

甲烷超声速燃烧过程的数值模拟*

刘宏, 杜新, 沈月阳, 雷麦芳, 王发民

(中国科学院力学研究所, 北京 100080)

摘要: 提出了一种 CH_4/O_2 在超声速气流中燃烧的 6 方程化学反应模型, 并且用在超声速高温空气中横向喷射的二维流场进行了数值模拟验证。特别模拟了不同来流条件和壁面条件对燃烧效率的影响及 CH_4 和空气中的氧气混合燃烧的过程。数值方法采用二阶精度的 Harten-Yee 隐式 TVD 格式, 计算结果表明 6 方程反应模型能较好地反映 CH_4/O_2 的燃烧过程。

关键词: 超音速冲压喷气发动机; 超音速燃烧; 甲烷; 数值仿真

中图分类号: V235.213 **文献标识码:** A **文章编号:** 1001-4055 (2002) 01-0063-05

Numerical simulation on supersonic combustion of methane

LIU Hong, DU Xin, SHEN Yue-yang, LEI Mai-fang, WANG Fa-min

(Inst. of Mechanics, Academia Sinica, Beijing, 100080, China)

Abstract: A flow field with a sonic methane jet injected transversely into a supersonic hot air flow was simulated. The model of six elementary reactions of the methane-oxygen system was verified by solving N-S equations using the Harten-Yee implicit TVD scheme. The effects of different boundary conditions and inlet conditions were studied and a contrast was made with the model of single-reaction of the methane-oxygen system.

Key words: Supersonic combustion ramjet engine; Supersonic combustion; Methane; Numerical simulation

1 引言

研究吸热型碳氢燃料在超声速气流中燃烧的机理是当前研究的热门课题^[1]。液态碳氢燃料燃烧时的化学反应和热物理过程很复杂,例如, CH_4 和 O_2 的完全化学反应包括 20 多个组元、200 多个化学反应。通过直接求解雷诺方程及补充完全化学反应的模型,已超出了目前的计算能力,因此需采用简化的动力学模型。找到一种既能基本反映燃烧过程的化学动力学特征,又能为现有的计算能力所接受的化学反应模型是解决问题的关键。文献[2]在完全反应模型的基础上,建立了甲烷超声速燃烧 4 组元二个基元反应的简化化学动力学模型;文献[3]采用了乙烯燃料 5 组元两步化学反应模型,近似模拟高温富油燃气超燃试验状态。本文采用 CH_4 燃料作为研究对象,把物理问题简化为二维平板中, CH_4 燃料通过窄缝横向喷射进超声速气流的简化模型,试图反映出碳氢燃料在超

声速燃烧中的化学反应特征。

2 热化学反应模型和数值方法

2.1 控制方程

守恒形式的雷诺平均 N-S 方程在笛卡尔直角坐标系下,可写成如下形式:

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial F}{\partial x} + \frac{\partial G}{\partial y} = \frac{\partial F_v}{\partial x} + \frac{\partial G_v}{\partial y} + S$$

式中 $U = [\rho \quad u \quad v \quad e]^T$,

$$F = [\rho U \quad u^2 + p \quad uv \quad (e + p)u]^T,$$

$$G = [\rho v \quad uv \quad v^2 + p \quad uv \quad (e + p)v]^T,$$

$$F_v = [D_i \frac{\partial Y_i}{\partial x} \quad \tau_{xx} \quad \tau_{xy} \quad u_{xx} + v_{xy} + q_x]^T,$$

$$G_v = [D_i \frac{\partial Y_i}{\partial y} \quad \tau_{xy} \quad \tau_{yy} \quad u_{xy} + v_{yy} + q_y]^T,$$

$$S = [\dot{\omega} \quad 0 \quad 0 \quad 0]^T$$

式中 u, v 为速度; ρ 为组元密度; e, p 为单位体积

* 收稿日期: 2001-03-12; 修订日期: 2001-06-18。基金项目: 国家自然科学基金资助项目 (19802019)。

作者简介: 刘宏 (1966—), 男, 硕士, 助理研究员, 研究领域为计算流体力学。

混合气体的密度、能量、压力； Y_i 为组元的质量分数； D_i 为扩散系数； $\tau_{xx}, \tau_{xy}, \tau_{yy}$ 为剪切应力； q_x, q_y 为热通量； S 为化学反应源项。计算中采用 Baldwin-Lomax 代数涡粘性模型，因为该模型比较简单，对某些分离流动也适用^[4]。输运系数由输运理论给出。

2.2 化学模型

通过对甲烷燃烧的化学反应机理的研究，根据化学反应的活化能、反应物分子碰撞几率以及其基本反应速率，在完全化学反应模型的基础上，提出 CH₄ 燃烧的 6 反应方程模型。假设 N₂ 不参与反应，则共有 9 个组元：O, O₂, CH₃, CH₄, OH, CHO, CH₂O, CO, CO₂。6 个基元反应为：

- (1) O₂ + M = O + O + M；
- (2) CH₄ + O = CH₃ + OH；
- (3) CH₃ + O₂ = CH₂O + OH；
- (4) CH₂O + O = CHO + OH；
- (5) CHO + O = CO + OH；
- (6) CO + O + M = CO₂ + M。

化学反应方程式的一般形式为^[5]

$$\sum_{j=1}^{N_e} \nu_{ij} X_j = \sum_{j=1}^{N_e} \nu_{ij} X_j \quad (i = 1, 2, \dots, N_c)$$

本文采用有限速率化学动力学模型，组元生成率

$$\dot{C}_i = \sum_j (\nu_{ij} - \nu_{ij}) \left(k_{f,j} \prod_{k=1}^{N_c} [C_k]^{\nu_{kj}} - k_{b,j} \prod_{k=1}^{N_c} [C_k]^{\nu_{kj}} \right),$$

$k_{f,j}, k_{b,j}$ 分别是正、逆向速率常数。

2.3 计算方法

取喷口宽度和来流参数为特征量 L, V, ρ, μ, c_p 分别为特征长度、速度、密度、定压比热容，令 $Re = V L / \mu$ ，无量纲化后雷诺平均 N-S 方程可表示为

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial F}{\partial x} + \frac{\partial G}{\partial y} = \frac{1}{Re} \left(\frac{\partial F_v}{\partial x} + \frac{\partial G_v}{\partial y} \right) + S$$

为解决热化学反应源项带来的刚性问题，本文在源项处理时，采用了点隐式方法^[6]

$$\begin{aligned} S^{n+1} &= S^n + \left(\frac{\partial S}{\partial U} \right)^n \left(\frac{\partial U}{\partial t} \right)^n \Delta t + O(\Delta t^2) \\ &= S^n + \left(\frac{\partial S}{\partial U} \right)^n (U^{n+1} - U^n) + O(\Delta t^2). \end{aligned}$$

数值格式应用 Harten-Yee 的二阶隐式 TVD 格式

$$U_{i,j}^{n+1} + \left[\begin{aligned} &-\frac{\Delta t}{x} (\tau_{i+1/2,j}^{n+1} - \tau_{i-1/2,j}^{n+1}) + \\ &-\frac{\Delta t}{y} (\tau_{i,j+1/2}^{n+1} - \tau_{i,j-1/2}^{n+1}) - \Delta t S_{i,j}^{n+1} \end{aligned} \right] =$$

$$U_{i,j}^n - (1 - \theta) \left[\begin{aligned} &-\frac{\Delta t}{x} (\tau_{i+1/2,j}^n - \tau_{i-1/2,j}^n) + \\ &-\frac{\Delta t}{y} (\tau_{i,j+1/2}^n - \tau_{i,j-1/2}^n) - \Delta t S_{i,j}^n \end{aligned} \right] +$$

$$\frac{1}{Re} \left[\begin{aligned} &-\frac{\Delta t}{x} \tau_{xx} F^n + \frac{\Delta t}{y} (\tau_{yy} G^n) \end{aligned} \right].$$

对隐式部分进行线性化处理，令 $\theta = \Delta t / \Delta x = \Delta t /$

$$\left\{ \begin{aligned} &I + \left[\begin{aligned} &\left[\begin{aligned} &H_{i+1/2,j} - H_{i-1/2,j} \end{aligned} \right]^n + \\ &\left[\begin{aligned} &H_{i,j+1/2} - H_{i,j-1/2} \end{aligned} \right]^n \end{aligned} \right] E = \\ &- \Delta t D^n \\ &- \left[\begin{aligned} &\tau_{xx} \tau_{yy} \end{aligned} \right] \left[\begin{aligned} &F^n + G^n \end{aligned} \right] - \Delta t S^n. \end{aligned} \right.$$

式中

$$E = (U^{n+1} - U^n), D = \frac{\partial S}{\partial U},$$

$$H_{i+1/2} = \frac{1}{2} \left(A_{i+1} - \tau_{i+1/2} \right), A_{i+1} = \left(\frac{\partial F}{\partial U} \right)_{i+1},$$

$$\tau_{i+1/2} = \max \left(a_{i+1/2}^i \right) I (E_{i+1} - E_i),$$

$$\tau_{i+1/2} = \frac{1}{2} \left(F_i + F_{i+1} + R_{i+1/2} - \tau_{i+1/2} \right),$$

I 为单位矩阵， $a_{i+1/2}^i$ 和 $R_{i+1/2}$ 是 $A_{i+1}(U)$ 的特征值和对应的特征向量， τ 是数值粘性系数， τ_{xx} 是二阶修正^[7]， τ_{xx} 是 x 方向上的中心差分算子， τ_{yy} 是 y 方向上的中心差分算子。

为提高喷嘴附近的流场分辨率，采用了如下变换：

$$(y_l) = Y_{\max} - \frac{\ln \left(\frac{y - 1 - y_l}{y - 1 - y_l} \right)}{\ln \left(\frac{y + 1}{y - 1} \right) / Y_{\max}},$$

$$x_0 = \frac{1}{2} \ln \left[\frac{1 + (e^x - 1) X_0 / x_{\max}}{1 + (e^{-x} - 1) X_0 / x_{\max}} \right];$$

$$(x) = x_{\max} x_0 + \frac{x_{\max}}{x} \sinh^{-1} \left[\left(\frac{x}{X_0} - 1 \right) \sinh(x, x_0) \right],$$

$$y_l = \frac{y - y_B}{y_A - y_B}.$$

式中 x, y 表示物理平面的坐标， (x, y) 表示计算平面的坐标， α, β 是控制网格疏密的系数。计算区域和计算网格如图 1 所示，网格为 80 × 60。

在湍流计算中，为了求得壁面的摩擦系数 τ_w 和正确反映壁面对流场的影响，必须使离开壁面的第一个网格点的 $Y^+ < 5$ ，且在 $Y^+ < 30$ 的范围内有足够多的网格点。这在现有条件下很难做到。为此采用了壁面对数率修正，对 $\tau_w = \mu_w |u'|$ ，采用了如下迭代：

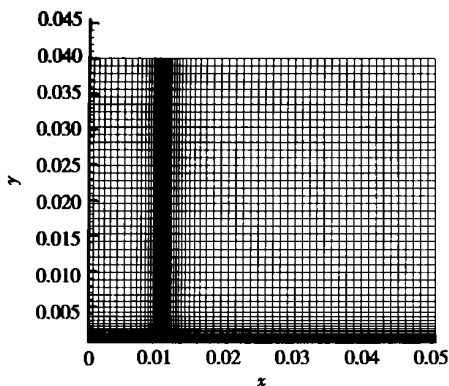


Fig. 1 Numerical grid

$$\frac{u_1}{u^*} = \frac{1}{k} \ln \left[E \frac{y_1}{y^*} \right], \text{ 即}$$

$$\frac{u_1}{\left(\frac{w}{w^*} \right)^{1/2}} = \frac{1}{k} \ln \left[\frac{\left(\frac{w}{w^*} \right)^{1/2}}{\mu_w} \right].$$

2.4 计算模型的验证

为了验证 6 方程模型在描述热化学反应过程中的正确性,模拟了甲烷平行喷射超燃流场,并与文献 [3] 中给出的实验数据进行了比较。计算区域参照文献 [3],计算条件如表 1,计算网格节点数为 127 × 73。图 2 给出了壁面压力分布的计算结果与试验值的比较,壁面压力计算值与实验结果基本吻合。计算获得的波系结构与文献 [3, 8] 中给出的波系结构相吻合。

Table 1 Parameters at the entrance of combustion

Flow	p/MPa	T/K	Ma	Mass fraction				
				CH ₄	O ₂	CO ₂	H ₂ O	N ₂
Air	0.097 7	491.9	2.09		0.233 0		0.052 0	0.715 0
Gas	0.173 1	1 771.9	1.25	0.105 9	0.010 3	0.120 5	0.156 6	0.606 7

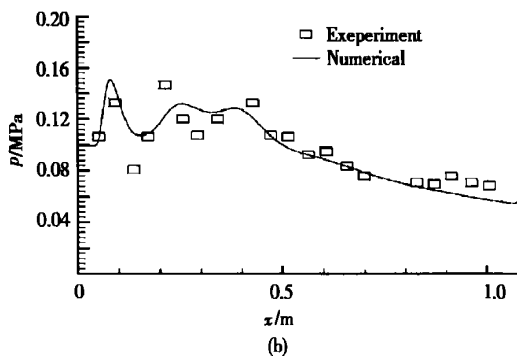
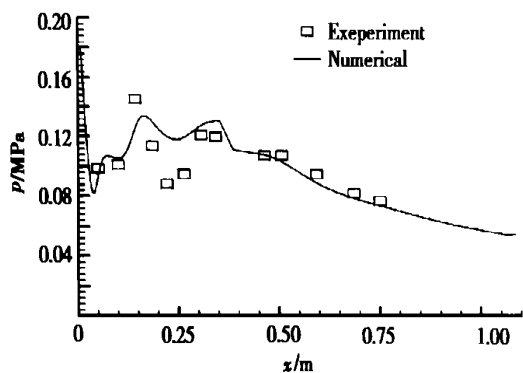


Fig. 2 Wall pressure comparison of calculation and experiment

(a) Upper wall (b) Low wall

3 结果分析

本文模拟的物理模型是在经过前机身和进气道压缩的高温高速空气中,在侧壁垂直喷射气态 CH₄。来流条件假定为:在边界层内速度分布按对数率给定,边界层外为均匀来流条件。壁面采用无滑移条件和等温(或绝热壁)条件。出口和上边界由内点外差得到。喷口条件为:窄缝宽度为 0.1 mm、马赫数为 1.0、压力为 0.506 MPa、温度为 250 K。

为了验证 6 方程模型在描述热化学反应过程中的改进效果,本文与描述 CH₄/O₂ 的总化学反应模型 (CH₄ + 2O₂ = CO₂ + 2H₂O) 进行了比较。计算结果表明总反应模型反映了化学反应的总效果,但由于没有考虑中间反应过程,与实际偏差较大。从图 3 与图 4 比较可以看到,总反应模型的高温区有前移趋势,且温度也要低一些。

图 4 是温度等值线图。上游回流区和弓形激波与马赫盘的交界处,流场温度较高,是化学反应较完全的区域。由于回流区的存在,创造了超声速燃气流自动点火的有利条件。在此处,空气通过激波,温度和压力增加,且混合气体停留时间较长,容易点火。

图 5 是 Ma = 1.8, T = 962 K, p = 0.101 MPa, 绝热壁条件下的压力等值线图。可以看出,甲烷垂直射入超声速气流,在出口处形成的马赫盘,受来流影响,向下游倾斜。由于喷嘴出口压力较高,引起喷嘴上游附面层分离,形成复合的超声速-亚声速回流区,且在回流区前缘产生斜激波。在射流背风面,气流迅速膨胀形成低压区,也出现气流分离和回流现象。

图 6、图 7 分别是组元 CH₄ 和 CO₂ 的摩尔分数图。可看到在下游回流区,温度低,几乎没有化学反应。

图8是与图4来流条件相同,等温壁条件下的温度图。与图4比较,可看到等温壁条件下的最高温度比绝热壁的情况降低了400 K,上游回流区也减小,说明壁面吸热使化学反应减弱。

图9和图10是 $Ma = 2.8, T = 962 \text{ K}, p = 0.101 \text{ MPa}$,绝热壁条件下的温度图和 CO_2 摩尔分数图。 CO_2 是放热反应的主要生成产物之一,与 Ma

$= 1.8$ 情况(图7)相比,其峰值有所下降,说明随飞行马赫数的提高(飞行马赫数大于7时),化学反应会进行得不完全。

图11和图12是 $Ma = 1.8, T = 1314 \text{ K}, p = 0.101 \text{ MPa}$,绝热壁条件下的温度图和 CO_2 摩尔分数图。与图4相比,可看到反应放热有所增强,静温的峰值后推到弓形激波和马赫盘之间的区域。

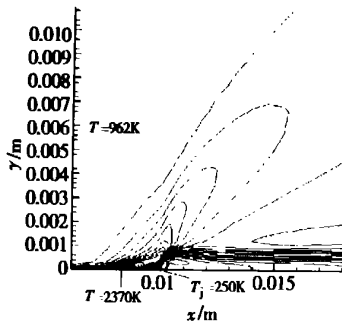


Fig. 3 Temperature of one-equation model (Adiabatic wall, $Ma = 1.8, T = 962 \text{ K}$)

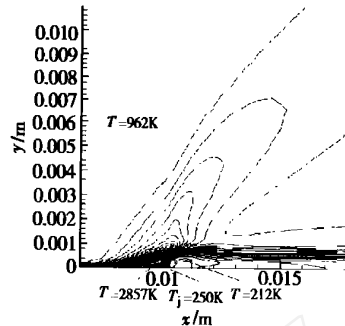


Fig. 4 Temperature of six-equations model (Adiabatic wall, $Ma = 1.8, T = 962 \text{ K}$)

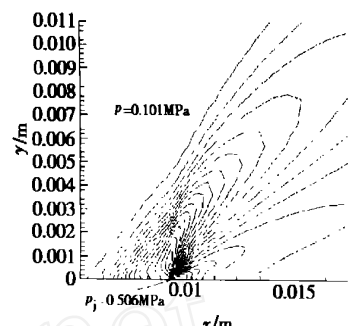


Fig. 5 Pressure of six-equations model (Adiabatic wall, $Ma = 1.8, T = 962 \text{ K}$)

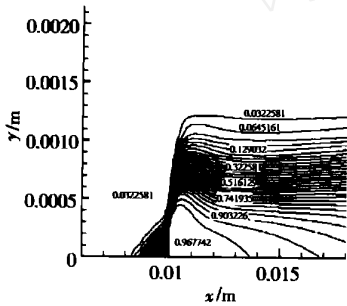


Fig. 6 Mole fraction of CH_4 (Adiabatic wall, $Ma = 1.8, T = 962 \text{ K}$)

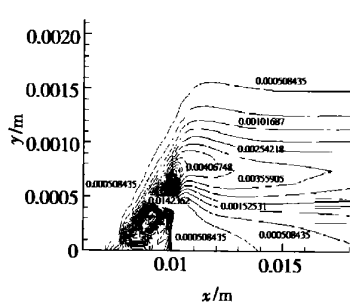


Fig. 7 Mole fraction of CO_2 (Adiabatic wall, $Ma = 1.8, T = 962 \text{ K}$)

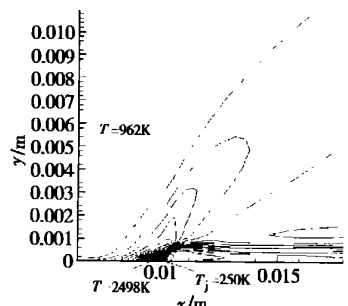


Fig. 8 Temperature (Isothermal wall, $Ma = 2.8, T = 962 \text{ K}$)

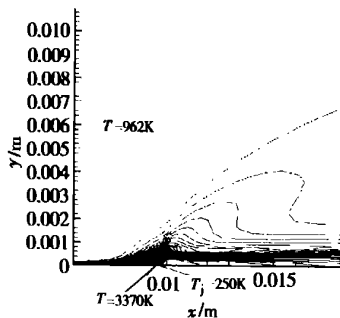


Fig. 9 Temperature (Adiabatic wall, $Ma = 2.8, T = 962 \text{ K}$)

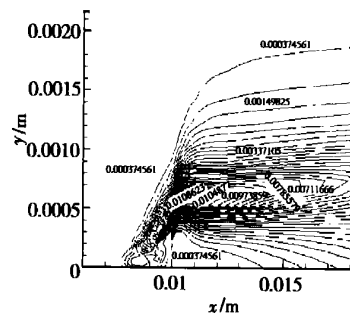


Fig. 10 Mole fraction of CO_2 (Adiabatic wall, $Ma = 2.8, T = 962 \text{ K}$)

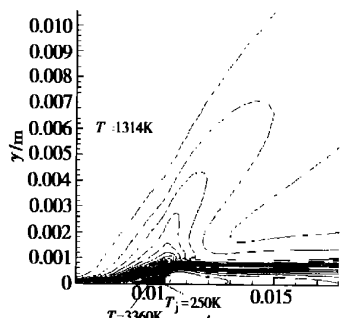


Fig. 11 Temperature (Adiabatic wall, $Ma = 1.8, T = 1314 \text{ K}$)

(下转第 83 页)

据的不断丰富与 NEPE 推进剂燃烧波结构模型的不完善,将有力促进对于 AP 与 HMX 间“连锁互动”机制的深入理解与探讨,并可扩展至推进剂的其它组分。

参考文献:

- [1] Palopoli S F, Brill T B. Thermal decomposition of energetic materials 52. On the foam zone and surface chemistry of rapidly decomposing HMX[J]. *Combustion and Flame*, 1991, 87:45 ~ 60.
- [2] Kim E S, et al. Thermal decomposition studies of energetic materials using confined rapid thermolysis/FTIR spectroscopy [J]. *Combustion and Flame*, 1997, 110:239 ~ 255.
- [3] Beckstead M W, et al. A comparison of solid monopropellant combustion and modeling[R]. *AIAA* 97-0586.
- [4] Tanaka M, Beckstead M W. A three - phase combustion model of ammonium perchlorate[R]. *AIAA* 96-2888.
- [5] Jing Q, et al. Influence of condensed phase mechanism on

HMX temperature sensitivity [R]. *AIAA* 98-3222.

- [6] 牛和林. 新型固体含能材料点火与燃烧特性研究[D]. 合肥:中国科技大学, 2001.
- [7] Karpowicz R J, Brill T B. The transformation of HMX: its thermal analysis and relationship to propellants[J]. *AIAA Journal*, 1982, 20(11):1586 ~ 1591.
- [8] Kimura J, Kubota N. Thermal decomposition process of HMX [J]. *Propellants, Explosives, Pyrotechnics*, 1980, 5:1 ~ 8.
- [9] Chambers C C, et al. Further studies of the classical dynamics of the unimolecular dissociation of RDX [J]. *J Phys Chem*, 1995, 99(43).
- [10] Kubota N. Energetics of HMX-based composite modified double-base propellant combustion[J]. *Journal of Propulsion and Power*, 1999, 15(6):759 ~ 762.

(编辑:朱立影)

(上接第 66 页)

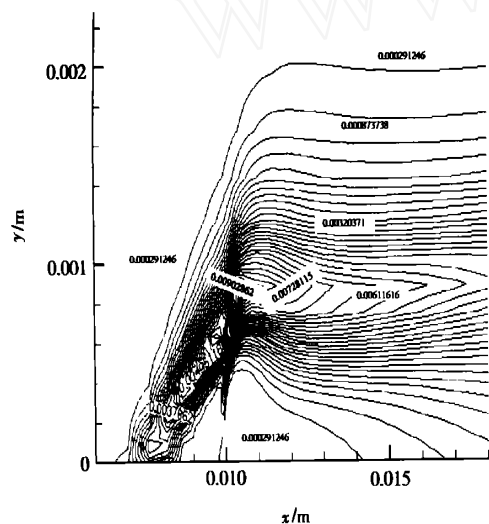


Fig. 12 Mole fraction of CO_2

(Adiabatic wall, $\text{Ma} = 1.8$, $T = 1314 \text{ K}$)

4 结论

本文采用差分格式,对二维平板中甲烷燃料通过窄缝横向喷射进入超声速空气主流的混合燃烧进行了数值模拟,比较了与总反应模型的差别及壁面条件和来流条件的影响。计算结果显示了有化学反应的流场特征,表明来流速度增加不利于化学反应进行,提高燃烧室温度可促进反应进行。从计算结果和分析看,6 方程模型更好地反映了流场特征,其结果是

合理的。下一步拟采用更为精确的简化化学反应模型进行模拟,以研究不同简化模型对结果的影响。

参考文献:

- [1] Tishkoff Julian M, Drummond J hilip, Edwards T, et al. Future direction of supersonic combustion research [R]. *AIAA* 97-1017.
- [2] 唐亚林,张德良,王琳琳,等. 碳氢燃料超声速燃烧的化学动力学研究(I) 甲烷超声速燃烧的简化化学动力学模型[J]. *推进技术*, 1999, 20(5).
- [3] 王春,司徒明,马继华,等. 高温富油燃气超声速燃烧数值模拟[J]. *推进技术*, 2000, 21(2).
- [4] Baldwin B S, Lomax H, Thin layer approximation and algebraic model for separated turbulent flows[R]. *AIAA* 78-0257, 1978.
- [5] Magnussen B F, Hjertager B H. On mathematical models of turbulent combustion with special emphasis on soot formation and combustion[C]. *In 16th International Symp. (Int'l) on Combustion, The Combustion Institute*, 1976.
- [6] 唐亚林. 碳氢燃料在超音速燃烧中的化学动力学研究[R]. 北京:中国科学院力学研究所, 1999, 4.
- [7] Yee H C, Warming R F. Implicit total variation diminishing schemes for steady-state calculations[J]. *Journal of Computational Physics* 57:327 ~ 360, 1985.
- [8] 司徒明,王子川,牛余涛,等. 高温富油燃气超燃实验研究[J]. *推进技术*, 1999, 20(6).

(编辑:盛汉泉)