

喷管化学反应流的对角化点隐式法求解^{*}

张化照 梁国柱 王慧玉

(北京航空航天大学宇航学院, 北京, 100083)

摘 要: 采用弱耦合对角化点隐式方法的 MacCormack 格式, 求解喷管的粘性化学反应流动, 解决了控制方程组的刚性问题, 又大大减少了常规点隐式方法中求逆矩阵的大量工作。对液氢液氧火箭发动机, 采用 6 种组分、8 个反应有限速率的化学反应模型和 Baldwin-Lomax 代数湍流模型, 得到流场参数在喷管中的分布。计算结果表明, 采用对角化点隐式方法求解化学反应喷管粘性流动能提高计算效率。

主题词: 氢氧发动机, 喷管气流, 反应流, 数值计算, 流体

分类号: V434.11

DIAGONAL POINT-IMPLICIT METHOD FOR COMPUTING CHEMICAL REACTING FLOW IN NOZZLES

Zhang Huazhao Liang Guozhu Wang Huiyu

(School of Astronautics, Beijing Univ. of Aeronautics and Astronautics, Beijing, 100083)

Abstract: The viscous chemical reacting flow in nozzles was computed using a loosely coupled diagonal point-implicit MacCormack scheme. This scheme solved the stiffness problem of governing equations and reduced the large scale work of inverting block matrices in normal point-implicit schemes. The combustion process in the LH_2/LO_2 rocket engine was modeled using a 6-species and 8-step finite-rate chemical reaction model, and the Baldwin-Lomax algebraic turbulent model was adopted. The distributions of the flow parameters in nozzle were presented. The results show that the diagonal point-implicit MacCormack scheme can improve computing efficiency greatly in computing the viscous chemical reacting flow in nozzles.

Subject terms: Hydrogen oxygen engine, Nozzle flow, Reacting flow, Numerical calculation

1 引 言

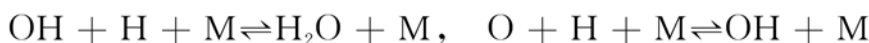
在模拟液氢液氧火箭发动机喷管内的化学反应流动过程中, 采用弱耦合对角化点隐式方法的 MacCormack 两步有限差分格式求解 N-S 方程, 可解决求解化学反应流动方程组的刚性问题和减少因求逆矩阵而增加的计算量, 从而提高了计算效率。本文在计算中采用 6 种组分、8 个反应的有限速率化学反应模型和 Baldwin-Lomax 代数湍流模型, 得到了流场参数在喷管中的分布, 为化学动力学损失的计算提供了必要的数据库。

^{*} 收稿日期: 1998-04-10, 修回日期: 1998-09-07, 本课题系国家“八六三”基金资助项目

2 控制方程

在忽略了彻体力、热辐射, 且认为喷管为一绝热体系的前提条件下, 轴对称、可压、化学反应、湍流流动雷诺平均的 N-S 方程及组分扩散方程参见文献 [1]。

液氢液氧推进剂的 6 组分的 8 个基元反应为 [2, 3]:



采用有限速率的化学反应模型, 化学反应的影响主要体现在源项中, 对于一个由 N_s 种化学组分构成并发生 JJ 个基元可逆反应的化学反应系统, 其反应方程式可以表示成:

$$\sum_{i=1}^{N_s} \alpha_{ij} R_i \rightleftharpoons \sum_{i=1}^{N_s} \beta_{ij} R_i \quad j = 1, 2, \dots, JJ \quad (JJ \text{ 表示可逆反应体系基元反应总数})$$

式中 α_{ij} 和 β_{ij} 分别是在第 j 个基元反应中处于等式两边的第 i 种组分前面的化学当量系数, 所以第 i 种组分的生成率为:

$$W_i = M_i \sum_{j=1}^{JJ} (\beta_{ij} - \alpha_{ij}) \left(\frac{\rho}{\bar{M}} \right)^L \left(K_j \prod_{i=1}^{N_s} \left(\rho \frac{Y_i}{M_i} \right)^{\alpha_{ij}} - K_{-j} \prod_{i=1}^{N_s} \left(\rho \frac{Y_i}{M_i} \right)^{\beta_{ij}} \right)$$

式中: L 是一常数, 其值取决于该反应中是否包含对反应有影响但又不实际发生化学变化的第三者: 当反应中有第三者时 $L=1$, 反之 $L=0$; $\bar{M}$ 是平均相对分子质量; 正逆反应的化学反应速率常数 K_j 和 K_{-j} 的值由下式求解:

$$K_j = A_j T^{B_j} \exp(-T_j/T), \quad K_{-j} = A_{-j} R^{B_{-j}} \exp(-T_{-j}/T)$$

式中的 A_j , B_j , T_j , A_{-j} , B_{-j} , T_{-j} 均为常数, 可查得。

3 数值方法

3.1 对角化点隐式方法的 MacCormack 两步有限差分格式

采用弱耦合对角化点隐式的 MacCormack 时间推进预测-校正两步有限差分格式求解化学反应喷管流场的控制方程, 预测步和校正步分别采用向前差分 and 向后差分, 计算平面网格取 $\Delta\xi = \Delta\eta = 1$, 差分格式如下:

预测步:

$$\begin{aligned} \left(\frac{U}{J} \right)_{i,j}^{n+1} &= \left(\frac{U}{J} \right)_{i,j}^n - \Delta t_{i,j} \left(\left(\frac{\xi_z E + \xi_r F}{J} \right)_{i+1,j}^n - \left(\frac{\xi_z E + \xi_r F}{J} \right)_{i,j}^n \right) M^{-1} - \\ &\quad \Delta t_{i,j} \left(\left(\frac{\eta_z E + \eta_r F}{J} \right)_{i,j+1}^n - \left(\frac{\eta_z E + \eta_r F}{J} \right)_{i,j}^n + \left(\frac{H}{J} \right)_{i,j}^n \right) M^{-1} \end{aligned}$$

校正步:

$$\left(\frac{U}{J} \right)_{i,j}^{(n+1)*} = \left(\frac{U}{J} \right)_{i,j}^n - \Delta t_{i,j} \left(\left(\frac{\xi_z E + \xi_r F}{J} \right)_{i,j}^{n+1} - \left(\frac{\xi_z E + \xi_r F}{J} \right)_{i-1,j}^{n+1} \right) M^{-1} -$$

$$\Delta t_{i,j} \left(\left(\frac{\eta_z E + \eta_r F}{J} \right)_{i,j}^{\overline{n+1}} - \left(\frac{\eta_z E + \eta_r F}{J} \right)_{i,j-1}^{n+1} + \left(\frac{H}{J} \right)_{i,j}^n \right) M^{-1}$$

$$\text{式中: } \left(\frac{U}{J} \right)_{i,j}^{n+1} = \frac{1}{2} \left(\left(\frac{U}{J} \right)_{i,j}^{\overline{n+1}} + \left(\frac{U}{J} \right)_{i,j}^{(n+1)*} \right), \quad M = \left(I + \Delta t \left(\frac{\partial H}{\partial U} \right)^n \right)$$

3.2 点隐式方法预调节矩阵的对角化

在常规点隐式方法中, 预调节矩阵为:

$$\left(\frac{\partial H}{\partial U} \right)^n = \begin{bmatrix} \frac{\partial h_1}{\partial \rho_1} & \frac{\partial h_1}{\partial \rho_2} & \cdots & \frac{\partial h_1}{\partial \rho_{n-1}} & \frac{\partial h_1}{\partial \rho_n} \\ \frac{\partial h_2}{\partial \rho_1} & \frac{\partial h_2}{\partial \rho_2} & \cdots & \frac{\partial h_2}{\partial \rho_{n-1}} & \frac{\partial h_2}{\partial \rho_n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots & \vdots \\ \frac{\partial h_n}{\partial \rho_1} & \frac{\partial h_n}{\partial \rho_2} & \cdots & \frac{\partial h_n}{\partial \rho_{n-1}} & \frac{\partial h_n}{\partial \rho_n} \end{bmatrix}$$

Jacobi 矩阵元素可由下式算得^[5]:

$$z_{m,n} = \frac{\partial h_m}{\partial \rho_n} = \sum_r (v_r^f - v_r^b) \left[\frac{v_i^f}{y_i} k_j \prod_j y_j^{v_j^f} - \frac{v_i^b}{y_i} k_j \prod_j y_j^{v_j^b} + \prod_j y_j^{v_j^b} \frac{\partial k_f}{\partial y_i} - \prod_j y_j^{v_j^b} \frac{\partial k_b}{\partial y_i} \right]$$

式中: $\rho_n = \rho \cdot Y_n$ ($n = 1, \dots, N_s$)

一般认为 $\frac{\partial k_f}{\partial y_i}$ 和 $\frac{\partial k_b}{\partial y_i}$ 不重要而可以忽略, (式中的 f 和 b 分别对应前面的化学反应模型中的 j 和 $-j$, 即为反应的正向和逆向)

在对角化点隐式方法中, 将常规点隐式方法的预调节矩阵对角化处理, 具体做法为: 将原预调节矩阵的每行元素平方和的平方根作为对角化方法的预调节矩阵的对角线上的元素, 这个预调节矩阵的求逆较之常规点隐式方法的预调节矩阵的求逆就简单多了, 大大节省了工作量。

$$\frac{\partial H}{\partial U} = \begin{bmatrix} \frac{1}{\tau_1} & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\tau_2} & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & \frac{1}{\tau_n} \end{bmatrix}$$

其中: $\frac{1}{\tau_i} = \beta_c \left[\sum_j \left(\frac{\partial h_i}{\partial \rho_j} \right)^2 \right]^{\frac{1}{2}}$, β_c 是一个大于 1 的松弛因子。

4 初边值条件

入口是亚声速边界, 径向速度为零, 轴向速度、静温、静压、密度、组分的质量分数等

都由入口条件获得。壁面边界根据无滑移的边界条件得 $u=0$, $v=0$, 其余的参数用一阶外推得到。

轴线边界条件: 没有通量传递, $v=0$, 其余的参数用一阶外推得到。

出口边界条件处于超声速部分用二阶外推得到, 处于亚声速的部分一阶外推。

流动参数的初场为一轴对称粘性初场, 组分初场用一热力学计算结果。

5 算例及结论

图 1~6 分别给出了对某液氢液氧火箭发动机化学反应粘性喷管进行数值模拟得到的压力、温度、马赫数及 O_2 , OH , H_2O 组分的等值线图。

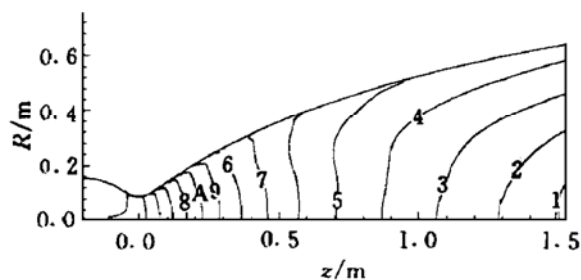


Fig. 1 Contour of dimensionless pressure

1) 0.018 2) 0.028 3) 0.044 4) 0.070
5) 0.11 6) 0.17 7) 0.27 8) 0.43

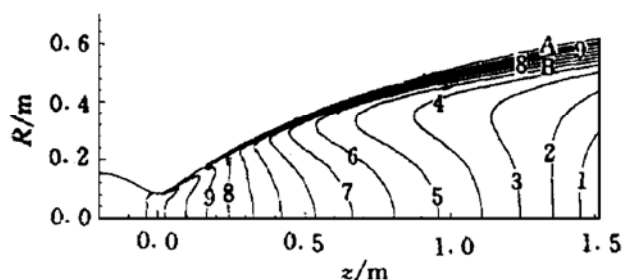


Fig. 2 Contour of dimensionless temperature

1) 1 933 2) 2 047 3) 2 160 4) 2 273
5) 2 387 6) 2 500 7) 2 613 8) 2 727

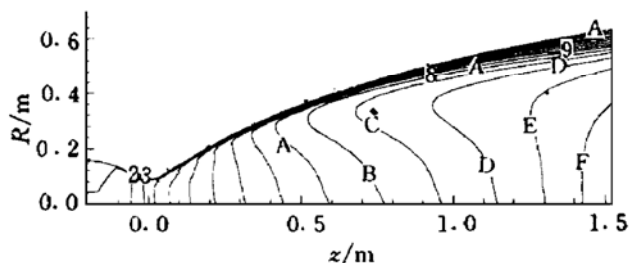


Fig. 3 Contour of Mach number

A) 2.36 B) 2.59 C) 2.83 D) 3.06
E) 3.30 F) 3.54

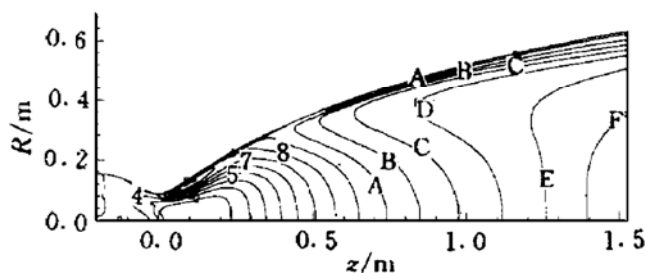


Fig. 4 Contour of O_2 mass fraction

A) 0.92% B) 0.96% C) 1.00%
D) 1.04% E) 1.08% F) 1.11%

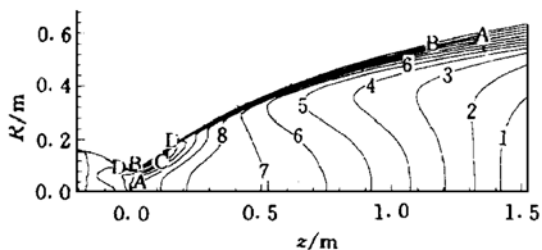


Fig. 5 Contour of OH mass fraction

1) 0.21% 2) 0.24% 3) 0.26% 4) 0.29%
5) 0.32% 6) 0.34% 7) 0.37% 8) 0.40%

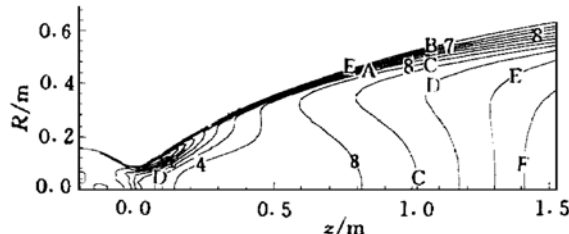


Fig. 6 Contour of H_2O mass fraction

A) 0.914% B) 0.917% C) 0.920% D) 0.922%
E) 0.925% F) 0.928%

从图中可以得出以下结论:

(1) 化学反应流动和无反应流动的流场参数分布十分相似, 大致趋势相同, 但具体分布则不同, 在喷管相同位置上化学反应流动的温度、压力、马赫数等均大于无反应流动的值, 这是由于考虑了化学反应的热量损失小于不考虑化学反应的热量损失。

(2) 各组分的质量分数的分布符合化学动力学规律: 随着温度的降低, 复合反应加强, 离解反应减弱, 大分子的质量分数增加, 而小分子的质量分数减小。

(3) 考虑粘性的计算结果比无粘的计算结果^[2]更能真实地反映流动情况。

参 考 文 献

- 1 张化照, 梁国柱, 王慧玉. 喷管化学反应粘性流场的数值模拟. 推进技术, 1998, 19 (5)
- 2 Evans J S, Schexnayder C J. Critical influence of finite rate chemistry and unmixedness on ignition and combustion of supersonic H₂-air streams. AIAA 79-0355
- 3 方丁酉, 张为华, 夏智勋, 等. 液氢液氧发动机喷管化学反应流数值模拟. 推进技术, 1996, 17 (4)
- 4 Drummond J P, Rongers R C, Hussaini M Y. A detail numerical model of a supersonic reacting mixing layer. AIAA 86-1 427
- 5 Imlay S, Rberhardt S. A diagonal implicit scheme for computing flow with finite-rate chemistry. AIAA 90-1 577

简 讯

导弹制造厂商注视着冲压和超燃冲压发动机

导弹技术正朝着发展与革命的足迹前进, 发展将是近期到中期的道路, 如果高速推进试验在近几年内能够获得成功, 那么高速推进的革命性变化在 10 年内就可能出现。

欧洲几个制造厂商组成了一个集团, 研制称为 Meteor 的新型超视距空空导弹 (BVRAAM)。美国雷锡恩公司也组建一个竞争小组, 提供称为未来中程空空导弹 (FMRAAM) 的 ALM-120 Amraam 的下一代改型。这两个竞争合同小组均采用冲压推进系统来获得射程目标, 并为提高末段机动能力提供续航动力。雷锡恩的 FMRAAM 设计采用法国宇航导弹公司的液体燃料冲压发动机, 而 Meteor 小组将采用 DASA 拜尔恩化学子公司研制的固体燃料可变流整体式固体火箭冲压发动机。

根据德国空军的一单独而平行的技术验证计划, DASA's LFK 公司正在从事称为 Eu-raam 的 BVRAAM 导弹研究, 也可能采用拜尔恩化学公司研制的冲压发动机作为推进系统。德国称为 Armiger 的新技术及反雷达导弹也许采用 $Ma=3$ 火箭冲压发动机来提高射程并减少攻击目标的时间, 该发动机具有四个空气进气道, 低容积高比冲的主发动机推进剂中硼含量高。

此外, 美国在研究高超声速超燃冲压发动机导弹, 高级研究防御计划局的可快速响应导弹验证器 (ARRMD) 正在研制中。预计 2005 年具有初步的工作能力。

龙玉珍 供稿