

超临界环境下煤油替代物液滴燃烧特性数值研究^{*}

吴海龙, 聂万胜, 郑 直, 何 博

(航天工程大学 宇航科学与技术系, 北京 101416)

摘 要: 为研究液氧/煤油火箭发动机燃烧室内经喷注形成的煤油液滴的燃烧过程, 基于实际气体状态方程、高压热物性修正、高压气液平衡和详细化学反应动力学, 建立一维的全瞬态液滴燃烧模型, 对超临界环境下两组分煤油替代物液滴的燃烧特性及液滴初始直径的影响进行仿真研究。结果表明, 在超临界环境下, 相比于煤油液滴纯蒸发过程, 煤油液滴燃烧过程的迁移时刻大大提前; 煤油液滴着火之后很快进入超临界燃烧阶段, 此时液滴燃烧过程可以看成中心附近的燃料高浓度区与外侧氧气高浓度区之间的扩散燃烧过程; 煤油液滴的火焰半径先增大, 达到最大值之后开始减小, 并减小为零, 火焰温度在着火之后快速上升至最大值, 并基本保持不变, 在火焰半径减小为零之后开始降低; 随着液滴初始直径的增大, 火焰特性以及液滴中心参数变化曲线趋势不变、整体延迟, 着火时间、迁移时间和液滴寿命增大。

关键词: 煤油替代物; 液滴; 超临界环境; 燃烧特性; 数值仿真

中图分类号: V312.1

文献标识码: A

文章编号: 1001-4055 (2019) 11-2537-09

DOI: 10.13675/j.cnki. tjjs. 190002

Numerical Investigation on Combustion Characteristics of Kerosene Surrogate Droplet in Supercritical Environment

WU Hai-long, NIE Wan-sheng, ZHENG Zhi, HE Bo

(Department of Aerospace Science and Technology, Space Engineering University, Beijing 101416, China)

Abstract: To study the combustion process of kerosene droplet which was injected into the combustion chamber of LOX/kerosene rocket engine, based on the equation of state for actual gases, the correction of thermal physical properties under high pressure, vapor-liquid equilibrium under high pressure and detailed chemical-kinetic mechanisms, a one-dimensional transient droplet combustion model was established. The model was used to simulate the combustion characteristics and the influence of the initial droplet diameter of the bicomponent kerosene surrogate droplet in supercritical environment. The results show that, in supercritical environment, the migration time of combustion for kerosene droplet is much earlier than that of pure evaporation. The kerosene droplet enters the supercritical combustion stage soon after ignition and the droplet combustion process can be regarded as the diffusion combustion process between the high concentration of fuel near the center and the high concentration of oxygen outside. The flame radius of kerosene droplet first increases, and then decreases to zero after reaching the maximum. The flame temperature rises rapidly to the maximum after ignition, then almost keeps steady,

^{*} 收稿日期: 2019-01-01; 修订日期: 2019-03-14。

基金项目: 国家自然科学基金 (51876219)。

作者简介: 吴海龙, 硕士生, 研究领域为煤油液滴蒸发燃烧仿真。E-mail: hailong408@qq.com

通讯作者: 聂万胜, 博士, 教授, 研究领域为液体火箭发动机。E-mail: nws1969@126.com

引用格式: 吴海龙, 聂万胜, 郑 直, 等. 超临界环境下煤油替代物液滴燃烧特性数值研究[J]. 推进技术, 2019, 40(11): 2537-2545. (WU Hai-long, NIE Wan-sheng, ZHENG Zhi, et al. Numerical Investigation on Combustion Characteristics of Kerosene Surrogate Droplet in Supercritical Environment[J]. *Journal of Propulsion Technology*, 2019, 40(11):2537-2545.)

and finally reduced after the flame radius decreases to zero. With the increase of initial droplet diameter, the variation tendency of flame characteristic and droplet center parameter is almost unchanged, only overall delay. The ignition time, migration time and droplet life increase as the initial diameter of the droplet increases.

Key words: Kerosene surrogate; Droplet; Supercritical environment; Combustion characteristic; Numerical simulation

1 引 言

目前主流的液氧煤油发动机在稳定工作时燃烧室压力都很高。前苏联的 RD-170 的燃烧室压力达到 24.54 MPa, 俄罗斯的 NK-33 的燃烧室压力达到了 14.7 MPa^[1], 国内的 YF-100 的燃烧室压力达到 18 MPa, 已经远高于煤油和氧气的临界压力, 燃烧室温度也已经远远超过了临界温度^[2]。超临界环境对发动机性能影响很大, 而且这种影响大多数体现为对液滴行为的影响, 当煤油经喷注作用进入充满超临界气体的环境时, 从雾化到发生化学反应的整个燃烧过程的所有方面都与众所周知的亚临界环境下的结果大相径庭^[3]。考虑到后续大推力液体火箭发动机的研发及发动机性能提升, 对超临界环境下煤油液滴的燃烧特性进行研究显得尤为关键。

超临界环境下, 液滴燃烧的研究通过实验和数值仿真两种手段进行。实验方面主要采用挂滴法, 将液滴悬挂于带有头部的纤维丝上, 置于密闭容腔内, 通过加热容腔使液滴自燃或者采用电火花点火的方式将液滴点燃, 研究液滴的燃烧过程。Sato 等^[4]研究了正辛烷在高压环境下的点火燃烧过程, 讨论了微重力环境下液滴点火燃烧的特性及自然对流对液滴点火燃烧的影响。张蒙正等^[5]采用重活塞实验系统, 研究了煤油液滴在超临界环境下的蒸发和燃烧现象, 结果表明, 在超临界环境下煤油液滴发生自燃, 且呈现多点着火现象。Ma 等^[6]研究了亚临界和超临界环境下正十六烷和正十七烷液滴的燃烧特性, 测得了燃烧过程中液滴温度和液滴发展变化情况, 发现超临界环境下液滴不存在蒸发平衡阶段, 准定常假设不成立。

仿真方面的研究主要在低压全瞬态液滴燃烧模型的基础上, 考虑超临界环境影响, 建立模型进行研究。Shuen 等^[7]基于 Hsieh 等^[8]的模型, 采用有限速率化学反应模型计算气相化学反应, 建立了超临界液滴燃烧模型。结果表明, 液滴在亚临界环境下的燃烧过程为蒸发控制下的燃烧, 在超临界环境下的燃烧为扩散控制下的燃烧。孙凤贤等^[9-10]针对零重力、静止环境下的碳氢燃料液滴的蒸发燃烧过程及环境

压力和温度对这些特性的影响进行了研究。结果表明, 液滴蒸发和燃烧过程具有强烈的耦合特性, 蒸发和火焰面的动态特性在液滴的蒸发燃烧的前期和后期表现出明显不同的特征。王宏楠等^[11]建立了实现超临界迁移现象的液滴燃烧模型, 并用该模型以正庚烷液滴为研究对象, 采用单步总包反应计算化学反应源项, 研究了环境压力、温度和液滴初始温度对液滴燃烧的影响, 得到了一系列液滴燃烧寿命和火焰特性的规律。

在之前的研究中, 针对煤油液滴的研究以实验研究为主, 仿真研究很少, 且仿真研究针对单一组分或单组分煤油替代物, 并采用单步总包反应来计算化学反应源项, 无法精确获得煤油液滴的点火和燃烧特性。本文针对 RP-3 煤油, 选取两组分煤油替代物, 并采用详细化学反应机理, 建立仿真计算模型并开展相关研究, 得到超临界环境下煤油液滴的燃烧特性。

2 物理模型和计算方法

由于实际的液氧/煤油火箭发动机中经雾化形成的液滴和液滴所处的环境都比较复杂, 仿真计算过程中无法完全复现实际工况, 必须对实际工况进行如下简化:

(1) 忽略液滴周围气流速度及压力波动。

(2) 忽略重力和自然对流影响。

(3) 忽略液滴形状变化, 认为液滴在整个蒸发和燃烧过程中都保持球形。

(4) 忽略气相的 Dufour, Soret 效应及热辐射效应。

基于以上假设, 综合考虑了气相与液相的能量传导和组分扩散、化学反应引起的组分变化和能量源项、高压环境下液滴表面气液平衡、高压环境下气相主要组分在液相中的溶解、高压环境下气相与液相流体热物理性质的压力修正和超临界环境下液滴燃烧过程中的迁移, 建立了一维的超临界环境下的全瞬态液滴燃烧模型。

2.1 控制方程

由于液相和气相控制方程形式基本一致, 且当进入超临界蒸发燃烧阶段, 液相和气相不再分离, 形

成统一的超临界相,因此对液相和气相建立统一的控制方程。

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \rho v) = 0 \quad (1)$$

$$\frac{\partial(\rho Y_i)}{\partial t} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial(r^2 \rho v Y_i)}{\partial r} =$$

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \rho D \frac{\partial Y_i}{\partial r}) + \dot{\omega}_i$$

$$\frac{\partial(\rho c_p T)}{\partial t} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial(r^2 \rho v c_p T)}{\partial r} =$$

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \lambda \frac{\partial T}{\partial r}) - \sum_i \dot{\omega}_i h_i(T) \quad (3)$$

式中 r 代表物理平面中距离液滴中心的距离, m ; t 代表时间, s ; Y_i 代表各组分的质量分数; ρ 为密度, kg/m^3 ; T 为温度, K ; v 为速度, m/s ; D 为自扩散系数, m^2/s ; c_p 为定压比热容, $J/(kg \cdot K)$; λ 为热传导系数, $W/(m \cdot K)$; $\dot{\omega}_i$ 为气相或超临界相化学反应产生的组分 i 的净生成速率; $h_i(T)$ 为气相或超临界相组分 i 在温度 T 下的焓。

2.2 初始条件及边界条件

2.2.1 初始条件

在 $t=0$ 时刻:

$$T_l = T_l^0, T_g = T_g^0,$$

$$p_g = p_l = p^0, Y_i = Y_i^0,$$

式中 T_l^0 为液滴初始温度, T_g^0 和 p^0 分别为初始环境温度和环境压力。 Y_i^0 为组分初始条件, 在液滴内部只含燃料组分, 不含环境气体组分, 在气相中只含环境气体组分, 不含燃料蒸气组分。

2.2.2 亚临界边界条件

在气相的无穷远处, 满足以下边界条件:

$$T_{g,\infty} = T_g^0, Y_{i,\infty} = Y_i^0$$

在液滴中心处, 满足以下边界条件:

$$\frac{\partial T}{\partial r} = 0, \frac{\partial Y_i}{\partial r} = 0, \frac{\partial v}{\partial r} = 0$$

在液滴表面处, 满足以下边界条件:

$$T_{g,s} = T_{l,s} = T_s, \sum_i Y_{ig,s} = 1$$

$$\sum_i Y_{il,s} = 1, \phi_i^l X_i^l = \phi_i^g X_i^g$$

式中 $T_{g,s}$, $T_{l,s}$ 分别为液滴表面气相侧和液相侧的温度, T_s 为液滴表面温度, $Y_{ig,s}$, $Y_{il,s}$ 分别为组分 i 在气相侧和液相侧的质量分数, X_i^g , X_i^l 分别为组分 i 在气相侧和液相侧的摩尔分数, ϕ_i^g , ϕ_i^l 分别为液滴表面气相侧和液相侧各组分的逸度系数, 通过 Peng-Robinson^[12] 状态方程求得。由于在液滴燃烧过程的仿真中采用了详细的化学反应机理, 气相组分较多(超过一

百种组分), 但大多数组分均为中间产物, 存在时间短, 且含量较低($Y_i < 0.01$), 因此只考虑几种气相主要组分(O_2 , CO_2 , H_2O , N_2) 在液相中的溶解。

2.2.3 超临界边界条件

当液滴表面气相侧温度和压力均超过混合物的临界值时, 即认为达到超临界状态, 此时液滴表面张力减小为零, 液滴表面消失, 气相与液相之间的热物性趋于连续^[13]。因此, 当液滴表面达到超临界状态时, 不再区分气液相, 只需定义液滴中心处和液滴表面处的边界条件, 其定义与亚临界相同。

2.3 数值计算方法

由于在液滴蒸发燃烧过程中液滴表面不断变化, 如果直接对控制方程进行离散和求解, 需要在每个时间步计算完成之后重新划分计算网格, 为了避免这种情况的发生, 进行坐标转换将物理平面转换到计算平面中, 使液滴表面始终固定在计算坐标值为 1 的位置处, 如图 1 所示。

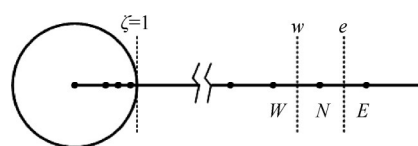


Fig. 1 Schematic diagram of the grid nodes and the control volume

两坐标系的空间位置转换:

$$\zeta = r/r_s$$

两坐标系中的速度转换:

$$w = v - \zeta \dot{r}_s$$

式中 ζ 代表计算平面中距离液滴中心的距离, r_s 代表液滴半径, m ; $\dot{r}_s$ 代表液滴半径的变化率。以连续性方程(式(1))为例, 经过坐标转换可得:

$$\zeta^2 \frac{\partial}{\partial t} (\rho) + \frac{1}{r_s} \frac{\partial}{\partial \zeta} (\zeta^2 \rho w) + \frac{\dot{r}_s}{r_s} \frac{\partial}{\partial \zeta} (\zeta^3 \rho) = 0 \quad (4)$$

在对计算域空间离散之前, 要对计算域进行网格划分, 由于液滴表面附近的流场参数变化较大, 因此计算域网格的划分采用非均匀网格, 对液滴表面附近的网格进行加密处理, 从而提高液滴表面附近参数的计算精度。

经过坐标转换后的控制方程的离散方法采用有限体积法, 在空间上采用混合格式离散, 在时间上采用绝对稳定的全隐式时间积分方案, 其控制容积边界取为相邻网格节点的中心处, 如图 1 所示。其中, W 和 E 为控制容积 N 两侧的网格节点, w 和 e 为控制容积 N 的控制容积边界点。

在液滴燃烧过程的仿真中,气相场和超临界相场的求解中存在化学反应源项,将流动与化学反应耦合求解的话对时间步长的要求很严($dt < 1.0 \times 10^{-10}$),且求解过程中稳定性较差。因此,在此处采用算子分裂的思想,将流动与化学反应耦合算子 H_{dt} 分裂成为流动运算算子 H_{dt}^F 和化学反应运算算子 H_{dt}^C 两个独立的算子。

在一个时间步长 dt 上,采用式(5)分三步完成流动和化学反应的积分,即

$$H_{dt}(Y_i^n, T^n) = H_{dt/2}^C H_{dt/2}^F H_{dt/2}^C \rightarrow (Y_i^{n+1}, T^{n+1}) \quad (5)$$

H_{dt}^F 流动运算算子在 dt 的时间步长上采用全隐式时间积分方案。

H_{dt}^C 为一个逐点的化学反应运算算子,在每个气相或者超临界相的网格点上运用化学反应动力学对式(6)进行计算,实现从 t^n 到 t^{n+1} 的化学反应积分运算,即 $H_{dt}^C(Y_i^n, T^n) \rightarrow (Y_i^{n+1}, T^{n+1})$ 。

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho Y_i)}{\partial t} &= \dot{\omega}_i \\ \frac{\partial(\rho c_p T)}{\partial t} &= -\sum_i \dot{\omega}_i h_i(T) \end{aligned} \quad (6)$$

由于在详细化学反应动力学模型中,既包含化学反应速率快、特征时间尺度很小的基元反应,同时也包含化学反应速率慢特征时间尺度很大的基元反应,这种差距反映到微分方程组(6),就是方程组的特征值差别很大,方程组对应特征矩阵的条件数很大。因此,式(6)在积分过程中存在严重的刚性问题,必须采用专门的积分方法。常见的刚性常微分方程组的积分方法及其对应的软件包主要有: VODE, LSODE, DASPK, IVPAG, BzzOde 等。文献[14]将上述几种方法用于几种常见的化学问题的刚性常微分方程组的求解,并进行了对比,结果表明, BzzOde 无论是在计算效率、计算耗时还是适用性上都表现出了明显的优势。BzzOde 是 BzzMath 库^[15] 中的一个常微分方程组求解模块,其中的 BzzOdeStiff 子模块专门用于求解刚性常微分方程组,此处在求解刚性化学反应常微分方程组时采用的就是这个模块。

2.4 煤油替代物的选取及高压环境下热物性计算

现在国内使用的煤油型号主要为 RP-3, 文献[16]通过气相质谱色谱联用仪对 RP-3 煤油的组分进行了分析,结果见表1。可见 RP-3 煤油是一种组分十分复杂的混合物,目前还无法实现对这种复杂混合物液滴的超临界燃烧过程直接进行仿真计算。因此必须选取一种或者几种物质作为其替代物进行

仿真研究。目前最常见的是采用正十二烷作为煤油替代物进行相关的仿真研究。采用单一组分替代煤油虽然简单但忽略了煤油是一种混合物的重要特性,而采用过多组分又会造成仿真计算难以实现。考虑到 RP-3 的主要成分为烷烃和苯系物,因此本文采用文献[17-18]中提出的两组分的 RP-3 煤油的替代物:(质量分数)80% 正癸烷($n\text{-C}_{10}\text{H}_{22}$)和 20% 1,2,4-三甲基苯(TMB),其主要热力学性质如表2,同时,也直接采用文献[17]中的化学反应机理,该套机理总共包括 131 种组分,1020 步基元反应。

Table 1 Component of RP-3 kerosene

Component	Content/%
Alkane	42.33
Cycloparaffin	21.35
Benzene series	24.05
Naphthaline	8.18
Other	4.09

Table 2 Component and properties of bicomponent surrogate fuel for RP-3 kerosene

Component	$n\text{-C}_{10}\text{H}_{22}$	TMB
Mass fraction/%	80.0	20.0
Critical pressure/MPa	2.1	3.2
Critical temperature/K	617.7	649.1
Boiling point/K	447.3	442.5

建立准确的液滴超临界燃烧模型,就必须建立一套适用于超临界环境的流体热物性的计算模型。经过对文献中同一热物性的不同计算模型的对比、挑选,建立了一整套高压环境下的流体热物性的计算模型,详见表3。

2.5 模型验证

由于目前缺乏煤油液滴在超临界微重力环境下的燃烧过程的实验数据,为了进一步验证超临界环境下液滴燃烧模型在高压环境下仿真计算结果的有效性,与文献[4]中的正辛烷液滴在微重力环境下的点火燃烧过程实验结果进行对比。文献[4]的研究中,实验压力分别选取 1.52MPa, 6.08MPa, 10.1MPa, 而正辛烷的临界压力和临界温度分别为 2.52MPa 和 570K,环境压力涵盖了亚临界和超临界。环境气体为空气(质量分数 $Y_{\text{O}_2} = 0.232$, $Y_{\text{N}_2} = 0.768$),环境温度为 300K,采用电弧放电点火器对液滴进行点火,并用高速摄像机拍摄记录火焰半径的变化情况。在仿真的过程中为了模拟电弧放电点火器的点火过程,采用文献[23]中的方式,在液滴周围的气相域中设置

Table 3 Calculation model of fluid properties at high pressure

Properties	Gas	Liquid
PVT relation of real gas and liquid	Peng-Robinson equation of state ^[12]	
c_p	c_p of ideal gas + correction of deviation function ^[19]	
λ	Misic-Thodos method ^[20] + Stiel-Thodos method correction ^[19]	Chung method ^[19] + Stiel-Thodos method correction ^[19]
D	Lee ^[21]	
Mixture critical properties	Prausnitz ^[22]	

了高温区,如图2所示。 r_0 为液滴初始半径。仿真中,正辛烷蒸气在空气中燃烧反应采用文献[24]中的详细化学反应机理。

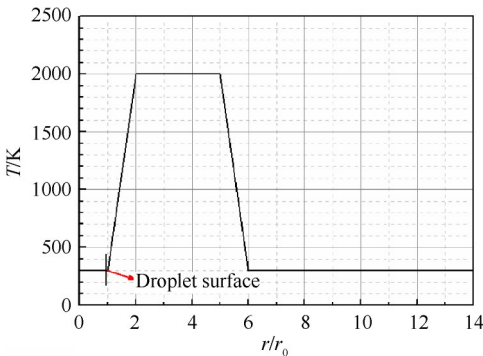


Fig. 2 Simulation of arc discharge ignition

图3为高压环境下,正辛烷液滴燃烧的实验与仿真的对比图,图中 t_b 为液滴寿命。可以看出,无论是亚临界压力还是超临界压力下,液滴燃烧火焰半径的变化趋势与实验基本一致,且都随着压力的增大,火焰半径减小。但同一压力下,仿真结果的无量纲火焰半径小于实验结果测得的无量纲火焰半径。出现这种现象主要有以下原因:(1)仿真中火焰半径取在最高温度所在的位置,而在实验中的火焰半径是通过测量由高速摄像机拍摄所得图片中火焰最外侧的直径来获得的,并不完全是温度最高处所在位置,这就导致实验测得的火焰半径大于实际的火焰半径。(2)实验中液滴悬挂在细丝上面,其传热效果对液滴燃烧有影响。(3)高压下实验结果的图像清晰度较低,火焰面分辨率低。

3 计算结果与分析

本节中,煤油液滴采用由正癸烷和1,2,4-三甲基苯组成的两组分煤油替代物液滴,环境气体为空气(质量分数 $Y_{O_2} = 0.232, Y_{N_2} = 0.768$),其组分的临界压力分别为5.0MPa和3.4MPa,临界温度分别为154.6K和126.2K,如无特殊说明,则液滴初始直径 $d_0 = 100\mu\text{m}$,液滴初始温度 $T_0 = 300\text{K}$ 。

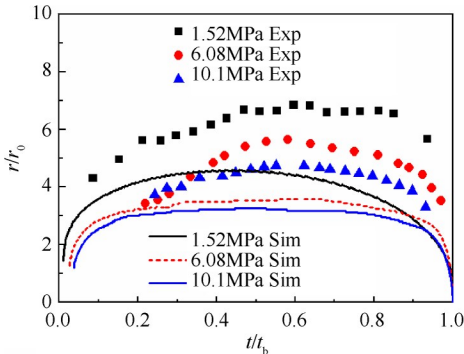


Fig. 3 Comparison and verification of simulation result

为了方便研究,定义2个变量:(1)火焰温度 T_f :当气相或者超临界相发生化学反应且温度高于2000K时,气相或超临界相中温度的最大值,单位为K;(2)火焰半径 r_f :当气相或者超临界相发生化学反应且温度高于2000K时,气相或超临界相中温度的最大值所处的位置,单位为m。

3.1 超临界环境下煤油液滴在超临界迁移前燃烧与蒸发对比

图4为 $p=10.1\text{MPa}, T=1400\text{K}$ 的煤油液滴蒸发与燃烧对比。可以看出,在超临界环境下,液滴并不是从一开始就进入超临界燃烧阶段,而是先经历一段亚临界燃烧阶段,当液滴表面压力和温度同时达到或超过液滴表面液相侧混合物的临界压力和临界温度时才发生超临界迁移,进入超临界燃烧阶段。煤油液滴在超临界空气环境下的燃烧过程相比于在超临界氮气环境下的蒸发过程,液滴在开始之后很快就发生了超临界迁移,进入了超临界燃烧阶段,这主要是由于发生化学反应产生大量的热,这些热量经热传导到达液滴表面,使液滴表面温度快速上升,很快达到了液滴表面液相侧混合物的临界温度。

着火之前,各基本特性与相同压力和温度下的蒸发过程就表现出明显的差异。相比于蒸发情况下的各基本参数,燃烧情况下的液滴相对直径的平方在着火之前缓慢上升,在着火之后突增;液滴表面温度在着火之前就远高于蒸发情况下的液滴表面温度,且升温速率更快,在着火之后升温速率进一步加

快;液滴表面蒸发流率在着火之前也较高,且快速上升,在着火之后上升速率加快;液滴表面蒸发焓在着火之前从一开始就低于蒸发情况下的液滴表面蒸发焓,且下降速度很快,在着火之后垂直下降。

出现以上现象主要是因为 $p=10.1\text{MPa}$, $T=1400\text{K}$ 的超临界环境下,液滴表面温度上升很快,液滴蒸发加快,因此在液滴表面附近很快就能达到发生化学反应所需的温度和组分浓度要求,发生化学反应,产生大量热量,使液滴表面温度快速上升,液滴表面蒸发流率加快,液滴表面蒸发焓降低。

3.2 超临界环境下煤油液滴燃烧火焰特性

在 $p=10.1\text{MPa}$, $T=1400\text{K}$ 的超临界空气环境下,煤油液滴很快发生超临界迁移,进入超临界燃烧阶段,此时,液滴表面消失,不再存在明显的气液相边界,液滴的燃烧不再受蒸发过程控制,而是由燃料组分的扩散控制。图 5 为 $p=10.1\text{MPa}$, $T=1400\text{K}$ 的煤油液滴燃烧温度在流场中的分布图。可以看出,液滴从一开始很快就在距离液滴表面很近的位置着火,形成范围为 1 倍的液滴初始半径的高温火焰区;之后,高温火焰区快速向远场方向扩展,范围越来越大,最大时达到 5~6 倍的液滴初始半径,在这个过程中,中心附近始终存在一个低温区,且低温区的范围越来越小;当在高温火焰区向外扩展至接近最远处,同时中心低温区消失时,高温火焰区迅速扩展到中

心,此时围绕中心形成了一个约 6 倍液滴初始半径的高温火焰区;之后高温火焰区经过约 0.7ms 的维持不变之后,范围越来越小,最高温度也逐渐降低。

为了进一步分析整个液滴燃烧过程中高温火焰区的特性,在图 6 中展示了 $p=10.1\text{MPa}$, $T=1400\text{K}$ 的煤油液滴燃烧无量纲火焰半径和火焰温度随时间变化的曲线。可以看出,液滴着火时刻的火焰半径为 1.4 倍的液滴初始半径,之后由于高温区域向两侧扩散,火焰范围增大,火焰半径也随之逐渐增大,直到达到其最大值(3.5 倍的液滴初始半径),之后由于中心附近的 $n\text{-C}_{10}\text{H}_{22}$ 和 TMB 浓度降低,无法维持燃烧,火焰半径开始缓慢减小,在 $t=3.5\text{ms}$ 之后,中心附近的 $n\text{-C}_{10}\text{H}_{22}$ 和 TMB 浓度快速降低,火焰也随之向中心传播,火焰半径快速减小,在 $t=3.958\text{ms}$ 时减小为零。火焰温度在着火时刻达到了 2800K 左右,此时火焰范围小且不稳定,随着火焰范围增大,火焰逐渐稳定,火焰温度也缓慢上升至最大值 2900K 并基本保持不变,在 $t=3.958\text{ms}$,也就是火焰半径减小为零之后, $n\text{-C}_{10}\text{H}_{22}$ 和 TMB 消耗殆尽,火焰无法维持,火焰温度开始下降。

值得注意的是,在超临界环境下,无量纲火焰半径先减小为零,之后火焰温度才开始下降。这主要是在超临界环境下,没有液滴表面的限制,在燃烧快结束时,中心处的燃料组分直接燃烧,火焰半径减小

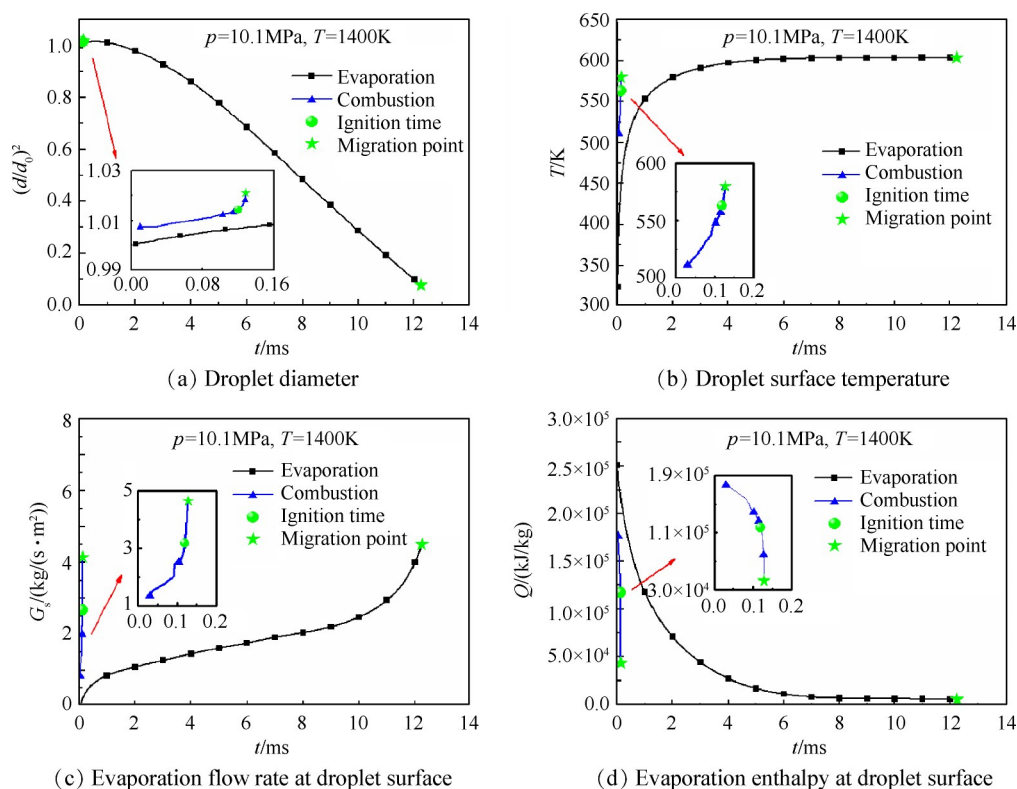


Fig. 4 Comparison of droplet evaporation and combustion

为零,之后由于燃料消耗完毕,在热传导的作用下火焰温度开始下降。

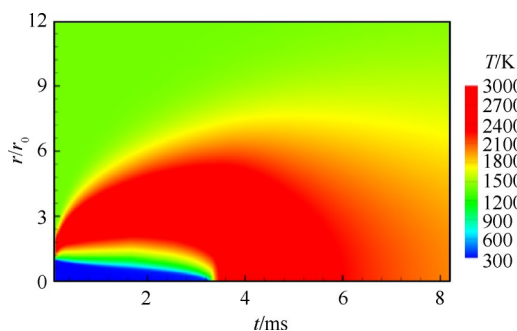


Fig. 5 Temperature distribution of kerosene droplet combustion

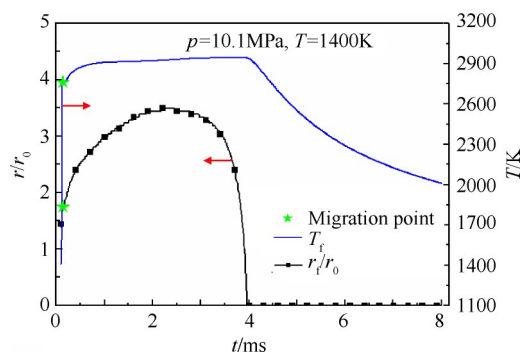


Fig. 6 Flame radius and flame temperature of kerosene droplet combustion

3.3 液滴初始直径对煤油液滴燃烧的影响

图7为 $p=10.1\text{MPa}$, $T=1200\text{K}$ 的不同液滴初始直径下,无量纲火焰半径随时间变化曲线。可以看出,在不同的液滴初始直径下,无量纲火焰半径的变化趋势基本一致,但随着液滴初始直径的增大,火焰稳定燃烧阶段被拉长,无量纲火焰半径扩展得越慢。同时,随着液滴初始直径的增大,无量纲火焰半径所能达到的最大值先增大后减小,但仔细观察可以看到,在 $d_0=50\mu\text{m}$ 时,火焰稳定燃烧时间太短,无量纲火焰半径来不及增大到最大值就已经燃烧完毕。

图8为 $p=10.1\text{MPa}$, $T=1200\text{K}$ 的不同液滴初始直径下,火焰温度随时间变化曲线。可以看出,随着液滴初始直径的增大,液滴火焰温度的稳定时间越长,但火焰温度的最大值基本不变,火焰温度在着火初始的升温速率越慢。因此,液滴初始直径越小,液滴燃烧越剧烈。

图9为 $p=10.1\text{MPa}$, $T=1200\text{K}$ 的点火时间、迁移时间和液滴寿命随液滴初始直径变化曲线。可以看出,随着液滴初始直径的增大,点火时间、迁移时间和液滴寿命都直线上升,且液滴寿命随液滴初始直

径变化曲线斜率较大。不同液滴初始直径的点火时间和迁移时刻差别很小,但当液滴初始直径较小时,液滴迁移时间小于着火时间,也就是液滴先发生超临界迁移,再形成高温火焰,但随着液滴初始直径的增大,迁移时间超过了着火时间,且之间的差距有增大的趋势。

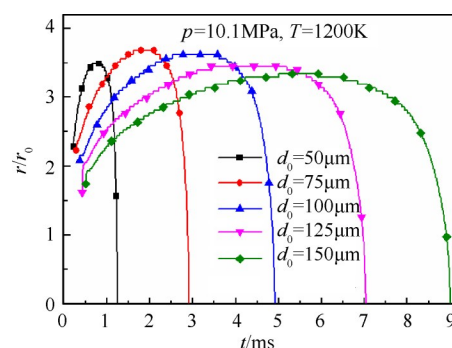


Fig. 7 Variation of dimensionless flame radius under different droplet initial diameter

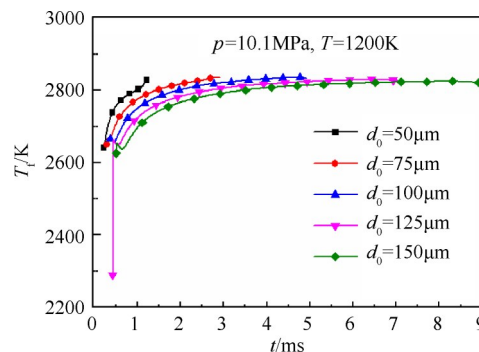


Fig. 8 Variation of dimensionless flame temperature under different droplet initial diameter

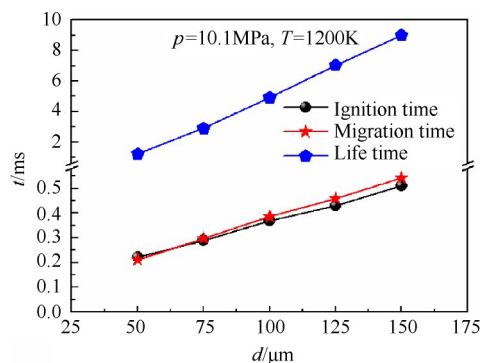


Fig. 9 Variation of ignition time, migration time and life time under different droplet initial diameter

图10为 $p=10.1\text{MPa}$, $T=1200\text{K}$ 的不同液滴初始直径下,液滴中心 $n\text{-C}_{10}\text{H}_{22}$ 质量分数、TMB质量分数和温度随时间变化曲线,图中 T_{centre} 表示液滴中心温度。可以看出,液滴中心处 $n\text{-C}_{10}\text{H}_{22}$ 和TMB的质量分数在

液滴即将燃烧结束前一直保持初始值,在燃烧的末期突然下降,迅速减小为零,虽然两个组分的质量分数开始下降的时间基本一致,但 $n\text{-C}_{10}\text{H}_{22}$ 比TMB更早地减小为零,这主要是因为 $n\text{-C}_{10}\text{H}_{22}$ 为链烷烃,更易发生氧化化学反应。液滴中心温度也是基本保持初值,在液滴即将燃烧结束时快速上升至火焰温度。同时,随着液滴初始直径的增大,液滴中心处 $n\text{-C}_{10}\text{H}_{22}$ 质量分数、TMB质量分数的下降段时间整体推迟,但趋势一致,液滴中心处温度上升的时刻也是随着液滴初始直径的增大而向后延迟。这主要是因为液滴中心处的 $n\text{-C}_{10}\text{H}_{22}$ 质量分数、TMB质量分数和温度只有在液滴燃烧快要结束时才有变化,因此,液滴初始直径的增大只是延迟了液滴中心参数的变化。

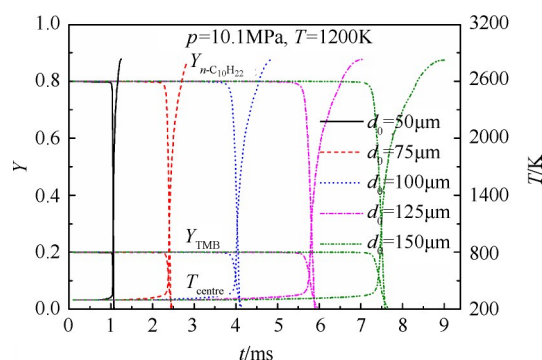


Fig. 10 Variation of parameter at droplet center under different droplet initial diameter

4 结 论

通过本文研究,得出以下结论:

(1)在超临界环境下,相比于煤油液滴纯蒸发过程,煤油液滴燃烧过程的迁移时刻大大提前,几乎在刚开始就发生迁移,进入超临界燃烧阶段。

(2)在超临界环境下,煤油液滴在一开始就很快开始燃烧,初始蒸发阶段很短,着火之后很快进入超临界燃烧阶段,此时液滴燃烧过程可以看成中心附近的燃料高浓度区与外侧氧气高浓度区之间的扩散燃烧过程。火焰半径开始很小,并快速增大,达到最大值之后开始减小,并快速减小为零。火焰温度在着火之后快速上升至最大值,并基本不变,在火焰半径减小为零之后开始下降。

(3)液滴初始直径对火焰温度、无量纲火焰半径以及液滴中心参数的影响都只是使其整体提前或延迟,并不影响其变化趋势。着火时间、迁移时间和液滴寿命都随着液滴初始直径的增大而增大。

致 谢:感谢国家自然科学基金资助。

参考文献:

- [1] 邢继发,刘国球,黄坚定,等. 世界导弹与航天发动机大全[M]. 北京:军事科学出版社,1999.
- [2] 杨 涛,方丁酉,唐乾刚. 火箭发动机燃烧原理[M]. 长沙:国防科技大学出版社,2008.
- [3] Sirignano W A. Fluid Dynamics and Transport of Droplets and Sprays (Second Edition)[M]. New York: Cambridge University Press, 2010.
- [4] Sato Jun'ichi, Tsue Mitsuhiro, Niwa Mario, et al. Effects of Natural Convection on High-Pressure Droplet Combustion[J]. *Combustion and Flame*, 1990, 82(2): 142-150.
- [5] 张蒙正,徐胜利. 超临界环境下煤油和UDMH单滴燃烧现象[J]. 火箭推进, 2013, 39(5): 1-6.
- [6] Ma Z, Li Y, Li Z, et al. Evaporation and Combustion Characteristics of Hydrocarbon Fuel Droplet in Sub- and Super-Critical Environments [J]. *Fuel*, 2018, 220: 763-768.
- [7] Shuen J S, Yang V, Hsiao C C. Combustion of Liquid-Fuel Droplet in Supercritical Conditions[J]. *Combustion and Flame*, 1992, 89(4): 299-319.
- [8] Hsieh K C, Shuen J S, Yang V. Droplet Vaporization in High Pressure Environments near Critical Conditions [J]. *Combustion Science and Technology*, 1991, 76(3): 111-132.
- [9] 孙凤贤,李 磊. 相对静止热环境中正庚烷液滴的蒸发燃烧数值模拟[C]. 西安:中国工程热物理学会燃烧学学术会议,2008.
- [10] 孙凤贤,夏新林,沈 淳,等. 非等温液滴蒸发燃烧的传热传质特性[J]. 工程热物理学报, 2010, 31(8): 1403-1406.
- [11] 王宏楠,何 旭,鹿盈盈. 超临界环境条件对碳氢燃料液滴燃烧特性的影响[J]. 工程热物理学报, 2015, 36(8): 1815-1819.
- [12] Ruszalo R. Modeling of Ignition of Liquid Hydrocarbon Droplets at High Pressure[D]. Ottawa: The University of Ottawa, 1990.
- [13] 何 鹏. 超临界环境下燃料液滴蒸发及其影响因素研究[D]. 北京:北京航空航天大学,2010.
- [14] Ferraris G B, Manca D. BzzOde: A New C++ Class for the Solution of Stiff and Non-Stiff Ordinary Differential Equation Systems[J]. *Computers & Chemical Engineering*, 1998, 22(11): 1595-1621.
- [15] Ferraris G B. BzzMath: Numerical Libraries in C++[EB/OL]. <https://super.chem.polimi.it/downloadfiles/3235>, 2015-07-07.

- [16] 周舟, 范玮, 靳乐, 等. 单个RP-3航空煤油液滴的超临界蒸发实验研究[J]. 推进技术, 2016, 37(8): 1422-1430. (ZHOU Zhou, FAN Wei, JIN Le, et al. Experimental Investigation on Supercritical Evaporation of RP-3 Aviation Kerosene Droplet[J]. *Journal of Propulsion Technology*, 2016, 37(8): 1422-1430.)
- [17] 王慧汝. RP-3航空煤油详细化学反应机理初步研究[J]. 燃气涡轮试验与研究, 2015, 28(5): 19-23.
- [18] Honnet S, Seshadri K, Niemann U, et al. A Surrogate Fuel for Kerosene[J]. *Proceedings of the Combustion Institute*, 2009, 32: 485-492.
- [19] Poling B E, Prausnitz J M, O'Connell J P. The Properties of Gases and Liquids[M]. New York: MCGRAW-HILL, 2001.
- [20] 童景山, 李敬. 流体热物理性质的计算[M]. 北京: 清华大学出版社, 1982.
- [21] Lee H, Thodos G. Generalized Treatment of Self-Diffusivity for the Gaseous and Liquid States of Fluids[J]. *Industrial & Engineering Chemistry Fundamentals*, 1983, 22(1): 17-26.
- [22] Chueh P L, Prausnitz J M. Vapor-Liquid Equilibria at High Pressures: Calculation of Critical Temperatures, Volumes and Pressures of Nonpolar Mixtures[J]. *AIChE Journal*, 1967, 13(6): 1107-1113.
- [23] Cuoci A, Mehl M, Ferraris G B, et al. Autoignition and Burning Rates of Fuel Droplets under Microgravity[J]. *Combustion and Flame*, 2005, 143(3): 211-226.
- [24] Westbrook C K, Pitz W J, Herbinet O, et al. A Comprehensive Detailed Chemical Kinetic Reaction Mechanism for Combustion of *n*-Alkane Hydrocarbons from *n*-Octane to *n*-Hexadecane[J]. *Combustion and Flame*, 2008, 156(1): 181-199.

(编辑:朱立影)