第 23 卷 第 3 期
2006 年 5 月

计 算 物 理
CHINESE JOURNAL OF COMPUTATIONAL PHYSICS

Vol. 23, No. 3
May, 2005

[文章编号] 1001-246X(2006)03-0266-07

# 脉冲爆轰发动机热射流起爆机理数值分析

牟乾辉, 胡宗民, 赵 伟, 张德良, 姜宗林
(中国科学院力学研究所 LHD, 北京 100080)

[摘 要] 应用频散可控耗散差分格式, 求解具有化学反应项的 Euler 方程, 探讨了热射流起爆可燃混合气缩短 DDT 过程的物理机制. 数值研究模拟了不同条件下的起爆过程, 从氢氧链式反应出发详细分析了氢氧爆轰直接起爆的 SWACER (能量释放而形成激波或压缩波的相干放大) 机制的建立条件, 讨论了热射流起爆存在超临界、临界和亚临界三种直接起爆机制.

[关键词] PDE; 射流点火; 直接起爆; 爆轰; 数值模拟
[中图分类号] O357 [文献标识码] A

## 0 引言

脉冲爆轰发动机(PDE)是一种新概念推进系统,它利用在充满混合可燃气体的燃烧室(或称作爆轰管)的封闭端起爆可燃气体,产生向开口端传播的爆轰波,高压气体由推力喷管高速膨胀喷出,从而产生发动机推力. 考虑到前导激波的预压缩作用,PDE 可以近似为一个等容放热过程,所以脉冲爆轰发动机热循环效率要比涡轮喷气发动机高得多. PDE 概念提出于上世纪 40 年代[1],由于当时对爆轰现象物理本质理解的不够,这种推进系统的研究曾一度遭到否定. 但是,随着近年来对爆轰现象的深入了解和对高超声速飞行器发展需求的增长[2~4],对脉冲爆轰发动机的研究又成为气体动力学研究的一个热点. 鉴于 PDE 具有较高的推进效率、简单的机体结构和较宽的运行范围,它在军事以及航空航天领域都有着诱人的应用前景.

PDE 的热力循环过程可分为 4 个阶段:即进气、起爆、爆轰和排气. 所谓起爆就是点燃混合气,使爆燃转至爆轰的过程(Deflagration Detonation Transition, DDT). 一般情况下,对于脉冲爆轰发动机来讲,DDT 在时间和空间上都是一个相对长的过程,这对提高发动机的脉冲频率、减小重量、提高热效率都是极大的限制. 可以说点火起爆是 PDE 热力循环的关键控制过程,而 DDT 过程又是爆轰物理的基础现象. 所以,对热射流点火起爆的研究既有理论意义又有应用价值. 文[5]对热射流点火进行了实验研究,研究结果表明热射流能够在爆轰管的起爆端附近迅速形成爆轰,是缩短 DDT 过程的有效方法[6~8]. 本文应用数值模拟方法,探讨热射流起爆的机制,给出更为详细的物理解释.

## 1 物理问题描述

在爆轰物理的研究中,可燃混合气的直接起爆有多种方法,如电熔丝熔断点火、火花放电点火和高能起爆炸药点火等,其基本要求就是通过这些方法提供足够的爆轰临界起始能量. 在文[4]中 Lee 阐述了直接起爆的超临界、临界和亚临界起爆准则,并且应用简化的单步化学反应模型证明了理论结果. 在超临界起爆条件下,初始反应阵面与前导激波阵面耦合,直接形成 CJ 爆轰波;在亚临界起爆条件下,这两个阵面解耦,前导激波不断衰减;在临界条件下,初始反应阵面与前导激波阵面是分离的,经过一段过渡调整时期,反应阵面赶上激波阵面迅速形成过驱爆轰波. 在临界起爆过程中,其物理机制与爆燃转爆轰的 DDT 过程非常类似,就是 SWACER(Shock wave amplification coherent energy release)过程,即在合理的化学反应梯度场内,由于能量释放而形成激波或压缩波的相干放大.

[收稿日期] 2005-01-10; [修回日期] 2005-07-01
[基金项目] 国家自然科学基金和中国工程物理研究院(10276035)资助项目
[作者简介] 牟乾辉(1977-),男,贵州都匀,博士生,从事脉冲爆轰发动机相关研究,北京市海淀区北四环西路 15 号中科院力学所 LHD 100080.

© 1994-2008 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved. http://www.cnki.net

在脉冲爆轰发动机的研究中,需要高频率的连续起爆系统.火花放电的起爆能量常常低于所应用的可燃混合气临界起爆能量,所以预燃热射流起爆就是一种重要的能量放大起爆方法.预燃热射流起爆系统如图 1 所示,即在通常的爆轰管前外加一段预燃管.整个系统内充满相同的可燃混合气体,首先在预燃管内将气体点火燃烧,然后利用高温燃烧产物和含有自由基的部分未反应气体向爆轰管喷射.由于喷射气体含有更多的能量,在射流的非定常发展过程中可以直接诱发爆轰.

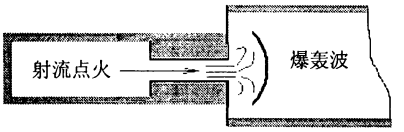


图 1　增设预燃管的 PDE 爆轰管示意图

Fig. 1　Sketch of PDE with a pre-combustion tube

## 2　控制方程和数值方法

本文研究不考虑预燃过程,而只关注射流直接诱发动力学爆轰过程,因此粘性、热传导和分子扩散等耗散效应可以不考虑.在上述简化和假设下,二维轴对称多组分气相爆轰过程的控制方程为带化学反应源项的 Euler 方程组

$$\frac{\partial U}{\partial t}+\frac{\partial F}{\partial x}+\frac{\partial G}{\partial r}+\frac{1}{r}S_g = S_c, \tag{1}$$

其中未知变量矩阵 $U=(\rho_1,\cdots,\rho_{ns},\rho u,\rho v,E)^T$,对流通量矩阵 $F=(\rho_1 u,\cdots,\rho_{ns}u,\rho u^2+p,\rho uv,(E+p)u)^T$, $G=(\rho_1 v,\cdots\rho_{ns}v,\rho uv,\rho v^2+p,(E+p)v)^T$,几何源项矩阵 $S_g=(\rho_1 v,\cdots\rho_{ns}v,\rho uv,\rho v^2,(E+p)v)^T$,化学反应源项矩阵 $S_c(U)=(\omega_1,\cdots\omega_{ns},0,0,0)^T$,在以上各式中 $\rho_i(i=1,\cdots,ns)$ 为第 $i$ 组分密度,混合气体密度 $\rho=\sum_{i=1}^{ns}\rho_i$;$u,v$ 为 $x,r$ 向的速度;$E$ 为单位体积总能,$E=e+\rho(u^2+v^2)/2$,$e$ 为单位体积内能,$e=\rho h-p$,其中混合物比焓 $h=\sum C_i h_i$,组分 $i$ 的焓值 $h_i$ 由多项式拟和的方法给出;理想混合气体的压力为 $p=\sum\rho_i R_i T$,$R_i$ 为第 $i$ 种组分的气体常数;$\omega_i$ 为第 $i$ 组分的单位体积的质量生成率,根据基元反应模型求得,本文考虑 8 ($ns=8$) 种组分 20 个反应,相关组分为 $H_2$,$O_2$,O,H,OH,$HO_2$,$H_2O_2$,$H_2O$.

本文对方程组(1)的离散方法采用 Jiang 等人在 1995 年提出的频散可控耗散差分格式(DCD)[9,10],该格式应用了 Steger-Warming 的矢通量分裂技术,处理激波等强间断的鲁棒性好,且具有格式构造简单、激波分辨率高、计算量小等优点,具体计算公式与方法见文[11].

## 3　计算验证

关于反应流动数值结果的验证是一项非常棘手的工作,本文只做基本的方法验证.图 2 给出了直接起爆并形成稳定爆轰的过程,混合气体为 $2H_2+O_2+Ar$,$P_0=16$ kPa,$T_0=298$ K.在 $t=6.5$ μs 时刻,爆轰迅速建立,但是还不稳定,爆压缓慢增长,并逐渐趋于一个平稳值,形成稳定传播的爆轰波.计算得到的爆速 $D=2257\ \mathrm{m\cdot s^{-1}}$,这和 C-J 爆速 $D_{CJ}=2240\ \mathrm{m\cdot s^{-1}}$ 是很接近的.

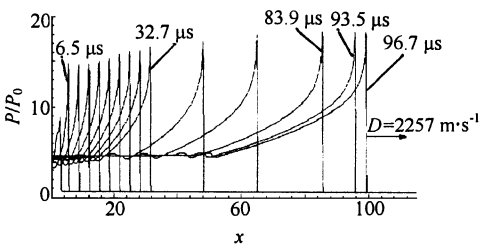


图 2　爆轰的起爆过程($P$ 为无量纲压力)

Fig. 2　A numerical detonation setup process

## 4　计算结果与分析

计算域如图 3 所示,其中包括预燃管、过波管和爆轰管三部分,它们的直径与长度分别为 $D1$,$D2$,$D3$ 和 $L1$,$L2$,$L3$.本文把氢氧混合气体作为爆轰介质,为了改变混合物敏感度以比较射流诱发的不同起爆机制,在混合物中加入了不同比例的氮气,从而改变了混合物的起爆难度.混合物初始压力和温度为 $P_0=1$ atm,$T_0=298$ K.应用 3 种混合物组分构成:1) $2H_2+O_2+4N_2$;2) $2H_2+O_2+5N_2$;3) $4H_2+O_2+7N_2$.预燃管内给定相应爆轰介质的燃烧产物,其中包括自由基 O,H,OH,以及相应的温度和压力,并给定一个较低的初始速度($80\ \mathrm{m\cdot s^{-1}}$);在过渡管和爆轰管内充满上述爆轰气体.表 1 给出了 $H_2/O_2/$ 混合物 8 组分 20 反应模型的主要

© 1994-2008 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved.　http://www.cnki.net

链反应式[12],其中式 ①为链的引发反应,②～④为链的增长反应,其中 ③,④为增长分支反应,而 ⑤～⑦为链的终止反应. $H_2$ 与 $O_2$ 经过引发反应 ①,每生成一个 OH 就很快经反应 ②生成 H. 在分支反应 ③,④中传递物由一个变为 2 个,这是迅速加快反应的主要原因. 爆轰反应能否进行下去主要取决于竞争反应 ③和 ⑤,其中后者生成不活泼的 $HO_2$ 消耗大量的 H,从而使反应终止. 下面将结合上述链反应机理对三种爆轰气体的射流起爆过程进行分析.

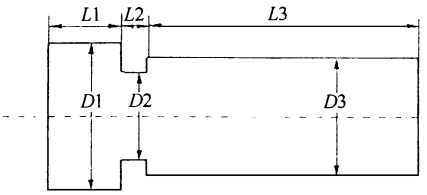


图 3 计算区域示意图

Fig. 3 Calculation domain

表 1 $H_2/O_2/8$ 组分 20 反应模型的主要链反应式

Table 1 Part of the chain-reactions of $H_2/O_2$

| 基元反应式 | $A$/cm$^3$ mol$^{-1}$ s$^{-1}$ | $n$ | $Ea$/cal mol$^{-1}$ ·K$^{-1}$ |
|---|---|---|---|
| ① $H_2 + O_2 = 2OH$ | $1.70 \times 10^{13}$ | 0.0 | 47 780 |
| ② $OH + H_2 = H_2O + H$ | $1.17 \times 10^{9}$ | 1.3 | 3 626 |
| ③ $H + O_2 = OH + O$ | $6.00 \times 10^{14}$ | 0.0 | 16 790 |
| ④ $O + H_2 = OH + H$ | $5.06 \times 10^{4}$ | 2.7 | 6 290 |
| ⑤ $H + O_2 + M = HO_2 + M$ | $3.61 \times 10^{17}$ | - 0.7 | 0 |
| ⑥ $H + H + M = H_2 + M$ | $1.00 \times 10^{18}$ | - 1.0 | 0 |
| ⑦ $H + OH + M = H_2O + M$ | $1.60 \times 10^{22}$ | - 2.0 | 0 |

### 4.1 爆轰气体 $2H_2 + O_2 + 4N_2$

在本文考虑的 3 种爆轰气体中,混合物 1) 是最容易起爆的. 图 4 给出了不同时刻爆轰管内的 $H_2$ 和 OH 等密度分布,它们从不同角度反映了预燃产物引发爆轰的过程. 在 $t = 16.6$ μs,高温预燃产物经过过渡管向爆轰管内发展并产生前导激波的绕射. 前导激波压缩了爆轰管内的未反应气体,使 $H_2$ 的密度提高. 前导激波和压缩区之后是接触间断面,间断后是高温燃烧产物,其中包含一些自由基 OH,间断前是已经被压缩的未反应气体,在此间断面附近开始了链的引发反应 ①,生成了大量的 OH,这里就是活化的化学反应区. 到 $t = 18.6$ μs时刻,上述反应区靠近对称轴部分由于没有受到稀疏波的作用,链的增长反应 ②～④顺利进行,消耗了大量的 $H_2$,并形成了 $H_2O$ 以及大量的自由基 O,H,OH,反应释热使得反应阵面向前加速突起,但是在此时刻并没有追上前导激波. 在反应阵面与前导激波之间,链式反应的引发、增长和发展形成了化学反应梯度场,这符合 SWACER[4] 的要求. 由于更强的反应区与压缩波的耦合,反应阵面发展形成过驱爆轰波阵面,到 $t = 22.3$ μs 时刻追上前导激波,并向上壁面呈弧形扩展. 这一过驱爆轰波在图 5 中更为明显,其波速超过了2 142 m·s$^{-1}$. 当过驱爆轰波追上前导激波之后,由于波前不再是预压缩气体反应物,爆轰波强度不断衰减,最终将发展成为 C-J 爆轰波.

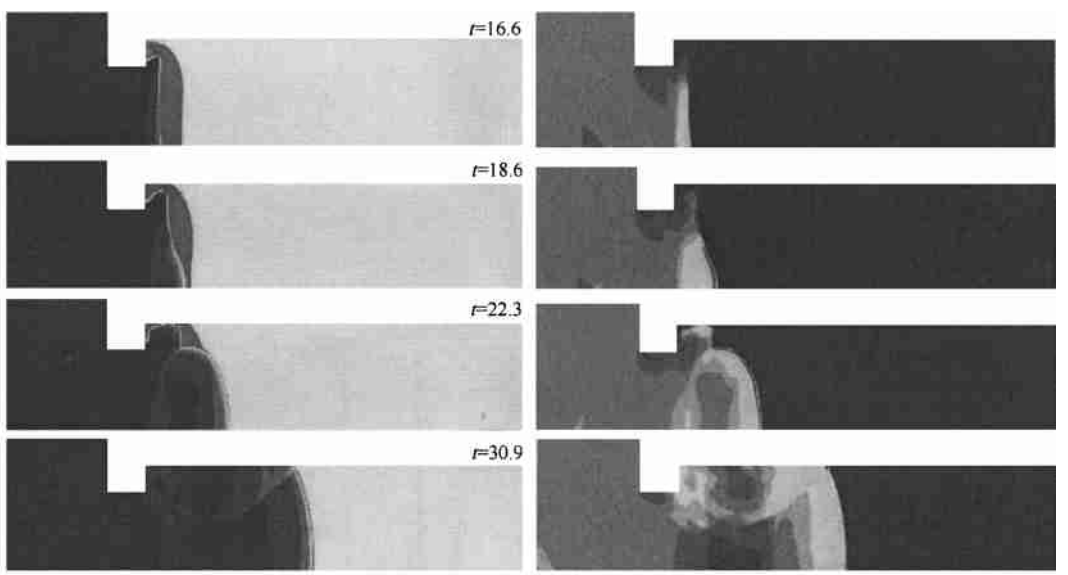


图 4 不同时刻的 $H_2$ (左) 和 OH(右) 等密度分布(时间单位:μs)

Fig. 4 Density contours of species $H_2$ and OH(time unit:μs)

© 1994-2008 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved. http://www.cnki.net

在 $t = 30.9\ \mu s$ 时刻,波速约为1 768 m·s$^{-1}$(见图 5). 当弧形爆轰波到达上壁面以后发生反射,马赫干进一步把在壁面附近弯曲的爆轰波阵面推平. 在整个过程中,链的增长反应绝对占优,而竞争反应 ⑤处于劣势,与活性基 OH 相比,不活泼的 $HO_2$ 生成量非常低,而且其分布也只局限在非常窄的反应阵面内,见图 6.

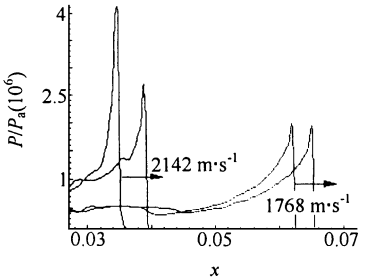


图 5　不同时刻轴对称线上的压力分布

Fig. 5　Pressure along the axis of symmetry

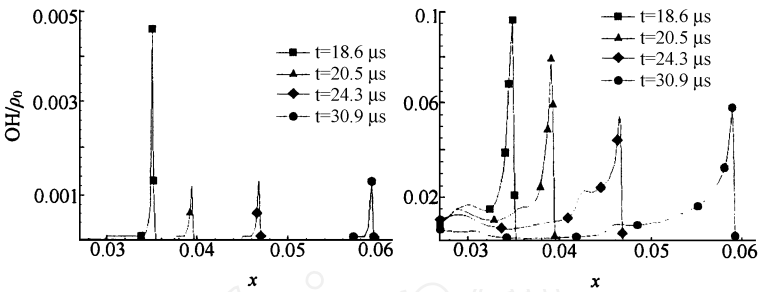


图 6　不同时刻的 OH 和 $HO_2$ 无量纲密度分布

Fig. 6　Density contours of OH and $HO_2$

比照文[4]中的直接起爆准则,这种条件下的预燃起爆机制称为超临界直接起爆机制. 在这种机制下,在预燃产物与未反应气体的间断面上发生直接起始爆轰反应,建立了 SWACER 过程,在较短的空间范围内迅速形成爆轰波.

### 4.2　爆轰气体 $2H_2 + O_2 + 5N_2$

对于混合气体 2) $2H_2 + O_2 + 5N_2$,其射流起爆过程如图 7 所示. 因为加入了更多的惰性气体 $N_2$,它的起爆难度较算例 1 要大. 图 7 表示在 $t = 22.6$ 时刻,高温预燃产物经过过渡管向爆轰管内发展并发生前导激波的绕射,前导激波压缩了爆轰管内的未反应气体. 但和算例 1 不同的是,在接触间断面上并没有强烈的链起始反应发生. 在稀疏波作用区之外,前导激波压缩区内的自由基 OH 的浓度保持与预燃产物中的 OH 相当,说明没有新的 OH 生成. 因此,利用高温射流直接起始爆轰的机制 ——超临界直接起爆机制 ——不复存在. 但是,在前导激波绕射并进一步触及爆轰管壁以后,其碰撞反射形成局部的高温区域,在这里未反应气体的压缩更为强烈,链引发反应较易进行,在这一区域内新形成了少量的 OH. 但是,如图 8 所示,这一区域内虽然存在丰富的 H 自由基,但同时生成了不活泼的 $HO_2$,说明竞争反应 ③和 ⑤强度相当,甚至后者略强,OH 消耗过大,

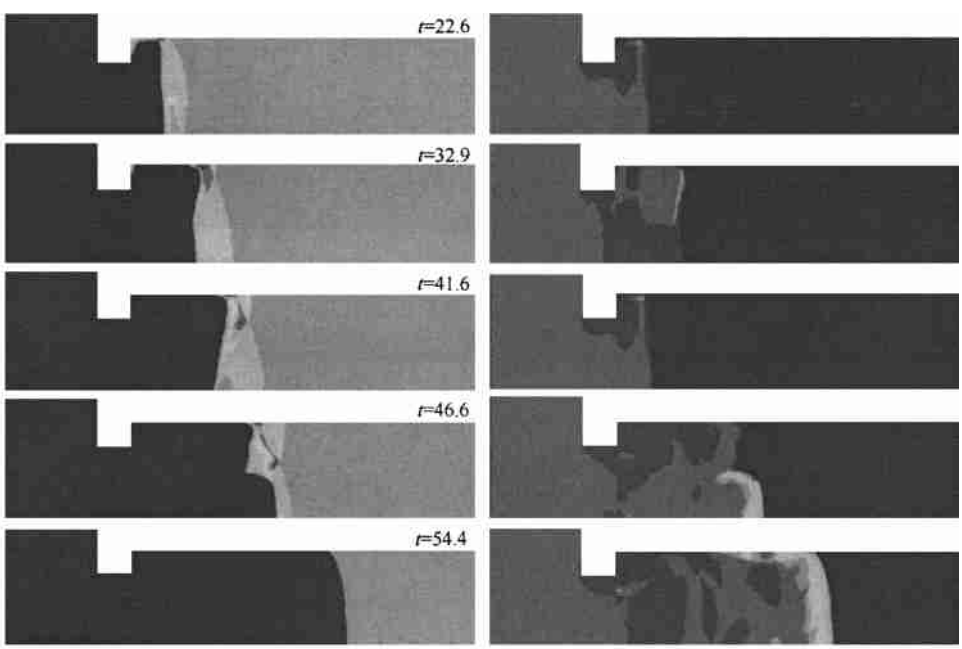


图 7　不同时刻的 $H_2$(左)和 OH(右)等密度分布(时间单位:μs)

Fig. 7　Density contours of $H_2$ and OH(time unit:μs)

© 1994-2008 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved.　http://www.cnki.net

链反应不能迅速增长. 随着反射波向对称轴传播,上述反应阵面沿接触间断面向中心径向扩展,由于反射波的衰退,此反应阵面的轴向发展减缓,使得反应区与轴向呈一角度倾斜,如图中 $t = 32.9$ 时刻的参数分布. 到 $t = 41.6$ 时刻反射波到达对称轴,并再一次碰撞反射,形成局部微爆,在这里,链引发反应 ①和增长反应 ②~④的条件已经达到,有丰富的 OH 生成,并消耗大量的 $H_2$. 此后,SWACER 机制逐渐形成,反应区与激波逐渐耦合,至 $t = 46.6$ 时刻,爆轰波阵面终于建立. 此时阵面因碰撞导致弯曲,其前行部分阵面之前的是经过前导激波一次压缩的反应气体,流场较均匀因而阵面呈平面形状. 而沿径向扩展的部分,由于波前是经过前导激波和反射激波两次压缩的未反应气体,同时含有部分自由基,这一部分阵面反应更为强烈,且呈弧形. 到 $t = 54.4$ 时刻爆轰波前行部分已经追上前导激波,同时沿径向发展的波阵面也与壁面碰撞反射,使得壁面附近的波阵面增强,落后的爆轰阵面逐渐追上前行激波阵面. 如图 9 所示,此时波速为1 938 m·s$^{-1}$,仍为过驱爆轰波,但是,比较图 5 和图 9 可知在整个过程中爆轰的过驱度没有算例 1 高.

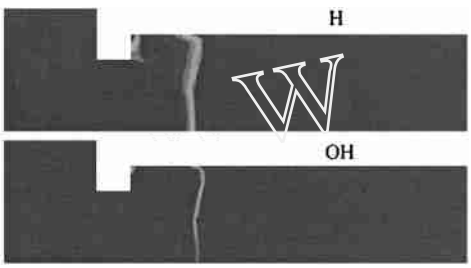


图 8 $t = 32.9$ μs H 和 $HO_2$ 等密度分布

Fig. 8 Density contours of H and $HO_2$ at $t = 32.9$ μs

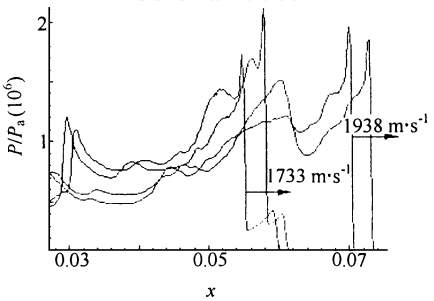


图 9 不同时刻轴对称线上的压力分布

Fig. 9 Pressure along the axis of symmetry

比照文[4]中直接起爆准则,这种条件下的预燃起爆机制称为临界直接起爆机制. 在这种机制下,经过前导激波在爆轰管壁和对称中心的两次碰撞反射之后,引发了爆轰反应,局部地建立了 SWACER 过程,在较长的空间范围内形成爆轰波. 临界直接起爆机制不仅受反应物构成的影响,PDE 燃烧室各部分的几何尺寸也会改变直接起爆过程.

### 4.3 爆轰气体 $2H_2 + O_2 + 7N_2$

对于组分为 $2H_2 + O_2 + 7N_2$ 的混合气体 3),过多的惰性气体 $N_2$ 使其起爆难度更大. 算例 3 的结果如图 10 所示. 在反应阵面上不活泼的 $HO_2$ 生成量一直与 H 相当,而 OH 浓度也保持与预燃产物中的 OH 相当,这说明链反应没有引发和进一步增长,因而没有形成爆轰波,其阵面也只是燃烧波而已. 虽然,前导激波经过两次碰撞反射之后,在对称轴附近形成了较强的反应阵面,但这里的反应不足以提供链引发与增长的条件,竞争反应 ⑤相对占优,生成了 $HO_2$,而且反应释能也被三体粒子带走. 在图 11 中给出了其压力波形,其峰值压力在衰减,阵面速度为 959 m·s$^{-1}$,在计算区域内已经没有起爆的可能. 参照文[4]中直接起爆准则,该过程称为亚临界起爆机制.

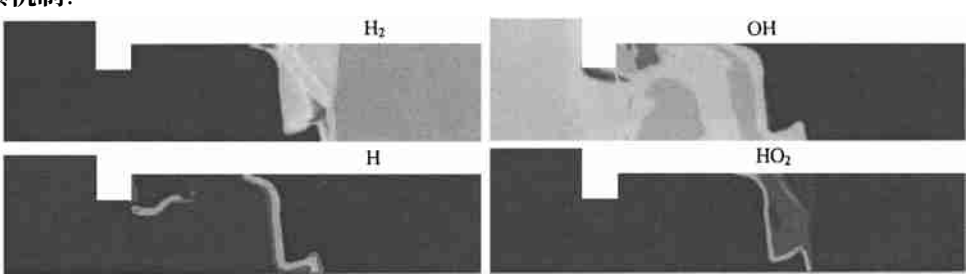


图 10 $t = 69.2$ 时刻 $H_2$,OH,H 和 $HO_2$ 等密度分布

Fig. 10 Density contours of $H_2$, OH, H and $HO_2$ at $t = 69.2$ μs

© 1994-2008 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved. http://www.cnki.net

### 4.4　几何尺寸的影响

对于同一种爆轰气体混合物,改变几何尺寸,也会改变其直接起爆过程. 本节针对算例 1 的气体混合物 1) $2H_2 + O_2 + 4N_2$,把过渡管的直径 $D2$ 由 30 mm 减小到 8 mm,得到起爆过程如图 12 所示. 在这种尺寸条件下,过渡管出口处的稀疏波的作用相对增强,由 $t = 19.9\ \mu s$ 时刻图可以看出,虽然部分 $H_2$ 被消耗,但是在间断面上竞争反应 ⑤相对占优,链增长反应受到抑制,并没有更多的 OH 自由基新生成,超临界起爆机制不复存在. 即使在 $t = 53.7\ \mu s$ 时刻,前导激波从爆轰管壁面反射回来,也没有在接触间断面上进一步引发链式反应,临界起爆机制也没有建立.

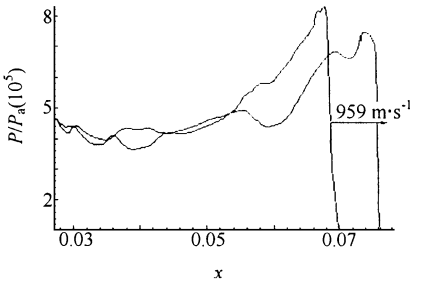


图 11　不同时刻轴对称线上的压力分布

Fig. 11　Pressure along the axis of symmetry

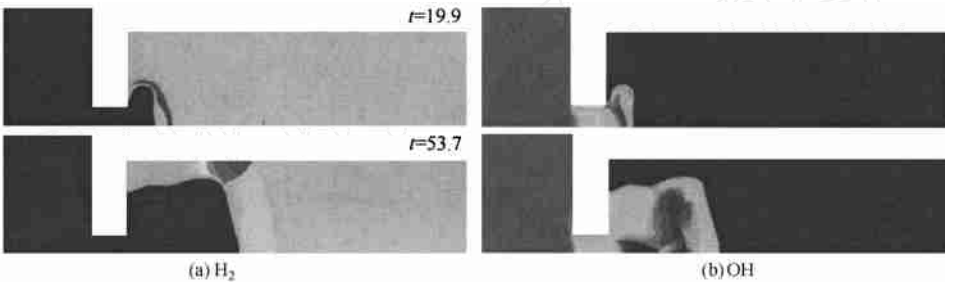


图 12　不同时刻的 $H_2$ 和 OH 等密度分布(时间单位:μs)

Fig. 12　Density contours of $H_2$ and OH(time unit:μs)

## 5　结论

本文应用数值模拟方法并从氢氧链式反应出发,探讨了 PDE 热射流起爆过程的反应动力学的物理机理,分析了氢氧爆轰直接起爆的 SWACER(能量释放而形成激波或压缩波的相干放大)机制的建立条件. 计算结果表明存在三种起爆机制:即超临界、临界和亚临界机制. 而 PDE 的几何尺度也在不同程度上影响这些起爆机制. 对于 PDE 研究来说,要求在爆轰管内迅速建立爆轰,因此需要超临界直接起爆. 而热射流起爆过程的研究对液体燃料 PDE 研究将是至关重要的.

### [参　考　文　献]

[1] Hoffmann N. Reaction propulsion by intermittent detonative combustion[A]. In: Ministry of Supply[M]. Volkenrode Translation, 1940.

[2] Lee John H S, Moen I O. The mechanism of transition from deflagration to detonation in vapor cloud explosions[A]. Prog Energy Combust Sci, 1980, **6**: 359 - 389.

[3] Lee John H S. Dynamic parameters of gaseous detonation[J]. Ann Rev Fluid Mech, 1984, **16**: 311 - 336.

[4] Lee John H S. Detonation waves in gaseous explosives[A]. In: Handbook of Shock Waves, Volume **3**: 309 - 416, Academic Press, 2001.

[5] 王超. 脉冲爆轰发动机中波得动力学过程分析[D]. 博士论文,中国科学院力学研究所,2003.

[6] Helman D, Shreeve R P, Eidelman S. Detonation pulse engine[R]. AIAA Paper 86-1683, 1986.

[7] 张欣玉,俞鸿儒,赵伟,李仲发. 氢氧爆轰直接起始实验研究[J],流体力学测量与控制,1996, **10**(2): 63 - 68.

[8] 赵伟. 利用氢氧爆轰产生高焓实验气流装置的性能研究[D][博士论文]. 中国科学院力学研究所,1999.

[9] Jiang Z, Takayama K, Chen Y S. Dispersion conditions for non-oscillatory shock capturing schemes and its applications[J]. Comp Fluid Dynamics Journal, 1995, **4**: 137 - 150.

[10] Jiang Z. On dispersion-controlled principles for non-oscillatory shock-capturing schemes[J]. ACTA MECHANICA SINICA, 2004, **20**(1): 1 - 15.

[11] Hu Zong-min, Mu Qian-hui, ZHANG De-liang, JIANG Zong-lin. Numerical simulation of gaseous detonation wave propagation through

© 1994-2008 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved.　http://www.cnki.net

bend with a detailed chemical reaction mode[J]. Chinese J Comput Phys, 2004, **21**(5): 408 - 414.
[12] 肖衍繁, 李文斌. 物理化学[M]. 天津: 天津大学出版社, 1997.

# Numerical Analyses of Direct Detonation Initiation in PDEs with a Pre-combustion Jet

MU Qian-hui, HU Zong-min, ZHAO Wei, ZHANG De-liang, JIANG Zong-lin
(*LHD, Institute of Mechanics, Beijing* 100080, *China*)

**Abstract**: Direct onset detonation initiated by high temperature jets from a pre-combustion tube is investigated numerically. A dispersion-controlled dissipative scheme is adopted to solve Euler equations with axis-symmetric flows implemented with detailed chemical reaction kinetics of the hydrogen-oxygen mixture. For validation and verification purpose, computational results are compared with experimental results. Three regimes of direct detonation initiation, referred to as supercritical, critical and subcritical ones, are demonstrated with numerical analyses from a viewpoint of chain reactions. The regimes are affected by the PDEs geometric configuration. It is recognized that the SWACER mechanism plays an important role in the state transit of chemically reacting flows in which the gradient of chemical radicals presents properly.

**Key words**: PDE; jet initiation; direct detonation initiation; detonation; numerical simulation

**Received date**: 2005 - 01 - 10; **Revised date**: 2005 - 07 - 01

© 1994-2008 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved. http://www.cnki.net