

# PDE 快速起爆机理数值研究

胡宗民<sup>1</sup>, B. C. Khoo<sup>2</sup>, 姜宗林<sup>1</sup>

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

(2 Department of Mechanical Engineering, National University of Singapore, Singapore 119260)

**摘要** 在脉冲爆轰发动机的爆轰管内安装障碍物是加速爆燃转爆轰(DDT)的有效方法。本文应用高精度 WENO 格式和中心差分格式求解多组分 Navier-Stokes 控制方程组, 氢氧化学反应动力学由包含 9 组分 19 反应的基元反应模型来描述。初步计算结果表明, 在障碍通道内对火焰加速和热点/局部微爆的形成起重要作用的机制, 其中包括激波反射机制和射流碰撞机制。

**关键词** 氢氧爆轰, 快速起爆机理, 波焰作用, 数值模拟

## 引言

脉冲爆轰发动机 PDE 是极具吸引力的新型发动技术之一, 相对于传统的发动机, 它具有以下优势: 热效率高和结果简单(几乎没有移动部件)。PDE 性能依赖爆轰波形成和工作频率, 这就需要快速起爆, 即要求爆燃转爆轰(DDT)过程的迅速实现。而不幸的是, DDT 过程涉及复杂的多尺度物理和化学过程, 人们对它的认识还远远不够清楚和完善[1]。通过大量的实验研究和数值计算, 人们发现在爆轰管内加装障碍物可以加速 DDT 过程, 其中的主要物理机制是障碍物可以诱导火焰面变形、强化湍流混合、增强燃烧, 从而使火焰加速[2, 3]。但是, 最近的研究表明其物理机制远非如此简单[4], 例如, 障碍物后的未反应气团(unburned pockets)起重要作用, 其延迟燃烧可以在反应流核心区域产生强射流从而加速火焰传播。

数值模拟在揭示 DDT 过程的研究中起到了重要作用, 它可以对其中的物理现象进行深入而全面的阐释。相关的数值研究一般应用单步化学反应模型[3-6], 这种简化模型易于实施, 可应用于各种爆轰气体。而事实上, 复杂的化学反应动力学远非单步, 而这种简化也带来了爆轰气体热力学性能的偏差。对于可用的 PDE, 其爆轰管的长度应尽量短, 在保证爆轰波可以有效建立的前提下提高工作频率。在这种情况下, 通过“漫长”的湍流火焰加速实现 DDT 的过程将不可行。另外, 在并不远离临界

起爆条件的情况下, 爆轰管内加装的障碍物也不能太多, 否则将引起较大诱导阻力并延长排气时间。

基于之前的相关数值研究工作[7, 8], 本文应用五阶 WENO 格式[9]和四阶中心差分格式, 求解多组分化学反应 Navier-Stokes 方程组, 详细研究障碍管道内激波-火焰相互作用、诱导火焰加速、DDT 强化过程的物理机制。

## 1 数值方法与简化模型

如图 1 所示, 障碍物加装在 PDE 爆轰管的起爆管内, 它的内径比主爆轰管内径小。一般情况下主爆轰管内填充易储但不易起爆的可燃气体, 例如碳氢化燃料 JP7 等; 而起爆管内填充易爆气体, 例如氢气。本文计算域和障碍物布置如图 2 所示, 简化为二维对称半管。其中障碍物的几个控制参数为  $h \times w - n \times d$  其定义见图 2。本文所有计算, 起爆管长度为 200 mm, 半宽  $H = 15 \text{ mm}$ ,  $h \times w = 5 \text{ mm} \times 2 \text{ mm}$ , 这对应 33% 的阻塞率(blockage ratio), 而不同的障碍物布置方式对应着其个数和间距  $n \times d$ 。初始填充条件为  $p_0 = 20 \text{ kPa}$ ,  $T_0 = 295 \text{ K}$ , 起爆点简化为一个半径为  $R_i$  的柱体, 其强度不足以导致爆轰直接起始(direct initiation)。

本文应用的化学反应模型中 9 个组分包括  $\text{H}_2$ ,  $\text{O}_2$ ,  $\text{H}$ ,  $\text{O}$ ,  $\text{OH}$ ,  $\text{HO}_2$ ,  $\text{H}_2\text{O}_2$ ,  $\text{H}_2\text{O}$  和稀释气  $\text{Ar}$ , 19 个基元反应此处不赘述。每个组分的热力学特性参数详见文献[10]。多组分控制方程组的对流部分由五阶 WENO 格式离散, 而粘性

项则用四阶中心差分格式离散，时间方向由个应用三阶 Runge-Kutta 算法。WENO 格式已经广泛应用与爆轰问题的数值模拟[8, 11-14]。本文对流动和化学反应采用不同的积分步长来处理后者带来的刚性问题。

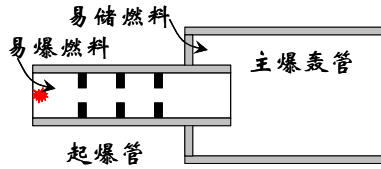


图 1 障碍物强化起爆管简化模型

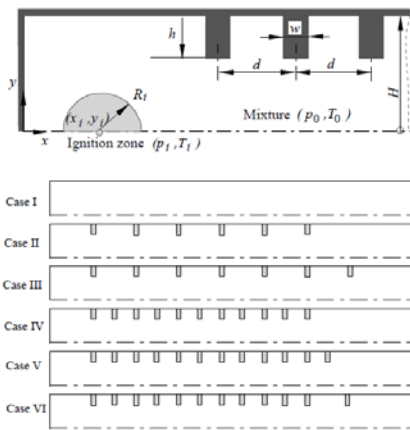


图 2 简化计算域和障碍物布置方式：  
 $n \times d = 0 \times 0$  (Case I);  $6 \times 20$  (Case II);  $7 \times 20$  (Case III);  $11 \times 10$  (Case IV);  $12 \times 10$  (Case V);

## 2 快速起爆机制

总体而言，在光滑起爆管内(Case I)，给定的起爆条件无法建立爆轰波，Case II 和 Case IV 加装了障碍物，虽然火焰得到加速，但是，模拟结果显示在计算区域内也没有实现 DDT 过程。其它布置方式都实现了爆轰波的快速建立。图 3 记录了极值压力曲线沿起爆管对称面和壁面的分布，高达约  $140p_0$  的压力脉冲体现了障碍体的副作用：诱导阻力和破坏管体材料的可能性，这也是障碍物不能在起爆管内无限加装的原因之一。

虽然前文强调障碍物对湍流混合的强化作用，但是本文着重强调激波动力学过程的作用。图 4 给出了沿起爆管对称面上的波动力学

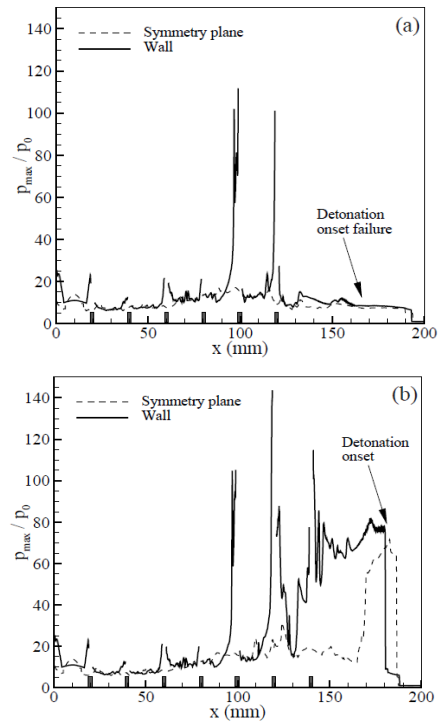


图 3 压力极值记录，对称面（虚线），管壁（实线）：(a)Case II；(b)Case III

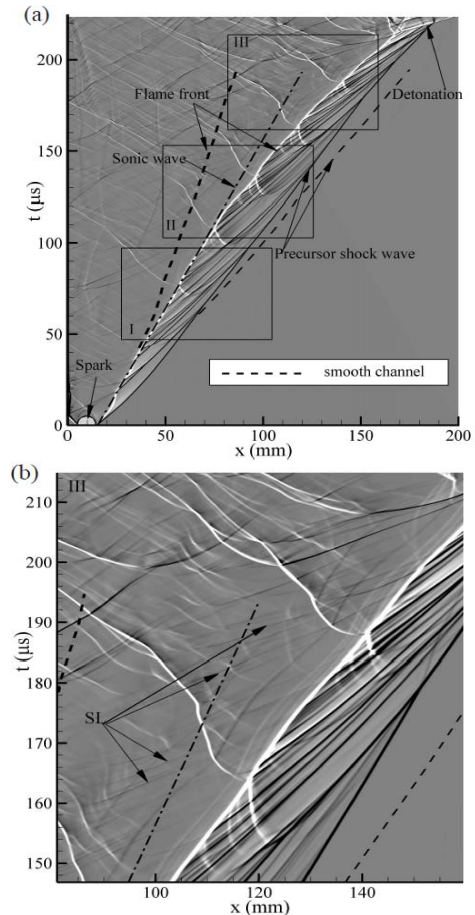


图 4 波图 t-x(沿对称面), Case I 和 Case III

过程，显示的量为  $\partial\rho/\partial x$ 。虚线则代表 Case I，而背景量代表 Case III，灰色条纹代表右行激波，而亮纹代表右行火焰面或者左行激波。在光滑起爆管内，图 4 虚线显示，前导激波阵面和主火焰面分布在声速线两侧，前者以超声速传播而后者显然是亚声速的。因而，此两阵面是趋于发散，在计算区域内不相交表明火焰面追不上激波阵面，爆轰波没有建立。此处的声速线由前导激波阵面前的未受干扰的静止气体计算得到。

相对于光滑起爆管，加装了 7 个障碍体的 Case III 中，前导激波阵面的传播速度明显降低（对应较大的斜率），而主火焰面则强烈加速，并最终达到超声速。此两阵面趋于相交表明爆轰波可以建立。如图 4 所示，有众多小激波（shocklet）产生，它们前导激波和主火焰面后传播发生碰撞、反射等复杂的激波动力学现象。整个波动力学过程可大致分为三个部分：I、II、III 区，在图 4 中由 3 个矩形分别界定。在 I 区，主火焰面加速主要由于初始点火源诱导的激波在左端面反射引起，主火焰面以近似不变的速度传播。在 II 区，从起爆管左端面或者从障碍物反射的小激波作用在主火焰面上，从而使后者大大加速，此区为过度区。在 III 区内，由起爆管左端面反射的小激波已经无法追上主火焰面，而作用在主火焰面上的右行小激波主要由主火焰面附近的障碍物反射而来。这从另外一个侧面表明加装过量的障碍体并不一定有利于 DDT 的快速建立。而在此区，主火焰面的传播速度也类似于 I 区，即几乎恒定。需要指出的是，虽然在 III 区内主火焰面加速到极大，但它仍无法与前导激波汇合，爆轰波的建立则是通过局部微爆实现的。数值模拟显示，局部微爆通常发生在前导激波和主火焰面之间，也就是说，主火焰面加速与前导激波共同孕育了局部微爆发生所需要的条件。

图 5 给出了局部微爆的射流碰撞机制。得到不断加速和强化的主火焰面在 6 号障碍体后旋转，同时从 7 号障碍体反射而回的左行激波也得到 6 号障碍体，使火焰面在 6 号障碍体附近急剧变化扩展，诱导了局部的强射流，并碰撞到 6 号障碍体表面。此处，存在丰富的未反应气团，同时靠近高温火焰面，射流碰撞以及

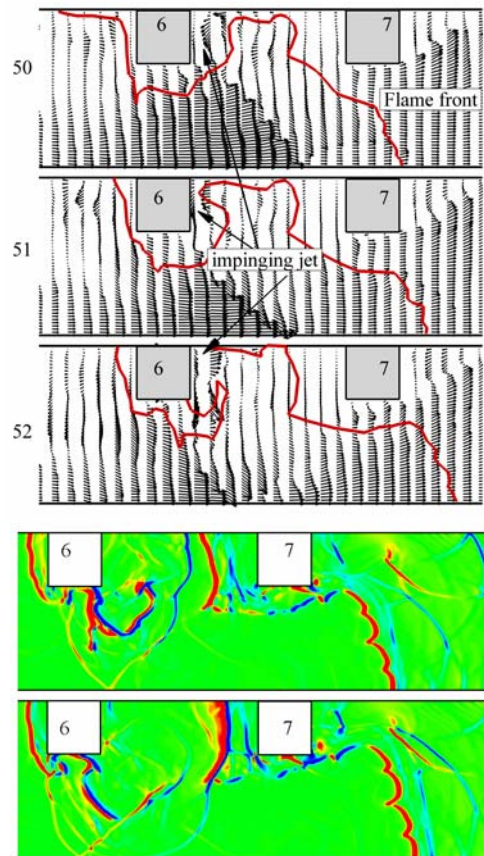


图 5 射流碰撞机制(速度矢量和纹影 Case III)

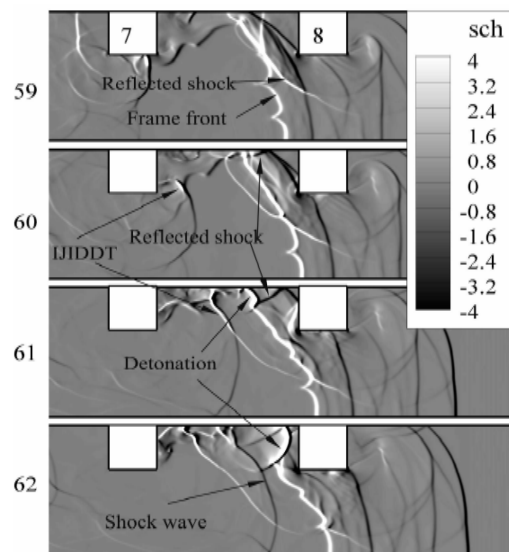


图 6 激波反射机制(纹影 Case VII)

激波反射过程, 共同诱发了局部微爆。为了验证激波反射机制的存在, 在 Case VII 加装了 8 个障碍物。从图 8 可以看出, 在 8 号障碍物上游, 激波在管壁反射, 反射波与主火焰面作用点附近, 局部微爆发生。此爆轰耗尽了障碍物之间的未反应气团, 从而使 7 号障碍物前射流碰撞诱导的局部微爆蜕化成激波。

图 7 给出了不同障碍物布局所得到的波图, 从中可以看出 Case V, 加装更多的障碍物, 可以大大加速主火焰面, 而对前导激波的影响甚微。但是, 极大加速的主火焰面并没有缩短 DDT 发生的时间和距离, 这从另外一个侧面证明加装过多障碍物的副作用。而把这种布局稍微改变, 把最后一个障碍物向下游移动, 得到 Case VI 布局。局部微爆无论在时间上还是在空间上都大大提前了。这说明, 在起爆管上游段, 多加障碍物可以促进主火焰面加速; 而在下游段, 扩大障碍物间隔, 则有利于激波动力学过程诱导局部微爆, 详细机理在进一步的研究中。

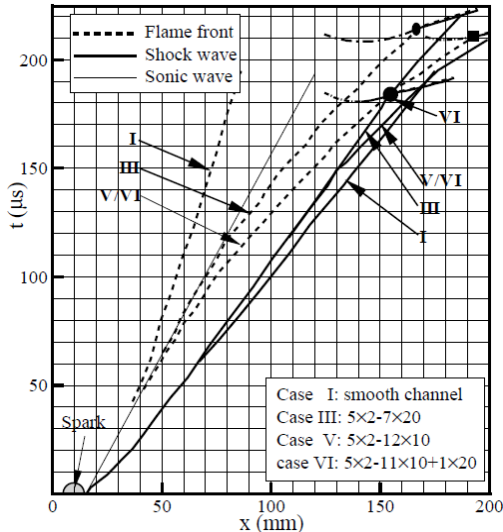


图 7 不同布局的波图 t-x

### 3 结论

本文通过高精度数值模拟研究, 探讨了爆轰管内加装障碍物对加速 DDT 过程的物理机理, 主要发现了射流碰撞和激波反射诱导局部微爆的两种机制。而这两种机制的发生都离不开火焰面的加速。小激波束在障碍体的反射碰撞过程, 以及与主火焰面的相互作用, 是后者

加速的主要原因。从表象而言, 爆轰管内加装障碍物, 可以使前导激波降速, 而使主火焰面加速, 从而在前导激波和主火焰面之间孕育了局部微爆发生的必要条件。

### 参考文献

- 1 Lee JHS. Detonation waves in gaseous explosives. In: *Handbook of Shock Waves*, vol 3, ed by Ben-Dor G, Igra O, Elperin T, (Academic Press, 2001) pp 309 - 415
- 2 Moen IO, Donato M, Knystautas R, Lee JH. Flame acceleration due to turbulence produced by obstacles. *Combust. Flame*, 1980, 39:221 - 32
- 3 Gamezo VN, Ogawa T, Oran ES. Flame acceleration and DDT in channels with obstacles: Effect of obstacle spacing. *Combust Flame*, 2008, 155:302 - 315
- 4 Valiev DM, Bychkov B, Akkerman VY, Law CK, Eriksson LE. Flame acceleration in channels with obstacles in the deflagration-to-detonation transition. *Combust. Flame*, 2010, 157:1012 - 1021
- 5 Valiev, DM, Bychkov, V, Akkerman, VY, Eriksson, LE. Different stages of flame acceleration from slow burning to Chapman-Jouguet deflagration. *Phys. Rev. E*, 2009, 80:036317
- 6 Khokhlov, AM, Oran, ES, Thomas, GO. Numerical simulation of deflagration-to-detonation transition: The role of shock-flame interactions in turbulent flames. *Combust. Flame*, 1999, 117:323 - 339
- 7 Hu ZM, Dou HS, Khoo BC. Rapid detonation initiation by sparks in a short duct: a numerical study. *Shock Waves*, 2010, 20:241 - 249
- 8 Hu ZM, Dou HS, Khoo BC. Numerical study on rapid detonation onset in obstructed channels with a detailed reaction model. ISWI2010: The Shock and High Rate properties of Matter, University of Cambridge, London, UK, Sep. 7 - 10, 2010
- 9 Jiang GS, Shu CW. Efficient implementation of weighted ENO schemes. *J. Comp. Phys.*, 1996, 126:202 - 228
- 10 McBride, BJ, Zehe, MJ, Sanford G. NASA Glenn coefficients for calculating thermodynamic properties of individual species. NASA/TP 2002-211556, Glenn Research Center, Cleveland, Ohio (2002)
- 11 Wang, CJ, Xu, SL. Re-initiation phenomenon of gaseous detonation induced by shock reflection. *Shock Waves*, 2007, 16:247 - 256
- 12 Hu, XY, Khoo, BC, Zhang, DL, Jiang, ZL. The cellular structure of a two-dimensional H<sub>2</sub>/O<sub>2</sub>/Ar detonation wave. *Combust. Theor. Model.*, 2004, 8:1 - 21
- 13 Qu, Q, Khoo, BC, Dou, HS, Tsai, HM. The evolution of a detonation wave in variable crosssection chamber. *Shock Waves*, 2008, 18:213 - 233
- 14 Dou, HS, Tsai, HM, Khoo, BC, Qiu, JX. Simulations of detonation wave propagation in rectangular ducts using a three-dimensional WENO scheme. *Combust. Flame*, 2008, 154:644 - 659

## SHOCK WAVE DYNAMIC MECHNISM FOR RAPID DETONATION ONSET IN OBSTRUCTED CHANNELS OF PDE

HU Zongmin<sup>1</sup> KHOO Boocheong<sup>2</sup> JIANG Zonglin<sup>1</sup>

(1 State Key Laboratory of High Temperature Gas Dynamics, Institute of Mechanics, C A S, No.15 Beisihuanxi Rd, Beijing 100190, China)

(2 Department of Mechanical Engineering, National University of Singapore, Singapore 119260)

**Abstract** Mounting obstacles in a pulse detonation engine (PDE) channel/tube is an effective means to accelerate deflagration to detonation transition (DDT). In the present study, the high-order WENO scheme is used to investigate the rapid detonation initiation in an obstructed channel. The governing equations are the Navier-Stokes equations and the chemical kinetic model consists of 19 elementary reactions and 9 species. Several different layouts of obstacles are simulated to find an optimal obstruction configuration. Numerical results show that shock wave dynamics becomes very critical to facilitate the formation of hot-spots or local explosion which likely leads to detonation onset in the channel.

**Key words** detonation, rapid onset, mechanism, simulation