



CSTAM 2010-0047

**采用简化机理模拟乙烯在超声速气流中  
自点火燃烧过程**

仲峰泉，范学军，俞刚，张新宇

中国科学院高超声速科技中心

中国科学院力学研究所高温气体动力学重点实验室

**第三届高超声速科技学术会议**

**2010年10月26-28日 江苏·无锡**

# 采用简化机理模拟乙烯在超声速气流中 自点火燃烧过程

仲峰泉<sup>1,2</sup>, 范学军<sup>1,2</sup>, 俞刚<sup>1,2</sup>, 张新宇<sup>1,2</sup>

(1 中国科学院高超声速科技中心 北京海淀区 100190 )

(2 中国科学院力学研究所 高温气体动力学重点实验室 北京海淀区 100190)

**摘要** 本文采用由CARM生成的11组分/7步反应简化机理对二维超声速气流中热乙烯横向喷射、自点火燃烧过程进行了非定常模拟。同时, 计算采用了SST  $k-\omega$  湍流模型、涡耗散概念(EDC)燃烧模型以及ISAT积分算法等技术。数值研究了马赫数2.5、总温1800K来流中, 不同当量比条件下乙烯的自点火燃烧过程。研究发现: 乙烯首先在凹腔内着火; 在当量比较低时, 燃烧主要发生在凹腔下游, 并且燃烧区域为超声速; 随着当量比的提高, 由于释热量的增加, 使得燃烧室内气流发生热雍塞, 乙烯在亚声速气流中燃烧, 燃烧效率显著提高, 燃烧主要发生在凹腔区。另外, 采用总包反应模型计算的结果表明由于模型过于简单, 使得燃烧效率偏高、总温偏大, 与简化机理给出的结果差别显著。

**关键词** 简化机理、超声速燃烧、数值模拟、涡耗散概念模型、自点火延迟时间

## 引言

超声速燃烧是一个涉及湍流/化学反应相互作用、激波/边界层相互作用等强耦合的复杂过程。其中, 湍流/化学反应相互作用是超燃过程的主导因素, 也是数值模拟的难点。由于化学反应特征时间与流动特征时间的差异, 以及反应步之间时间尺度的差异, 导致了数值求解中的“刚性”问题, 使超燃模拟尤其是非定常计算费时费力。另外, 现有的化学反应机理过于复杂, 特别是碳氢化合物的氧化机理往往包含了几百上千种组分和基元反应。比如法国P. Dagaut<sup>[1]</sup>发展的煤油详细机理, 以三组分碳氢化合物作为煤油的化学替代模型, 机理包括298组分, 1592基元反应; H. Wang、A. Laskin<sup>[2]</sup>提出的乙烯氧化详细机理, 包括71组分, 395步基元反应。由于计算量和刚性问题, 直接应用详细机理进行数值模拟几乎不可能。同时, 基于实验数据发展的几步总包反应, 如文献[3]给出的乙烯两步反应模型, 被广泛地使用。但该类模型过于简单, 不包括关键

的自由基, 通常不能模拟点火等非定常过程, 并且会导致反应释热量的偏大预测。因此, 发展从详细机理简化而得的简化机理、研究简化机理的可应用性将为准确地模拟超燃过程提供基础。

近年来, 超燃数值模拟在国内外日趋受到重视, 相关的研究报道越来越多。总体而言, 目前的数值研究大多限于氢/氧或者甲烷/氧反应, 而针对多碳原子的碳氢化合物的超燃数值模拟较少。国防科技大学在氢/氧超燃计算方面取得了一系列成果<sup>[4], [5]</sup>, 其中应用混合RANS/LES方法对超燃流场结构的刻画和湍流脉动的捕捉, 比以往的雷诺平均方法有显著的改进。空气动力研究与发展中心发展了航空煤油反应机理简化方法(SPARCK), 并应用到超声速燃烧数值模拟中<sup>[6], [7]</sup>。加州伯克利分校的J.-Y. Chen<sup>[8]</sup>基于拟稳态近似假设(QSS)发展了一套反应机理简化方法(Computer Assisted Reduction Mechanism Code), 简称CARM。C. Montgomery等人<sup>[9], [10]</sup>运用CARM生成的15组分甲烷简化机理结合Fluent数值求

解器对部分预混的甲烷/空气湍流火焰进行了数值模拟；同时采用了25组分的正庚烷结合KIVA求解器模拟了柴油预混燃烧。计算结果与实验测量吻合的较好。在国内，中科院力学所殷悦、俞刚<sup>[11], [12]</sup>率先采用CARM生成的简化机理对乙烯、气态煤油超燃过程进行了二维定常模拟。需要说明的是，目前有关碳氢化合物超燃的模拟多为定常计算，因此湍流/化学反应的相互耦合机理以及简化机理的优、缺点未能得到充分体现。

本文将采用乙烯的11组分/7步简化反应模型，对乙烯在马赫2.5的超声速气流中横向喷射、自点火燃烧过程进行非定常模拟。乙烯的简化机理由其71组分/395步详细机理通过CARM生成，并进行了点火延迟时间的验证。本文研究了热乙烯在凹腔前喷射的自点火燃烧过程，乙烯当量比为0.32和0.6。同时，采用了C. Westbrook和F. Dryer提出的两步总包反应模型<sup>[3]</sup>进行了模拟，作为与简化机理结果的比较。研究发现，采用简化机理可以清晰地给出乙烯自点火、火焰扩散的非定常过程。基于本文采用的二维燃烧室构型，当乙烯当量比较小时（ $\phi=0.32$ ），燃烧主要为超声速，反应活跃区主要在凹腔的后沿以及下游区域。随着当量比的提高，由于释热量的增加，在自点火燃烧过程中将发生热雍塞，使得燃料主要在亚声速气流中燃烧。这时，反应活跃区集中在凹腔区域，反应的延迟时间显著减小，燃烧效率增大。同时，采用两步总包模型的计算结果表明：过于简单的模型将导致反应释热量的偏大估计以及燃烧总温、静压的偏高预测。

## 1 反应机理与燃烧模型

本文采用的11组分/7步反应机理由CARM简化，并生成计算化学反应源项（组分质量生成率）的Fortran子程序。采用CARM简化的步骤大致如下：1）对已有的乙烯详细机理（71组分/395步反应）结合PSR、PREMIX反应模型进行敏感度分析，首先获得一个骨架机理（30组分/105步反应）；2）运用QSS假设对骨架机

理进行进一步简化。根据组分浓度及其生成率，选择满足QSS假设的组分，运用矩阵运算自动生成最终机理，同时生成CKWYP子程序。该子程序在给定压力、温度和组分的质量分数后可以计算组分的质量生成率。表1给出了11组分/7步机理的形式。

这里有两点需要说明：1）简化机理实际包含的组分与骨架机理相同，其中满足QSS假设的组分通过数值求解（矩阵运算），它们之间是非线性耦合的。因此，简化机理最终生成的反应步（如11组分/7步）的反应速率受到QSS组分的影响，是温度、压力、组分浓度的复杂函数，无法用简单的诸如Arrhenius形式去描述。2）CKWYP子程序格式为Fortran语言。如需要与商用求解器衔接（例如Fluent，其自定义接口只识别C语言），需要进行混合编程和相应设置。

组分	H2、O2、H、O、OH、CO、CO2、H2O、C2H2、C2H4、N2
反应步	H + O2 = O + OH
	H2 + O = H + OH
	H2 + OH = H + H2O
	2H = H2
	O + CO = CO2
	3H2 + 2O + 2CO = 4H + 2O2 + C2H2
	2H2 + H2O + 2CO = H + O2 + OH + C2H4

表1 11组分/7步简化机理

图1给出了预混乙烯/空气（ $P=1\text{atm}$ ，当量比=1）的自点火延迟时间随温度的变化曲线。详细机理和骨架机理确定的延迟时间以及D. Horning<sup>[13]</sup>利用激波管测量（ $P=1\text{atm}$ ， $\phi=1$ ，氩气摩尔比84%）的点火延迟时间也在图中给出。三种模型的结果在温度影响趋势上基本一致，但简化机理给出的点火延迟时间要明显低于详细机理和骨架机理的延迟时间，这主要是由于反应模型的简化导致了控制反应速率的自由基的减少。有趣的是，与实验测量相比较，骨架机理给出的延迟时间吻合的最好。

燃烧模型采用了由B. F. Magnussen<sup>[14]</sup>提出的涡耗散概念模型（EDC），即在湍流的精细涡结构中包含了化学反应详细机理。精细结构

特征长度可以由I. R. Gran和B. F. Magnussen提出的公式(1)来确定<sup>[15]</sup>,同时精细结构内反应的特征时间由公式(2)确定。

$$\xi^* = C_\xi \left( \frac{\nu \varepsilon}{k^2} \right)^{\frac{3}{4}} \quad (1)$$

$$\tau^* = C_\tau \left( \frac{\nu}{\varepsilon} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (2)$$

其中,  $\nu$  为运动粘性系数,  $k$  为湍流动能,  $\varepsilon$  为湍动能耗散率;  $C_\xi$  为体积比率, 经验值为2.1377,  $C_\tau$  为时间尺度长速, 经验值为0.4082。

在精细结构内发生的化学反应可以假设为等压过程,因此组分守恒方程中的化学反应源项可由式(3)确定:

$$R_i = \frac{\rho (\xi^*)^2}{\tau^* \left[ 1 - (\xi^*)^3 \right]} (Y_i^* - Y_i) \quad (3)$$

其中,  $\rho$  为混合气体密度,  $Y_i$ 、 $Y_i^*$  分别为反应前和经过  $\tau^*$  时间反应后的组分质量分数。

EDC模型更为详细的介绍可参见文献[14]、[15]。该模型能够将湍流流动与化学反应很好地结合,已经得到了广泛运用。如C. J. Montgomery等人<sup>[9]</sup>, G. D. Stefanidis等人<sup>[16]</sup>运用EDC模型进行了湍流化学反应过程。但EDC模型将导致数值积分的计算量显著增大。因此,本文在处理带化学反应的数值积分上采用了S.B. Pope<sup>[17]</sup>提出的ISAT (In Situ Adaptive Tabulation) 技术。

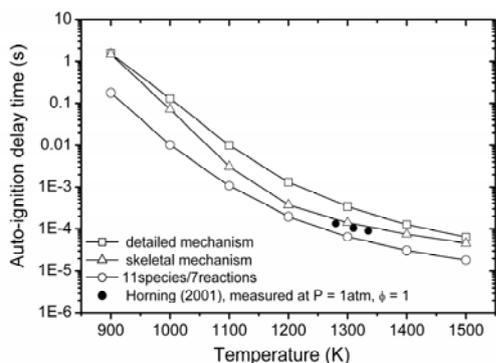


图1 反应机理确定的乙烯自点火延迟时间随温度的变化

此外,本文还采用了C. Westbrook和F. Dryer提出的两步总包反应模型:



Arrhenius反应速率常数包括的指前因子A和活化能 $E_a$ ,以及组分反应速率指数可参见文献[3]、[18]。燃烧模型采用了层流有限速率模型与B. Magnussen和B. Hjertager<sup>[19]</sup>提出的涡耗散模型(EDM)相结合,反应速率取两者确定的较小值。

## 2 数值方法

本文采用了有限体积法结合SST  $k-\omega$  湍流模型数值模拟马赫2.5的二维超声速气流中(总温1800K,总压1.1MPa)热乙烯(总温1000K,模拟煤油在高温条件下充分裂解后的主要产物)的垂直喷注燃烧过程。Navier-Stokes方程的求解采用了Fluent6.3提供的基于密度的求解器,对流项离散采用了Roe迎风格式,粘性项采用二阶中心差分,时间项采用了Euler隐式格式。控制方程中所有变量以及组分扩散方程、湍流模型方程中变量的空间离散均具有二阶精度。总网格数为6.3万,其中凹腔内分布1.4万网格,壁面最小网格尺度控制在 $\Delta y_{min}^+ \sim 1$ 。计算采用MPI并行技术,加速效率达87%。数值方法首先针对超声速气流中氮气二维射流和凹腔流动进行了模拟,壁面静压结果与实验测量吻合得较好。由于篇幅限制,这里未给出冷流场射流结果。

组分定压比热 $C_p$ 由温度的四次多项式分段拟合来确定。组分粘性系数、热传导系数通过分子动力学理论确定,需要预知各组分分子的Lennard-Jones碰撞半径 $\sigma$ 和L-J势能参数 $\frac{\varepsilon}{k_B}$ 。混合物的定压比热采用基于质量分数的混合公式,混合物粘性系数、热传导系数则通过摩尔分数的混合公式。质量扩散系数的确定

较复杂，这里仅考虑基于菲克扩散的二元扩散系数，通过 L-J 参数  $\sigma$ 、 $\frac{\varepsilon}{k_B}$  确定。

计算区域如图 2 所示，计算域总长 860mm，入口高度为 25mm。凹腔长高比为 10，深度为 10mm，后缘倾斜度 27°。凹腔上游为长度 360mm、高度 25mm 的等截面段，乙烯在凹腔上游 60mm 处垂直喷射。凹腔下游为长度 400mm、带 1.2° 扩张角的燃烧段。计算域入口为压力边界条件；出口为无反射条件；上边界为对称条件；下壁面及凹腔为固壁绝热条件；乙烯出口条件为给定总压、静压、总温和湍流速度。

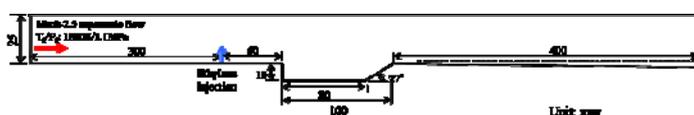


图2 二维燃烧室结构示意图

### 3 结果与讨论

本文采用简化机理对超声速流场中乙烯自点火燃烧过程进行了非定常模拟，表2给出了算例的条件参数。其中，压力定义为乙烯出口总压与来流静压比。

	算例1	算例2	算例3
压比	5	9.2	5
乙烯总温 (K)	1000	1000	1000
出口马赫数	1.04	1.06	1.04
乙烯当量比	0.32	0.6	0.32
反应机理	简化机理	简化机理	总包反应模型

表2 算例条件参数

#### 3.1 低当量比燃烧过程—算例 1

图3给出了乙烯自点火燃烧的静温分布时间序列图。算例1的总计算时间为13ms，乙烯从喷射→自点火→火焰扩散→稳定燃烧所需的时间为约6ms。如图3所示， $t=0.8-1.35\text{ms}$ 时，燃烧首先在凹腔内发生。当 $t=1.35-2\text{ms}$ 时，随着乙烯向下游扩散，在凹腔后形成了主要的着火区。整个着火过程在 $t=6\text{ms}$ 时基本稳定。图4

为自由基 $\text{C}_2\text{H}_2$ 质量浓度分布的时序图。作为富燃料条件下重要中间产物， $\text{C}_2\text{H}_2$ 的分布显示了乙烯初始反应的活跃区。在 $t=1.35\text{ms}$ 时，较多的 $\text{C}_2\text{H}_2$ 出现在凹腔底部，说明凹腔是最先着火区域。燃烧稳定后， $\text{C}_2\text{H}_2$ 主要分布在凹腔内，这说明凹腔内处于富燃料状态，乙烯在凹腔内发生不完全反应。图5给出了 $\text{CO}$ 质量浓度分布图。燃烧稳定后凹腔内 $\text{CO}$ 浓度较高，这也说明凹腔内乙烯的氧化反应不完全。图6为自由基 $\text{OH}$ 质量浓度分布。当 $t=1.35\text{ms}$ 时，大量 $\text{OH}$ 在凹腔后出现，说明凹腔下游是主要的着火区。燃烧稳定后 $\text{OH}$ 主要也分布在凹腔下游，这里是富氧燃烧， $\text{CO}_2$ 也主要在凹腔下游形成。

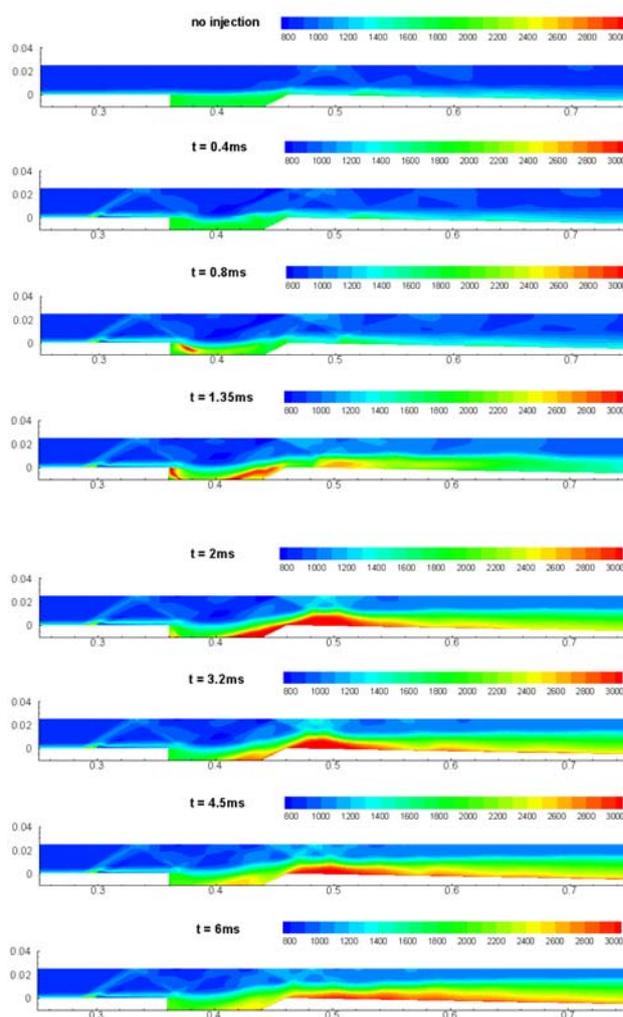


图3 低当量比条件下静温分布时序图（单位：K）

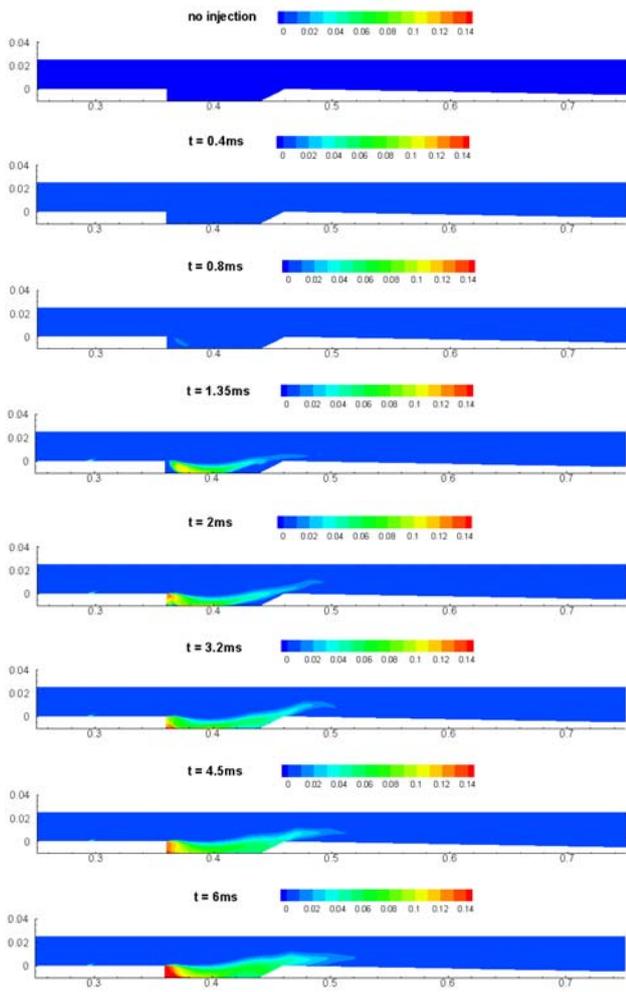


图4 低当量比条件下C2H2浓度分布时序图

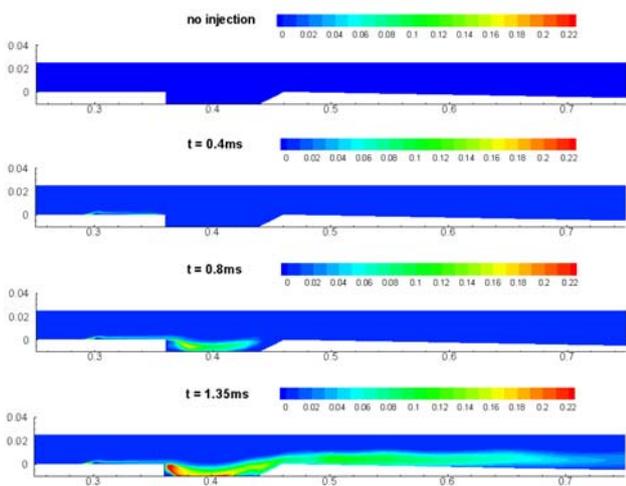


图5 低当量比条件下CO浓度分布时序图

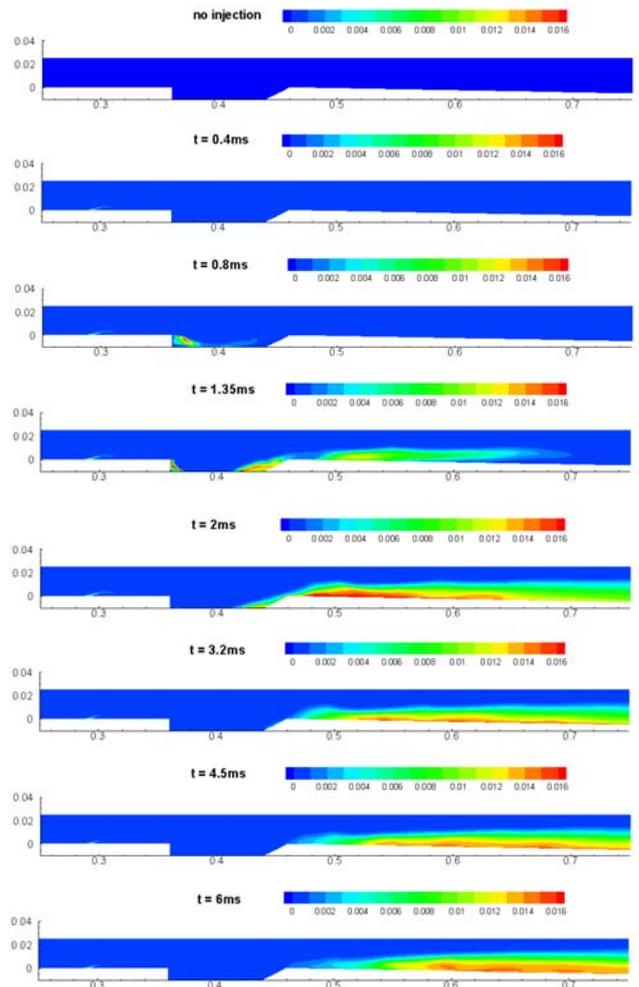


图6 低当量比条件下OH浓度分布时序图

图7给出了C2H2质量生成率分布的时序图。燃烧稳定后C2H2生成率主要出现在凹腔内。有趣的是，在C2H2正生成率的下游紧接着

出现了负生成率区域。这说明大量的C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>在凹腔产生后，紧接着又在下游区域被消耗。结合图8（OH质量生成率分布）可以看出，C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>的消耗促使大量的OH产生，使得乙烯被充分氧化，生成CO<sub>2</sub>。从图8还可以看出，乙烯燃烧存在着明显的时间延迟，以OH质量生成率分布为判据，从乙烯喷射孔到OH正生成率极大值分布的距离为0.25m，在此区域内流动平均速度约为1000m/s，可大致确定反应延迟时间为0.25ms。

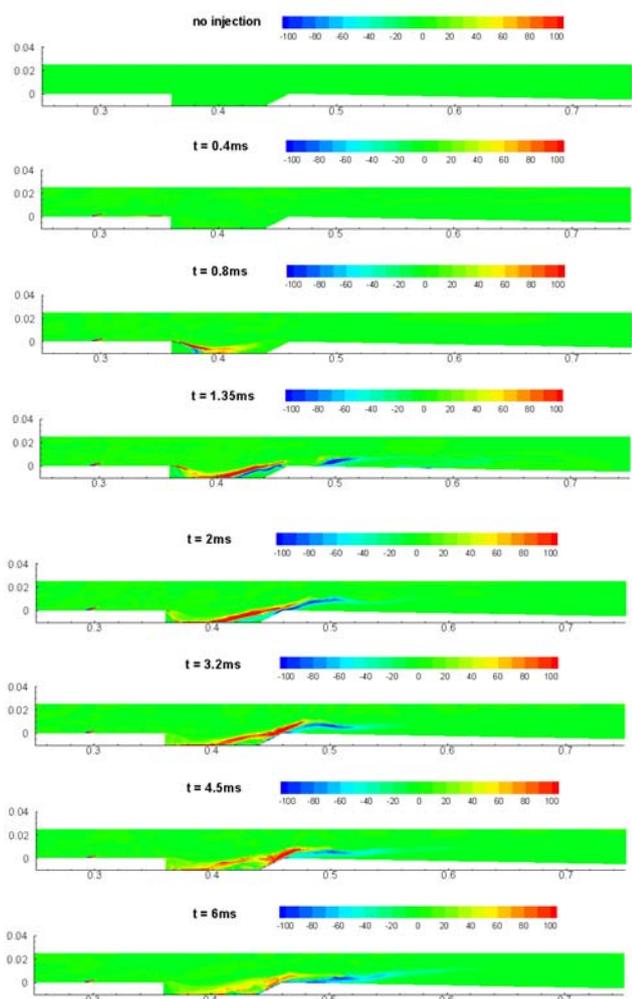


图7 低当量比条件下C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>质量生成率分布时序图

图9(a)为燃烧稳定后静压分布。由于燃烧释热，静压在凹腔下游显著增大，壁面静压最大值达到来流静压的2.4。图9(b)给出了亚声速、超声速区域分布（即马赫数1的等值线）。如图所示，由于乙烯当量比较小（0.32），燃烧主要为超声速。

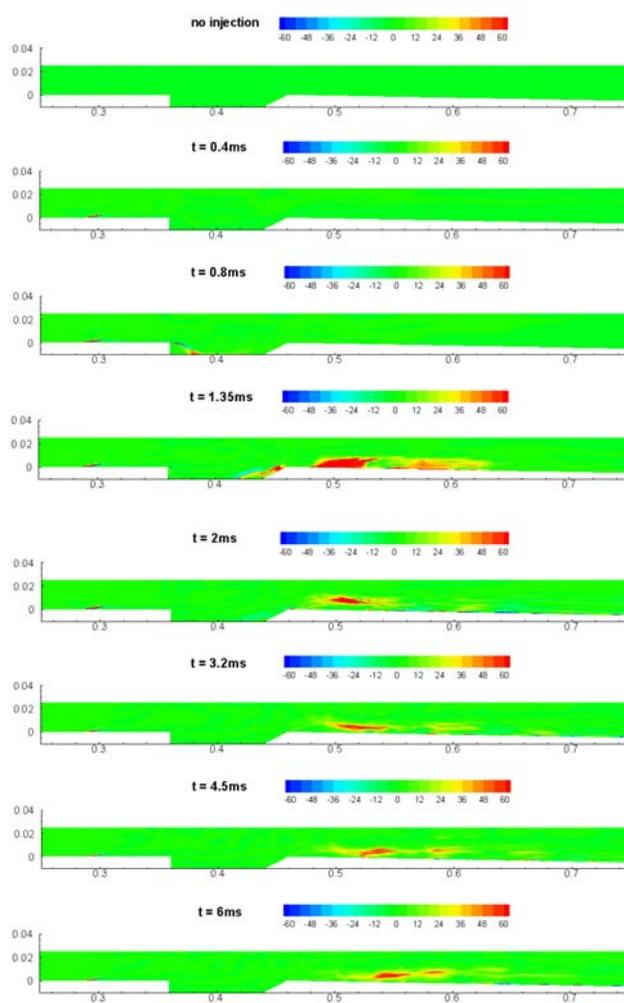


图8 低当量比条件下OH质量生成率分布时序图

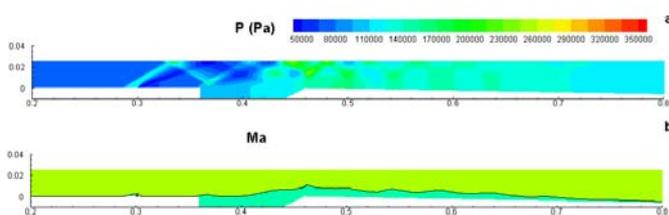


图9 低当量比条件下静压分布以及马赫1等值线

### 3.2 高当量比燃烧过程—算例2

算例2模拟了当量比为0.6时乙烯的自点火燃烧过程。图10为静温分布的时序图。计算的总时间为17ms。如图所示，类似于算例1，乙烯首先在凹腔内着火；随着乙烯的扩散， $t=1.4ms$ 时，在凹腔下游处形成主要的着火区。但是与算例1不同的是，凹腔下游的燃烧并未很快稳定下来。由于燃烧释热以及压力升高，

火焰在大约 $t=4.5-10.7\text{ms}$ 之间向上游传播。在 $t=10.7\text{ms}$ ，由于下游背压增大，在燃料喷射点上游形成较大的漩涡，将部分燃料带到喷射点上游进行燃烧。在 $t=13\text{ms}$ 时，喷射点前形成了几道斜激波，使得燃料喷射混合区域为亚声速区，乙烯基本处于亚燃状态，这将导致反应加速、燃烧效率提高。整个点火燃烧过程到 $t=15\text{ms}$ 左右才稳定。图11为燃烧稳定后静压和马赫线分布。如图11(a)所示，由于燃烧基本处于亚燃，燃烧充分，静压显著增大，其壁面静压最大值为来流静压的4.7倍。图11(b)显示了亚声速、超声速区域以及马赫1的等值线。从图中可以清楚地看出燃烧基本处于亚声速区。

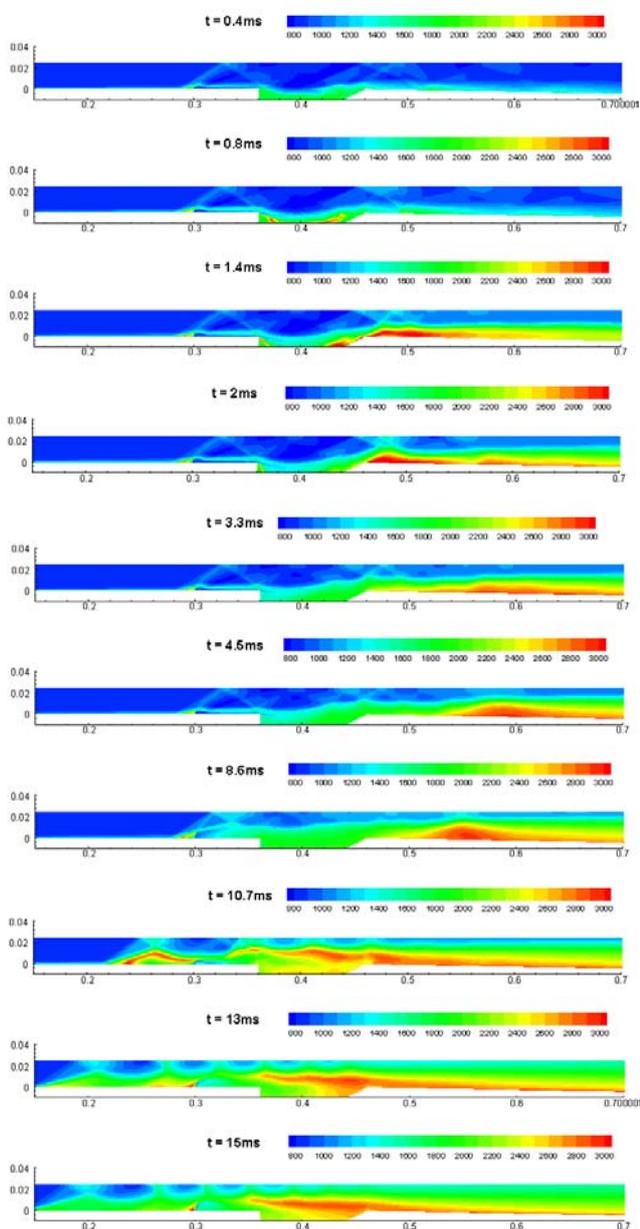


图10 高当量比条件下静温分布时序图（单位：K）

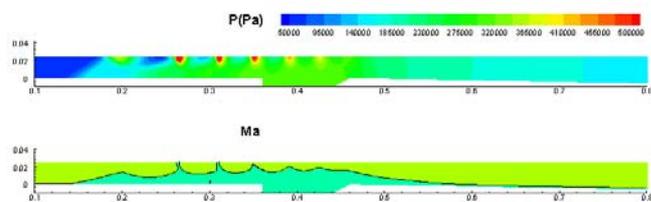


图11 高当量比条件下静压分布、马赫1等值线

图12(a) - (c)分别给出了燃烧稳定时， $\text{C}_2\text{H}_2$ 、 $\text{OH}$ 、 $\text{CO}$ 的质量浓度分布。与算例1(图4)相比， $\text{C}_2\text{H}_2$ 的主要分布仍在富燃料区域，即凹腔内；而 $\text{OH}$ 的分布更接近喷射点，这主要是由于低速和静温升高，导致了反应延迟时间的减小。 $\text{OH}$ 、 $\text{C}_2\text{H}_2$ 自由基的质量生成率分布在图13(a)、(b)中给出。与算例1相比较（图8）， $\text{OH}$ 正生成率主要出现在紧靠喷射点的下游；与算例1（图7）比较， $\text{C}_2\text{H}_2$ 的正生成率分布由凹腔的后沿区域前移到喷射点下游，这也说明了由于静温升高和流速降低，导致反应延迟时间较小，反应在喷射点下游不远处就开始。图13(b)还显示了 $\text{C}_2\text{H}_2$ 正生成率分布的下游紧接着出现负生成率（消耗率）分布，这一现象与算例1类似，说明 $\text{C}_2\text{H}_2$ 产生后又很快与 $\text{O}_2$ 、 $\text{O}$ 反应生成 $\text{OH}$ 。

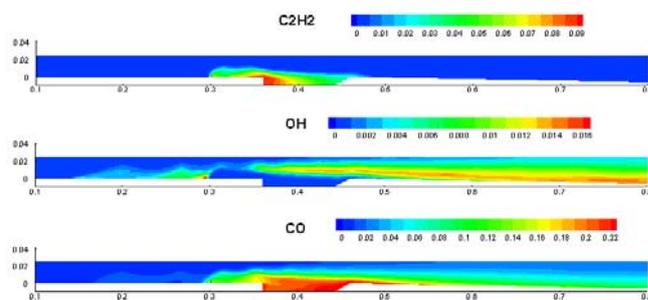


图12 高当量比条件下 $\text{C}_2\text{H}_2$ 、 $\text{OH}$ 、 $\text{CO}$ 质量浓度分布

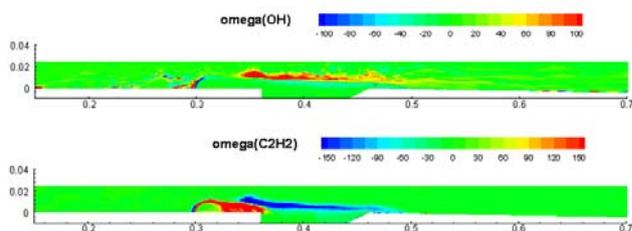


图13 高当量比条件下 $\text{OH}$ 、 $\text{C}_2\text{H}_2$ 质量生成率分布

图14给出了算例1、2以及无喷射燃烧时下壁面的静压分布。当量比为0.6时，乙烯燃烧区域基本上为亚声速。这一点从静压分布上也可以看出，算例2的静压在凹腔区域呈平台分布，并且无任何波系结构特征；而算例1的静压分布有明显的反射斜激波和波系干扰的特征。

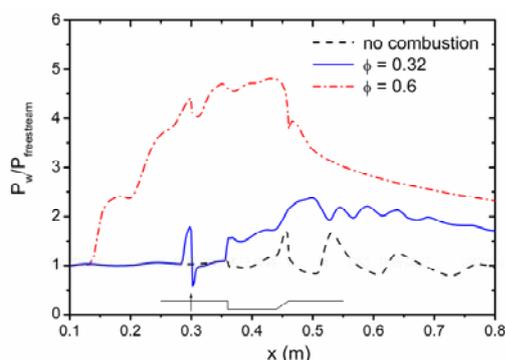


图14 不同燃烧条件下壁面静压分布

### 3.3 总包反应模型—算例3

作为比较，算例3（当量比0.32）给出了采用Westbrook和Dryer两步反应模型的计算结果。图15为燃烧稳定后静温和静压分布。如图所示，与算例1、2不同，温度最大值主要集中在凹腔内，并且最高静温超过了3200K。这说明总包模型过于简单，导致了模拟的燃烧过于充分、静温过高。从静压分布可以看出，燃烧使压力显著升高；壁面静压最大值达到来流静压的3.8倍，这对于马赫数2.5来流、当量比0.32的乙烯自点火条件偏高。

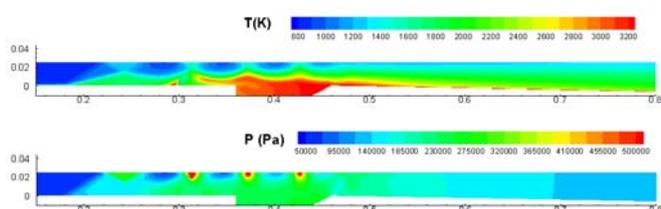


图15 采用两步反应获得的静温、静压分布

算例1、2、3计算的总温分布如图16给出。相比较算例1、2，总包反应模型确定的燃烧总温明显偏高。同时，图16还说明燃烧总温分布在横截面内分布很不均匀。

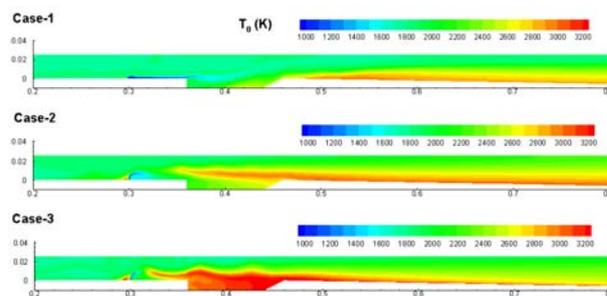


图16 不同反应模型和当量比条件下获得的总温分布

## 4 结论

本文采用由CARM生成的简化机理对超声速流场中乙烯横向喷射、自点火燃烧过程进行了模拟，获得了较详细的燃烧过程的信息。基于本文采用的燃烧室构型以及初步结果，主要的结论有：

- 1) CARM生成的碳氢燃料简化机理及其Fortran子程序可以与商用流体软件进行衔接，并且实现高效并行计算下的多维超燃问题的非定常模拟。
- 2) 乙烯自点火燃烧首先在凹腔内发生，但主要的燃烧区出现在凹腔的下游。当量比较低时，乙烯将在凹腔下游燃烧，燃烧处于超声速状态；当量比较大时，由于释热量的增加，流动将发生热雍塞，燃烧将转变为亚声速燃烧，燃烧效率显著提高。
- 3) 由于总包反应模型过于简单，将导致反应加速、释热量偏大，从而影响了燃烧过程的模拟，并且给出的总温分布偏高。

需要说明的是，由于二维燃烧问题与三维问题有很大的差异（比如，相同当量比条件下，二维射流的压比要远小于三维的压比，使得混合过程完全不同）；以及由于燃烧性能对于燃烧室构型、凹腔结构、燃料喷射方式的敏感性，现有的模拟结果未得到相应的实验验证。同时，目前采用的11组分/7步机理仍需要进一步改进，使得机理能够更准确地模拟真实燃烧过程。

## 致谢

本文工作得到了国家自然科学基金（编号：10621202，10902115）的资助。University of Connecticut 的宋之人教授为本文提供了简化机理，并在反应机理方面给予很多指导意见，作者在这里衷心地表示感谢！

## 参考文献

1. Philippe Dagaut, "On the kinetics of hydrocarbons oxidation from natural gas to kerosene and diesel fuel", *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2002, 4, pp.2079-2094
2. Hai Wang, Alexander Laskin, "A Comprehensive Kinetic Model of Ethylene and Acetylene Oxidation at High Temperatures", Progress Report 1998
3. C. K. Westbrook, F. L. Dryer, "Simplified Reaction Mechanisms for the Oxidation of Hydrocarbon Fuels in Flames", *Combustion Science and Technology*, Vol.27, 1981, pp.14-27
4. M-B. Sun, Z-G. Wang, J-H. Liang and H. Geng, "Flame Characteristics in a Supersonic Combustor with Hydrogen Injection Upstream of a Cavity Flameholder", *Journal of Propulsion and Power*, 2008, 24(4), pp.688-696
5. 范周琴, 孙明波, 刘卫东, "氢燃料超燃冲压发动机内部流动与燃烧过程的混合RANS/LES模拟", CSTAM-2009-0004, 第二届高超声速科技学术会议, 安徽黄山
6. 钱炜祺, 杨顺华, 肖保国, 乐嘉陵, "碳氢燃料点火燃烧的简化化学反应动力学模型", *力学学报*, 2007, 39(1), pp.37-44
7. S-H. Yang, B-G. Xiao, J-L. Le, "Implementation of Reduced Chemical Kinetics and ISAT in Modeling of Supersonic Combustion", ISABE-2009-1357
8. J.-Y. Chen, "Development of Reduced Mechanisms for Numerical Modeling of Turbulent Combustion", Workshop on Numerical Aspects of Reduction in Chemical Kinetics, CERNICS-ENPC, Cite Descartes, Champus sur Marne, France, 1997
9. C. J. Montgomery, D. M. Shino, C. Yang, S. D. Brunson, A. R. Parkinson, J.-Y. Chen, G. M. Goldin, S.-C. Kong and R. D. Reitz, "Reduced Chemical Kinetic Mechanisms: Application to CFD Codes and Optimization", Technical Report DMI-0091593, Reaction Engineering International, 2003
10. C. J. Montgomery, W. Zhao, C.-J. Tam, D. R. Eklund and J.-Y. Chen, "CFD Simulation of a 3-D Scramjet Flameholder Using Reduced Chemical Kinetic Mechanisms", AIAA 2003-3874
11. 殷悦, 俞刚, "乙烯超声速燃烧的数值模拟研究", *实验流体力学*, Vol.20, No.2, 2006
12. 殷悦, "气态碳氢燃料超声速燃烧的数值模拟", 硕士论文, 中国科学院力学研究所, 2006
13. D. M. Horning, "A Study of the High-Temperature Auto-ignition and Thermal Decomposition of Hydrocarbons", Report No. TSD-135, Stanford University 2001
14. B. F. Magnussen, "On the Structure of Turbulence and a Generalized Eddy Dissipation Concept for Chemical Reaction in Turbulent Flow", AIAA-1981-0042, The 19th AIAA Meeting, St. Louis, 1981
15. I. R. Gran and B. F. Magnussen, "A numerical study of a bluff-body stabilized diffusion flame. part 2. influence of combustion modeling and finite-rate chemistry", *Combustion Science and Technology*, 119:191, 1996
16. G. D. Stefanidis, B. Merci, G. J. Heynderickx and G. B. Marin, "CFD simulations of steam cracking furnaces using detailed combustion mechanisms", *Computers & Chemical Engineering*, Vol.30, No.4, 2006, pp.635-649
17. S. B. Pope, "Computationally efficient implementation of combustion chemistry using in-situ adaptive tabulation", *Combustion Theory and Modeling*, 1:41-63, 1997
18. J. Li, F. Ma, V. Yang, K.-C. Lin and T. A. Jackson, "A Comprehensive Study of Ignition Transient in an Ethylene-Fueled Scramjet Combustor", AIAA 2007-5025
19. B. F. Magnussen and B. H. Hjertager, "On mathematical models of turbulent combustion with special emphasis on soot formation and combustion", *Symposium (International) on Combustion*, Vol.16, No.1, 1977, pp.719-729

# NUMERICAL SIMULATION OF AUTO-IGNITION AND COMBUSTION OF ETHYLENE IN A SUPERSONIC CROSSFLOW WITH A REDUCED KINETIC MODEL

ZHONG Fengquan<sup>1,2</sup> FAN Xuejun<sup>1,2</sup> YU Gang<sup>1,2</sup> ZHANG Xinyu<sup>1,2</sup>

(1 Key Laboratory of High Temperature Gas Dynamics, Institute of Mechanics, C A S, No.15 Beisihuanxi Road, Beijing 100190, China)

(2 Hypersonic Research Center CAS, No.15 Beisihuanxi Road, Beijing 100190, China)

**Abstract** Obtained with Computer Assisted Reduction Mechanism Code (CARM), a reduced kinetic model including 11 species and 7 reactions was used for the numerical simulation of mixing, auto-ignition and

combustion of ethylene in a supersonic crossflow. The SST  $k-\omega$  turbulence model, the eddy dissipation concept (EDC) model for the combustion and the ISAT integral technique for acceleration of chemistry calculation were also applied. The current numerical work focused on the unsteady process of auto-ignition and combustion of heated ethylene in a crossflow with a Mach number of 2.5 and a total temperature of 1800K. The results revealed that at relatively low fuel/air equivalence ratio, the major combustion region was located just downstream of the cavity and possessed supersonic flow properties. As fuel/air equivalence ratio increased and the amount of the heat released from reactions became larger, thermal choking would occur for the combustor flow and ethylene combusted in a subsonic flow, with a significantly higher efficiency. Moreover, result calculated with a 2-step lumped model indicated that due to the simplicity of the model, the predicted combustion efficient and the total temperature were overrated.

**Keywords** reduced kinetic model, supersonic combustion, numerical simulation, eddy dissipation concept model, auto-ignition delay time