

喷管一维流场化学非平衡通用计算软件研制*

王大鹏, 蔡国飙

(北京航空航天大学 宇航学院, 北京 100083)

摘要: 研制的火箭发动机一维喷管非平衡流通用计算软件, 建立在一个统一的化学反应库之上。该通用计算软件可对推进剂元素为碳、氢、氧、氮、氟、氯的火箭发动机喷管进行一维化学非平衡流数值模拟。通过计算推进剂元素为氢、氧和碳、氢、氧、氮的喷管一维化学非平衡流, 得到了喷管流场的速度、温度、密度、压力及各组分的质量百分比等参数, 为工程设计提供了依据。

关键词: 反应动力学; 喷管气流; 非平衡流; 数值仿真; 仿真软件

中图分类号: V430 文献标识码: A 文章编号: 1001-4055 (2001) 04-0282-04

Chemical nonequilibrium general computational software design of nozzle one dimensional flow field

WANG Da-peng, CAI Guo-biao

(School of Astronautics, Beijing Univ. of Aeronautics and Astronautics, Beijing 100083, China)

Abstract: The general computational software of rocket engine one dimensional nozzle nonequilibrium flow, which is based on one unite chemical library, can simulate the flow field of rocket engine nozzle with the propellants consisted of carbon, hydrogen, oxygen, nitrogen, fluorine, and chlorine elements. By computing the nozzle flow field with the propellant elements of hydrogen, oxygen and carbon, hydrogen, oxygen, nitrogen, the fields of velocity, temperature, pressure and all species mass fraction were gotten. They can be referenced by designer.

Key words: Reaction kinetics; Nozzle flow; Nonequilibrium flow; Numerical simulation; Simulation software

1 引言

当化学系统特征松弛长度与系统空间的几何特征尺度相近时, 系统中存在着明显的驰豫过程, 这一过程的发生会导致能量的存在形式和分布发生变化, 从而影响了系统内其它物理参数的大小及分布, 由此造成的系统损失称为化学动力学损失。对于火箭发动机喷管一维流场的带化学反应的数值计算, 常见的方法有化学平衡计算、组分冻结计算, 这两种方法都忽略了系统中的化学动力学损失, 而对于大膨胀比的火箭发动机喷管, 其化学动力学的损失是显著的, 所以对喷管进行化学非平衡的流场计算能更好地反映喷管内的真实流动情况, 从而为设计提供可靠的依据。

化学非平衡计算一般都采用有限速率法的化学反应模型, 国外早在 20 世纪 60 年代就开展了对较多推进剂种类的喷管进行一维化学非平衡计算的工作, 在 80 年代又对其进行改进, 并朝通用化方向发展^[2]; 国内针对化学非平衡的计算大多都就某一类推进剂的火箭发动机进行模拟, 缺乏通用性和继承性。

本文所述的“喷管一维化学非平衡流通用计算软件”在结构上是以一个开放的化学反应库为基础, 可对化学库支持的各种类型推进剂的喷管进行一维化学非平衡流场计算, 本文分别对两种不同类型的液体火箭发动机喷管一维流场进行了模拟。

2 控制方程及数值方法

火箭发动机喷管内流动的气体成分非常复杂, 混

* 收稿日期: 2000-10-25; 修订日期: 2000-11-09。

作者简介: 王大鹏 (1975—), 男, 硕士生, 研究领域为航空宇航推进理论与工程。

合气体的性质,如气体常数、定压比热容、比热比等都随温度、组分浓度等因素的变化而变化。这里假设系统没有质量和能量损失、无粘性,混合气体为理想气体,其中气体组分的内部自由度(平动、转动和振动)处于平衡状态,控制方程如下:

连续方程 $\frac{d}{dx}(\rho u A) = 0$

动量方程 $\rho u \frac{du}{dx} + \frac{dp}{dx} = 0$

能量方程 $h + \frac{1}{2}u^2 = H_c$

状态方程 $p = \rho RT$

此处 $h = \sum_{i=1}^{N_s} C_i h_i$, $R = \sum_{i=1}^{N_s} C_i R_i$, $h = \int_0^T C_{pi} dT + h_{i0}$ 分别为

混气的焓、气体常数和组分的焓的表达式; $u, \rho, p, T, h, H_c, R, c_i, C_{pi}, R_i, A, x$ 分别代表混气的速度、密度、压力、温度、静焓、总焓、气体常数,组分的质量百分比、定压比热容、气体常数和喷管的截面积、轴向坐标。

本文计算时采用二阶精度的隐式积分法,考虑一般一阶齐次微分方程

$$\frac{dY_i}{dx} = f_i(x, Y_1, Y_2, \dots, Y_{N_s+3}),$$

$$i = 1, 2, \dots, N_s + 3$$

此处 Y_i 即混气的轴向速度 V 、混气密度 ρ 、混气温度 T 和组分质量百分比 C_k ; $N_s + 3$ 为变量总数; h 为每步积分的步长。假定该方程非奇异,并存在唯一解,在 x_{n+1} 点做泰勒展开并整理后得

$$\left| 1 - \frac{h_{n+1}(h_{n+1} + h_n)}{2h_{n+1} + h_n} \beta_{i,i,n} \right| K_{i,n+1} - \frac{h_{n+1}(h_{n+1} + h_n)}{2h_{n+1} + h_n} \sum_{j=1, j \neq i}^{N_s+3} \beta_{i,j,n} K_{j,n+1} = \frac{h_{n+1}^2}{(2h_{n+1} + h_n)h_n} K_{i,n} + \frac{h_{n+1}(h_{n+1} + h_n)}{2h_{n+1} + h_n} \cdot (f_{i,n} + \alpha_{i,n} h_{n+1}), i = 1, 2, \dots, N_s + 3 \quad (1)$$

此处: $f_{i,n} = \left. \frac{dY_i}{dx} \right|_{x_n}$, $\alpha_{i,n} = \left. \frac{\partial f_i}{\partial x} \right|_{x_n}$, $\beta_{i,j,n} = \left. \frac{\partial f_i}{\partial Y_j} \right|_{x_n}$,

积分增量 $K_{i,n+1} = Y_i(x_{n+1}) - Y_i(x_n)$, $K_{i,n} = Y_i(x_n) - Y_i(x_{n-1})$;

积分步长 $h_{n+1} = x_{n+1} - x_n$ 。

求解过程为:沿喷管轴向从喷管进口经喉部到喷管出口,通过高斯列主元素消去法解方程(1)得到变量的增量 $K_{i,n+1}$,下游变量参数 $Y_{i,n+1}$ 通过 $Y_i(x_{n+1}) = Y_i(x_n) + K_{i,n+1}$ 计算得到。

3 化学反应模型

本文采用有限化学反应速率的化学动力学模型,对于一个有 N_s 种化学组分构成,并发生 J 个基元可逆反应的化学反应系统,其反应方程可表示成

$$\sum_{i=1}^{N_s} v_{i,j} S_i \leftrightarrow \sum_{i=1}^{N_s} v'_{i,j} S_i, j = 1, 2, 3, \dots, J (J \text{ 表示可逆反应体系中基元反应的总数})$$

。式中 $v_{i,j}$ 和 $v'_{i,j}$ 分别是在第 j 个基元反应中处于反应式两边的第 i 种组分的化学当量系数, S_i 代表反应式中第 i 种化学组分。

每种基元反应的净生成率 X_j 为

$$X_j = \left[K_j \prod_{i=1} \left| \frac{\rho C_i}{M_i} \right|^{v_{i,j}} - \prod_{i=1} \left| \frac{\rho C_i}{M_i} \right|^{v'_{i,j}} \right] K_{B,j} L_j$$

式中 $K_j, K_{B,j}, L_j, M_i$ 分别为第 j 个基元反应的平衡常数,逆向反应速率,三体反应项和第 i 种组分的摩尔质量^[1,3,4]。

$K_j = e^{-\Delta F/R_o T}$, 此处: $\Delta F = \sum_{i=1}^f v'_{i,j} - \sum_{i=1}^f v_{i,j}$, R_o 为通用气体常数, T 为温度, F, f 分别为反应式自由能和组分自由能。

根据 Arrhenius 定律, $K_{B,j} = AT^{-N} e^{(-1000B/R_o T)}$, A, N, B 为常数^[1]。由化学动力学理论得,基元反应的正向反应速率为 $K_{F,j} = K_j K_{B,j}$ 。当基元反应为复合分解反应: $A + M \leftrightarrow B + C + M$ 时, $L_j = \sum_{i=1}^{N_s} m_{j,i} \left| \frac{\rho C_i}{M_i} \right|$,

$m_{j,i}$ 为反应比率系数^[1]; 当基元反应为二元交换反应: $A + B \leftrightarrow C + D$ 时, $L_j = 1$ 。各组分的生成率为

$$W_i = \sum_{j=1}^J W_{i,j} = \sum_{j=1}^J M_i (v'_{i,j} - v_{i,j}) X_j$$

4 软件特点及算例分析

本文编制的通用计算软件的特点是建立在一个可拓展的化学库基础上的计算软件,目前此化学库包含由 C, H, O, N, F, Cl 元素组成的 20 种组分,42 个反应式,根据需要可继续扩充此化学库。计算软件的结构简图如图 1 所示。

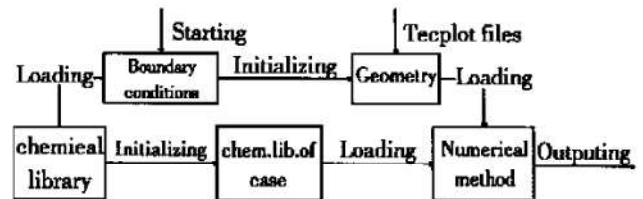


Fig. 1 Structure of computational codes

本软件的计算步骤为:通过边界条件模块给定所

选算例的化学反应参数(主要参数为算例的燃气组分),根据算例的燃气组分在化学库中选定存在的基元反应式(只有当一个反应式中的所有反应项在算例的燃气组分中存在时,此反应式才被选定)和组分的物性参数,初始化生成算例的化学库并加载到内核算法模块中;几何生成模块和 Tecplot 软件建立了接口,可处理由 Tecplot 生成的数据文件,并通过边界条件对几何生成模块进行初始化,生成喷管几何形状及相关参数,再加载到内核算法模块中;最后在内核算法模块中计算并输出。

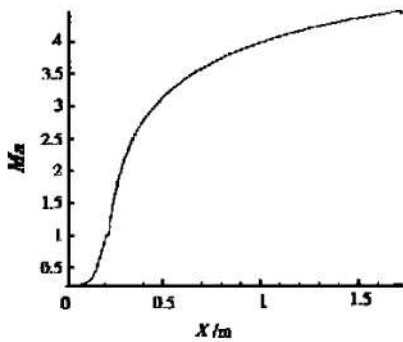


Fig. 2 Mach of nozzle

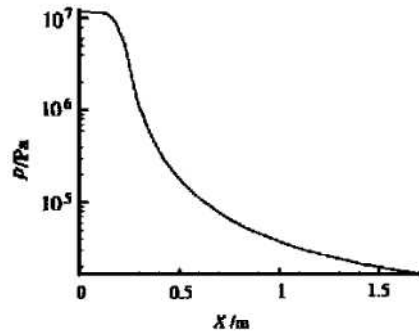


Fig. 3 Pressure of nozzle

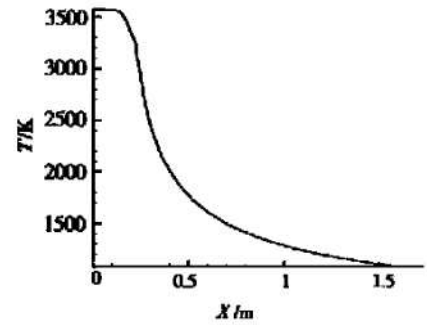
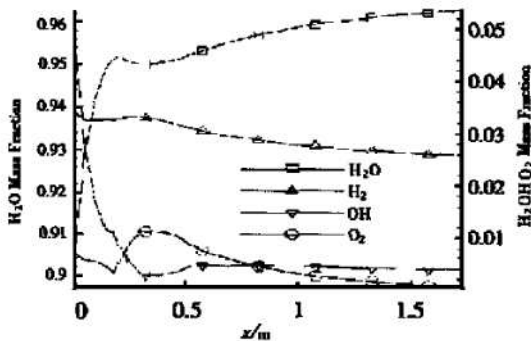


Fig. 4 Temperature of nozzle

由图 2~4 可看出,喷管的马赫数、压强、温度的变化规律符合拉瓦尔喷管的流动特性:温度沿轴向降低,热能转化为燃气的动能,马赫数增大,燃气沿喷管轴向由进口到出口不断膨胀,压力下降;由图 5 可看出各组分质量分数的分布符合化学动力学规律:随着温度的降低,朝反应放热方向进行的趋势增强,复合反应亦加强。在此推进剂系统中 H_2O 的生成为主要的放热反应。同时复合反应的增强有利于大分子的生成,所以 H_2O 的质量分数增大。

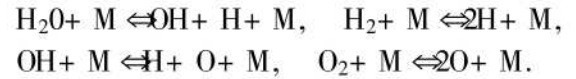
算例二:某型号火箭发动机喷管,推进剂为: $HNO_3-27/(CH_3)_2N_2H_2$, 化学反应模型采用的 11 组分 18 反应模型,如下:

Fig. 5 Mass fraction of H_2O, H_2, OH, O_2

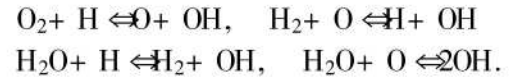
计算的边界条件为喷管入口的轴向速度、静温、静压、比热比、组分的质量百分比。

算例一:某型号火箭发动机喷管,推进剂为: LH_2/LO_2 , 化学反应模型采用的 6 组分 8 反应模型,如下:

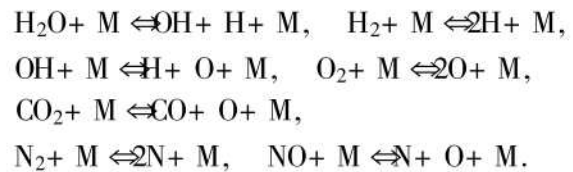
复合分解反应



二元交换反应



复合分解反应



二元交换反应

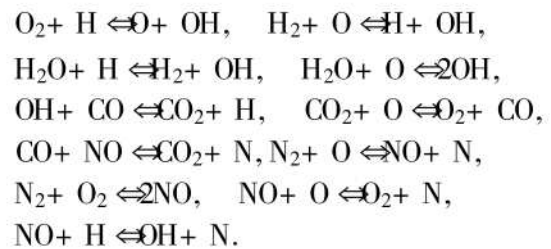


图 6~8 表明:喷管的温度、压力、马赫数的变化符合拉瓦尔喷管的流动特性:温度沿轴向降低,热能转化为燃气的动能,马赫数增大,燃气沿喷管轴向由进口到出口不断膨胀,压力下降;由图 9~11 可看出: H_2O, CO_2 的质量分数增大,因为在此系统中这两种物质的生成为主要的放热反应,这符合温度降低有利于放热反应进行的规律;另外,根据化学动力学理论,沿喷管流动方向复合反应的增强也是造成 H_2O, CO_2 这两种物质质量分数增多的原因。从图 12 看到 N_2 的质量分数几乎保持不变,这反映了 N_2 的惰性特点。

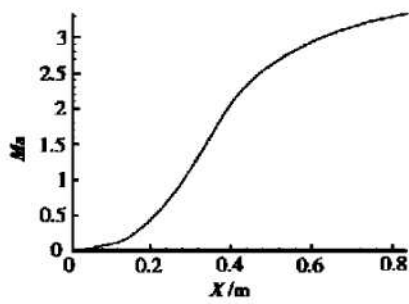


Fig. 6 Mach of nozzle

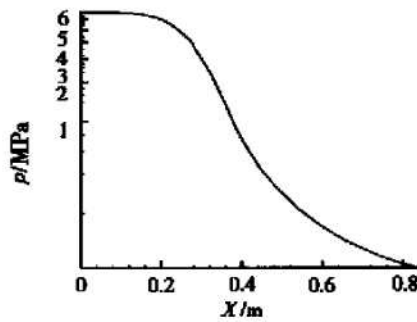


Fig. 7 Pressure of nozzle

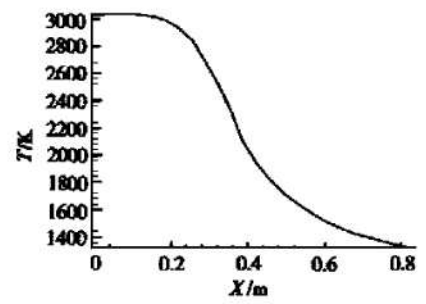


Fig. 8 Temperature of nozzle

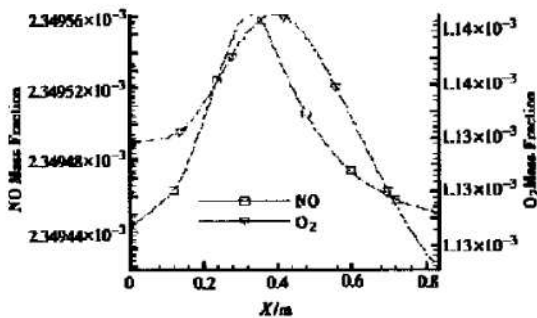


Fig. 9 Mass fraction of NO, O₂

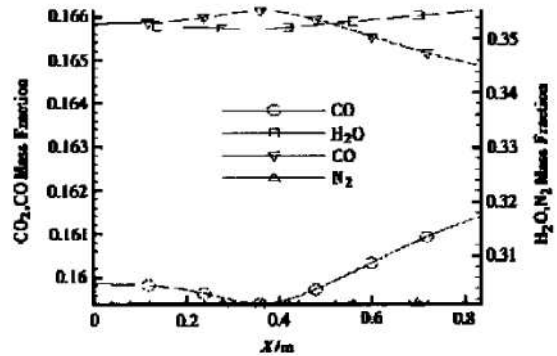


Fig. 10 Mass fraction of CO₂, CO, H₂O, N₂

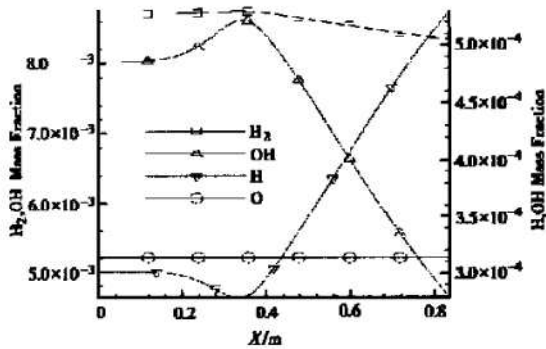


Fig. 11 Mass fraction of H₂, OH, H, O

5 结束语

通过对以上算例计算所得的压力、温度、马赫数、组分浓度百分比的结果分析,说明计算结果是合理的,证明了本软件求解的正确性和通用性。

参考文献:

- [1] Kliegel J R, Nickerson G R, Tyson T J, ODK ICRPG one-dimensional kinetic nozzle analysis computer program[R]. Interagency Chemical Rocket Propulsion Group, AD841-201, July 1968.
- [2] Nickerson G R, Dang L D, Coats D E, Engineering and programming manual[R]. Two-dimensional Kinetic Reference Computer Program, Software And Engineering Associates, Inc., Contract No. NAS8-35931, April 1985.
- [3] Uenishi K, Hampton, Northam G B, Three dimensional computations of transverse hydrogen jet combustion in a supersonic airstream[R], AIAA-87-0089.
- [4] 周力行. 燃烧理论和化学流体力学[M]. 北京: 科学出版社, 1986.
- [5] 张化照, 梁国柱, 王慧玉. 喷管化学反应流场的数值模拟[J]. 推进技术, 1998, 19 (5).

(编辑: 王居信)