

文章编号: 0258-1825(2020)03-0552-25

超声速燃烧数值模拟中复杂化学反应的建模方法

吴 坤¹, 范学军^{1,2,*}

(1. 中国科学院 力学研究所 高温气体动力学国家重点实验室, 北京 100190;

2. 中国科学院大学 工程科学学院, 北京 100049)

摘 要:高保真度的数值模拟有助于研究超声速条件下点火、熄火、火焰传播以及稳焰等关键物理-化学过程, 推动对冲压发动机中复杂燃烧现象的准确理解与可靠预测。然而, 实际发动机中碳氢燃料燃烧导致的广泛时空尺度对湍流燃烧的建模带来了极大的挑战。为此, 必须首先解决超声速燃烧数值模拟中复杂化学反应的高保真建模问题。本文对超声速燃烧模拟中湍流-化学反应相互作用模型、机理简化以及求解加速方法的研究现状进行了总结。以典型燃料燃烧建模为主线, 介绍了复杂化学反应的高保真建模方法以及不同化学反应机理在超燃模拟中的适用性及其影响。以反应机理多层次保真度评估体系为基础, 进一步明确了简化机理在超燃数值模拟中的优势与不足, 阐明了动态自适应化学方法在研究超声速条件下细致燃烧过程的必要性和可行性。

关键词:超声速燃烧; 碳氢燃料; 复杂化学反应; 简化反应机理; 动态自适应化学

中图分类号: V235.21; V211.22

文献标识码: A

doi: 10.7638/kqdlxxb-2020.0027

Modeling methodology for complex chemical mechanism involved in supersonic combustion simulation

WU Kun¹, FAN Xuejun^{1,2,*}

(1. State Key Laboratory of High Temperature Gas Dynamics, Institute of Mechanics,
Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China;

2. School of Engineering Science, University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China)

Abstract: High-fidelity numerical simulation is considered as an indispensable approach to reveal key physical-chemical process such as ignition, extinction, flame propagation, and stabilization in supersonic flows, and promotes accurate understanding and reliable prediction of complex combustion phenomenon in ramjet engines. However, the extensive spatiotemporal scales caused by the combustion of hydrocarbon fuels in actual engines pose great challenges to turbulent combustion modeling. To overcome these challenges, high-fidelity modeling of complex chemistries in numerical simulation of supersonic combustion should be carefully handled. This paper gives a summary of the main research progresses in turbulence-combustion interaction model, mechanism reduction, and solution acceleration methods in supersonic combustion simulation. Taking typical fuels as prototypes, the high-fidelity modeling of complex chemistries, as well as applicability and influences of different chemical mechanisms in supersonic combustion are introduced. Based on the three-level fidelity evaluation methodology of chemical mechanism, the advantages and disadvantages of reduced mechanism are further clarified, and the necessity and feasibility of using dynamic adaptive chemistry method in the investigation of detailed combustion processes in supersonic flows are also elaborated.

收稿日期: 2020-02-24; 修订日期: 2020-03-20

基金项目: 国家重点实验室青年创新基金(LHD2019CX02)

作者简介: 吴坤(1990-), 男, 博士, 主要研究方向: 湍流燃烧数值模拟, 化学反应机理简化, 射流与喷雾动力学. E-mail: wukun@imech.ac.cn

通信作者: 范学军*(1967-), 男, 博士, 研究员, 博士生导师, 主要研究方向: 吸热碳氢燃料热物性及燃烧特性, 燃烧室性能优化, 燃烧室热环境分析与再生冷却系统研究. E-mail: xfan@imech.ac.cn

引用格式: 吴坤, 范学军. 超声速燃烧数值模拟中复杂化学反应的建模方法[J]. 空气动力学学报, 2020, 38(3): 552-576.

(C)1994-2022, China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved. http://www.cnki.net
doi: 10.7638/kqdlxxb-2020.0027 WU KUN, FAN XUEJUN. Modeling methodology for complex chemical mechanism involved in supersonic combustion simulation[J]. Acta Aerodynamica Sinica, 2020, 38(3): 552-576.

Keywords: supersonic combustion; hydrocarbon fuels; complex chemistry; reduced chemical mechanism; dynamic adaptive chemistry

0 引 言

高超声速吸气式推进系统的研究工作开始于 20 世纪 50 年代,旨在发展以超燃冲压发动机为动力的推进装置,以实现临近空间马赫数 6~15 的高速巡航飞行^[1]。实践表明,超燃冲压发动机结构简单、燃料比冲高且高马赫数下性能优良,是实现大气层内高超声速飞行的理想动力装置之一^[2]。对于实际的超燃冲压发动机而言,燃料的选择将直接影响发动机的性能,因此需要综合考虑燃料的热值、热沉(冷却能力)、反应速率等多方面的性能。考虑到在超燃冲压发动机中气流的驻留时间仅毫秒量级,需要燃料能够尽可能快地实现燃烧释热。氢燃料反应速度快、热值高、热力学-化学性质相对简单,其在超声速燃烧中的应用研究从 20 世纪 50 年代便已经开始,经历了 1980 年代美国空天飞机计划 NASP,并成功用于 2004 年美国 X-43A 的飞行试验。相比于氢燃料,碳氢燃料的化学反应速率慢(比氢燃料慢约 3 个数量级)、热值低(单位质量热值只有氢的 1/3)、热沉有限(单位质量热沉仅为氢的 1/6)。此外,在实际发动机的应用中还需考虑到液态燃料与空气的雾化、蒸发过程。

液态氢燃料的重要缺点在于体积能量密度较低,仅为液态煤油的四分之一,因此并不适合用于在大气层中巡航的高超声速飞行器。此外,氢燃料的生产成本要远高于碳氢燃料,同时考虑到贮存和维护成本,其实际应用还需要克服很多困难。虽然液态碳氢燃料与氢燃料相比存在化学反应速率慢、热值低以及热沉有限等不足,但更易存储、携带且便于实际应用^[3]。X-51A 的飞行试验验证,在充分掌握碳氢燃料理化特性的基础上,这些缺点在一定程度上是可以克服的。尽管液态氢燃料在未来的 $Ma > 10$ 的跨大气层飞行中不可或缺,但是它在马赫数 4~8 时没有明显优势。一般认为在飞行马赫数 4~8 的条件下碳氢燃料是更为理想的选择^[2]。

为满足高效、稳定的工作要求,发动机内部的复杂超声速燃烧过程引起了研究者的持续关注。超声速燃烧的准确建模与数值模拟一直是超声速燃烧过程研究的重要内容之一。反应流中流动-化学反应的相互作用一般可用流动时间尺度 τ_f 和化学反应时间尺度 τ_c 的比值,即 Damköhler 数 ($Da = \tau_f / \tau_c$) 来表征。对复杂碳氢燃料的超声速燃烧模拟而言,由于涉及反应众多,各反应的特征时间差异较大,缩比模型

难以保持 Da 不变,故流动模拟只能基于全尺寸模型以准确刻画相应的燃烧现象。此外,在燃料喷注以及稳焰区域,一般都存在复杂的三维流动,因此通常不能做二维简化。

基于以上两点,目前在超燃数值模拟中,鉴于燃烧室的实际尺寸,一般网格量都较大,为平衡计算代价,对燃烧反应的模拟往往只能考虑单步或几步化学反应。然而,在稳焰、熄火等极限燃烧现象中流场不同位置或不同时刻存在不同的主导反应机制^[4],则相应的化学反应特征时间也不相同。为了准确捕捉关键的物理-化学过程,燃烧数值模拟必须包含详细的化学反应信息^[5]。此时超燃冲压发动机中实际使用的碳氢燃料却给数值模拟带来了极大的困难。如图 1 所示,随着燃料中碳数的增加,其详细化学反应机理中的组分数与基元反应数呈指数增加。对于超声速燃烧数值模拟中常用的乙烯和煤油化学反应机理而言,其机理中一般需要 50~1000 个组分,相应地必须求解大量的组分守恒方程。Chen^[6]在甲烷预混火焰的直接数值模拟中发现求解详细化学反应所需的 CPU 时间占总时间比例超过 90%,随着燃料复杂度增加,其占比将进一步增大。另一方面,反应过程中不同组分的特征时间差异较大,为此详细化学反应将包含广泛的时间尺度,导致化学反应流模拟中的刚性问题,使得相应的微分方程求解困难。一般而言,燃料组成越复杂,其详细化学反应机理涉及的特征时间尺度范围越大,刚性方程求解越困难,导致计算量

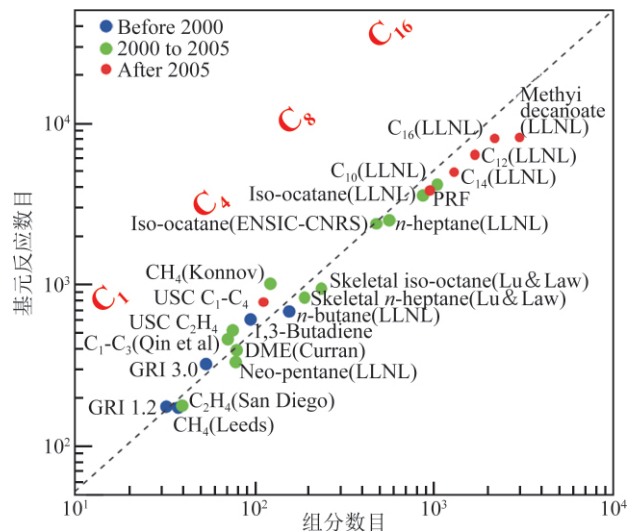


图 1 不同燃料化学反应机理的组分与反应数^[5]

Fig.1 The number of species and reactions in the chemical mechanisms of different fuels^[5]

急剧增加。因此,如何有效地处理复杂化学反应机理与广泛的时间尺度将成为湍流燃烧数值模拟的关键。

关于超声速条件下湍流-化学反应相互作用建模的研究,此前已有不少工作,包括火焰面模型^[7]、PDF 类模型^[8]以及有限化学反应速率模型^[9]在超声速燃烧模拟中的应用。本文将主要介绍超声速燃烧数值模拟中复杂化学反应的高保真建模、典型燃料燃烧反应的建模实践以及不同化学反应机理在超声速燃烧模拟中的适用性及其影响。基于简化化学反应机理的评估体系,明确基于简化反应机理的超燃模拟的不足,进一步介绍适用于模拟超声速条件下非正常燃烧现象的化学反应建模方法。

1 复杂化学反应机理处理方法

燃烧问题涉及到广泛的时空尺度、复杂的物理-化学过程,从宏观运动来看,所涉及的空间尺度范围为 $10^{-6} \sim 1 \text{ m}$ ^[10]。此外,燃烧过程还涉及如液体燃料的蒸发/雾化、辐射、湍流-化学反应相互作用、非平衡流等过程。一般而言,在超燃冲压发动机的燃烧过程中,辐射效应影响相对较小,对于气态燃料最为重要的是湍流-化学反应交互作用。为了对超声速燃烧室中的湍流化学反应流进行准确模拟,除了要处理复杂化学反应外,还要对湍流-化学反应的相互作用进行建模。实际上湍流燃烧模型的选取也影响到化学反应的建模与求解。为此,本节将首先介绍超燃数值模拟中常用的湍流燃烧模型。此外,在碳氢燃料的模拟中,复杂化学反应导致计算量急剧增加,因此反应机理的简化与求解加速也至关重要。

1.1 超声速条件下湍流-化学反应相互作用模型

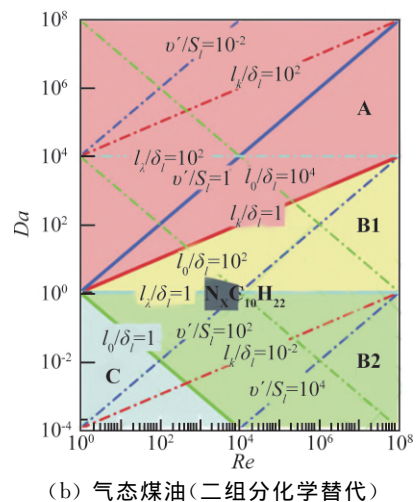
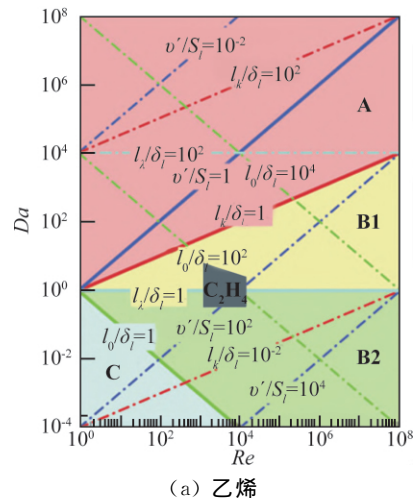
为了封闭 RANS 模型或 LES 滤波后的控制方程,除了要模拟亚格子湍流之外,还需要模化平均或者滤波后的化学反应源项。由于该反应源项是温度与组分浓度的非线性函数,采用湍流模型中传统的矩方法进行封闭较为困难。早期的湍流燃烧模型,如涡耗散(Eddy Dissipation Model)^[11, 12]与涡破碎(Eddy Break up Model)^[13]等模型中都假设化学反应速率无限快,即流动特征时间远大于化学反应特征时间。由于忽略了有限化学反应速率的影响,不适用于复杂的燃烧模式。

目前在超声速推进系统中主要采用以下五种湍流燃烧模型,包括准层流燃烧模型、火焰面模型(Flamelet Model)^[14]、部分搅拌反应器模型(PaSR Model)^[15]、概率密度函数模型(PDF Model)^[16]以及线性涡模型(LEM Model)^[17]。

1) 准层流模型忽略了湍流-化学反应的交互作

用,直接以平均或滤波参数计算化学反应源项,但是由于其计算代价小且对稳态燃烧问题能给出较为准确的结果,在超燃模拟中仍然有较多使用^[18-19]。

2) 火焰面模型基于湍流的尺度分离假设,认为燃烧中的组分浓度和热力学量可以表示为少数几个代表变量(如混合分数、进度变量)的函数,其中的代表模型包括火焰面模型,火焰面/进度变量模型等。与不可压缩湍流燃烧不同,超声速燃烧室中的湍流-化学反应存在更为强烈的相互作用。流场中可能出现激波,导致压强和温度出现间断,因此火焰面模型在超燃模拟中的适用性一直存在争议^[7, 20]。尽管针对超声速燃烧模拟的火焰面模型改进工作从未间断^[21-25]。但李晓鹏等^[26]基于对碳氢燃料超燃流场的尺度分析(如图 2),发现随着燃料复杂度增加,火焰模式以旋涡小火焰为主。因此,火焰面模型在氢气超燃中适用性较好,但对于乙烯和煤油等复杂碳氢燃料



l_k 为 Kolmogorov 尺度、 l_λ 为泰勒尺度、 l_0 为积分尺度、 δ_f 为火焰厚度

图 2 超声速燃烧室中的典型湍流燃烧模式分区^[26]

Fig.2 Typical turbulence-combustion interaction regime in scramjet combustor^[26]

的模拟还需谨慎。

3) PaSR 模型以部分搅拌反应器模拟湍流燃烧过程,以特征时间尺度 τ_f 和 τ_c 分别来表征湍流混合与化学反应两个过程^[15]。由此,滤波后的化学反应源项可由滤波后的温度 \tilde{T} 、压力 \tilde{p} 和组分浓度 \tilde{Y}_k 表示, $\tilde{\omega} = \kappa \omega(\tilde{T}, \tilde{p}, \tilde{Y}_k)$, 其中 $\kappa \sim \tau_c / (\tau_c + \tau_f)$ 。PaSR 模型由于其模型简单,计算量小,同时程序实现容易等优势在航空发动机、超声速燃烧室模拟中获得广泛应用^[27-30]。

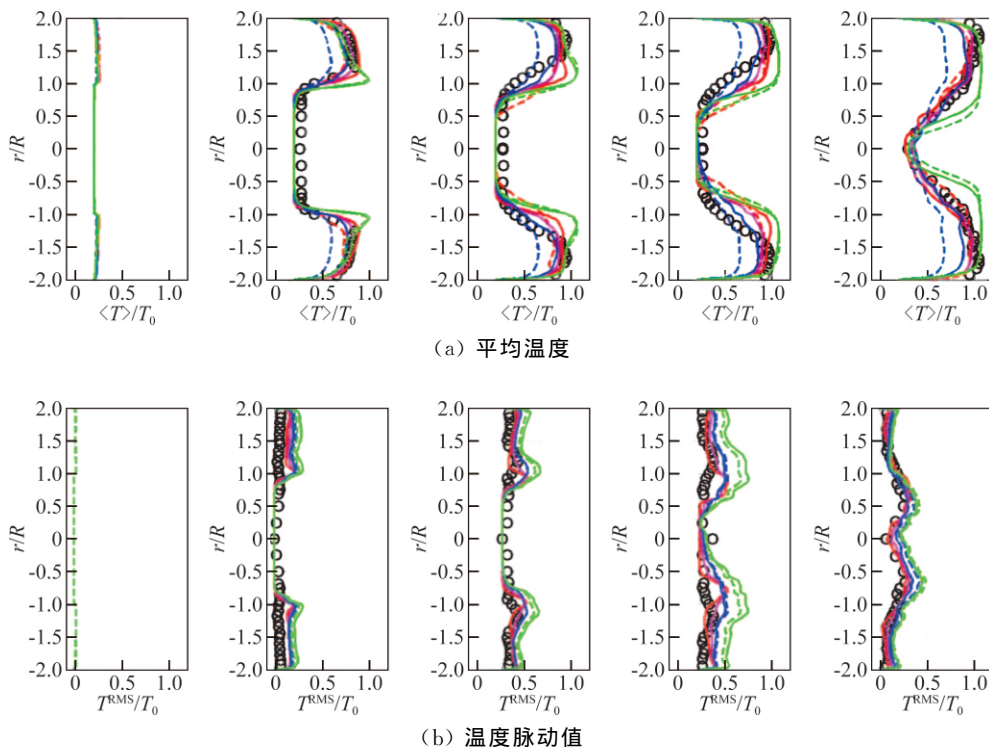
4) PDF 方法起源于 Pope 的开创性工作^[16],基于 PDF 方法的输运方程中化学反应源项能够自行封闭,可以准确地模拟详细化学反应动力学过程,是一种普适的湍流燃烧模型。然而,PDF 方法是在低速不可压缩流基础上发展起来的,在可压缩流的流动间断处计算的收敛存在一定困难。

5) 线性涡模型(LEM)最早由 Memon 等^[31]应用于燃烧的大涡模拟。LES-LEM 方法的实现分为两个子过程,第一个过程是在每一个子网格中独立进行线性涡计算,第二个过程中通过叠加过程实现亚格子信息在网格边界上的输运。然而, Fureby^[32]指出 LEM 模型存在计算量偏大的问题,因此目前采用 LEM 的计算仅限于一些简单的模型燃烧室。

Fedina 等^[33]在丙烷燃料后台阶突扩燃烧室中对

PaSR 模型、EDC 模型、增厚火焰模型(Thickened Flame Model, TFM)以及火焰面进度变量模型(Flamelet Progress Variable model, FPV)进行了比较。如图 3 所示,三种有限反应速率模型(PaSR、EDC 和 TFM)的结果跟实验更加吻合,其中 PaSR 模型的结果相对误差最小。同时, Fureby^[34]在丙烷燃料旋流燃烧室的模拟发现,尽管四种模型都与实验结果定性相符,但是考虑 NO 和 CO 等污染物的定量预测,有限化学反应速率模型(PaSR 与 EDC)还是要明显优于 FPV 模型。由于有限化学反应速率模型(PaSR 和 EDC 模型)在建模时考虑了多尺度相互作用,因此更适合复杂的湍流-化学反应相互作用问题^[35]。

由于在超声速燃烧室中难以进行精细的实验测量,因此可用于进行数值验证的数据库并不多。而且实验测量一般仅限于壁面静压、平均速度与流场温度等,远不足以支撑高精度湍流模型的发展。目前超声速燃烧中普遍采用的湍流燃烧模型基本都是从不可压缩反应流中扩展而来,仅在少数超燃实验中得到证,其普适性和计算精度还有待进一步确认和改进。正如 Gonzalez-Juez 等^[36]所言,考虑到目前高速推进系统数值模拟中湍流燃烧模型发展的困境,也许提高所采用的化学反应机理的可靠性是当下更好的选择。



○ 为实验值,红色实线 PaSR 模型,洋红色实线 EDC,蓝色实线 TFM-F=3,蓝色虚线 TFM-F=6,绿色实线 FPV-1,绿色虚线 FPV-2

图 3 $x/r=0, 1.0, 3.0, 5.0, 12.0$ 处的平均温度和温度脉动值^[33]

1.2 化学反应机理简化

在化学反应流的数值模拟中,总的计算量基本与组分数的平方成正比,随之而来的是复杂的耦合非线性微分方程组,同时反应涉及到的宽范围时间尺度将导致方程的刚性突出^[37]。对详细化学反应机理进行简化,通过去除影响较小的组分和反应,可以极大地缩减微分方程组的规模,同时还可以相应地降低求解方程的刚性。在详细反应机理的基础上进行适当简化,采用简化机理进行化学反应流的模拟,可在保证化学反应求解精度的同时大幅提高计算效率。

目前常用的机理简化方法的原理大致分为两种类型^[38]。第一类方法主要基于时间尺度分析,将化学反应空间分为快速和慢速两个流形,通过去除快时间尺度对应的化学反应实现微分方程刚性的降低。其中典型方法是准稳态分析方法(Quasi-Steady State Approximation, QSSA)^[39]、计算奇异摄动法(Computational Singular Perturbation, CSP)^[40]、本征低维流形方法(Intrinsic Low Dimensional Manifold, ILDM)^[41]与部分平衡近似(Partial Equilibrium Approximation, PEA)^[42]。另一类方法的核心在于确定和去除多余的组分与反应。尽管复杂碳氢燃料的反应机理中包含大量的组分和化学反应,但是部分组分和反应对模拟所关心的化学反应特征影响较小,在一定误差阈值内可以忽略这些组分和反应。较早被用于确定这些组分和反应的方法是敏感性分析法(Sensitivity Analysis, SA)^[43-44]。计算所选目标参数(如点火延迟时间、层流火焰速度等)对某组分或者基元反应的敏感程度。通过敏感度的大小表征该组分或基元反应对目标参数的影响,通过去除相应的组分或反应,以达到简化机理的目的。敏感性分析方法涉及到雅克比矩阵的数值操作,组分数目较多的化学反应将带来很大的计算量。对于燃烧室中的燃烧,考虑到反应变量的空间非均匀性,为保证计算结果的准确性,一般需要在流场中多个空间位置进行采样,使得敏感性分析较为困难。目前,敏感性分析法通常与其他机理简化方法耦合使用,即对已通过其他方法进行简化的机理进行再简化^[45]。

为了克服敏感性分析计算量大的缺点, Lu 与 Law^[46]提出了基于组分间相互作用的直接关联图法(Directed Related Graph, DRG)。以 DRG 方法为基础,又衍生出其他的机理简化方法,包括考虑误差传递的直接关联图法(DRG with Error Propagating, DRGEP)^[47]、结合敏感性分析的考虑误差传递的直接关联图法(DRGEP Aided Sensitivity Analysis, DRGEP-SA)^[48]、反应路径分析法(Path Flux

Analysis, PFA)^[49]以及全局反应路径选取法(Global Pathway Selection, GPS)^[50]。与敏感性分析法相比,基于直接关联图的方法具有计算量相对较小、机理简化效率高等优势,因此也被应用于化学反应的动态简化^[51]。

1.3 列表-查询法

在燃烧数值模拟中,考虑到化学反应求解的计算代价,可以通过建表-插值方法,充分利用已求解状态,提高整体求解效率。当前已经发展出了不少列表-插值类的方法,包括结构化查表法(Structured Lookup Tabulation)^[52]、再复制模拟(Repro-Modeling)^[53]、人工神经网络(Artificial Neural Networks, ANN)^[54]、分段重用解映射(Piecewise Reusable Implementation of Solution Mapping, PRISM)^[55]以及动态自适应建表(In-Situ Adaptive Tabulation, ISAT)^[56]。

目前,在超声速燃烧数值模拟中应用最多的是动态自适应建表方法 ISAT (In-Situ Adaptive Tabulation)^[57-59],在 ISAT 方法中首先需要定义由温度 T 、压力 p 、以及组分质量分数 Y_k 构成的化学-热力学状态变量 $\psi = \{Y_1, Y_2, \dots, Y_N, T, p\}$ 。在积分时间步 Δt 下对初始状态为 $\psi^0 = \psi(t_0)$ 的化学反应方程进行积分,得到反应终态 $\psi(t_0 + \Delta t)$,两状态之间的对应关系定义为映射函数 $\mathbf{R}(\psi^0)$ 。在实际计算中,对组分演化的 ODE 方程进行积分时,先向建表层提供查询向量 ψ^q 。ISAT 模块会首先尝试在之前存储的结果中查找映射函数 $\mathbf{R}(\psi^0)$,之后通过线性近似获得当前时间步的映射函数:

$$\mathbf{R}(\psi^q) \approx \mathbf{R}^l(\psi^0) = \mathbf{R}(\psi^0) + \delta \mathbf{R}^l \quad (1)$$

其中 $\delta \mathbf{R}^l = \mathbf{A}(\psi^0)(\psi^q - \psi^0)$,而 \mathbf{A} 为映射梯度函数矩阵:

$$A_{ij}(\psi^0) = \frac{\partial R_i(\psi^0)}{\partial \psi_j} \quad (2)$$

公式(1)定义的线性近似在精度区域(Region of Accuracy, ROA)中被认为是成立的,其中 ROA 为以 ψ^0 为中心的满足局部误差 ϵ_{local} 的 ψ^q 区域,定义为:

$$\epsilon_{\text{local}} = |\mathbf{R}(\psi^q) - \mathbf{R}^l(\psi^0)| = |\delta \mathbf{R} - \delta \mathbf{R}^l| \leq \epsilon_{\text{ISAT}} \quad (3)$$

其中, $\delta \mathbf{R} = \mathbf{R}(\psi^q) - \mathbf{R}^0(\psi^q)$,而 ϵ_{ISAT} 为给定误差阈值。由于 $\mathbf{R}(\psi^q)$ 在实际查表过程中并不可得,因此 ROA 通常近似为状态变量空间中的守恒超椭圆,即精度椭圆:

$$EOA = \delta \psi^T \tilde{\mathbf{A}}^T \tilde{\mathbf{B}}^T \tilde{\mathbf{B}} \tilde{\mathbf{A}} \delta \psi \leq \epsilon_{\text{ISAT}}^2 \quad (4)$$

其中, $\tilde{\mathbf{B}}$ 为给定的归一化矩阵, $\tilde{\mathbf{A}}$ 为 \mathbf{A} 的修正矩阵,而 $\delta \psi = \psi^q - \psi^0$ 。如果在当前的精度椭圆中没有查找到

需要的值, ISAT 算法将会进行扩展或添加操作:

1) 直接对反应 ODE 方程求解, 并通过方程(1)计算出局部误差; 2) 如果局部误差大于给定阈值 ϵ_{ISAT} , 将会在存储 $R(\psi^q)$ 的二叉树中添加新的叶子节点, 否则会判定当前的 EOA 太过保守, 进而扩展 EOA 以包括当前的 ψ^q 。此外, 考虑到超声速流场中的复杂波系结构, 与低速不可压缩反应流模拟不同, 在超声速燃烧数值模拟中压力也应作为 ISAT 算法的建表变量^[60]。

2 超燃数值模拟中化学反应建模研究现状与分析

尽管氢燃料与碳氢燃料在马赫数 4~8 相比没有明显优势, 但是由于其反应速率快, 物理-化学性质相对简单, 在超声速燃烧的基础研究方面有着非常广泛的应用。乙烯作为煤油复杂裂解产物的主要成分, 通常也被用来作为裂解煤油的替代组分^[61], 作为碳氢燃料的典型代表, 广泛应用于超声速燃烧的实验研究^[62-64]。

相较于煤油而言, 作为纯净物的氢气和乙烯理化性质相对比较明确, 为此本节将首先介绍超燃数值模拟中常用的氢气和乙烯详细化学反应机理。在此基础上, 进一步总结氢气和乙烯简化机理的发展现状, 分析化学反应建模对超燃数值模拟的影响。

与氢气和乙烯不同, 航空煤油是 C_7-C_{16} 大分子复杂碳氢化合物的混合物, 包含链烷烃、环烷烃以及芳香烃在内的多种组分^[65]。同时, 不同原油产地、型号、批次、加工工艺以及不同添加剂的航空煤油其组分也不尽相同。因此, 对煤油的燃烧反应建模需要同时解决三个方面的问题——准确的替代燃料模型, 详细化学反应机理构建, 实用简化反应机理的发展与应用。

2.1 氢燃料超声速燃烧模拟

2.1.1 常用氢气反应机理

表 1 总结了文献中用于超燃数值模拟的氢气反应机理。值得注意的是, Zhukov^[69] 机理主要针对较高环境压力下的火箭燃烧室开发, 在超燃数值模拟中较少采用。在此前的超燃数值模拟中, 广泛采用的氢气反应机理为 Jachimowski^[70] 于 1988 年开发的 9 组分 20 步机理(表示为: J-9S-20R)。由于该机理较为复杂, 带来极大的计算代价, 因此只在 Potturi 与 Edwards^[73] 的混合 LES/RANS 模拟等少数几个研究工作得到应用。基于 Jachimowski^[70] 的 J-9S-20R 详细机理, 采用准稳态假设以去除反应中间组分 HO_2 和 H_2O_2 , Eklund^[68] 得到 7 组分 7 步的简化反应机理(E-7S-7R)。

随着对氢气反应机理的认识逐步深入, 尤其是近

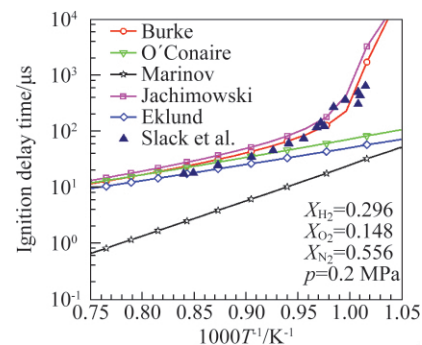
表 1 超燃数值模拟中常用的氢气反应机理

Table 1 Hydrogen oxidation mechanisms used in supersonic combustion simulations

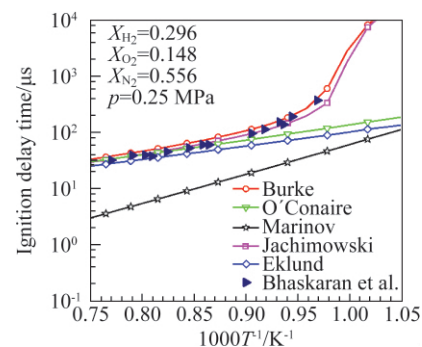
Name	Abbreviation	Species	Reaction	Pressure-dependent
Marinov ^[66]	M-3S-1R	3 + bath gas	1	No
Rogers ^[67]	R-4S-2R	3 + bath gas	2	No
Eklund ^[68]	E-7S-7R	6 + bath gas	7	No
Zhukov ^[69]	Z-9S-3R	8 + bath gas	13	No
Jachimowski ^[70]	J-9S-19R	8 + bath gas	19	No
O'Conaire ^[71]	O-9S-23R	8 + bath gas	23	Yes
Burke ^[72]	B-9S-23R	9 + bath gas	23	Yes

Note: bath gas is N_2 , Ar or He

年来大量可靠的实验测量数据以及采用量子化学计算对重要基元反应速率的修正^[74], Burke 等^[72] 提出了 9 组分 23 步反应的氢气详细机理(B-9S-23R), 并在较宽的温度压力范围内进行了充分验证。笔者^[75] 在接近大气压条件下, 计算得到五组氢气氧化反应机理的点火延迟时间, 如图 4 所示。可以看出 Marinov 的 M-3S-1R 总包机理在整个温度范围内都极大地低估了点火延迟时间。相比而言 Eklund 的 E-7S-7R 简化机理与实验结果吻合较好, 但是在低温区(~ 1000 K)时, 仍然存在较大误差, 而 O'Conaire 的 O-9S-23R 机理的预测结果与 E-7S-7R 简化机理相比没有明显改善。Burke 的 B-9S-23R 和 Jachimowski 的 J-9S-20R 机理相比, 结果相差不大, 但是与实验结果的定量比



(a) $p = 0.20$ MPa



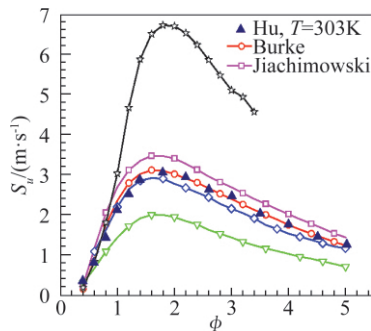
(b) $p = 0.25$ MPa

图 4 氢气点火延迟时间^[75]与实验测量结果比较^[76-77]

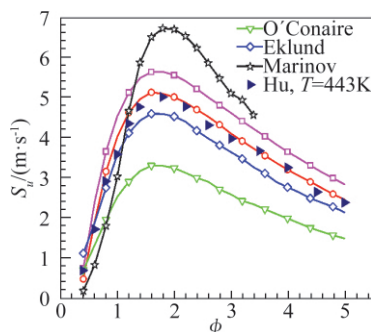
Fig. 4 Comparison of ignition delay time of different hydrogen mechanism with the experimental data^[76-77]

较来看 B-9S-23R 机理更好一些。

图 5 中比较了不同氢气反应机理的层流火焰速度计算结果^[75], 其中 Marinov 的 M-3S-1R 机理显著地高估了层流火焰速度, O'Conaire 的 O-9S-23R 机理却给出了相反的结果。在两组不同的初始温度下, Burke 的 B-9S-23R 机理的计算结果与实验均吻合得非常好, Jiachimowoski 的 J-9S-20R 机理在富燃条件下高估了层流火焰速度, 最大相对误差分别为 13% 和 12%。值得注意的是, 在两组不同的初始温度下, 从贫燃到富燃条件, Eklund 的 E-7S-7R 机理给出的预测结果与实验结果吻合都相当好。



(a) $T=303\text{ K}$



(b) $T=443\text{ K}$

图 5 采用不同氢气反应机理预测的层流火焰速度^[75]与实验测量^[78]的比较

Fig.5 Comparison of the laminar flame speed of hydrogen-air mixture under atmospheric pressure with experimental data^[78]

在实际的反应流模拟中, 考虑到流动与化学反应的跨尺度相互作用, 仅考察零维点火延迟和一维层流火焰传播是不够的。Zhou 等^[79]在低速氢气非预混射流火焰 ($Re=9300$) 的模拟中比较了五组氢气反应机理 (包括四组详细反应机理), GRI 3.0^[80]、Davis^[81]、Hong^[82] 以及 O'Conaire 的 O-9S-23R 机理和 Boivin^[83] 3 步简化机理。如图 6 所示, 简化机理预测的火焰温度比详细机理高出 200~300 K, 同时由于不能准确模拟反应路径, 重要中间产物如 HO_2 、H 以及 OH 的预测均存在较大偏差, 导致对火焰高度预测的较大差异。此外, Zhou 等^[79]还指出对详细化学反应机理而言, 零维点火延迟并不能给出实际火焰计算的正确估计。

2.1.2 氢气反应机理对超燃数值模拟的影响

在超声速燃烧的数值模拟中, 由于流动速度更快 (约为 1000 m/s), 化学反应建模中的误差会显著放大。Kestler 等^[84]采用 RANS 模型结合 Eklund 的 E-7S-7R 与 O'Conaire 的 O-9S-23R 两组机理对壁面直喷超声速燃烧室进行了模拟, 观察到在距离燃料喷口 0.4 m 之前两组机理预测的压力分布基本一致, 但是随后 O'Conaire 的 O-9S-23R 机理模拟中由于释热分布的差异, 出现两个较高的压力峰值。Gerlinger 等^[85]在超声速射流火焰的模拟中比较了 6 组不同的氢气反应机理。通过零维点火延迟与超声速射流火焰抬升距离的比较, 发现 O'Conaire 的 O-9S-23R 和 Jiachimowoski 的 J-9S-20R 机理的预测结果与实验吻合得更好。而 GRI 3.0 机理的点火延迟时间最长, 导致火焰抬升距离与实验偏差最大, 因而不推荐 GRI 3.0 机理用于超燃数值模拟。Kumaran 等^[86]在支板喷注燃烧室的模拟中考察了单步总包机理^[87], 由于单步机理释热过于集中导致壁面静温的沿程分布与实验值相差较大, 因此要准确预测静压分布以及推力性能, 模拟中选择化学反应机理时, 除了点火延迟时

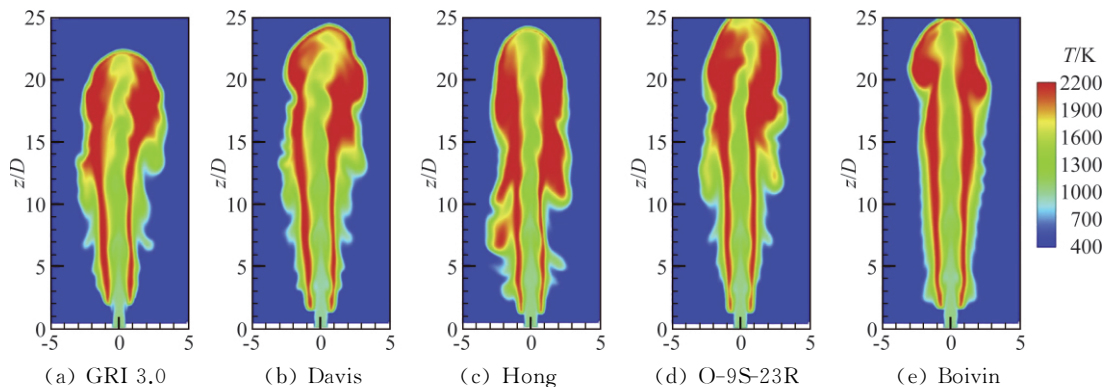
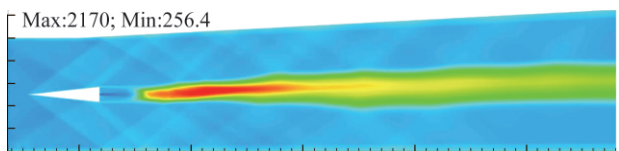


图 6 五组不同化学反应机理预测的 $t=24\text{ ms}$ 中间截面瞬时温度云图^[79]

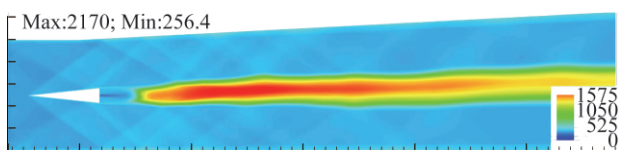
Fig.6 Instantaneous cross-sectional temperature profile at time $t=24\text{ ms}$ ^[79]

间和火焰速度外,还需要考虑释热率。基于壁面平行喷注超声速燃烧室的混合 LES/RANS 模拟, Edwards 等^[88]认为由于 Jachimowski 的 J-9S-20R 机理反应速率较 Eklund 的 E-7S-7R 机理更慢,因此更倾向于在靠近壁面一侧的低速区燃烧。

基于上述研究,在超燃数值模拟中采用简化机理的不足也逐渐被认识,因此近年来进行了以 DLR 燃烧室为基础、探讨化学反应建模影响的一系列研究工作。Berglund 等^[28]在支板喷注超声速燃烧的大涡模拟中发现 Marinov 的 M-3S-1R 总包机理与 Rogers 的 R-4S-2R 和 Davidenko^[89]七组分七步反应机理相比,极大地低估了点火延迟时间,导致火焰稳定位置大幅前移。Fureby 等^[90]发现 Rogers 的 R-4S-2R 反应机理与 Davidenko 机理^[89]相比,无法准确预测燃烧室内的静温分布。Potturi 与 Edwards^[73]的研究中同时采用了 Jachimowski 的 J-9S-20R 和 Eklund 的 E-7S-7R 两组氢气氧化反应机理。从图 7 可以看出,9 组分详细反应机理预测的高温区比 7 组分简化机理要大得多,但是两者预测的火焰位置均远离支板,与实验观察不符。图 8 展示了五组不同的化学反应机理模拟的 DLR 燃烧室 H₂O 质量分数的空间分布,不难看出 Burke 的 B-9S-23R 机理预测的 H₂O 分布区域最小,而 Marinov 的 M-3S-1R 机理给出的分布区域最大,因此后者预测的燃烧效率比前者高 5% 左右^[91]。笔者^[5]进一步探讨了化学反应机理对 DLR 燃烧室火焰稳定预测的影响,发现 Burke 的 B-9S-23R 机理预测到支板稳焰燃烧室沿流向存在引导-转变-剧烈燃烧三个分区,Eklund 的 E-7S-7R 机理能够定性复现三个分区特征,而 Marinov 的 M-3S-1R 机理不能正确地预测该稳焰模式。由此可见,要准确模拟超声速条件下的复杂燃烧现象,对化学反应进行高保真建模是非常关键的一环。



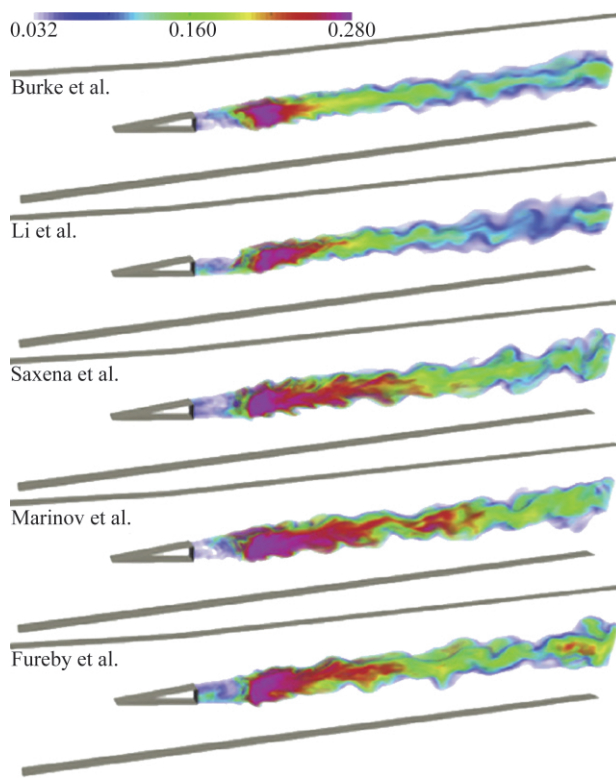
(a) E-7S-7R



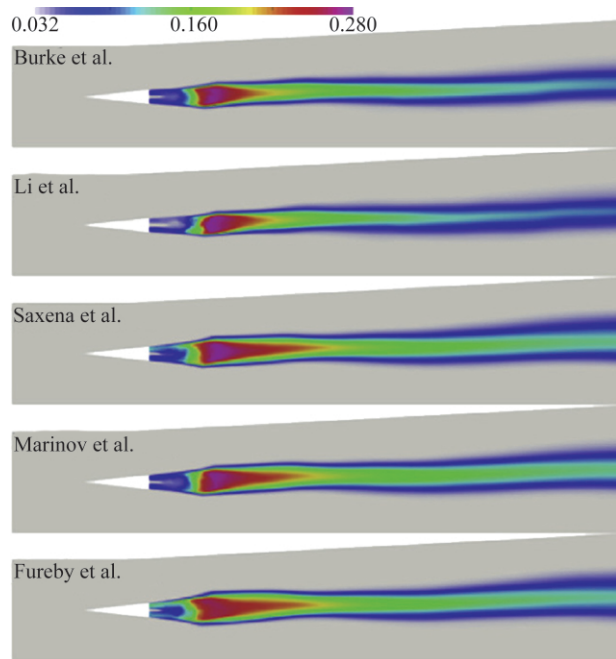
(b) J-9S-20R

图 7 采用不同氢气反应机理预测的流场平均温度云图^[73]

Fig. 7 Time-averaged temperature contour predicted by different hydrogen chemical mechanism^[73]



(a) 瞬时值



(b) 平均值

图 8 不同化学反应机理预测的 H₂O 质量分数云图^[91]

Fig. 8 Instantaneous and time-averaged Y_{H₂O} contours for five detailed chemical kinetics mechanism^[91]

2.2 乙烯燃料超声速燃烧模拟

2.2.1 常用乙烯反应机理

当前常用的乙烯详细化学反应机理见表 2。由 Gas Research Institute 为天然气燃烧而开发的 GRI 3.0 机理^[80]包含 53 组分, 325 步反应, 并在温度

1000~2500 K、压力($1.3 \times 10^{-4} \sim 1.0$) MPa、当量比 0.1~5 的工况范围内进行了优化。在天然气的化学动力学机理方面,劳伦斯·利弗摩尔国家实验室(Lawrence Livermore National Laboratory, LLNL)也提出了由 126 组分、639 反应构成的详细机理^[92],这一机理主要目的是包含污染物生成的反应,可适用的温度范围较低,仅为 600~1100 K。加州大学圣迭戈分校(University of California, San Diego, UCSD)的研究者们提出了 57 组分、269 步反应的乙烯详细机理^[93],可适用于温度 1000~2500 K、压力 0.05~1.0 MPa、当量比 0.5~2 的工况范围,并与激波管实验获得的点火延迟时间进行了对比。南加州大学

(University of Southern California, USC)的王海等^[94]也提出了 H₂/CO/C₁-C₄ 的高温化学动力学机理 USC II,包含 52 组分、367 步反应,在工况范围为温度 950~2200 K、压力 0.07~0.3 MPa 适用。Laskin 等^[95]针对乙烯和乙炔提出了包含 75 组分、529 步反应的详细机理,并就乙烯的点火延迟时间、层流火焰速度在温度 1000~2300 K、压力 0.05~0.3 MPa、当量比 0.5~3 的工况范围进行了验证。Konnov^[96]针对小分子的碳氢燃料提出了相应的详细机理,包含组分 127 个,反应 1207 步,在温度 630~1040 K 的范围内与激波管实验数据进行了验证。此外, Qin 等^[97]还进一步提出了优化的 C₁-C₃ 机理。

表 2 常用乙烯详细机理

Table 2 Summary of the detailed ethylene mechanisms

Mechanism	GRI 3.0 ^[80]	LLNL ^[92]	UCSD ^[93]	USCII ^[94]	Laskin ^[95]	Konnov ^[96]	Qin ^[97]
Species	53	155	57	111	75	127	70
Reaction	325	689	269	784	529	1207	463

Xu 等^[98]对上述乙烯详细机理(Laskin 除外)进行了详细验证与分析,发现消耗 O 和 OH 的初始反应以及紧随其后的乙烯基氧化反应,对乙烯的点火延迟有非常大的影响。此外敏感度分析表明:在层流火焰预测方面,贫燃条件下 H-O 与 C₁ 反应影响较大;而在富燃条件下,层流火焰速度对 C₂ 机理更为敏感。由于 LLNL 机理主要针对 *n*-butane 开发,而 Konnov 机理适用的温度范围为 630~1040 K,远低于于超声速燃烧室的工况范围,因此这两组机理在接下来的详细机理的比较中将不再考虑。

2.2.2 针对 Scramjet 飞行条件的反应机理适用性分析

Scramjet 典型的飞行走廊对应的工况范围为^[99]:压力~0.1 MPa、温度 1000~2500 K、当量比 0.5~2.0。为了在给定的工况下比较以上不同机理的化学动力学特性,笔者考察了如点火延迟时间、层流火焰速度、绝热火焰温度以及释热率等特征参数^[100]。图 9 给出了不同压力下 5 组不同的乙烯详细机理的点火延迟时间与实验数据的对比。从图 9(a)可以看出,在压力接近一个大气压的条件下,UCSD 和 UCSII 机理的计算结果与实验数据吻合得非常好。Qin 机理给出了基本相似的趋势,却极大地高估了点火延迟时间。Laskin 机理在高温区与实验数据吻合较好,但是在温度低于 1450 K 的区间却相对低估了点火延迟。相反,GRI 3.0 机理在低温区与实验数据吻合良好,却在高温区高估了点火延迟。当压力提高到接近 3 个大气压时,UCSD 机理与实验数据仍然能很好地吻合,而 UCSII 机理在低温区误差相对较大。Qin 机理在整个工况范围内依然高估了点火

延迟时间,而 GRI 3.0 机理的结果有所改善,但在低温区仍然存在较大误差。

图 10 为层流火焰速度计算结果与两组不同实验数据的比较。可以看出 GRI 3.0 机理的计算结果与两组实验结果都存在很大的偏差,对 Egolfopoulos^[102]

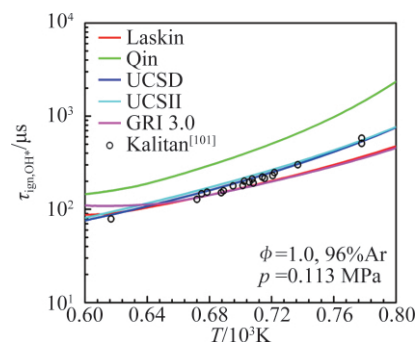
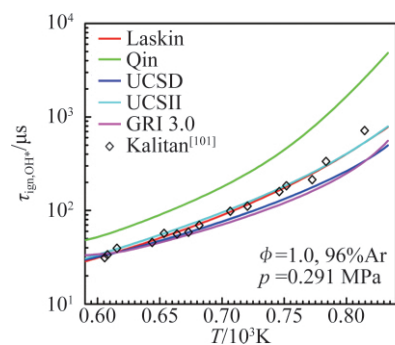
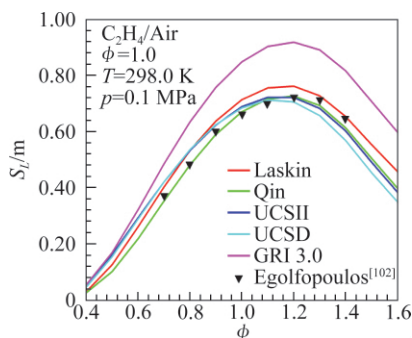
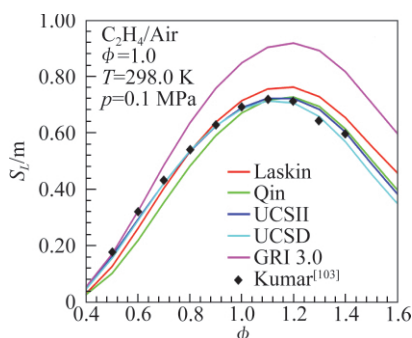
(a) $p=0.113$ MPa(b) $p=0.291$ MPa

图 9 乙烯-空气当量混合物,不同详细机理计算的点火延迟时间^[100]与 Kalitan 实验^[101]比较

Fig. 9 Ignition delays predicted by different detailed mechanisms^[100] and the experimental data from Kalitan et al.^[101]



(a) Comparison with Egolfopoulos's experiment



(b) Comparison with Kumar's experiment

图 10 初始温度 298 K 与初始压力 0.1 MPa 的条件下,不同详细机理计算的层流火焰速度^[100]与实验结果的对比
Fig. 10 Laminar flame speeds predicted by different detailed ethylene mechanisms^[100] and the experimental data at $p=0.1$ MPa and $T=298$ K for stoichiometric ethylene/air mixture

和 Kumar^[103] 实验的平均相对误差分别为 27.9% 和 20.8%。

笔者^[75] 为了更加系统地比较不同乙烯详细机理在点火延迟时间和层流火焰速度预测方面的准确性,分别与五组点火延迟实验和四组层流火焰速度实验结果进行了比较。结果表明,UCSD 和 USCII 机理在超燃发动机的工况范围内比其他几组机理更为合适。考虑到 UCSD 机理的组分数和反应数比 USCII 机理更小,因此在超燃数值模拟中建议将 UCSD 机理作为基准。

2.2.3 简化反应机理及其应用

关于碳氢燃料简化机理,Westbrook 等^[104] 在早期做了比较系统的工作,提出了包括 5 组分 1 步反应、6 组分 2 步反应以及多步总包机理。其中两步反应机理假设乙烯通过一步反应 $C_2H_4 + 2O_2 \rightarrow 2CO + 2H_2O$ 首先转化为 CO 和 H_2O ,CO 再通过氧化反应转变为 CO_2 。而多步反应中乙烯经 $C_2H_4 + O_2 \rightarrow 2CO + 2H_2$,其后的氧化反应采用 12 组分 21 步反应的 CO- H_2 - O_2 准总包反应给出。Singh 和 Jachimowski^[105] 采用类似的假设基于 25 组分 75 步反应的详细机理发展了 9 组分 10 步的总包反应机

理。在 Singh 和 Jachimowski 的总包反应机理基础上, Terese 等^[106] 优化了部分反应步的速率常数,提出了 10 组分 8 步反应的总包机理。总包反应机理的优势在于组分和反应数一般较少,因此计算代价相对较小,其不足之处在于反应速率常数通常需要通过实验拟合,很难适应宽范围的工况条件,尤其是在富燃情况下误差会更大^[104,106]。伴随着化学反应机理简化方法的发展,出现一系列基于准稳态假设(QSSA)的乙烯简化机理,并用于化学反应流的模拟中,包括:Montgomery 基于 52 组分 367 步反应的详细机理得到的 21 组分简化机理^[107],殷^[108] 和 Zhong 等^[109] 基于 Laskin 机理发展了 11 组分 7 步简化机理,以及肖等^[110] 基于 GRI 3.0 机理得到的 20 组分 16 步反应的准总包机理。考虑到合理选取准稳态组分的难度以及较低的简化效率,近年来以 DRG 方法为代表的机理简化方法更多地运用于乙烯机理简化。采用耦合的 DRG、SA 与 QSSA 方法,Luo 等^[111] 对 USCII 的 C_1 - C_4 机理进行了简化,最终得到了 39 组分 35 步反应的简化机理,并用于 NO_x 的预测。Zhong 等^[112] 与李等^[113] 分别采用 DRGEP 结合 SA,DRGEP 结合 QSSA 得到了 25 组分 131 步反应的骨架简化机理和 24 组分 20 步反应的简化机理。

上述简化机理在开发时较少考虑超声速燃烧特定的工况条件,简化机理在超燃数值模拟中的影响并不明确。由于早期超燃实验中测量数据以壁面静压为主,因此在反应流的模拟中主要以静压分布为预测目标。Xu 等^[114] 在水平喷射二维超声速燃烧的模拟中考察了 Westbrook 的一步和两步反应机理^[104],结果表明两者在预测燃烧室壁面静压分布上无明显差异。此外,乙烯简化反应机理在超声速剪切层燃烧^[115]、凹腔燃烧室的点火过程^[109]、稳定燃烧^[108]、流场震荡^[116] 以及如图 11 所示的节流过程中的火焰动态特性^[117] 也给出了定性的预测。

值得注意的是在上述工作中机理的验证也仅依赖于壁面静压数据,而过度简化的反应机理在超燃数值模拟中的不足也逐渐凸显。Baurle 等^[118] 在凹腔稳焰超声速燃烧室的模拟中比较了 7 组分 3 步总包机理^[119] 以及 Singh 和 Jachimowski^[105] 的 9 组分 10 步机理,发现 10 步反应机理的预测结果与实验更为接近,而前者给出的释热分布主要集中在燃料喷注点附近,揭示了超燃数值模拟对反应机理的敏感性。在凹腔稳焰燃烧室的模拟中,Liu 等^[120] 通过对比由 Qin 机理^[97] 简化得到的 19 组分 15 步简化机理,证实了 7 组分 3 步总包机理^[119] 以及 Singh 和 Jachimowski^[105] 的 9 组分 10 步机理在火焰稳定模拟方面的不足。Cocks

等^[121]在凹腔稳焰燃烧室的模拟中比较了 Westbrook 的一步和两步反应机理^[104](如图 12 所示),两组机理

预测的波系结构基本一致,壁面静压分布也相同,但是预测的火焰形态与位置跟实验结果相差较大。

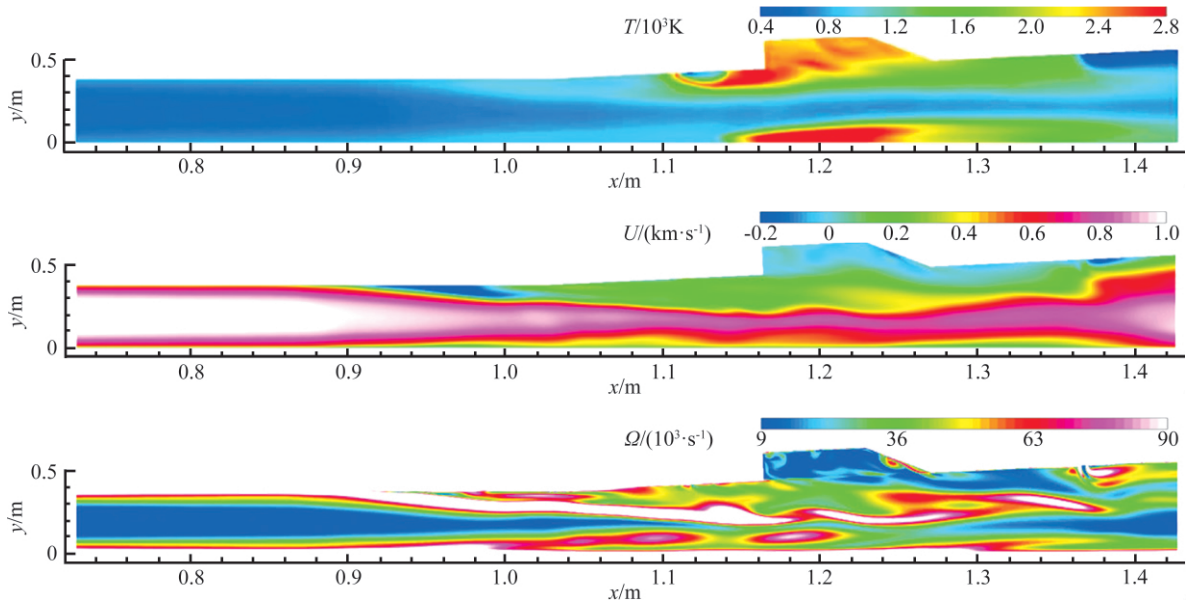


图 11 空气节流条件下点火过程中($t=4.81$ ms) x - y 平面上温度、流向速度以及涡量值云图^[117]。

Fig.11 Contours of the temperature, axial velocity, and vorticity magnitude on x - y plane in the combustor section at $t=4.81$ ms during the ignition transient with air throttling^[117]

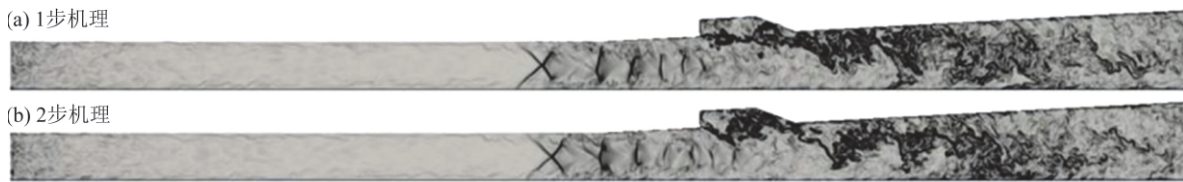


图 12 瞬时数值纹影图^[121]

Fig.12 Instantaneous numerical schlieren images for simulations^[121]

基于上述研究进展不难发现,现有的简化/骨架机理在超声速燃烧模拟的应用中,对于壁面静压的预测与实验结果都符合较好,但是在流场细节包括火焰结构与位置、释热分布的预测方面还存在不足。考虑到在超声速燃烧室中对火焰结构及关键组分信息的精细测量较为困难,目前尚缺乏对简化机理在超燃数值模拟中准确性的系统评估,本文将在 2.4 节对这一问题展开更为详细的阐述。

2.3 煤油超声速燃烧模拟

2.3.1 替代燃料

由于航空煤油成分复杂,目前尚无统一的分子式,为保持研究对象的一致性和结果的可重复性,可行的办法是采用少数典型的碳氢化合物构成替代燃料来模拟真实燃料的理化特性^[122]。通常认为煤油(Jet-A, Jet-A1, TR0, JP8)的平均分子式介于 $C_{10.9}H_{20.9}$ 至 $C_{12}H_{23}$ 之间^[123],替代燃料多采用单一组分的正癸烷或正十二烷。Dagaut 等^[124]采用单组分正癸烷表征煤油在高压搅拌反应器中的氧化反应,而

Doute 等^[125]在煤油预混火焰中也采用了相同的替代组分。由于单一组分的替代燃料不能很好地反映煤油的氧化反应特征,尤其是碳烟以及污染物的生成。为此 Vovelle 等^[126]与 Maurice 等^[127]分别提出了包含 10% 甲苯与 90% 正癸烷,以及 22% 乙苯与 78% 正癸烷的两组分替代燃料,而 Lindstedt 和 Maurice^[128]则考察了 11% 苯/甲苯/乙苯/萘与 89% 正癸烷构成的替代燃料。基于对煤油理化特性的详细分析,Edwards 等^[122]全面分析了单组分替代燃料的不足并强调了发展多组分替代燃料的必要性。Gueret 等^[129]首次提出了包含链烷烃、环烷烃和芳香烃在内的 Jet-A1 三组分替代燃料,即 79% 正十二烷、10% 丙基环己烷与 11% 1,2,4 三甲基苯,并在此基础上提出了 56 组分/360 步反应的总包反应机理。Dagaut^[130]构建了 74% 正癸烷、15% 正丙基苯以及 11% 丙基环己烷构成的替代模型,同时发展了包含 207 组分的详细机理。基于 Gueret 替代模型^[129],Honnet 等^[131]发展了 80% 正癸烷、20% 1,2,4 三甲基苯的 Aachen

Surrogate 模型,与点火延迟和火焰传播实验吻合较好。针对 Jet-A1 煤油,Dagaut 等^[132]在比较了四种不同替代燃料模型,正癸烷(100%)、正癸烷/正丙基苯(74%/26%)、正癸烷/正丙基环己烷(74%/26%)以及正癸烷/正丙基苯/正丙基环己烷(74%/15%/11%)的基础上,提出三组分替代是比较理想的选择。为准确模拟点火与碳烟生成特性,Dooley 等发展了分别包含正癸烷/异辛烷/甲苯,及正十二烷/异辛烷/1,3,5-三甲基苯/正丙基苯在内的三组分^[133]和四组分^[134]替代燃料。针对天然气合成油(GtL),Dagaut 等^[135]发展出了包含 33.2% 异辛烷、57.5% 正癸烷以及 9.1% 正丙基环己烷的三组分替代模型。

由于国内主要使用 RP-3 航空煤油,因此发展针对 RP-3 煤油的替代燃料模型及化学反应机理也是目前需要解决的关键技术问题。范学军等^[61]在国内较早开展了 RP-3 煤油替代燃料的研究,提出了 49% 正癸烷、44% 1,3,5-三甲基环己烷和 7% 正丙基苯的三组分替代模型。肖保国等^[136]与曾文等^[137]分别发展了由正癸烷/三甲基环己烷/乙基苯(79%/13%/8%),以及正癸烷/甲苯/丙基环己烷(65%/10%/25%)构成的三组分替代燃料。近期,Mao 等^[138]构建了 49.8% 正十二烷、21.6% 异辛烷及 28.6% 甲苯的三组分替代模型以准确模拟 RP-3 煤油的点火延迟特性,而 Liu 等^[139]提出的正癸烷、正十二烷、异辛烷以及甲基环己烷(14%/10%/30%/36%)的四组分替代燃料在碳烟生成方面与 RP-3 煤油吻合很好。

2.3.2 详细反应机理

关于煤油详细化学反应机理,Dagaut 和 Cathonnet^[123]对 2006 年之前的研究工作做了很好的回顾。针对正癸烷单组分替代煤油,比较有代表性的包括 Dagaut 等^[124]发展的 90 组分 573 步反应,与 Lindstedt 和 Maurice^[128]的 193 组分 1085 步反应详细机理。基于前期的三组分替代模型(74% 正癸烷/15% 正丙基苯/11% 正丙基环己烷),Dagaut 和 Cathonnet^[123]得到了 209 组分 1673 步反应的煤油详细反应机理,并很好预测了在 0.1~4.0 MPa 条件下射流搅拌反应器的实验数据。进一步地,Dagaut 等^[135]针对 GtL 燃料的氧化反应发展了包括 2430 组分 10962 步反应的更为详细的反应机理。在国内 RP-3 煤油详细反应机理的发展方面,肖保国等^[136]、曾文等^[137]分别基于三组分替代模型,发展了 106 组分 946 步反应、150 组分 591 步反应的煤油详细反应机理。徐佳琪^[140]等针对 RP-3 煤油的高温自点火燃烧,提出了包含 73.0% 正十二烷、14.7% 1,3,5 三甲基环己烷及 12.3% 正丙基苯的三组分替代模型,并构

建了 2237 组分 7959 步反应的煤油详细反应机理。Yu 等^[141]基于三组分替代模型(正十二烷/2,5-二甲基己烷/甲苯),发展了包含 1880 组分 6586 步反应的 RP-3 煤油详细反应机理。在四组分替代模型(40% 正癸烷/42% 正十二烷/13% 乙基环己烷/5% 对二甲苯)的基础上,郑东等^[142]提出了 168 组分 1089 步反应的半详细反应机理,并在点火延迟和层流火焰速度预测上进行了验证。

2.3.3 实用简化反应机理及其应用

上述的煤油详细反应机理对于实际化学反应流尤其是超声速燃烧的数值模拟而言规模都太大,因此需要对其进行适当简化,发展出实用的简化反应机理。最早的煤油简化机理为 Najjar 和 Goodger^[143]提出的单步机理,随后 Aly 与 Salem^[144]校正了反应速率常数并用于煤油预混火焰的模拟。为了更加准确地模拟煤油氧化反应的过程,Gueret 等^[129]提出了半总包反应机理,其基本思想是对大分子燃料采用总包反应,即包括正十二烷/正丙基环己烷/1,2,4-三甲基苯的三组分替代燃料,首先裂解为个小分子中间组分(C_1 - C_4),随后小分子组分再通过 50 组分 360 步反应的详细机理实现氧化反应。类似地,Kundu 与 Deur^[145]、Wang^[146]以及 Choi^[147]分别对单组分替代煤油提出了 16 组分 23 步反应、11 组分 17 步反应以及 10 组分 10 步反应的半总包机理。Franzelli 等^[148]提出了煤油-空气预混燃烧的两步反应机理,包括燃料分解为 CO 和 H_2O 以及 CO- CO_2 的平衡反应,通过在不同当量比下对指前因子的分段列表,该机理在很宽范围内与 Dagaut 的详细反应机理^[123]预测的层流火焰速度基本一致。针对国产 RP-3 航空煤油的四组分替代模型,郑东等^[142]发展了包含 168 组分 1089 步反应的半总包机理,并用点火延迟和层流火焰速度实验数据进行了验证。

早期的煤油超燃数值模拟基本都采用规模较小的总包反应机理。Rajasekaran 与 Babu^[149]在壁面喷注凹腔燃烧室模拟中采用单步总包反应模拟 $C_{12}H_{26}$ /空气氧化反应,结果发现由于释热过于集中导致燃料喷口附近压力预测值远高于实验值。Wang^[146]基于单组分替代模型($C_{12}H_{24}$)采用 11 组分 17 步反应半总包机理成功预测了火箭发动机燃烧室压力。黄生洪等^[150]采用基于单组分替代模型($C_{12}H_{23}$)的 30 步半总包机理对凹腔燃烧室进行了模拟,但是缺乏相应燃烧流场的实验验证。Westbrook 等的单组分替代($C_{12}H_{23}$)单步总包反应机理也广泛应用于煤油燃烧支板和凹腔稳焰超声速流场的数值模拟^[151-153]。侯凌云等^[154]在超声速燃烧的模拟中比较了煤油单

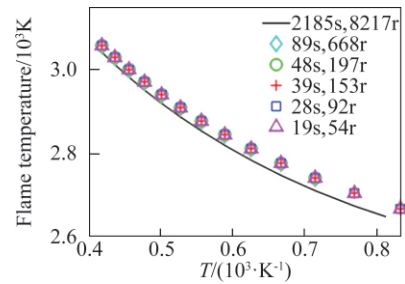
步^[152]和两步总包机理^[148],结果表明两步机理较为准确的预测了壁面静压分布,而单步机理局部释热量过于集中,同时强调了准确选择反应机理的重要性。

由于总包或半总包反应机理难以准确模拟发动机宽范围工作的燃烧反应特性,因此近年来从煤油详细化学反应出发构建简化反应机理成为研究热点。Kyne等^[155]采用敏感性和反应速率分析对基于两组分煤油替代模型(89%正癸烷/11%甲苯)的详细反应机理进行了简化,得到了84组分440步反应的简化机理并用于预混火焰的预测。基于QSSA方法, Montgomery等^[156]分别发展了针对JP-8的15-20组分的简化机理并与点火延迟和层流火焰速度的实验结果进行了比较。Luche等^[157]采用原子通量结合主成分分析的方法对三组分煤油替代模型的详细机理(225组分3493步反应)进行了简化,得到了33和40组分两组简化机理,并准确预测了JSR的实验结果。为满足燃气轮机燃烧室的CFD模拟, Strelkova等^[158]基于Jet-A的三组分替代模型发展了71组分417步反应的详细机理,同时构建了23组分38步反应的简化反应机理,并在高温1000~1700 K范围内对简化机理进行了验证。Wang等基于Dagaut三组分替代模型的详细反应机理(209组分1673步反应)^[123],采用DRG和迭代筛选与结构分析方法,发展了适用于煤油高温氧化反应的106组分382步反应骨架机理^[159],并随后基于QSSA进一步得到了34组分总包反应机理^[160]。针对国产RP-3航空煤油肖保国等^[136]、曾文等^[137]、徐佳琪等^[140]分别提出了20组分18步反应、88组分281步反应以及138组分530步反应的高温简化机理,并在点火延迟时间预测上与实验结果符合很好。Zhong和Peng^[161]在详细考察了正十二烷、正十四烷与十氢萘反应机理的基础上,提出了煤油的三组分替代模型并构建了相应的50组分274步反应的骨架反应机理。

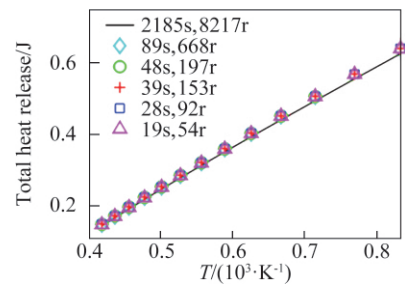
尽管关于煤油简化机理的研究已经取得了不小的进展,但是上述机理简化工作主要考虑零维点火或一维层流火焰速度的模拟,实际应用到二维或三维反流尤其是超声速燃烧模拟的并不多。

近年来,并行计算技术以及煤油简化机理的发展使得基于更为详细的煤油简化机理的超燃数值模拟成为可能^[163]。Yao等^[164]首先基于Dagaut三组分替代模型(28.8%异辛烷,62.4%正癸烷,8.8%丙基环己烷),包括2815组分8217步反应煤油详细反应机理^[135],发展了一系列煤油骨架反应机理,并在超燃工况下进行了验证。如图13所示,采用DRGEP耦

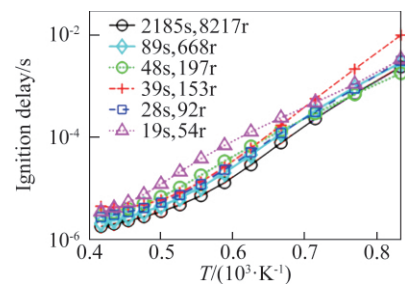
合SA方法简化后,除48组分机理误差较大外,其余4组骨架反应机理与详细机理在点火延迟时间和层流火焰速度的预测方面误差都较小。其中28组分92步反应的骨架机理用于全尺寸煤油方截面超声速燃烧室变当量比条件下燃烧流场特征的数值研究^[165],其湍流-化学反应相互作用的分析表明,煤油超声速燃烧中94%以上的区域都处于慢反应区,火焰面模型基本不适用。同时,19组分54步反应的骨



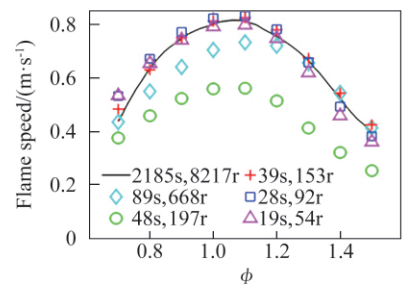
(a) 绝热火焰温度



(b) 总释热量



(c) 点火延迟时间



(d) 层流火焰速度

图13 不同骨架机理与详细机理预测结果比较^[162]Fig.13 Comparison between skeletal and detailed mechanism^[162]

架机理由于计算量小,在结合 ISAT 列表法的情况下,系统研究了圆截面和椭圆截面燃烧室波系结构和燃烧流场特征^[166],并在国际上首次实现了煤油超燃的亿级网格模拟(如图 14)^[167]。

在圆变椭圆截面全尺寸超声速燃烧室的数值模拟中,Yao 等^[162]详细比较了包含 19、28、39 和 48 组分的四组骨架反应机理,结果表明不同简化程度的煤油反应机理预测的壁面静压基本一致,且与实验都很好吻合,但是 19 组分机理预测的点火位置更靠近上游,且总的燃烧效率要高于其他机理的结果。对湍流-化学反应相互作用的统计分析^[164]如图 15 所示,

在 19 组分和 28 组分模拟中火焰面模式的比重分别为 6.1%和 15.7%,然而随着组分数增多(即化学反应复杂增加)火焰面模式占比降至 1%左右。这一结果清楚地表明,复杂碳氢燃料的超燃模拟中化学反应的准确建模不仅影响到静压、释热分布及组分输运等流场宏观特性的预测,还会影响甚至完全改变湍流-化学反应相互作用的模式。

2.4 简化机理超燃数值模拟的评价方法

为了系统评估简化反应机理对超声速燃烧数值模拟的影响,笔者^[100]提出了三层次简化机理保真度评估体系:1)第一层次的化学动力学特征匹配,主

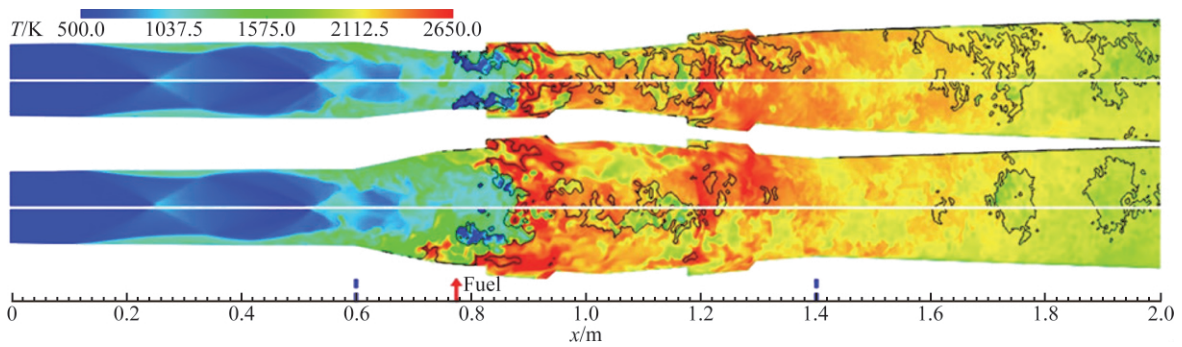


图 14 圆变椭圆截面燃烧室瞬时温度场^[167]

Fig.14 Instantaneous temperature field for the round-to-elliptic-transition scramjet combustor^[167]

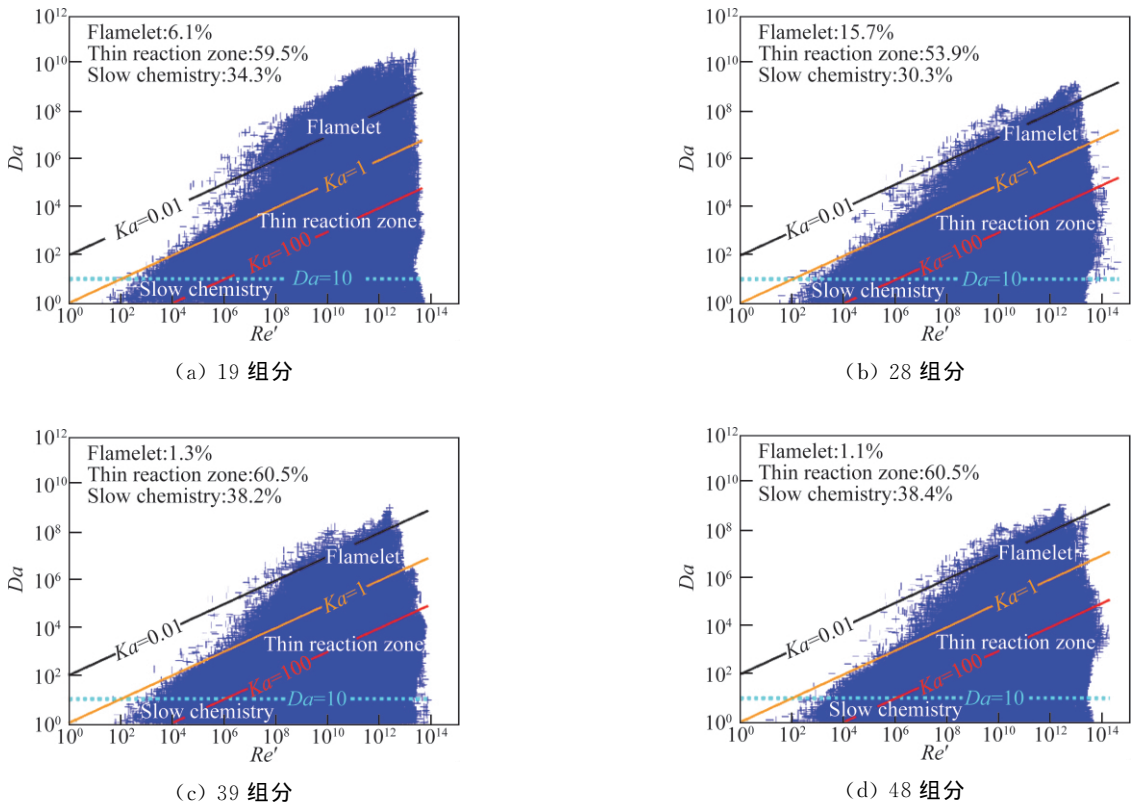


图 15 圆变椭圆燃烧室超声速燃烧模拟的 Borghi 模式图^[164]

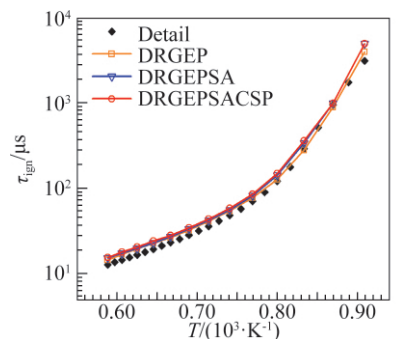
要是点火延迟时间、层流火焰速度、释热率和熄火拉伸率等参数;2) 第二层次针对发动机整体效率评估, 需要考虑到化学反应与流动的相互作用, 但是主要关注燃烧室压力分布、总压损失、燃烧效率等总体性能指标;3) 第三层次需要考虑更加复杂的非定常燃烧过程或者一些极限现象, 比如火焰稳定、点火/熄火等过程, 对简化机理的保真度要求更高。

考虑到超声速燃烧实验中难以对详细的组分信息进行定量测量, 因此本节将以乙烯超声速燃烧为例结合 UCSD 详细反应机理^[93] 对上述方法体系进行介绍。从 UCSD 详细机理出发, 笔者^[100] 采用 DRGEP 结合 SA 和 CSP 等方法构建了 30 组分 143 步反应 (DRGEP)、24 组分 101 步反应 (DRGEP SA) 以及 24 组分 86 步反应 (DRGEP SA CSP) 三组骨架机理, 并首先开展了第一层次即化学动力学特征的验证。从图 16 中的点火延迟计算结果可以看出, 三组骨架机理与详细机理都吻合得非常好, 即使当温度超过 1350 K 后相对误差有所增大, 但是最大也不超过 5%。而就层流火焰速度的计算而言, 如图 17 所示三组简化机理与详细机理的结果都基本吻合, 在富燃条件下 30 组分机理的预测结果与详细机理符合得更好, 24 组分 101 步反应和 24 组分 86 步反应机理预测的层流火

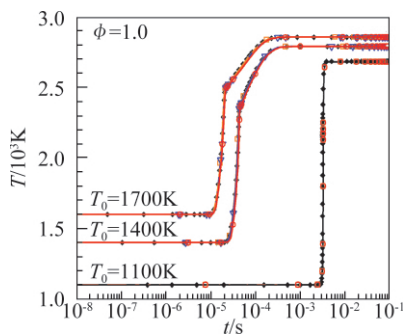
焰速度比详细机理的结果稍大, 但最大相对误差仍然不超过 1.5%。

随后基于 DRGEP SA CSP 骨架机理进行第二层次即发动机整体效率评估。对于平行喷注超声速燃烧室采用大涡模拟结合 PaSR 有限化学反应速率模型, 因此实际上第二层次的评估已经考虑了流动与化学反应的相互作用, 只是重点关注发动机整体性能指标。如图 18, 骨架反应机理预测的沿程准一维静压和马赫数分布与详细机理的计算结果基本一致, 平均相对误差分别为 3.7% 和 1.8%, 而相应的燃烧室出口燃烧效率的相对误差不到 1%。从计算效率的角度而言, 采用骨架机理可以大幅降低计算代价, 其计算 CPU 时间仅为详细机理的五分之一左右。

第三层级的保真度评估涉及到更加复杂的化学动力学以及流动-化学反应相互作用过程。图 19 给出了两组机理预测的时均 OH 自由基的分布, 与详细机理相比骨架反应机理的结果中 OH 自由基的分布更靠近燃烧室入口。此外 CO 以及释热分布上都存在较大差异。类似地, 释热分布及关键组分预测的较大偏差, 可能导致冲压发动机中隔离段激波串、边界层分离位置、热壅塞以及进气道不启动边界预测的失败。



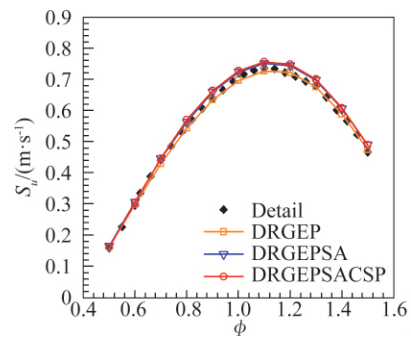
(a) 点火延迟时间



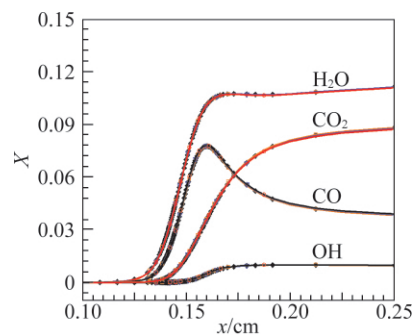
(b) 温度响应曲线

图 16 压力 $p=0.1$ MPa 条件下当量乙烯-空气混合物点火延迟时间与温度响应曲线^[100]

Fig.16 Comparisons of ignition delay time, and temperature response for the skeletal and detailed mechanisms under $p=0.1$ MPa for stoichiometric ethylene-air mixture^[100]



(a) 层流火焰速度



(b) 组分分布

图 17 初始温度 298 K, 压力 $p=0.1$ MPa, 乙烯-空气当量混合物层流火焰速度与组分分布^[100]

Fig.17 Comparisons of laminar flame speed and species distribution for the skeletal and detailed mechanisms for stoichiometric ethylene-air mixture under $T=298$ K and $p=0.1$ MPa^[100]

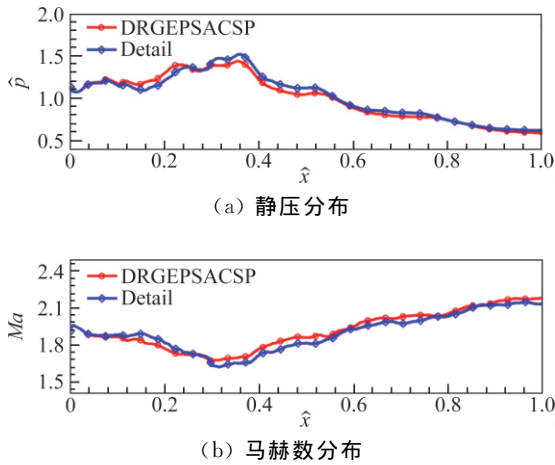


图 18 燃烧室总体性能预测^[100]
Fig.18 Predictions of pseudo one-dimensional streamwise distribution^[100]

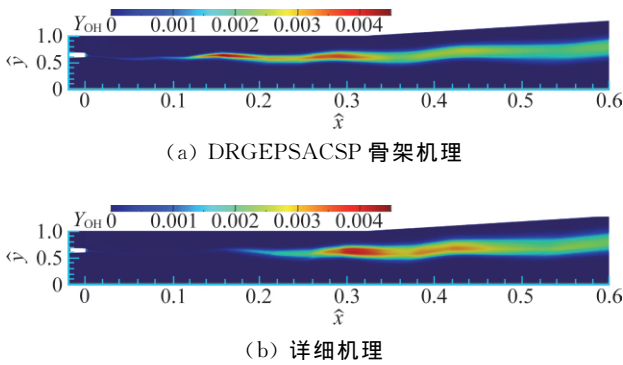


图 19 时均 OH 自由基分布的预测^[100]
Fig.19 Prediction of time-averaged OH contours^[100]

基于上述三层次的保真度评估体系分析,总体而言,简化机理对发动机整体性能参数的预测值与详细机理基本一致且计算效率较高,仍然是模拟评估燃烧室总体性能参数的合理选择。然而,简化机理由于无法涵盖真实燃烧室中的复杂化学-热力学参数空间,在精细的流场特征以及湍流-化学反应相互作用方面还存在较大偏差。

3 基于动态自适应化学方法的超声速数值模拟

由于机理简化通常在燃烧模拟之前,难以覆盖燃烧室中较宽广的热力学状态空间,特别是非稳态燃烧、点火/熄火等问题对机理准确性要求更高,为此可以采用分区化学^[168]以及动态自适应化学方法(Dynamic Adaptive Chemistry, DAC)^[51],进一步提高计算准确性和效率。分区化学方法通过在不同的反应区域采用不同的简化机理以提高计算效率,在内燃机的燃烧模拟中应用较多^[169-170],但是由于很难给出简洁明确的分区判据而限制了其自身的发展。目

前的研究热点是动态机理简化方法。基于当时当地的化学热力学参数实时调整骨架简化机理,可以最大程度地保留准确的化学反应信息,同时将计算量保持在较低水平。由于动态自适应化学方法在点火、熄火以及污染物生成模拟等方面具有较大优势,当前在内燃机模拟^[171-173]、湍流直接数值模拟^[174]中已有不少研究工作,但是在超燃数值模拟方面还未引起足够的重视。

近期,笔者^[60]基于 Francesco 等^[175]提出的耦合自适应建表的动态自适应化学方法(Tabulation of Dynamic Adaptive Chemistry, TDAC)率先实现了基于动态自适应化学的超声速燃烧数值模拟。如图 20 所示 TDAC 算法包括两个基本模块——自适应建表和机理简化。自适应建表方法与 1.3 节一致,如果查表未得到结果,程序即进入 DAC 模块。与积分整个组分演化方程组不同,程序首先根据当时局部化学-热力学状态进行化学反应机理简化,在详细反应机理中抽取适用于局部热力学状态空间的骨架机理,包括激活组分及其相关反应,之后再基于简化后的化学反应机理进行积分,剩余的未激活组分对应的组分反应方程不进行求解。

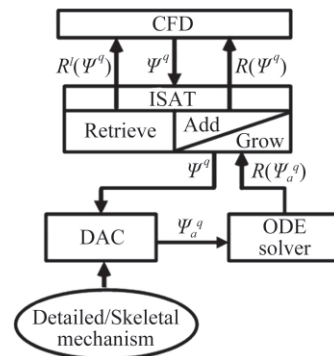
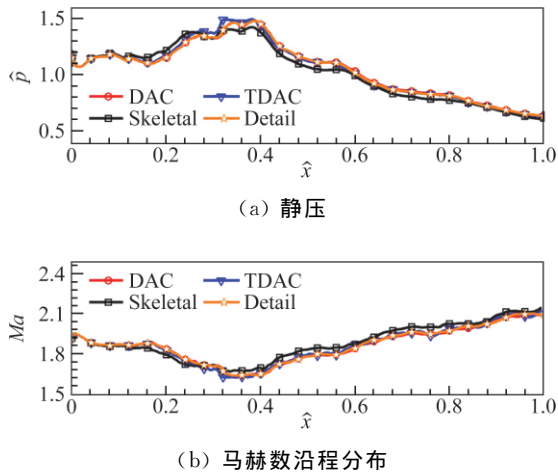


图 20 化学反应流计算中当地自适应建表法与动态机理简化耦合算法
Fig.20 Coupling algorithm of the ISAT and DAC in the reacting flow simulation

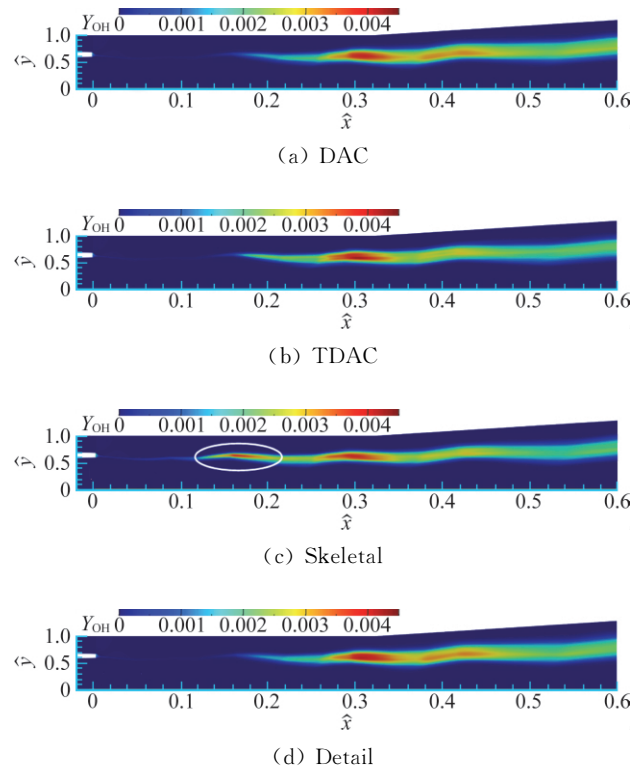
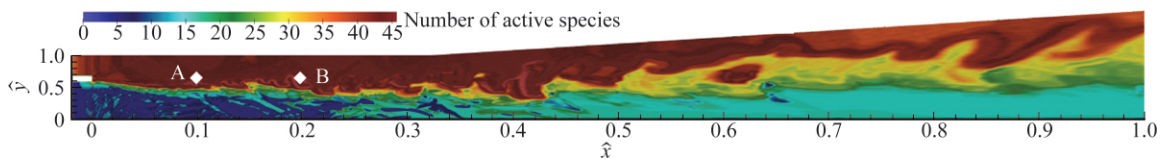
采用上述动态自适应化学方法,对 2.4 节中的平行喷注乙烯超声速燃烧进行了模拟。图 21 中给出了不同化学反应建模方法计算的燃烧室静压和马赫数沿程分布,可以看出采用 DAC、TDAC 以及骨架反应机理(24 组分 86 步反应)与详细机理的计算结果基本一致。然而,就图 22 中示出的 OH 分布来看, DAC 可以显著改善采用单一骨架反应机理在火焰稳定位置预测上的不足。

为了直观了解 DAC 方法的计算效率,图 23 展示了瞬时活跃组分流场分布,可以看出燃烧室中的反应区大致可以分成以下几个区域。通常在热解阶

图21 燃烧室准一维静压和马赫数的沿程分布^[60]Fig.21 Pseudo-one-dimensional streamwise profiles of pressure and Ma predicted by different chemistry treatment methods^[60]

段,大分子的碳氢燃料在 H 和 OH 等自由基的作用下转化为小分子的组分,这一过程涉及到较多的基元反应。在燃烧室 $\hat{x} < 0.4$ 的上半部分,高温富油条件下发生燃料的裂解反应,涉及到超过 40 个激活组分。在燃烧室下部为污染空气,因此只需要较少的激活组分就足以描述当地的化学反应。在流向位置 $\hat{x} > 0.4$,反应区大致可以分为三层:1)靠近上壁面附近仍然是富油燃料流的热解反应;2)下壁面附近依然是污染空气流;3)在中间混合层位置的剧烈燃烧区涉及到 25~30 个激活组分。DAC 方法通过动态调整局部的反应机理可以极大地降低计算开销。与详细机理相比,DAC 方法的加速比大致为 3.12 左右,比骨架机理略低。但是,如果进一步耦合 ISAT 算法后,TDAC 方法可以达到更高的加速比 5.56 左右。

上述结果已经证实了 DAC 方法在超燃数值模拟中的可行性、准确性,然而在计算效率方面还不太理想。近期,An 等^[176]通过对动态简化后的机理进行列表,在 DLR 超声速燃烧室的模拟中进一步提高 DAC 方法的计算效率,与传统 ISAT 方法相比可提升效率 1.3~1.7 倍左右。显然 DAC 方法还存在进一步提升的空间。

图22 采用 DAC、TDAC、骨架机理和详细机理计算的 OH 质量分数云图^[60]Fig.22 Time-averaged OH radical contours predicted by DAC, TDAC, global skeletal mechanism and detailed mechanism^[60]Fig.23 Instantaneous distribution of the number of the active DAC species^[60]

4 总结与展望

将高保真度的数值模拟方法应用于超声速湍流燃烧的研究工作在近几年得到了飞速发展。一方面可压缩湍流数值模拟方法以及高性能并行技术的发展使得大规模超声速湍流模拟成为可能;另一方面高速可压缩流条件下湍流-化学反应相互作用建模方面的持续研究也推动了超声速湍流燃烧开始走向工程化和实用化。现有的研究成果和进展显示了这一领

域的广阔前景和发展潜力,本文从超燃冲压发动机实用燃料出发,深入探讨了复杂碳氢燃料超声速燃烧数值模拟的研究现状,揭示了当前存在的问题和挑战。

首先,对于碳氢燃料的超声速燃烧而言,流场大部分区域为旋涡小火焰模式,这导致火焰面模型并不能普遍适用,此时更适宜采用有限化学反应速率模型。

第二,如何准确刻画超声速条件下点火、稳焰等非定常燃烧现象中的湍流-化学反应的跨尺度相互作用,以及如何处理随之而来的求解方程数目的增多以及方

程刚性等问题都有赖于复杂化学反应的准确建模。

第三,当前简化反应机理的构建基本都是以零维自点火或一维层流火焰作为标模,较少考虑实际三维数值模拟中湍流-化学反应的跨尺度相互作用,尤其缺乏对于煤油燃料实际超燃模拟的系统性研究。

第四,为全面衡量简化反应机理在超燃数值模拟中的影响,应当采用基于物理目标的多层次保真度评估体系,即(1)化学动力学特征匹配(点火延迟时间、层流火焰速度等参数);(2)发动机整体效率评估,需要考虑化学反应与流动的大尺度相互作用,但是主要关注燃烧室总体性能指标;(3)针对非定常燃烧过程或极限现象,需全面考虑湍流-化学反应的跨尺度相互作用。

第五,明确指出单一静态简化反应机理在基本燃烧特征及发动机整体性能的快速评估方面可以给出比较准确的结果,但是对于燃烧流场的精细结构、点火以及火焰稳定的完整过程预测方面仍存在比较明显的不足。

最后,根据对乙烯燃料超声速燃烧流场特征和关键组分的分析,基于动态自适应化学的超声速燃烧数值模拟方法能够显著改善单一简化机理在火焰稳定位置预测上的不足,为超声速条件下复杂化学的高保真建模提供了新思路。

在现有工作积累的基础上,高保真度的数值模拟在未来超声速燃烧的研究中必将扮演更加重要的角色。关于未来的研究工作有以下几点值得关注:

1) 针对超声速条件下湍流-化学反应的相互作用机制的相关实验和数值模拟研究尚未达成系统性认识,特别是与碳氢燃料的动态燃烧过程、多燃烧模态等问题建模相关的理论和模型的发展还不够完善。

2) 尽管动态自适应化学方法在超声速燃烧数值模拟中的适用性及准确性已经得到证实,但是相关的影响因素,如机理简化方法、简化目标及误差阈值的选取方面,还缺乏系统性研究。此外,计算效率方面与低速流的模拟结果相比还有较大的差距,尚需进一步提升。

3) 国产 RP-3 航空煤油替代燃料及其反应机理的研究与国外存在较大差距,尤其是反应机理的验证也不够充分,能否全面准确地描述国产 RP-3 航空煤油的化学动力学特性有待进一步研究。

4) 事实上制约超声速燃烧数值模拟的最大瓶颈还是令人生畏的计算代价。综合运用机理简化、列表法以及机器学习等方法提高可压缩高速湍流燃烧的计算效率。实现多级耦合加速的研究工作方面还比较欠缺。

参 考 文 献:

- [1] 王振国, 梁剑寒, 丁猛, 等. 高超声速飞行器动力系统研究进展[J]. 力学进展, 2009, 39(6): 716-739.
WANG Z G, LIANG J H, DING M, et al. A review on hypersonic airbreathing propulsion system [J]. *Advances in Mechanics*, 2009, 39(6): 716-739. (in Chinese)
- [2] 俞刚, 范学军. 超声速燃烧与高超声速推进[J]. 力学进展, 2013, 43(5): 449-471.
YU G, FAN X J. Supersonic combustion and hypersonic propulsion [J]. *Advances in Mechanics*, 2013, 43(5): 449-471. (in Chinese)
- [3] MAURICE L, EDWARDS T, GRIFFITHS J. Liquid hydrocarbon fuels for hypersonic propulsion[M]// CURRAN E T, MURTHY S N B. *Scramjet Propulsion*, 2000: 757-822.
<https://doi.org/10.2514/5.9781600866609.0757.0822>
- [4] WU K, ZHANG P, YAO W, et al. Numerical investigation on flame stabilization in DLR hydrogen supersonic combustor with strut injection[J]. *Combustion Science and Technology*, 2017, 189(12): 2154-2179.
<https://doi.org/10.1080/00102202.2017.1365847>
- [5] LU T F, LAW C K. Toward accommodating realistic fuel chemistry in large-scale computations[J]. *Progress in Energy and Combustion Science*, 2009, 35(2): 192-215.
<https://doi.org/10.1016/j.pecs.2008.10.002>
- [6] CHEN Z. *Studies on the initiation, propagation and extinction of premixed flames[D]*. Princeton: Princeton University, 2009.
- [7] 孙明波, 范周琴, 梁剑寒, 等. 部分预混超声速燃烧火焰面模式研究综述[J]. 力学进展, 2010, 40(6): 634-641.
SUN M B, FAN Z Q, LIANG J H, et al. Evaluation of partially premixed flamelet approach in supersonic combustion [J]. *Advances in Mechanics*, 2010, 40(6): 634-641. (in Chinese)
- [8] 杨越, 游加平, 孙明波. 超声速燃烧数值模拟中的湍流与化学反应相互作用模型[J]. 航空学报, 2015, 36(1): 261-273.
YANG Y, YOU J P, SUN M B. Modeling of turbulence-chemistry interactions in numerical simulations of supersonic combustion [J]. *Acta Aeronautica et Astronautica Sinica*, 2015, 36(1): 261-273. (in Chinese)
- [9] FUREBY C. Large eddy simulation modelling of combustion for propulsion applications [J]. *Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 2009, 367(1899): 2957-2969.
<https://doi.org/10.1098/rsta.2008.0271>
- [10] JU Y. Recent progress and challenges in fundamental combustion research [J]. *Advances in Mechanics*, 2014, 44(1): 26-97.
doi: 10.6052/1000-0992-14-011
- [11] MAGNUSSEN B F, HJERTAGER B H. On mathematical modeling of turbulent combustion with special emphasis on soot formation and combustion [J]. *Symposium (International) on Combustion*, 1977, 16(1): 719-729.
[https://doi.org/10.1016/s0082-0784\(77\)80366-4](https://doi.org/10.1016/s0082-0784(77)80366-4)
- [12] KASSEM H I, SAQR K M, ALY H S, et al. Implementation of the eddy dissipation model of turbulent non-premixed combustion in OpenFOAM [J]. *International Communications in Heat and Mass Transfer*, 2011, 38(3): 363-367.
<https://doi.org/10.1016/j.icheatmasstransfer.2010.12.012>
- [13] SPALDING D B. Mixing and chemical reaction in steady confined turbulent flames [J]. *Symposium (International) on Combustion*, 1971, 13(1): 649-657.

- [https://doi.org/10.1016/S0082-0784\(71\)80067-X](https://doi.org/10.1016/S0082-0784(71)80067-X)
- [14] PETERS N. Laminar diffusion flamelet models in non-premixed turbulent combustion[J]. *Progress in Energy and Combustion Science*, 1984, 10(3): 319-339.
[https://doi.org/10.1016/0360-1285\(84\)90114-x](https://doi.org/10.1016/0360-1285(84)90114-x)
- [15] GOLOVITCHEV V I, NORDIN N, JARNICKI R, et al. 3-D diesel spray simulations using a new detailed chemistry turbulent combustion model[R]. SAE Technical Paper 2000-01-1891, 2000.
<https://doi.org/10.4271/2000-01-1891>
- [16] POPE S B. PDF methods for turbulent reactive flows[J]. *Progress in Energy and Combustion Science*, 1985, 11(2): 119-192.
[https://doi.org/10.1016/0360-1285\(85\)90002-4](https://doi.org/10.1016/0360-1285(85)90002-4)
- [17] GHODKE C, CHOI J, SRINIVASAN S, et al. Large eddy simulation of supersonic combustion in a cavity-strut flameholder [C]//49th AIAA Aerospace Sciences Meeting including the New Horizons Forum and Aerospace Exposition, Orlando, Florida, Reston, Virginia: AIAA, AIAA 2011-323.
<https://doi.org/10.2514/6.2011-323>
- [18] SUN M B, WANG Z G, LIANG J H, et al. Flame characteristics in supersonic combustor with hydrogen injection upstream of cavity flameholder[J]. *Journal of Propulsion and Power*, 2008, 24(4): 688-696.
<https://doi.org/10.2514/1.34970>
- [19] ZHANG M, HU Z, HE G, et al. Large-eddy simulation of kerosene spray combustion in a model scramjet chamber[J]. *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part G: Journal of Aerospace Engineering*, 2010, 224(9): 949-960.
<https://doi.org/10.1243/09544100jaero738>
- [20] WILLIAMS F. Progress in knowledge of flamelet structure and extinction[J]. *Progress in Energy and Combustion Science*, 2000, 26(4/5/6): 657-682.
[https://doi.org/10.1016/s0360-1285\(00\)00012-5](https://doi.org/10.1016/s0360-1285(00)00012-5)
- [21] GAO Z X, LEE C. A flamelet model for turbulent diffusion combustion in supersonic flow[J]. *Science China Technological Sciences*, 2010, 53(12): 3379-3388.
<https://doi.org/10.1007/s11431-010-4169-z>
- [22] SAGHAFIAN A, TERRAPON V E, PITSCH H. An efficient flamelet-based combustion model for compressible flows[J]. *Combustion and Flame*, 2015, 162(3): 652-667.
<https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2014.08.007>
- [23] LADEINDE F, LOU Z P. Improved flamelet modeling of supersonic combustion[J]. *Journal of Propulsion and Power*, 2018, 34(3): 750-761.
<https://doi.org/10.2514/1.136779>
- [24] ZHAO G Y, SUN M B, WANG H B, et al. Investigation of combustion characteristics in a scramjet combustor using a modified flamelet model[J]. *Acta Astronautica*, 2018, 148: 32-40.
<https://doi.org/10.1016/j.actaastro.2018.04.005>
- [25] SHAN F L, HOU L Y, CHEN Z, et al. Linearized correction to a flamelet-based model for hydrogen-fueled supersonic combustion[J]. *International Journal of Hydrogen Energy*, 2017, 42(16): 11937-11944.
<https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2017.02.100>
- [26] 李晓鹏, 张泰昌, 齐力, 等. 超声速燃烧中的特征尺度及影响因素[J]. *航空动力学报*, 2013, 28(7): 1458-1466.
LI X P, ZHANG T C, QI L, et al. Characteristic scales and influential factors in supersonic combustion [J]. *Journal of Aerospace Power*, 2013, 28(7): 1458-1466. (in Chinese)
- [27] QIN F, HUANG Z W, HE G Q, et al. Flame stabilization mechanism study in a hydrogen-fueled model supersonic combustor under different air inflow conditions [J]. *International Journal of Hydrogen Energy*, 2017, 42(33): 21360-21370.
<https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2017.06.237>
- [28] BERGLUND M, FUREBY C. LES of supersonic combustion in a scramjet engine model[J]. *Proceedings of the Combustion Institute*, 2007, 31(2): 2497-2504.
<https://doi.org/10.1016/j.proci.2006.07.074>
- [29] HUANG Z W, HE G Q, QIN F, et al. Large eddy simulation of flame structure and combustion mode in a hydrogen fueled supersonic combustor[J]. *International Journal of Hydrogen Energy*, 2015, 40(31): 9815-9824.
<https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2015.06.011>
- [30] HUANG Z W, HE G Q, WANG S, et al. Simulations of combustion oscillation and flame dynamics in a strut-based supersonic combustor[J]. *International Journal of Hydrogen Energy*, 2017, 42(12): 8278-8287.
<https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2016.12.142>
- [31] MENON S, GENIN F, CHERNYAVSKY B. Large eddy simulation of scramjet combustion using a subgrid mixing/combustion model[C]//12th AIAA International Space Planes and Hypersonic Systems and Technologies, Norfolk, Virginia, Reston, Virginia: AIAA, AIAA 2003-7035.
<https://doi.org/10.2514/6.2003-7035>
- [32] FUREBY C. LES for supersonic combustion[C]//18th AIAA/3AF International Space Planes and Hypersonic Systems and Technologies Conference, Tours, France, Reston, Virginia: AIAA, AIAA 2012-5979.
<https://doi.org/10.2514/6.2012-5979>
- [33] FEDINA E, FUREBY C. A comparative study of flamelet and finite rate chemistry LES for an axisymmetric dump combustor [J]. *Journal of Turbulence*, 2011, 12: N24.
<https://doi.org/10.1080/14685248.2011.582586>
- [34] FUREBY C. A comparative study of flamelet and finite rate chemistry LES for a swirl stabilized flame [J]. *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, 2012, 134(4): 041503.
<https://doi.org/10.1115/1.4004718>
- [35] SABELNIKOV V, FUREBY C. LES combustion modeling for high Re flames using a multi-phase analogy[J]. *Combustion and Flame*, 2013, 160(1): 83-96.
<https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2012.09.008>
- [36] GONZALEZ-JUEZ E D, KERSTEIN A R, RANJAN R, et al. Advances and challenges in modeling high-speed turbulent combustion in propulsion systems [J]. *Progress in Energy and Combustion Science*, 2017, 60: 26-67.
<https://doi.org/10.1016/j.pecs.2016.12.003>
- [37] LAW C K, SUNG C J, WANG H, et al. Development of comprehensive detailed and reduced reaction mechanisms for combustion modeling[J]. *AIAA Journal*, 2003, 41(9): 1629-1646.
<https://doi.org/10.2514/2.7289>
- [38] TURÁNYI T, TOMLIN A S. Reduction of reaction mechanisms[M]//*Analysis of Kinetic Reaction Mechanisms*. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2014: 183-312.
https://doi.org/10.1007/978-3-662-44562-4_7
- [39] OLUWOLE O O, SHI Y, WONG H W, et al. An Exact-Steady-state Adaptive Chemistry method for combustion simulations: Combining the efficiency of reduced models and

- the accuracy of the full model[J]. *Combustion and Flame*, 2012, 159(7): 2352-2362.
<https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2012.02.011>
- [40] LU T F, JU Y G, LAW C K. Complex CSP for chemistry reduction and analysis[J]. *Combustion and Flame*, 2001, 126(1/2): 1445-1455.
[https://doi.org/10.1016/s0010-2180\(01\)00252-8](https://doi.org/10.1016/s0010-2180(01)00252-8)
- [41] MAAS U, POPE S B. Simplifying chemical kinetics: Intrinsic low-dimensional manifolds in composition space [J]. *Combustion and Flame*, 1992, 88(3/4): 239-264.
[https://doi.org/10.1016/0010-2180\(92\)90034-m](https://doi.org/10.1016/0010-2180(92)90034-m)
- [42] REIN M. The partial-equilibrium approximation in reacting flows[J]. *Physics of Fluids A: Fluid Dynamics*, 1992, 4(5): 873-886.
<https://doi.org/10.1063/1.858267>
- [43] TOMLIN A S, TURÁNYI T, PILLING M J. Low-Temperature Combustion and Autoignition, Chapter 4: Mathematical tools for the construction, investigation and reduction [M]//Comprehensive Chemical Kinetics. Elsevier, 1997, 35: 293-438.
[https://doi.org/10.1016/S0069-8040\(97\)80019-2](https://doi.org/10.1016/S0069-8040(97)80019-2)
- [44] TURÁNYI T. Sensitivity analysis of complex kinetic systems. Tools and applications[J]. *Journal of Mathematical Chemistry*, 1990, 5(3): 203-248.
<https://doi.org/10.1007/bf01166355>
- [45] NIEMEYER K E. Skeletal mechanism generation for surrogate fuels[D]. Cleveland, Ohio: Case Western Reserve University, 2010.
- [46] LU T F, LAW C K. A directed relation graph method for mechanism reduction [J]. *Proceedings of the Combustion Institute*, 2005, 30(1): 1333-1341.
<https://doi.org/10.1016/j.proci.2004.08.145>
- [47] PEPIOTDESJARDINS P, PITSCH H. An efficient error-propagation-based reduction method for large chemical kinetic mechanisms[J]. *Combustion and Flame*, 2008, 154(1/2): 67-81.
<https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2007.10.020>
- [48] NIEMEYER K E, SUNG C J, RAJU M P. Skeletal mechanism generation for surrogate fuels using directed relation graph with error propagation and sensitivity analysis[J]. *Combustion and Flame*, 2010, 157(9): 1760-1770.
<https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2009.12.022>
- [49] SUN W T, CHEN Z, GOU X L, et al. A path flux analysis method for the reduction of detailed chemical kinetic mechanisms[J]. *Combustion and Flame*, 2010, 157(7): 1298-1307.
<https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2010.03.006>
- [50] GAO X, YANG S, SUN W T. A global pathway selection algorithm for the reduction of detailed chemical kinetic mechanisms[J]. *Combustion and Flame*, 2016, 167: 238-247.
<https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2016.02.007>
- [51] LIANG L, STEVENS J G, FARRELL J T. A dynamic adaptive chemistry scheme for reactive flow computations[J]. *Proceedings of the Combustion Institute*, 2009, 32(1): 527-534.
<https://doi.org/10.1016/j.proci.2008.05.073>
- [52] CHEN J Y, KOLLMANN W, DIBBLE R W. Pdf modeling of turbulent nonpremixed methane jet flames [J]. *Combustion Science and Technology*, 1989, 64(4/5/6): 315-346.
<https://doi.org/10.1080/00102208908924038>
- [53] TURÁNYI T. Parameterization of reaction mechanisms using orthonormal polynomials[J]. *Computers & Chemistry*, 1994, 18(1): 45-54.
[https://doi.org/10.1016/0097-8485\(94\)80022-7](https://doi.org/10.1016/0097-8485(94)80022-7)
- [54] CHRISTO F C, MASRI A R, NEBOT E M, et al. An integrated PDF/neural network approach for simulating turbulent reacting systems[J]. *Symposium (International) on Combustion*, 1996, 26(1): 43-48.
[https://doi.org/10.1016/s0082-0784\(96\)80198-6](https://doi.org/10.1016/s0082-0784(96)80198-6)
- [55] TONSE S R, MORIARTY N W, BROWN N J, et al. PRISM: piecewise reusable implementation of solution mapping. An economical strategy for chemical kinetics[J]. *Israel Journal of Chemistry*, 1999, 39(1): 97-106.
<https://doi.org/10.1002/ijch.199900010>
- [56] Maurice L, Edwards T, Griffiths J. Liquid hydrocarbon fuels for hypersonic propulsion[M]// *Scramjet Propulsion*. Chapter 12. Reston, VA: AIAA, 2001.
<https://doi.org/10.2514/5.9781600866609.0757.0822>
- [57] PANDEY K M, AZAD B K, SAHU S P, et al. Computational analysis of mixing in strut based combustion at air inlet Mach number 2 [J]. *International Journal of Environmental Science and Development*, 2011, 2(1): 73-80.
<https://doi.org/10.7763/IJESD.2011.V2.100>
- [58] 肖保国, 杨顺华, 邢建文, 等. 并行原位自适应建表方法在超燃计算中的应用[J]. *推进技术*, 2010, 31(4): 412-417.
XIAO B G, YANG S H, XING J W, et al. An application of parallel *in situ* adaptive tabulation method in calculation of supersonic combustion[J]. *Journal of Propulsion Technology*, 2010, 31(4): 412-417. (in Chinese)
- [59] MONTGOMERY C, ZHAO W, ADAMS B, et al. CFD simulations of supersonic combustion using reduced mechanisms and ISAT [C]//16th AIAA Computational Fluid Dynamics Conference, Orlando, Florida. Reston, Virginia: AIAA. AIAA 2003-3547.
<https://doi.org/10.2514/6.2003-3547>
- [60] WU K, CONTINO F, YAO W, et al. On the application of tabulated dynamic adaptive chemistry in ethylene-fueled supersonic combustion[J]. *Combustion and Flame*, 2018, 197: 265-275.
<https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2018.08.012>
- [61] 范学军, 俞刚. 大庆 RP-3 航空煤油热物性分析[J]. *推进技术*, 2006, 27(2): 187-192.
FAN X J, YU G. Analysis of thermophysical properties of Daqing RP-3 aviation kerosene [J]. *Journal of Propulsion Technology*, 2006, 27(2): 187-192. (in Chinese)
- [62] MICKA D, DRISCOLL J. Reaction zone imaging in a dual-mode scramjet combustor using CH-PLIF [C]//44th AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference & Exhibit, Hartford, CT. Reston, Virginia: AIAA. AIAA 2008-5071.
<https://doi.org/10.2514/6.2008-5071>
- [63] SCHULTZ I A, GOLDENSTEIN C S, SPEARRIN R M, et al. Multispecies midinfrared absorption measurements in a hydrocarbon-fueled scramjet combustor [J]. *Journal of Propulsion and Power*, 2014, 30(6): 1595-1604.
<https://doi.org/10.2514/1.b35261>
- [64] YUAN Y M, ZHANG T C, YAO W, et al. Characterization of flame stabilization modes in an ethylene-fueled supersonic combustor using time-resolved CH* chemiluminescence [J]. *Proceedings of the Combustion Institute*, 2017, 36(2): 2919-2925.
<https://doi.org/10.1016/j.proci.2016.07.040>

- [65] NARAYANASWAMY K, PITSCH H, PEPIOT P. A component library framework for deriving kinetic mechanisms for multi-component fuel surrogates: Application for jet fuel surrogates[J]. *Combustion and Flame*, 2016, 165: 288-309. <https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2015.12.013>
- [66] MARINOV N M, WESTBROOK C K, PITZ W J. Detailed and global chemical kinetics model for hydrogen [R]. Lawrence Livermore National Laboratory, UCRL-JC-120677, CONF-9510158-1, 1995. <https://digital.library.unt.edu/ark:/67531/metadc794810/>
- [67] ROGERS R C, CHINITZ W. Using a global hydrogen-air combustion model in turbulent reacting flow calculations[J]. *AIAA Journal*, 1983, 21(4): 586-592. <https://doi.org/10.2514/3.8117>
- [68] EKLUND D, STOUFFER S. A numerical and experimental study of a supersonic combustor employing sweep ramp fuel injectors[C]//30th Joint Propulsion Conference and Exhibit, Indianapolis, IN, USA. Reston, Virginia; AIAA. AIAA 1994-2819. <https://doi.org/10.2514/6.1994-2819>
- [69] ZHUKOV V P. Verification, validation, and testing of kinetic mechanisms of hydrogen combustion in fluid-dynamic computations[J]. *ISRN Mechanical Engineering*, 2012, 2012: 1-11. <https://doi.org/10.5402/2012/475607>
- [70] JACHIMOWSKI C J. An analytical study of the hydrogen-air reaction mechanism with application to scramjet combustion [R]. NASA Langley Research Center, NASA-TP-2791, 1988.
- [71] CONAIRE M Ó, CURRAN H J, SIMMIE J M, et al. A comprehensive modeling study of hydrogen oxidation [J]. *International Journal of Chemical Kinetics*, 2004, 36(11): 603-622. <https://doi.org/10.1002/kin.20036>
- [72] BURKE M P, CHAOS M, JU Y G, et al. Comprehensive H₂/O₂ kinetic model for high-pressure combustion[J]. *International Journal of Chemical Kinetics*, 2012, 44(7): 444-474. <https://doi.org/10.1002/kin.20603>
- [73] POTTURI A, EDWARDS J. LES/RANS simulation of a supersonic combustion experiment[C]//50th AIAA Aerospace Sciences Meeting including the New Horizons Forum and Aerospace Exposition, Nashville, Tennessee. Reston, Virginia; AIAA. AIAA 2012-611. <https://doi.org/10.2514/6.2012-611>
- [74] 甯红波, 李泽荣, 李象远. 燃烧反应动力学研究进展[J]. *物理化学学报*, 2016, 32(1): 131-153. NING H B, LI Z R, LI X Y. Progress in combustion kinetics [J]. *Acta Physico-Chimica Sinica*, 2016, 32(1): 131-153. (in Chinese)
- [75] 吴坤. 超声速燃烧室火焰稳定模式与简化化学反应机理研究[D]. 北京: 中国科学院大学, 2018. WU K. Investigation on the flame stabilization modes and chemical mechanism reduction in supersonic combustion[D]. Beijing: University of Chinese Academy of Sciences, 2018.
- [76] SLACK M W. Rate coefficient for H + O₂ + M = HO₂ + M evaluated from shock tube measurements of induction times[J]. *Combustion and Flame*, 1977, 28: 241-249. [https://doi.org/10.1016/0010-2180\(77\)90031-1](https://doi.org/10.1016/0010-2180(77)90031-1)
- [77] BHASKARAN K A, GUPTA M C, JUST T. Shock tube study of the effect of unsymmetric dimethyl hydrazine on the ignition characteristics of hydrogen-air mixtures [J]. *Combustion and Flame*, 1973, 21(1): 45-48. [https://doi.org/10.1016/0010-2180\(73\)90005-9](https://doi.org/10.1016/0010-2180(73)90005-9)
- [78] HU E J, HUANG Z H, HE J J, et al. Experimental and numerical study on laminar burning velocities and flame instabilities of hydrogen-air mixtures at elevated pressures and temperatures[J]. *International Journal of Hydrogen Energy*, 2009, 34(20): 8741-8755. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2009.08.044>
- [79] ZHOU X J, JIANG X, MIRA MARTINEZ D. The effects of chemical kinetic mechanisms on large eddy simulation (LES) of a nonpremixed hydrogen jet flame[J]. *International Journal of Hydrogen Energy*, 2016, 41(26): 11427-11440. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2016.04.079>
- [80] SMITH G P, GOLDEN D M, FRENKLACH M, et al. GRI-Mech 3.0 [EB/OL]. <http://combustion.berkeley.edu/gri-mech/version30/text30.html> http://WWW.ME.BERKELEY.EDU/GRI_MECH/
- [81] DAVIS S G, JOSHI A V, WANG H, et al. An optimized kinetic model of H₂/CO combustion [J]. *Proceedings of the Combustion Institute*, 2005, 30(1): 1283-1292. <https://doi.org/10.1016/j.proci.2004.08.252>
- [82] HONG Z K, DAVIDSON D F, HANSON R K. An improved H₂/O₂ mechanism based on recent shock tube/laser absorption measurements[J]. *Combustion and Flame*, 2011, 158(4): 633-644. <https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2010.10.002>
- [83] BOIVIN P, JIMÉNEZ C, SÁNCHEZ A L, et al. An explicit reduced mechanism for H₂-air combustion[J]. *Proceedings of the Combustion Institute*, 2011, 33(1): 517-523. <https://doi.org/10.1016/j.proci.2010.05.002>
- [84] KEISTLER P, XIAO X D, HASSAN, et al. Simulation of the SCHOLAR supersonic combustion experiments [C]//45th AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit, Reno, Nevada. Reston, Virginia; AIAA. AIAA 2007-835. <https://doi.org/10.2514/6.2007-835>
- [85] GERLINGER P, NOLD K, AIGNER M. Influence of reaction mechanisms, grid spacing, and inflow conditions on the numerical simulation of lifted supersonic flames [J]. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 2009, 62(12): 1357-1380. <https://doi.org/10.1002/fld.2076>
- [86] KUMARAN K, BABU V. Investigation of the effect of chemistry models on the numerical predictions of the supersonic combustion of hydrogen[J]. *Combustion and Flame*, 2009, 156(4): 826-841. <https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2009.01.008>
- [87] HSU K, JEMCOV A. Numerical investigations of detonation in premixed hydrogen-air mixture - Assessment of simplified chemical mechanisms [C]//Fluids 2000 Conference and Exhibit, Denver, CO, USA. Reston, Virginia; AIAA. AIAA 2000-2478. <https://doi.org/10.2514/6.2000-2478>
- [88] EDWARDS J R, BOLES J A, BAURLE R A. Large-eddy/Reynolds-averaged Navier-Stokes simulation of a supersonic reacting wall jet[J]. *Combustion and Flame*, 2012, 159(3): 1127-1138. <https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2011.10.009>
- [89] DAVIDENKO D, GÖKALP I, DUFOUR E, et al. Numerical simulation of hydrogen supersonic combustion and validation of computational approach[C]//12th AIAA International Space Planes and Hypersonic Systems and Technologies, Norfolk, Virginia. Reston, Virginia; AIAA. AIAA 2003-7033.

- <https://doi.org/10.2514/6.2003-7033>
- [90] FUREBY C, FEDINA E, TEGNÉR J. A computational study of supersonic combustion behind a wedge-shaped flameholder [J]. *Shock Waves*, 2014, 24(1): 41-50.
<https://doi.org/10.1007/s00193-013-0459-2>
- [91] LIU B, HE G Q, QIN F, et al. Investigation of influence of detailed chemical kinetics mechanisms for hydrogen on supersonic combustion using large eddy simulation [J]. *International Journal of Hydrogen Energy*, 2019, 44(10): 5007-5019.
<https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2019.01.005>
- [92] MARINOV N M, PITZ W J, WESTBROOK C K, et al. Aromatic and polycyclic aromatic hydrocarbon formation in a laminar premixed n-butane flame[J]. *Combustion and Flame*, 1998, 114(1/2): 192-213.
[https://doi.org/10.1016/S0010-2180\(97\)00275-7](https://doi.org/10.1016/S0010-2180(97)00275-7)
- [93] Mechanical and Aerospace Engineering (Combustion Research), University of California at San Diego. Chemical-kinetic mechanisms for combustion applications[EB/OL]. <http://web.eng.ucsd.edu/mae/groups/combustion/mechanism.htm>
- [94] WANG H, YOU X Q, JOSH A V, et al. USC mech version ii: High-temperature combustion reaction model of H₂/CO/C₁-C₄ compounds[EB/OL]. http://ignis.usc.edu/USC_Mech_II.htm, 2007-05.
- [95] WANG H, LASKIN A. A comprehensive kinetic model of ethylene and acetylene oxidation at high temperatures [R]. Delaware: University of Delaware, 1998.
<http://ignis.usc.edu/Mechanisms/C2-C4/c2.pdf>
- [96] KONNOV A. Development and validation of a detailed reaction mechanism for the combustion modeling[J]. *Eurasian Chemical-Technological Journal*, 2000, 2(3-4): 257-264.
- [97] QIN Z W, LISSIANSKI V V, YANG H X, et al. Combustion chemistry of propane: a case study of detailed reaction mechanism optimization [J]. *Proceedings of the Combustion Institute*, 2000, 28(2): 1663-1669.
[https://doi.org/10.1016/s0082-0784\(00\)80565-2](https://doi.org/10.1016/s0082-0784(00)80565-2)
- [98] XU C Q, KONNOV A A. Validation and analysis of detailed kinetic models for ethylene combustion[J]. *Energy*, 2012, 43(1): 19-29.
<https://doi.org/10.1016/j.energy.2011.11.006>
- [99] SEGAL C. The scramjet engine[M]. Cambridge: Cambridge University Press, 2009.
<https://doi.org/10.1017/cbo9780511627019>
- [100] WU K, YAO W, FAN X J. Development and fidelity evaluation of a skeletal ethylene mechanism under scramjet-relevant conditions[J]. *Energy & Fuels*, 2017, 31(12): 14296-14305.
<https://doi.org/10.1021/acs.energyfuels.7b03033>
- [101] KALITAN D M, HALL J M, PETERSEN E L. Ignition and oxidation of ethylene-oxygen-diluent mixtures with and without silane[J]. *Journal of Propulsion and Power*, 2005, 21(6): 1045-1056.
<https://doi.org/10.2514/1.8026>
- [102] EGOLFOPOULOS F N, ZHU D L, LAW C K. Experimental and numerical determination of laminar flame speeds: Mixtures of C₂-hydrocarbons with oxygen and nitrogen[J]. *Symposium (International) on Combustion*, 1991, 23(1): 471-478.
[https://doi.org/10.1016/S0082-0784\(06\)80293-6](https://doi.org/10.1016/S0082-0784(06)80293-6)
- [103] KUMAR K, MITTAL G, SUNG C J, et al. An experimental investigation of ethylene/O₂/diluent mixtures: Laminar flame speeds with preheat and ignition delays at high pressures [J]. *Combustion and Flame*, 2008, 153(3): 343-354.
<https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2007.11.012>
- [104] WESTBROOK C K, DRYER F L. Simplified reaction mechanisms for the oxidation of hydrocarbon fuels in flames[J]. *Combustion Science and Technology*, 1981, 27(1/2): 31-43.
<https://doi.org/10.1080/00102208108946970>
- [105] SINGH D J, JACHIMOWSKI C J. Quasiglobal reaction model for ethylene combustion[J]. *AIAA Journal*, 1994, 32(1): 213-216.
<https://doi.org/10.2514/3.11972>
- [106] LÖVÅS T, MALIK N, MAUSS F. Global reaction mechanism for ethylene flames with preferential diffusion[J]. *Combustion Science and Technology*, 2010, 182(11/12): 1945-1960
<https://doi.org/10.1080/00102202.2010.497419>
- [107] MONTGOMERY C. Optimized reduced chemical kinetic mechanisms for ethylene and JP-8 combustion[C]//45th AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit, Reno, Nevada, Reston, Virginia: AIAA, AIAA 2007-771.
<https://doi.org/10.2514/6.2007-771>
- [108] 殷悦, 俞刚. 乙烯超声速燃烧的数值模拟研究[J]. *实验流体力学*, 2006, 20(2): 55-57, 77.
YIN Y, YU G. Numerical study of supersonic combustion of ethylene[J]. *Journal of Experiments in Fluid Mechanics*, 2006, 20(2): 55-57, 77.
- [109] ZHONG F Q, CHEN L H, LI F, et al. Numerical simulation of ignition and combustion of ethylene in a supersonic model combustor with a reduced kinetic mechanism[J]. *Combustion Science and Technology*, 2013, 185(4): 548-563.
<https://doi.org/10.1080/00102202.2012.730080>
- [110] 肖保国, 赵慧勇, 杨顺华, 等. 乙烯简化化学动力学模型在 HiFire 燃烧室计算中的应用[J]. *航空动力学报*, 2014, 29(6): 1287-1294.
XIAO B G, ZHAO H Y, YANG S H, et al. Application of reduced chemical kinetic model for ethylene combustion in combustor calculation of HiFire [J]. *Journal of Aerospace Power*, 2014, 29(6): 1287-1294. (in Chinese)
- [111] LUO Z Y, LU T F, LIU J W. A reduced mechanism for ethylene/methane mixtures with excessive NO enrichment[J]. *Combustion and Flame*, 2011, 158(7): 1245-1254.
<https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2010.12.009>
- [112] ZHONG F Q, MA S G, ZHANG X Y, et al. Development of efficient and accurate skeletal mechanisms for hydrocarbon fuels and kerosene surrogate[J]. *Acta Mechanica Sinica*, 2015, 31(5): 732-740.
<https://doi.org/10.1007/s10409-015-0434-5>
- [113] 李瑞, 何国强, 秦飞, 等. 乙烯燃烧化学动力学机理的简化与分析[J]. *航空动力学报*, 2018, 33(9): 2074-2083.
LI R, HE G Q, QIN F, et al. Skeletal chemical kinetic model generation and analysis for combustion of ethylene[J]. *Journal of Aerospace Power*, 2018, 33(9): 2074-2083. (in Chinese)
- [114] 徐旭, 蔡国飙. 氢/碳氢燃料超声速燃烧的数值模拟[J]. *推进技术*, 2002, 23(5): 398-401.
XU X, CAI G B. Numerical simulation on combustion of hydrogen/hydrocarbon in supersonic airstream[J]. *Journal of Propulsion Technology*, 2002, 23(5): 398-401. (in Chinese)
- [115] ZHANG L W, CHOI J Y, YANG V. Supersonic combustion and flame stabilization of coflow ethylene and air with splitter plate[J]. *Journal of Propulsion and Power*, 2015, 31(5): 1242-1255.
<https://doi.org/10.2514/1.635740>
- [116] 田野, 乐嘉陵, 杨顺华, 等. 乙烷燃料超燃冲压发动机流场振荡及其控制研究[J]. *推进技术*, 2015, 36(7): 961-967.

- TIAN Y, LE J L, YANG S H, et al. Study on flow oscillation and its control methods in an ethylene-fueled scramjet combustor[J]. *Journal of Propulsion Technology*, 2015, 36(7): 961-967. (in Chinese)
- [117] LI J, ZHANG L W, CHOI J Y, et al. Ignition transients in a scramjet engine with air throttling part II: reacting flow[J]. *Journal of Propulsion and Power*, 2015, 31(1): 79-88. <https://doi.org/10.2514/1.135269>
- [118] BAURLE R, MATHUR T, GRUBER M, et al. A numerical and experimental investigation of a scramjet combustor for hypersonic missile applications[C]//34th AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference and Exhibit, Cleveland, OH, USA. Reston, Virginia: AIAA. AIAA 1998-3121. <https://doi.org/10.2514/6.1998-3121>
- [119] EKLUND D, BAURLE R, GRUBER M. Numerical study of a scramjet combustor fueled by an aerodynamic ramp injector in dual-mode combustion[C]//39th Aerospace Sciences Meeting and Exhibit, Reno, NV, USA. Reston, Virginia: AIAA. AIAA 2001-379. <https://doi.org/10.2514/6.2001-379>
- [120] LIU J W, TAM C, LU T F, et al. Simulations of cavity-stabilized flames in supersonic flows using reduced chemical kinetic mechanisms[C]//42nd AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference & Exhibit, Sacramento, California. Reston, Virginia: AIAA. AIAA 2006-4862. <https://doi.org/10.2514/6.2006-4862>
- [121] COCKS P, DONOHUE J, BRUNO C, et al. IDDES of a dual-mode ethylene fueled cavity flameholder with an isolator shock train[C]//51st AIAA Aerospace Sciences Meeting including the New Horizons Forum and Aerospace Exposition, Grapevine (Dallas/Ft. Worth Region), Texas. Reston, Virginia: AIAA. AIAA 2013-116. <https://doi.org/10.2514/6.2013-116>
- [122] EDWARDS T, MAURICE L Q. Surrogate mixtures to represent complex aviation and rocket fuels [J]. *Journal of Propulsion and Power*, 2001, 17(2): 461-466. <https://doi.org/10.2514/2.5765>
- [123] DAGAUT P, CATHONNET M. The ignition, oxidation, and combustion of kerosene: a review of experimental and kinetic modeling[J]. *Progress in Energy and Combustion Science*, 2006, 32(1): 48-92. <https://doi.org/10.1016/j.pecs.2005.10.003>
- [124] DAGAUT P, REUILLON M, BOETTNER J C, et al. Kerosene combustion at pressures up to 40 atm: Experimental study and detailed chemical kinetic modeling[J]. *Symposium (International) on Combustion*, 1994, 25(1): 919-926. [https://doi.org/10.1016/S0082-0784\(06\)80727-7](https://doi.org/10.1016/S0082-0784(06)80727-7)
- [125] DOUTÉ C, DELFAU J L, AKRICH R, et al. Chemical structure of atmospheric pressure-premixed *n*-decane and kerosene flames [J]. *Combustion Science and Technology*, 1995, 106(4/5/6): 327-344. <https://doi.org/10.1080/00102209508907785>
- [126] VOVELLE C, DELFAU J L, REUILLON M. Formation of aromatic hydrocarbons in decane and kerosene flames at reduced pressure[M]//Springer Series in Chemical Physics. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 1994: 50-65. https://doi.org/10.1007/978-3-642-85167-4_4
- [127] MAURICE L, BLUST J, LEUNG K, et al. Emissions from combustion of hydrocarbons in a well-stirred reactor[C]//37th Aerospace Sciences Meeting and Exhibit, Reno, NV, USA. Reston, Virginia: AIAA. AIAA 1999-1038. <https://doi.org/10.2514/6.1999-1038>
- [128] LINDSTEDT R P, MAURICE L Q. Detailed chemical-kinetic model for aviation fuels[J]. *Journal of Propulsion and Power*, 2000, 16(2): 187-195. <https://doi.org/10.2514/2.5582>
- [129] GUÉRET C, CATHONNET M, BOETTNER J C, et al. Experimental study and modeling of kerosene oxidation in a jet-stirred flow reactor [J]. *Symposium (International) on Combustion*, 1991, 23(1): 211-216. [https://doi.org/10.1016/S0082-0784\(06\)80261-4](https://doi.org/10.1016/S0082-0784(06)80261-4)
- [130] DAGAUT P. On the kinetics of hydrocarbons oxidation from natural gas to kerosene and diesel fuel[J]. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 2002, 4(11): 2079-2094. <https://doi.org/10.1039/b110787a>
- [131] HONNET S, SESHADRI K, NIEMANN U, et al. A surrogate fuel for kerosene[J]. *Proceedings of the Combustion Institute*, 2009, 32(1): 485-492. <https://doi.org/10.1016/j.proci.2008.06.218>
- [132] DAGAUT P, EL BAKALI A, RISTORI A. The combustion of kerosene: Experimental results and kinetic modelling using 1- to 3-component surrogate model fuels[J]. *Fuel*, 2006, 85(7/8): 944-956. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2005.10.008>
- [133] DOOLEY S, WON S H, CHAOS M, et al. A jet fuel surrogate formulated by real fuel properties[J]. *Combustion and Flame*, 2010, 157(12): 2333-2339. <https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2010.07.001>
- [134] DOOLEY S, WON S H, HEYNE J, et al. The experimental evaluation of a methodology for surrogate fuel formulation to emulate gas phase combustion kinetic phenomena [J]. *Combustion and Flame*, 2012, 159(4): 1444-1466. <https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2011.11.002>
- [135] DAGAUT P, KARSENTY F, DAYMA G, et al. Experimental and detailed kinetic model for the oxidation of a Gas to Liquid (GtL) jet fuel[J]. *Combustion and Flame*, 2014, 161(3): 835-847. <https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2013.08.015>
- [136] 肖保国, 杨顺华, 赵慧勇, 等. RP-3 航空煤油燃烧的详细和简化化学动力学模型[J]. *航空动力学报*, 2010, 25(9): 1948-1955.
- XIAO B G, YANG S H, ZHAO H Y, et al. Detailed and reduced chemical kinetic mechanisms for RP-3 aviation kerosene combustion[J]. *Journal of Aerospace Power*, 2010, 25(9): 1948-1955. (in Chinese)
- [137] 曾文, 李海霞, 马洪安, 等. RP-3 航空煤油模拟替代燃料的化学反应简化机理[J]. *推进技术*, 2014, 35(8): 1139-1145.
- ZENG W, LI H X, MA H A, et al. Reduced chemical reaction mechanism of surrogate fuel for RP-3 kerosene[J]. *Journal of Propulsion Technology*, 2014, 35(8): 1139-1145. (in Chinese)
- [138] MAO Y, YU L, WU Z, et al. Experimental and kinetic modeling study of ignition characteristics of RP-3 kerosene over low-to-high temperature ranges in a heated rapid compression machine and a heated shock tube[J]. *Combustion and Flame*, 2019, 203: 157-169. <https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2019.02.015>
- [139] LIU W, LIANG X, LIN B Y, et al. A comparative study on soot particle size distributions in premixed flames of RP-3 jet fuel and its surrogates[J]. *Fuel*, 2020, 259: 116222. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2019.116222> <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0016236119315765>
- [140] 徐佳琪, 郭俊江, 刘爱科, 等. RP-3 替代燃料自点火燃烧机理构建及动力学模拟[J]. *物理化学学报*, 2015, 31(4): 643-652.

- XU J Q, GUO J J, LIU A K, et al. Construction of autoignition mechanisms for the combustion of RP-3 surrogate fuel and kinetics simulation[J]. *Acta Physico-Chimica Sinica*, 2015, 31(4): 643-652. (in Chinese)
- [141] YU J, GOU X L. Comprehensive surrogate for emulating physical and kinetic properties of jet fuels [J]. *Journal of Propulsion and Power*, 2018, 34(3): 679-689. <https://doi.org/10.2514/1.636766>
- [142] 郑东, 于维铭, 钟北京. RP-3 航空煤油替代燃料及其化学反应动力学模型[J]. *物理化学学报*, 2015, 31(4): 636-642. ZHENG D, YU W M, ZHONG B J. RP-3 aviation kerosene surrogate fuel and the chemical reaction kinetic model[J]. *Acta Physico-Chimica Sinica*, 2015, 31(4): 636-642. (in Chinese)
- [143] NAJJAR Y S H, GOODGER E M. Soot formation in gas turbines using heavy fuels. 1[J]. *Fuel*, 1981, 60(10): 980-986. [https://doi.org/10.1016/0016-2361\(81\)90096-x](https://doi.org/10.1016/0016-2361(81)90096-x)
- [144] ALY S L, SALEM H. Prediction of premixed laminar flame characteristics of commercial kerosene fuel[J]. *Fuel*, 1989, 68(9): 1203-1209. [https://doi.org/10.1016/0016-2361\(89\)90196-8](https://doi.org/10.1016/0016-2361(89)90196-8)
- [145] KUNDU K P, DEUR J M. A simplified reaction mechanism for calculation of emissions in hydrocarbon (Jet-A) combustion [C]//29th Joint Propulsion Conference and Exhibit, Monterey, CA, USA. Reston, Virigina; AIAA. AIAA 1993-2341. <https://doi.org/10.2514/6.1993-2341>
- [146] WANG T S. Thermophysics characterization of kerosene combustion[J]. *Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, 2001, 15(2): 140-147. <https://doi.org/10.2514/2.6602>
- [147] CHOI J. A quasi global mechanism of kerosene combustion for propulsion applications [C]//47th AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference & Exhibit, San Diego, California. Reston, Virigina; AIAA. AIAA 2011-5853. <https://doi.org/10.2514/6.2011-5853>
- [148] FRANZELLI B, RIBER E, SANJOSÉ M, et al. A two-step chemical scheme for kerosene-air premixed flames [J]. *Combustion and Flame*, 2010, 157(7): 1364-1373. <https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2010.03.014>
- [149] RAJASEKARAN A, BABU V. Numerical simulation of kerosene combustion in a dual mode supersonic combustor [C]//42nd AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference & Exhibit, Sacramento, California. Reston, Virigina; AIAA. AIAA 2006-5041. <https://doi.org/10.2514/6.2006-5041>
- [150] 黄生洪, 徐胜利, 刘小勇. 煤油超燃冲压发动机两相流场数值研究 (III) 煤油在超燃流场中的多步化学反应特征[J]. *推进技术*, 2005, 26(2): 101-105. HUANG S H, XU S L, LIU X Y. Combustion flow of kerosene-fueled scramjet with 3D cavity (III) Multi-step chemistry characteristics of kerosene[J]. *Journal of Propulsion Technology*, 2005, 26(2): 101-105. (in Chinese)
- [151] KUMARAN K, BABU V. Mixing and combustion characteristics of kerosene in a model supersonic combustor[J]. *Journal of Propulsion and Power*, 2009, 25(3): 583-592. <https://doi.org/10.2514/1.40140>
- [152] KUMARAN K, BEHERA P R, BABU V. Numerical investigation of the supersonic combustion of kerosene in a strut-based combustor[J]. *Journal of Propulsion and Power*, 2010, 26(5): 1084-1091. <https://doi.org/10.2514/1.46965>
- [153] DHARAVATH M, MANNA P, SINHA P K, et al. Numerical analysis of a kerosene-fueled scramjet combustor[J]. *Journal of Thermal Science and Engineering Applications*, 2016, 8(1): 011003. <https://doi.org/10.1115/1.4030699>
- [154] 侯凌云, 牛东圣, 潘鹏飞, 等. 煤油总包反应机理对超声速燃烧的影响[J]. *推进技术*, 2013, 34(7): 938-943. HOU L Y, NIU D S, PAN P F, et al. Effects of kerosene global reaction mechanisms on supersonic combustion [J]. *Journal of Propulsion Technology*, 2013, 34(7): 938-943. (in Chinese)
- [155] KYNE A G, PATTERSON P, POURKASHANIAN M, et al. Prediction of premixed laminar flame structure and burning velocity of aviation fuel-air mixtures [C]//ASME Turbo Expo 2001: Power for Land, Sea, and Air. Volume 2: Coal, Biomass and Alternative Fuels; Combustion and Fuels; Oil and Gas Applications; Cycle Innovations. New Orleans, Louisiana, USA, 2001. <http://dx.doi.org/10.1115/2001-GT-0055> ISBN: 978-0-7918-7851-4
- [156] MONTGOMERY C, CANNON S, MAWID M, et al. Reduced chemical kinetic mechanisms for JP-8 combustion [C]//40th AIAA Aerospace Sciences Meeting & Exhibit, Reno, NV, USA. Reston, Virigina; AIAA. AIAA 2002-336. <https://doi.org/10.2514/6.2002-336>
- [157] LUCHE J, REUILLON M, BOETTNER J C, et al. Reduction of large detailed kinetic mechanisms: application to kerosene/air combustion[J]. *Combustion Science and Technology*, 2004, 176(11): 1935-1963. <https://doi.org/10.1080/00102200490504571>
- [158] STRELKOVA M I, KIRILLOV I A, POTAPKIN B V, et al. Detailed and reduced mechanisms of jet a combustion at high temperatures[J]. *Combustion Science and Technology*, 2008, 180(10/11): 1788-1802. <https://doi.org/10.1080/00102200802258379>
- [159] WANG Q D, FANG Y M, WANG F, et al. Skeletal mechanism generation for high-temperature oxidation of kerosene surrogates [J]. *Combustion and Flame*, 2012, 159(1): 91-102. <https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2011.05.019>
- [160] WANG Q D, FANG Y M, WANG F, et al. Systematic analysis and reduction of combustion mechanisms for ignition of multi-component kerosene surrogate [J]. *Proceedings of the Combustion Institute*, 2013, 34(1): 187-195. <https://doi.org/10.1016/j.proci.2012.06.011>
- [161] ZHONG B J, PENG H S. Development of a skeletal mechanism for aviation kerosene surrogate fuel [J]. *Journal of Propulsion and Power*, 2019, 35(3): 645-651. <https://doi.org/10.2514/1.637421>
- [162] YAO W, WU K, LEE Y, et al. Influence of chemical mechanisms on supersonic combustion characteristics fueled by kerosene [C]//2018 Joint Propulsion Conference, Cincinnati, Ohio. Reston, Virginia; AIAA. AIAA 2018-4740. <https://doi.org/10.2514/6.2018-4740>
- [163] 樊孝峰, 王江峰, 赵法明, 等. 煤油简化化学反应机理在超燃数值模拟中的应用[J]. *空气动力学学报*, 2018, 36(6): 974-982. FAN X F, WANG J F, ZHAO F M, et al. Applications of reduced reaction mechanism for numerical calculations in supersonic combustion of kerosene fuel [J]. *Acta Aerodynamica Sinica*, 2018, 36(6): 974-982. (in Chinese) <http://www.cnki.net>

- [164] YAO W, WU K, FAN X J. Development of skeletal kerosene mechanisms and application to supersonic combustion [J]. *Energy & Fuels*, 2018, 32(12): 12992-13003. <https://doi.org/10.1021/acs.energyfuels.8b03350>
- [165] YAO W, LU Y, WU K, et al. Modeling analysis of an actively cooled scramjet combustor under different kerosene/air ratios [J]. *Journal of Propulsion and Power*, 2018, 34(4): 975-991. <https://doi.org/10.2514/1.136866>
- [166] YAO W, YUAN Y M, LI X P, et al. Comparative study of elliptic and round scramjet combustors fueled by RP-3 [J]. *Journal of Propulsion and Power*, 2018, 34(3): 772-786. <https://doi.org/10.2514/1.136721>
- [167] YAO W, WU K, FAN X J. Influences of domain symmetry on supersonic combustion modeling [J]. *Journal of Propulsion and Power*, 2019, 35(2): 451-465. <https://doi.org/10.2514/1.137227>
- [168] SCHWER D A, LU P S, GREEN Jr W H. An adaptive chemistry approach to modeling complex kinetics in reacting flows [J]. *Combustion and Flame*, 2003, 133(4): 451-465. [https://doi.org/10.1016/s0010-2180\(03\)00045-2](https://doi.org/10.1016/s0010-2180(03)00045-2)
- [169] LIANG L, STEVENS J G, FARRELL J T. A dynamic multi-zone partitioning scheme for solving detailed chemical kinetics in reactive flow computations [J]. *Combustion Science and Technology*, 2009, 181(11): 1345-1371. <https://doi.org/10.1080/00102200903190836>
- [170] GOLDSBOROUGH S S, BANYON C, MITTAL G. A computationally efficient, physics-based model for simulating heat loss during compression and the delay period in RCM experiments [J]. *Combustion and Flame*, 2012, 159(12): 3476-3492. <https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2012.07.010>
- [171] CONTINO F, FOUCHER F, DAGAUT P, et al. Experimental and numerical analysis of nitric oxide effect on the ignition of iso-octane in a single cylinder HCCI engine [J]. *Combustion and Flame*, 2013, 160(8): 1476-1483. <https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2013.02.028>
- [172] REN Z Y, LIU Y F, LU T F, et al. The use of dynamic adaptive chemistry and tabulation in reactive flow simulations [J]. *Combustion and Flame*, 2014, 161(1): 127-137. <https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2013.08.018>
- [173] WEI H Q, ZHOU L, ZHOU H, et al. Toward efficient chemistry calculations in engine simulations through static adaptive acceleration [J]. *Combustion Science and Technology*, 2017, 189(4): 623-642. <https://doi.org/10.1080/00102202.2016.1229312>
- [174] YANG S, RANJAN R, YANG V, et al. Parallel on-the-fly adaptive kinetics in direct numerical simulation of turbulent premixed flame [J]. *Proceedings of the Combustion Institute*, 2017, 36(2): 2025-2032. <https://doi.org/10.1016/j.proci.2016.07.021>
- [175] CONTINO F, JEANMART H, LUCCHINI T, et al. Coupling of *in situ* adaptive tabulation and dynamic adaptive chemistry: an effective method for solving combustion in engine simulations [J]. *Proceedings of the Combustion Institute*, 2011, 33(2): 3057-3064. <https://doi.org/10.1016/j.proci.2010.08.002>
- [176] AN J, HE G Q, QIN F, et al. Dynamic adaptive chemistry with mechanisms tabulation and *in situ* adaptive tabulation (ISAT) for computationally efficient modeling of turbulent combustion [J]. *Combustion and Flame*, 2019, 206: 467-475. <https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2019.05.016>