1999 年 10 推 进 技 术 Oct. 1999
第 20 卷 第 5 期 JOURNAL OF PROPULSION TECHNOLOGY Vol. 20 No. 5

# 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*

唐亚林 张德良 王琳琳 袁生学 王发民

(中国科学院力学研究所, 北京, 100080)

**摘 要**: 采用雷诺平均N-S 方程对碳氢燃料甲烷 ($CH_4$) 在超声速流动中混合燃烧过程进行了数值研究, 提出了简化的甲烷燃烧的反应机理及反应动力学模型, 建立了Baldwin-Lomax 代数涡粘性湍流模型, 采用了高精度的TVD 隐式格式和化学源项隐式解法, 计算结果和氢气/空气超燃的计算结果进行了比较, 表明所采用的反应机理及计算模型合理, 算法可行, 就算例结果而言, 碳氢化合物作为一种超燃燃料有其独特的优势, 值得进一步深入研究。

**主题词**: 烃类燃料, 甲烷, 超音速燃烧, 数值仿真

**分类号**: V 511

# NUMERICAL SIMULATION FOR COMBUSTION OF METHANE FUEL IN SUPERSONIC FLOW

Tang Yalin Zhang Deliang Wang Linlin Yuan Shengxue Wang Famin

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

**Abstract**: The mixing and combustion of hydrocarbon (methane) in supersonic flow were investigated numerically by using Reynolds average equations. The turbulent model of Baldwin-Lomax algebraic eddy viscosity and the chemical models of implicit treatment of chemical source term were adopted. Numerical results were analysed and compared with one of hydrogen fuel. The results show that the chemical model established is reasonable and the numerical method is reliable. The hydrocarbon fuel is a prospective fuel in supersonic combustion flow.

**Subject terms**: Hydrocarbon fuel, Methane, Supersonic combustion, Numerical simulation

## 1 引 言

碳氢燃料是下一代超声速发动机的发展方向之一[1,2]。超声速发动机中燃料燃烧的化学反应是一个非常复杂的过程, 反应过程中会有许多中间产物如自由基、原子、离子产生, 化学反应是有限的控制反应速率的碰撞复合过程[3~5], 它与燃料燃烧的效率以及所产生的推力有密切关系。通过对本课题的研究, 既获得碳氢燃料在超燃中的化学动力学数据和流场数据, 为发动机的设计和燃料的选择提供依据, 又增加对碳氢化合物燃烧的化学反应机理的认识。目前, 国内外对这一领域中的化学动力学问题尚未进行足够系统深入的研究。

## 2 控制方程及物理模型

### 2.1 控制方程及其数值计算方法

* 收稿日期: 1998-09-16, 修回日期: 1999-05-26, 本课题为国家自然科学基金资助项目 (19802019)

© 1994-2007 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved. http://www.cnki.net

2.1.1 控制方程

采用雷诺平均全N-S 方程进行求解。计算中，靠近喷口的流场由二维带化学源项的雷诺平均全N-S 方程来模拟，总体连续方程由独立的组元守恒方程替代，假定没有由化学反应引起的动量和能量的改变，忽略各个组元间的相互作用力，即假定动量和总能方程中的源项为0。守恒形式的雷诺平均全N-S 控制方程为:

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

式中: U 为守恒变量向量, F, G 为对流项向量, $F_v$, $G_v$ 为粘性向量, S 为化学源项向量。

无化学反应流场计算中，全流场赋入口的初值，喷口外给喷口参数进行迭代计算，计算的过程反映了喷流和主流相互作用的全过程。化学反应流场计算中，取相应的无化学反应流场的收敛值作为化学反应流场的初始值，进行迭代计算，可大大节约收敛所需时间。

2.1.2 边界条件

进行无化学反应流场计算时，上游的入口边界条件中，边界层内给边界层条件，边界层外给自由流条件。假定主流在入口处已发展成湍流，边界层内的速度分布按 1/7 幂律分布:

$$u = u_\infty (y/\delta)^{1/7}, y < \delta \quad (\delta \text{ 为边界层厚度})$$

化学反应流场计算中，上游的入口边界条件由相应的无化学反应流场计算的收敛值给定。

2.1.3 差分格式和求解方法

对于 $(\xi, \eta)$ 坐标系中的流动控制方程采用带有一个参数 θ的差分格式

$$U_{i,j}^{n+1} + \theta\left\{\frac{\Delta t}{\Delta\xi}[\tilde{F}_{i+1/2,j}^{n+1} - \tilde{F}_{i-1/2,j}^{n+1}] + \frac{\Delta t}{\Delta\eta}(\tilde{G}_{i,j+1/2}^{n+1} - \tilde{G}_{i,j-1/2}^{n+1}) - \Delta t S_{i,j}^{n+1}\right\} =$$

$$U_{i,j}^{n} - (1-\theta)\left\{\frac{\Delta t}{\Delta\xi}(\tilde{F}_{i+1/2,j}^{n} - \tilde{F}_{i-1/2,j}^{n}) + \frac{\Delta t}{\Delta\eta}(\tilde{G}_{i,j+1/2}^{n} - \tilde{G}_{i,j-1/2}^{n}) - \Delta t S_{i,j}^{n}\right\} +$$

$$\frac{1}{Re}\left(\frac{\Delta t}{\Delta\xi}\delta^{\xi}\tilde{F}_v^n + \frac{1}{Re}\left(\frac{\Delta\eta}{\Delta\eta}\delta^{\xi}\tilde{G}_v^n\right)\right.$$

其中，$\delta^{\xi}$ 是 ξ方向的中心差分算子，$\delta^{\eta}$ 是 η方向的中心差分算子。

当 θ= 0 时此格式为显式，当 θ≠ 0 时，格式为隐式。由于 $CH_4$ 碳氢化合物在超声速流动中混合燃烧是一个涉及到具有化学反应的非平衡问题，由于反应速率非常快，根据计算稳定性的要求，时间步长必须非常小，在实际计算中是不可能的，因此格式需要用隐式，在计算中采用迎风 TVD 格式，取 θ= 1，此时该格式是时间向后欧拉隐式格式，它是无条件稳定。计算步长可以适当扩大。在计算中采用源项点隐方法处理化学反应源项刚性问题。此外，为了提高计算效率，在计算中对隐式算子进行对角化处理，并采用因式分解算法，使计算在不影响原有精度情况下避开三对角的直接求解，只需进行代数运算就能求解方程，大大缩短了计算时间。

**2.2 湍流模型**

在计算中，采用Baldwin-Lomax 代数粘性湍流模型来描述流动中的湍流效应，计算实践表明，Baldwin-Lomax 湍流模型能很好地模拟湍流效应。

随着气体分子运动论日益完善以及近年来实验技术的飞速发展，湍流模型中所需要的输运特性参数可以通过有关的理论计算得到。在计算中认为每个组元的湍流输运特性是相似的，总的输运系数可以表示为层流和湍流输运系数之和。

**2.3 化学动力学模型**

本项目所研究的对象是碳氢燃料，和氢氧燃料相比，燃烧的化学反应复杂，即使是 $CH_4$ 这

© 1994-2007 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved. http://www.cnki.net

种最简单的碳氢燃料其燃烧时完全的化学反应也达 124 个，涉及 24 种组元[6]。以现阶段的计算能力不可能把这些化学反应完全考虑，所以建立一个既适应于现阶段计算能力，又能反映燃料 $CH_4$ 燃烧的化学动力学特征的化学动力学模型是本项目中一个非常重要的工作。结合燃烧中各基元化学反应的活化能大小，碰撞几率的大小以及其反应速度的快慢，经过反复计算，在完全反应模型的基础上，建立了一个包括两个基元反应的化学动力学模型，该模型仅涉及 4 种组分：$CH_4$，$CH_3$，OH 和 $H_2O$，其中OH 来自于高温下含有污染物的空气。

## 3　计算实例及主要结果分析

### 3.1　典型算例

在数值模拟中计算了初始空气主流的马赫数为 1.81，静压为 0.101MPa，静温为 961 K，对应等熵变换驻点温度为 1 590 K，$CH_4$ 气体从 0.1mm 窄缝中平行喷射进空气主流，马赫数为 1.0，静压为 1.385MPa，静温为 242 K 的算例。计算分两步进行，第一步计算无化学反应的流场，以便让空气/甲烷充分混合，第二步点燃化学反应，计算得出甲烷在超声速主流中燃烧过程中流场成分，温度等效应。

无化学反应流场计算中，设化学源项为 0，选定 $CH_4$，OH，$N_2$ 三组元，考虑组元间扩散效应，带化学反应流场计算中，选 $CH_4$、OH、$H_2O$、$CH_3$ 和 $N_2$ 五组元进行计算绝热壁边界条件。部分计算结果见图 1～3。为了和 $H_2/O_2$ 体系比较，我们同时计算了 $H_2/O_2$ 混合物超燃流动流场，此时无化学反应流场计算中选定 $H_2$，$O_2$，$N_2$，带化学反应流场计算中选定 $H_2$，$O_2$，OH，$H_2O$，$N_2$ 五组元进行计算，计算结果见图 4 和图 5。图 2，3，5 中 $z$ 轴表示相对值。

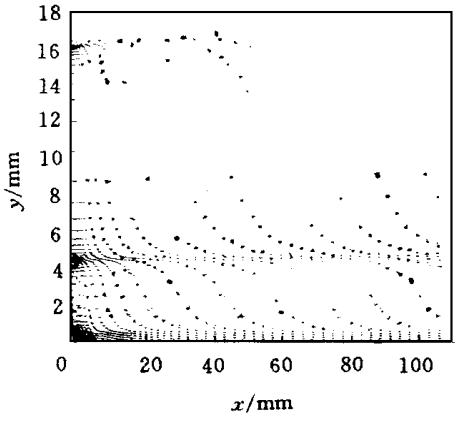


Fig.1　Calculated field of combustion of methane in supersonic flow

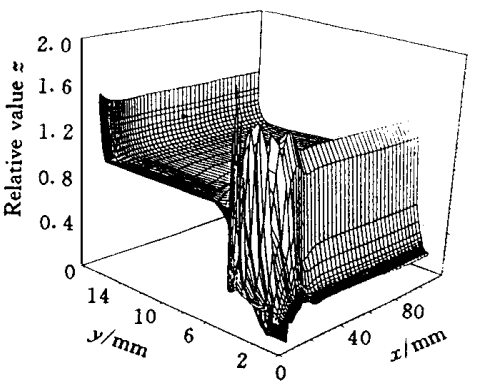


Fig.2　Calculated static temperature distributions of combustion of methane in supersonic flow

### 3.2　计算结果分析

(1) 图 1 表示了甲烷和空气的混合过程，从图中可以看出，由于空气主流马赫数 1.81 而甲烷的马赫数仅是 1.0，因此，空气主流在进入流场后，突然膨胀并向壁面靠近，在此过程中空气和甲烷进行了混合。流场中存在一个两种物质（甲烷/空气）的混合界面，在界面附近混合比较充分，离界面越远混合越差。在喷口的两个端点处，流场特别密集，表明甲烷在这两处组元浓度相对较高。另外图中明显显示出一个附面层，厚度约为全流场宽度的 5%，这一结

© 1994-2007 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved.　http://www.cnki.net

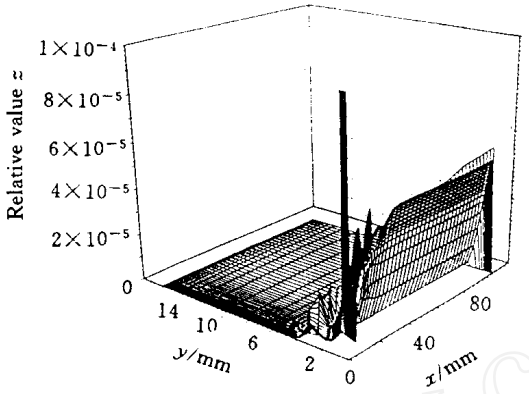


Fig. 3 Calculated methane distribution in supersonic combustion flow

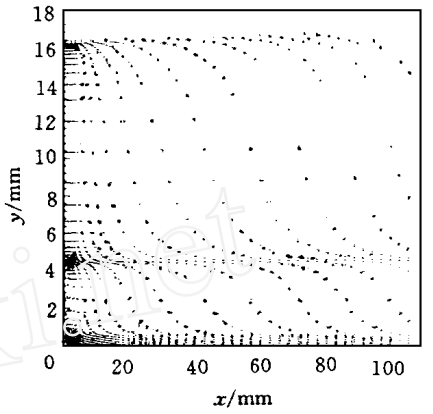


Fig. 4 Calculated field of combustion of $H_2/O_2$ in supersonic flow

果和预计的附面层厚度是吻合的，它从一个侧面证实了计算结果的合理性。

(2) 图 2 反映了流场的温度分布。图中看出，在界面附近的温度比其它区域要高大约 1.5 倍，表明在这一区域化学反应进行比较充分，尤其在甲烷喷口入口处附近温度达到最大值，这一点是和喷口端点甲烷组元浓度较高有关。

(3) 图 1 和图 4 看出，甲烷/空气和氢气/空气流场特征完全一样，存在一个混合界面，在喷口附近混合最强。但从图 2 和图 5 的静温分布来看，明显发现氢气体系不存在高温区，而甲烷体系中出现了一个高温区。图 3 是 $CH_4$ 的浓度分布图，其特点是在界面附近的浓度比其它区域高，在喷口附近出现了一个突出的高浓度区，这些现象和静温分布的结果是吻合的。

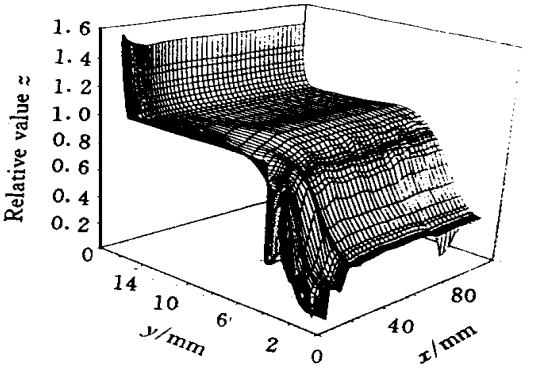


Fig. 5 Calculated static temperature distribution of $H_2/O_2$ in supersonic flow

## 参 考 文 献


1 Kou K K. Principle of combustion. John Wiley & Sons, Inc, 1986.

2 袁在顺. 烃类燃料的能量特性. 推进技术, 1991, 12 (1)

3 Jacobs P A. Numerical simulation of transient hypervelocity flow in an expansion tube. NASA CR-189615, 1992.

4 Ryan T W, et al. Ignition delay, heats of combustion and reaction rates of aluminum alkyl derivatives used as ignition and combustion enhancers for supersonic combustion. NASA-CR-189581, 1992.

5 Law C K. Chemical kinetic and aerodynamic structure of dlames. AD-A 256, 1992.

6 罗孝良, 戴之声. 化学反应速度常数手册第一分册. 成都: 四川科技出版社, 1985.


© 1994-2007 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved. http://www.cnki.net