论文

快速压缩机中激波反射起爆过程数值模拟

向守智, 齐运亮, 王志*, 王建昕

清华大学汽车工程系, 汽车安全与节能国家重点实验室, 北京 100084

* E-mail: wangzhi@tsinghua.edu.cn

收稿日期: 2016-08-01; 接受日期: 2016-10-08; 网络出版日期: 2016-12-02

国家自然科学基金(批准号: 91541206)资助项目

摘要 对在快速压缩机上使用高速摄影观察到一种由激波反射引起的超级爆震起爆机理进行了数值模拟研究. 高速摄影获得的图像显示起爆发生在燃烧室近壁面处. 通过建立与试验结果对应的物理模型, 使用 CFD 软件数值模拟了激波发展过程, 研究了激波与燃烧室壁面的交互作用, 解析了激波反射引发爆震燃烧的过程. 结果表明, 激波在圆形燃烧室传播过程中会在近壁面区域发生马赫反射, 三波点滑移线与壁面之间形成高温区, 高温区中热点自燃发生局部热爆炸形成的激波与反应面耦合最终发展为爆轰.

关键词 爆震, 起爆, 激波, 壁面反射, 马赫反射

1 引言

随着世界能源问题与环境问题日益突出, 各个国家对发动机的燃油消耗率与尾气排放提出了更高的要求. 为了达到节能减排的目标, 目前国际上汽油机普遍采用增压小排量技术. 但是随着增压比的不断提高, 发动机在低速大负荷工况下易发生“超级爆震”^[1~3]. 超级爆震发生时, 缸内出现极高压力并伴随着剧烈的压力震荡, 能够瞬间破坏发动机. 由于超级爆震的难以控制, 严重制约了汽油机进一步提高功率密度和降低油耗. 国内外研究表明, 超级爆震由早燃引起, 在特定条件下, 早燃会演变为超级爆震. 清华大学王志等人^[4]研究了早燃与超级爆震的关系, 指出超级爆震由早燃引发, 但早燃不一定发生超级爆震. 因此杜绝早燃能够有效抑制超级爆震.

目前国际上针对发动机早燃源的研究很多^[5~8]. 而对于发动机中早燃如何演变为超级爆震的过程研究较少. 本课题组通过在快速压缩机中进行高速摄影方法观察到异辛烷-空气混合气燃烧机爆震过程, 发现了超级爆震中存在爆轰^[9]. 2002 年起利兹大学的 Bradley 等人^[10]采用详细反应机理进行一维数值模拟研究发现随着热点区域温度梯度的提高, 热点区域会产生热爆炸、快速自燃性爆燃、发展中的爆轰、慢速自燃性爆燃、层流燃烧火焰. 在此基础上, Bradley 提出了 ε (压力波在热点内的传播时间与热点的激发时间之比) 和 ζ (压力波面传播速度与反应波面传播速度之比) 两个无量纲参数, 通过一维直接数值模拟得到不同燃烧模式分布图, 将发动机中发生的超级爆震认为是“发展中的爆轰”^[10,11]. 2015 年北京大学的 Yu 和 Chen^[12]采用一维数值模拟研究了密闭燃烧室内初始温度压

引用格式: 向守智, 齐运亮, 王志, 等. 快速压缩机中激波反射起爆过程数值模拟. 中国科学: 技术科学, 2016, 46: 1287–1295
Xiang S Z, Qi Y L, Wang Z, et al. Numerical simulation of detonation initiation induced by shock wave reflection in a rapid compression machine (in Chinese). Sci Sin Tech, 2016, 46: 1287–1295, doi: 10.1360/N092016-00016

力以及燃烧室长度对火焰传播过程中对末端混合气的影响, 研究发现燃烧室内温度压力越高, 燃烧室长度越长越容易发生末端混合气自燃或者爆轰。

本文是基于快速压缩机试验结果进行二维数值模拟, 研究激波位置与激波与化学反应及燃烧室壁面的交互作用, 进一步解析超级爆震的爆轰起爆机理。

2 爆轰起爆过程的试验解析

快速压缩机试验平台的详细介绍见参考文献[9]。试验中使用的燃料为燃空当量比为 1 的均匀预混异辛烷-空气混合气, 快速压缩机的压缩比为 9.8; 压缩终点燃烧室空间呈薄圆饼形。压缩终点温度和压力分别为 641 K 和 2.0 MPa。图 1 为试验中通过高速摄影得到的图像结果以及对应的压力曲线。试验中在燃烧室中心点火, 火焰传播压缩末端混合气导致在燃烧室的边缘处出现了自燃区(图 1(a)), 由于局部自燃定容放热产生激波。激波在 B 时刻交汇后继续向燃烧室空间发展。

由于燃烧室中心为已燃区, 音速较高, 激波进入后演变为压缩波而不可视, 但在周围未燃区传播的激波锋面可以清楚辨别(图 1(c)~(e))。当激波传播到燃烧室右侧时(图 1(e))引发强烈自燃并形成爆轰, 爆轰波速约为 1800 m/s, 接近 Chapman-Jouguet(C-J)爆轰速度。起爆时刻燃烧室内压力约为 6.3 MPa, 通过气体状态方程计算得到未燃混合气温度约为 863 K。

图 2 为爆轰起爆试验解析示意图。可以将其整个过程分为 3 个阶段分析, 分别为末端局部自燃产生激波阶段、激波经壁面区域传播阶段和壁面起爆阶段。

图 1 (网络版彩图)试验中通过高速摄影得到图像结果以及对应的缸压曲线((a)~(e)为增强 5 倍后得到)

由燃烧室中心点火所产生并传播的火焰面不断压缩末端混合气, 使其温度压力不断提高, 使其末端热点产生局部快速放热产生激波(图 2(a)). 相比于激波的传播速度 900 m/s 左右, 火焰面的传播速度非常小, 只有 10 m/s 左右。在激波传播过程中可以近似将火焰面视为静止。当激波传播到燃烧室右侧时激波在壁面发生反射形成高温区(图 2(b)), 为低温放热反应提供条件。随着放热反应的进行, 壁面处发生局部热爆炸形成爆轰, 即完成起爆(图 2(c)). 随后爆轰波以接近 Chapman-Jouguet 爆轰速度的速度沿壁面向起爆点两侧仍有未燃混合气的区域高速传播, 并形成强烈压力振荡(如图 1 中压力曲线), 在很短的时间内燃烧过程完成。

3 起爆过程的数值模拟

3.1 物理模型

考虑到燃烧室形状与计算成本, 模拟中建立二维模型, 计算从末端混合气中出现自燃时刻开始。如图 3 所示。为了模拟局部自燃, 在二维燃烧室模型中分别设置自燃区和未燃区, 忽略火花点火产生的中心已燃区, 以排除与起爆无关的区域, 聚焦末端混合气中的起爆过程。未燃区的温度和压力分别为 890 K 和 6.3 MPa, 未燃区温度由起爆时刻的试验数据调整得到。计算中未燃区温度 890 K 比理论计算值 863 K 略高, 主要原因如下: (1) 理论计算温度是由缸压参数通过气体状态方程计算得到, 燃烧过程中缸内混合气的绝热指数不断变化, 所以计算得到的温度参数会出现误差; (2) 试验中缸内流场存在湍流脉动, 未燃区局部混合气温度会高于 863 K; (3) 在数值模拟中温度设为 890 K 时, 模拟结果与试验结果较为吻合。因此在数值模拟中未燃区温度选择了 890 K。已燃区的温度和压力分别为 2500 K 和 20 MPa, 已燃区的热力学状态为未燃区混合气定容放热得到。未燃区内为当量比异辛烷空气混合气; 已燃区组分为完全燃烧产物。燃烧室壁面选择无滑移的绝热边界条件。为了便于检测混合气燃烧过程, 在计算域中布置了 3 个监测点如图 3 所示。

3.2 数值方法

爆震燃烧是一个具有强间断的火焰与激波的相

图 2 (网络版彩图)试验结果解析

(a) 末端局部自燃产生激波; (b) 激波经壁面区域传播; (c) 壁面起爆

图 3 爆轰模拟物理模型

相互作用的高度非线性问题, 需要高精度数值计算, 来解析湍流-激波-化学反应相互作用. 考虑到发动机燃烧系统边界, 需要能够分辨近壁流动结构、分辨可燃混气的化学反应特征(即能够准确模拟其着火延迟和火焰传播特性)、分辨爆震波结构和各种强度的传播的膨胀波和压缩波. 因此, 须采用精细网格、微小时间步长的耦合化学反应动力学的计算流体动力学数值模拟.

模拟计算在 CONVERGE 软件平台下进行. 因激波具有高压梯度特点, 数值模拟采用 PISO^[13]的计算格式. 空间离散格式采用二阶迎风格式. 为了较精细描述湍流对流场的影响, 湍流模型选用大涡模型, 亚网格模型选用 Dynamic Structure 模型^[14].

为了加速计算并捕捉激波, 采用自适应网格技术与自适应时间步长. 在温度梯度和速度梯度大的区域对网格进行加密, 在激波锋面处的网格尺度为

25 μm . 动态时间步长范围为 $10^{-9} \sim 10^{-7}$ s. 图 4 为计算过程中激波区域自适应网格生成, 图 5 为计算过程中网格数量变化. 计算中所使用的化学反应机理为 22 步反应的异辛烷化学动力学机理^[15].

图 4 (网络版彩图)激波区域的自适应网格生成

图 5 计算过程中总网格数量变化

4 计算结果与讨论

4.1 激波反射过程

表 1 为激波传播过程中温度、压力分布. 从表中可以看出激波在圆形燃烧室传播过程中激波扫过的区域温度压力都显著升高. 由于激波在壁面的反射现象, 近壁区域的温度压力大幅上升, 最高温度能够达到 1200 K 以上, 为起爆点的触发提供条件.

图 6 为入射激波壁面反射过程, 0~30 μs 时间内, 入射激波 I 在圆形壁面上不断反射, 在壁面附近出现三波结构, R 为反射激波, H 为马赫杆, L 为三波点的滑移线. 随着入射激波与壁面夹角的不断减小, 三波点向壁面运动, 马赫反射转变为反转马赫反射, 马赫杆长度不断减小. 最后, 三波点贴于壁面, 成为过渡规则反射, 如 35 μs 时刻所示. 之后, 过渡规则反射转变为规则反射, 得到新的反射激波 F, 而新的反射激波 F 和原反射激波作用, 形成新的马赫波 W. 马赫反射导致在三波点后方, 滑移线与壁面之间形成高温区^[16].

表 1 自然激波传播过程温度、压力分布

时间	温度 (K)	压力 (MPa)
	<div><div></div><div>1240</div><div>1155</div><div>1070</div><div>985</div><div>900</div></div>	<div><div></div><div>25</div><div>20</div><div>15</div><div>10</div><div>5.0</div></div>
20 μs
30 μs
35 μs
40 μs

图 6 入射激波壁面反射过程

4.2 起爆过程分析

表 2 为起爆区域温度、压力和速度分布. 由于计算域的对称性, 为了更好地描述起爆过程, 表 2 中截取了对称域左下方 1/4 区域进行分析. 从表中可以看出, 测点 1 所在区域经过激波反射后压力和温度大幅上升达到(25 MPa, 1200 K). 随着温度的继续上升, 在 40.5 μs 测点 1 所在区域发生快速的高温放热反应即局部热爆炸, 测点 1 右下游出现微弱的激波. 当测点 1 区域发生热爆炸后, 激波与火焰面迅速耦合形成爆轰波, 从 41 μs 开始稳定爆轰波从测点 2 传播到测点 3. 从速度场可以看到, 局部微爆的形成流场速度

表 2 起爆区域温度、压力和速度分布

时间	温度(K)	压力(MPa)	流场速度(m/s)
39.5 μs
40.5 μs
41.0 μs
42.5 μs
44.5 μs

显著提高, 最高达到 1300 m/s.

图 7 为 46.5 和 48.5 μs 时刻测点所在位置示意图 (水平黑线为测点位置), 从图中可以看出爆轰波传播方向与当地流动速度方向一致, 且爆轰波后的流动速度远高于波前的值, 这也表明爆轰形成后, 燃烧模式由亚音速转为超音速燃烧. 图 8 给出了 46.5 和 48.5 μs 时刻, 压力与流场速度沿爆轰波法向方向的变化. 通过图 8 可以得到两不同时刻爆轰波所在位置, 进而可以计算出爆轰波面在燃烧室中的移动速度约为 2035 m/s. 考虑到爆轰波前当地流场速度爆轰波前当地流场速度 223 m/s, 因此可以得到爆轰波的实际传播速度为 1812 m/s, 与该条件下 C-J 爆轰速度 1870 m/s 基本一致.

图 9 为壁面上测点 M1, M2 和 M3 区域温度、压

力随时间的变化规律. 测点 1 所在区域在经过激波压缩后, 压力温度都出现阶跃式的上升. 40 μs 左右测点 1 所在区域进入迅速的高温放热阶段, 压力出现小幅度上升且得到压力极值, 该区域完成起爆过程. 爆轰波沿壁面从 M2 向 M3 传播, 其峰值压力从 51.6 MPa 变为 92 MPa, 这表明从 M2 到 M3 的过程中, 爆轰波还处于发展阶段. 由于入射激波在 M1 和 M2 区域发生了马赫反射, 所以该区域温度压力曲线在起爆前都只出现一次阶跃, 而入射激波在 M3 区域发生了规则反射, 因此该区域温度压力曲线在起爆前出现了 2 次阶跃.

在激波反射的近壁处设置一系列测点, 来观察近壁面处压力、温度及各组分在不同时刻的变化. 测点布置如图 10 所示, 测点所在位置覆盖了起爆区域与爆轰波传播区域.

图 7 测点所在位置压力和速度分布图

(a) 46.5 μs ; (b) 48.5 μs . 箭头代表流场方向

图 8 46.5 和 48.5 μs 时刻爆轰波法向方向上的压力与流场分布图

图9 壁上测点 M1, M2 和 M3 区域温度、压力随时间的变化规律

图10 近壁区域测点布置示意图

图11 为近壁区域不同时刻测点处温度、压力曲线, 横坐标为曲线上该测点到起始测点距离 x . 从压力曲线可以看出激波在壁面反射过程中, 其强度不断增强. 20 μs 时刻近壁区域最高压力为 22 MPa, 此时激波所在位置距离最左端 40 mm, 35 μs 时刻近壁区域最高压力为 26 MPa, 且激波所在位置为 $x=21$ mm. 激波强度的增强也伴随着激波后温度的小幅度升高, 从 20 μs 时刻的 1195 K 上升到 35 μs 时刻的 1226 K. 随着激波压缩后温度的上升, 异辛烷混合气的低温放热反应速率加快, 在 37 μs 时刻后可以明显看出激波上游区域 $x=16$ mm 处温度迅速上升. 图12

图11 近壁区域不同时刻测点处温度、压力曲线

(a) 温度曲线; (b) 压力曲线

图 12 (网络版彩图)近壁区域不同时刻测点处不同组分的质量分数曲线

(a) CH_2O ; (b) HO_2 ; (c) OH

为近壁区域不同时刻测点处 CH_2O , HO_2 和 OH 的质量分数曲线, 也可以看出在 $37\ \mu\text{s}$ 时刻 HO_2 浓度在 $x=16\ \text{mm}$ 处达到峰值. 在 $37\sim 39.5\ \mu\text{s}$ 之间虽然反应速率不断加速, 但仍处于低温放热阶段, 激波后压力曲线未出现极值. 在低温放热阶段末期 $39.5\ \mu\text{s}$ 时刻, CH_2O 浓度在 $x=16\sim 20\ \text{mm}$ 区域达到峰值, 为高温放热阶段提供条件, 在 $40.0\ \mu\text{s}$ 之后随着高温放热反应的进行 $x=18\ \text{mm}$ 处的 CH_2O 迅速降低. 从 $40.0\ \mu\text{s}$ 开始 $x=18\ \text{mm}$ 处开始积累 OH , 说明异辛烷混合气燃烧开始进入高温放热阶段, 此时 $x=18\ \text{mm}$ 处温度达到 $2200\ \text{K}$, 该区域内的低温反应产物 HO_2 开始降低. 同时随着放热速率的大幅上升, $40.5\ \mu\text{s}$ 时刻的压力曲线在激波上游 $x=20\ \text{mm}$ 处出现压力极值, 说明此处发生热爆炸且形成激波. $40.5\sim 44.5\ \mu\text{s}$ 激波与异辛烷混合气的

高温反应面逐步耦合, 最终发展形成稳定的爆轰波. 在 $44.5\ \mu\text{s}$ 时刻爆轰波面上最高压力达到 $100\ \text{MPa}$. 计算得到的压力峰值远大于试验值的原因有以下两点: 1) 爆轰波传播速度极快, 缸压传感器响应速度较慢未能完全捕捉到如此剧烈的压力峰值; 2) 当爆轰波形成时, 燃烧室内压力分布极不均匀, 缸压传感器的安装位置对缸压曲线的影响较大.

图 13 为起爆过程中不同时刻近壁区域各参数对比, 图中横坐标为该测点到起始测点距离. 从图中可以看出 $40.0\ \mu\text{s}$ 时刻 $x=18\ \text{mm}$ 处 CH_2O 和 HO_2 的质量分数都有所减小, 而 OH 开始生成, 说明该区域已经从低温放热阶段发展到高温放热阶段. 但是由于放热速率还不足以产生热爆炸, $x=18\ \text{mm}$ 处未出现压力极值. 随着反应的加速, 在 $40.5\ \mu\text{s}$ 时刻, 可以看到

图 13 (网络版彩图)起爆过程中不同时刻近壁区域各参数对比

$x=20.6$ mm 附近的压力曲线出现极值, 说明该处发生热爆炸产生激波. 同时该激波位置与 OH 和 CH_2O 质量分数梯度最大处一致, 说明该激波面与反应面耦合, 同时激波不断加强, 在之后逐步发展为稳定的爆轰波.

5 结论

通过试验研究结合数值模拟, 研究了快速压缩机试验中发现的激波壁面反射起爆过程. 解析了激波位置与激波与化学反应及燃烧室壁面的交互作用,

得到以下结论:

- (1) 激波在圆形燃烧室传播过程中入射激波在近壁区域可以发生马赫反射, 三波点滑移线与壁面之间形成高温区, 温度达到 1200 K 以上;
- (2) 激波反射形成的高温区低温放热阶段积累大量的 HO_2 , CH_2O 等自由基和活性成分, 为高温阶段迅速放热(即局部热爆炸)提供条件;
- (3) 当激波反射形成的高温区进入高温放热反应阶段时, 发生局部热爆炸形成激波;
- (4) 激波与反应面耦合, 激波不断加强最终发展为爆轰.

参考文献

- 1 张志福, 舒歌群, 梁兴雨. 增压直喷汽油机超级爆震现象与初步试验. 内燃机学报, 2011, 29: 422-426
- 2 徐雅齐. 增压直喷汽油机超级爆震试验研究. 硕士学位论文. 北京: 清华大学, 2013
- 3 王志, 龙岩, 王建昕. 增压汽油机中早燃和超级爆震的研究进展. 汽车安全与节能学报, 2015, 1: 17-29
- 4 Wang Z, Liu H, Song T, et al. Relationship between super-knock and pre-ignition. Int J Eng Res, 2015, 16: 166-180
- 5 Kalghatgi G T, Bradley D. Pre-ignition and 'super-knock' in turbo-charged spark-ignition engines. Int J Eng Res, 2012, 13: 399-414
- 6 Palaveev S, Magar M, Kubach H, et al. Premature flame initiation in a turbocharged DISI engine: Numerical and experimental investigations. SAE Int J Engines, 2013, 6: 54-66
- 7 Lauer T, Heiss M, Bobicic N, et al. A comprehensive simulation approach to irregular combustion. In: SAE 2014 World Congress & Exhibition. SAE International, 2014. 2014-01-1214
- 8 Moriyoshi Y, Yamada T, Tsunoda D, et al. Numerical simulation to understand the cause and sequence of LSPI phenomena and suggestion of CaO mechanism in highly boosted SI Combustion in Low Speed Range. In: SAE 2014 World Congress & Exhibition. SAE International, 2015
- 9 Qi Y L, Wang Z, Wang J X, et al. Effects of thermodynamic conditions on the end gas combustion mode associated with engine knock. Combust Flame, 2015, 162: 4119-4128
- 10 Gu X J, Emerson D, Bradley D. Modes of reaction front propagation from hot spots. Combust Flame, 2003, 133: 63-74
- 11 Bates L, Bradley D, Paczko G, et al. Engine hot spots: Modes of auto-ignition and reaction propagation. Combust Flame, 2016, 166: 80-85

- 12 Yu H, Chen Z. End-gas autoignition and detonation development in a closed chamber. *Combust Flame*, 2015, 162: 4102–4111
- 13 Issa R I. Solution of the implicitly discretized fluid flow equations by operator-splitting. *J Comput Phys*, 1986, 62: 40–65
- 14 Quan S P, Dai M Z, Pomraning E, et al. Numerical simulations of supersonic diesel spray injection and the induced shock waves. *SAE Int J Engines*, 2014, 7: 1054–1060
- 15 Dong Z L, Shuai S J, Wang Z. CFD modeling of mixture preparation and soot formation in a downsized gasoline direct injection engine. In: *SAE 2016 World Congress and Exhibition*. SAE International, 2016
- 16 曹春丽, 徐胜利, 刘二伟. 双波长 NO-PLIF 法测量激波马赫反射温度场的实验研究. *中国科学技术大学学报*, 2013, 43: 510–516

Numerical simulation of detonation initiation induced by shock wave reflection in a rapid compression machine

XIANG ShouZhi, QI YunLiang, WANG Zhi & WANG JianXin

State Key Laboratory of Automotive Safety and Energy, Tsinghua University, Beijing 100084, China

This paper presents numerical study of detonation initiation induced by shock wave reflection which is photoed by high speed camera in a rapid compression machine. It is found that detonation initiates near the wall of combustion chamber. In the numerical study, the process of shock wave propagation, the interaction between shock wave and wall, and the detonation initiation by shock wave reflection are analysed with a CFD software. The numerical simulation demonstrates that mach reflection occurs near the wall during the propagation of the shock wave in the combustion chamber. The temperature of the region between the slip plane and the wall becomes higher. The auto-ignition of a hot spot in the high temperature region forms shock wave which is coupled with the reaction surface, resulting in the detonation finally.

knock, detonation initiation, shock wave, wall reflection, Mach reflection

doi: 10.1360/N092016-00016