

文章编号: 1000-8055(2009)12-2655-06

详细反应机理的航空发动机二维燃烧流场计算

侯宽新¹, 刘 勇², 赵坚行²

(1. 中国民航飞行学院 广汉分院, 广汉 618307;

2. 南京航空航天大学 能源与动力学院, 南京 210016)

摘 要: 对某航空发动机主燃烧室简化模型进行了基于正庚烷($n-C_7H_{16}$)详细反应机理的燃烧流场数值模拟. 在二维贴体坐标系下, 计算过程采用了 $k-\epsilon$ 双方程模型来预估湍流特性, 用 EDC(eddy dissipation concept)湍流燃烧模型预估反应速率, 用 PSR(perfectly stirred reactor)模型的方法处理复杂化学反应项, 得出了基于详细反应机理的温度场、组分浓度场, 验证了机理文件中反应的某些组分与特定自由基之间的关系, 对比了总包反应 EBU-SRK(eddy break up simplified reaction kinetics)的温度场, 结果基本相符.

关 键 词: 化学反应模型; 详细反应机理; EDC(eddy dissipation concept) 模型;

PSR(perfectly stirred reactor) 模型; 正庚烷; 数值分析

中图分类号: V231.2

文献标识码: A

Two-dimensional numerical simulation of reactive flow in aero-engine combustor with detailed chemical kinetic mechanisms

HOU Kuangxin¹, LIU Yong², ZHAO Jianxing²

(1. Guanghan Flight College,

Civil Aviation Flight University of China, Guanghan 618307, China;

2. College of Energy and Power Engineering,

Nanjing University of Aeronautics and Astronautics, Nanjing 210016, China)

Abstract: The paper presented a numerical simulation of turbulent flow in a reduced aero-engine combustor model with the detailed chemical kinetic mechanisms of $n-C_7H_{16}$. Under the two-dimensional body-fitted grid, the turbulent characteristics were estimated by $k-\epsilon$ equations, the reacting rate was estimated by eddy dissipation concept (EDC) model. In the paper the reacting model was perfectly stirred reactor (PSR), the concentrations of the major components and thermal flow results were gotten, and the relationship between some certain components validated the feasibility. The results of the EDC model basically agree with the one-step reactions with EBU-SRK (eddy break up simplified reaction kinetics) model.

Key words: chemical reaction model; detailed chemical kinetic mechanisms;

EDC (eddy dissipation concept) model; PSR (perfectly stirred reactor) model;

n -heptane; numerical analysis

随着航空业的迅速发展, 燃烧温度和强度在大幅提高, 计算高温反应时精确性要求相应变高; 另外积碳现象, 燃烧中间组分对火焰结构及火焰

稳定性的影响, 燃烧污染物形成机理等等都迫切需要对目前的燃烧数值模拟方法中应用详细反应机理. 因此深入研究详细反应机理在航空发动机

收稿日期: 2008-12-03; 修订日期: 2009-01-09

作者简介: 侯宽新(1979-), 男, 安徽淮南人, 助理工程师, 硕士, 主要从事燃烧流场数值计算.

燃烧流场计算中的应用是具有重要意义的,也是未来燃烧计算的发展方向之一。

航空煤油组分复杂且牌号众多,对其详细反应机理的研究还不多见,且尚未发现有成熟可用的机理文件。在2005年的第20届ICDERS(International Colloquium on the Dynamics of Explosions and Reactive Systems)会议中,Dean A J等人研究指出航空煤油(Jet A)目前已经分析出来的组分只有50%,但也有167种之多。2007年第21届ICDERS会议中,Strelkova M I等人提出对航空煤油(Jet A)的研究的一种简化方案是:9.1% hexane(C_6H_{14}) + 18.2% benzene(C_6H_6) + 72.7% decane($C_{10}H_{24}$) (以上比例为质量分数),但这些组分的详细反应机理尚未成熟,暂无法应用。

而正庚烷由于十六烷值与柴油($C_{13}H_{23}$)相当,所以是柴油的相似燃料,其反应机理常用于车用活塞发动机燃烧计算研究中,比较成熟,目前应用良好。正庚烷与我国航空器目前普遍采用的3号航空煤油从热值来看,航空煤油(3#)与正庚烷的单位体积热量比为1.06~1.13,两者基本相当,用正庚烷来初步模拟航空煤油的温度场是可行的。本文应用单一燃料成分的反应机理文件,探索出一种基于详细反应机理的航空发动机燃烧流场计算的方法,以便于在航空煤油的详细反应机理研究成熟之后可以快速开展起来。

1 气相控制方程及离散后的混合差分格式

二维任意曲线坐标系下的控制方程的通用形式可表示为

$$J \frac{\partial}{\partial t} (\rho \Phi) + \frac{\partial}{\partial \xi} (\rho U \Phi) + \frac{\partial}{\partial \eta} (\rho V \Phi) = \frac{\partial}{\partial \xi} \left[\frac{\Gamma_\Phi}{rJ} (\alpha \Phi_\xi - \beta \Phi_\eta) \right] + \frac{\partial}{\partial \eta} \left[\frac{\Gamma_\Phi}{rJ} (-\beta \Phi_\xi + \gamma \Phi_\eta) \right] + rJ S_\Phi \quad (1)$$

其中

$$\alpha = x_\eta^2 + y_\eta^2; \quad \beta = x_\xi x_\eta + y_\xi y_\eta; \\ \gamma = x_\xi^2 + y_\xi^2; \quad J = x_\xi y_\eta - x_\eta y_\xi.$$

Φ 分别代表速度分量 u, v, w , 湍流动能 k , 湍流耗散率 ε , 焓 H , 修正压力 p' 和组分 y_m 等变量; U 和 V 分别为直角坐标下流速 u 和 v 的逆变分量,仅在对流项中出现; Γ_Φ 为扩散系数; S_Φ 为源项。当 Φ 表示某一特定量时, Γ_Φ 和 S_Φ 对此特定量有特

定的意义和表达式,详细内容见文献[1]中相关内容。

本文在交错网格下,采用混合差分,全隐式格式对方程(1)进行离散^[1]

$$a_p \Phi_p = a_e \Phi_e + a_w \Phi_w + a_n \Phi_n + a_s \Phi_s + b \quad (2)$$

其中

$$a_e = \left[\frac{1}{2} |C_e|, D_e \right] - \frac{1}{2} C_e;$$

$$a_w = \left[\frac{1}{2} |C_w|, D_w \right] - \frac{1}{2} C_w;$$

$$a_n = \left[\frac{1}{2} |C_n|, D_n \right] - \frac{1}{2} C_n;$$

$$a_s = \left[\frac{1}{2} |C_s|, D_s \right] - \frac{1}{2} C_s;$$

$$a_p^0 = \frac{\Phi_p^0}{J \Delta t}; \quad b = S_c + a_p^0 \Phi_p^0;$$

$$a_p = a_e + a_w + a_n + a_s + a_p^0 - S_p;$$

$$C_e = (\rho U)_e; \quad C_w = (\rho U)_w;$$

$$C_n = (\rho V)_n; \quad C_s = (\rho V)_s;$$

$$D_e = \left(\frac{\Gamma_\Phi \alpha}{J} \right)_e; \quad D_w = \left(\frac{\Gamma_\Phi \alpha}{J} \right)_w;$$

$$D_n = \left(\frac{\Gamma_\Phi \alpha}{J} \right)_n; \quad D_s = \left(\frac{\Gamma_\Phi \alpha}{J} \right)_s.$$

2 二维贴体网格及初边值条件

考虑到复杂反应的计算量太大,目前使用的网格数为 35×30 ,见图1。本文研究的航空发动机燃烧室尺寸为 $120\text{mm} \times 50\text{mm}$,燃烧类型采用预混湍流燃烧,旋流器入口处余气系数设定为 $\alpha = 1.33$,压强 $p = 2\text{MPa}$,入口速度 $U = 24\text{m/s}$, $V = -5.6\text{m/s}$,总温 $T = 757\text{K}$ 。用壁面函数^[2]计算近壁区流动,而与之参照的EBU-SRK(eddy break up simplified reaction kinetics)模型的燃料为航空煤油其平均分子式为 $C_{12}H_{24}$ 。

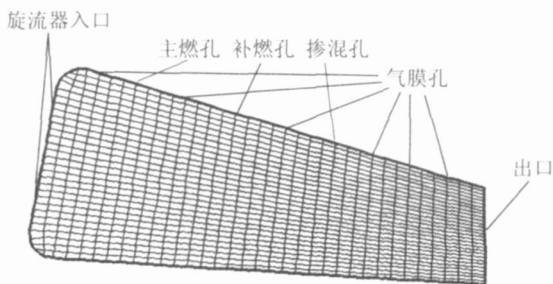


图1 燃烧室网格图

Fig. 1 Grid of combustor

3 EDC-DRK(eddy dissipation concept-detailed reaction kinetics) 模型

EDC 模型是 1981 年和 1989 年由 Magnussen 提出的涡团耗散概念模型^[1,3]。该模型出发点是化学反应由两个区组成: 一, 是在湍流微细结构(fine structures)中分子间很容易碰撞, 发生化学反应, 此时化学反应受化学动力控制; 二, 是在微细结构的周围较大涡团区域内, 含有不同成分的涡团必须混合后才能进行化学反应, 混合所需时间比化学反应时间长, 因此受混合速率控制。

在 EDC 模型中湍流微细结构质量分数为 γ^* , 其大小可按下式计算^[4]:

$$\gamma^* = 9.67 \left(\frac{\nu \epsilon}{k} \right)^{3/4} \tag{3}$$

其中 ν 为运动黏度; k 为湍流动能; ϵ 为湍流耗散率。

对于那些反应较快的化学反应^[5]

$$\gamma^* = 2.13 \left(\frac{\nu \epsilon}{k^2} \right)^{1/4} \tag{4}$$

而微细结构的特征时间尺度是用来描述混合所需的时间, 其大小可按下式计算^[1]:

$$\tau^* = 0.41 \left(\frac{\nu}{\epsilon} \right)^{1/2} \tag{5}$$

在微细结构中组分质量和焓的控制方程为^[1]

$$\frac{dy_m^*}{dt} = \frac{y_m - y_m^*}{(1 - \gamma^*)\tau^*} + \frac{\omega_m^* M_m}{\rho^*} \tag{6}$$

$(m = 1, \dots, N_s)$

$$\frac{dH^*}{dt} = \frac{\sum_{m=1}^{N_s} (y_m h_m - y_m^* h_m^*)}{(1 - \gamma^*)\tau^*} + \dot{q}_{rad}^* \tag{7}$$

其中 y_m^* 为微细结构中 m 组分的质量分数, y_m 为整个控制体中 m 组分的质量分数, ω_m^* 为微细结构中 m 组分的净生成率 ($\text{mol}/(\text{m}^3 \cdot \text{s})$), M_m 为 m 组

分的摩尔质量, 其中 y_m^* 的计算由 PSR(perfectly stirred reactor) 模型^[6] 的求解。组分 m 的湍流化学反应速率的计算方法为^[4]

$$R_m = \left(\frac{\gamma^*}{1 - \gamma^*} \right) \tau^* (y_m^* - y_m) \tag{8}$$

在 EDC 模型中, 每个单元体可以认为是一个部分充分搅拌的反应器, 其反应特征时间为 τ , 其单元体积为 $V_{\text{单元}}$, 进口温度为本计算单元温度 T , 根据体积和特征时间可以获得质量流率 m ; 根据组分守恒式(6)和能量平衡式(7), 采用牛顿迭代和时间积分方法可以求解最终的组分 y_m^* 和温度 T^* 。微细结构中化学反应速率在 Chemkin 4.0 帮助文件(Chemkin_Theory.pdf)中如下式:

$$\omega_m = \sum_{i=1}^I (v''_{mi} - v'_{mi}) \left(k_{ti} \prod_{m=1}^M [X_m]^{v'_{mi}} - k_{ri} \prod_{m=1}^M [X_m]^{v''_{mi}} \right) \tag{9}$$

式中 k_{fi} 和 k_{ri} 分别为第 i 个反应的正向和逆向反应系数, $[X_m]$ 为第 m 类组分的物质的量浓度。 k_{fi} 和 k_{ri} 由 Arrhenius 公式计算

$$k_i = A_i T^{\beta_i} \exp \left(- \frac{E_i}{RT} \right) \tag{10}$$

其中 A_i , β_i 和 E_i 分别为第 i 个反应的指前因子、温度指数和活化能。对应于每一个基元反应的 A_i , β 和 E_i 值可以从机理解析后的连接文件中直接获取。

4 详细反应机理文件说明

本机理是 Curran H J, Seiser H, Pitsch H, Seshadri K 和 Pitz W J 等人于 2004 年 5 月 19 日发布的, 包含了 544 个组分和 2446 个基元反应。该机理文件可在 http://www-cmls.llnl.gov/?url=science_and_technology-chemistry-combustion-nc7h16 网址处下载。其详细反应原理说明见参考文献[7], 主要反应过程如图 2 所示。

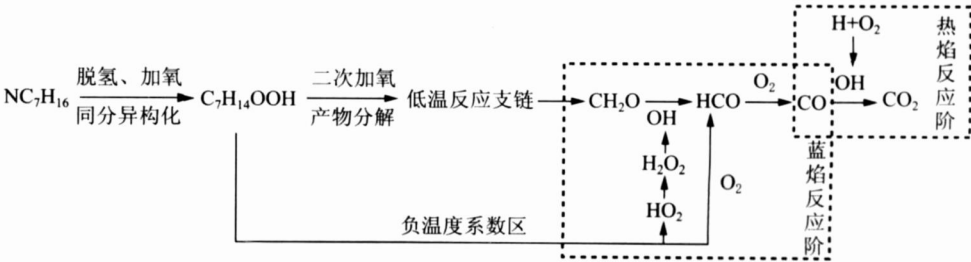


图 2 正庚烷详细反应机理的流程简图

Fig. 2 Scheme of n heptane oxidation reactions

5 计算方法及程序流程

问题的求解必须包括以下模块: 机理文件的解析得到连接文件, 基本程序框架提供各种流场参数, 调用 Chemkin 子程序库处理组分流场参数, PSR 模块处理 Δt 时间之后微细结构中各种组分质量分数的变化. 其中常用的 Chemkin 子程序库中 API 函数有: CKLEN, CKINIT, CKINDX, CKSYMS, CKCPBS, CKHBMS, CKRHOY, CKWYP 等等. 具体机理文件解析及函数使用方法见 Chemkin 4.0 帮助文件 (Chemkin_API.pdf). 本文计算流程简图如图 3 所示.

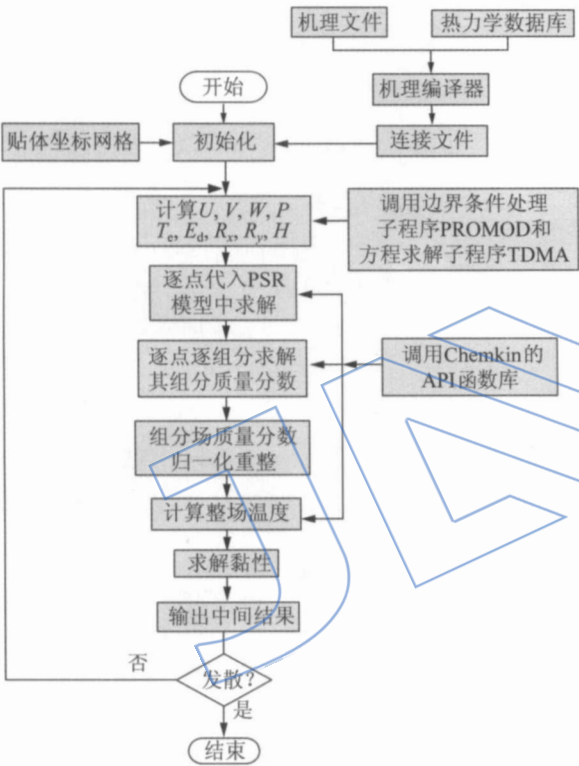


图 3 计算流程简图

Fig. 3 Scheme of the program

6 计算结果及分析

图 4 与图 5 是单步反应与复杂反应计算所得温度场结果的对比, 其整体温度场分布相似并分布比较合理, 前者得到的中后段中心区温度 1850K 左右, 而后者得到的 1750K 左右, 由于单步反应认为燃烧热会完全释放且航空煤油的热值高于正庚烷, 因而温度比后者偏高是合理的. 另外, 基于复杂反应计算的温度场在稳定火焰的回流区内出现了一定的温度梯度, 而 EBU-SRK 模

型计算的温度场中的温度分布比较均一. 由于是预混燃烧, 所以剧烈的放热区域在旋流器的出口附近, 而回流区内的能量来自于反应区炽热气体对周围气体的热传导、热对流以及热辐射, 所以周围气体应低于火焰中心温度. 本文计算的是非稳态结果, 所以在火焰的发展阶段图 4 和图 5 的计算结果基本符合实际燃烧情况.

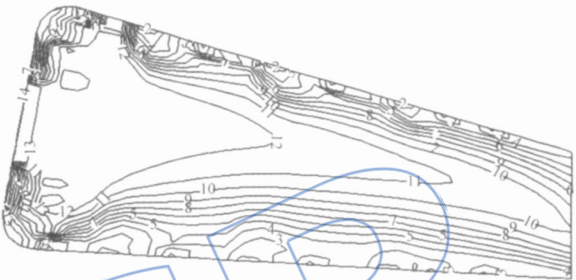
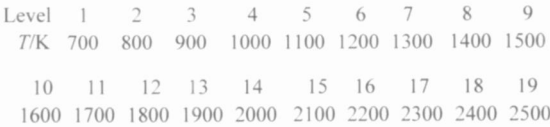


图 4 EBU-SRK 模型温度等值线

Fig. 4 Isothermal chart with EBU-SRK model

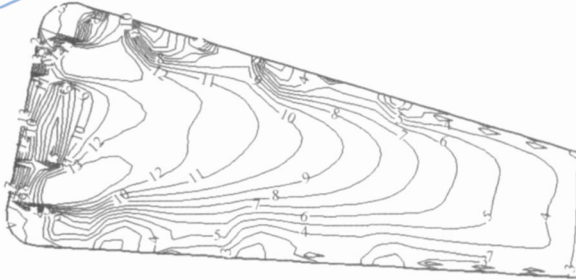
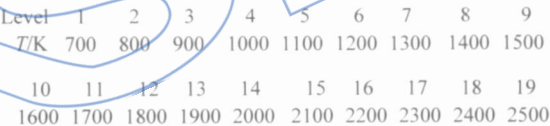


图 5 EDC-DRK 模型 $t=12\text{ ms}$ 时温度等值线

Fig. 5 Isothermal chart with EDC-DRK model

($t=12\text{ ms}$)

由于 EBU-SRK 模型中没有详细中间组分计算, 图 6~ 图 9 均为 EDC-DRK 模型 $t=12\text{ ms}$ 时的质量分数等值线图. 此时的流场、温度场和组分场等已基本建立且计算累积误差没有扩大. 由于无法用实验手段获得真实流场的组分分布, 下面根据详细反应机理所揭示的反应过程, 以及反应方程分析本算法的可行性.

从图 6 和图 7 我们可以分析出以下特点:

1) CO 和 OH 均仅存在于反应区. OH 是传播整个链式反应的重要活性物质, 它的生成与消

耗都是在自由基池中进行, 在高温反应区内迅速生成也迅速消失. 而 CO 是蓝焰反应的主要产物.

2) 图 6 中 CO 的分布也与图 2 中热焰反应阶段吻合很好. 另外 CO 的形成区域是在 OH 自由基存在区域的内部, 这映证了 OH 自由基存在于蓝焰与热焰反应两个阶段而 CO 只是蓝焰反应阶段的产物.

3) 在外环主燃孔 ($I=8, 9$) 附近 OH 自由基明显增加. 随着反应的进行, 自由基池中产生了 H, 而主燃孔处补入了大量的 O_2 , 在足够的温度下, 反应 $H + O_2 \rightarrow OH$ 得以进行. 在热焰反应阶段 CO 氧化成 CO_2 最重要的基元反应是 $CO + OH \rightarrow CO_2 + H$, 所以 OH 是促使 CO 氧化最重要的自由基. 因此图 6 中 CO 并没有向外环主燃孔扩散.

根据反应原理, 蓝焰反应阶段的 OH 主要来源于 H_2O_2 , 基元反应 $H_2O_2 (+M) = OH + OH (+M)$ 的活化能较高, 并且是吸热反应, 因而温度较低的反应条件下反应不易进行, 所以在混气浓度较稀或燃烧反应温度较低的反应条件下不能生成 OH. 因此可以看出在图 8 中 H_2O_2 的存在区域比 OH 存在区域大. H_2O_2 的生成也需要 O_2 , 因此 H_2O_2 也向外环主燃孔处扩散.

图 9 是主燃孔截面上的 OH/CO 质量分数与温度 T 之间的关系图. 可以看出以下几个特点:

1) OH 质量分数要比 CO 高很多, 这是由于燃烧室的温度很高, CO 很快被 OH 进一步氧化, 而高温正好利于 OH 的生成.

2) CO 的质量分数随温度升高的增加值远没有 OH 变化明显, 也说明了 OH 的生存依赖于高温条件.

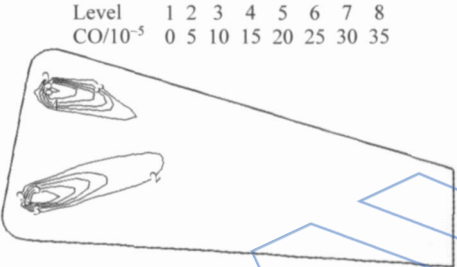


图 6 CO 组分分布
Fig. 6 Distribution chart of CO

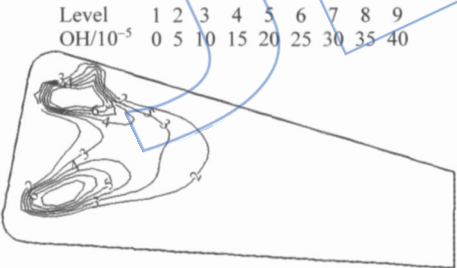


图 7 OH 组分分布
Fig. 7 Distribution chart of OH

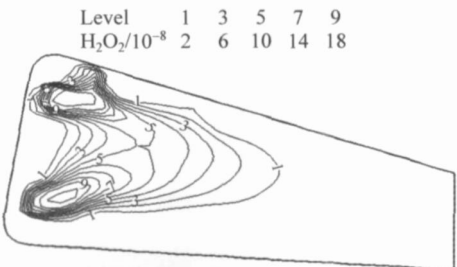


图 8 H_2O_2 组分分布
Fig. 8 Distribution chart of H_2O_2

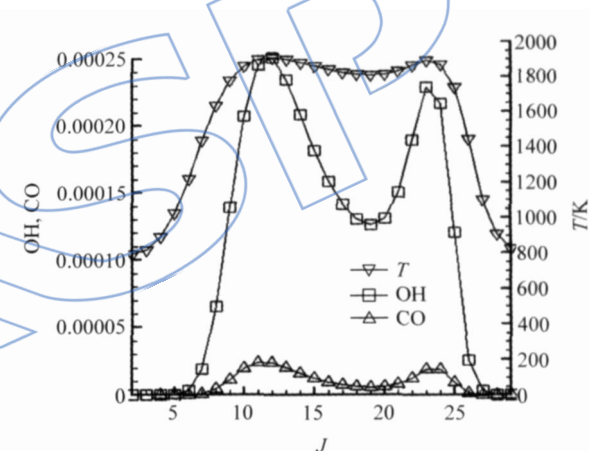


图 9 $I=8$ 截面温度 T 对 OH/CO 组分的影响
Fig. 9 Effect of temperature on OH/CO ($I=8$)

7 总 结

本文利用 EDC 模型及 Chemkin 程序包中 PSR 模块处理基于详细反应机理下的湍流燃烧流场的数值仿真, 计算结果温度分布与 EBU-SRK 方法相近. 通过详细反应机理可以获得很多中间组分的质量分数分布, 这些中间组分与机理文件提示的反应过程一致, 证明了本方法的可行性与可靠性, 为基于详细反应机理的燃烧数值模拟计算提供了一条较为快速可靠的方法. 并且从相关文献中可知烃类燃料的燃烧机理中很多相同反应过程, 基于正庚烷的计算结果对基于航空煤油的计算也有一定的参考价值.

参考文献:

[1] 赵坚行. 燃烧的数值模拟[M]. 北京: 科学出版社, 2002

[2] Launder B E, Spalding D B. The numerical computation of turbulent flows[J]. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 1974, 3(2): 269-289

[3] Ertesvag I S, Magnussen B F. The eddy dissipation turbulence energy cascade model[J]. Combustion Science and Technology, 2000, 159(1): 213-235

[4] Stefanidis G D, Merci B, Heynderickx G J, et al. CFD simulations of steam cracking furnaces using detailed combustion mechanisms[J]. Computers and Chemical Engineering, 2006, 30(4): 635-649.

[5] Ogink R, Golovitchev V. Gasoline HCCI modeling: an engine cycle simulation code with a multi zone combustion model [R]. SAE Paper 2002-01-1745

[6] Glarborg P, Kee R J, Grcar J F, et al. PSR: a fortran program for modeling well stirred reactors[R]. Sandia Report, 1986

[7] Curran H J, Gaffuri P, Pitz W J, et al. A comprehensive modeling study of n heptane oxidation[J]. Combustion and Flame, 1998, 114: 149-177.

