

# 元素势法在爆震波特征参数计算中的应用\*

范 玮, 严传俊

(西北工业大学 航空动力与热力工程系, 陕西 西安 710072)

**摘 要:** 应用元素势法, 计算了脉冲爆震发动机 (PDE) 常用的 6 种爆震燃料产生爆震波的波后压力、波后温度及爆震波速等特征参数, 得出了特征参数随余气系数变化的合理规律, 以及 PDE 应选择密度大的燃料的结论。并与实验结果和国外相应的计算结果进行了对比, 说明了该法在 PDE 研究中的有效性和可靠性。

**关键词:** 脉动式喷气发动机; 元素势法; 爆轰波; 特征参数计算

中图分类号: V231.22 文献标识码: A 文章编号: 1001-4055 (2001) 03-0222-03

## Element potential approach and its application to calculation of characteristic parameters of detonation wave

FAN Wei, YAN Chuan-jun

(Dept. of Aeroengine Engineering, Northwestern Polytechnical Univ., Xi'an 710072, China)

**Abstract:** Using element potential approach, the characteristic parameters such as post-detonation pressure, post-detonation temperature and detonation wave velocity of pulse detonation engines with 6 conventional detonable fuels were calculated and reasonable variations of these parameters with excess air coefficient were obtained. Moreover, the conclusion was drawn that the higher fuel density was, the better the performance of PDE. Compared with our experimental results and those of corresponding calculation abroad, it is shown that the element potential approach is highly efficient and reliable in PDE research.

**Key words:** Pulsejet engine; Element potential approach; Detonation wave; Calculation of characteristic parameters

### 1 引 言

准确、高效地进行脉冲爆震发动机(PDE)的特征参数计算,为脉冲爆震发动机的试验提供理论指导,是脉冲爆震发动机研制中的一个重要方面。其特征参数计算主要包括 Chapmann Jouguet (C-J) 定常爆震波波后压力、温度及爆震波速度的计算。爆震是预混气燃烧中火焰传播的另一种形式,是燃烧波以超声速在可爆性预混气中传播时产生的燃烧现象。目前关于燃烧平衡组分的计算常用平衡常数法和最小吉布斯自由能法,但在许多反应系统中,产物组分的数目( $N$ )大大超过了元素的组成数( $M$ ),使得所求解的平衡方程数目巨大( $N-M$ ),非常复杂。爆震燃烧产生的是高温、高压燃气,内中反应复杂,组分繁多,正属这种反应系统。元素势法<sup>[1]</sup>是求解反应混气平衡状

态的另一种方法,计算中只需求解与元素组成数  $M$  相等个数的元素势,计算简便、高效,很适合 PDE 的性能计算,目前国内尚无这方面的报道。本文在脉冲爆震波发动机初步研究<sup>[2~4]</sup>的基础上,采用元素势法计算了 6 种燃料产生的爆震波特征参数。

### 2 元素势法简介

对  $T, p$  一定的反应系统,其平衡状态由最小吉布斯(Gibbs)自由能给出

$$G = \sum n_j g_j$$

其中  $g_j$  是单位摩尔组分  $A_j$  的自由能,  $n_j$  是系统中组分  $A_j$  的总摩尔数,并且满足原子数守恒的约束条件,原子数守恒可写成

$$\sum N_{ij} n_j = a_i$$

\* 收稿日期: 2000-10-30; 修订日期: 2000-12-14。基金项目: 国家自然科学基金 (59776001) 和航空科学基金 (00C53019) 资助项目。获奖情况: 1997 年度航空工业总公司科技进步二等奖 (971074)。

作者简介: 范 玮 (1966—), 女, 博士生, 副教授。研究领域为脉冲爆震发动机的应用基础研究。

式中  $N_{ij}$  为组分  $A_j$  中  $i$  原子的数目,  $a_i$  为该系统  $i$  原子的总数。一般

$$G = G(T, p, n_j)$$

故

$$dG_{T,p} = \sum g_j dn_j$$

约束条件为

$$\sum N_{ij} dn_j = da_i = 0$$

由于存在原子数守恒的约束条件,  $n_j$  并不都是自由变量, 根据上式, 可用所有其他的  $n_j$  来表示受限的  $n_j$ , 然后可用拉格朗日乘法, 将其前一式中受限的  $n_j$  消去。设第  $i$  个约束的乘子为  $\lambda$ , 那么在平衡态时

$$\sum (g_j - \sum N_{ij} \lambda) dn_j = 0$$

又平衡态时, 每个  $dn_j$  的系数必须消失, 因此对每种组分  $A_j$  有

$$g_j = \sum N_{ij} \lambda$$

式中  $\lambda$  就称为  $i$  原子的元素势。

对理想气体有

$$g_j(T, p_j) = g_j(T, p) + RT \ln x_j$$

因而上式可改写成

$$g_j(T, p) + RT \ln x_j = \sum N_{ij} \lambda$$

即

$$\ln x_j = -g_j(T, p)/RT + \sum N_{ij} (\lambda/RT)$$

所以, 为了求得组分  $A_j$  的平衡浓度  $x_j$ , 只需知道与其元素组成数  $M$  相等数目的  $\lambda$  即可, 而无需求解  $(N-M)$  个有关平衡常数  $K_p$  的方程式。

在上式中,  $g_j$  的值可从热化学表中查得, 只要定下  $\lambda$  值, 便可求得  $x_j$ 。在很多情况下, 先假定主要产物的摩尔分数, 由此估计出相关的元素势, 进而据此求得微量组分的摩尔分数, 便可得所有产物组分的精确组成。例如: 对  $H_2, O_2$  反应系统, 先假定产物只有  $H_2O$  和  $O_2$ , 而无  $H_2$ , 可由反应方程式求得  $X_{H_2O}$  和  $X_{O_2}$ 。然后, 根据上面最后一式以及  $g_{H_2O}, g_{O_2}$  的值可求得  $\lambda_H, \lambda_O$ , 再用  $\lambda_H$  及  $g_{H_2}$  代入上式, 可求得  $X_{H_2}$ , 回代反应方程式, 最后便可得所有产物组分的精确组成。

总之, 元素势法从每种产物的组成元素着手, 着眼于产物及其组成元素的微系统, 列出相应等式, 而不需冗长的迭代, 因而计算简便、高效。

### 3 计算结果及分析

应用上述方法, 计算了爆震常用的 6 种燃料与空

气的混气产生的 C-J 爆震波的波后压力、温度及爆震波速度等特性参数, 计算时考虑了可能的 14 种产物, 如  $C(S), CO, CO_2, H, O, HO, H_2O, N, O_2, N_2, NO_2, NO, H_2, CH_4$  等。其中, JP-10 的分子式为  $C_{10}H_{16}$ , 是一种航天上常用的液体燃料,  $C_8H_{16}$  代表常用的汽油, 这两种燃料分别被用在美国海军研究生院(NPS) 和本课题的PDE上。计算结果如图1~ 3所示。

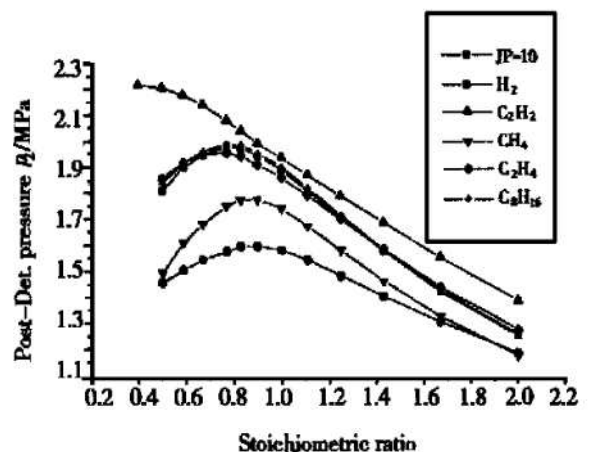


Fig. 1 Post Detonation pressure vs.  $a$

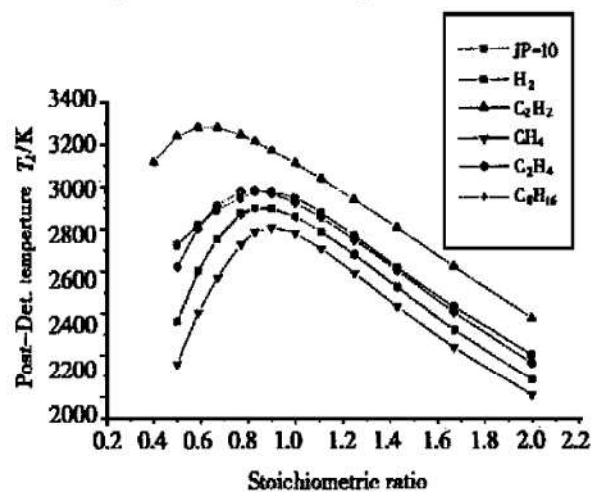


Fig. 2 Post-detonation temperature vs.  $a$

由图 1~ 3 可见, 各参数的最大值都在余气系数为 0.8~ 0.9 (稍富油) 处取得, 过贫或过富均不能获得最佳爆震波特性; 唯一例外的是乙炔混气, 其爆震参数最大值明显高于其它燃料, 且在非常富油状态下取得, 这是由其独特的强爆炸性和宽广的可爆范围决定的。出于安全方面的考虑, 不选它作为 PDE 燃料。因为爆震波后压力与 PDE 的推力水平直接相关, 由图 1 可见, 波后压力与燃料的密度密切相关, 密度越大, 则产生爆震波的波后压力也越大, 这意味着 PDE 要尽量选择高密度的燃料; JP-10 与汽

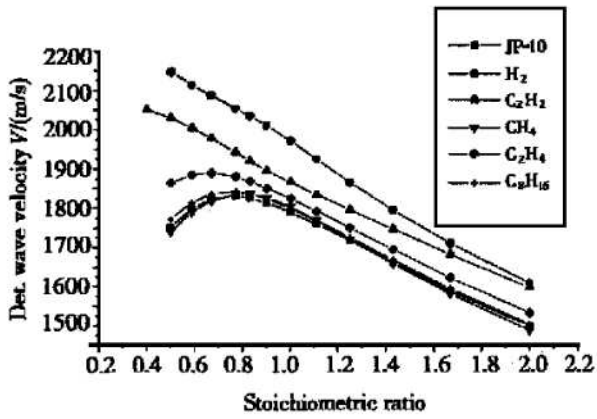


Fig. 3 Velocity of detonation wave vs.  $\alpha$

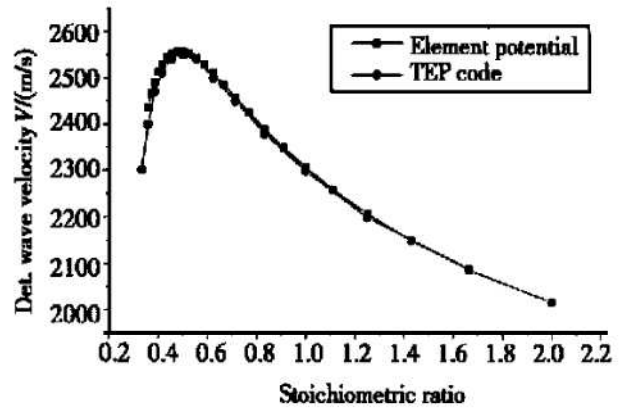


Fig. 5 Comparison between two approaches with JP10/O<sub>2</sub>

油的各项特性取值非常接近,而且综合比较起来,是较理想的PDE燃料,说明国内外的PDE选择的燃料是合适的。

#### 4 对比验证

将汽油/空气的计算结果与研究试验的实测值<sup>[5]</sup>(如图4)进行了对比。在进口条件为标准状态,余气系数为1时,实测的峰值压力平均为1.758 MPa,与计算值1.902 7 MPa很接近。并且,将JP-10/O<sub>2</sub>计算结果与NPS采用TEP商用程序的计算结果进行了对比<sup>[6]</sup>(如图5),结果也非常接近,说明了本文的计算方法与计算结果的可靠性。计算值比实验值和TEP程序的结果稍大的原因是本法未考虑两相流的影响,但其计算精度满足工程需要。

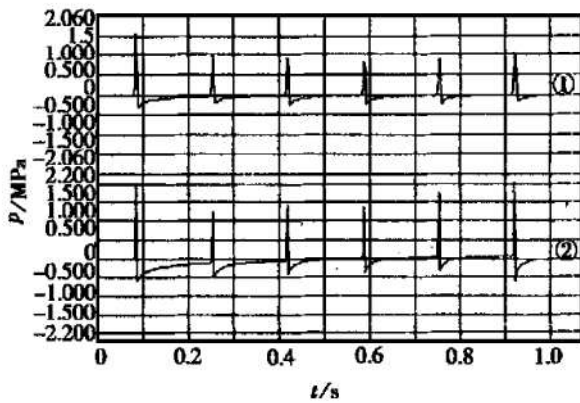


Fig. 4 Experimental result for post-detonation pressure with C<sub>8</sub>H<sub>16</sub>/air

Near head ①Near tail

#### 5 结论

(1) 元素势法可用来计算脉冲爆震发动机的特征参数,计算简便、高效、可靠。

(2) 由计算出的特征参数趋势可见,各参数的最大值都在余气系数为0.8~0.9(稍富油)处取得,过贫或过富均不能获得最佳爆震波特性;爆震波后压力与燃料的密度密切相关,密度越大,则产生爆震波的波后压力也越大,PDE的推力也越大,这意味着要尽量选择高密度的燃料;JP-10与汽油的各项特性取值非常接近,是较理想的PDE燃料。

(3) 应用元素势法的计算结果与实验实测值和国外相应计算结果等吻合很好,精度满足工程要求。

#### 参考文献:

- [1] Reginald Mitchell. Combustion fundamentals [M]. Stanford Course Notes on Combustion, 1996, 12.
- [2] 何立明,严传俊,范玮.脉冲爆震发动机的推力计算方法[J].推进技术,1997,18(5).
- [3] 何立明,严传俊,范玮.爆震波在爆震燃烧室内传播过程的数值模拟[J].推进技术,1998,19(6).
- [4] 何立明,严传俊,范玮.脉冲爆震波发动机的可爆范围和内流燃气温度与壁温的实验方法[J].推进技术,1999,20(3).
- [5] 黄希桥.气液两相脉冲爆震发动机的试验研究[D].西安:西北工业大学,2000,4.
- [6] Bronhvi C M. Netzer D. Detonation studies of JP-10 with oxygen and air for pulse detonation engine development [R], AIAA paper 99-2635.