

反应机理对 air/H₂ 燃烧系统多场耦合仿真的适用性

樊雪松, 陈 阳, 吴德权, 蔡国飙
(北京航空航天大学 宇航学院, 北京 100191)

摘 要: 针对某 air/H₂ 燃烧系统, 建立起流动、传热、燃烧多场耦合有限体积分态数值模型, 构建了通用化的反应机理库和配套的物性参数库, 分别采用热力计算方法和 3 套氢氧反应机理方法进行仿真; 基于反应机理的仿真描述了点火与熄火过程, 揭示了各基元反应和组分变化对燃烧流动瞬态过程的影响。与已经过试验验证的热力计算方法对比, 结果表明: Williams 机理符合最好, Conaire 机理次之, Evans 机理符合相对较差。相比 Conaire 机理, 采用 Williams 反应机理使反应熄火温度由 1200 K 降低至 1155.3 K, 在 1222.3 K 的低温工况下, 计算结果误差由 Conaire 机理的 4.7% 降低至 2.74%, 使多场耦合数值系统的应用范围更广、计算结果更佳; 低温工况下, H₂O₂ 及其相关反应对氢氧机理的描述精度会产生较大影响。

关 键 词: 多场耦合问题; 瞬变燃烧; 瞬变流动; 系统动力学; 氢氧反应机理
中图分类号: V434.1 **文献标志码:** A

Applicability of reaction mechanisms to multi-field coupling simulation of air/H₂ combustion system

FAN Xuesong, CHEN Yang, WU Dequan, CAI Guobiao
(School of Astronautics,

Beijing University of Aeronautics and Astronautics, Beijing 100191, China)

Abstract: For an air-hydrogen combustion system, a dynamic finite volume numerical model considering the multi-field coupling of flow, heat transfer and combustion was established, a general library of reaction mechanisms and physical property parameters was constructed. The thermodynamic calculation method and three sets of hydrogen-oxygen reaction mechanism methods were used for simulation calculation, and the latter can also describe the process of ignition and flameout, and reveal the impact of various elementary reactions and species changes on the combustion and flow transient process. The Williams mechanism fitted best with the results of the thermodynamic calculation, which was validated by experiments, followed by the Conaire mechanism, and the Evans mechanism was relatively poor. Compared with the Conaire mechanism, Williams reaction mechanism lowered the quenching temperature from 1200 K to 1155.3 K, reduced the calculation error from 4.7% to 2.74% under the low temperature condition of 1222.3 K, and made the application of multi-coupling numerical system more extensive and the calculation result better. Under low temperature,

收稿日期: 2017-07-07

基金项目: 国家自然科学基金(11101023)

作者简介: 樊雪松(1993—), 男, 硕士生, 从事液体推进系统动力学与仿真研究。

通讯作者: 陈阳(1979—), 男, 讲师, 博士, 主要从事液体推进系统的动力学与仿真研究。E-mail: yangchen@buaa.edu.cn

引用格式: 樊雪松, 陈阳, 吴德权, 等. 反应机理对 air/H₂ 燃烧系统多场耦合仿真的适用性[J]. 航空动力学报, 2018, 33(10): 2392-2403. FAN Xuesong, CHEN Yang, WU Dequan, et al. Applicability of reaction mechanisms to multi-field coupling simulation of air/H₂ combustion system[J]. Journal of Aerospace Power, 2018, 33(10): 2392-2403.

H₂O₂ and related reactions had a great influence on the description accuracy of the hydrogen-oxygen mechanism.

Key words: multi-field coupling problems; transient combustion; transient flow; system dynamics; hydrogen-oxygen reaction mechanism

符号说明

A	横截面积(m ²)	M_w	摩尔质量(kg/mol)
$\bar{A}_i$	横截面 A_i 与 A_{i+1} 的平均值(m ²)	v_{i_r, i_s}	组分 i_s 在反应 i_r 中的净化学计量系数
R_p	反应的过程变化率(mol/(m ³ · s))	c_{i_s}	组分 i_s 摩尔浓度(mol/m ³)
C_d	流量系数(无量纲)	w	组分的质量分数(无量纲)
r_s	对有限控制体积的壁面径向坐标(m)	n_r	反应总数
d	管路的内径(m)	n_s	组分总数
S, S_s	控制体积区域和变形区域的内壁面表面积(m ²)	$\alpha_{tbc, i_r i_s}$	反应 i_r 中组分 i_s 的第三体影响系数(第三体效率)
$D_{i_s m}$	第 i_s 种组分在混合物中的有效二元扩散系数(无量纲)	h	单位质量的焓(J/kg)
T	热力学温度(K)	λ	导热系数(W/(m K))
E_v	单位体积总能量(J/m ³)	p	压强(Pa)
$T_i(0)$	燃烧室掺混点火区温度(K)	ρ	密度(kg/m ³)
E_m	单位质量总能量(J/kg)	q_m	质量流量(kg/s)
T_{ic}	热力计算方法所得掺混点火区温度(K)	q_{mf}	燃料质量流量(kg/s)
f_i	i 方向单位质量所受的力(N/kg)	τ_v	阀门相对开度(无量纲)
t	时间(s)	Q_{nc}	无化学能释放情况下单位体积增加的热量(J/(m ³ s))
f_k	无量纲摩擦损失系数(无量纲)	Φ	当量比(无量纲)
x	管道轴向坐标(m)	$\dot{q}$	流体传递给管壁的热流量(W/m ²)
$\bar{x}_i$	管道轴向坐标 x_i 与 x_{i+1} 的平均值(m)	ω_{i_s}	组分 i_s 单位体积的质量生成率(kg/(m ³ · s))
g	重力加速度(m/s ²)		
u	流体速度(m/s)		
k_f, k_r	正、逆反应的反应速率常数(变化单位)		
u_s	管壁弹性变形引起的沿管壁外法线方向的膨胀速度(m/s)		

对于火箭发动机的研发工作,数值仿真^[1-2]作为试验之外的另一种研究方法,可缩短研制周期、降低试验成本、规避试验风险,并为试验提供指导性意见。美国国家航空航天局(NASA)的数值推进系统仿真项目 NPSS (numerical propulsion system simulation)是当今发动机系统仿真的高水平的代表^[3-7]。该项目表明,精确详细的数值仿真能将发动机研制工作所花费的时间和费用降低 30%~40%。

多场耦合问题,也称为多物理场问题^[8]。在系统级的仿真研究中,对整个系统进行高维多场耦合瞬变建模,无论从工作量,还是复杂程度上来说,以目前的技术条件是难以完成的,因此,有必要在模型精确度和系统复杂度之间进行合理权衡,而将系统模型简化为一维甚至零维是目前较

通用的处理方式^[9-13]。在涉及燃烧的流动系统中,燃烧是整个系统的核心工作过程。目前用于考虑燃烧过程的方法,主要有基于化学热力学的热力计算方法和基于化学动力学的反应机理方法^[2,13]。文献[13]提出了一种多场耦合管流系统仿真实理论和模型体系,考虑了流场、壁面温度场、浓度场的多场耦合^[13-15],对于燃烧过程,则使用基于反应机理的方法来考虑,该方法相对于基于热力计算的方法有诸多优势,不仅能描述燃烧的点火与熄火过程,还能描述各个基元反应和各个反应组分对燃烧过程的影响,解决了基于化学动力学方法的流-热-燃多场耦合复杂管网系统的统一数值建模问题。该体系构建的最初目的是为了提

高对涡轮试验台系统^[10-11]中温度分层现象的描述精度,然而,煤油的详细反应机理极为庞杂,耦合

到多组件的试验台系统多场耦合瞬变仿真中,存在刚性、计算周期和适用性问题。考虑到碳氢链锁燃烧的 3 个主要因素是氢氧化学、CO 氧化、C1/C2 化学,要解决碳氢化合物的反应机理问题,必须先解决氢氧化学反应机理问题,因此把研究重点首先放到组分和基元反应相对较少的氢/氧详细反应机理的多场耦合上是一个可行的方向。

目前氢/氧反应机理已比较成熟,存在多种成熟的详细和简化机理^[16]。爱尔兰国立大学的 Conaire 等^[17]在 2004 年提出了一个温度、压强以及混合比适用范围都很广的氢氧燃烧综合性反应机理,对氢氧系统燃烧过程进行了敏感性分析,以此研究在不同工况下各基元反应对燃烧过程的影响。研究用到了当时较权威的动力学数据和热化学数据,其计算结果与很多已经发表的试验结果符合很好。2014 年圣地亚哥加州大学的 Williams 研究小组^[16]针对氢燃烧提出了一个 21 步反应机理,综述了氢氧化学反应机理发展情况,包括较新的化学反应动力学以及反应速率常数,总结了关于氢燃烧的基本输运性质状态的理论,分析了氢氧的自然过程;此外,还综述了氢气爆燃的理论,包括火焰结构、燃烧速度、可燃性限制等。Evans 等^[18]在 1980 年对比分析了氢氧燃烧的两种反应机理,一种包含 7 个组分和 8 步反应,另外一种则包含 12 个组分 25 步反应,两者之间的主要区别在于,12 组分的机理考虑了额外的 3 种组分 HO₂、NO 和 NO₂,以及由此延伸出来的一些额外反应步骤。研究表明,涉及 HO₂ 的反应对于低温点火研究来说是重要的,而在大多数热空气试验气体中发现的 NO 和 NO₂ 两种组分使得 air/H₂ 在低温下更容易点火,而火焰的点火特性对化学动力学特性和混合均匀度非常敏感。

借鉴以往研究中的优点与不足,本文在文献[13]多场耦合模型体系的基础上,构建了反应机理库和对应的物性参数库,并对程序进行通用化改造,分别采用基于化学平衡的热力计算方法和基于 3 套氢氧详细反应机理的化学动力学方法进行仿真,以研究各反应机理在多场耦合仿真中的适用性。

1 燃烧系统的模块化建模

文献[13]从适用于连续介质控制体的笛卡儿坐标系中欧拉型积分形式的包含有限速率化学反应的多组分三维 Navier-Stokes(N-S)方程出发,

通过合理模化和基于 Fick 定律的近似推导得到了多组分可压缩变截面管流准一维瞬变流动积分和微分形式的守恒方程组,并通过在空间交错网格上的有限体积离散建立了一种计算准一维可压缩多组分变截面管流瞬变流场的有限体积模型,进而建立起一种流动、传热、燃烧多场耦合的统一模型体系。当基于 Fick 定律的多组分扩散简化方法被采用时,包含有限速率化学反应的多组分可压缩变截面管流一维瞬变流动守恒方程的积分形式可化为如下形式:

质量守恒方程

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{x_1}^{x_2} \rho A dx = (\rho u A)_{x=x_1} - (\rho u A)_{x=x_2} \quad (1)$$

组分质量守恒方程

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{x_1}^{x_2} \rho_{i_s} A dx = \left[\left(\rho_{i_s} u - \rho D_{i_s-m} \frac{\partial w_{i_s}}{\partial x} \right) A \right]_{x=x_1} - \left[\left(\rho_{i_s} u - \rho D_{i_s-m} \frac{\partial w_{i_s}}{\partial x} \right) A \right]_{x=x_2} + \int_{x_1}^{x_2} \dot{w}_{i_s} A dx \quad (2)$$

其中 $i_s=1,2,\dots,n_s-1$ 。

动量守恒方程

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \int_{x_1}^{x_2} \rho u A dx &= (\rho u^2 A + p A)_{x=x_1} - (\rho u^2 A + p A)_{x=x_2} + \int_{x_1}^{x_2} p \frac{\partial A}{\partial x} dx + \\ &\int_{x_1}^{x_2} \sum_{i_s=1}^{n_s} \rho_{i_s} f_{x,i_s} A dx - \int_{x_1}^{x_2} f_r \rho A dx \end{aligned} \quad (3)$$

其中 $f_{x,i_s}=f_x=g\cos\theta, f_r=\frac{f_\lambda u}{2d} \left| \frac{u}{d} \right|$ 。

能量守恒方程

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \int_{x_1}^{x_2} \rho E_m A dx &= - (p u_s S_s)_{r=r_s} - \dot{q} S + \\ &\left[\left(\rho E_m u + p u - \lambda \frac{\partial T}{\partial x} - \rho \sum_{i_s=1}^{n_s} D_{i_s-m} h_{i_s} \frac{\partial w_{i_s}}{\partial x} \right) A \right]_{x=x_1} - \\ &\left[\left(\rho E_m u + p u - \lambda \frac{\partial T}{\partial x} - \rho \sum_{i_s=1}^{n_s} D_{i_s-m} h_{i_s} \frac{\partial w_{i_s}}{\partial x} \right) A \right]_{x=x_2} + \\ &\int_{x_1}^{x_2} \sum_{i_s=1}^{n_s} f_{x,i_s} \left(\rho_{i_s} u - \rho D_{i_s-m} \frac{\partial w_{i_s}}{\partial x} \right) A dx + \int_{x_1}^{x_2} Q_{nc} A dx \end{aligned} \quad (4)$$

式中 $w_{n_s}=1-\sum_{i_s=1}^{n_s-1} w_{i_s}$, 所选第 n_s 种组分应该是质量分数最大(处于高质量浓度稀释)的组分。

从该体系及其衍生出的流动、传热两场耦合模型子体系^[12]出发,根据图 1 所示 air/H₂ 燃烧示例系统各典型部件的具体结构可以衍生出具体的模块化仿真模型^[9-13],表 1 所示为系统模块化

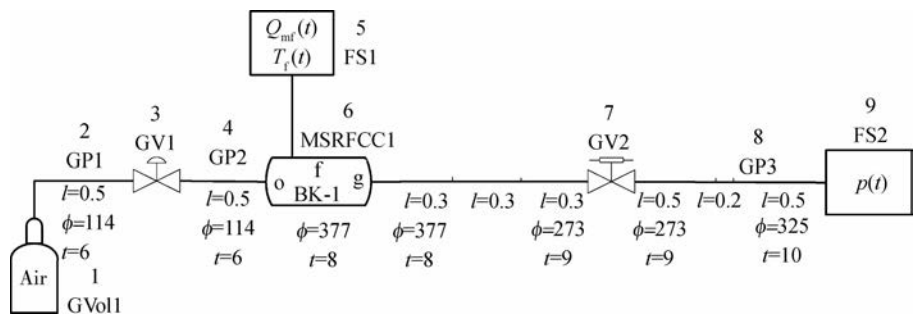


图 1 Air/H₂ 燃烧示例系统的模块化仿真模型(单位:mm)

Fig. 1 Modularization simulation model of air-hydrogen combustion sample system (unit:mm)

表 1 Air/H₂ 燃烧示例系统各典型元件的模块化信息
Table 1 Modularization disassembly of air-hydrogen combustion sample system

模块标识符	模块属性
FS(fluid source)	基础
GP(gas pipe)	基础
GVol(gas volume)	基础
GV(gas valve)	基础
MSRFCC(multi-species reacting flow combustion chamber)	基础

分解后产生的 5 个典型元件的模块信息,最终组合出 air/H₂ 系统的模块化仿真模型。

对于管道类元件,每 100 mm 划分一个网格;而对于气体阀门与气体容积元件,则划分为 2 个标准网格,总长度为 200 mm。GVol1 为空气容腔,为系统提供氧化剂;GV1 为气体阀门,控制空气流量;FS1为氢气瓶流体源,提供燃料。MSRFCC1

为多组分反应流燃烧室,是系统的核心模块,o 表示氧化剂入口,f 表示燃料入口,g 表示气相反应,BK-1 为燃气发生器型号,其模型如图 2 所示,采用基于反应机理的方法计算,同时用热力计算方法计算当前混合比情况下的燃烧温度用于对比。点火方案为:点火时段在能量方程中加入点火源能量项,即 $dE_{v,0}/dt = dE_{v,0}/dt + Q_{nc,ig}$,同时每隔一段时间 $\Delta t_{iginterval}$ ($\Delta t_{iginterval}$ 为点火间隔时间),判断燃烧室掺混点火区温度 T_0 是否超过规定点火温度 T_{ig} ,如果 $T_0 > T_{ig}$,则令单位体积单次增加的能量 $Q_{nc,ig}$ 为零,否则 $Q_{nc,ig}$ 维持原值继续向掺混点火区中增加能量。GV2 为气体阀门,调节燃烧室压强,FS2 为出口环境流体源。图 1 中标出了管道 GP1-3 以及 MSRFCC1 的长度 l (单位为 m,沿管道标注)、外径 ϕ 和壁厚 t (单位为 mm,沿管道标注)。

仿真计算时,给定初始流场和壁面温度场分布,待冷流稳定后,10 s 时刻在 MSRFCC1 中点火,整个过程持续约 13 s。

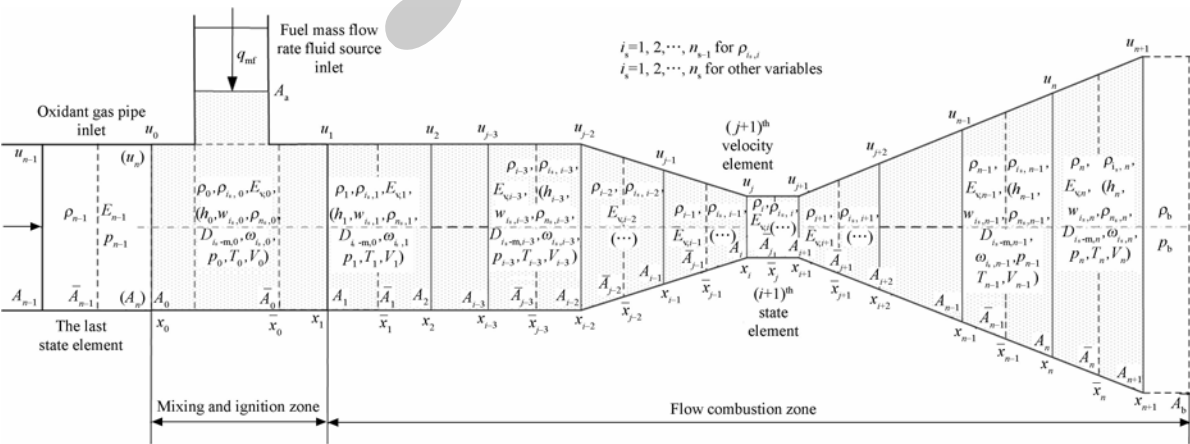


图 2 多组分反应流燃烧室模块的有限控制体积单元

Fig. 2 Finite control volume grids of multi-species reacting flow combustion chamber module

2 化学动力学模型

建立化学动力学模型的目的是研究在层流或湍流中,各基元反应的过程变化率以及各组分生成率。本文使用 Arrhenius 公式,选择层流有限速率模型进行计算,忽略湍流脉动的影响。

2.1 组分质量生成率的计算

对于一个包含 n_r 个基元反应、 n_s 种组分的化学反应系统,第 i_r 个反应的通用形式可写为

$$\sum_{i_s=1}^{n_s} \nu'_{i_r,i_s} M_{i_s} \xrightleftharpoons[k_{r,i_r}]{k_{f,i_r}} \sum_{i_s=1}^{n_s} \nu''_{i_r,i_s} M_{i_s} \tag{5}$$

第 i_r 个基元反应的过程变化率为

$$R_{p,i_r} = R_{pf,i_r} - R_{pr,i_r} = k_{f,i_r} \prod_{i_s=1}^{n_s} c_{i_s}^{\nu'_{i_r,i_s}} - k_{r,i_r} \prod_{i_s=1}^{n_s} c_{i_s}^{\nu''_{i_r,i_s}} \tag{6}$$

反应 i_r 中,组分 i_s 的质量生成率为

$$\dot{\omega}_{i_r,i_s} = M_{w,i_s} \Gamma \nu_{i_r,i_s} R_{p,i_r}, \quad i_r = 1, 2, \dots, n_r \tag{7}$$

组分 i_s 总的生成率(单位体积质量生成率)为

$$\dot{\omega}_{i_s} = \sum_{i_r=1}^{n_r} \dot{\omega}_{i_r,i_s} \tag{8}$$

式中 $\Gamma = \sum_{i_s=1}^{n_s} \alpha_{tbe,i_r,i_s} c_{i_s}$ 表示反应 i_r 中第三体对反应速率的影响。 k_{f,i_r} 、 k_{r,i_r} 通常可以由 Arrhenius 公式给出,然而对于有些反应,现存的数据库往往只能给出正或逆反应的速率常数,另一个方向的速率常数可以根据平衡常数计算得到。

2.2 反应机理的选择

反应机理是用来描述一个总体反应的一组基元反应。描述同一反应的不同机理,其适用范围、精度等也会有所不同。本文针对 air/H₂ 燃烧系统,分别选用 Conaire,Williams 和 Evans 共 3 种

氢氧详细机理^[16-18]建立反应机理和物性参数库,并针对 air/H₂ 系统加入了 Ar、N₂ 两种组分(在前两种机理中认为 Ar、N₂ 不参与反应)扩展了 3 种机理。扩展后的 Conaire 机理包含 10 组分 21 步基元反应,是标准算例;Williams 机理包含 10 组分 24 步基元反应,它选用了最新的动力学以及反应速率常数;Evans 机理包含 13 组分 25 步基元反应,考虑氮相关反应。

3 模型应用效果

采用面向对象的 Fortran 2008 语言将反应机理库和物性参数库程序化并融入系统仿真程序中,针对 air/H₂ 燃烧示例系统开展多场耦合仿真研究以对比分析 3 种机理的适用性。

3.1 算例参数设置

表 2 所示为 GV1、GV2 两个调节阀的动作时序,边界条件为:流体源 FS1,流量为 0.03 kg/s 温度为 279.4 K;流体源 FS2,压强为 0.102 3 MPa。点火条件为:10~10.1 s 为点火时段,通过点火源向系统逐次增加能量。单位体积单次增加的能量 $Q_{nc_ig} = 2.5 \times 10^8 \text{ W/m}^3$,每经过点火间隔时间 $\Delta t_{iginterval}$ 向系统增加能量一次, $\Delta t_{iginterval} = 0.1 \text{ ms}$,直至燃烧室温度达到点火温度 $T_{ig} = 1\,200 \text{ K}$ 。FS1 边界条件为氢气流量和温度,FS2 则为恒压大气环境, t 为仿真时间。沿时间动态推进的 CFL(Courant-Fiedrich-Lewy)数设置为:0~10 s 时为 0.8,10~10.004 s 时为 1.0×10^{-4} ,10.004~10.01 s 时为 1.0×10^{-5} ,10.01~10.05 s 时为 2.0×10^{-5} ,10.05~10.1 s 时为 5.0×10^{-5} ,10.1~16 s 时为 1.0×10^{-4} 。随着时间的推进,逐步调大 GV1 阀门开度,增加空气流量,以此研究不同机理对不同工况的适用性。

表 2 阀门时序设计
Table 2 Time sequence of valves

参数	t/s										
	0	10.3	10.6	10.9	11.2	11.5	11.8	12.1	12.4	12.7	13.0
GV1 相对开度 τ_v	0.184	0.200	0.210	0.220	0.225	0.228	0.231	0.233	0.235	0.237	0.239
当量比 Φ	0.440	0.433	0.392	0.362	0.336	0.324	0.317	0.310	0.305	0.301	0.299
GV2 相对开度 τ_v	0.500	0.500	0.500	0.500	0.500	0.500	0.500	0.500	0.500	0.500	0.500

3.2 仿真结果对比分析

如图 3~图 6 所示为 3 种机理算例的各元件

的部分仿真结果。数据输出频率在 0~9.99 s 冷流阶段为 100 Hz,即每隔 0.01 s 一个数据点;在

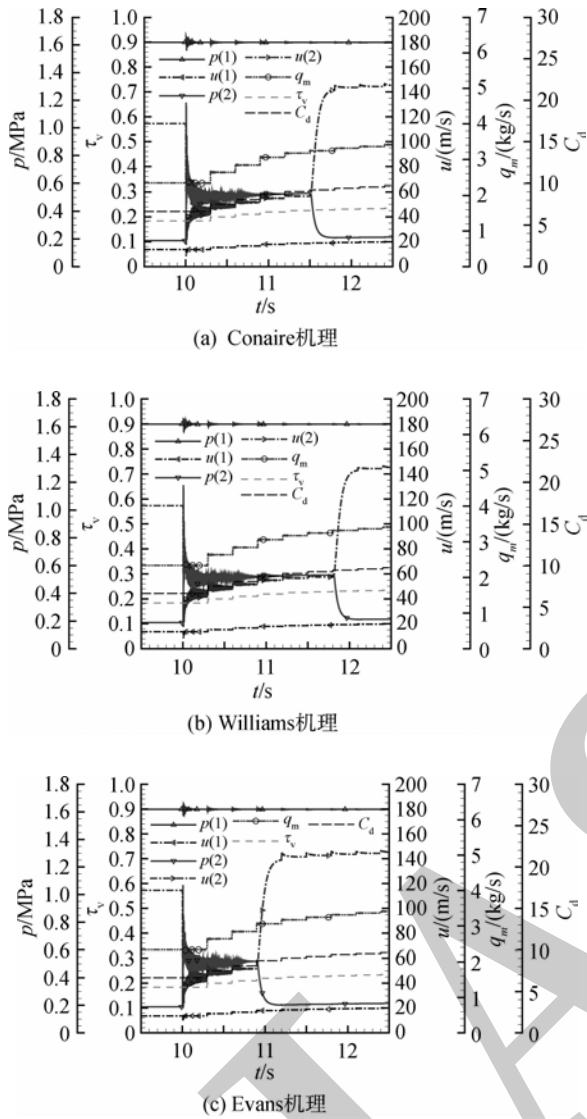


图 3 3 种算例中阀门 GV1 压强、流速、质量流量、相对开度和流量系数的仿真结果对比

Fig. 3 Comparison of the GV1 pressures, velocities, mass flow rate, relative opening and flow coefficient at three simulation cases

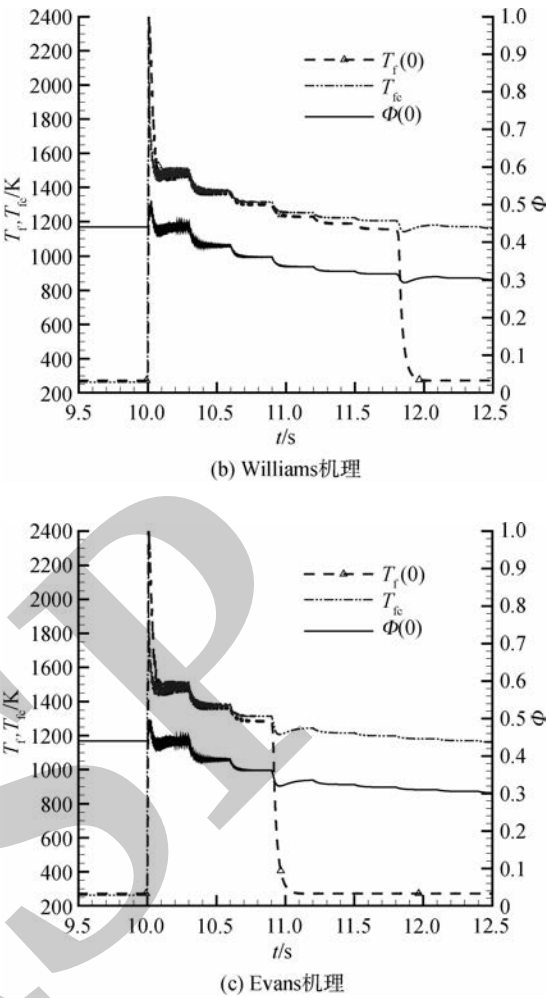
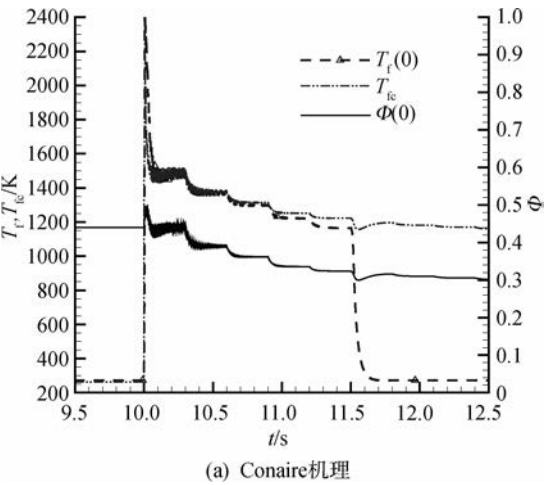
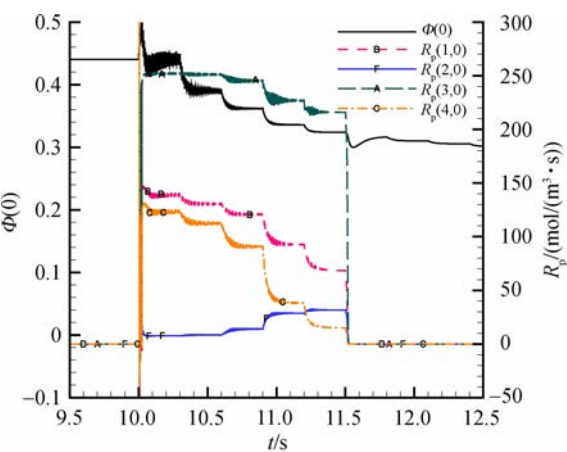


图 4 3 种算例中燃烧室掺混点火区温度与热力计算温度的对比

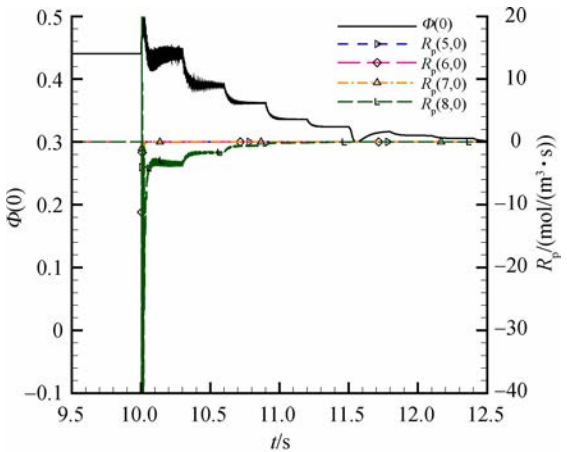
Fig. 4 Comparison of the mixing and ignition zone temperature with the thermodynamic-calculation temperature at three simulation cases

9.99~10.004 s、10.006~10.2 s 两个时段为 10 000 Hz;在 10.004~10.006 s 时段为 100 000 Hz;在 10.2~16 s 时段为 1 000 Hz。沿流动方向的 0、 $n/2$ 、 n 分别表示流场最初、中间、最末网格。

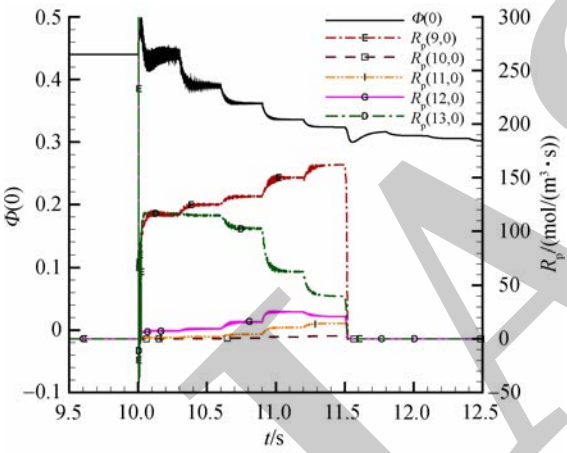
图 3 所示为各机理算例中阀门 GV1 处压强、流速、流量、相对开度和流量系数的仿真结果,图 4 为各机理算例燃烧室掺混点火区温度仿真结果 $T_t(0)$ 与同等混合比条件下热力计算算得温度 T_{fe} 的对比。图 4 中计算 T_{fe} 所用的热力计算方法在以往试验台仿真^[9-10]中已经过试验验证,在 260 s 的工作过程中,温度动态仿真曲线整体上都落在了试验台同一横截面上的两个温度传感器测得的总温曲线的范围内,可用作衡量反应机理计算结果的标准。由图 3 可知,GV1 之前为气瓶,在有限仿真时间内其入口处压力基本恒定。燃烧室在 10 s 点火,点火瞬间 GV1 出口处压力受到下游影



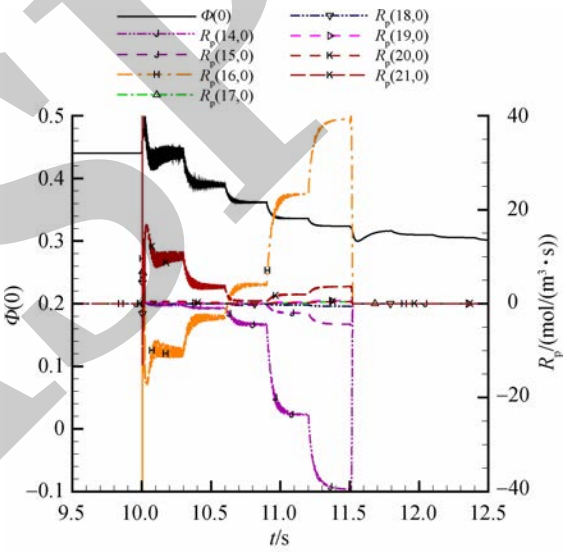
(a) Conaire机理H₂/O₂链式反应的过程变化率



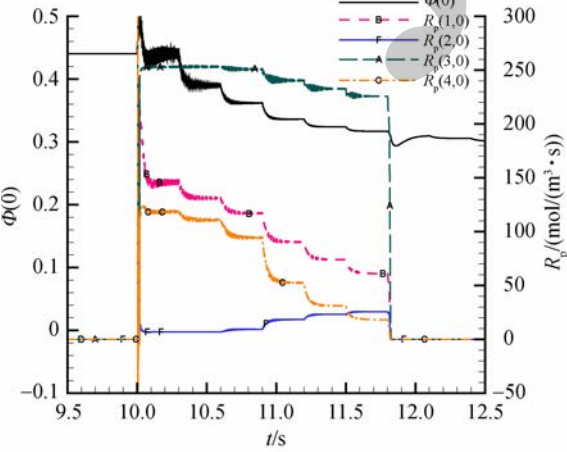
(b) Conaire机理H₂/O₂分解与重组反应的过程变化率



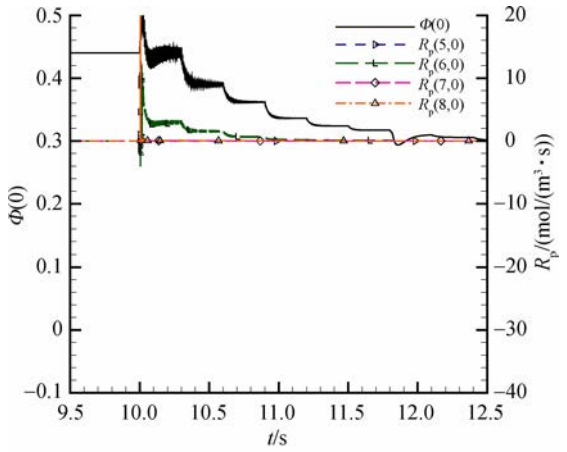
(c) Conaire机理HO₂生成与消耗反应的过程变化率



(d) Conaire机理H₂O₂生成与消耗反应的过程变化率



(e) Williams机理H₂/O₂链式反应的过程变化率



(f) Williams机理H₂/O₂分解与重组反应的过程变化率

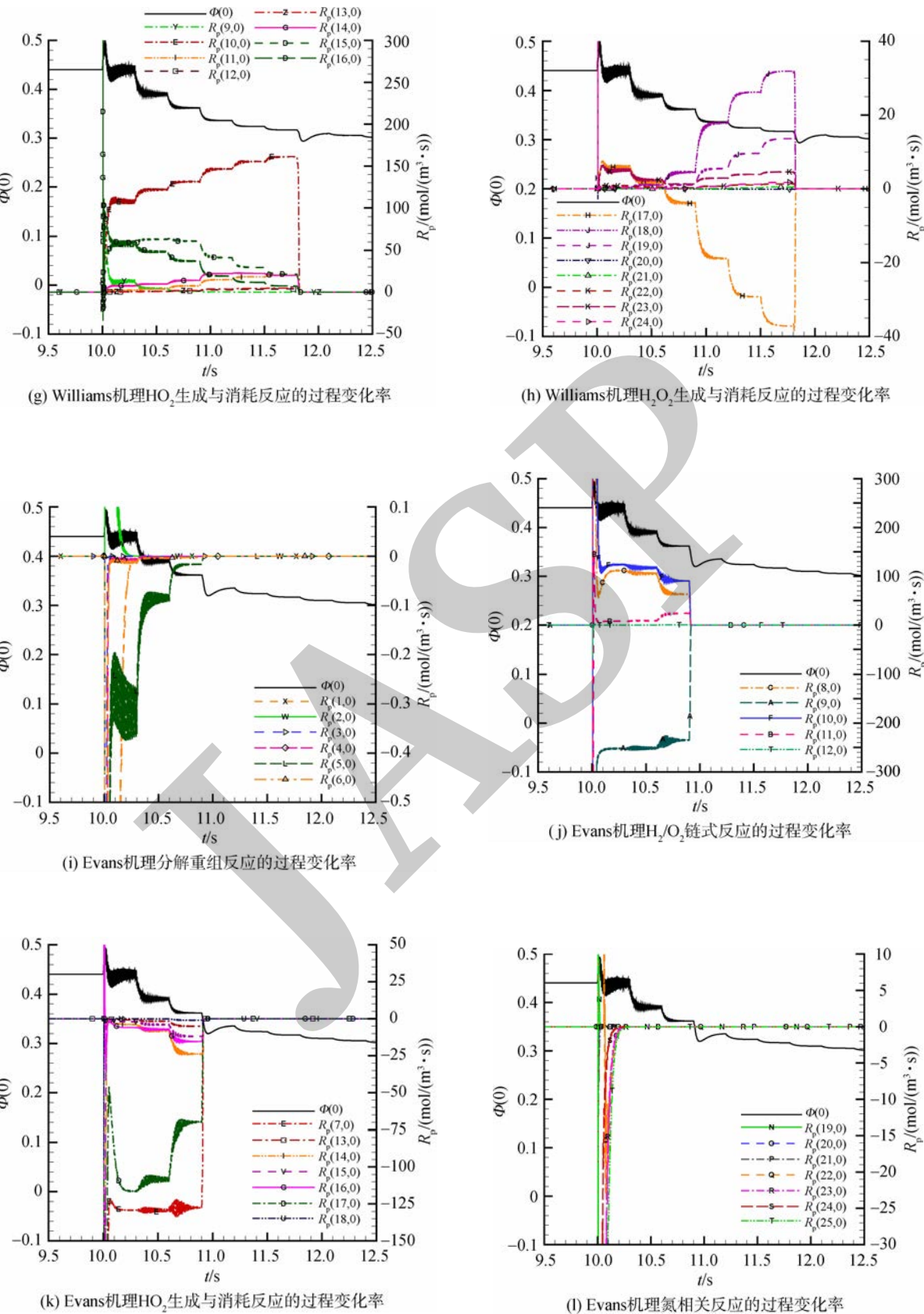


图 5 3 种机理算例的掺混点火区各基元反应过程变化率

Fig. 5 Progress rates of elementary reactions at the mixing and ignition zone of three simulation cases

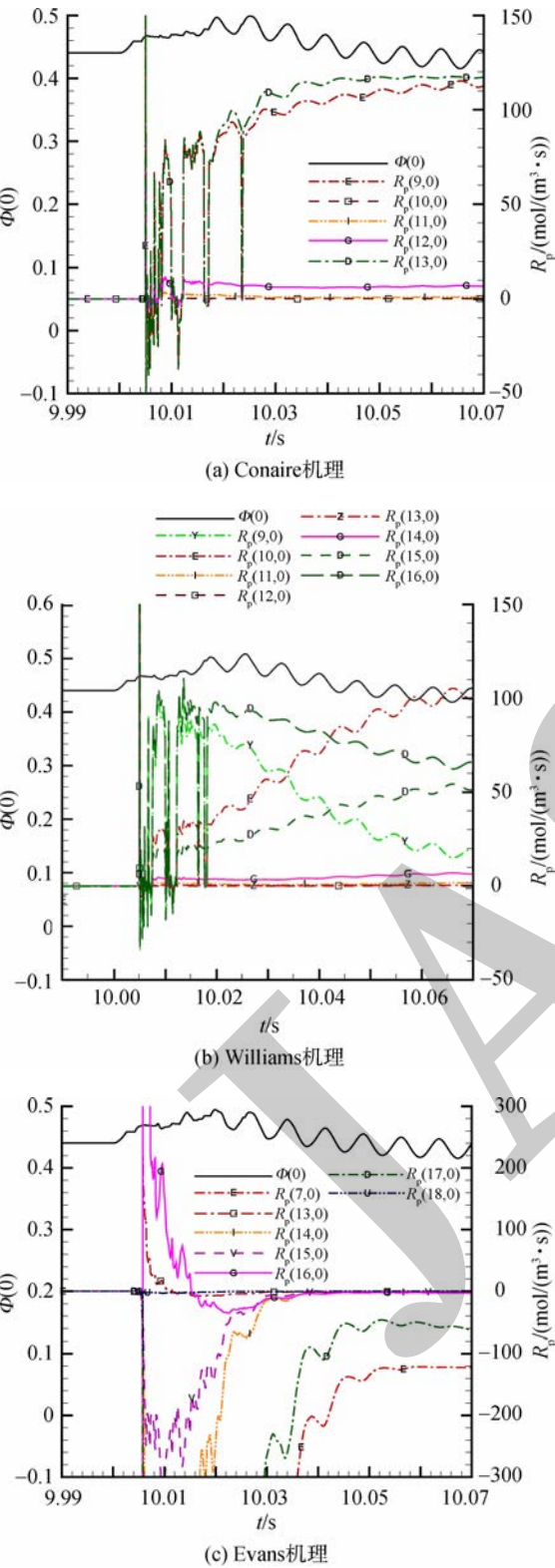


图 6 3 种机理算例点火阶段 HO_2 生成与消耗反应的过程变化率

Fig. 6 Progress rates of formation and consumption reactions of HO_2 at the ignition stage

响,有一个较强的脉冲,流速则因压力影响陡然下降之后又陡然上升,压力和流速都有较强的震荡,这可能是因为 MSR FCC1 上游的部件都是按无

化学反应和组分扩散的管流进行建模的,与按多组分反应流进行建模的 MSR FCC1 部件连接时,在燃烧初期因无法保证对瞬间倒流现象的守恒描述而引起数值震荡,这种震荡随着时间推进和当量比逐级降低而逐渐稳定,在 10.5 s 之后已不再明显。

由图 4 可知,随着 GV1 开度逐步增大,空气流量逐步增加。由于算例为富氧工况, GV1 开度越大,混合比就越偏离化学当量混合比,温度也就越低。总体来看,3 种机理与热力计算算得的掺混点火区温度在熄火段之前均符合良好,但在稳定段均略低于热力计算温度,说明有限速率化学反应的放热量略小于化学平衡假设下的放热量。热力计算方法不能反映燃烧熄火段,点火段的峰值及下降过程也较快,而基于反应机理的多场耦合仿真则能够较好地反映出这两个阶段,这是反应机理方法的优势之一。3 种机理最大的区别在于熄火点的不同: Conaire 机理在 11.5 s 时熄火,此时 GV1 开度为 0.228, $T_f(0)$ 为 1200 K;相比 Conaire 机理, Williams 机理的熄火点推迟到 11.8 s,此时 GV1 开度已达到 0.231, $T_f(0)$ 为 1155.3 K,其他部分基本相同; Evans 机理则在 10.9 s 左右就已经开始熄火,此时 GV1 开度为 0.22, $T_f(0)$ 为 1284 K。

表 3 中的时间点为每次调节阀门 GV1 之后,燃烧室再次达到稳定的时刻。由表 3 可以看出,3 种机理温度与热力计算温度的最大误差均不超过 5%,在同一时刻点, Williams 机理相对 Conaire 机理误差更小,且能描述温度更低、混合比偏离当量比更多工况下的燃烧;而 Evans 机理则相对误差较大、应用范围较窄。可知: Williams 机理应用效果优于 Conaire 机理,而后者又优于较旧的 Evans 机理; Evans 机理所未考虑的 H_2O_2 组分及相关反应对于低温燃烧非常关键,而其额外考虑的 N_2 相关反应在低温工况下并不重要。

图 5 显示了 3 种机理算例掺混点火区中各个基元反应过程变化率随时间的变化曲线。可以看出,在不同燃烧阶段,氢气和氧气分解、重组形成各种中间产物,并最终生成水的反应途径有所不同。不同机理之间最大的差异也在于此,即:在不同燃烧阶段,哪一个基元反应占据主导地位,是反应进行的主要途径。这主要是因为不同机理每个基元反应的指前因子 A_i 、温度指数 β 、活化能 E_a 均不相同,因此在反应过程中各组分的含量、各基元反应的反应速率也都有一定差别。图 6 则着重

表 3 热力计算与各反应机理所得燃烧室温度误差对比

Table 3 Error comparison of temperatures obtained by thermodynamic calculation and reaction mechanism

机理	参数	t/s					
		10.2	10.5	10.8	11.1	11.4	11.7
Conaire	T _i (0)/K	1454.4	1366.1	1296.9	1222.2	1164.9	272.9
	T _{ic} /K	1470.0	1380.8	1312.6	1252.1	1222.3	1191.8
	误差/%	1.06	1.06	1.20	2.39	4.70	
Williams	T _i (0)/K	1453.4	1364.5	1297.7	1229.0	1188.8	1155.6
	T _{ic} /K	1468.6	1378.9	1312.6	1251.7	1222.3	1205.0
	误差/%	1.03	1.04	1.14	1.81	2.74	4.10
Evans	T _i (0)/K	1461.1	1357	1285.4	273.1	272.5	272.4
	T _{ic} /K	1475.4	1372.8	1314.2	1238.8	1216.2	1198.7
	误差/%	0.97	1.15	2.19			

注:表中无数据处表示已熄火状态。

描述部分基元反应在点火瞬间的变化细节。

对比图 5 中 Conaire 机理图(5(a)~图 5(d))与 Williams 机理图(5(e)~图 5(h))可知,Williams 机理与 Conaire 机理的 H₂/O₂ 链式反应以及分解与重组反应均较为相似,链式反应都在整个反应中占据主导地位。两种机理的主要区别在于 HO₂ 生成与消耗反应。Williams 机理有 24 步反应,含有 Conaire 机理的全部 21 步反应,并新增加了 R9(O + OH + M = HO₂ + M)和 R13(HO₂ + H = H₂O + O)两个基元反应,而 R15/R16(HO₂ + OH = H₂O + O₂)则多出一个副反应,这 3 个反应都是 HO₂ 的生成与消耗反应。Conaire 机理中,HO₂ 的生成途径只有 R9(H + O₂ + M = HO₂ + M)一种,该反应也是 HO₂ 生成与消耗反应中最剧烈的一个;与之相对,Williams 机理中 HO₂ 的生成途径则有 R9 和 R10 两种,其中 R10 对应 Conaire 机理中的 R9。对比图 6(a)、图 6(b)中点火段数据可知,Williams 机理中 R9 逐渐下降,而 R10 则逐渐上升至占主导地位,并在后续各阶段与 Conaire 机理 R9 的过程变化率保持一致,都随着 GV1 开度增加而增加。Williams 机理对于点火段的描述与 Conaire 机理基本一致,但更加细致地描述了各基元反应所处地位的变化。点火之后,燃烧逐渐稳定,Williams 机理新增的 R9 变得比 R10 弱很多,首次达到稳定时,其过程变化率只有 R10 的 10%,而后续更是随着 GV1 开度的增加而减小。

至于 HO₂ 的消耗途径,Conaire 中主要为

R13(HO₂ + OH = H₂O + O₂),Williams 机理中主要为 R15/R16,从数值上看,R15/R16 的过程变化率之和也与 Conaire 机理 R13 基本相等,其值均随 GV1 开度增加而减小。Williams 机理 R15 和 R16 过程变化率在初期十分接近,但随着 GV1 开度增加,R16 下降得更快,即 R15 作用逐渐变大。Williams 机理的 R11(HO₂ + H = OH + OH),R12(HO₂ + H = H₂ + O₂)和 R14(HO₂ + O = OH + O₂)分别对应 Conaire 机理 R11、R10 和 R12,Williams 机理 R13 为新增反应,这些反应都是消耗 HO₂ 的反应,且随 GV1 增大而增大。在燃烧后期,这些途径的过程变化率已与燃烧初期占主导地位的 R15/R16 的变化率持平甚至反超,例如 Williams 机理在熄火前的 11.7s 时刻,R11~R14 过程变化率之和为 48.74 mol/(m³ · s),而 R15 与 R16 之和则为 28.86 mol/(m³ · s),约为前者一半;而在点火初期,R15 与 R16 之和为前者的数十倍。其中,新增的 R13 在后期的过程变化率相比点火初期增加了约 7 倍。在 H₂O₂ 的生成与消耗方面,Williams 的 R18/R19(2HO₂ = H₂O₂ + O₂)对应 Conaire 的 R14/R15 的逆反应,其中 Williams 的 R18 与 Conaire 的 -R14(-R14 表示 R14 的逆反应,后文同理)的变化趋势和数值基本一样,但 Williams 的 R19 的过程变化率在后期可达到 Conaire 的 -R15 的 3 倍左右,反映了两种机理中 H₂O₂ 消耗途径的不同。

从过程变化率来看,Evans 机理与前两个机理有很大区别,如图 5(i)~图 5(l)所示。Evans

机理不仅包含 Conaire 机理中关于 H_2 、 O_2 、 H_2O 、 OH 的重组与分解,还包括与氮元素相关的 HNO_2 、 NO_2 和 HO_2 的分解与重组,但缺少 H_2O_2 相关反应。该机理中的分解与重组反应 R1~R6 基本只在点火段有一定作用,在之后的稳定段和熄火段,其过程变化率都趋近于零。图 5(j) 所示的氢氧链式反应中,OH 的主要生成反应 R8 ($\text{H}_2\text{O} + \text{O} = \text{OH} + \text{OH}$) 和 R10 ($\text{O}_2 + \text{H} = \text{OH} + \text{O}$) 以及次要生成反应 R11 ($\text{H}_2 + \text{O} = \text{OH} + \text{H}$) 相对于 Conaire 机理的对应基元反应,其变化趋势一样,但主要反应的 R_p 值要小 10% 以上。图 5(k) 所示的 HO_2 生成与消耗反应中,Evans 机理 R7 ($\text{HO}_2 + \text{M} = \text{H} + \text{O}_2 + \text{M}$) 的逆反应对应于 Conaire 机理 R9,是 HO_2 生成的主要途径,在各个稳定段,其 R_p 保持在 $-130 \text{ mol}/(\text{m}^3 \cdot \text{s})$ 附近,并没有像 Conaire 机理一样随 GV1 开度增加而显著上升,只是有所震荡。将图 6(c) 与图 6(a)、图 6(b) 对比可知,Evans 机理的 HO_2 生成与消耗反应在点火初期都特别剧烈(尤其是 HO_2 的主要生成途径—R7),在点火后期则逐渐稳定至和前两个机理相近的数值。此外,R17 ($\text{H}_2\text{O} + \text{O}_2 = \text{OH} + \text{HO}_2$) 的逆反应对应于 Conaire 机理的 R13,两者也有较大差异。该反应是 Evans 机理中 HO_2 消耗的主要途径,在燃烧初期其 R_p 绝对值与 Conaire 机理 R13 十分接近,都在 $120 \text{ mol}/(\text{m}^3 \cdot \text{s})$ 左右,但震荡要更剧烈,且随 GV1 开度增加下降地要快得多。在 Conaire 机理中,R13 逐级降低到约 $30 \text{ mol}/(\text{m}^3 \cdot \text{s})$,随 GV1 再开大而熄火;而 Evans 机理中,—R17 则在 10.6 s 后由约 $110 \text{ mol}/(\text{m}^3 \cdot \text{s})$ 突降到约 $70 \text{ mol}/(\text{m}^3 \cdot \text{s})$,然后熄火。图 5(l) 显示氮相关反应在点火初期十分剧烈,之后基本趋近于零。总体来说,Evans 机理相对老旧,对于氢氧链式反应和 HO_2 相关反应的描述不如 Conaire 机理和 Williams 机理精确可靠,在点火阶段各基元反应都十分剧烈,但稳定燃烧时期温度下降更快;而在进入熄火阶段时,更是由于没有考虑 H_2O_2 相关反应导致误差更大,熄火更早,适用范围更窄。

4 结 论

1) 研究所基于的多场耦合管流系统仿真理论与模型体系有别于以往任何系统级仿真体系,可考虑多组分化学反应、组分扩散、变体积、变物性、流体轴向热传导、管壁传热、重力场和摩擦力影响等诸多因素。本文构建的通用反应机理接口

使得该体系对任意反应机理的融合从程序层面简化到机理文件层面,为后续开展更为复杂的碳氢燃料系统级多场耦合瞬变研究奠定了基础。

2) 3 种反应机理所得的燃烧温度计算结果均能与已经过试验验证的热力计算方法^[7]的计算结果符合良好,且能较好地反映点火与熄火的过程以及在燃烧过程中各个组分、各个基元反应变化的细节,但不同化学反应机理的适用范围宽窄和计算精度有所不同。随着空气流量增加,燃烧室温度逐渐降低,而温度越低,3 种机理的计算误差也越大。当温度降低至 1314 K 左右时,Conaire 机理计算温度误差为 1.20%,Williams 机理为 1.14%,略小于 Conaire 机理,而 Evans 机理的误差则已经达到 2.19%,且在下一次增大空气流量后熄火(1284 K),已无法进行更低温度工况的计算。当温度继续降低至 1222 K 左右时,Conaire 机理的误差已增大至 4.7%,且在下次增大空气流量后熄火(1200 K),无法进行更低温度工况的计算;而此时 Williams 机理的误差仅有 2.74%,仍能进行更低温度的计算,直至 1155.3 K 才熄火,体现出 Williams 机理相对于 Conaire 机理在适用范围和计算精度方面的明显优势。

3) 通过对不同温度、混合比下各基元反应剧烈程度、各组分形成渠道和消耗渠道的对比分析可知,是否考虑 H_2O_2 这一组分会对氢氧机理在富氧低温工况下的计算精度产生较大影响。Evans 机理虽然考虑的组分数和基元反应数大于 Conaire 机理和 Williams 机理,而且考虑了氮相关反应,但由于缺少低温下起关键作用的 H_2O_2 相关反应,其精度反而较差。在某些特定工况下,影响一套机理描述精度的是它是否包含特定组分,而不是机理所包含组分和反应的数目。在使用氢氧机理描述低温工况时,需选用包含 H_2O_2 相关反应的机理。

参考文献:

- [1] KARIMI H, NASSIRHARAND A, ZANJ A. Integration of modeling and simulation of warm pressurization and feed systems of liquid propulsion systems[J]. Acta Astronautica, 2011, 69(5/6): 258-265.
- [2] SMIRNOV N N, NIKITIN V F. Modeling and simulation of hydrogen combustion in engines[J]. International Journal of Hydrogen Energy, 2014, 39(2): 1122-1136.
- [3] CHAPMAN J W, LAVELLE T M, LITT J S, et al. A process for the creation of T-MATS propulsion system models from NPSS data[R]. AIAA-2014-3931, 2004.
- [4] HEATH C M. Characterization of swirl-Venturi lean di-

- rect injection designs for aviation gas turbine combustion [J]. Journal of Propulsion and Power, 2014, 30(5): 1334-1356.
- [5] KIM H J, KUMANO T, LIOU M S, et al. Flow simulation of supersonic inlet with bypass annular duct[J]. Journal of Propulsion and Power, 2011, 27(1): 29-39.
- [6] LEE K, NAM T, PERULLO C, et al. Reduced-order modeling of a high-fidelity propulsion system simulation[J]. AIAA Journal, 2011, 49(8): 1665-1682.
- [7] ALLISON D L, ALYANAK E J, BHAGAT N D. High fidelity, nonlinear, integrated nozzle installation effects for numerical propulsion system simulation[R]. AIAA-2015-0649, 2015.
- [8] BUNGARTZ H J, LINDNER F, MEHL M, et al. A plug-and-play coupling approach for parallel multi-field simulations[J]. Computational Mechanics, 2015, 55(6): 1119-1129.
- [9] 陈阳, 唐振宇, 蔡国飙, 等. 涡轮试验台燃烧装置建模与仿真: I 基于混合物分数的分区模型[J]. 推进技术, 2012, 33(6): 981-986.
CHEN Yang, TANG Zhenyu, CAI Guobiao, et al. Numerical modeling and simulation of turbine test rig combustion device: I partition model based on mixture fraction[J]. Journal of Propulsion Technology, 2012, 33(6): 981-986. (in Chinese)
- [10] CHEN Y, CAI G B, ZHANG Z P, et al. Multi-field coupling dynamic modeling and simulation of turbine test rig gas system[J]. Simulation Modelling Practice and Theory, 2014, 44(4): 95-118.
- [11] 陈阳, 蔡国飙, 马好东, 等. 涡轮试验台燃烧装置建模与仿真: II 仿真结果与分析[J]. 推进技术, 2013, 34(1): 115-123.
CHEN Yang, CAI Guobiao, MA Haodong, et al. Numerical modeling and simulation of turbine test rig combustion device: II simulation results and analysis[J]. Journal of Propulsion Technology, 2013, 34(1): 115-123. (in Chinese)
- [12] CHEN Y, WANG H S, XIA J X, et al. Dynamic modeling and simulation of an integral bipropellant propulsion double-valve combined test system[J]. Acta Astronautica, 2017, 133: 346-374.
- [13] CHEN Y, JIANG F, CAI G B, et al. A novel simulation theory and model system for multi-field coupling pipe-flow System[J]. Combustion Theory and Modeling, 2017, 21(5): 799-837.
- [14] 宋少云. 多场耦合问题的协同求解方法研究与应用[D]. 武汉: 华中科技大学, 2007.
SONG Shaoyun. Research and application of cooperative solution method for multi-field coupling problem[D]. Wuhan: Huazhong University of Science and Technology, 2007. (in Chinese)
- [15] KEYES D E, MCINNES L C, WOODWARD C, et al. Multiphysics simulations: challenges and opportunities[J]. International Journal of High Performance Computing Applications, 2012, 27(1): 4-83.
- [16] SANCHEZ A L, WILLIAMS F A. Recent advances in understanding of flammability characteristics of hydrogen[J]. Progress in Energy and Combustion Science, 2014, 41(6): 1-55.
- [17] CONAIRE M O, CURRAN H J, SIMMIE J M, et al. A comprehensive modeling study of hydrogen oxidation[J]. International Journal of Chemical Kinetics, 2004, 36(11): 603-622.
- [18] EVANS J S, SCHEXNAYDER C J, Jr. Influence of chemical kinetics and unmixedness on burning in supersonic hydrogen flames[J]. AIAA Journal, 1980, 18(2): 188-193.

(编辑: 王碧珺)