

喷管性能的化学动力学分析*

孙得川¹, 陈 杰², 林庆国²

(1. 西北工业大学 航天工程学院, 陕西 西安 710072; 2. 上海动力机械研究所, 上海 200233)

摘 要: 应用化学平衡流动和化学反应动力学的方法对某液体发动机喷管进行计算, 得到了不同面积比下的燃气参数和发动机性能参数分布。小型液体火箭发动机的化学动力学损失比较大, 性能接近冻结流动的结果。化学动力学损失主要产生在喷管初始膨胀部分, 随着面积比的增加, 化学动力学损失增大。

关键词: 液体推进剂火箭发动机; 喷管; 性能; 化学平衡; 化学动力学*

中图分类号: V434.11 文献标识码: A 文章编号: 1001-4055 (2003) 03-0222-03

Chemical kinetics analysis for nozzle performance

SUN De-chuan¹, CHEN Jie², LIN Qing-guo²

(1. Coll. of Astronautics, Northwestern Polytechnical Univ., Xi'an 710072, China;

2. Shanghai Inst. of Space Propulsion, Shanghai 200233, China)

Abstract: The nozzle performance of a small LRE for space propulsion was calculated using chemical equilibrium and chemical kinetic methods. For small LRE, kinetic loss is larger and nozzle performance is closed to frozen state. Kinetic loss is mainly produced in the divergence area near throat. High area ratio tends to have larger kinetic losses.

Key words: Liquid propellant rocket engine; Nozzle; Performance; Chemical equilibrium; Chemical kinetics*

1 引 言

喷管的性能分析主要包括冻结流动、平衡流动和化学动力学分析。从 20 世纪 70 年代开始, NASA 开发了最初的关于化学平衡和非平衡计算的程序, 可以计算透平机械、激波管、发动机喷管等的相应问题^[1]。经过几十年的发展, 其喷管流动计算程序从 ODE (One-Dimensional Equilibrium), ODK (One-Dimensional Kinetics) 发展到了 TDK (Two-Dimensional Kinetics), 并且新增加了许多功能用以处理诸如三组元发动机、超燃冲压发动机中的化学反应流动问题^[2]。比较之下, 虽然我们对液体火箭发动机性能的计算理论都掌握, 但是还缺乏实用的工程化的软件。对此, 由化学平衡流动和化学动力学出发, 我们首先研制了液体火箭发动机一维化学动力学计算软件, 可以方便的对使用各种推进剂的液体火箭发动机进行性能分析。

对于空间用的小型液体火箭发动机, 因为其燃烧

室压强不高, 喉径比较小, 燃气在喷管内停留的时间比较短, 所以其化学动力学损失相对大发动机来说要大一些。本文利用自行研制的喷管性能计算软件, 针对某空间小型液体火箭发动机喷管做了化学平衡流动和化学非平衡流动计算, 得到了反应产物的化学组成, 发动机的真空比冲, 真空推力系数, 以及喷管各截面的平均温度、压强、马赫数等。分析了化学动力学损失的变化。可以为发动机设计提供依据。

2 反应模型

计算中认为燃气是理想气体, 忽略相间的相互作用。混合物的状态方程为

$$pV = nRT \quad \text{或} \quad p/\rho = nRT \quad (1)$$

其中: p —N/m², V —m³/kg, n —kg•mole/kg, T —K, ρ —kg/m³。

当凝相的量很小时, 可以认为上式正确。计算中忽略凝相的体积并且不考虑其对压强的影响。其中

* 收稿日期: 2002-07-01; 修订日期: 2002-08-20。

作者简介: 孙得川 (1973—), 男, 博士, 研究领域为航空宇航推进和计算流体力学。

体积、密度和摩尔数是指气相,而质量则包含凝相。

对于化学平衡流动,本文采用最小 Gibbs 自由能的方法。关于该方法的详细描述见文献[1]。对于化学非平衡流动,本文采用有限化学反应速率的化学动力学模型。

化学反应的一般形式为

$$\sum v_i \alpha_i = \sum v_i' \alpha_i \quad (2)$$

其中 α_i 代表化学组分的名称, v_i, v_i' 表示相应的化学计量系数。方程左边表示反应物,右边表示产物。

化学反应速率有多种表示方法,本文采用 Arrhenius 指数形式的表示:

$$k = AT^B \exp(-E/RT) \quad (3)$$

其中 E 为积分活化能, A, B 是与温度无关的系数。

3 化学动力学损失

当高能推进剂在燃烧室中燃烧时,高温使通常比较稳定的分子分解,燃气在喷管中膨胀时又不断的复合,释放能量来转化为动能。但是燃气在喷管中的驻留时间很短,压强和温度下降也非常快,所以燃气无法保持化学平衡的状态。火箭发动机的化学动力学损失通常用下面的方法表示

$$\eta_{kin} = I_{spkin} / I_{speq} \quad (4)$$

$$\eta'_{kin} = (I_{spkin} - I_{spfroz}) / (I_{speq} - I_{spfroz}) \quad (5)$$

下标 kin, eq, froz 分别表示化学动力学,化学平衡和冻结流动状态。

化学动力学损失通常与推进剂,燃烧室压强和喷管的尺寸有关。发动机的理论性能采用一维化学平衡流动计算得到。计算时给定发动机的燃烧室压强、混合比和推进剂的生成焓。

4 小型 LRE 性能分析

本文以某空间用小型液体火箭发动机喷管为例进行性能计算。喷管外形如图 1 所示。所有的尺寸以喉部半径做无量纲处理。喷管喉径 $r_1 = 1.55\text{mm}$, 出口面积比 100。

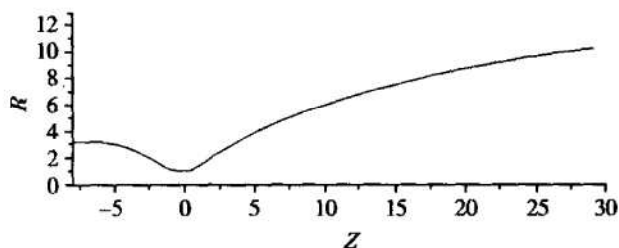


Fig. 1 Profile of small LRE nozzle

该发动机采用双组元推进剂: $\text{N}_2\text{O}_4/\text{MMH}$ (一甲基肼)。燃烧室压强 $p_c = 0.8\text{MPa}$, 混合比为 1.65。计算中采用的化学反应和相应的数据见表 1^[3], 包括 11 种组分和 15 种反应。

Table 1 Reaction rate data for CHON system

Reaction	A	B	E
$\text{H} + \text{H} + \text{M} = \text{H}_2 + \text{M}$	6.4×10^{17}	- 1.0	0.0
$\text{H} + \text{OH} + \text{M} = \text{H}_2\text{O} + \text{M}$	8.4×10^{21}	- 2.0	0.0
$\text{O} + \text{O} + \text{M} = \text{O}_2 + \text{M}$	1.9×10^{13}	0.0	- 1 790
$\text{N} + \text{O} + \text{M} = \text{NO} + \text{M}$	6.4×10^{16}	- 0.5	0.0
$\text{N} + \text{N} + \text{M} = \text{N}_2 + \text{M}$	3.0×10^{14}	0.0	- 990
$\text{CO} + \text{O} + \text{M} = \text{CO}_2 + \text{M}$	1.0×10^{14}	0.0	0.0
$\text{O} + \text{H} + \text{M} = \text{OH} + \text{M}$	3.62×10^{18}	- 1.0	0.0
$\text{O}_2 + \text{H} = \text{O} + \text{OH}$	2.2×10^{14}	0.0	16 800
$\text{H}_2 + \text{O} = \text{H} + \text{OH}$	1.8×10^{10}	1.0	8 900
$\text{H}_2 + \text{OH} = \text{H}_2\text{O} + \text{H}$	2.2×10^{13}	0.0	5 150
$\text{OH} + \text{OH} = \text{H}_2\text{O} + \text{O}$	6.3×10^{12}	0.0	1 000
$\text{CO} + \text{OH} = \text{CO}_2 + \text{H}$	1.5×10^7	1.3	- 765
$\text{N}_2 + \text{O} = \text{NO} + \text{N}$	7.6×10^{13}	0.0	75 500
$\text{O}_2 + \text{NO} = \text{O} + \text{NO}_2$	6.4×10^9	1.0	6 250
$\text{CO} + \text{O} = \text{CO}$	2.5×10^6	0.0	3 180
$\text{CO}_2 + \text{O} = \text{CO} + \text{O}$	1.7×10^{13}	0.0	52 700

$k = AT^B \exp(-E/RT)$; in units of ml, K, mole

图 2, 3, 4 分别给出了马赫数、温度和焓沿着喷管轴线的曲线。因为关心的主要是不同面积比下的参数变化,所以所有曲线均以面积比为横坐标。另外,在喷管的收敛段,燃气的速度低,温度高,化学动力学的影响并不大,所以图中的曲线都是从喉部开始。从上面的几个图看到,在喷管喉部附近,燃气温度相对还比较高,速度也不是很大,所以在面积比很小的时候燃气还处于接近化学平衡的状态;随着面积比增大,温度和压强迅速下降,燃气非常明显地偏离平衡状态,并且偏离随着面积比增大而增强,向冻结状态靠近。由于偏离化学平衡状态,燃烧产物的焓相对要高一些,有部分能量没有释放,所以温度比平衡态要低。正因为如此,虽然非平衡流动的速度比平衡流动要低,但是其马赫数反而要高于平衡流。

图 5, 6 是发动机真空推力系数和真空比冲与面积比的关系。在面积比大于 10 以后,化学动力学对真空推力系数的影响是明显的。图 6 还补充了冻结流动时的真空比冲,对于空间用小型液体发动机来说,发动机性能更趋向于冻结流动。在喷管出口(面积比 100),真空比冲低于平衡状态 13s 之多。

图 7 给出了化学损失的变化,从中也可以看到化学损失随着面积比的增大而升高。在喷管出口 $\eta = 0.96$, $\eta' = 0.203$, 化学损失是比较大的。另外,从图

5, 6, 7 可以看到, 从化学动力学的角度来说, 喷管初始膨胀阶段对于发动机性能是至关重要的, 因为温度

和速度变化剧烈, 燃气的化学动力学损失主要在这一段产生, 以后接近冻结流(当然仍高于冻结流)。

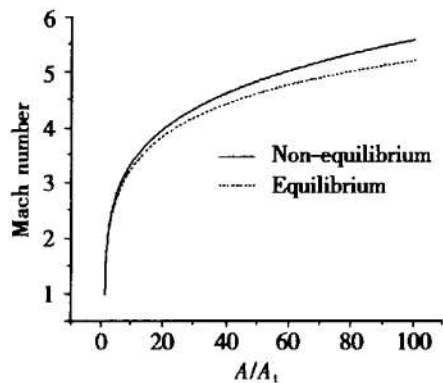


Fig. 2 Mach number with area ratio

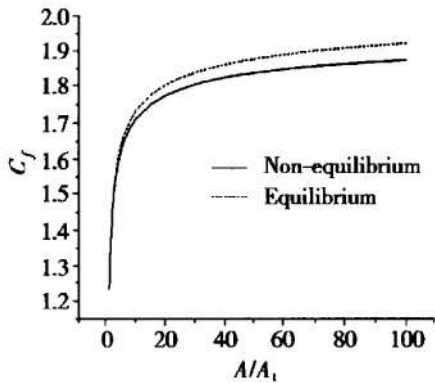


Fig. 5 Vacuum thrust coefficient with area ratio

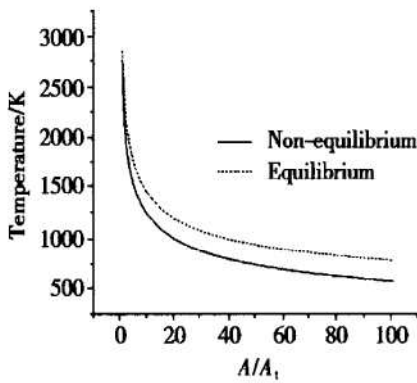


Fig. 3 Temperature with area ratio

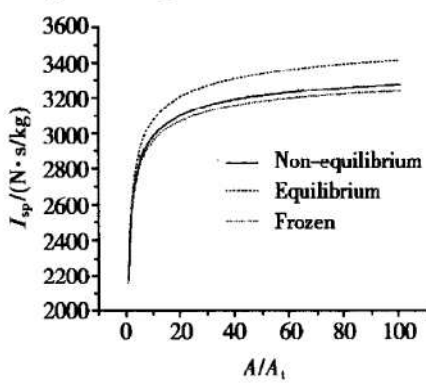


Fig. 6 Vacuum I_{sp} with area ratio

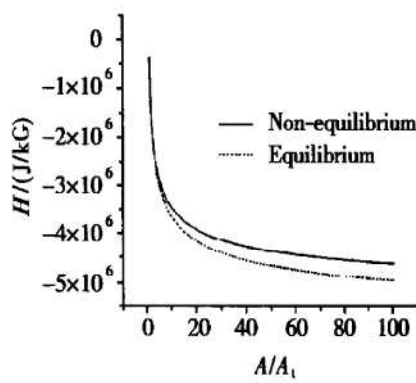


Fig. 4 Enthalpy with area ratio

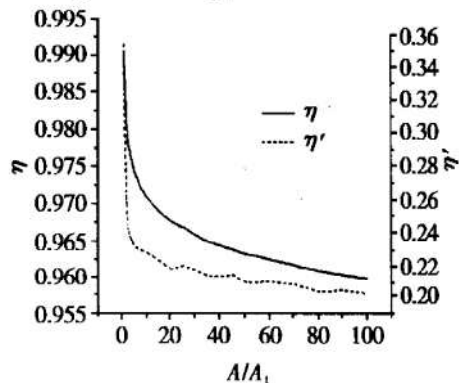


Fig. 7 Kinetic loss efficiencies with area ratio

表 2 列出了不同面积比下各组分的 Mole 分数 (非平衡流动的结果)。燃烧产物中 H_2O , N_2 , H_2 , CO 的含量比较高, 大约占了 90% 左右。其中 N_2 为惰性组分, 含量不变。另外, 从表 2 也可以看到, 在所给的面积比变化范围内, 各种组分的含量基本保持不变, 这是因为化学反应主要发生在温度比较高的区域, 在面积比大于 20 以后, 流动接近于冻结状态(从图 3 到图 7 的曲线变化也可以反应出来)。

Table 2 Mole fraction of species

A/A_1	40	60	80	100
CO	.12764	.12763	.12762	.12761
CO ₂	$.40103 \times 10^{-1}$	$.40116 \times 10^{-1}$	$.40124 \times 10^{-1}$	$.40136 \times 10^{-1}$
H	$.35683 \times 10^{-1}$	$.35778 \times 10^{-1}$	$.35826 \times 10^{-1}$	$.35859 \times 10^{-1}$
H ₂	.14648	.14641	.14638	.14636
H ₂ O	.33786	.33794	.33798	.33800
N	$.93241 \times 10^{-6}$	$.92001 \times 10^{-6}$	$.91130 \times 10^{-6}$	$.90798 \times 10^{-6}$
NO	$.27600 \times 10^{-2}$	$.27600 \times 10^{-2}$	$.27600 \times 10^{-2}$	$.27600 \times 10^{-2}$
N ₂	.30495	.30495	.30495	.30495
O	$.10436 \times 10^{-2}$	$.10385 \times 10^{-2}$	$.10346 \times 10^{-2}$	$.10309 \times 10^{-2}$
OH	$.20934 \times 10^{-2}$	$.19879 \times 10^{-2}$	$.19327 \times 10^{-2}$	$.18941 \times 10^{-2}$
O ₂	$.13794 \times 10^{-2}$	$.13888 \times 10^{-2}$	$.13955 \times 10^{-2}$	$.14015 \times 10^{-2}$

5 结 论

空间用小型液体火箭发动机的燃烧室压强低, 几何尺寸小, 化学动力学损失比较大, 性能接近冻结流动的结果。喷管初始膨胀段是化学损失产生的重要部位。化学动力学损失与面积比有关, 对于出口面积比大的小型液体火箭发动机, 化学动力学损失要大一些。在给定的混合比下, 该发动机燃烧产物主要为 H_2O , N_2 , H_2 , CO 。

参考文献:

- [1] Sanford Gordon, Bonnie J McBride. Computer program for calculation of complex chemical equilibrium compositions, rocket performance, incident and reflected shocks, and chapman-jouguet detonations[R]. NASA SP-273, March 1976.
- [2] Nickerson G R, Dang L D, Coats D E. Two-dimensional kinetic performance computer program[R]. Software and Engineering Associates, Inc., Contract No. NAS8-35931, April 1985.
- [3] Dunn S S, Coats D E. Nozzle performance predictions using the TDK97 code[R]. AIAA 97-2807.

(编辑: 王居信)