

文章编号: 1672-9897(2006)02-0055-04

乙烯超声速燃烧的数值模拟研究

殷悦, 俞刚

(中国科学院力学研究所, 北京 100080)

摘要:利用 Fluent 软件、ISAT 算法与由 CARM(Computer Assisted Reduction Method)简化而来的 11 组分、7 步反应的乙烯简化机理对碳氢燃料/空气的超声速燃烧问题进行数值模拟。研究表明这种方法是可利用的。计算得到的压力数据与试验压力值可以比较。

关键词:超声速燃烧; 乙烯; CARM; Fluent; ISAT

中图分类号: O362; O643.2⁺1; O241.82 **文献标识码:** A

Numerical study of supersonic combustion of ethylene

YIN Yue, YU Gang

(Inst. of Mechanics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100080, China)

Abstract: The simulation of ethylene/air supersonic combustion is carried out by using Fluent software, ISAT and a reduced ethylene reaction mechanism of 11 species, 7 steps which is reduced by CARM(Computer Assisted Reduction Method). The study shows that this method is available. The calculated and experimental static pressure data are comparable.

Key words: supersonic combustion; ethylene; CARM; Fluent; ISAT

0 引 言

吸热碳氢燃料(如煤油)被加热后将裂解为小分子碳氢化合物, 乙烯是主要成分之一。所以对加热裂解煤油的数值模拟可以近似地利用乙烯来代替。作者利用 Fluent 软件和 CARM(Computer Assisted Reduction Method)产生的乙烯反应简化机理对乙烯的超声速燃烧问题进行数值模拟, 并与试验得到的压力数据进行了比较。

国际上有不少利用 Fluent 对超燃进行数值模拟的研究。A. D. Rossi 利用大涡模拟功能中的 FM 和 Smagorinsky 模型, 计算了氢气超声速燃烧中的湍流混合和火焰稳定等问题, 指出这两种模型在上述问题上没有本质的差异^[1]。S. J. Mattick 利用 PDF 模型及

有限速率模型详细研究了共轴射流火焰, 定性地研究了污浊空气(Vitiated Air)的成分对发动机内点火和火焰稳定的影响^[2]。T. O. Mohieldin 等人以日本国家宇航实验室的超燃冲压发机构型为基础, 研究冷态流场中射流对上游流场的影响, 指出在对称的几何模型中可以产生不对称的流动结构^[3]。作者利用 Fluent 作为流场计算程序; 采用 CARM 简化得到的 11 种组分、7 步反应的乙烯反应简化机理计算化学反应源项, 它的详细机理是国际上公认比较准确的 Wang 的 71 种组分、395 步反应的乙烯详细反应机理。为了避免刚性问题、加快计算速度, 作者利用 ISAT(In-Situ Adaptive Tabulation)算法结合 Fluent 的 UDF 功能, 采用混合编程方式调用该简化机理计算乙烯超声速燃烧问题。

• 收稿日期: 2004-10-19; 修订日期: 2006-02-25

基金项目: 国家自然科学基金重点资助项目(10232060)

作者简介: 殷悦(1979-), 男, 辽宁鞍山人, 硕士研究生。研究方向: 超声速燃烧的数值模拟。

1 流场计算、简化机理与加速算法

1.1 流场计算程序

Fluent 中有很多模型可供选择,作者使用 COU-
PLE 解算器, RNG κ - ϵ 湍流模型, 湍流燃烧模型使用
EDC(Eddy Dissipation Concept)。

1.2 乙烯简化机理

Chang 开发的 CARM 程序包^[4], 依据化学动力学的
准稳态假设, 通过计算机矩阵计算可以从详细机理
自动得到简化机理和与 chemkin 兼容的计算组分摩
尔生产率的子程序 CKWYP。组分生成率在给定的压
力、温度和质量分数条件下被表示为准稳态组分的函
数, 利用原详细机理中各个组分和基元反应的动力学
数据迭代计算得到。这种计算机自动生成方式, 省去
大量人工分析、输入工作。文中所用反应机理各组分
与反应如下:

H_2 H O O_2 OH H_2O CO CO_2 C_2H_2 C_2H_4 N_2

(1) $H + O_2 = O + OH$

(2) $H_2 + O = H + OH$

(3) $H_2 + OH = H + H_2O$

(4) $2H = H_2$

(5) $O + CO = CO_2$

(6) $3H_2 + 2O + 2CO = 4H + 2O_2 + C_2H_2$

(7) $2H_2 + H_2O + 2CO = H + O_2 + OH + C_2H_4$

1.3 ISAT 加速算法

与 Arrhenius 形式的反应机理相比, CKWYP 计算
量巨大。S. B. Pope 设计的配套算法 ISAT(In-Situ

Adaptive Tabulation) 可以大大提高计算速度^[5]。该算
法主要考虑求解燃烧问题的含时方程组:

$$\frac{d\Phi}{dt} = S(\Phi(t)) \quad (1)$$

由于各个反应的特征时间尺度不同而出现计算刚性
问题。如果计算过程中将某些网格的状态 $\Phi^0 = \{Y_1,$
 $Y_2, \dots, Y_N, T\}$ (Y_i 为质量分数, T 为温度) 和其积分
结果存储在二叉树的节点中, 那么当计算的另一网格
的状态 Φ^1 与已存储在节点中的 Φ^0 相差很大时, 采
用直接积分计算 Φ^1 的变化。并且将 Φ^1 与积分结果
存储在二叉树的一个新节点; 当计算中遇到的网格状
态 Φ^1 在 Φ^0 的精度范围内, 利用线性近似公式(2)来
计算:

$$R(\Phi^1) = R(\Phi^0) + A(\Phi^0) * (\Phi^1 - \Phi^0) \quad (2)$$

(其中 $R(\Phi^i) = \Phi(t_i + \Delta t)$, A 是雅克比矩阵)。二叉
树搜索运算快, 线性近似公式的计算量较小, 它的计
算时间与组分数目呈线性增长^[6], 所以 ISAT 大大提
高计算速度。

2 实验设备

实验装置包括 $M=2.5$ 的空气供应系统、多用途
燃烧室、煤油加热系统。整个燃烧室(图 1、单位 mm)
总长 1070mm, 由三段构成, 即一个近似等截面的进口
隔离段(1° 的扩张角用于边界层修正)和两个扩张角
分别为 3° 和 4° 的扩张段。燃烧室入口处截面积为
 $51\text{mm} \times 70\text{mm}$ 。煤油喷嘴以及凹腔火焰稳定装置采
用可拆换的一体化模块设计。凹腔深 12mm, 斜坡倾
斜角 45° , 总体长高比约为 7。煤油通过 5 个 0.9mm
的小孔垂直喷入主流。稳定的 $M=2.5$ 超声速气流
在系统启动约 2.5s 后达到, 并可连续运行约 7s。

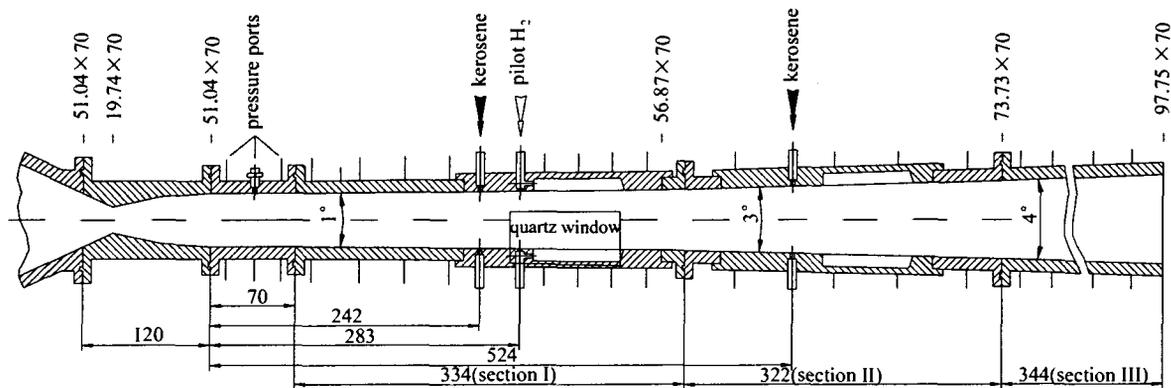


图 1 氢引导, 煤油超声速模型燃烧室示意图

Fig.1 Sketch of kerosene/pilot hydrogen supersonic model combustor

力学所超燃实验室设计的煤油电加热系统包括二级。第一级加热器采用储热式电加热系统,最高温度设置为 570K,加热容量 0.8kg,加热时间 10 ~ 15min;第二级加热器管道结构与第一级一样,加热能力可以达到 950K 以上,加热时间为 1 ~ 2s^[7]。

3 计算结果与分析

3.1 计算区域与条件

计算区域简化为单凹腔、不带引导氢、带有对称上边界的二维计算区域,入口处高 25.5mm,总长 1070mm。凹腔深 12mm,底长 89mm,斜坡倾斜 45°,网格数 12,000。模拟了自由来流马赫数 $M = 2.5$,总温 $T_0 = 1800\text{K}$,总压 $P_0 = 1.2 \times 10^6\text{Pa}$,燃料喷流马赫数 $M = 1$,总温 $T_0 = 900\text{K}$,总压 $P_0 = 4.0 \times 10^6\text{Pa}$ 的超声速燃烧问题。共利用 6 个 CPU,总计用时 168h。

3.2 结果与讨论

图 2 为计算得到的压力值与试验值的比较。计算结果共有两个压力峰值出现。第一个峰值出现在燃料喷流处前端。计算得到的压力明显高出试验测量结果。原因在于试验中燃料从直径 0.9mm 的孔中射出,而计算中采用二维区域来代替实际的三维问题,燃料相当于从一道 0.9mm 的缝中射出。试验中的自由来流空气可以从喷流孔旁边绕行,而计算中的燃料喷流阻碍了空气的流通,导致前端压力过高。A-C(射流处到凹腔前端)的压力值下降与试验值的趋势不符。主要是由于射流阻挡氧气的进入而使这一区域燃烧不充分。而压力试验值上升说明这一区域内实际发生的化学反应比计算结果剧烈。这再次说明利用二维区域计算的局限性。计算中的另一个压力峰值出现在凹腔的后端(图中 B 点),与试验结果比较符合。该点的压力值是气流冲击与燃烧共同作用的结果。凹腔之后的压力计算值与试验值符合得很好。

ISAT 的作用十分明显。ISAT 在此算例中把计算速度提高约 6 倍。ISAT 在使用效率上还有增长空间。本文的计算效率只增加 6 倍可以解释为:本文使用的反应机理的组分仍然很多。由于增加一种组分,相当于多了一个“自由度”,使得 Φ^1 很难落在已存储的节点 Φ^0 的椭圆精度范围内,查表或公式(2)也就很少被使用。另外,不能开辟一个大的内存作为二叉树存储空间也是计算速度无法再提高的一个原因。

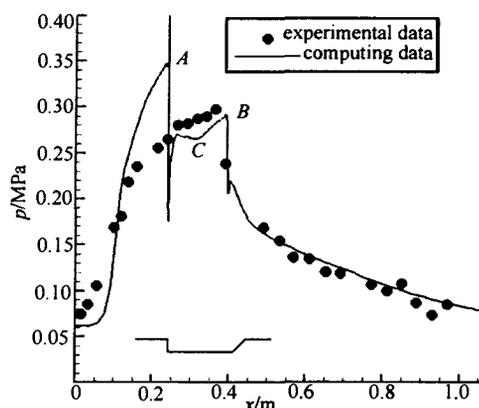


图 2 沿壁面压力分布比较

Fig. 2 Wall normalized static pressure plot

4 总结

作者利用 Fluent 结合 ISAT 调用了 CARM 产生的乙烯简化机理计算了乙烯的超声速燃烧问题,总结如下:

(1) 该研究证明了利用 Fluent 与 CARM 相结合计算超燃问题是可行的。在网格数目相对稀疏的情况下,得到的沿壁面压力分布与试验压力数据基本符合。该反应机理可以被用来进行超燃数值研究;

(2) ISAT 算法在 Fluent 与 CARM 结合的计算问题中具有重要作用。它使得调用相对完备的简化机理进行计算成为可能。通过计算,作者认为 CARM 产生的简化机理的组分应该尽可能少(低于 10 种组分),收敛速度尽可能快;

(3) 采用二维方程计算燃料横向射流燃烧问题是不充分。射流会阻挡氧化剂进入凹腔,造成部分区域燃烧不充分的。对于使用 CARM 机理的计算问题,应该发展三维的并行计算;

(4) 由于受到计算资源的限制,本文目前只计算了一组简化机理相对简单的结果。对于采用更为复杂的多组分加热裂解煤油反应机理对碳氢燃料超燃问题的进一步模拟还需要提高运算速度,以便对不同的简化机理进行比较。

致谢:感谢中国空气动力研究与发展中心的吴颖川、郑忠华、赵慧勇提供的有益讨论和帮助。

参考文献:

- [1] ROSSI A D, et al. LES of supersonic combustion of H₂/vitiated air[R]. AIAA 2004-3877.

参考文献:

- [1] WILLERT C E, GHARIB M. Digital particle image velocimetry[J]. *Exp in Fluids*, 1991, (10): 181 ~ 193.
- [2] 何培杰, 龙新平, 梁爱国等. 射流泵流场的 PIV 测量[J], *水科学进展*, 2004, 15(3): 297 ~ 299.
- [3] SCHMITT T, KOSTER J N, HAMACHERS H. Particle design for displacement tracking velocimetry[J], *Meas. Sci. Technol*, 1995(6): 682 ~ 689.
- [4] 范洁川等. 近代流动显示技术[M]. 北京: 国防工业出版社, 2002.
- [5] MELLING A. Tracer particles and seeding for particle image velocimetry[J]. *Meas. Sci. Technol*, 1997(8): 1406 ~ 1416.
- [6] AJAY K P. Particle image velocimetry[J]. *Current Science*, 2000, 79(1): 51 ~ 60.
- [7] 母国光, 战元龄. 光学[M]. 合肥: 中国科学技术大学出版社, 1991.
- [8] 魏润杰, 申功焘, 丁汉泉. 近距离 DPIV 粒子成像分析[J]. *北京航空航天大学学报*, 2001, 27(6): 662 ~ 665.
- [9] ARROYO M P, GREATER C A. Stereoscopic particle image velocimetry[J]. *Meas. Sci. Technol*, 1991, (2): 1181 ~ 1186.
- [10] ZANG Wei-jun, AJAY K P. Performance evaluation of a Scheimpflug stereocamera for particle image velocimetry[J], *Applied Optics*, 1997, 36(33): 8738 ~ 8744.

(上接第 57 页)

- [2] MATTICK S J, et al. Numerical modeling of supersonic combustion: validation and vitiation study using Fluent[R]. AIAA 2005-4287.
- [3] MOHIELDIN T O, et al. Numerical study of 2D dual-mode scramjet combustor [R]. AIAA 2003-7036.
- [4] CHANG W C. Modeling of NOx formation in turbulent flames development of reduced mechanisms and mixing models [D]. Ph.D. thesis, U.C. Berkeley.
- [5] POPE S B. Computationally efficient implementation of combustion chemistry using in situ adaptive tabulation[J]. *Combustion theory modeling*, 1997, (1): 41 ~ 63.
- [6] TISHKOFF J M, et al. Future directions of supersonic combustion research: air force/NASA workshop on supersonic combustion[R]. AIAA 1997-1017.
- [7] YU G, et al. Characterization of a supersonic model combustor with partially cracked kerosene[R]. AIAA 2005-3714.