

文章编号: 1001-1455(2006)06-0522-06

单次脉冲爆轰发动机工作过程的数值模拟*

于陆军, 范宝春, 董 刚, 归明月

(南京理工大学瞬态物理实验室, 江苏 南京 210094)

摘要: 通过求解 14 组分和 19 个基元反应的 $\text{CH}_4\text{-O}_2\text{-N}_2$ 详细化学反应动力学机理的二维轴对称 Navier-Stokes 方程, 对爆轰管内半球形高温火团引发的爆轰过程和爆轰波进入外流场后的全流场分布进行数值模拟。模拟结果显示了爆轰波在管内的成长、稳定传播、进入尾喷管后衰减为激波和进入外流场的全过程, 以及爆轰管出口端附近区域的复杂涡与激波的相互作用。对轴线上的压力分布和封闭端的压力等进行了讨论, 为脉冲爆轰发动机的开发研制提供参考信息。

关键词: 爆炸力学; 化学反应机理; 数值模拟; 脉冲爆轰发动机; 爆轰波

中图分类号: O381

国标学科代码: 130 · 3510

文献标志码: A

1 引 言

爆轰能够快速、高效地把可燃混合物里的化学能转化为有用的热能和机械能。脉冲爆轰发动机 (pulse detonation engine, PDE) 以推进管内重复的爆轰波产生的高压作为推进的动力。它具有质量轻、结构简单、热效率高、推力大等优点, 可望成为新一代航空、航天动力装置。

D. Helman^[1] 和 J. B. Hinkey 等^[2] 通过所做的单循环和多循环的 PDE 实验对初始点火能量、燃料部分预混、爆燃转爆轰过程和推力大小进行了研究; J. L. Cambier^[3] 和 S. Eidelman 等^[4] 通过数值模拟计算了推进端的推力, 进口处和尾喷管附近的流动; 黄希桥等^[5] 对脉冲爆轰燃烧强化混合过程进行了实验研究, 讨论了脉冲爆轰发动机模型混合室内不同扰流螺纹螺距内径比对其性能的影响。然而, 相关研究主要集中于管内流场, 对于管外流场的数值模拟和理论分析则相对较少, 国内迄今尚未见文献报道。

本文中以甲烷-空气可燃混合气体为研究对象, 采用基于多组分反应流的波传播算法, 对爆轰过程和管内、外流场变化进行数值模拟, 其中使用甲烷-空气的详细化学反应动力学机理, 包含 19 步基元反应和 14 组分, 对计算结果进行分析。

2 数值方法

2.1 基本方程

采用二维轴对称的, 带化学反应的 Navier-Stokes 方程

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial x} + \frac{\partial \mathbf{G}}{\partial y} + \mathbf{W} = \frac{\partial \mathbf{F}_v}{\partial x} + \frac{\partial \mathbf{G}_v}{\partial y} + \mathbf{S} \quad (1)$$

式中:

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} \rho_1 \\ \vdots \\ \rho_K \\ \rho u \\ \rho v \\ e \end{pmatrix}, \quad \mathbf{F} = \begin{pmatrix} \rho_1 u \\ \vdots \\ \rho_K u \\ \rho u^2 + p \\ \rho uv \\ u(p + e) \end{pmatrix}, \quad \mathbf{G} = \begin{pmatrix} \rho_1 v \\ \vdots \\ \rho_K v \\ \rho uv \\ \rho v^2 + p \\ v(p + e) \end{pmatrix}$$

* 收稿日期: 2005-09-09; 修回日期: 2006-06-22
基金项目: 国家自然科学基金项目(50336030)
作者简介: 于陆军(1979—), 男, 博士研究生。

$$\mathbf{W} = \frac{\beta v}{y} \begin{pmatrix} \rho_1 \\ \vdots \\ \rho_K \\ \rho u \\ \rho v \\ p + e \end{pmatrix}, \quad \mathbf{F}_V = \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ \tau_{xx} \\ \tau_{xy} \\ \tau_{xy} \\ u \tau_{xx} + v \tau_{xy} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{G}_V = \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ \tau_{xy} \\ \tau_{yy} \\ \tau_{yy} \\ u \tau_{xy} + v \tau_{yy} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{S} = \begin{pmatrix} \dot{\omega}_1 \\ \vdots \\ \dot{\omega}_K \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

其中 ρ 为密度, p 为压力, u 和 v 分别为 x 和 y 方向速度分量, e 为单位体积总内能

$$e = \rho \int c_V dT + \frac{1}{2} \rho (u^2 + v^2) \tag{2}$$

式中: $c_V = \sum c_{V_k} Y_k$ 为混合物的定容比热, Y_k 为组分 k 的质量分数, $k = 1, 2, \dots, K$, T 为温度。

$\dot{\omega}_k$ 为组分 k 的净生成速率

$$\dot{\omega}_k = \sum_{i=1}^I (\gamma''_{ki} - \gamma'_{ki}) \left(k_{fi} \prod_{k=1}^K [X_k]^{\gamma'_{ki}} - k_{bi} \prod_{k=1}^K [X_k]^{\gamma''_{ki}} \right) \tag{3}$$

式中: $\gamma'_{ki}, \gamma''_{ki}$ 分别表示第 i 个基元反应中组分 k 的正、逆反应计量系数; $[X_k]$ 为组分 k 的摩尔浓度; k_{fi}, k_{bi} 分别表示第 i 个基元反应的正、逆反应速率常数, 他们遵循 Arrhenius 定律

$$k_{fi} = A_{fi} T^{\beta_{fi}} \exp\left(\frac{-E_{fi}}{RT}\right) \tag{4}$$

式中: A_{fi} 表示第 i 个正反应的指前因子; β_{fi} 表示第 i 个正反应的温度指数; E_{fi} 表示第 i 个正反应的活化能。

2.2 计算方法

数值计算时, 采用分裂算法, 将控制方程中的流动过程和化学反应过程解耦, 即每个计算时间步长, 由冻结化学反应的流体动力学计算和没有流动作用的化学反应计算组成。先通过流体动力学步计算, 得到新的流体参数, 再利用新参数进行化学反应步计算, 从而得到一个完整的化学反应流动的新参数。流体动力学过程的计算是以波传播方法^[6]为基础, 并把它改为适应多组分反应流的计算, 刚性化学反应方程采用隐式 Gear 算法求解程序计算。计算时, 流体动力学过程采用无量纲计算(选定基准压力为 1.01325×10^5 Pa, 温度为 298.15 K, 长度为 0.1 m), 化学反应采用有量纲计算。

计算区域图 1 所示。区域(a)为对称轴上方的 PDE 爆轰管, 管长 8, 高 0.5, 尾喷管的长度和角度分别为 0.8 和 15° , 区域(a)相应的计算网格数为 800×50 ; 区域(b)的初始计算区域为 1.0×2.0 , 其计算网格数为 50×100 ; 区域(c)的初始计算区域为 1.4×1.48 , 其计算网格数为 70×74 。区域(b)和(c)将可以随着计算的进行而不断的增大。

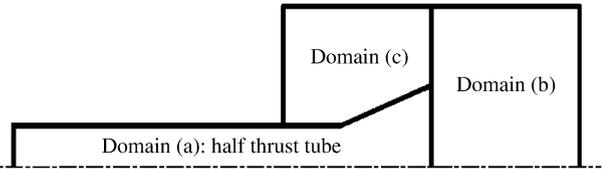


图 1 模拟中所应用的计算域的分布
Fig.1 Distribution of computational domains used in the simulation

初始时刻, 管内充满温度和压力都为 1.0、当量比也为 1.0 的甲烷-空气混合物, 尾喷管和外部区域为温度和压力都为 1.0 的空气。位于管内左端的点火区为高温高压区, 给定初始温度是 5.0、压力为 2.5。壁面都按绝热、无滑移刚性壁面处理, 外部区域的边界按开口边界来处理。

3 结果和讨论

3.1 PDE 的工作过程

典型脉冲爆轰发动机工作过程主要包括四个步骤: 第一步, 爆轰管内填充可燃气体; 第二步, 通过点火, 在管内逐渐形成向出口端传播的爆轰波; 第三步, 爆轰波传出爆轰管外, 在出口处产生的膨胀波向管内传播; 第四步, 膨胀波抵达爆轰管的封闭端, 导致封闭端的压力下降直至失去推力。

综上所述,爆轰波的发展主要包括三个阶段:第一,爆轰波的形成阶段;第二,爆轰波在管内稳定传播阶段;第三,爆轰波进入外流场,迅速衰减为无反应的激波。

图2为轴线上火焰阵面、激波阵面、可燃混合物(或燃烧产物)与空气接触间断面的传播轨迹图,它描述了单次脉冲爆轰过程的流场波系。A点为爆轰管的推进端,于该点起爆后,经短暂时间,在B点成长为爆轰波。BC段为爆轰波在管内的传播阶段。稳定传播的爆轰波于C点进入尾喷管,尾喷管内介质是空气,其

声速阻抗小于燃烧产物的声速阻抗,故与爆轰波作用后,产生向管内传播的反射膨胀波。同时,进入尾喷管的爆轰波,由于失去化学能量的支持,激波阵面和火焰阵面开始解耦。因此,图中火焰阵面轨迹和激波阵面轨迹在C处开始分离,并在D处完全熄灭。激波由E点溢出爆轰管,波后气体也以欠膨胀射流的方式尾随激波溢出,由于出口端附近压力梯度比较大,出口端附近区域迅速产生膨胀波。

在爆轰波抵达尾喷管之前,接触间断一直维持在 $X/L=7.2$ 处,即C点。爆轰波进入尾喷管后,在透射激波的作用下,接触间断开始向出口处运动,而后传播出爆轰管。图中CF线右侧是燃烧产物,CF和CG之间,即激波阵面和接触间断之间是空气。

图3为轴线上不同时刻的压力分布图,显示了爆轰波从形成到最终衰减的具体过程和相应的压力剖面变化。当火团初始温度合适时,火焰将逐渐加速,且最终转换为爆轰波。图3中的曲线1表明,在成长为C-J爆轰波以前,首先出现强爆轰,曲线2~5显示了稳定爆轰波在管内的传播过程(曲线1时刻到爆轰波进入尾喷管之间的时间段对应图2中的BC段)。随后爆轰波进入尾喷管,衰减为激波(对应于图2中的CE段),激波再进入管外流场(对应图2中的EG段)。在接触间断处产生的反射膨胀波和在尾喷管附近产生的膨胀波,都会使管内压力下降(曲线6、曲线7、曲线8)。在 $t=3.44$ 时,膨胀波抵达爆轰管的封闭端,从而促使封闭端的推力逐渐下降,直至失去推力(曲线9、曲线10)。

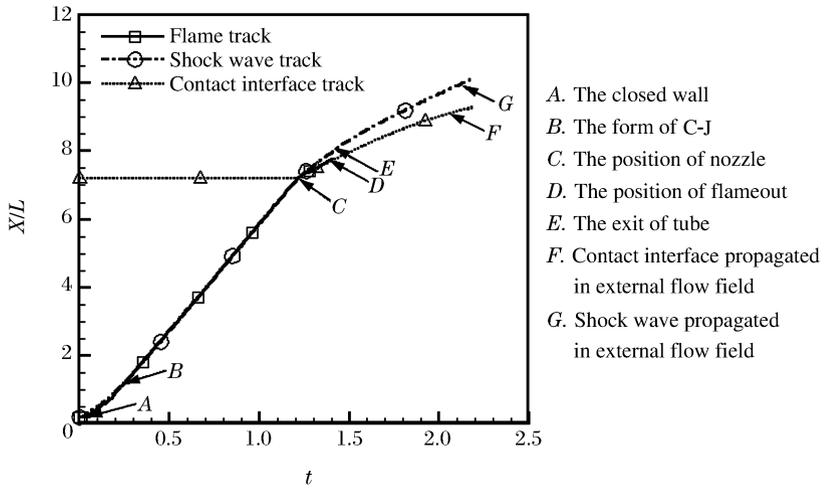


图2 轴线上火焰阵面,激波阵面,接触间断的传播轨迹

Fig. 2 Trace of flame, shock wave and contact interface along the axis

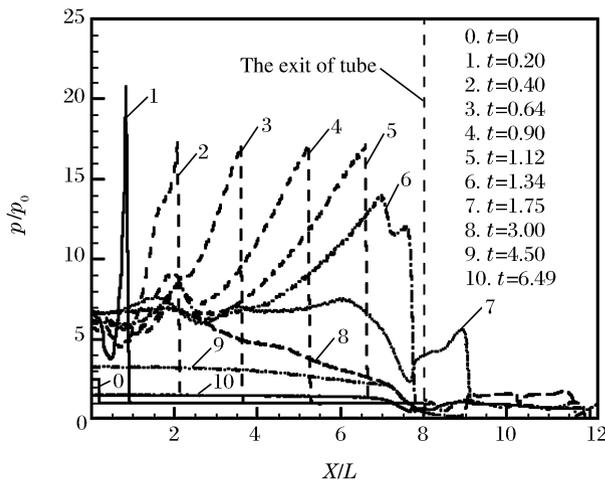


图3 不同时刻的轴线上的压力分布

Fig. 3 Pressure distribution of axis at the different time

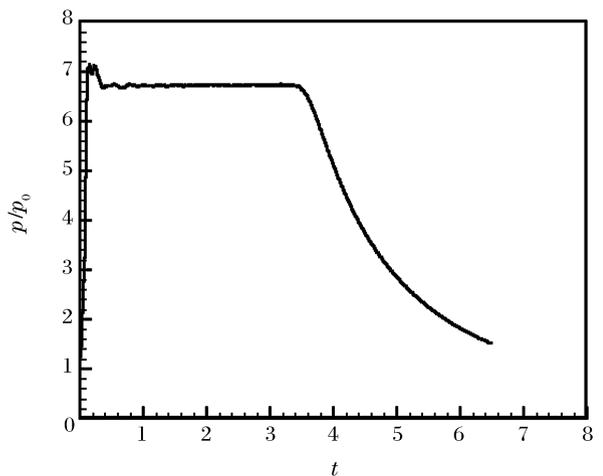


图4 封闭端的压力随时间的变化

Fig. 4 The head-end (thrust wall) pressure history

图 4 为爆轰管封闭端的压力随时间变化图。在形成稳定爆轰波以前的时段内,封闭端的压力值较高,这与设定的初始条件(高温高压火团点火)和过驱爆轰有关。封闭端的压力经过短暂上升之后,迅速降低到约 6.70,并且在膨胀波抵达爆轰管的封闭端($t=3.44$)之前,其压力基本保持为该值,这部分时间是 PDE 管产生推力的阶段。进一步的计算表明激波的形成和传播到出口端需要时间为 1.42,所以在激波离开 PDE 管之后,膨胀波抵达封闭端所用的时间为 2.02。在膨胀波抵达 PDE 管子的封闭端之后,封闭端的压力开始逐渐降低。

3.2 爆轰波结构和管内流场变化

图 5 给出了 $t=0.64$ 时刻,在轴线位置上,稳定爆轰波后组分质量分数和压力的分布。由于是等当量比反应,所以爆轰波阵面后的绝大部分区域燃料都已经燃烧完全,因此在爆轰波后面,只存在燃烧产物(CO_2 和 H_2O)和不参加化学反应的惰性气体氮气,其中 CO_2 的质量分数为 0.151 25, H_2O 的质量分数为 0.123 75。波阵面中重要自由基质量分数由大到小的顺序为 $\text{CO} > \text{CH}_3 > \text{CH}_2\text{O}$,这三种自由基的质量分数维持在 0.000 13~0.001 3 之间。由三种自由基的分布可以计算出火焰阵面的宽度约为 0.059 92,并且压力曲线和自由基的分布证明了激波阵面和火焰阵面已经相互耦合形成了稳定传播的爆轰波。此时稳定传播的爆轰波的速度为 1 845 m/s。作者利用 Gordon-Mcbride 程序计算的在相同条件下的 C-J 爆速为 1 926 m/s,与本文中计算结果比较吻合。

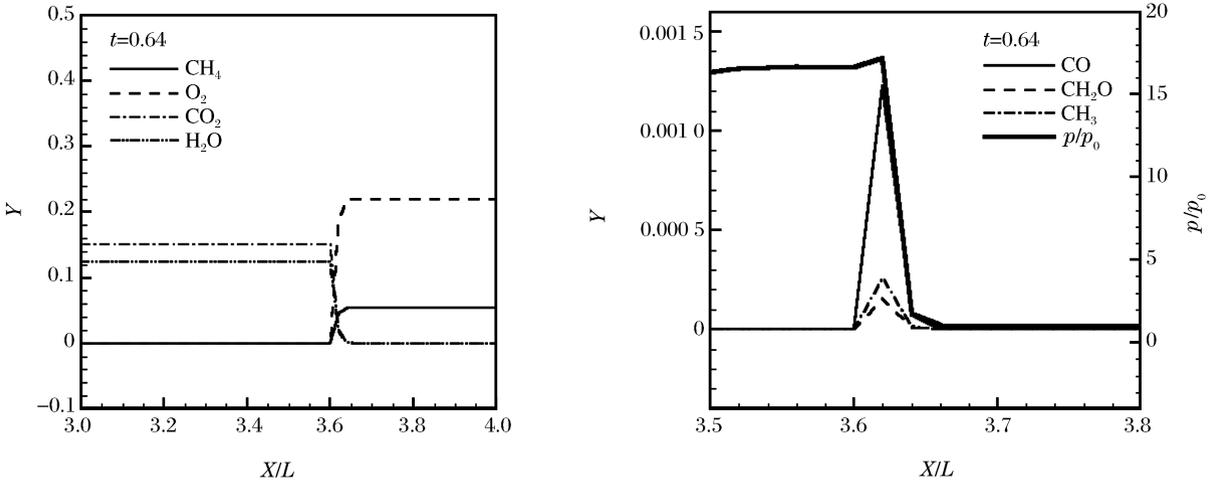


图 5 爆轰波稳定传播时的轴线上的压力、组分分布图

Fig. 5 Distributions of pressure and species of axis when detonation wave propagated steadily

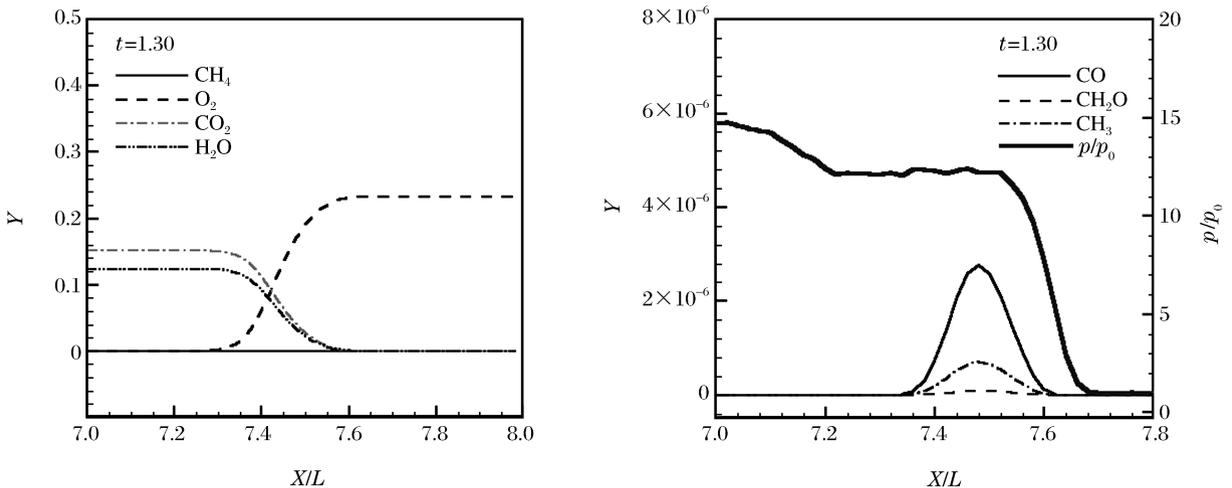


图 6 爆轰波进入尾喷管后的轴线上的压力、组分分布图

Fig. 6 Distributions of pressure and species of axis after detonation wave went into the nozzle

图 6 为在轴线位置上,爆轰波进入尾喷管后 $t=1.30$ 时刻的组分质量分数和压力的分布。由于尾喷管内介质是空气,其氧气的质量百分含量(0.233)比直管内未燃前的相应的氧气质量百分含量(0.220)高,所以图 6 中激波前面的氧气质量百分含量比图 5 中的略高。由于气体对流的作用,所以此时三种重要自由基(CO, CH₃, CH₂O)仍少量存在,但是其质量百分数比图 5 中相应自由基的质量百分数明显降低,其质量分数维持在 3×10^{-6} 以下。当爆轰波进入尾喷管后,激波阵面和火焰阵面开始解耦,爆轰波逐渐衰减为一个无反应的激波。图 6 中火焰阵面所在的位置为 $X/L=7.478$,激波阵面位置为 $X/L=7.606$,这说明了激波阵面和火焰阵面正在解耦(此现象与图 2 中的火焰阵面轨迹和激波阵面轨迹在 C 处开始分离一致)。此时刻激波的压力强度已经减弱为 $p/p_0 \approx 14.7$ (稳定传播时的爆轰波压力强度 $p/p_0 \approx 17.3$)。

3.3 管外流场变化

图 7 显示了出口端附近区域的涡与激波的相互作用。爆轰管内的高温高压气体以欠膨胀射流的方式尾随激波溢出,在尾喷管出口附近形成膨胀波,使出口端附近压力急速下降,甚至出现负压,图 3 中的曲线 8 清晰显示了这一情况。在爆轰管出口端附近的已压缩气体快速地以球面波的方式向外流场发展,膨胀波同时向爆轰管内传播。爆轰管内高压气体以超音速的方式溢出爆轰管,在剪切流和斜压效应的作用下,在爆轰管出口附近形成涡环。涡环的功能如同一个发散型的尾喷管,射流通过这个流体尾喷管时速度发生变化,有可能发生壅塞,产生驻定激波。图 7 为在流体尾喷管的发散端形成的驻定激波。在图 7 涡量阴影图中,阴影越明亮处其正向(垂直于纸面向外)涡量越大。

(a) Shadowgraph of vortex, $t=2.50$

(b) Snapshot of vortex line, $t=2.50$

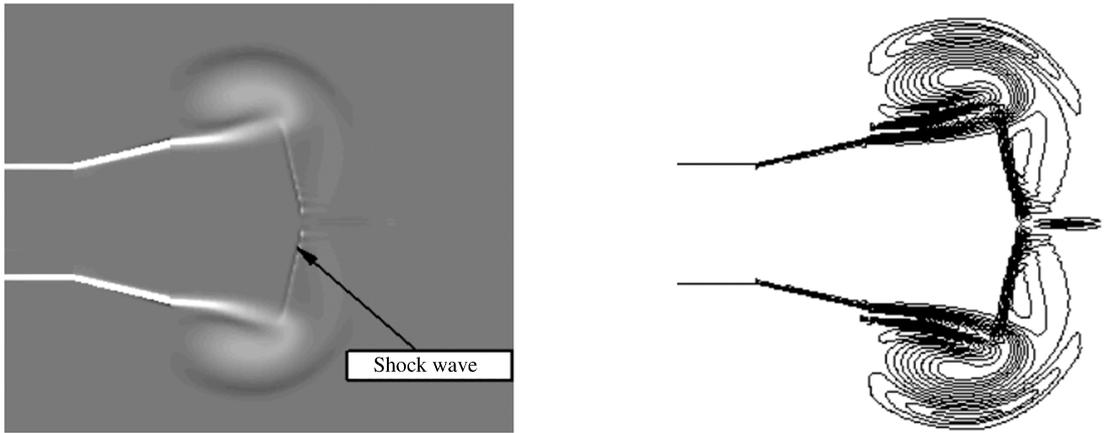


图 7 爆轰波进入外流场后的涡量阴影图和涡线图

Fig. 7 Shadowgraph of vortex and snapshot of vortex line after detonation wave went into external flow field

图 8 为爆轰波溢出爆轰管之后,尾喷管附近及外流场的压力等值线图,它可视化的描述了单次脉冲爆轰的流场变化。

(a) $t=1.76$

(b) $t=2.00$

(c) $t=2.25$

(d) $t=2.50$

(e) $t=3.25$

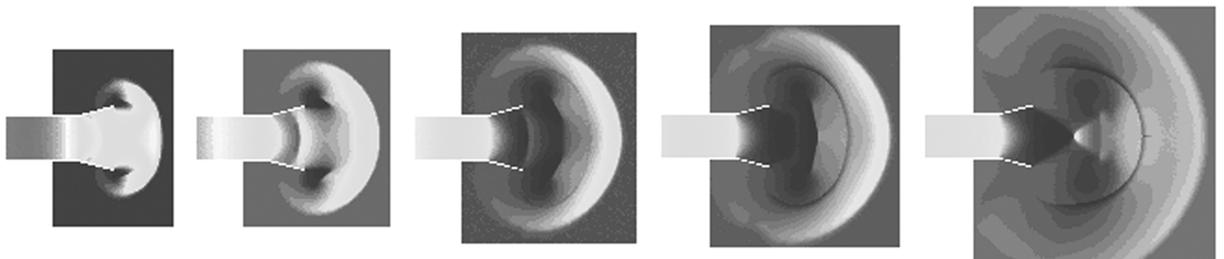


图 8 初始膨胀阶段的压力等值线图

Fig. 8 Snapshots of pressure contours at the initial stage of expansion

4 结 论

采用分裂格式处理带化学反应的二维轴对称 Navier-Stokes 方程, 数值模拟了 PDE 的工作过程。使用改进的二维波传播方法求解流场, 使用基于隐式 Gear 算法的微分方程解法器求解化学反应过程。使用的甲烷-空气的详细化学反应动力学机理包含 14 组分和 19 步基元反应。计算结果表明, 本文中给定的初始条件下, 高温气团开始燃烧后, 先形成过驱爆轰后逐渐衰减为稳定传播的爆轰波。稳定传播的爆轰波进入尾喷管后, 火焰阵面和激波阵面开始解耦, 爆轰波逐渐衰减为无反应的激波, 激波再进入管外流场。接触间断处产生的反射膨胀波和在尾喷管附近形成的膨胀波都向爆轰管的封闭端传播, 最终导致封闭端压力下降。采用多组分化学反应动力学方法可以计算爆轰波后的组分浓度和温度分布, 为了解其内部结果提供了有用信息, 同时为 PDE 的开发研制提供了理论依据。

参考文献:

- [1] Helman D, Shreeve R P, Eidelman S. Detonation pulse engine[R]. AIAA, 86-1683, 1986.
- [2] Hinkey J B, Bussing T, Kaye L. Shock tube experiments for the development of a hydrogen-fueled pulse detonation engine [R]. AIAA, 95-2578, 1995.
- [3] Cambier J L, Adelman H G. Preliminary numerical simulation of a pulsed detonation wave engine[R]. AIAA, 88-2960, 1988.
- [4] Eidelman S, Grossman W, Lottati I. Air-breathing pulsed detonation engine concept: A numerical study[R]. AIAA, 90-2420, 1990.
- [5] 黄希桥, 严传俊, 范玮, 等. 脉冲爆震燃烧强化混合过程的实验研究[J]. 燃烧科学与技术, 2005, 11(3): 282-285.
HUANG Xi-qiao, YAN Chuan-jun, FAN Wei, et al. Experimental study of the mixing process of pulse detonation combustion[J]. Journal of Combustion Science and Technology, 2005, 11(3): 282-285.
- [6] Leveque R J. Wave propagation algorithms for multidimensional hyperbolic[J]. Journal of Computational Physics, 1997, 131(2): 327-353.

Numerical simulation of the process on a pulse detonation engine

YU Lu-jun, FAN Bao-chun*, DONG Gang, GUI Ming-yue

(National Key Laboratory of Transient Physics, Nanjing University of Science and Technology, Nanjing 210094, Jiangsu, China)

Abstract: By solving two-dimensional axisymmetric Navier-Stokes equations in conjunction with the chemistry, a numerical simulation of pulse detonation process induced by flame in the tube with $\text{CH}_4\text{-O}_2\text{-N}_2$ mixture and the flow field outside was performed, and a detailed chemical mechanism of $\text{CH}_4\text{-O}_2\text{-N}_2$ system, which included 14 species and 19 element reactions, was involved. The computational results demonstrate the process of the development, steady propagation, degenerating into a shock after the detonation wave went into the flow field outside and complex vortex /shock interactions in the vicinity of the thruster exit. The pressure distribution of axis and the head-end (thrust wall) thrust history were discussed to research and exploit a pulse detonation engine.

Key words: mechanics of explosion; chemical reaction mechanism; numerical simulation; pulse detonation engine; detonation wave

* Corresponding author: FAN Bao-chun
E-mail address: bcfan@mail.njust.edu.cn
Telephone: 025-84303235