

甲烷/空气超声速燃烧流动数值模拟^{*}

刘 君

(国防科技大学 航天与材料工程学院, 湖南 长沙 410073)

摘 要: 用流动项与化学反应生成源项解耦处理的化学非平衡流动计算方法, 从薄层近似三维 N-S 方程出发, 采用 ENO 差分格式数值模拟了超声速冲压加速器简化模型中, 高速甲烷气流从后体多个喷口射入高超声速空气流形成流场, 研究了高温异质气体效应和 19 组分 65 反应模型的非平衡效应对冲压加速器表面压力分布的影响。计算表明新型解耦方法适合反应机理复杂的碳氢燃料超燃冲压发动机内部流动模拟, 为开发应用软件系统打下基础。

关键词: 冲压喷气发动机; 非平衡流; 反应动力学; 烃类燃料; 超音速燃烧; 计算流体力学

中图分类号: V235.211

文献标识码: A

文章编号: 1001-4055 (2003) 04-0296-04

Numerical study for CH₄/air supersonic combustion

LIU Jun

(Inst. of Aerospace and Material Engineering, National Univ. of Defence Technology, Changsha 410073, China)

Abstract: The flow induced by CH₄ jets for simplified scramjet model was simulated numerically, based on the 3-D thin-layer approximation N-S equations and ENO scheme. The pressure distribution of scramjet was compared with cases without CH₄ jets and chemical reaction. There were 19 species and 65 reactions chemical mechanism in computation. The method was convenient to modify chemical mechanism without changing fluid dynamic codes and was validated to fit for the flow simulation of carbon/hydrogen fuel combustion in scramjet.

Key words: Ramjet engine; Nonequilibrium flow; Reaction kinetics; Hydrocarbon fuel; Supersonic combustion; Computational fluid dynamics

1 引 言

超燃冲压发动机计算最近出现模拟 H₂/O₂ 燃烧的 GASP, VULCAN 等和模拟碳氢燃烧的 RAMEC, GRIMECH, REDRAM 等专业流动软件, 引用的软件计算结果涉及高达 47 组分 279 反应的复杂化学反应模型^[1,2]。我们在开发 Fluent 和 PHOENICS 等引进的商业软件中发现, 它们在非平衡流动模拟方面无法达到 CFD, SHIP, TWODEL, SRGULL 等软件功能。

90 年代初, 国内开展了非平衡流动计算^[1,3], 近几年, 大多引用国外提出的全隐或点隐算法解决非平衡流动模拟出现的刚性问题, 算法涉及到源项矩阵; 用这种算法编写的软件研究与组分和化学反应模型密切相关的燃料与超声速空气流混合、点火延迟和燃烧稳定性问题, 修改组分或化学反应模型需要重新推

导和编程, 十分繁琐, 不便于工程应用。

文献[3]中提出一种新的非平衡流动计算方法, 特点是将流体的控制方程分为运动齐次方程与反应源项方程解耦处理, 计算中如果增减气体组分不必修改程序, 改变化学反应仅需要重新编写生成源项计算模块, 十分适合于软件的工程化。通过 H₂/Air 和 CH₄/Air 燃烧流场模拟, 与已有的文献结果比较, 验证算法精度和效率^[3~6]。本文选择更为复杂化学反应动力学模型和近 40 万网格数的三维外形, 考核这种算法应用于实际工程研究的可行性, 探讨以此为基础开发 scramjet 流动模拟软件对计算机条件的要求。

2 非平衡流算法稳定性分析

数学模型、差分格式离散、计算方法和算例验证见文献[3~7]。稳定时间步长选取, 说明如下:

^{*} 收稿日期: 2002-06-12; 修订日期: 2002-11-13。

作者简介: 刘 君 (1965—), 男, 研究员, 研究领域为计算流体力学应用研究。

$$\frac{\partial u}{\partial t} + a \frac{\partial u}{\partial x} = f(u) = cu + b \quad (a > 0) \quad (1)$$

$f(u)$ 为反应源项, 线性化处理, c, b 为常数, 方程 (1) 存在稳定解要求 $c < 0$ 。一阶迎风差分格式离散为

$$\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} + a \frac{u_i^n - u_{i-1}^n}{\Delta x} = \frac{c}{2}(u_i^{n+1} + u_i^n) + b \quad (2)$$

如果 $f(u) = 0$, 格式的稳定性条件为

$$c_1 = a \Delta t / \Delta x \leq 1 \quad (3)$$

引入符号: $w = u_c - u_t$ 表示计算值和理论值误差, 对应的误差方程为

$$w_j^{n+1}(1 - c_2) = w_j^n(1 + c_2) - c_1(w_j^n - w_{j-1}^n) \quad (4)$$

这里, $c_2 = c \Delta t / 2$ 。根据计算流体力学理论, 稳定性要求误差放大因子

$$\lambda = \left| \frac{w_j^{n+1}}{w_j^n} \right| = \left| \frac{1 + c_2 - c_1(1 - e^{-\theta})}{1 - c_2} \right| \leq 1 \quad (5)$$

可见只要满足对流项稳定条件 (3), 不等式 (5) 对任意的 θ 都成立, 因此上述非平衡流动计算方法对时间步长没有影响。实际应用中发现, 对放热比较剧烈的 H_2/Air 燃烧, 计算初期要求为对流项稳定条件 (3) 确定时间步长的 1/4, 接近收敛时没有限制^[5]。

3 CH₄ 燃烧流动模拟

本文主要考察算法以及软件对复杂化学反应动力学模型的处理能力, 有意选择采用较为复杂的 19 组分 65 反应模型描述 CH_4/Air 燃烧; 组分包括: H, O,

H_2O , OH, O_2 , H_2 , CO, CO_2 , CHO, CH_2O , CH_3 , CH_4 , CH_2 , CH, H_2O_2 , HO_2 , N, NO, N_2 ; 涉及的反应方程如表 1 (表中按方程式两边分子数目分为三类)。计算中使用的组分热力学特性和反应速率等参数来自文献 [2, 8]。

物理模型采用简化的旋成体外形^[1], 进气道内径为 3.0cm, 中心体为锥-柱-锥布局, 半锥角为 14°, 柱直径 1.95cm, 长度为 11.73cm; 锥体前取 5 排网格作为进口边界, 锥体后延伸 4.0cm 作为下游出口; 8 个燃气喷注口均匀分布在后斜面上。根据流动特点, 周向计算 1/4 区域, 沿周向延伸 2 排网格处理对称边界条件; 进气道下游的外部流动不影响内部流动。计算区域如图中虚线示意。采用代数网格生成技术, 在壁面附近适当加密。计算中流向、径向和周向网格为 $320 \times 51 \times 23$, 网格总数接近 40 万。

模拟飞行高度 $H = 22\text{km}$, 环境压力 $p_\infty = 3999.7\text{Pa}$, 温度 $T_\infty = 218.65\text{K}$, 大气组分为 21% O_2 和 79% N_2 , 飞行马赫数 $Ma_\infty = 6.5$, 攻角为 0。喷注燃料为气态 CH_4 , 出口压力 $p_{\text{jet}} = 101325.2\text{Pa}$, 温度 $T_{\text{jet}} = 600.0\text{K}$, 马赫数 $Ma_{\text{jet}} = 1.0$, 喷流与轴线夹角 $\theta_{\text{jet}} = 20^\circ$ 。

边界条件提法如下: 进口边界固定为来流参数; 出口边界采用一阶外推; 轴上法向速度为 0, 其余物理量采用第 2 排参数平均值。加速器表面速度无滑移、等温壁 $T_w = 600\text{K}$ 和完全非催化条件。

Table 1 Chemical mechanisms of CH₄/Air mixtures

CH ₃ + H+ M= CH ₄ + M	CO+ O+ M= CO ₂ + M	H+ O ₂ + M= HO ₂ + M	H+ H+ M= H ₂ + M
H+ H+ H ₂ = H ₂ + H ₂	H+ H+ H ₂ O= H ₂ + H ₂ O	H+ H+ CO ₂ = H ₂ + CO ₂	H+ OH+ M= H ₂ O+ M
H+ O+ M= HO+ M	/	CH ₄ + H= CH ₃ + H ₂	H ₂ + OH= H ₂ O+ H
H ₂ + O ₂ = OH+ OH	CH ₄ + O= CH ₃ + OH	CH ₄ + OH= CH ₃ + H ₂ O	CH ₃ + O= CH ₂ O+ H
CH ₃ + OH= CH ₂ O+ H ₂	CH ₃ + OH= CH ₂ + H ₂ O	CH ₃ + H= CH ₂ + H ₂	CH ₂ + H= CH+ H ₂
CH ₂ + OH= CH ₂ O+ H	CH ₂ + OH= CH+ H ₂ O	CH+ O ₂ = HCO+ O	CH+ O= CO+ H
CH+ OH= HCO+ H	CH+ CO ₂ = HCO+ CO	CH ₂ + CO ₂ = CH ₂ O+ CO	CH ₂ + O= CO+ H ₂
CH ₂ + O ₂ = CH ₂ O+ O	CH ₂ + O ₂ = CO ₂ + H ₂	CH ₂ + O ₂ = CO+ H ₂ O	CH ₂ + O ₂ = HCO+ OH
CH ₂ O+ OH= HCO+ H ₂ O	CH ₂ O+ H= HCO+ H ₂	CH ₂ O+ O= HCO+ OH	HCO+ OH= CO+ H ₂ O
HCO+ H= CO+ H ₂	HCO+ O= CO ₂ + H	HCO+ O ₂ = CO+ HO ₂	CO+ OH= CO ₂ + H
CO+ O ₂ = CO ₂ + O	HO ₂ + CO= CO ₂ + OH	CH ₄ + O ₂ = CH ₃ + HO ₂	N+ O ₂ = NO+ O
H+ O ₂ = OH+ O	O+ H ₂ = OH+ H	OH+ HO ₂ = H ₂ O+ O ₂	H+ HO ₂ = OH+ OH
O+ HO ₂ = OH+ O ₂	OH+ OH= H ₂ O+ O	H+ HO ₂ = H ₂ + O ₂	2HO ₂ = H ₂ O ₂ + O ₂
H ₂ O ₂ + H= HO ₂ + H ₂	H ₂ O ₂ + OH= HO ₂ + H ₂ O	N ₂ + O ₂ = NO+ NO	N ₂ + O= NO+ N
/	N ₂ + N= N+ N+ N	CH ₂ + O= CO+ H+ H	CH ₂ + O ₂ = CO ₂ + H+ H
CH ₂ + O ₂ = CO+ OH+ O	CH ₂ O+ M= HCO+ H+ M	HCO+ M= CO+ H+ M	O ₂ + M= O+ O+ M
N ₂ + M= N+ N+ M	NO+ M= N+ O+ M	H ₂ O ₂ + M= OH+ OH+ M	/

* M is a third body

计算无喷流、有喷流无反应和有喷流有反应三种情况, 计算得到在包含喷口的对称面(与 x 轴的夹角 22.5°) 上部分物理参数的等值线如图 1。超声速来流在中心体前缘产生的斜激波在管道表面反射, 反射激波受中心体上游锥柱结合处膨胀波影响强度有所减弱, 在柱体表面二次反射和管道表面第三次反射时激波与附面层相互干扰产生局部分离区, 这些结构在三种算例中基本一致。无喷流算例见图 1(a), 激波在管道内多次反射后到达后锥体时已经很弱, 经过再次膨胀, 在后锥体表面已很不明显。但是高压欠膨胀 CH_4 喷流对进气道内空气阻挡作用在喷口前产生较强的激波, 如图 1(b) 和 (c); 结合图 2 是算例 (a) 和 (c) 计算得到后体压力比较, 可以看到喷口前分离区内压力向上游传播引起的变化。比较图 1(b) 和 (c) 发现尽管 CH_4 在喷口就与空气接触, 但是燃烧产物 CO_2 和 H_2O 并非立刻产生, 有明显的点火延迟; 而且从流动结构判断点火过程正好发生在管壁反射激波后, 属

于激波点火。根据以上信息, 可以得出如图 3 所示的流场结构, 定性分析基本合理。

4 软件计算效率分析

CFD 在解决 scramjet 问题中遇到新的挑战: 除了模拟内外流中复杂波系和涡系外, 点火和燃烧过程中高度非线性的非平衡效应不容忽视。文献[5, 8] 研究 H_2/Air 预混燃气中激波点火过程, 其他条件完全一样, 7 组分 8 反应模型没有出现实验观测到的燃烧振荡, 13 组分 32 反应模型可以模拟出这一现象, 原因在于后者考虑了更多描述点火过程的热解反应。对以碳氢为燃料的 scramjet 流动, 涉及的化学反应动力学模型从几种组分几反应到几十组分几百反应^[2], 针对某设计型号, 直接采用较为简单的反应动力学模型, 可能得不到对工程研究有指导意义的计算结果。因此非平衡流动模拟方法和软件的计算效率是从科研领域走向工程应用的关键。

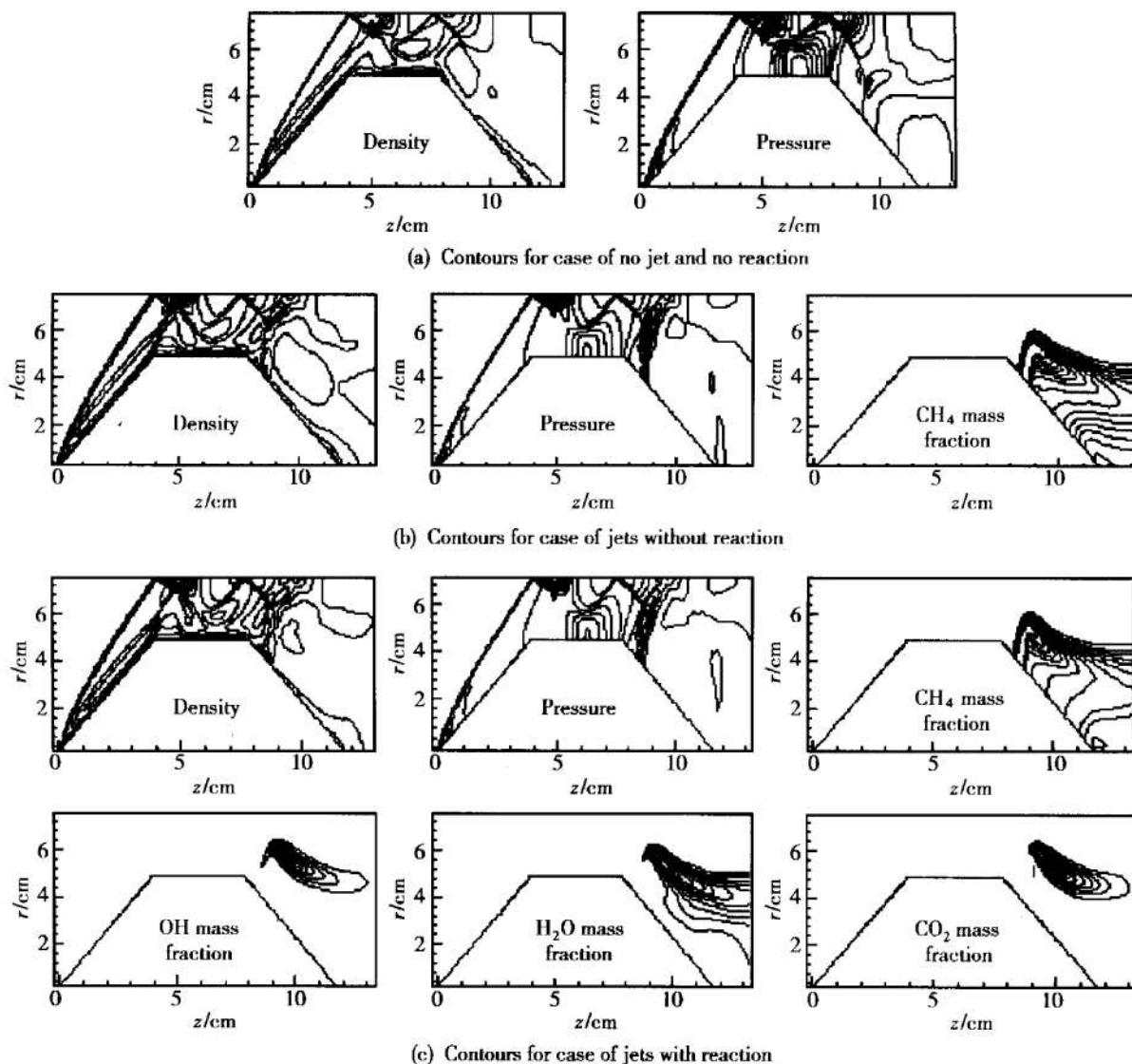


Fig. 1 Contours of some parameters for three computational cases

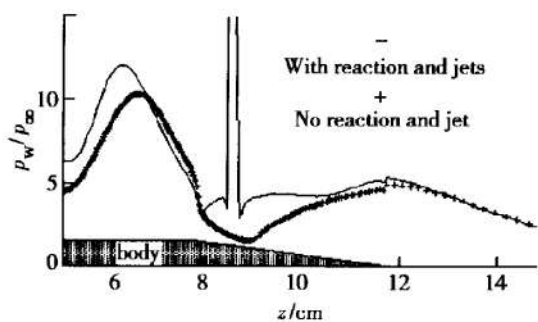


Fig. 2 Comparison of pressure distribution on the surfaces of afterbody

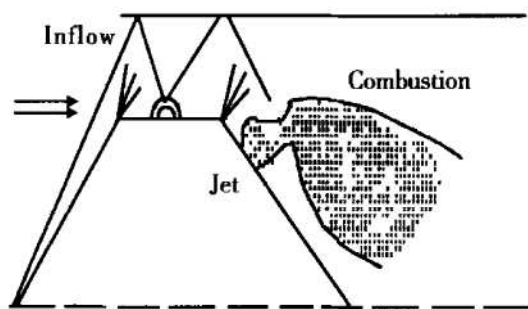


Fig. 3 Flow structure

计算在主频为 P ④—1GHz, 内存 128MB 配置 Winbook6630 型电脑上完成, 编译器采用微软公司开发的 Fortran Powerstation 4.0。无喷流无反应情况每步推进时间 20s, 达到收敛(图 1(a)) 需要 2200 步; 在此基础上进行有喷流无反应计算, 每步推进时间一样, 达到收敛(图 1(b)) 增加 1800 步; 在此基础上开始有反应流动计算, 根据算子分裂要求反应算子在总算子中分为对称的 2 步, 总算子推进时间 74s, 如果反应算子分为 4 步^[4,5], 每步推进时间 107s, 本文取 4 步形式达到收敛(图 1(c)) 增加 1950 步。完成本文计算量接近 4 天。

与文献[4, 5]算例进行粗略比较, 本文算法的反应组分和反应方程式数目增加与总算子每步推进时间增加量基本成线性关系, 对全隐或点隐算法至少是平方关系。另外, 本文算法增减气体组分或化学反应不必重新修正与流体运动控制方程有关的计算模块, 仅需要改变生成源项计算模块, 由于显式不涉及源项矩阵, 推导和编写较为简单。

根据文献[4, 5, 9], 模拟点火过程中不稳定燃烧现象对网格要求, 针对本文算例外形, 初步估算流向网

格应增大 8 倍、径向增大 4 倍和周向增大 4 倍, 网格总数超过 5000 万; 由于网格尺度直接影响时间推进步长, 达到收敛总的计算步数至少增加 8 倍, 现有计算条件几乎不可能进行尝试。根据国内现有巨型计算机的速度, 考虑对显式计算方法进行并行算法处理效率较高, 开展这样研究工作也是可能的。

5 结 论

本文从算法、网格、化学动力学模型等方面, 考察文献[3]提出的非平衡流动计算方法应用于 scramjet 内部燃烧数值模拟的可行性。研究表明计算方法适合于工程化, 涉及几十种组分和几百个反应很快就可完成编程工作; 但是, 对于实际复杂外形、准确模拟点火延迟、非定常燃烧过程, 需要有世界一流的巨型计算机条件进行保障。

参考文献:

- [1] 陈坚强. 超声速燃烧流动及漩涡运动的数值模拟[D]. 中国空气动力研究与发展中心, 1995.
- [2] Nusca M J. Computation simulation of starting dynamics in a ram accelerator[R]. AIAA 98-3146.
- [3] 刘 君, 张涵信, 高树椿. 一种新型的计算化学非平衡流动的解耦方法[J]. 国防科技大学学报, 2000, 22(5).
- [4] 刘 君. 化学动力学模型对 H₂/AIR 超燃模拟的影响[J]. 推进技术, 2003, 24(1).
- [5] 刘 君. 非平衡流计算方法及其模拟激波诱导振荡燃烧[J]. 空气动力学学报, 2003, 21(1).
- [6] 刘 君. 超音速完全气体和 H₂/O₂ 燃烧非平衡气体的复杂喷流流场数值模拟[D]. 中国空气动力研究与发展中心, 1993.
- [7] 刘 君, 刘瑞超, 贾忠湖, 等. 爆炸波与物体干扰流场的数值模拟[J]. 空气动力学学报, 2000, 18(1).
- [8] Nusca M J. Reacting flow simulation of transient multi-stage ram accelerator operation and design studies[R]. AIAA 95-2494.
- [9] Choi Jeong-Yeol, Jeung Irr-Seuck, Yoon Youngbin. Computational fluid dynamics algorithms for unsteady shock-induced combustion (part 1 and part 2) [J]. AIAA Journal, 2000, 38(7): 1179~ 1195.

(编辑: 王居信)