independent of pressure, and linearly correlated with the initial temperature. The ignition delay time for the detailed chemical kinetic model is dependent of pressure, and is not linearly correlated with the initial temperature. However, in the inflection zone and the low temperature zone, the CFD results are 3 orders of magnitude smaller than the theoretical values. The CFD values of the ignition delay time differ from the theoretical ones by a factor as large as 10^3 . The detonation cell size simulated by all the chemical models is smaller than the experimental results, and the ignition delay time is proportional to the cell size. The detonation simulation results show that the longer the ignition delay time, the bigger the detonation cell size. The period of triple-point is almost equal to the ignition delay time of the gas behind the incident shock wave. Ignition delay time is a key parameter in detonation initiation and propagation.

Key words detonation, cell, ignition delay time, chemical kinetic mode

Received 3 May 2014, revised 21 August 2014.

1) The project was supported by the National Natural Science Foundation of China (31021002).

2) Zhang Wei, Ph.D candidate, research interests: detonation physics. E-mail: zhangwei@imech.ac.cn