

文章编号: CSTAM2014-P19-0022

气相爆轰波的点火延迟时间与胞格尺度内在关系的数值研究

张薇, 刘云峰, 姜宗林

(中国科学院力学研究所, 北京 100190)

摘要: 首次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 H₂/Air 混合气体, 分析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 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。入射激波后的诱导区内气体的点火延迟时间与三波点的运动周期一致, 是定量化模拟胞格的关键因素。

关键词: 爆轰波, 胞格, 胞格尺度, 点火延迟时间, 化学反应模型

中图分类号:

文献标识码: A

0 引言

爆轰现象是由 Berthelot, Vieille 和 Le Chatelier 在研究火焰传播时观察到的^[1]。一百多年来, 人们通过实验观察、数值模拟和理论分析对爆轰波的起爆、形成和传播过程进行了大量的研究, 获得了一系列的重要进展, 对爆轰现象的起爆机理和传播机制有了比较深入的认识。20世纪60年代, White^[1]采用流场显示技术, 观察到了爆轰波的多波结构与爆轰胞格。胞格结构在爆轰波的传播中扮演着重要的角色, 反映了爆轰波的许多重要特征, 它不仅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^[2]。近几十年来, 有关气相爆轰波的胞格结构在理论、实验和数值计算方面都已有了大量研究。目前对爆轰波传播机理的研究主要集中在探讨胞格的发展机制。

然而, 由于实际流动的复杂性, 如何通过

特征物理量深入的描述爆轰波遇到了很大的困难。胞格尺度和气体性质之间的内在联系还没有建立。

随着计算机模拟技术的发展, 大量的数值结果促进了对胞格结构的深入研究。一维的脉动爆轰和多维(二维、三维)的胞格爆轰的大量研究结果, 为研究爆轰波面结构打下了基础。Shepherd 等做了大量实验, 分析不同可燃气体在不同参数下的胞格尺度, 总结了一些定性规律^[3]。Lee 分析了爆轰中各种动力学参数对胞格尺度的影响^[3], 试图从中阐述爆轰波形成和传播的某些规律。Oran 等对胞格尺度进行数值模拟, 得到部分定性规律^[4]。

现有关于爆轰波胞格的研究主要集中在胞格尺度的定性规律上, 缺乏定量化的研究结果。大量的研究表明: 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]。

要想准确地模拟爆轰波的胞格尺度，需要在化学反应模型中考虑更多的关键物理因素。其中一个关键因素是要合理模拟化学反应带的特征尺度。在现有的胞格尺度研究中，大多是利用ZND模型计算得到的半反应区长度作为化学反应带的特征参数，再从半反应区长度着手来定性描述胞格尺度。通过改变活化能、放热率和指前系数等参数来改变胞格的大小，得到部分物理规律。姜宗林在2012年指出：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，需要更进一步的定量化界定^[6]。

爆轰波的实质是燃烧波，在燃烧理论中，自点火现象在燃烧过程中扮演着重要的角色。自点火机制控制火焰的稳定性。点火延迟时间在自点火机制中是重要的参数。在数值模拟中，火焰主要由化学动力学模型控制。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^[7]。在激波压缩和化学反应放热的过程中，点火延迟时间是一个很重要的概念，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^[8]。

本研究首次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。希望最终通过燃烧和爆轰的理论交叉，定量地刻画爆轰波的起爆与传播机理。为了更好地从化学反应机理的角度来讨论问题。

1 控制方程和数值方法

控制方程采用二维守恒形式的Euler方程和有限速率化学反应模型，忽略粘性项和分子扩散项。

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial F}{\partial x} + \frac{\partial G}{\partial y} = S$$

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

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

在空间方向上采用三阶的ENO格式离散，对矢量通量进行了Steger-Warming分解。在时间方向上采用三阶TVD Runge-Kutta法。爆轰气体选择满足化学反应当量比的H₂/Air的混合气体，网格长度为 $dx = dy = 10 \mu m$ 。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

本研究中共使用了三个化学反应模型。模型1是传统的总包单步反应模型^[2]，模型2是在模型1的基础上修正的总包单步反应模型^[2]。模型3是基元反应模型，选取的是11种组分H₂, H, O₂, O, H₂O, OH, HO₂, H₂O₂, N₂, N, NO、20个化学反应的基元化学反应模型^[9]。

3 结果与讨论

3.1 总包单步反应模型点火延迟时间

图1给出了两个单步反应模型：模型1、2在10atm下点火延迟时间随温度的变化规律，并与CHEMKIN的计算结果^[10]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，分成三个部分：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在高温段的斜率，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的结果。

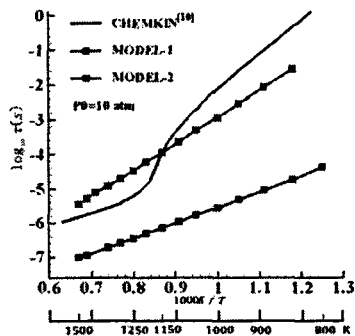


图1、模型1和模型2的点火延迟时间

Fig 1. Ignition Delay Time for MODEL-1 and MODEL-2

3.2 基元反应模型的点火延迟时间

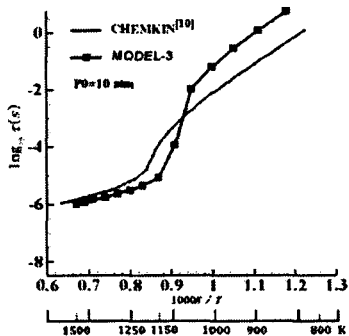


图2 模型3的点火延迟时间随温度的变化

Fig2. Ignition Delay Time for MODEL-3

图2给出的是模型3计算的在10atm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的点火延迟时间S型曲线。在高温段，计算结果比CHEMKIN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的结果小1-2个数量级，差别较大。在低温段，计算结果比CHEMKIN的结果大1-2个数量级，这一段二者曲线的斜率是一致的。这一研究结果表明，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。

3.3 计算结果与实验结果比较

图3中给出1atm下三个模型的计算结果与实验

结果^[11]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。从图上还可以看出，实验结果在拐点区域和低温段随温度的变化比CHEMKIN和模型3的结果更为平缓^[12]。综合考虑，模型2的点火延迟时间曲线最接近实验结果。

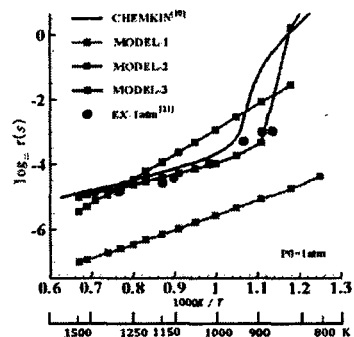


图3 模型点火延迟时间与实验结果比较

Fig3. Comparison of the ignition delay time measured from experiments and predicted by models

3.4 单步反应模型的胞格与点火延迟时间

对于满足当量比的H₂/Air混合气体，在压力1atm和温度300K的初始条件下，实验得到的胞格宽度大约为8mm^[11]。该状态下，用模型1模拟得到的胞格宽度约为0.8mm，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8mm，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短一个量级，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。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。本研究中这一温度为1400K左右，模型2相应的点火延迟时间为 $\tau=7.72\mu\text{s}$ 。

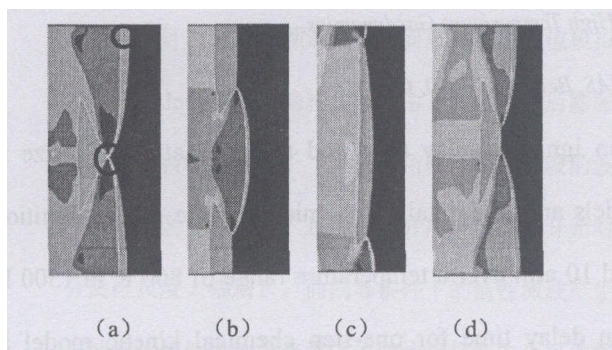


图4、一对三波点在一个周期内的运动

Fig4. Movement within a period of a pair of triple points

图4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 $2\mu\text{s}$ ，三波点的运动周期约为 $6\mu\text{s}$ ，图4(a)中区域B即为一对碰撞中的三波点，波后A区域的气体温度约为1400K，压力约为20atm。该状态下的点火延迟时间与三波点的运动周期基本相等。

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1400K下的点火延迟时间约为 $0.5\mu\text{s}$ 。在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

总包单步反应模型计算的点火延迟时间是线性曲线，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短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。

点火延迟时间是控制爆轰波传播的关键参数。对于初始压力为1atm、初始温度为300K、当量比的 H_2/Air 混合气体，修正后的单步模型模拟得到的爆轰波三波点的运动周期刚好是入射激波后气体的压力温度所对应的点火延迟时间，该温度为1400K左右。此时模拟得到的胞格宽度与实验值相等。传统的单步模型在相同状态下的点火延迟时间小一个量级，其模拟得到的胞格宽度比实验值也小一个量级。

参考文献

- [1] 姜宗林, 滕宏辉. 气相规则胞格爆轰波起爆与传播统一框架的几个关键基础问题研究. 中国科学, 42(4): 421-435.
- [2] 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 Y F, Jiang Z L. Study on the chemical reaction kinetics of detonation models (in Chinese). Sci Sin-PhyMech Astron, 2011, 41: 1-11, doi:10.1360/132011-265)
- [3] 滕宏辉. 气相爆轰波形成和传播机制的基础问题研究. 【D】博士学位论文, 中国科学院力学研究所, 2008
- [4] E. S. Oran, Numerical simulations of hydrogen detonations with detailed chemical kinetics. Proceedings of the Combustion Institute, 2013, 34: 2009-2016.
- [5] Liu Y F, Jiang Z L. Reconsideration on the role of the specific heat ratio in Arrhenius law. applications Acta Mech Sin, 2008, 24: 261-266
- [6] Jiang Z L, Teng H H. Research on some fundamental problems of the universal framework for regular gaseous detonation initiation and propagating (in Chinese). Sci Sin-PhyMech Astron, 2012, 42: 421-435
- [7] B. Merci. Analysis of auto-ignition of heated hydrogen-air mixtures with different detailed reaction mechanisms. Combustion Theory and Modeling. 2011, 15: 409-436.
- [8] V. Yang, J. Y. Choi, Some Numerical Issues on Simulation of Detonation Cell Structures, Combustion, Explosion, and Shock Waves, Vol. 44, No. 5, pp. 560-578, 2008
- [9] Stephen R Turns, An Introduction to Combustion Concepts and Applications, Second Edition ISBN 978-7-302-18762-2
- [10] 赵真龙, 陈正, 陈十一. 计算氢气/空气混合物着火延迟时间的相关函数. 中国科学, 2010, 55: 1063-1069.
- [11] M. Kaneshige, and J. E. Shepherd, Detonation Database, Technical Report FM97-8, GALCIT, July 1997.

Numerical simulation of the intrinsic relationship between ignition delay time and gaseous detonation cell size

Zhang Wei¹, Liu Yunfeng¹, Jiang Zonglin¹

1. *The State Key Laboratory of High Temperature Gasdynamics,*

Institute of Mechanics, CAS, Beijing 100190, China

Abstract: In this paper, the intrinsic relationship between ignition delay time and the detonation cell size is analyzed, predicted by two one-step chemical kinetic models and one detailed chemical kinetic model. Ignition delay times for mixtures of hydrogen and air at 1.0 atm and 10 atm over a temperature range of 800 K to 1500 K are investigated. The results demonstrate that the ignition delay time for one-step chemical kinetic model is independent of pressure, but 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 result is 3 orders of magnitude smaller than the theoretical value. The detonation cell size predicted 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 equal to the ignition delay time of the gas behind the incident shock wave. Therefore, ignition delay time is a key parameter in detonation initiation and propagation.

Key words: detonation, cell, cell size, ignition delay time, chemical kinetic model