

液滴碰撞聚合模型及其在喷雾燃烧流场中的应用^{*}

李 强, 蔡体敏, 何国强, 刘佩进

(西北工业大学 航天工程学院, 陕西 西安 710072)

摘 要: 基于平滑粒子流体动力学方法的思想, 建立了新的描述液滴间碰撞和聚合过程的数学模型, 将相互碰撞的液滴局限在其周围一定数目的液滴之间, 并对液滴间碰撞的概率进行了重新定义。数值计算结果表明: 模型从根本上摆脱了 O'Rourke模型对计算网格的依赖性, 大幅度提高了计算效率和精度。在此基础上考虑液滴的变形、破碎及相变过程, 采用 Euler-Lagrangian方法和有限化学反应速率模型, 对 RBCC引射模态进行了三维两相喷雾燃烧流场数值模拟, 并和实验数据进行了对比。结果表明: 在 RBCC自由引射模态, 二次燃料喷射位置的适当后移会使燃料利用率提高, 引射比增加, 引射火箭推力增加。

关键词: 液雾⁺; 液滴; 碰撞和聚合⁺; 数学模型; 数值计算

中图分类号: V430 文献标识码: A 文章编号: 1001-4055 (2005) 05-0452-06

Droplet collision and coalescence model and its application in the spray combustion simulation

LI Qiang CAI T min HE Guo-qiang LU Pei-jin

(College of Astronautics, Northwestern Polytechnical University, Xi'an 710072, China)

Abstract Due to the fact that the droplet collision and coalescence model is very important and the models existed are time-consuming and mesh-dependent. Based on the principal idea of Smooth Particle Hydrodynamics method, a new droplet collision and coalescence model was presented in this paper. The model assumes that a droplet can only collide with a given number of nearest droplets surrounding it. In this way the droplet collision probability was redefined. Numerical simulation shows that the model presented is mesh independent, highly efficient and accurate. Then Euler-Lagrangian method including droplet deformation, breakup and phase change, coupled with finite rate chemical reaction model was used and three dimensional turbulent spray combustion simulation was carried on the eject mode of RBCC. Comparison was made between computation and the experimental data and it is shown that in the eject mode of RBCC, the movement of injector downstream to some extent can increase the fuel combustion efficiency and thrust.

Key words Liquid sprays⁺; Droplet Collision and coalescence⁺; Mathematical simulation; Numerical calculation

1 引 言

液雾中液滴间存在着碰撞和聚合过程, 这一物理现象已经引起越来越多的关注。Kitron^[1]指出, 由碰撞诱发的破碎与聚合对液滴尺寸的分布有很大的影响。Marion G^[2]通过实验研究指出气流湍流度对液滴的破碎和碰撞聚合有很大影响, 但在其计算模型中假设液滴破碎时只能破碎成两个大小相同的液滴, 聚合时也只能是大小相同的液滴发生聚合。

目前描述液滴间碰撞和聚合过程的模型以 O'Rourke^[3]提出的模型最具代表性, 但该模型存在网格依赖性很强、计算量大、工程计算精度低等缺点。Ashem JP^[4]利用 O'Rourke的模型计算了空心锥液雾中液滴间的碰撞问题, 计算结果与实测值相差 30% ~ 40%。在 O'Rourke模型的基础上, Bird^[5]提出了 TC模型, 但计算结果表明该模型对所假定的液滴分布有很大的依赖性。为减小计算量, Schmid^[6]提出了 NTC模型, 和 O'Rourke模型相比, 该模型以

* 收稿日期: 2004-12-15 修订日期: 2005-04-05

作者简介: 李 强 (1976—), 男, 博士生, 研究领域为航空宇航推进理论与工程。E-mail: 193088066@126.com

每次生成离散相计算网格和新的计算液滴为代价减小了计算量,但两套计算网格的存在给动量的耦合计算带来了困难,计算液滴的随机抽样生成也可能使系统动量出现不守恒现象,数值计算结果表明该模型也存在对计算网格的依赖性。

本文建立了新的描述液滴间碰撞和聚合过程的数学模型,讨论了模型对计算网格的依赖性,并将所建立的模型应用到 RBCC 二次喷雾燃烧流场的数值模拟中。

2 数学模型

喷雾燃烧流动是一个包含传质、传热、化学反应、湍流及二相流的复杂流动过程,目前对其进行数值模拟一般都采用 Eulerian-Lagrangian 方法,在 Eulerian 坐标中求解气相的控制方程和描述化学反应过程的控制方程,同时在 Lagrangian 坐标系中对液滴进行跟踪,计算液滴的传质、传热过程,两相之间的耦合一般是通过在控制方程的右侧附加源项来完成的。

2.1 气相控制方程

气相采用 RANS 方程进行描述,考虑液雾的作用,其控制方程可以写成如下形式

$$\partial \rho / \partial t + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = \rho_s \quad (1-1)$$

$$\frac{\partial (\rho \mathbf{u})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{u}) = -\nabla p - \nabla \cdot \left(\frac{2}{3} \rho \mathbf{u} \right) + \nabla \cdot \sigma + \mathbf{F}_s \quad (1-2)$$

$$\frac{\partial (\rho I)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} I) = -p \nabla \cdot \mathbf{u} - \nabla \cdot \mathbf{J} + \rho \epsilon + \dot{Q}_s + \dot{Q}_c \quad (1-3)$$

式中 ρ , $\mathbf{u}$, p , I 分别为气体的密度、速度、压强和比内能, σ 为粘性应力张量, $\dot{Q}_c$ 为化学反应的能量源项, $\mathbf{J}$ 是热通量项,包括热传导项和焓扩散项, ρ_s , $\mathbf{F}_s$ 和 $\dot{Q}_s$ 分别为由离散相引起的质量、动量和能量源项,其表达式详见文献[7]; k , ϵ 分别为湍动能及其耗散率,在本文计算中由 k - ϵ 湍流模型封闭。

化学反应采用一步化学反应方程式,反应速率由广义阿累尼乌斯定律计算。

2.2 离散相控制方程

应用轨道模型追踪液滴的运动过程时,将液滴看成离散质点,对单个液滴应用牛顿第二定律

$$m_p (d\mathbf{V}_p / dt) = \mathbf{F} \quad (2)$$

式中 m_p , $\mathbf{V}$, $\mathbf{F}$ 分别为液滴的质量、速度和所受到的作用力。液滴受到的作用力 $\mathbf{F}$ 十分复杂,本文计算中

只考虑气相的阻力和体积力,即

$$\mathbf{F} = \frac{\pi d_p^2}{8} C_D |\mathbf{u} - \mathbf{u}' - \mathbf{V}_p| (\mathbf{u} + \mathbf{u}' - \mathbf{V}_p) + m_p \mathbf{g} \quad (3)$$

式中 d_p 为液滴直径, $\mathbf{u}$ 为气相湍流脉动速度, $\mathbf{g}$ 为体积力产生的加速度, C_D 为阻力系数,表达式为

$$C_D = C_{d, \text{spherical}} [1 + 2.636y] \quad (4)$$

式中 $C_{d, \text{spherical}}$ 为当量球型液滴的阻力系数,由标准阻力公式计算, y 为无量纲参数,由 TAB^[7] 模型计算。计算中液滴的蒸发采用 d^2 模型描述,通过对液滴的轨迹进行随机修正以考虑湍流对液滴的扩散作用,采用 TAB 模型描述液滴的变形和破碎过程。

2.3 液滴碰撞和聚合模型

描述液滴间相互碰撞和聚合的子模型在喷雾燃烧的数值模型中十分重要。由于 O'Rourke^[3] 模型具有网格依赖性强、计算量大,计算精度低等缺点,而 TC^[5] 模型和 NTC^[6] 模型不但对液滴初始分布依赖性强,还可能造成系统动量不守恒,据此本文基于平滑粒子流体动力学方法的基本思想建立了新的描述液滴碰撞和聚合过程的数学模型。

平滑粒子流体动力学方法是一种纯拉格朗日方法,本质上不需要计算网格,该方法将整个流场离散成 N 个粒子,将粒子 j 的质量 m_j 赋予其质心 $\mathbf{x}_j(t)$ ($j=1, 2, 3, \dots, N$),对场函数 $F(\mathbf{x})$ 进行核函数估值,其定义是

$$F(\mathbf{x}) = \int_A W(\mathbf{x}, \mathbf{x}', h) F(\mathbf{x}') d\mathbf{x}' \quad (5)$$

式中 A 是积分域, $W(\mathbf{x}, \mathbf{x}', h)$ 是积分核函数, $\mathbf{x}$ 和 $\mathbf{x}'$ 为估值点和插值基点, h 称为平滑长度,描述粒子所负载的物理量在空间的有效作用范围,显然 $F(\mathbf{x})$ 表示 $\mathbf{x}$ 附近各点处 F 值的加权平均, $W(\mathbf{x}, \mathbf{x}', h)$ 就是所使用的权。

目前平滑粒子流体动力学方法有两种实现方式,一是将粒子间的作用局限在一定的距离范围之内,并选取 Gaussian 型函数作为核函数;另一种方法是将粒子之间的作用控制在距离最近的 N_0 个粒子之间,可以看出第二种方式将随粒子浓度的变化自适应地调节计算精度。

在建立描述液滴碰撞和聚合的模型时,需要解决的主要问题包括:计算液滴碰撞对的搜索、计算液滴碰撞与否的判断及碰撞的结果,本文借助平滑粒子流体动力学方法两种实现方式的各自的优点来解决前两个问题。

计算液滴碰撞对的搜索。由于液滴间的碰撞最有可能发生于距离最近的液滴之间,距离较远的液滴间碰撞的概率几乎为零,所以为了提高计算精度,减少计

算量,本文借用了平滑粒子流体动力学方法第二种实现方式的优点,将可能发生碰撞的计算液滴对按液滴间的相对距离局限在其周围一定数目的计算液滴之间,考虑到湍流对液滴的扩散作用,对二维情况取 $N_0 = 18$ 对三维情况取 $N_0 = 54$ 。该方法的优点在于用计算液滴间的相对距离取代了 O'Rourke 模型中计算网格对计算液滴的限制,从根本上消除了计算网格大小、形状和计算液滴空间分布对液滴碰撞的直接影响,同时使计算量维持在和计算液滴数相同的数量级上。

液滴间碰撞的判断。对于计算液滴碰撞对之间是否碰撞的判断, O'Rourke 模型采用选取随机数的方法,使其计算结果的随机性很大,同时将计算液滴的普遍性绝对化。本文利用平滑粒子流体动力学方法第一种实现方式的优点,计算液滴类似于负载物理量的粒子,以质量为例进行类比,计算液滴所负载的质量将以积分核的形式在空间连续展开,它所代表的真实液滴数密度在空间也将按积分核的形式连续分布,此时一个计算液滴与另一个计算液滴所代表的液滴中一个液滴发生碰撞的概率就是所采用的积分核函数在该处的值,所以在本文模型中将液滴间碰撞的概率看成是液滴间相对距离的函数,并采用平滑粒子流体动力学方法中的积分核函数来定义液滴间碰撞的概率。

对于编号为 i 的计算液滴 P^i , 首先确定可能和它发生碰撞的计算液滴,将其编号为 $\{i_1, i_2, \dots, i_{N_0}\}$, 对于计算液滴碰撞对 (P^i, P^m) , $m = i_1, i_2, \dots, i_{N_0}$, 假设其位移分别为 $\vec{x}_i, \vec{x}_m$, 速度矢量分别为 $\vec{V}_i, \vec{V}_m$, 如果

$$(\vec{x}_i - \vec{x}_m) \cdot (\vec{V}_i - \vec{V}_m) > 0 \quad (6)$$

则说明两个液滴向着相同的方向运动,认为这两个液滴之间不可能发生碰撞。将满足条件 $(\vec{x}_i - \vec{x}_m) \cdot (\vec{V}_i - \vec{V}_m) < 0$ 的所有计算液滴的编号记为集合 $\{i_1, i_2, \dots, i_n\}$, 定义为

$$s_{ij} = |\vec{x}_i - \vec{x}_j| \quad h = 2 \max(s_{ij}) \quad j = i_1, i_2, \dots, i_n \quad (7)$$

定义编号为 i 的计算液滴 P^i 中一个液滴和编号为 k 的计算液滴 P^k ($k = i_1, i_2, \dots, i_n$) 中一个液滴之间发生碰撞的概率:

$$P_{ik} = \frac{1}{h^{dim} \pi^{dim/2}} \exp\left(-\frac{s_{ik}^2}{h^2}\right) \quad (8)$$

在采用式 (8) 定义液滴间碰撞的概率后,可以计算出计算液滴 P^i 和计算液滴 P^k 之间发生碰撞的次数。

应用以上所建模型研究了计算网格大小对液滴碰撞和聚合模型的影响,进行了 $15\text{cm} \times 20\text{cm}$ 的二维平面开放区域内两种不同大小网格上的数值模拟。两股垂直的射流相距 9cm , 单喷孔流量为 6.0g/s 温度为 300.0K , 喷雾锥角为 10° , 初始液滴 SMD 为 $100.0\mu\text{m}$, 速度为 30.0m/s 环境压力为一个大气压, 温度为 300K ; 计算网格剖分数分别为 15×21 和 30×42 计算结果如下:

图 1~2 给出两种网格大小下计算结果中液滴的位置分布。可以看出,不考虑液滴间的碰撞和聚合时,在计算网格加密前后,液滴的位置分布没有明显差别,交汇点对两股液雾的运动规律没有造成任何影响。对于 O'Rourke 模型,在计算网格加密前,两股液雾在交汇点处相互作用,各自的运动规律发生明显的改变,由于计算网格较大,使得在交汇点处单个网格内的液滴数密度很高,此时 O'Rourke 模型会过多地计算液滴之间的碰撞和聚合次数,导致在交汇点后,液雾分布比较集中;在计算网格加密后,这一现象有了明显改善,两股液雾在交汇点后呈扇型均匀分布,这充分说明计算网格大小对 O'Rourke 模型有很大的影响。对于本文所建模型,在网格加密前后虽然交汇点处单个网格内液滴数密度变化很大,但由于本文建立的模型在进行液滴碰撞对的选取及碰撞概率的计算中均以计算液滴间的相对距离为依据,且随计算液滴数密度的大小进行自适应调节,液滴位置分布没有明显的变化,这说明本文所建模型不但能保持较高的计算精度,而且对计算网格的大小没有明显的依赖性。

图 3 给出了两股液雾交汇点处不同模型、不同计算网格大小下计算结果中液滴的分布情况,可以看出对于不同的网格大小,在交汇点所处的计算网格内(对粗网格为一个计算网格,对细网格为四个计算网格)计算液滴的浓度分布基本相同,而不同模型的计算结果差别较大,这说明计算结果的差异是由计算模型导致的,而不是由计算网格大小引起的。

3 RBCC 二次喷雾燃烧数值模拟

作为本文所建模型的工程应用,本节进行了 RBCC 二次喷雾燃烧流场的数值模拟。计算中的 RBCC 几何结构详见文献^[8], 对其中的 Case(2) 和 Case5 两个工况进行了数值计算,计算中液滴的初始 SMD 采用实验测量的结果且假定液滴尺寸服从 x^2 分布。

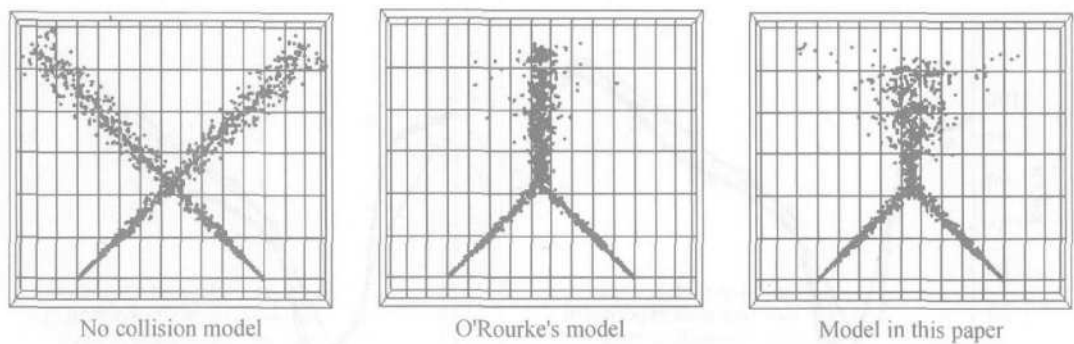


Fig 1 Distributions of computational droplets on coarse mesh

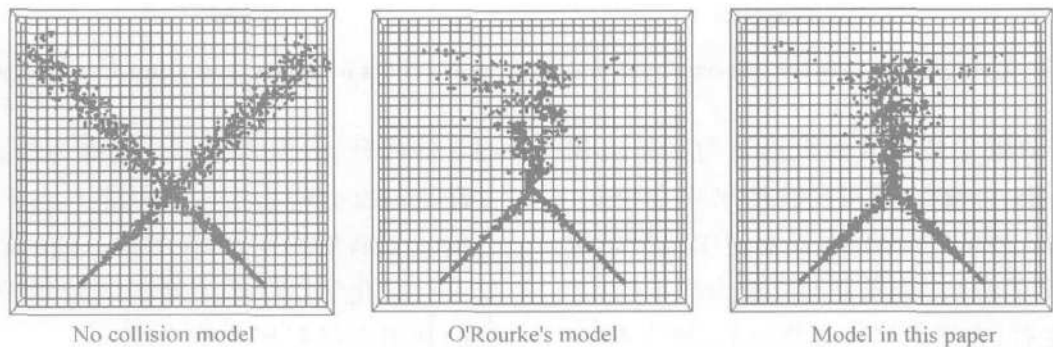


Fig 2 Distributions of computational droplets on refined mesh

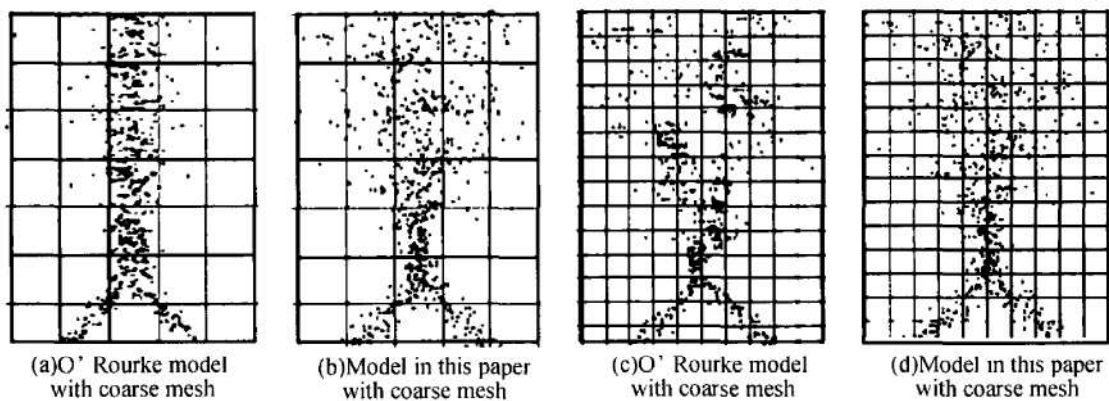


Fig 3 Distributions of computational droplets on crossing point with different mesh sizes

图 4给出两种工况下计算结果中流道内距壁面 1mm 处压强的计算值和实验测量值的比较。可以看出,不同酒精喷射点下,流道中压强分布趋势基本相同,由进气道入口开始,压强逐渐减小,在一次火箭出口处,达到最小值,随后在支板火箭的作用下,压强逐渐上升,在喷管出口处膨胀到环境压强。但在两种不

同喷射点下,压强的大小又有所不同,采用前喷射点时,流道内的压强稍微偏大,采用后喷射点时,发动机的引射量有所增加,比较计算值和实验测量值可以看出,计算结果和实验结果基本吻合,最大误差在燃烧室中段,误差约 12%。

Table 1 Measured and computed thrust without and with combustion

	Thrust/N			Fuel efficiency	Thrust ratio	
	Without combustion		With combustion			
	Experimental	Experimental	Numerical		Experimental	Numerical
Case1	972					
Case4(2)	720	938	911	62%	96.5%	93.7%
Case5	760	980	954	74%	100.8%	98.7%

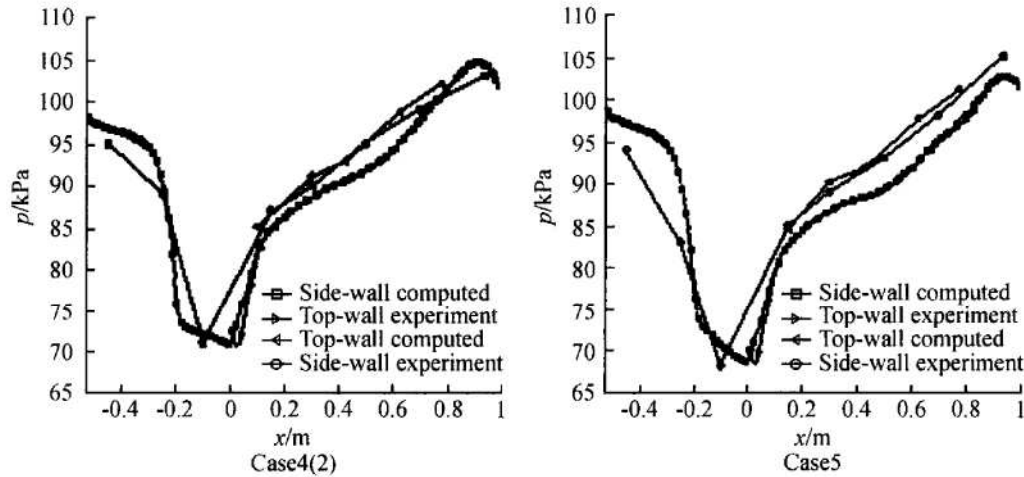


Fig 4 Comparison between experimental and numerical results of pressure at 1mm from the wall

表 1给出了两组实验中发动机推力的测量值和计算值。可以看出, 计算结果和实验结果吻合较好, 从发动机推力的比较可以看出, 在没有组织二次燃烧时, 由于燃料喷雾的影响, 造成发动机推力的下降, 下降幅度达 25% 左右; 在组织二次燃烧以后, 推力有了

明显的回升, 但仍然没有产生推力增益, 计算结果中发动机的推力略小于实验结果。由于没有方法可以直接获知酒精的利用率, 所以只能根据生成 CO_2 的量来计算化学反应所消耗的酒精量, 两种状况下, 酒精的利用率仅有 62% 和 74%。

Table 2 Measured and computed pressure and mass flow rate of air at inlet

		Pressure of inlet/kPa		Mass flow rate of air/(kg/s)	
		Experimental	Numerical	Experimental	Numerical
Case4(2)	Before combustion	60.25		1.4375	
	After combustion	89.05	94	0.9801	0.914
Case5	Before combustion	62.15		1.4369	
	After combustion	83.55	89	1.1390	1.076

表 2给出了进气道中压强及空气质量流率的测量值和计算值, 可以看出, 在组织二次燃烧后, 进气道中的压强上升, 升幅达 30% 左右, 引射量却明显下降, 降幅达 40% 左右。两种工况下计算结果中进气道内的压强值比实验测量值偏高约 6.5%, 计算结果中空气质量流率比实验测量值偏低约 6.7%。

从 Case4(2)和 Case5的实验结果和计算结果都可以看出, 燃料喷射位置的适当后移会使燃料利用率提高, 引射比增加, 引射火箭推力增加。由于在不同的喷射点, 燃油液雾所面对的环境不同, 引射火箭燃烧室中流动速度较大, 压强较高, 而喷注器的喷射速度并不高, 液滴的贯穿能力较差 (不到 1cm), 所以对液滴影响最大的是紧贴侧壁 1cm 范围内流场的属性。结合 Case1中两个不同喷射点处流场的速度、温度分布和 Case4(2)与 Case5中液滴直径分布图 5和图 6可以看出, 前喷射点处, 在液雾贯穿内, 流场的速度和温度都较低, 液滴破碎和蒸发的效率不明显, 液滴的蒸发量很小, 而且由于气动力的作用迅速向上

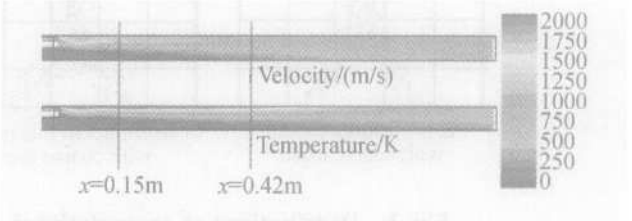


Fig 5 Temperature and velocity profile on plane $z= 50\text{mm}$ for Case1

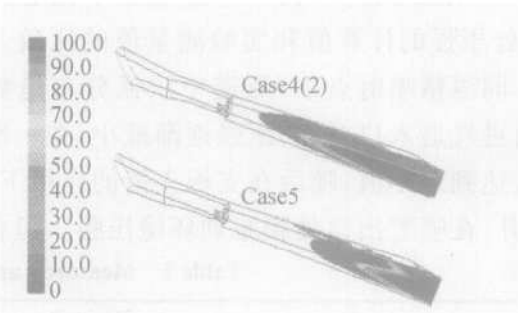


Fig 6 Distribution of droplet diameter(μm) for Case4(2) and Case5

盖板方向移动, 而该处的温度和速度更低, 最后燃油

以液滴的形式经发动机出口流出;后喷射点处,在液雾贯穿内,流场的温度和速度明显升高,液滴破碎和蒸发的效率增强,在液滴尚没有到达上盖板以前,大量的液滴就已完全蒸发,在发动机尾部发生剧烈燃烧,加热效果明显,流场速度提高,引射火箭推力增强,由于气相的抽吸,流道内压强较低,引射比提高。

4 结 论

本文基于平滑粒子流体动力学方法的基本思想,建立了描述液滴间碰撞和聚合过程的数学模型,将液滴相互碰撞的概率看成是液滴间相对距离的函数,从根本上摆脱了 O'Rourke 模型对计算网格的依赖性,模型计算结果稳定、可靠,对计算网格的大小没有明显的依赖性.通过对 RBCC 进行三维两相喷雾燃烧流场的数值模拟,表明在自由引射模态,燃料喷射位置的适当后移会使燃料利用率提高,引射比增加,引射火箭推力增加。

参考文献:

- [1] Kitron A, Elperin T, and Tamir A. Stochastic modeling of the effects of the liquid droplet collisions in impinging streams absorbers and combustors[J]. *Int J. Multiphase Flow*, 1991, 17(2): 274
- [2] Marion G, Dicharry C, Mendiboume B. Contribution of the modelization of the surfactant concentration influence on droplet size distribution in oil/water emulsion[J]. *Progress in Collid & Polymer Science*, 1993, 307~ 311.
- [3] O'Rourke P J. Collective drop effects on vaporizing liquid sprays[D]. *Princeton University*, 1981.
- [4] Ashem J P, Peters J E. Modeling of a hollow-cone liquid spray including droplet collisions[J]. *J. Propulsion*, 1988, 44(5).
- [5] Bird G A. Molecular gas dynamics[M]. *Clarendon Press Oxford*, 1994.
- [6] Schmidt David P, and Rutland C J. A new droplet collision algorithm [J]. *Journal of Computational Physics*, 2000, 164, 62~ 80.
- [7] KIVA-3. A KIVA program with block-structured mesh for complex geometries[M]. *LA-12503-MS. Los Alamos National Laboratory*.
- [8] 刘佩进,何国强,李宇飞,等. RBCC 引射火箭模态二次燃烧实验 [J]. 推进技术, 2004, 25(1). (LIU Pei-jin, HE Guo-qiang, LI Yu-fei et al. Effect of secondary combustion in rocket ejector[J]. *Journal of Propulsion Technology*, 2004, 25(1).)

(编辑: 刘萝威)

(上接第 442 页)

参考文献:

- [1] Dora Elia Musielak. Injection and mixing of gas propellants for pulse detonation propulsion [R]. *34th AAA /ASME /SAE /ASEE Joint Propulsion Conference & Exhibit*, 1998.
- [2] Eidelman S. Pulse detonation engine: a status review and technology development road map[R]. *AAA* 97-274Q.
- [3] 张群,严传俊,范玮,等. 填充系数对脉冲爆震发动机压力波影响的实验研究 [J]. 燃烧科学与技术, 2002, 8(5): 411~ 414.
- [4] Zhang F Y, Fujiwara T, Miyasaka T, et al. Detonation studies of high-frequency-operation pulse detonation engine with air/hydrogen[R]. *AAA* 2003-1169.
- [5] 张群,严传俊,范玮,等. 多循环脉冲爆震发动机概念化设计 [J]. 推进技术, 2003, 24(6): 500~ 504. (ZHANG Qun, YAN Chuan-jun, FAN Wei et al. Conceptual design of multi-cycle pulse detonation engines[J]. *Journal of Propulsion Technology*, 2003, 24(6).)
- [6] 孙承伟,卫玉章,周之奎. 应用爆轰物理 [M]. 北京: 国防工业出版社, 1999.

(编辑: 梅 瑛)