

# 亚临界环境下煤油液滴燃烧特性仿真

吴海龙, 聂万胜, 郑直, 何博

(航天工程大学, 北京 101416)

**摘要:** 基于 PR 状态方程、液滴表面气液平衡、流体热物性高压修正以及详细化学反应机理, 建立了一维的全瞬态多组分液滴燃烧模型, 对 RP-3 煤油液滴在亚临界环境下的燃烧特性进行了数值仿真。研究表明: 在亚临界环境下, 煤油液滴的燃烧过程与纯蒸发过程差异很大, 煤油液滴表面各参数随时间的变化曲线在着火之后出现突变, 液滴寿命大大减小; 煤油液滴短暂蒸发之后着火燃烧, 火焰温度快速上升, 火焰半径逐渐增大, 液滴燃烧后期, 火焰半径减小, 液滴燃烧末期, 火焰温度垂直下降, 火焰半径减小为零。

**关键词:** 亚临界环境; 煤油液滴; 燃烧特性; 数值仿真; 详细化学反应机理

**本文引用格式:** 吴海龙, 聂万胜, 郑直, 等. 亚临界环境下煤油液滴燃烧特性仿真[J]. 兵器装备工程学报, 2019, 40(8): 180-184.

**Citation format:** WU Hailong, NIE Wansheng, ZHENG Zhi, et al. Numerical Investigation on Combustion Characteristic of Kerosene Droplet in Subcritical Environment[J]. Journal of Ordnance Equipment Engineering, 2019, 40(8): 180-184.

中图分类号: TJ763; V434

文献标识码: A

文章编号: 2096-2304(2019)08-0180-05

## Numerical Investigation on Combustion Characteristic of Kerosene Droplet in Subcritical Environment

WU Hailong, NIE Wansheng, ZHENG Zhi, HE Bo

(Aerospace Engineering University, Beijing 101416, China)

**Abstract:** Based on the PR state equation, gas-liquid equilibrium at droplet surface, the correction of thermal physical at high pressure and the detailed chemical reaction mechanism, it established a one-dimensional transient multicomponent droplet combustion model, and the combustion characteristic of RP-3 kerosene droplet under the subcritical conditions was researched by numerical simulation. The research shows that, in the subcritical environment, the combustion process of kerosene droplet is very different from that of pure evaporation process. The curve of the parameters on the kerosene droplet surface changes abruptly after ignition, and the droplet life is greatly reduced. After a briefly evaporation stage, the kerosene droplet ignites and burns, the flame temperature rises rapidly and the flame radius gradually increases. At the later stage of droplet combustion, the flame radius begins to decrease, and at the end stage of droplet combustion, the flame temperature drops vertically and the flame radius decreases to zero.

**Key words:** subcritical environment; kerosene droplet; combustion characteristic; numerical simulation; detailed chemical reaction mechanism

随着我国航天事业的发展, 对大推力火箭发动机的需求也更加紧迫。目前, 大推力火箭发动机主要以液氧/煤油火

箭发动机为主, 但随着火箭发动机推力的不断增大, 燃烧不稳定性问题也愈加严重。

收稿日期: 2019-01-13; 修回日期: 2019-02-16

基金项目: 国家自然科学基金项目(51876219)

作者简介: 吴海龙(1993—), 男, 硕士, 主要从事液滴蒸发燃烧仿真研究。

通讯作者: 聂万胜(1969—), 男, 博士, 教授, 主要从事液体火箭发动机研究。

液氧/煤油火箭发动机中,煤油经喷嘴的雾化作用喷入燃烧室形成煤油液滴,煤油液滴蒸发,形成蒸气并向外扩散,在扩散过程中与同时喷注出来并直接气化的氧气混合并发生化学反应转化为燃烧产物<sup>[1]</sup>。这个过程是火箭发动机燃烧室内整个燃烧过程的基础,也与燃烧稳定性问题息息相关。

对于单液滴的蒸发与燃烧的研究起源于1945年Spalding等建立的单液滴常压蒸发燃烧模型<sup>[2]</sup>。之后,人们分别从实验和仿真的角度开展了从静止环境到对流环境、从自然重力到微重力、从常压到高压环境下的单液滴的蒸发与燃烧特性的研究。但实验研究难度很大,很难真正达到实际发动机内部的压力和温度条件,实验一般采用挂滴和飞滴的方式,采用高速摄像机拍摄记录实验结果,能得到的数据有限,难以得到详细的液滴内部参数及液滴表面附件的参数变化。因此,人们开展了大量的仿真研究,仿真研究可以很好地弥补实验的不足,并有助于解释实验现象。

目前,液滴的蒸发与燃烧的仿真研究以单组分液滴为主,且主要针对液滴在氮气中的纯蒸发过程<sup>[3-5]</sup>,对液滴燃烧过程的研究很少,且以常压环境下单组分液滴燃烧过程为主<sup>[6-8]</sup>。因此,本研究针对RP-3煤油液滴在亚临界环境下的燃烧过程,建立了多组分液滴高压燃烧模型,对RP-3煤油液滴在亚临界环境下的燃烧特性进行研究。

## 1 液滴燃烧模型

由于实际的液氧/煤油火箭发动机中经雾化形成的液滴和液滴所处的环境都比较复杂,仿真计算无法完全复现实际工况,必须对实际工况进行简化:

- 1) 忽略液滴周围环境中气流流动及压力波动;
- 2) 忽略重力和自然对流影响;
- 3) 忽略液滴形变,认为液滴始终保持球形;
- 4) 忽略气相的Dufour、Soret效应及热辐射效应。

基于以上假设,建立了一维的亚临界环境下的全瞬态液滴蒸发燃烧模型。模型中综合考虑了以下因素:①气相与液相的能量传导和组分扩散;②气相化学反应引起的组分变化和能量源项;③高压环境下液滴表面气液平衡;④高压环境下气相主要组分在液相中的溶解;⑤高压环境下气相与液相流体热物理性质的压力修正等因素。

### 1.1 控制方程

气相控制方程:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho_g}{\partial t} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \rho_g v_g) &= 0 \\ \frac{\partial (\rho_g Y_i)}{\partial t} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial (r^2 \rho_g v_g Y_i)}{\partial r} &= \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \rho_g D_g \frac{\partial Y_i}{\partial r}) + \dot{\omega}_i \\ \frac{\partial (\rho_g C_{pg} T_g)}{\partial t} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial (r^2 \rho_g v_g C_{pg} T_g)}{\partial r} &= \\ \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \lambda_g \frac{\partial T_g}{\partial r}) - \sum_i \dot{\omega}_i h_i(T) & \end{aligned}$$

液相控制方程:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho_l}{\partial t} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \rho_l v_l) &= 0 \\ \frac{\partial (\rho_l Y_i)}{\partial t} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial (r^2 \rho_l v_l Y_i)}{\partial r} &= \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \rho_l D_l \frac{\partial Y_i}{\partial r}) \\ \frac{\partial (\rho_l C_{pl} T_l)}{\partial t} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial (r^2 \rho_l v_l C_{pl} T_l)}{\partial r} &= \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \lambda_l \frac{\partial T_l}{\partial r}) \end{aligned}$$

式中: $r$ 代表物理平面中距离液滴中心的距离(m); $t$ 代表时间(s); $Y_i$ 代表气相和液相中各组分的质量分数; $\rho_g$ 、 $\rho_l$ 分别代表气相和液相密度( $\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$ ); $T_g$ 、 $T_l$ 分别代表气相和液相温度(K); $v_g$ 、 $v_l$ 分别代表气相和液相速度( $\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$ ); $D_g$ 、 $D_l$ 分别代表气相和液相自扩散系数( $\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ ); $C_{pg}$ 、 $C_{pl}$ 分别代表气相和液相定压比热容( $\text{J} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ ); $\lambda_g$ 、 $\lambda_l$ 分别代表气相和液相导热系数( $\text{W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ ); $\dot{\omega}_i$ 为气相化学反应产生的组分*i*的净生成速率, $h_i(T)$ 为气相组分*i*在温度*T*下的焓。

### 1.2 初始条件及边界条件

#### 1) 初始条件

在 $t=0$ 时刻,

$$\begin{aligned} T_l &= T_l^0 & T_g &= T_g^0 \\ P_g &= P_l = P^0 & Y_i &= Y_i^0 \end{aligned}$$

其中: $T_l^0$ 为液滴初始温度; $T_g^0$ 和 $P^0$ 分别为初始环境温度和压力; $Y_i^0$ 为组分初始条件,在液滴内部只含燃料组分,不含环境气体组分,在气相中只含环境气体组分,不含燃料蒸气组分。

#### 2) 边界条件

在气相的无穷远处,满足以下边界条件:

$$T_{g,\infty} = T_g^0 \quad Y_{i,\infty} = Y_i^0$$

在液滴中心处,满足以下边界条件:

$$\frac{\partial T}{\partial r} = 0 \quad \frac{\partial Y_i}{\partial r} = 0 \quad \frac{\partial v}{\partial r} = 0$$

在液滴表面处,满足以下边界条件:

$$\begin{aligned} T_{g,s} &= T_{l,s} = T_s & \sum_i Y_{ig,s} &= 1 \\ \sum_i Y_{il,s} &= 1 & \phi_i^g X_i^l &= \phi_i^l X_i^g \end{aligned}$$

其中: $T_{g,s}$ 、 $T_{l,s}$ 分别为液滴表面气相侧和液相侧的温度; $T_s$ 为液滴表面温度; $Y_{ig,s}$ 、 $Y_{il,s}$ 分别为组分*i*在气相侧和液相侧的质量分数; $\phi_i^g$ 、 $\phi_i^l$ 分别为液滴表面气相侧和液相侧各组分的逸度系数,通过Peng-Robinson<sup>[9]</sup>状态方程求得。由于在液滴燃烧过程的仿真中采用了详细的化学反应机理,气相组分较多(超过一百种组分),但大多数组分均为中间产物,存在时间短,且含量较低( $Y_i < 0.01$ ),因此只考虑几种气相主要组分( $\text{O}_2$ ,  $\text{CO}_2$ ,  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{N}_2$ )在液相中的溶解。

### 1.3 数值计算方法

由于在液滴蒸发燃烧过程中液滴半径不断减小,液滴表面内移,如果直接对控制方程进行离散和求解的话,就需要在每个时间步长计算完成之后重新划分计算网格,为了避免

这种情况的发生,利用坐标转换将物理平面转换到计算平面中,使液滴表面始终固定在计算坐标值为1的位置处。

计算域网格的划分采用非均匀网格,对液滴表面附近的气相侧和液相侧网格进行加密处理,在保证液滴表面附近参数的计算精度的同时降低总网格数,减少计算时常。

控制方程的离散方法采用有限体积法,空间上采用混合格式离散,时间上采用绝对稳定的全隐式时间积分方案,控制容积边界取为相邻网格节点的中心处。

在液滴燃烧过程的仿真中,气相场的求解中存在化学反应源项,直接耦合求解的话对时间步长的要求很严( $dt < 1.0e-10$ ),且求解过程中稳定性差,容易发散。因此,采用算子分裂的思想,将流动与化学反应耦合算子( $H_{dt}$ )分裂成为流动运算算子( $H_{dt}^f$ )和化学反应运算算子( $H_{dt}^c$ )两个独立的算子。

在一个时间步长  $dt$  上,采用下式分三步完成流动和化学反应的积分:

$$H_{dt}(Y_i^n, T^n) = H_{dt/2}^c H_{dt/2}^f H_{dt/2}^c \rightarrow (Y_i^{n+1}, T^{n+1})$$

$H_{dt}^f$  流动运算算子在  $dt$  的时间步长上采用全隐式时间积分方案。 $H_{dt}^c$  为一个逐点的化学反应运算算子,在每个气相网格点求解化学反应动力学刚性常微分方程组。这种刚性方程组需要专门的 ODE 求解器进行求解。本研究采用 BzzOde<sup>[10]</sup> 中的 BzzOdeStiff 子模块进行刚性常微分方程组的求解。

#### 1.4 煤油替代物的选取及热物性计算

RP-3 煤油是一种组分十分复杂的混合物,目前还无法实现对这种复杂混合物液滴的蒸发燃烧过程直接进行仿真计算。因此必须选取一种或者几种物质作为其替代物进行仿真研究。采用单一组分替代煤油虽然简单但忽略了煤油是一种混合物的重要特性,而采用过多组分又会造成仿真计算难以实现。考虑到 RP-3 的主要成分为烷烃和苯系物,因此本文采用文献[11]中提出的两组分的 RP-3 煤油替代物:(质量分数)80% 正癸烷和 20% 1,2,4-三甲苯,同时也采用其中的化学反应机理,该套机理总共包括 131 种组分,1020 步基元反应。

准确的热物性计算模型是液滴燃烧模型准确描述液滴燃烧过程的基础,且当环境压力接近煤油临界压力时,流体的热物性与常压环境下的差异很大,因此必须建立一套高压环境下的流体热物性的计算模型。经过对文献中同一热物性的不同计算模型的对比、挑选,建立了一整套高压环境下的流体热物性的计算模型<sup>[12-16]</sup>,其有关特性如表 1 所示。

#### 1.5 模型验证

由于目前缺乏 RP-3 煤油液滴在微重力环境下燃烧的准确数据,因此,与文献[17]中对正辛烷液滴在微重力环境下的点火燃烧过程进行对比,验证亚临界环境下液滴燃烧模型仿真计算结果的有效性。实验中环境压力选取为 1.52 MPa,环境气体为空气(质量分数  $Y_{O_2} = 0.232, Y_{N_2} = 0.768$ ),环境温度 300 K,采用电弧放电点火器对液滴进行点火,并用

高速摄像机拍摄记录火焰半径的变化情况。在仿真的过程中电弧放电点火器的点火过程的模拟采用文献[6]提出的在液滴周围的气相域中设置最高温度为 2 000 K 的梯形高温区域的方法。

表 1 高压环境下流体热物性计算模型的有关特性

热物理性质	气相	液相
实际气体和液体的 PVT 关系	Peng-Robinson 状态方程	Peng-Robinson 状态方程
定压比热容	理想气体定压比热 + 偏差函数修正	理想气体定压比热 + 偏差函数修正
热传导系数	Misic-Thodos 关联式 + Stiel-Thodos 高压修正	Chung + Stiel-Thodos 高压修正
自扩散系数	Lee 方法	Lee 方法
混合物临界性质	Prausnitz 方法	Prausnitz 方法

图 1 为高压环境下正辛烷液滴燃烧的实验与仿真结果,其中  $t_f$  为液滴寿命。可以看出,液滴燃烧火焰半径的整体变化趋势与实验基本一致,但仿真结果中无量纲火焰半径小于实验测得的无量纲火焰半径,且存在较大差距,其存在差距的原因如下:① 在仿真中火焰半径取在温度最高点所在的位置,而在实验中的火焰半径是通过测量由高速摄像机拍摄所得图片中火焰最外侧的直径来获得的,并不完全是温度最高处所在位置,这就导致实验测得的火焰半径大于仿真结果的火焰半径。② 实验中液滴悬挂在 SiC 纤维丝上面,其传热效果对液滴燃烧过程有影响,特别是对后半段影响较大,造成仿真结果与实验结果在后半段差距变大。

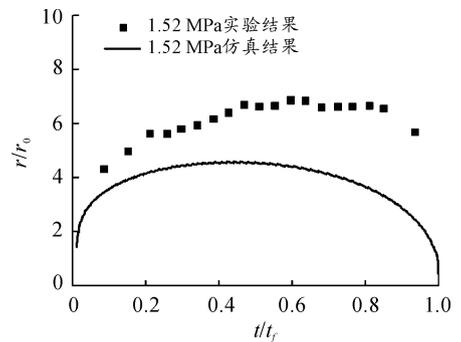


图 1 仿真与实验结果

## 2 RP-3 液滴燃烧仿真结果分析

本文中液滴初始直径  $d_0 = 100 \mu\text{m}$ ,液滴初始温度  $T_0 = 300 \text{K}$ 。液滴燃烧过程中环境气体为空气,液滴纯蒸发过程中环境气体为氮气,认为气相最高温度达到 2 000 K 时液滴着火。

在亚临界环境下,液滴的燃烧过程并不是液滴直接燃

烧,而是液滴先通过蒸发作用产生燃料蒸气,燃料蒸气与气相组分混合,当气相组分和温度达到着火的条件时,燃料蒸气与气相中的氧气发生化学反应,形成火焰,开始燃烧。因此,液滴的燃烧过程可以看作一个边蒸发边燃烧的过程。在

亚临界环境下的煤油液滴的蒸发结果的基础上分析亚临界环境下的煤油液滴的燃烧过程, $P=20\text{ atm}$ ,  $T=1\ 200\text{ K}$  在亚临界空气环境下的燃烧和亚临界氮气环境下的蒸发性能如图 2 所示。

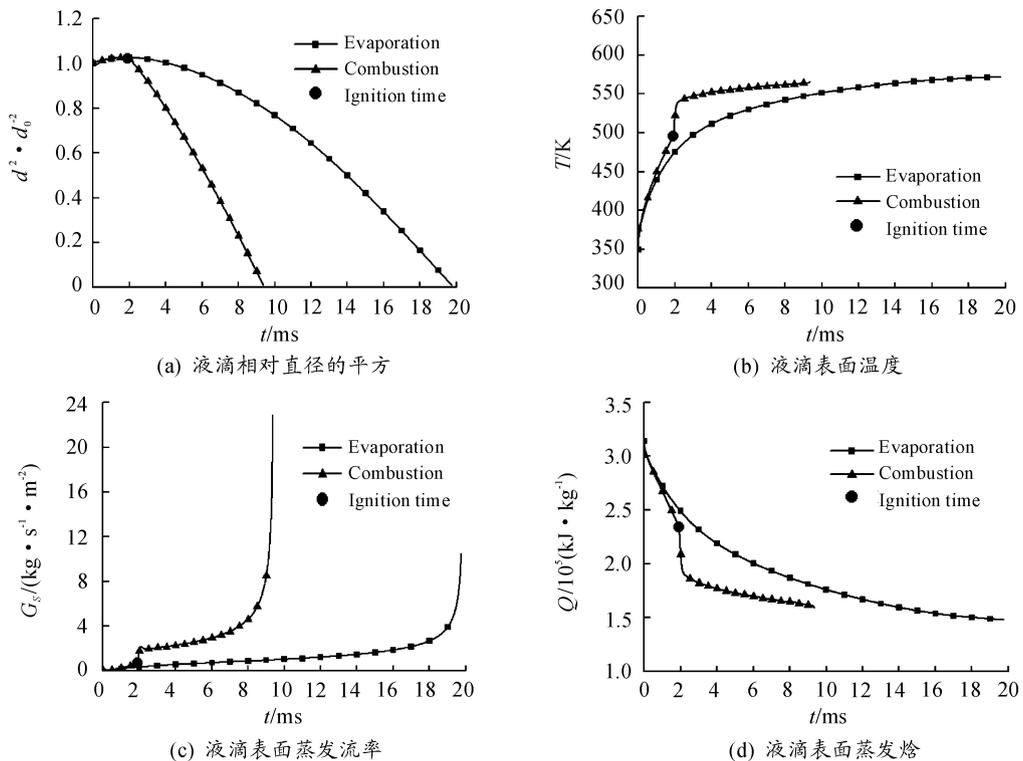


图 2  $P=20\text{ atm}$ ,  $T=1\ 200\text{ K}$  煤油液滴蒸发与燃烧性能

将液滴在氮气环境下的蒸发与液滴在空气环境下的燃烧过程进行对比。可以看出,在着火时刻之前,液滴燃烧过程各基本特性随时间变化曲线与液滴蒸发过程各基本特性随时间变化曲线基本一致。其中,液滴燃烧过程的液滴相对直径平方随时间增大,且与液滴蒸发过程的液滴相对直径平方随时间变化曲线重合。液滴燃烧过程的液滴表面温度随时间快速平滑上升,与液滴蒸发过程的液滴表面温度随时间变化曲线并不重合,但差别不大。液滴燃烧过程的液滴表面蒸发流率随时间缓慢上升,与液滴蒸发过程的液滴表面蒸发流率随时间变化曲线基本重合。液滴燃烧过程的液滴表面蒸发焓随时间快速下降,与液滴蒸发过程的液滴表面蒸发焓随时间变化曲线不重合,但差别不大。

在着火时刻之后,液滴燃烧过程各基本特性随时间变化曲线与液滴蒸发过程各基本特性随时间变化曲线差别很大,且都在着火点之后发生突变。其中,液滴燃烧过程的液滴相对直径平方随时间直线下降。液滴燃烧过程的液滴表面温度先突然增大,之后又急转为平,缓慢增加,但增幅不大,且最终达到的最高温度与蒸发过程基本一样。液滴燃烧过程的液滴表面蒸发流率同样先突然增大,之后又急转为平,缓慢增加,但最后又出现突增,且最终的最大蒸发流率远远大于蒸发过程的最大蒸发流率。液滴燃烧过程的液滴表面蒸

发焓同样先突然减小,之后又急转为平,缓慢降低,且最终的蒸发焓与蒸发过程最终的蒸发焓基本一样。

以上液滴燃烧过程与蒸发过程中各基本特性表现出来的差异主要是因为着火时刻之前,气相中的未发生化学反应,液滴处于一个纯蒸发的阶段,与液滴在氮气环境的蒸发基本一样;在着火时刻之后,在液滴周围的气相场中发生了燃料蒸气与氧气发生化学反应,瞬间产生大量的热量,大大提高了液滴周围气相场温度,同时由于热传导的作用,大量的热量传输到液滴表面,液滴表面温度瞬间增大至液滴沸点,液滴进入沸腾状态,当液滴处于沸腾状态时,液滴表面温度基本不变。同时,由于燃烧对液滴表面温度的影响,液滴表面蒸发流率和液滴表面蒸发焓也相应发生了变化。另外,相同环境压力和温度环境下,液滴燃烧的液滴寿命只有液滴纯蒸发液滴寿命的一半左右。这主要是因为化学反应所产生的大量热大大加速了液滴蒸发过程,与纯蒸发过程中提高环境温度的作用类似。

图 3 为  $P=20\text{ atm}$ ,  $T=1\ 200\text{ K}$  煤油液滴燃烧火焰半径和火焰温度。可以看出,液滴着火点出现在 3 倍的液滴初始半径位置,且无量纲火焰半径在着火之后先逐渐增大,后又逐渐减小,且减小的速率越来越快。在液滴燃烧即将结束时,无量纲火焰半径几乎呈垂直下降趋势。火焰温度液滴在

着火之后快速上升至最高温度,之后基本保持不变,在燃烧即将结束时,火焰温度开始下降,无量纲火焰半径减小为零,且在无量纲火焰半径减小为零之前,火焰温度已经开始快速下降。

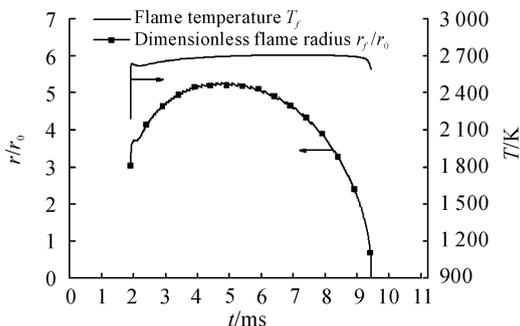


图3  $P=20$  atm,  $T=1\ 200$  K 煤油液滴燃烧  
火焰半径和火焰温度

### 3 结论

1) 在亚临界环境下,煤油液滴的燃烧过程与纯蒸发过程差异很大,煤油液滴的直径、表面温度、表面蒸发流率和表面蒸发焓等参数随时间的变化曲线在着火之后出现突变,且由于液滴燃烧产生的热量大大减小了液滴寿命。

2) 在亚临界环境下,煤油液滴在蒸发一段时间之后着火燃烧,着火之后,火焰温度快速上升,火焰半径逐渐增大,之后随着液滴直径逐渐减小,火焰半径也开始减小,在液滴寿命的末期,火焰温度先开始垂直下降,之后火焰半径减小为零,液滴燃烧完毕。

### 参考文献:

- [1] 杨涛,方丁酉,唐乾刚. 火箭发动机燃烧原理[M]. 长沙:国防科技大学出版社,2008:170-259.
- [2] 庄逢辰. 液体火箭发动机喷雾燃烧的理论、模型及应用[M]. 长沙:国防科技大学出版社,1995:78.
- [3] 袁嵩,于亮,赵汝岩. 气体介质中 JP-10 液滴蒸发数值模拟研究[J]. 兵器装备工程学报,2016,37(11):124-127.
- [4] BALAJI B, RAGHAVAN V, RAMAMURTHI K, et al. A Numerical Study of Evaporation Characteristics of Spherical N-Dodecane Droplets in High Pressure Nitrogen Environment[J]. Physics of Fluids,2011,23(6):063601.
- [5] 李鹏飞,雷凡培,王凯,等. 煤油液滴高压蒸发特性[J]. 航空学报,2018,39(3):121764.
- [6] CUOCI A, MEHL M, BUZZI F G. Autoignition and Burning Rates of Fuel Droplets under Microgravity[J]. Combustion and Flame,2005,143:211-226.
- [7] STAUCH R, LIPP S, MAAS U. Detailed Numerical Simulations of the Autoignition of Single N-Heptane Droplets in air[J]. Combustion and Flame,2006,145:533-542.
- [8] GIULIO B, EPAMINONDAS M. Spontaneous Ignition of Isolated N-Heptane Droplets at Low, Intermediate, and High Ambient Temperatures from a Mixture-Fraction Perspective[J]. Combustion and Flame,2015,162:2544-2560.
- [9] RUSZALO R. Modeling of Ignition of Liquid Hydrocarbon Droplets at High Pressure[D]. Ottawa: The University of Ottawa,1990.
- [10] BUZZI F, BZZMATH G. Numerical Libraries in C++[EB/OL]. [2015-05-21]. <http://www.chem.polimi.it/homes/gbuzzi>.
- [11] 王慧汝. RP-3 航空煤油详细化学反应机理初步研究[J]. 燃气涡轮试验与研究,2015,28(5):19-23.
- [12] RUSZALO R. Modeling of Ignition of Liquid Hydrocarbon Droplets at High Pressure[D]. Ottawa: The University of Ottawa,1990.
- [13] POLING B E, PRAUSNITZ J M, O'CONNELL J P. The Properties of Gases and Liquids, 5th Edition[M]. New York: McGraw-Hill,2001.
- [14] 童景山,李敬. 流体热物理性质的计算[M]. 北京:清华大学出版社,1982.
- [15] LEE H, THODOS G. Generalized Treatment of Self-Diffusivity for the Gaseous and Liquid States of Fluids[J]. Industrial & Engineering Chemistry Fundamentals,1983,22(1):17-26.
- [16] CHUEH P L, PRAUSNITZ J M. Vapor-Liquid Equilibria at High Pressures: Calculation of Critical Temperatures, Volumes and Pressures of Nonpolar Mixtures[J]. AIChE. Journal,1967,13(6):1107-1113.
- [17] SATO, TOKYO, TSUE, et al. Effects of Natural Convection on High-pressure Droplet Combustion[J]. Combustion and Flame,1990,82(2):142-150.

(责任编辑 唐定国)