# 气相化学反应与声学振荡的耦合机理数值研究\*

薛诚尤1, 聂万胜2, 何 博2, 郑 刚1

(1. 中国人民解放军装备学院 研究生院,北京 101416;2. 中国人民解放军装备学院 航天装备系,北京 101416)

摘 要:通过数值仿真方法针对液体火箭发动机内的气相化学动力学与振荡声场的热声耦合机理进行了研究。采用任意拉格朗日算法解耦流动与化学源项间的刚性。采用的多步总包反应机理考虑了底层的准稳态组分脉动。通过入口流量边界的流量脉动向燃烧室中引入纵向声波,并建立了冷流声学相似场模型以分析热声耦合效应的强度。研究发现:在线性小振幅声场中,气相化学动力学控制的释热系统与声学振荡无明显耦合激励;在非线性有限幅值声场中,燃烧室压力与释热波动出现"突跃"并表现为陡峭前沿波,气相化学动力学控制的释热系统与声学振荡发生耦合激励,反应流较其冷流声学相似场的压力振荡振幅增强约300%。最后分析了耦合激励发生的可能原因,提出了气相化学动力学体系的"释热分岔"假说。

关键词: 热声耦合; 化学动力学; 任意拉格朗日欧拉算法; 冷流声学相似场; 数值仿真 中图分类号: V434.1 文献标识码: A 文章编号:1001-4055 (2016) 02-0317-07 DOI: 10.13675/j. cnki. tjjs. 2016. 02. 016

## Numerical Research on Mechanism of Coupling between Gas-Phase Chemical Reaction and Acoustic Oscillation

XUE Cheng-you<sup>1</sup>, NIE Wan-sheng<sup>2</sup>, HE Bo<sup>2</sup>, ZHENG Gang<sup>1</sup>

(1.Department of Postgraduate, The Academy of Equipment, Beijing 101416, China;2. Department of Aerospace Equipment, The Academy of Equipment, Beijing 101416, China)

Abstract: The mechanism of the coupling between gas-phase chemical kinetics and acoustic fields in liquid rocket engines was studied through numerical methods. The arbitrary Lagrange Euler algorithm was applied to decouple the stiffness between flow and chemical source term. The chosen multistep global reaction mechanism could consider the pulse of the underlying quasi-steady-state components. Longitudinal acoustic waves were introduced into the chamber through mass-flow boundary disturbance. To analyze the magnitude of the thermo acoustic coupling effect, cold field of acoustic similarity model was established. The simulation results show that there was not obvious encouraging coupling between thermo system controlled by chemical kinetics and acoustic oscillation in acoustic fields of little amplitude. However, in the nonlinear acoustic fields of finite amplitude, encouraging thermo-acoustic coupling was gained with pressure and heat-release oscillation acting as 'abrupt change' and 'steep rise'. Amplitude of pressure oscillation in reaction flow was 300% stronger than that in its cold field of acoustic similarity. At last, the possible reason for the excitation was analyzed and the presumption of heat release bifurcation in gas-phase chemical kinetic systems was presented.

Key words: Thermo acoustic coupling; Chemical kinetics; Arbitrary Lagrange Euler algorithm; Cold field of acoustic similarity; Numerical simulation

\* 收稿日期: 2014-10-10; 修订日期: 2014-12-09。
 基金项目: 国家自然科学基金(51206185)。
 作者简介: 薛诚尤, 男, 硕士生, 研究领域为液体火箭发动机燃烧不稳定。E-mail: 946917637@qq.com

## 1 引 言

液体火箭发动机高频燃烧不稳定是一种热声耦 合现象<sup>[1]</sup>,可由 Rayleigh 准则进行描述,这一准则早 在19世纪就被发现且至今仍在燃烧不稳定研究领域 享有基础性地位。Rayleigh 准则本身是简单的,将其 置于液体火箭发动机具体的环境中却立刻变得捉摸 不清。液体火箭发动机内流场是一个复杂的物理化 学系统,其包含雾化、蒸发、湍流、燃烧等多个子过 程,其中哪些子过程可以作为燃烧不稳定的控制机 制至今未有定论。

为了研究释热与声场的耦合机理,有必要对燃烧当中的各子过程与声场的相互作用机制进行单独研究<sup>[2~4]</sup>。长期以来,特征时间较长的喷雾和蒸发过程一直是燃烧不稳定领域的重点研究对象<sup>[5,6]</sup>,两者在释热链中是热释放速率的决定性因素且与声学过程的固有频率相当。除此之外,近年来相关文献通过在仿真中采用LES或DES湍流模型捕捉瞬态湍流结构来研究湍流对燃烧不稳定的影响,其中比较有代表性的是普度大学Smith等的研究<sup>[7]</sup>,他们认为大尺度的涡撞击破碎引发的周期性释热脉动可能成为燃烧不稳定的驱动机制。

理论上说,液体火箭发动机内流场流动燃烧的 诸多子过程均是驱动燃烧不稳定的潜在因素,然而 热释放的最终途径化学动力学过程由于特征时间极 短而被长期忽视,特别是针对气相化学动力学与声 场耦合机理的仿真研究相对匮乏。在十分有限的研 究文献当中,均未对化学动力学释热过程进行充分 的孤立,因而难以得到较为明确的结论,仍存在一系 列重要的问题亟待被解答。鉴于此,本文构建了可 进行考虑了底层基元反应的多步总包化学动力学计 算的任意拉格朗日算法平台,并在此基础上研究了 气相化学反应与声学振荡的耦合机理,提出了冷流 声学相似场的分析模型,探讨了化学动力学过程作 为高频燃烧不稳定的控制因素的可能性。

## 2 数值方法与模型

## 2.1 数值算法

想要深入研究气相化学反应释热过程对燃烧不 稳定的作用机制,就必须要引入多步化学反应机理 模型。然而,多步化学反应的时间尺度远小于流场 的流动时间尺度,导致流动控制方程中的组分、能量 输运方程出现了刚性化学动力学源项。这种流动与 化学源项之间的刚性耦合可以通过运算分离算法消 除<sup>[8]</sup>。本文采用任意拉格朗日欧拉(ALE)运算分离 算法作为CFD核心算法,此算法将一个时间步长分 为A,B,C三个阶段进行计算。前两个阶段为拉格朗 日计算,不计算对流项,其中A阶段只进行化学动力 学源项的计算,B阶段采用类似SIMPLE算法的半隐 式迭代法求解压力-速度耦合场;最后C阶段为欧拉 计算,求解对流项<sup>[9]</sup>。

燃烧室内流场采用欧拉坐标系下的完全N-S方 程进行描述,N-S控制方程的通用形式参见文献 [10]。方程的空间离散为二阶精度,时间离散采用 一阶向前差分。

#### 2.2 物理模型

为了保证对化学动力学释热过程的孤立分析, 湍流模型采用标准 k-ε湍流模型。大涡模拟、分离涡 模拟等瞬态湍流模型可以捕捉到诸如漩涡脱落这种 强瞬态湍流结构,而这类瞬态结构可能和声学振荡 发生周期性耦合诱发不稳定从而影响仿真结果的分 析<sup>[7]</sup>,因而选取了雷诺时均的湍流模型。

化学动力学模型采用通用有限速率化学反应模型。湍流与燃烧的相互作用作如下处理:流动为燃 烧输运组分和参数,燃烧为流动提供组分源项和能 量源项。化学动力学方程组如下

$$\begin{cases} \frac{\mathrm{d}Y_k}{\mathrm{d}t} = \frac{W_k \dot{\omega}_k}{\rho} \\ \frac{\mathrm{d}T}{\mathrm{d}t} = -\frac{1}{\rho \bar{c}_p} \sum_{k=1}^{\kappa} h_k \dot{\omega}_k W_k \end{cases}$$
(1)

式中T表示单元温度, $Y_k$ 表示组分k的浓度, $\rho$ 表示单元密度, $\bar{c}_p$ 表示平均定压比热, $h_k$ 表示组分k比焓, $\dot{\omega}_k$ 表示组分k的摩尔生成率, $W_k$ 表示组分k的摩尔质量。

化学反应机理采用正十二烷多步总包机理,此 机理包含了34组分、31步的总包机理及底层的52组 分、217步的骨架机理,由正十二烷的详细反应机 理<sup>[11]</sup>通过直接关系图法(DRG)结合计算奇异值摄动 法(CSP)的机理简化方法获得,可以考虑底层基元反 应的准稳态(QSS)组分的浓度脉动。在求解QSS组 分浓度时采用LQSSA方法,解耦QSS组分间的非线 性耦合,并通过拓扑分析的结果使用高斯直接消除 法求解QSS浓度线性方程组<sup>[12]</sup>。采用刚性积分求解 器VODE解化学动力学方程组(1),并采用基于粒度 细化的动态负载平衡技术搭建MPI并行环境以提升 化学动力学计算效率<sup>[13]</sup>。

#### 2.3 仿真对象

选用文献[14]的缩比实验平台进行仿真研究,

选取其中编号为15D1的工况作为仿真工况,在实验 当中,此工况表现出了典型的纵向不稳定燃烧。缩 比燃烧室结构如图1所示。



Fig.1 Structure schematic diagram of the subscale combustion chamber

燃烧室头部为单喷嘴气液喷雾燃烧,中心为氧 化剂入口,氧化剂由比重为42%的氧气与58%的水 气构成,外侧环缝为煤油的旋流入口。实验当中的 重要参数及结果如表1所示。

Table 1	Important	parameters of	f the ex	periment
---------	-----------	---------------	----------	----------

Chamber length/cm	38.1
Chamber diameter/mm	46.5
Throat diameter/mm	20.8
Oxidizer entrance diameter/mm	20.5
Fuel entrance circular seam width/mm	0.889
Oxidizer flow rate/(g/s)	462
Fuel flow rate/(g/s)	74
Steady-state pressure of chamber/MPa	2.21

在仿真时并未考虑液相过程,采用气气喷注的 方式组织燃烧。气气喷注不同于气液喷注,会导致 仿真流场的温度分布与实验情形差异明显,这会影 响到燃烧室内释热与声学的时空交互作用从而可能 无法获得实验当中的不稳定现象。然而,本文的目 的并非复现实验现象,而是仅将此实验工况作为一 种基础工况,用气气燃烧取代气液燃烧从而排除了 液相的喷雾、蒸发等可能影响系统稳定性的因素,加 之*k-ε*湍流模型的使用,最终孤立了化学动力学过 程,使之成为燃烧释热的控制过程与决定系统稳定 性的最重要因素。

图 2 是本文所用的计算网格,网格数约为 11 万, 经网格独立性验证,此计算网格满足仿真要求。监 测点选在燃烧剧烈的上游区域。

入口边界采用质量流量边界,出口边界外推。 初始时刻高温氮气充斥整个计算区域以达到点火的 目的。



## 3 无声场激励下的仿真结果及分析

仿真计算过程中,为了减小分离误差的影响,仿 真时间步长选取为1.0×10<sup>-7</sup>s。



Fig. 3 Pressure variation of monitoring point

图 3 是监测点的压力变化曲线,仿真初始阶段监测点压力曲线振荡上升,在 3ms附近达到峰值后开始振荡下降,同时振荡幅值逐渐衰减。在 11ms后曲线 趋于平稳,最终的稳态压力约为 2.37MPa,与实验的 稳态数据相差较小(见表 1),但仿真工况表现出了线 性稳定性。系统表现出稳定性的原因在于系统当中 的声能激励因素(热声耦合效应)未能克服声能阻滞 因素(边界及粘性对声能的耗散),后者关系到燃烧 室的声学特性,本文的重点在于考察前者,即单纯的 化学动力学过程控制的释热能否与声波发生耦合互 激从而成为燃烧不稳定的潜在诱发机制。

为了分析化学动力学过程作为燃烧不稳定的激励因素的可能性,本文通过向燃烧室中引入声场来 考察气相化学反应与声学振荡的耦合机理。

#### 4 声场的激励方式

本文在稳态流场的基础上采用入口流量边界引

入脉动量的方法在燃烧室内激励声波<sup>[7]</sup>,这种方法比 较容易在边界设定扰动条件,且诱导效果明显,并对 算法的稳定性和收敛性影响较小。为激励纵向声 波,在氧化剂与燃料入口加入同频率、同相位的扰 动,入口流量表达式如下

$$\dot{m} = \dot{m}_{\text{mean}}(1+a)\sum_{i=1}^{n}\sin(2\pi f_i t)$$
 (2)

式中 m 为瞬时总质量流量, m<sub>mean</sub> 为平均质量流量, a 为扰动振幅, f<sub>i</sub> 为扰动频率。

#### 5 释热系统在有限幅值扰动激励下的响应

燃烧室在仿真工况下的一阶纵向振型约为 1300Hz,此声学振型在实验当中表现出了最不稳定 的性质,以此振频作为扰动信号的频率;流量扰动法 的最大幅值可达到稳态流量的100%,以此作为扰 动信号的振幅,考察此时燃烧室的压力振荡与释热 响应。

图 4 是燃烧室的压力与释热振荡曲线。压力曲 线在第四周期发生"突跃",在"突跃"后振荡逐渐增 大直至以较大幅值稳定振荡,在"突跃"后,压力与释 热每一周期的波动均存在陡峭前沿,这种陡峭前沿 波更接近于真实燃烧不稳定发生时所观测到的波 形<sup>[1]</sup>。释热曲线呈现出了高频小幅的振荡,这种振荡 应为基元反应中的瞬态组分脉动所引发。



Fig. 4 Pressure and heat-release oscillation

此外,由Rayleigh 准则可知:热声耦合发生正向 激励的必要条件是释热与压力的振荡保持相位一致 性。由于多步化学动力学系统在基元反应中存在着 链传递和压力敏感反应等机制,因而在声场波动影 响下的释热波动相较于声场波动发生了小幅相位偏 移,但基本保持了相位一致,这种同相性意味着单纯 由气相化学动力学控制的释热过程与声学过程存在 着能够发生耦合激励的基础。

为进一步明确化学动力学过程是否增强了声学

振荡,需要一个对比参照的系统,这个系统应该提供 声波的原始振荡强度,并且应保持除化学动力学过 程以外的最大程度的近似,以较好地剥离化学动力 学因素的影响从而方便对其单独研究。为此,本文 建立了冷流声学相似场的对比模型。

对应于反应流流场,在相同质量流量边界的基础上,考虑化学动力学的组分源项但不加入化学动力学能量源项从而建立冷流流场,两者最大的区别在于是否存在释热。为了使冷流的流场平均声速和平均压力与反应流相当,提升入口边界的初始温度。如此一来,两者的固有振型一致、质量流量和平均室压相同,唯一的区别在于反应流通过化学动力学释热获得温度而冷流相似场在入口处直接给定。这样,就可以量化释热过程对声学过程的激励效应的大小。

图 5 对比了相同振幅扰动下的反应流压力响应 和其冷流声学相似场的压力响应。冷流声学相似场 压力振荡的最终幅值与反应流突跃前的振荡幅值基 本一致,因此可以断定化学动力学的释热过程确实 增强了压力振荡。比较图 4 中的压力曲线和图 5(a) 可以发现,在反应流的振荡达到稳定后,较其冷流声 学相似场的振幅增强约 300%。多步化学动力学过



Fig. 5 Comparison of chamber pressure response under disturbance of 100% amplitude

0.0011

程与声学过程耦合发生了相互激励,而这种相互激励的产生可能与"突跃"和"陡峭前沿"有着密切的联系,也有可能与瞬态组分脉动所引发的高频释热脉动有关。

## 6 释热系统在小振幅扰动激励下的响应

取扰动幅值为0.5%,此小振幅下的声学过程基本是线性的<sup>[15]</sup>。图6对比了线性声场中的反应流场



(a) Pressure fluctuation of reaction flow

0.0012

0.0008

0.0004

0.0000

-0.0004

-0.0012

48

50

52

54

Time/ms
(c) Pressure fluctuation of cold flow

56

58

60

Relative amplitude pressure

与其冷流声学相似场的压力波动及频谱。反应流与 其冷流声学相似场对线性扰动的压力波动响应基本 一致,化学动力学释热过程未能与声学过程发生明 显的耦合激励。在线性扰动下,燃烧室的压力波形 更加趋近于标准的正弦波形,不再具有"突跃"及"陡 峭前沿峰"等非线性现象。

图 7 对比了线性与非线性扰动下的系统释热响 应。线性扰动下与非线性扰动下的释热曲线均存在



(d) Frequency spectrum of pressure fluctuation of cold flow





(a) Heat-release response in linear acoustic field

(b) Heat-release response in nonlinear acoustic field

Fig. 7 Comparison of heat-release response

着高频小幅振荡,然而线性扰动下并未发生明显的 热声耦合激励,因此,高频小幅的释热振荡并不是声 波放大的诱因。由于这种高频小幅的释热振荡能量 太低且频率太高导致了压力波无法对其进行充分的 响应,因而与高频脉动的释热曲线相对的压力曲线 十分光滑。

## 7 分析与讨论

在有限幅值扰动激励的非线性声场中,压力波 动"突跃"后发展成为具有陡峭前沿的压力振荡,化 学反应释热与声波发生了耦合激励;而在小幅值扰 动激励的线性声场中,化学反应释热与声波并未发 生明显互激。在两种情形下,两者的释热过程均是 以小幅高频脉动进行的,前者存在着后者所没有的 非线性现象,前者发生热声激励耦合而后者没有,因 此可以基本认为:化学动力学释热与声学过程的相 互激励作用来自于"突跃"和"陡峭前沿",瞬态组分 的高频脉动对声学过程并无影响。

在非线性声学振荡下的系统的释热响应之所以 会发生"突跃",可能与气相化学动力学控制的释热 系统自身蕴含的分岔特性的相关。化学动力学系统 存在着"点火延迟"、"可燃极限"等概念,这些概念当 中蕴含着发生释热分岔的可能性。

在化学动力学释热过程中,存在起链、链传递等 子过程,因此会出现以温度迅速跃升为标志的点火 点。图8给出了在混合比为1.0,初温1200K条件下, 环境压力分别为2MPa和4MPa时,简化机理在0-D 匀质反应器中的温度对时间的变化曲线。由图可 知,在不同压力下,温度曲线会出现平移,压力越高, 曲线向左平移幅度越大。以拉格朗日法的观点来 看,图中的时间轴近似代表了燃烧室中的空间位 置。如此一来,在竖直方向划一直线交不同环境压 力下的曲线于两个交点,则这两点代表了同一空间 位置在压力波动下的温度响应,而这种温度响应直 接反映了释热响应。若两个交点分别处于各自曲线 的未燃区和已燃区,则压力的波动就造成了燃烧室 中某处的燃烧行为发生了分岔。

图中两曲线所围成的近似矩形的区域为此压力 振荡下的释热响应敏感区域,压力越高曲线向右平 移越大,也就意味着敏感区域会随着压力波动的增 大而扩大;同时,在同一空间区域的释热波动也会 增大。

在非线性声场下出现了的"突跃",可能就源于 上游某区域由于压力的大幅振荡所导致的局部释热 分岔,这种分岔反过来激励了压力波的振荡,从而形成正反馈,出现了热声耦合激励的现象。之所以线性声场下热声效应不明显,其原因可能在于小波动线性条件下压力接近的两条曲线的敏感区域基本不存在从而无法发生剧烈的释热分岔。



Fig. 8 Temperature variation in different pressure conditions

#### 8 结 论

(1)气相化学动力学控制的释热系统与线性小振幅声波无法发生明显的耦合激励。

(2) 声学过程对化学动力学的高频小幅释热脉 动无响应。

(3)气相化学动力学控制的释热系统与非线性 有限振幅声波可以发生明显的耦合激励,发生耦合 激励后的压力振荡较冷流声学相似场振幅增大了约 300%。这一激励产生的原因可能是化学动力学释热 系统的释热分岔效应所致。

(4)气相化学动力学释热过程无法成为线性不稳定的控制因素,然而在燃烧室发生非线性振荡时(自激或外激),它可能会促进热声耦合的激励效应。

#### 参考文献:

- [1] David T Harrje, Frederick H Reardon. Liquid Propellant Rocket Combustion Instability [R]. NASA SP-194, 1972.
- Jean-Baptiste Carpentier, Francoise Baillot. Behavior of Cylindrical Liquid Jets Evolving in a Transverse Acoustic Filed [J]. *Physics of Fluids*, 2009, 21: 601-615.
- [3] Noah O R. Acoustic Excitation and Destruction of Liq-

uid Sheets [D]. Huntsville: The University of Alabama, 1999.

- [4] Kosuke Yamamoto. Characteristics of Streaming Caused by Local Heating in Standing Sound Waves [R]. AIAA 2007-5679.
- [5] Mark sliphorst. Combustion Instability Coupling Mechanisms between Acoustics and LO<sub>2</sub>/CH<sub>4</sub> Spray Flames
   [R]. AIAA 2011-327.
- [6] 聂万胜,庄逢辰.喷雾特性对液体火箭发动机燃烧稳 定性影响[J].推进技术,2000,21(3):56-59. (NIE Wan-sheng, ZHUANG Feng-chen. Effect of Spray Characteristic on the Liquid Rocket Combustion Stability [J]. Journal of Propulsion Technology, 2000, 21 (3):56-59.)
- [7] Randolph Jedediah Smith. Computational Investigations of High Frequency Acoustics and Instabilities in a Single- Element Rocket Combustor [D]. Indiana: Purdue University, 2010.
- [8] 何 博.凝胶液体火箭发动机喷雾液滴蒸发燃烧仿

真及实验研究[D]. 北京:装备学院, 2012.

- [9] Amsden. KIVA Code Manuals [R]. LA-11560-MS, 2010.
- [10] 王福军. 计算流体力学动力学分析[M]. 北京:清华 大学出版社, 2004.
- [11] 华晓筱,王静波,王全德,等.正十二烷高温燃烧机
   理的构建及模拟[J].物理化学学报,2011,27(12):
   2755-2761.
- Lu T, Law C K. Systematic Approach to Obtain Analytic Solutions of Quasi Steady State Species in Reduced Mechanisms [J]. Journal of Physical Chemistry A, 2006, 110: 13202-13208.
- [13] 亓雪冬,李 霞,梁 鸿. 计算网格中动态负载平衡策略研究[J]. 微电子学与计算机, 2009, 5: 21-24.
- [14] Kevin Miller. Combustion Instability with a Single-Element Swirl Injector[J]. Journal of Propulsion and Power, 2007, 23(5): 1102-1112.
- [15] 钱祖文.非线性声学[M].北京:科学出版社,2009. (编辑:史亚红)