

乙烯简化化学动力学模型在 HIFiRE 燃烧室计算中的应用

肖保国, 赵慧勇, 杨顺华, 邢建文

(中国空气动力研究与发展中心 超高速空气动力研究所
高超声速冲压发动机技术重点实验室, 四川 绵阳 621000)

摘 要: 为评估化学反应动力学模型对超燃冲压发动机计算结果的影响, 首先利用基于“准稳态”假设方法建立了复杂化学反应动力学模型简化软件包 (SPARCK), 从详细模型出发得到了一个包含 20 组分 16 步总包反应的乙烯简化动力学模型。然后采用该简化模型和 Princeton 大学的简化模型对乙烯点火延迟时间进行了计算, 对比显示两个简化模型计算结果基本一致, 与实验测量结果均吻合较好, 都能准确反映乙烯点火特性。但对 HIFiRE 燃烧室直连式实验的数值模拟结果显示两个模型计算得到的燃烧流场静温分布差别较大, 内流道推力性能相差近 12%。相比于 Princeton 大学的简化模型, SPARCK 软件得到的简化模型计算的壁面压力分布与实验结果吻合更好, 能够准确描述燃烧室流场现象。

关 键 词: 乙烯; “准稳态”假设; 简化化学动力学; 燃烧室; HIFiRE

中图分类号: V211.3

文献标志码: A

Application of reduced chemical kinetic model for ethylene combustion in combustor calculation of HIFiRE

XIAO Bao-guo, ZHAO Hui-yong, YANG Shun-hua, XING Jian-wen

(Science and Technology on Scramjet Laboratory,
Hypersonic Aerodynamics Research Institute,

China Aerodynamics Research and Development Center, Mianyang Sichuan 621000, China)

Abstract: In order to assess the influence of chemical kinetic models on the computational results of scramjet, a software package for reduced chemical kinetics (SPARCK) was used based on quasi-stationary state approximation and specifically developed for chemical reaction kinetics reduction, and a reduced chemical kinetic model with 20 species and 16 global reactions was achieved by reducing the detailed chemical kinetic model for ethylene combustion. Then, the ignition delay time of ethylene was calculated with the reduced model and another reduced model generated by Princeton University. The computational results showed two reduced models almost had the same ignition delay time, and achieved a good agreement with experimental results. Both models can describe the ignition characteristic of ethylene. The Hypersonic International Flight Research Experimentation (HIFiRE) direct-connect test was numerically simulated using two reduced chemical kinetic models. The computational results showed two reduced chemical kinetic models had big difference in the static temperature of combustor, with nearly 12% relative error in the flowpath thrust. The reduced model, obtained by SPARCK, showed better agreement with experimental data for wall pressure distribution, as compared with the Princeton University model, and could simulate

收稿日期: 2013-03-26

基金项目: 国家自然科学基金 (51376193)

作者简介: 肖保国 (1980—), 男, 湖北红安人, 助理研究员, 博士, 主要从事超燃冲压发动机研究。

accurately combustion phenomena in scramjet combustor.

Key words: ethylene; quasi-stationary state approximation; reduced chemical kinetics; combustor; HiFire

超燃冲压发动机是未来吸气式高超声速飞行器主要动力之一,它的燃料主要是碳氢燃料,包括乙烯、煤油等.在超燃冲压发动机数值模拟中,需要将流体力学方程组与燃料的化学反应动力学模型耦合起来,数值求解超燃冲压发动机燃烧流场.

目前,碳氢燃料化学反应动力学模型研究主要有两大类型.一类是总包反应形式,例如,Westbrook等^[1-2]提出了2步反应,即碳氢燃料先与氧气作用生成一氧化碳和水蒸汽,然后一氧化碳进一步氧化为二氧化碳.Hautman等提出了碳氢化合物的4步反应模型^[3],认为复杂的碳氢化合物 C_nH_{2n+2} 先分解,脱氢变成简单的碳氢化合物乙烯和氢;第2步再由乙烯氧化生成一氧化碳和氢;第3步是一氧化碳氧化生成二氧化碳;最后一步是生成的氢再氧化为水蒸汽.文献^[4]用该模型来对双模态超燃冲压发动机燃烧室中的流场成功地进行了数值模拟.这类总包反应首先将碳氢燃料的反应速率写成Arrhenius形式,再根据实验手段测定的点火延迟时间来确定出其中的参数值.在这一研究方法中,化学反应模型简单,计算公式简洁,便于工程使用,但是总包模型对燃料点火性能的模拟过于简单,对化学反应的中间过程体现不足,其参数对不同实际工况的有效性尚不明确,需要开展针对性实验验证,而且这些总包反应模型往往难以得到,特别是对复杂的碳氢燃料.

另一类是详细基元反应模型,但是这类模型相对比较复杂,以乙烯燃烧为例^[5],描述其详细反应机理的化学动力学模型由99种组分,533个基元反应组成.如果采用详细基元反应模型耦合到流场计算中时会出现“刚性问题”和计算效率的问题^[6],难以满足工程需求.为了克服这两个困难,需要对详细化学反应动力学模型进行简化,减少组分数和基元反应数,得到简化化学动力学模型应用于数值模拟中^[7-8].这些简化方法大都基于特定反应条件(温度、压力),通过判断某一物质组分或基元反应对整个系统计算结果影响的大小,尽量删除不重要的物质组分和基元反应,以达到简化的目的.由于简化方法和目的不同,即使从同一个详细化学反应机理出发,也会得到不同的简化化学反应机理.在超燃冲压发动机燃烧流场计算时,不同的简化模型可能对燃烧室流场参数和超

燃冲压发动机性能参数的预测产生较大差别.邢建文等采用数值方法^[9],针对一个直连式超燃冲压发动机模型,比较了5种氢/空气化学反应机理对燃烧室壁面压强的影响.他的研究表明:不同的氢/空气反应机理对壁面压强分布影响很大,最大的差别甚至达到16%左右.但他并未比较不同化学反应机理计算的点火延迟时间以及对超燃冲压发动机流场和推力的影响.

描述乙烯燃烧的详细和简化反应机理有很多,主要有Konnov机理^[10]、San Diego机理以及USC机理^[11]和GRI-Mech机理等.西北工业大学的XU和瑞典Lund大学的Konnov对这些机理的点火延迟时间和层流燃烧火焰速度与实验结果进行了对比^[12],结果显示不同反应机理在某一温度范围和当量比范围内与部分实验结果一致,但没有一个机理能够全面反映所有温度和当量比范围内的实验结果.杨顺华^[13]比较了GRI-Mech机理、Mawid的3步简化模型^[4]、Mawid等的8步简化模型^[14]、Westbrook等的两阶段-准总包简化模型^[2]以及一个10步简化模型^[15]在1100~2000 K初始温度范围内点火延迟时间的差别,结果表明这些简化模型只能反映出乙烯在某一个温度范围的点火特性,没有一个模型能够在整个温度范围内准确描述乙烯的点火特性.

Law等^[16]回顾了目前燃烧模拟中的反应机理研究指出:由于碳氢燃料的中等反应机理含有几十种组分和上百个基元反应,与这么多组分和反应相关的时间尺度又有显著的区别,这导致计算的刚性.因此有必要在不丧失主要特性的基础上通过从详细反应机理中简化得到简化反应机理.

简化反应机理通过略去对主要关心参数(热释放、主要组分生成率)影响不大的组分和反应来得到.这些不重要的组分和反应可以通过敏感性分析、计算奇异摄动和“准稳态”假设等来判别.国外基于“准稳态”假设已经开发了自动生成简化反应机理的软件CARM(computer assisted reduction method)^[17],该软件对众多碳氢燃料详细反应机理进行了简化,在CFD研究中得到了广泛应用.本文基于目前超燃冲压发动机CFD研究的需要,以“准稳态”假设^[18]为基础自行编制了化学动

力学模型简化程序包 SPARCK^[6,13,19],从乙烯燃烧的详细化学反应动力学模型出发,建立了包含20个组分和16步总包反应的简化化学动力学模型,前期验证计算表明该简化模型能有效地再现详细基元反应模型的反应机理,有较高的计算精度^[20]。

为进一步验证 SPARCK 软件的准确性,为超燃冲压发动机煤油燃料详细机理的简化奠定基础,本文挑选美国空军研究实验室和澳大利亚国防科学技术组织联合开展的 Hypersonic International Flight Research Experimentation (HIFiRE) Flight2 (HF2)直连式超燃发动机模型来开展验证计算。这主要是因为 HF2 直连式超燃冲压发动机有公开的几何参数构型、完整的壁面压强实验数据和国外计算软件的结果^[21-24]。通过验证计算,能够对本文乙烯简化模型在实际发动机中的适用性进行充分比较,分析不同反应机理的对计算结果的影响,为发动机 CFD 研究提供参考。

HF2 直连式超燃冲压发动机采用体积分数为64%的乙烯和36%的甲烷的混合气体作为燃料来模拟煤油的燃烧,为评估 HF2 直连式超燃冲压发动机的流道在不同的飞行马赫数下的操作性和燃烧性能,同时研究燃料流量和计算参数(包括几何外形、湍流模型和湍流近壁处理等)对燃烧性能的影响,Storch 分别采用 CFD++ 和 VULCAN 进行了计算^[21]。

本文首先比较了乙烯燃料的两种化学反应机理对激波管点火延迟时间计算的差别;然后,针对 HF2 直连式超燃冲压发动机模型,开展了三维计算,进一步比较两种化学反应机理对 HF2 直连式超燃冲压发动机在壁面压强、流场、质量加权马赫数和推力上的影响,验证了本文简化软件和简化模型的准确性和适用性。

1 计算模型和计算方法

1.1 计算模型和网格

HF2 直连式超燃冲压发动机流道(参见图1)包括一个等截面的隔离段、两个对称的开式凹槽、8个喷嘴(分别为 P1 和 S1)和渐扩的燃烧室。燃料从 P1 和 S1 两列喷嘴中喷出,在燃烧室中采用火花塞进行点火。P1 喷嘴和 S1 喷嘴在上下壁面各有4个,P1 喷嘴的直径为3.175 mm,以15°角斜喷入燃烧室;S1 喷嘴的直径为2.3876 mm,以90°垂直喷入燃烧室。隔离段横截面高为25.4 mm,宽为101.6 mm。整个流道为矩形截面,宽度保持101.6 mm 不变。

由于发动机模型上下、左右对称,为节省计算量,根据 Cabell 等^[24]的计算经验,采用1/4大小的模型进行计算,中间截面采用对称边界。计算网格共计358万个结构网格单元。网格在壁面附近进行指数加密,壁面第一层网格大约为0.05 mm,对应的 y^+ 大约为20。

1.2 计算方法

本文三维数值计算采用中国空气动力研究与发展中心研制的 AHL3D 软件^[25-26]。该软件经过10多年在超燃冲压发动机计算中的应用,具有较高的可靠性。控制方程为多组分湍流 N-S 方程,时间推进采用 LU-SGS(lower-upper symmetric Gauss-Seidel)方法,无黏通量采用 AUSMPW+(advective upwind splitting method by pressure based weight functions)格式,湍流模型采用 SST(shear stress transport)模型,采用 WIND-US 软件的壁面函数^[27]。

Storch 的计算采用 Princeton 大学以“准稳态”假设为基础建立的乙烯简化化学动力学模型^[28]。以下为叙述方便,把 Princeton 大学的 19

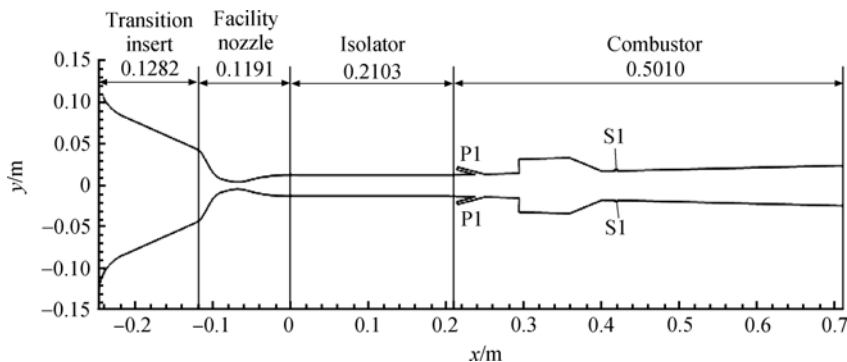


图1 HF2 发动机流道示意图

Fig. 1 HF2 flowpath schematic

组分乙烯简化动力学模型简称为 Mech 1, 把本文建立的 20 组分模型简称为 Mech 2. 两种化学反应机理相比, 它们都有 H_2 , H , O , O_2 , OH , H_2O , HO_2 , CH_3 , CH_4 , CO , CO_2 , CH_2O , CH_2CO , C_2H_2 , C_2H_4 和 N_2 共 16 种组分, 不同的是: Mech 1 有 H_2O_2 , C_2H_6 和 C_3H_6 共 3 种组分, Mech 2 有 CH , HCO , CH_3 和 C_2H 共 4 种组分, 具体参见文献[20, 28].

本文采用的两种化学反应机理都没有显式的 Arrhenius 公式, 需要采用额外的子程序来计算化学反应源项, 化学反应源项的 Jacobin 矩阵采用数值方法得到.

1.3 来流条件和边界条件

由于马赫数为 5.84 的实验结果和计算结果最全面, 本文主要针对该状态开展计算. 具体参数如下: 喷管出口马赫数为 2.51; 驻室总温为 1550 K, 总压为 1.48 MPa; P1 喷嘴当量比为 0.15, S1 喷嘴当量比为 0.50.

来流条件采用驻室条件, 壁面采用无滑移等温壁条件. 由于燃烧室出口是超声速出流, 采用外插边界条件.

2 计算结果

2.1 点火延迟时间分析

为了充分比较两个动力学模型的差别, 首先利用体积分数为 1% C_2H_4 + 1.5% O_2 + 97.5% N_2 的燃料混合物在激波管中的反应对比了点火延迟时间(定义为 CO_2 组分生成率最大时刻的时间间隔, 记为 τ_{CO_2})的差别. 图 2 给出了此工况下

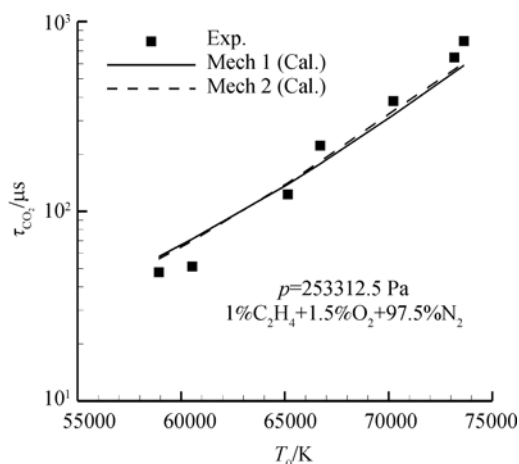


图 2 计算的点火延迟时间与实验结果的比较

Fig. 2 Comparison of calculated and experimental ignition delay time

两个简化模型的计算结果与实验测量结果^[29](记为 Exp.) 的比较. 从图 2 中结果来看, 计算结果与实验结果吻合较好. 表 1 中给出了具体数值的比较, 可以看出, 在初始温度高于 1535 K 时, Mech 1 模型点火速度略慢, 初始温度在 1350~1535 K 时, Mech 1 模型点火速度略快, 但两个简化模型计算结果最大相对误差(以 Mech 1 计算结果为基准)不超过 5%. 图 3 给出了初始温度 $T_0 = 1350$ K 时两个简化模型计算出的混合气体温度(T)随时间(t)变化历程比较. 可以看出, 虽然在反应后期混和气体温度基本一致, 但在反应初期, 相比于 Mech 1 模型, Mech 2 温度上升速度相对平缓, 两个模型温度上升(热量释放)过程存在差异. 从点火延迟时间结果来看, 两个简化模型的计算结果差别很小, 都能准确反映乙烯的点火特性.

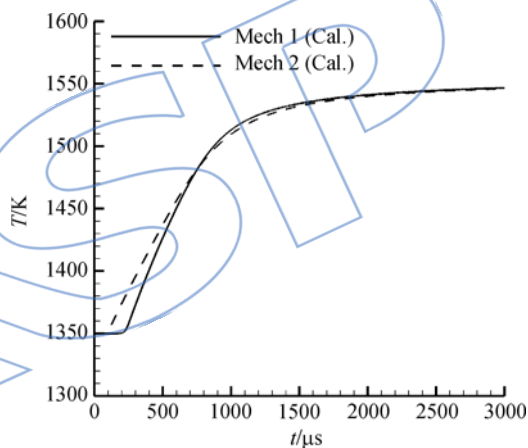


图 3 计算的混合气体温度历程比较($T_0 = 1350$ K)

Fig. 3 Comparison of calculated mixture temperature history ($T_0 = 1350$ K)

2.2 HF2 直连式超燃冲压发动机计算验证

在开展燃烧流场计算验证之前, 首先进行网格无关性验证. 在进行网格无关性验证时, 流向网格数保持不变, 考察不同法向壁面网格数(N_y)和不同横向网格数(N_z)对壁面压强和质量流量的影响. 其中横向网格数取 76 时, 法向网格数分别取 31, 41 和 51 三种分布; 横向网格数为 61 时, 法向网格数为 41. 为减少计算量, 此处仅对冷流流场进行验证. 从图 4、图 5 可以看出, 无论是壁面压强还是质量流量的分布, 计算结果都达到了网格无关性. 在以下的计算中, 法向壁面网格数取 41, 横向网格数取 76.

为考察本文计算所采用软件 AHL3D 的计算能力及相应边界条件设置的合理性, 首先采用 19 组分(Mech 1)化学反应机理对燃烧流场进行了

表 1 计算点火延迟时间与实验结果的比较

Table 1 Comparison of calculated and experimental ignition delay time

T_0/K	$10^4/T_0$	点火延迟时间/ μs			相对误差/%
		实验值	Mech 1 计算值	Mech 2 计算值	
1697.10	5.8924	47.642	57.72	56.15	2.72
1651.85	6.0538	51.063	71.36	69.75	2.26
1535.10	6.5142	122.980	138.67	140.77	1.51
1499.04	6.6709	221.840	177.94	183.24	2.98
1424.05	7.0222	380.320	321.98	337.67	4.87
1366.77	7.3165	645.680	540.98	558.27	3.20
1357.97	7.3639	788.640	587.90	603.99	2.74

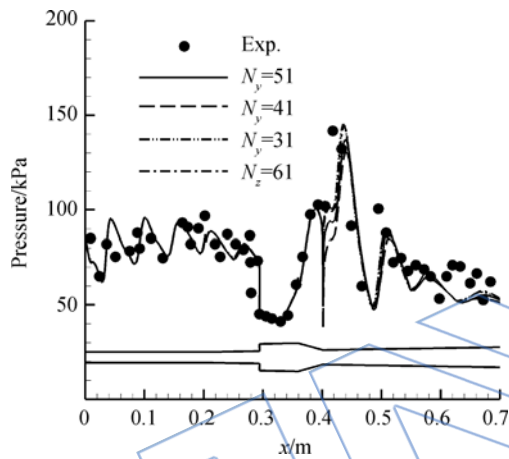


图 4 壁面压强的网格收敛性

Fig. 4 Grid convergence of wall pressure

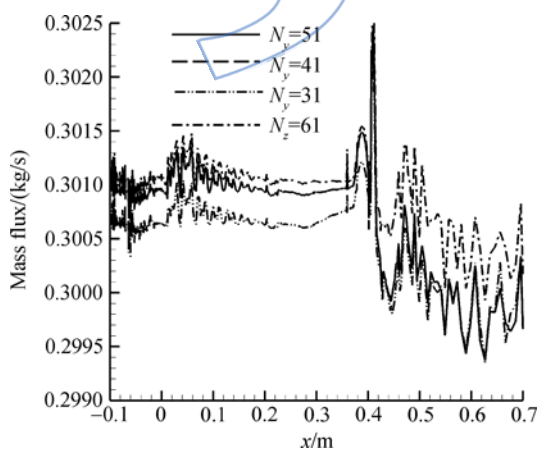


图 5 质量流量的网格收敛性

Fig. 5 Grid convergence of mass flux

计算. 图 6 给出了计算得到的壁面压强分布与文献结果(以 VULCAN 表示)和实验结果的对比, 可以看出在隔离段入口往后, 压强首先出现了明显的激波串结构, 然后在主喷嘴 P1 前升高, 这说

明在第 1 组喷嘴前出现了明显的燃烧诱导分离区. 随后压强逐渐上升, 在凹槽位置出现了一个台阶, 这是由于凹槽长深比为 3.8, 凹槽流动是典型的开式凹槽流动. 在凹槽后缘, 由于后缘出现了压缩波, 导致压强进一步上升, 在凹槽后面由于流道扩张, 导致压强下降. 在辅助喷嘴 S1 位置, 由于喷流压强较高, 压强又出现了一个峰值, 之后压强逐渐下降. 与实验结果相比, 计算结果除了在 P1 喷嘴附近稍偏高一些, 其余地方均与实验吻合较好. 与文献结果相比, 凹槽前两者压力有明显差别. 但是计算结果正确模拟了 P1 喷嘴前的压强波动和压强爬升位置, 而文献却没有模拟出来. 需要注意的是, 在 P1 喷嘴附近, 计算结果比文献偏高一些. 总的来看, 计算结果与文献大致相当, 说明本文所采用软件及数值方法可用来模拟 HF2 直连式超燃发动机燃烧流场.

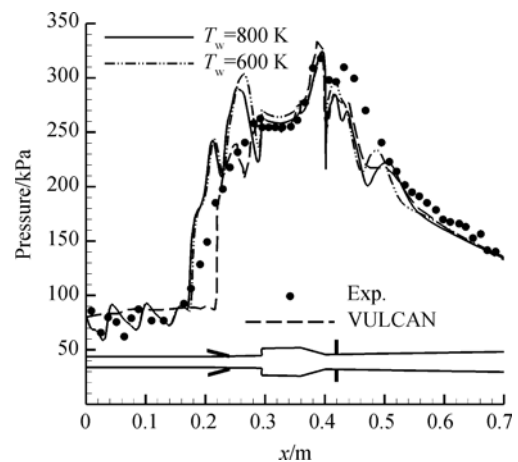


图 6 壁面温度对壁面压强分布的影响

Fig. 6 Effect of wall temperature on wall pressure distribution

图7给出的是不同壁面温度条件下质量流量分布,可以看出,壁面温度从600 K增加到800 K,质量流量分布几乎没有变化.另外,从图6还可以看出,壁面温度从600 K增加到800 K,壁面压强分布也几乎没有变化.因此在下文计算中,壁面温度均设为600 K.

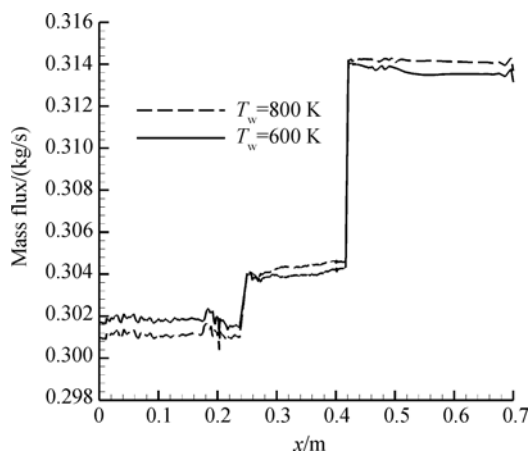


图7 壁面温度对质量流量的影响

Fig.7 Effect of wall temperature on mass flux

2.3 不同反应机理对 HF2 直连式超燃冲压发动机计算的影响

图8~图9给出的是不同化学反应机理对应的壁面压强分布和一维质量加权马赫数分布.可以看出两种反应机理预测结果在凹槽前差别比较大,主要表现为: Mech 1 反应机理预测壁面压强比 Mech 2 明显偏高, Mech 1 预测压强升高位置比较准确,但压强升高速度较快,明显高于实验结果.在第1组喷嘴 P1 前面 ($x=0.18\sim0.23$ m),实

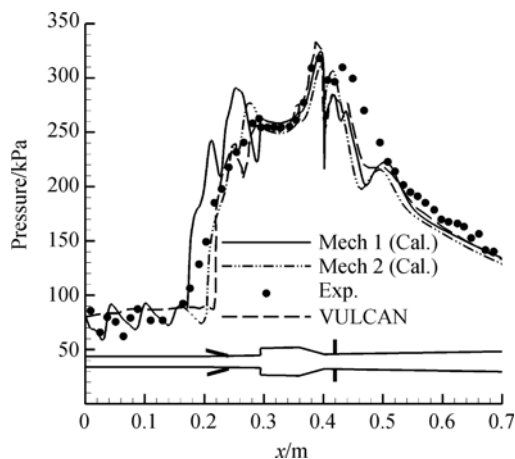


图8 化学反应机理对壁面压强分布的影响

Fig.8 Effect of chemical reaction mechanism on wall pressure distribution

验值介于两者之间. Mech 1 预测结果比实验值高40%左右, Mech 2 比实验值低35%左右. Mech 1 预测的壁面压强出现了两个峰值,而 Mech 2 和 VULCAN 的壁面压强都只有一个峰值.在 P1 后面 ($0.23\sim0.28$ m 之间), Mech 1 预测压强值比实验最大高25%左右,而 Mech 2 比实验值最大高9%左右.在第2组喷嘴 S1 前 ($x=0.38\sim0.40$ m), Mech 1 预测值比实验偏高1.5%左右, Mech 2 比实验值偏低2.5%左右,但是在 S1 喷嘴后 ($x=0.42$ m 附近), Mech 1 预测壁面压强比实验值低5%左右, Mech 2 比实验值高2%左右. Mech 2 预测的壁面压强分布与 VULCAN 更接近一些.由于在 P1 喷嘴附近, Mech 1 反应机理预测的壁面压强明显比实验值偏高,而 Mech 2 更接近实验,其他地方两种机理的差距都比较小,在5%以内.因此认为总体上 Mech 2 预测的壁面压强分布比 Mech 1 更准确.

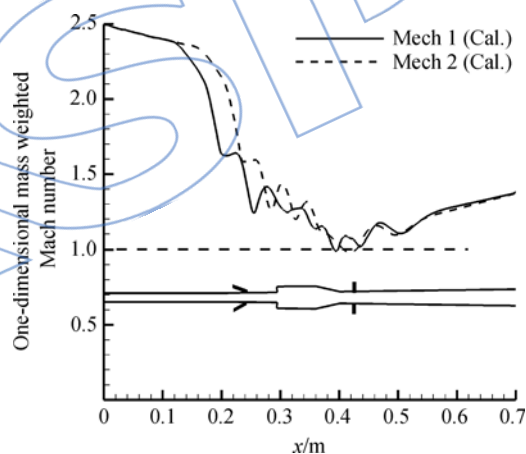


图9 化学反应机理对一维质量加权马赫数的影响

Fig.9 Effect of chemical reaction mechanism on one-dimensional mass weighted Mach number distribution

从前文表1和图3的分析来看,燃料从 P1 喷嘴进入燃烧室后, Mech 1 模型释放热量速度较快,大量的能量被释放,压力迅速升高,压力上升到一定程度后,导致燃烧室入口边界层发生分离,这时压力就沿着边界层向上游传播一定距离.从凹槽开始,两种化学反应机理的压强差别不大.与文献中 VULCAN 计算软件的结果相比, Mech 1 比 VULCAN 偏高,而 Mech 2 与 VULCAN 几乎相同.因此从与实验和文献结果对比来看, Mech 2 模型预测的结果要优于 Mech 1 模型.

超燃冲压发动机的燃烧模态可以分为超燃、双燃和亚燃模态3类. Eklund 等^[4]认为对于 HF2

项目,超燃模态的判定需要两个假设:在主喷嘴 P1 前没有明显的压强升高,同时沿整个流道的一维马赫数分布都大于 1。从图 8~图 9 可以看出,由于 Mech 1, Mech 2 和 VULCAN 的壁面压强计算结果都不满足第 1 条假设,但沿整个流道的一维质量加权马赫数分布绝大部分都大于 1,因此流场可以判定为双模态。

从图 9 可以看出,化学反应机理对一维质量加权马赫数的影响与压强分布相似,在凹槽前因为 Mech 1 模型大量热量被迅速释放,导致流场一维质量加权马赫数急剧减小。从图 10 可以看出, Mech 1 和 Mech 2 预测的温度分布比较类似,在横截面上,都是在对称面温度高,靠近壁面 Mech 1 预测的温度较高;沿流向来看,温度逐渐增加,最高达到 2 800 K。在隔离段和凹槽区域, Mech 1 模型释放热量速度较快, Mech 1 预测的温度明显比 Mech 2 高,两者最高温度大约相差 200 K,这与图 8 和图 9 结果相一致。

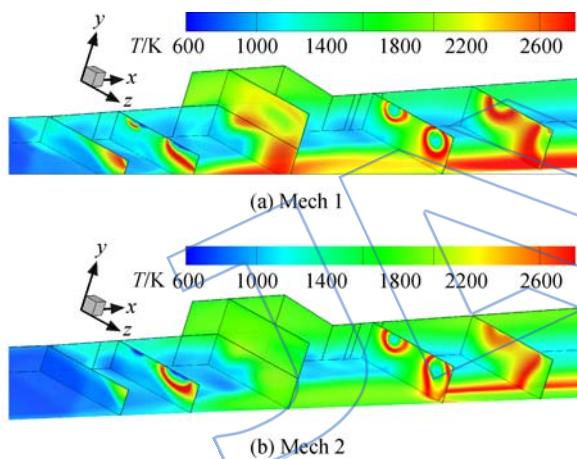


图 10 化学反应机理对流场温度分布的影响

Fig. 10 Effect of chemical reaction mechanism on flow field of static temperature

表 2 比较化学反应机理对超燃冲压发动机性能的影响。其中定义设备喷管出口到主喷嘴 P1 处区域为隔离段,主喷嘴 P1 到辅助喷嘴 S1 之间区域为燃烧室,辅助喷嘴 S1 之后为扩张段,推力沿流动方向为正方向。从表 2 可以看出,两个模型计算得到的内流道有效推力差别较大, Mech 1 模型计算得到有效推力在超燃冲压发动机各区域和整个内流道都高于 Mech 2 模型。最大差别发生在隔离段和燃烧室部分,这主要是由于两个模型在隔离段和燃烧室热量释放的速度不同,从而诱导的燃烧区域和流场结构不同,这也可以从图 8 壁面压强分布和图 10 流场温度分布看出。由于隔

离段推力值占整个内流道推力值比重很小,这部分差别可以不予考虑。但从整个内流道推力来看,两个模型计算得到推力值相对误差(以 Mech 1 计算结果为基准)还是几乎高达 12%,主要推力差别还是由燃烧室产生的,而燃烧室是燃料热量释放的主要区域,因此不同简化模型热量释放过程对超燃冲压发动机推力性能的评估有较大影响。但由于缺乏相关实验结果,因此还无法从流场温度和超燃冲压发动机受力情况来判断两个模型的优劣。

表 2 化学反应机理对超燃冲压发动机受力的影响
Table 2 Effect of chemical reaction mechanism on force of scramjet

	推力/N		相对误差/%
	Mech 1 计算值	Mech 2 计算值	
隔离段	-6.14	-2.20	64.17
燃烧室	-28.94	-24.64	14.86
扩张段	-53.65	-51.45	4.10
内流道	-88.73	-78.29	11.77

3 结 论

采用两种乙烯燃料简化化学反应机理对激波管点火延迟时间和 HF2 直连式超燃冲压发动机模型进行了计算,比较了两种简化机理点火延迟时间的差别以及两种简化机理对 HF2 直连式超燃冲压发动机在壁面压强、流场温度、一维质量加权马赫数和超燃冲压发动机推力性能上的影响,得到以下结论:

1) 两个简化化学动力学模型点火延迟时间差别很小,都能准确反映乙烯的点火特性,但在热量释放过程上有一定差别。

2) 两个简化模型燃烧放热过程上的不同对壁面压强、一维质量加权马赫数、流场温度和推力均有影响,但是对燃烧模态没有影响。

3) 对于 HF2 直连式超燃冲压发动机,由于 Mech 2 模型预测的壁面压力分布整体上与实验结果更接近,而 Mech 2 只比 Mech 1 增加了一个组分,对计算量影响不大,因此推荐采用 Mech 2 简化模型预测 HF2 直连式超燃冲压发动机流场。

参考文献:

[1] Westbrook C K, Dryer F L. Simplified reaction mechanism

- for the oxidation of hydrocarbon fuels in flames[J]. *Combustion Science and Technology*, 1981, 27(1/2): 31-43.
- [2] Westbrook C K, Dryer F L. Chemical kinetic modeling of hydrocarbon combustion[J]. *Progress Energy Combustion Science*, 1984, 10: 1-57.
- [3] Hautman D J, Dryer F L, Schug K P. A multiple-step overall kinetic mechanism for the oxidation of hydrocarbons[J]. *Combustion Science and Technology*, 1981, 25(5/6): 219-235.
- [4] Eklund R, Baurle R A, Gruber M R. Numerical study of a scramjet combustor fueled by an aerodynamic ramp injector in dual-mode combustion[R]. AIAA 2001-0379, 2001.
- [5] Montgomery C J, Cremer M A, Chen J Y, et al. Reduced chemical kinetic mechanisms for hydrocarbon fuels[R]. AIAA-99-2220, 1999.
- [6] 钱炜祺, 杨顺华, 肖保国, 等. 碳氢燃料点火燃烧的简化化学反应动力学模型[J]. *力学学报*, 2007, 39(1): 37-44.
QIAN Weiqi, YANG Shunhua, XIAO Baoguo, et al. Development of reduced chemical reaction kinetic model for hydro-carbon fuel combustion[J]. *Chinese Journal of Theoretical and Applied Mechanics*, 2007, 39(1): 37-44. (in Chinese)
- [7] Montgomery C J, Zhao W, Tam C J, et al. CFD simulations of a 3-D scramjet flameholder using reduced chemical mechanisms[R]. AIAA 2004-3874, 2004.
- [8] Montgomery C J, Zhao W, Adams B R, et al. Supersonic combustion simulations using reduced chemical kinetic mechanisms and ISAT[R]. AIAA 2003-3547, 2003.
- [9] 邢建文, 郑忠华, 宋文艳, 等. 反应机理对数值模拟超燃冲压发动机性能影响的初步研究[R]. 长沙: 第十三届激波与激波管学术会议, 2008.
- [10] Konnov A A. Implementation of the NCN pathway of prompt-NO formation in the detailed reaction mechanism[J]. *Combustion and Flame*, 2009, 156(11): 2093-2105.
- [11] Wang H, You X, Joshi A V, et al. USC Mech version II: high-temperature combustion reaction model of H₂/CO/C₁-C₄ compounds[R]. Combustion Kinetic Laboratory, University of Southern California, 2007. http://ignis.usc.edu/USC_Mech_II.htm.
- [12] XU Chaoqi, Konnov A A. Validation and analysis of detailed kinetic models for ethylene combustion[J]. *Energy*, 43(1): 19-29.
- [13] 杨顺华. 碳氢燃料超燃冲压发动机数值研究[D]. 四川, 绵阳: 中国空气动力研究与发展中心, 2006.
YANG Shunhua. Numerical study of hydrocarbon fueled scramjets[D]. Mianyang, Sichuan; China Aerodynamics Research and Development Center, 2006. (in Chinese)
- [14] Mawid M A, Sekar B. Kinetic modeling of ethylene oxidation in high speed reacting flows[R]. AIAA 97-3269, 1992.
- [15] Baurle R A, Mathur T, Gruber M R, et al. A numerical and experimental investigation of a scramjet combustor for hypersonic missile applications[R]. AIAA 98-3121, 1998.
- [16] Law C K, Sung C J, Wang H. Development of comprehensive detailed and reduced reaction mechanism for combustion modeling[R]. AIAA 2002-0331, 2002.
- [17] Montgomery C J, Swensen D A, Harding T V, et al. Automated creation and testing of reduced chemical kinetic mechanism[R]. AIAA 2001-3418, 2001.
- [18] Warnatz J, Maas U, Dibble R W. *Combustion*[M]. Germany: Springer-Verlag, 1999.
- [19] 肖保国, 钱炜祺, 杨顺华, 等. 甲烷点火燃烧的简化化学反应动力学模型[J]. *推进技术*, 2006, 27(2): 101-105.
XIAO Baoguo, QIAN Weiqi, YANG Shunhua, et al. Investigation of reduced chemical reaction kinetic model for combustion of methane[J]. *Journal of Propulsion Technology*, 2006, 27(2): 101-105. (in Chinese)
- [20] 杨顺华, 肖保国, 钱炜祺. 乙烯燃烧简化化学动力学模型及其验证[J]. *实验流体力学*, 2009, 23(2): 1-4.
YANG Shunhua, XIAO Baoguo, QIAN Weiqi. Reduced chemical kinetics and experimental test for ethylene combustion[J]. *Journal of Experiments in Fluid Mechanics*, 2009, 23(2): 1-4. (in Chinese)
- [21] Storch A M, Bynum M, Liu J, et al. Combustor operability and performance verification for HIFiRE flight 2[R]. AIAA 2011-2249, 2011.
- [22] Liu J, Gruber M. Preliminary preflight CFD study on the HIFiRE flight 2 experiment[R]. AIAA 2011-2204, 2011.
- [23] Bynum M, Baurle R. A design of experiments study for the HIFiRE flight 2 ground test computational fluid dynamics results[R]. AIAA 2011-2203, 2011.
- [24] Cabell K, Hass N, Storch A. HIFiRE direct-connect rig (HDCR) phase I scramjet test results from the NASA Langley arc-heated scramjet test facility[R]. AIAA 2011-2248, 2011.
- [25] YANG Shunhua, LE Jialing. Computational analysis of a kerosene-fueled scramjet[R]. ISABE-2005-1195, 2005.
- [26] 赵慧勇. 超燃冲压整体发动机并行数值研究[D]. 四川, 绵阳: 中国空气动力研究与发展中心, 2005.
ZHAO Huiyong. Parallel numerical study of whole scramjet engine[D]. Mianyang, Sichuan; China Aerodynamics Research and Development Center, 2005. (in Chinese)
- [27] Engblom W A, Frate F C, Nelson C C. Progress in validation of WIND-US for ramjet/scramjet combustion[R]. AIAA 2005-1000, 2005.
- [28] Liu J, Tam C J, Lu T. Simulations of cavity-stabilized flames in supersonic flows using reduced chemical kinetic mechanisms[R]. AIAA 2006-4862, 2006.
- [29] Hidaka Y, Nishimori T, Sato K, et al. Shock-tube and modeling study of ethylene pyrolysis and oxidation[J]. *Combustion and Flame*, 1999, 117(4): 755-776.