

气相胞格爆轰波特征尺度对化学反应模型

关键参数依赖关系的初步研究

张薇*, 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: 在爆轰波的数值模拟研究中, 现有的化学反应模型都只能给出定性的爆轰胞格结构, 要想定量地模拟胞格结构, 需要进一步提炼模型特征参数。本文首次讨论点火延迟时间和胞格尺度二者的内在关系, 尝试将点火延迟时间作为特征参量来量化模拟胞格尺度。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。研究结果表明: 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, 这与实验结果定性上是不一致的。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 型的点火延迟时间, 但是在拐点温度区域与理论值相差 1-3 个量级。研究还发现: 现有模型模拟的胞格尺度普遍偏小, 而相应的点火延迟时间也普遍偏小。点火延迟时间和胞格尺度之间有着密切的联系。温度为 1000K 时的点火延迟时间是定量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

一、引言

胞格结构在爆轰波的传播中扮演着重要的角色。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。气相爆轰波数值模拟的关键在于对化学反应和流体动力学间的非线性耦合过程的准确描述。随着对爆轰波研究的深入, 越来越多的研究开始着眼于对化学反应机理的思考。Oran 在 2013 年指出: 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。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, 需要更进一步的量化界定。

本文作者认为, 鉴于爆轰波的实质是燃烧波, 而在燃烧理论中, 自点火现象在燃烧过程中扮演着重要的角色。本研究首次将燃烧学的概念——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量化模拟胞格尺度。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, 本研究选取两个总包单步反应模型和一个基元反应模型进行点火延迟时间研究, 尝试从化学反应模型的角度出发探索决定胞格量化的关键机理。

二、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。数值格式, 空间方向采用三阶的 ENO 格式离散, 对矢量通量进行了 Steger-Warming 分解。时间方向采用三阶 TVD Runge-Kutta 法。二维计算中, 网格长度选择: $dx=dy=10$ 微米。爆轰气体选择满足化学反应当量比的氢气/空气的混合气体。计算的初始压力分别为 1atm 和 10atm, 初始温度变化范围为 800 K~1500 K。

* 报告人简介: 张薇, 流体力学, 研究生, zhangwei@imech.ac.cn

三、化学反应模型

一个传统的总包单步反应模型，一个在传统模型上修正的单步总包反应模型，一个基元反应模型。

四、结果与讨论

4.1 单步反应模型的点火延迟时间与压力的关系

单步反应模型的点火延迟时间与压力无关，这是与物理规律不一致的，是本研究首次发现的。在相同的初始温度下，模型 2 的点火延迟时间比模型 1 要长一个量级还要多，且模型 2 的结果更接近 CHEMKIN 的结果。模型 2 之所以能够较好的模拟爆轰波的胞格大小，关键在于，其点火延迟时间长，计算得到的点火延迟时间更接近于实验值。

4.2 对模型 2 的 Arrhenius 定律密度项修正的单步反应模型

为了在化学反应中体现压力的影响，本研究在模型 2 的基础上，提出一个类似详细化学反应模型的总包单步反应模型： $\dot{\omega} = -K\rho^2 Z \exp\left(-E_a^*(\gamma(Z) - 1)/R(Z)T\right)$ 。修正后的点火延迟时间体现出了随初始压力变化的特点。

4.3 基元反应模型的点火延迟时间特点

基元反应模型定性上可以得到理论点火延迟时间的 S 型曲线。但拐点区域的点火延迟时间对温度极其敏感，在 50K 的温度变化范围内，点火延迟时间就会变化 1-3 个量级。拐点区域内的计算结果均比理论结果小了 1-3 个数量级。

4.4 计算结果与实验结果比较

模型 2 的点火延迟时间在定性和定量上都更接近实验结果。且计算的胞格与实验一致。

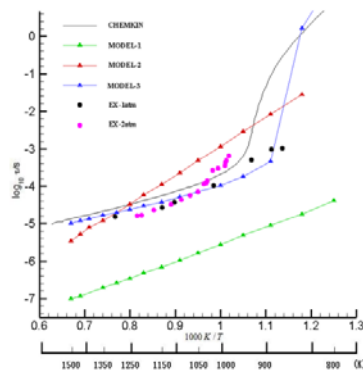


图 1 三个模型的点火延迟时间与实验结果比较

五、结论

本文做了两个总包单步反应模型和一个基元反应模型的点火延迟时间研究，以及点火延迟时间与胞格之间的内在联系，得到如下结论：

(1) 单步模型计算的点火延迟时间得到的是线性曲线，但也反应实验和理论结果的平均特性，尤其是在对温度变化特别敏感的拐点温度区域；

(2) 单步反应模型存在的问题：不能准确地反映出化学反应的所有关键机理，需要进一步修正；

(3) 三波点的运动周期刚好是最弱激波波后的温度对应的点火延迟时间，该温度刚好对应 1000K 左右。也就是说，这个温度状态的点火延迟时间是控制三波点运动的关键因素；

(4) 爆轰波的传播和点火延迟时间在机理上具有相关性，需要进一步研究。