

# 基于OpenFOAM的真实流体模型库 及均相求解器开发<sup>\*</sup>

李鹏飞<sup>1</sup>, 雷凡培<sup>2</sup>, 周立新<sup>1</sup>

(1. 西安航天动力研究所 液体火箭发动机技术重点实验室, 陕西 西安 710100;

2. 中国船舶工业集团有限公司, 北京 100044)

**摘要:** 为了正确认识高压环境下的流体非理想性特征, 及其对于低温射流喷雾过程的影响作用, 将多种不同真实流体模型写入到开源CFD程序OpenFOAM仿真平台中, 编译形成具有广泛通用性的真实流体热物理模型库; 并将高压下真实流体特征的影响引入到压力修正算法中; 开发出适用于描述超临界环境下低温流体流动过程的均相求解器。对高压下流体热物理性质的非理想性, 以及超临界环境下的低温液氮射流喷注过程进行研究。结果表明: 高压下的真实流体效应主要体现在低温区域, 本文所建立的模型库可以在任意热力学状态范围内正确预测流体热物性; 基于此模型库所开发的均相求解器可正确预测超临界环境下低温射流的详细流动特征和结构, 而理想气体模型则会大幅低估射流核心区密度分布, 中心线上误差高达68.9%; 综合考虑计算精度和效率, PR EoS及相关模型更适合于这类超临界流动问题的求解; 低温射流跨临界喷注中局部区域所发生的虚假沸腾现象会导致射流温升速率降低、体积膨胀速率加快; 射流核心区压缩因子明显 $<1$ , 在数值仿真时必须考虑高压环境下的真实流体效应。

**关键词:** 真实流体; 热物理性质; 超临界环境; 低温射流; 流动特性; 均相求解器

中图分类号: V434

文献标识码: A

文章编号: 1001-4055 (2020) 08-1773-12

DOI: 10.13675/j.cnki.tjjs.190186

## Development of Real-Fluid Model Libraries and Homogeneous Solver Based on OpenFOAM

LI Peng-fei<sup>1</sup>, LEI Fan-pei<sup>2</sup>, ZHOU Li-xin<sup>1</sup>

(1. Science and Technology Laboratory on Liquid Rocket Engine, Xi'an Aerospace Propulsion Institute, Xi'an 710100, China;

2. China State Shipbuilding Corporation Limited, Beijing 100044, China)

**Abstract:** In order to understand the non-ideality of fluid under high-pressure conditions and their effects on spray process of cryogenic jet, several different real-fluid models were implemented into open source CFD toolbox OpenFOAM, which was then compiled to form generalized real-fluid thermo-physical model libraries. In addition, the effects of non-linearity of these models were introduced to pressure-corrector algorithm. Thus, a homogeneous solver which was appropriate to characterize flow of cryogenic fluid at supercritical condition was developed. Non-ideality of thermo-physical properties under high-pressure conditions and injection of cryogenic liquid nitrogen jet under supercritical condition were investigated. The results indicated that the effects of real-fluid characteristics are primarily exhibited in the high-pressure, low-temperature regions, and the model libraries developed in this study could correctly predict thermo-physical properties under any thermodynamic condi-

<sup>\*</sup> 收稿日期: 2019-03-28; 修订日期: 2019-06-24。

通讯作者: 李鹏飞, 博士生, 研究领域为液体火箭发动机喷雾燃烧与传热冷却。E-mail: lipf200283@163.com

引用格式: 李鹏飞, 雷凡培, 周立新. 基于OpenFOAM的真实流体模型库及均相求解器开发[J]. 推进技术, 2020, 41(8): 1773-1784. (LI Peng-fei, LEI Fan-pei, ZHOU Li-xin. Development of Real-Fluid Model Libraries and Homogeneous Solver Based on OpenFOAM[J]. *Journal of Propulsion Technology*, 2020, 41(8): 1773-1784.)

tions. The newly developed solver based on these libraries could correctly reveal the flow characteristic and structures of cryogenic jet under supercritical condition, whereas the ideal gas model would largely underestimate the density in core region of jet, the error on centerline is up to 68.9%. The PR EoS together with the dependent models behave relatively superior to other model packages based on the comprehensive comparison of the computational accuracy and efficiency. The pseudo-boiling phenomenon in local region during trans-critical injection of cryogenic jet would result in decrease of temperature raising rate and increase of volume expansion rate, and the compressibility factor in core region of jet is remarkably less than 1, consequently, the real-fluid effects under high-pressure conditions must be considered during simulation.

**Key words:** Real-fluid; Thermo-physical properties; Supercritical conditions; Cryogenic jet; Flow characteristic; Homogeneous solver

## 1 引言

为了获得更高的性能和效率,目前的大推力液体火箭发动机工作压力普遍较高,远高于氧和煤油等常用推进剂临界压力。一系列试验研究已经清楚地表明,超临界环境下喷雾、混合、燃烧过程中的物理现象和机制与亚临界压力下的有很大不同,尤其是针对液氧这类低温推进剂。Mayer等<sup>[1-4]</sup>根据单组分低温液氮射流、液氮/氢气同轴剪切射流、液氧与氢气或甲烷的同轴剪切喷注燃烧等大量试验,发现超临界环境下的低温射流不会再发生类似于低压下的雾化破碎和液滴燃烧过程,此时从射流表面会发展出条纹状结构,并随着混合和燃烧过程迅速溶解于环境气体中。并通过对射流密度和温度分布、液核长度、射流扩张角等参数的测量<sup>[2-3]</sup>,分析了环境条件和初始喷注条件对射流发展过程的影响<sup>[4]</sup>。同时,Chehroudi等<sup>[5-8]</sup>也开展了大量低温射流冷态喷注试验研究。同样发现随着室压从亚临界增加到超临界,低温液体喷射由液体喷雾状转变为湍流稠密气态射流状。并通过对剪切层增长率、液核长度等参数的测量,首次提出了一个基于唯象论的跨临界射流增长率模型<sup>[5-6]</sup>。另外,为了能正确认识超临界压力下低温射流对声场振荡的敏感性特征与发动机燃烧不稳定性的关系,Chehroudi等<sup>[7]</sup>、Davis等<sup>[8]</sup>重点针对存在外部声场激励的条件,分析了不同室压下压力振荡对低温射流液核长度和扩张角及进一步对于掺混过程的影响。

数值研究方面,由于超临界压力下的流动和燃烧过程与低压下的有本质区别,导致低压下的模拟方法也将不再有效。因此,近年来针对液体火箭发动机超临界压力下低温推进剂喷雾燃烧的数值计算方法逐渐转为基于真实流体模型的均相方法。此时除了传统的封闭性问题之外,对超临界环境下的流

动进行仿真时还必须解决两个新问题:(1)流体热物性在临界点和虚假沸点附近的剧烈变化会对数值求解带来很大刚性;(2)真实流体模型的非线性特征对于计算稳定性的影响。Zong等<sup>[9-10]</sup>对超临界环境下的低温射流冷态喷注、液氧喷雾燃烧开展了详细数值研究,分析了低温射流表面的大密度梯度对剪切层不稳定性发展的影响,以及低温推进剂燃烧组织方式及火焰动态特性。Terashima等<sup>[11]</sup>针对超临界条件下低温射流表面的大梯度变化对于流场求解中数值稳定性的影响,提出了一种使用高阶紧致差分格式及局部人工耗散的高精度数值方法。除此之外,文献[12-15]同样是通过数值计算分析了超临界环境下的低温射流详细流动特征,分别讨论了不同状态方程、湍流模型、数值格式等对于计算结果的影响,以及初始喷注条件对于射流发展过程的影响。文献[15-18]针对低温液氧的跨临界燃烧火焰结构及动态特性开展了详细数值研究,分析了超临界环境下的质量输运及其对于燃烧速率的影响<sup>[16]</sup>、液氧跨临界转变对于火焰结构的影响<sup>[17]</sup>、跨临界火焰结构与湍流结构的相互作用、液氧初始温度对火焰结构、释热速率以及熄火特性的影响等<sup>[18]</sup>。

除了燃烧装置内超临界环境下的喷雾燃烧过程之外,再生冷却通道中的跨临界传热也正成为近年来液体火箭发动机超临界问题的研究重点之一。尤其是针对液氧甲烷发动机,跨临界传热过程中由于流体热物性剧烈变化所引起的传热恶化现象会对湍流传热特性带来显著影响<sup>[19-20]</sup>。

文献[14, 21-22]基于OpenFOAM所做的超临界环境下低温射流喷注数值仿真所采用的真实流体模型比较单一,难以扩展用于其它不同类型的流体。而本文的主要目的是针对液体火箭发动机超临界环境下的流动和燃烧过程,将多种具有不同适用性的真实流体模型写入到OpenFOAM开源CFD仿真平台

上,建立一套适用于超临界环境下各类问题研究的通用真实流体热物理模型库。在此基础上,将高压下真实流体特征的影响引入到压力修正算法中,开发出适用于描述低温流体流动过程的均相求解器。分别通过与 NIST (National Institute of Standards and Technology) 数据库以及相应低温射流试验数据的对比,验证本文所开发模型库及求解器的正确性,并认识超临界环境下的低温射流流动特征。

## 2 数值模型及求解方法

### 2.1 控制方程

针对可压缩、单组分流体流动的控制方程组为

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_j)}{\partial x_j} = 0 \quad (1)$$

$$\frac{\partial(\rho u_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_j u_i)}{\partial x_j} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} \quad (2)$$

$$\frac{\partial(\rho e)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_j e)}{\partial x_j} = -\frac{\partial(p u_j)}{\partial x_j} + \frac{\partial(\tau_{ij} u_i)}{\partial x_j} - \frac{\partial q_j}{\partial x_j} \quad (3)$$

式中  $\rho, u, e$  分别表示密度、速度和内能,  $\tau_{ij}$  和  $q_j$  分别为粘性应力张量和热通量。

### 2.2 湍流模型

目前相关的试验<sup>[2,6]</sup>及数值仿真<sup>[9,23]</sup>研究已表明,超临界压力下的流体热物性大梯度变化会影响到局部湍流结构的发展,常用的低压下湍流模型并不完全适合于描述超临界压力下湍流混合层中大尺度各向异性等特征。因此,应该充分考虑流体热力学状态的影响,对现有的湍流模型进行适当改进,但现阶段

针对该问题的研究还很少,并未发展出专门针对超临界流动的湍流模型<sup>[12,23-24]</sup>。而且相关研究通过对不同模型计算结果的对比,认为针对超临界流动的数值仿真中,选择合适的真实流体模型比湍流模型更重要,因为相比于湍流模型的影响,湍流结构更依赖于所采用的状态方程,现有的标准  $k-\varepsilon$  湍流模型可基本满足对超临界流动重要特征的正确预测<sup>[13,17]</sup>。因此,考虑到本文研究重点在于模型库及求解器的开发,所以在后续流场仿真中将采用标准  $k-\varepsilon$  湍流模型。

### 2.3 真实流体模型

#### 2.3.1 真实流体状态方程

目前常用的真实流体状态方程主要分为立方型和非解析型两大类。由于不同方程对于各类流体的精度有所不同<sup>[25]</sup>,所以为了能够实现后续所开发模型库具有广泛通用性,这里分别将 SRK, PR, RK-PR 等 3 种不同立方型状态方程(EoS),以及非解析型的 BWR 状态方程均写入到 OpenFOAM 模型库中。

首先,各立方型状态方程可以写成如下通用形式

$$p = \frac{RT}{V - b} - \frac{a\alpha(T)}{(V + \delta_1 b)(V + \delta_2 b)} \quad (4)$$

式中  $V$  为摩尔体积  $V = M/\rho$ ,  $R$  为通用气体常数。参数  $a\alpha(T)$  和  $b$  均为相对于理想气体状态方程所做的高压修正。方程(4)中的各参数及表达式因各状态方程而不同,具体参考表 1。

Table 1 Parameters of cubic EoS

|             | SRK EoS <sup>[26]</sup>                      | PR EoS <sup>[26]</sup>                      | RK-PR EoS <sup>[27]</sup>                                                                                                                                                          |
|-------------|----------------------------------------------|---------------------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| $\delta_1$  | 1                                            | $1 + \sqrt{2}$                              | $d_1 + d_2(d_3 - 1.168Z_c)^{d_4} + d_5(d_3 - 1.168Z_c)^{d_6}$                                                                                                                      |
| $\delta_2$  | 0                                            | $1 - \sqrt{2}$                              | $\frac{1 - \delta_1}{1 + \delta_1}$                                                                                                                                                |
| $a$         | $0.42748 \frac{(RT_c)^2}{p_c}$               | $0.457235 \frac{(RT_c)^2}{p_c}$             | $\frac{3y^2 + 3yd + d^2 + d - 1}{(3y + d - 1)^2} \cdot \frac{(RT_c)^2}{p_c}$                                                                                                       |
| $b$         | $0.08664 \frac{RT_c}{p_c}$                   | $0.077796 \frac{RT_c}{p_c}$                 | $\frac{1}{3y + d - 1} \cdot \frac{RT_c}{p_c}$<br>$d = (1 + \delta_1^2)/(1 + \delta_1)$<br>$y = 1 + \left[2(1 + \delta_1)\right]^{1/3} + \left(\frac{4}{1 + \delta_1}\right)^{1/3}$ |
| $\alpha(T)$ | $\left[1 + f_\omega(1 - T_r^{0.5})\right]^2$ |                                             | $\left(\frac{3}{2 + T_r}\right)^k$                                                                                                                                                 |
| $f_\omega$  | $0.48508 + 1.5517\omega - 0.15613\omega^2$   | $0.37464 + 1.54226\omega - 0.26992\omega^2$ | $k = (1.168Z_c A_1 + A_0)\omega^2 + (1.168Z_c B_1 + B_0)\omega + (1.168Z_c C_1 + C_0)$                                                                                             |

表 1 中的  $T_c, p_c, Z_c$  和  $\omega$  分别代表临界温度、临界压力、临界压缩因子和偏心因子,  $T_r$  表示对比温度, 表达式为

$$T_r = T/T_c \quad (5)$$

其次, 32 项系数的 BWR 状态方程表达式为<sup>[28]</sup>

$$p = \sum_{n=1}^9 a_n(T) \rho^n + \sum_{n=10}^{15} a_n(T) \rho^{2n-17} e^{-\rho^2} \quad (6)$$

式中  $a_n(T)$  为温度的函数,  $r=0.0096$ 。由于该方程最初是针对甲烷而建立, 目前已通过大量实验拟合出用于甲烷系数  $a_n(T)$  计算的 32 项常数。因此, 采用 BWR 方程可直接精确获得甲烷密度。但对于其它物质, 由于缺乏方程系数, 需要借助于对比态原理 (ECS)<sup>[28]</sup>。

$$\begin{cases} T_0 = T_a / f_{a,0} \\ \rho_0 = \rho_a / h_{a,0} \end{cases} \quad (7)$$

式中, 下脚标  $a$  和  $0$  分别表示待求物质和参考物质甲烷, 下文中下脚标  $a$  和  $0$  表示相同意义。对比态参数  $f_{a,0}$  和  $h_{a,0}$  具体计算方法参考文献[28]。

### 2.3.2 热力学性质

在理想气体性质的基础上, 通过偏离函数引入高压修正, 可以获得高压条件下的流体热力学性质。由于 OpenFOAM 中的能量方程以内能或焓作为求解变量, 所以根据偏离函数给出高压条件下的内能和焓<sup>[26]</sup>, 关系式为

$$U(T, p) = U^0(T) + \int_{\infty}^V \left[ T \left( \frac{\partial p}{\partial T} \right)_V - p \right] dV \quad (8)$$

$$\begin{aligned} H(T, p) = H^0(T) + \\ \int_{\infty}^V \left[ T \left( \frac{\partial p}{\partial T} \right)_V - p \right] dV + RT(Z - 1) \end{aligned} \quad (9)$$

类似地, 根据偏离函数和热力学基本关系式, 可进一步获得高压条件下的定容比热和定压比热, 即

$$C_v(T, p) = C_v^0(T) + T \int_{\infty}^V \left( \frac{\partial^2 p}{\partial T^2} \right)_V dV \quad (10)$$

$$\begin{aligned} C_p(T, p) = C_p^0(T) + \\ T \int_{\infty}^V \left( \frac{\partial^2 p}{\partial T^2} \right)_V dV - T \frac{(\partial p / \partial T)_V^2}{(\partial p / \partial V)_T} - R \end{aligned} \quad (11)$$

以上各式中的上角标  $0$  均表示理想气体状态, 各偏导数根据所选择的方程来计算。

### 2.3.3 输运性质——粘度

考虑到不同模型的计算精度、效率以及适用性, 针对流体输运性质的计算, 分别将 Chung 方法和 Ely-Hanley 对比态方法写入到 OpenFOAM 模型库中。

首先, Chung 方法计算动力粘度的表达式为

$$\eta = \left[ \frac{(T^*)^{0.5}}{\Omega_v} F_c \left( \frac{1}{G_2} + E_6 y \right) + \eta^{**} \right] \cdot \frac{36.344 (M \cdot T_c)^{0.5}}{V_c^{2/3}} \quad (12)$$

式中各参数具体意义和计算方法参考文献[29]。

其次, 基于对比态原理的 Ely-Hanley 方法在计算流体粘度时同样是将甲烷作为参考物。其表达式为<sup>[28]</sup>

$$\eta_a(\rho_a, T_a) = \eta_0(\rho_0, T_0) \cdot F_\eta \quad (13)$$

式中  $\eta_a(\rho_a, T_a)$  和  $\eta_0(\rho_0, T_0)$  分别为待求流体在实际状态  $(\rho_a, T_a)$ , 以及参考流体甲烷在当量状态参数  $(\rho_0, T_0)$  下的粘度。比例参数  $F_\eta$  为

$$F_\eta = \left( \frac{M_a}{M_0} \right)^{1/2} \cdot f_{a,0}^{1/2} \cdot h_{a,0}^{-2/3} \quad (14)$$

式中  $M_a$  和  $M_0$  分别为待求流体和参考流体甲烷的摩尔质量, 对比参数  $f_{a,0}$  和  $h_{a,0}$  可直接由式(7)计算。

### 2.3.4 输运性质——导热率

导热率的计算方法与粘度类似。采用 Chung 方法的高压下导热率计算式为

$$\lambda = \frac{31.2 \mu^0 \cdot \psi}{M} (G_2^{-1} + B_6 y) + q B_7 y^2 T_r^{0.5} G_2 \quad (15)$$

式中各参数具体意义和计算方法参考文献[29]。基于对比态原理的 Ely-Hanley 方法计算导热率表达式为

$$\lambda = \lambda^{**}(\rho_a, T_a) + \lambda''(T_a) \quad (16)$$

式中第一部分表示来源于分子碰撞或分子平动的能量传递, 其计算方法采用与粘度类似的对比态方法, 即

$$\lambda_a^{**}(\rho_a, T_a) = \lambda_0^{**}(\rho_0, T_0) F_\lambda X_\lambda \quad (17)$$

式中  $\lambda_a^{**}(\rho_a, T_a)$  和  $\lambda_0^{**}(\rho_0, T_0)$  分别为待求流体在实际状态以及参考流体甲烷在当量状态参数下由于分子碰撞而引起的导热率。比例参数  $F_\lambda$  为

$$F_\lambda = \left( \frac{M_0}{M_a} \right)^{1/2} \cdot f_{a,0}^{1/2} \cdot h_{a,0}^{-2/3} \quad (18)$$

式中  $f_{a,0}, h_{a,0}$  计算方法与粘度计算中相同。  $X_\lambda$  为修正系数。

式(16)中第二部分  $\lambda''(T_a)$  表示源于内部自由度引起的导热率, 具体计算方法参考文献[30]。

## 2.4 数值求解方法

上述所介绍的目前关于超临界喷雾燃烧的数值研究中, 大多采用的是密度基数值求解方法, 该方法对高速可压流具有很好的适用性, 但将其用于低速

可压流时会存在较强的刚性,必须借助于预处理方法来抑制数值不稳定性,导致计算量大幅增加。因此,本文在开发均相求解器时将以 OpenFOAM 中的 PIMPLE 压力基半隐式算法为基础。其基本思想是:在各时间步之间采用 PISO 无迭代算法进行时间步推进;在每个时间步内可看作是一种稳态问题的求解,所以采用 SIMPLE 算法进行迭代,直到取得本时间步内的较为精确的收敛解。这样,由于每个时间步的计算精度较高,可采用较大的时间步来进行时间推进。其计算流程如图 1 所示。

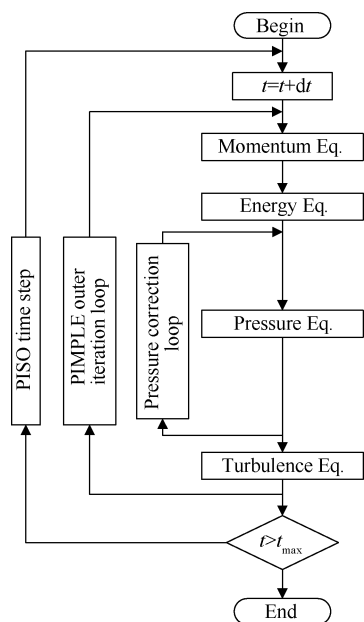


Fig. 1 Calculation flowchart of Pimple algorithm in OpenFOAM

上述压力修正算法的核心是根据动量方程和连续方程构造出压力修正方程,参考 OpenFOAM 源代码,可将压力修正方程写为

$$\frac{\partial}{\partial t}(\psi \cdot p) + \nabla \cdot (\rho \cdot HbyA_p^*) - \nabla \cdot \left( \rho \cdot \frac{1}{A_p} \nabla p^* \right) = 0 \quad (19)$$

式中  $\psi$  为绝热可压缩性,定义为

$$\psi = \frac{\rho}{p} \quad (20)$$

$HbyA_p^*$  为动量方程离散后根据节点系数和源项所定义的新变量,  $A_p$  为中心节点系数,  $p^*$  为修正后的压力。

虽然压力基算法已成功应用于可压缩流动,但针对本文所研究的高压超临界环境,还需要解决由于真实流体模型的非线性特征对于计算收敛性带来的较大影响。参考 OpenFOAM 的 PIMPLE 算法源代码,

对于温度场以及比热、可压缩性等热物性的计算均通过能量方程中的函数“thermo.correct()”来完成。因此,在求解完能量方程获得所有热物性之后,下一步的压力修正内迭代循环中所有热物性将保持不变。针对低压下的理想气体假设,该方法是合理的,因为方程(19)中只包含有一个热力学变量  $\psi$ , 根据理想气体状态方程  $p = \rho R_g T$ , 可将其写为

$$\psi = \frac{1}{R_g T} \quad (21)$$

式中  $R_g$  为气体常数。可以看出,  $\psi$  与压力是独立的。因此,在整个压力修正迭代循环中保持其不变不会影响到压力修正过程。

然而针对高压下所采用的真实流体模型,上述方法会严重影响收敛性。因为高压下的状态方程必须考虑压缩因子  $Z$ , 即

$$p = Z \rho R_g T \quad (22)$$

此时,  $\psi$  将会被写为

$$\psi = \frac{1}{Z R_g T} \quad (23)$$

式中  $Z$  表示真实气体与理想气体的偏离程度,与温度和压力均有关,即

$$Z = Z(p, T) \quad (24)$$

可以看到,高压条件下的  $\psi$  与压力并不是独立的,所以必须在修正压力的同时对  $\psi$  进行更新。否则热力学非一致性将强烈影响到压力修正循环的稳定性和收敛性。因此,本文所做的改进是在压力修正迭代的每一步中将热物性的更新也考虑在内,即把包含热物性计算的能量方程也放在压力修正内迭代循环中,如图 2 所示。

## 2.5 真实流体热物理模型库开发

由于不同真实流体模型对于各种类型推进剂的精度有所不同,所以为了建立一套具有广泛通用性的流体热物理性质计算方法,并能够适用于超临界环境下的各类流动和燃烧问题,参考 OpenFOAM 原始模型库及相应的源代码结构,首先,将 2.3 节中的各模型分别写为相应的模型类,并按类型嵌入到热物理模型类继承链中。其次,按照 OpenFOAM 的程序逻辑,将新写入的模型类与原有其它模型类相结合,组建形成各种新的热物理模型包,如图 3 所示。最终,编译创建出新的真实流体热物理模型库“librealfluidSpecie.so”和“librealfluidThermophysicalModels.so”,如图 4 所示。

## 2.6 均相求解器开发

基于本文新创建的模型类,并结合 2.4 节中对原

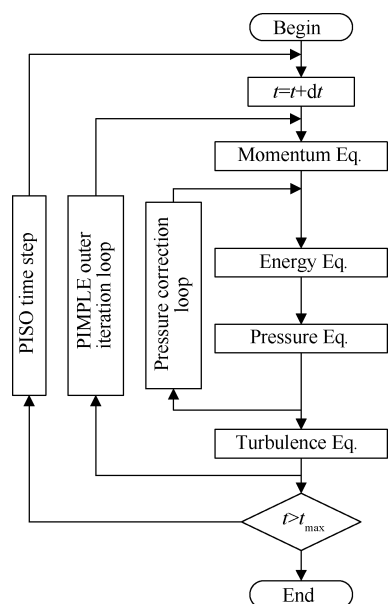


Fig. 2 Calculation flowchart of improved Pimple algorithm for real-fluid

```

makeThermo
(
    psiThermo,
    hePsiThermo,
    pureMixture,
    ChungTransport,
    sensibleEnthalpy,
    SRKjanafThermo,
    SRKGas,
    specie
);

```

Fig. 3 Physical model package in OpenFOAM

始 Pimple 算法的改进,可开发出适用于各类超临界流动和燃烧问题研究的不同求解器,如图 4 所示。当求解器创建成功之后,在针对具体问题开展流场仿

真时,只需综合考虑各种模型精度和效率,在算例的字典文件 thermophysicalProperties 中、子字典文件“thermotype”内的关键字 equationOfState, thermo, transport 后输入所要选择的模型,则可完成模型调用,如图 5 所示。

考虑到本文后续将结合 DLR 的低温液氮喷注试验对上述模型库及数值求解方法进行初步验证,所以这里将首先开发出均相求解器 realfluidPimpleFoam 来进行相应的数值仿真研究。

### 3 计算结果分析

#### 3.1 流体热物理性质计算及分析

由于氮和氧的物性参数比较接近,目前针对低温推进剂的冷态试验研究均采用氮作为氧的代替物。同时,作为后续液氮喷注过程数值仿真的基础,本文首先将采用上述热物理模型库中的各方法,详细计算氮在任意热力学状态下的热物性,分析高压下的真实流体特征及其与低压下理想气体性质的差异,并验证各模型的精度及适用性。

图 6 给出了不同状态方程计算的氮密度及其与 NIST 数据的对比。结果表明,与低压下密度曲线会在饱和点处出现间断的现象有本质不同,超临界压力下的密度曲线表现出光滑的趋势,不会出现气液共存的状态点,而且随着压力升高,密度曲线的梯度逐渐减小。详细对比不同方程计算结果,理想气体状态方程由于未考虑压缩因子,会在高压、低温区域产生明显错误。相比较之,上述各立方型状态方程,以及基于 BWR 状态方程的对比态方法均可以在包括

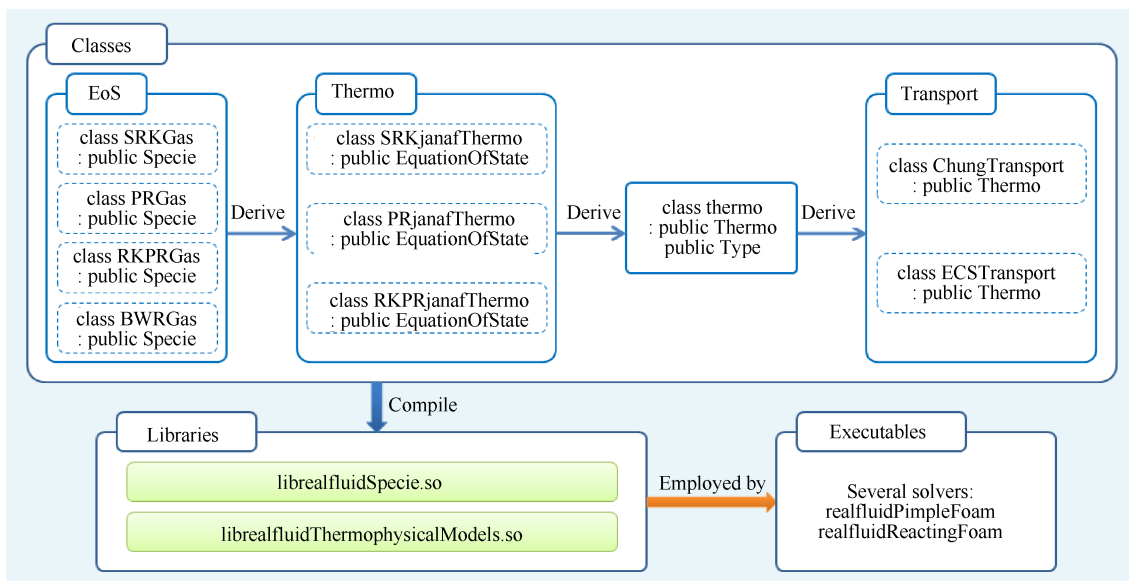


Fig. 4 Development of class libraries and solvers in OpenFOAM

```
thermoType
{
    type            hePsiThermo;
    mixture          pureMixture;
    transport        Chung;
    thermo           RKPRjanaf;
    equationOfState  RKPRGas;
    specie           specie;
    energy           sensibleInternalEnergy;
}
```

Fig. 5 Sub-dictionary of thermo-physical properties in OpenFOAM case

亚临界、超临界的任意范围内获得较高的计算精度。其中, PR EoS 仅在温度较低区域会小幅低估密度值。

图 7 和图 8 分别给出了基于不同状态方程的定压比热和焓计算结果及其与 NIST 数据的对比。结果

表明, 基于理想气体模型计算的定压比热和焓均与温度呈近似线性关系, 与高压下的实际值存在较大偏差, 无法说明在低温区域压力变化所产生的巨大影响。而偏离函数中由于引入了高压修正, 可以正确预测出密度大梯度变化区域热力学性质随温度的剧烈变化, 并始终与 NIST 数据吻合较好。特别注意到, 在略高于氮临界压力 (3.4MPa) 的 5MPa 条件下, 热力学性质对于温度的变化非常敏感, 尤其在 120K~150K 内, 定压比热先急剧上升后急剧下降, 并在 134K 附近处达到峰值, 这意味着此时即使吸收大量热量, 也不会有温度的明显变化, 而只会发生体积的迅速膨胀, 图 6 中此处的密度大梯度变化正好与之相对应。由于这种现象类似于亚临界条件下的沸腾过

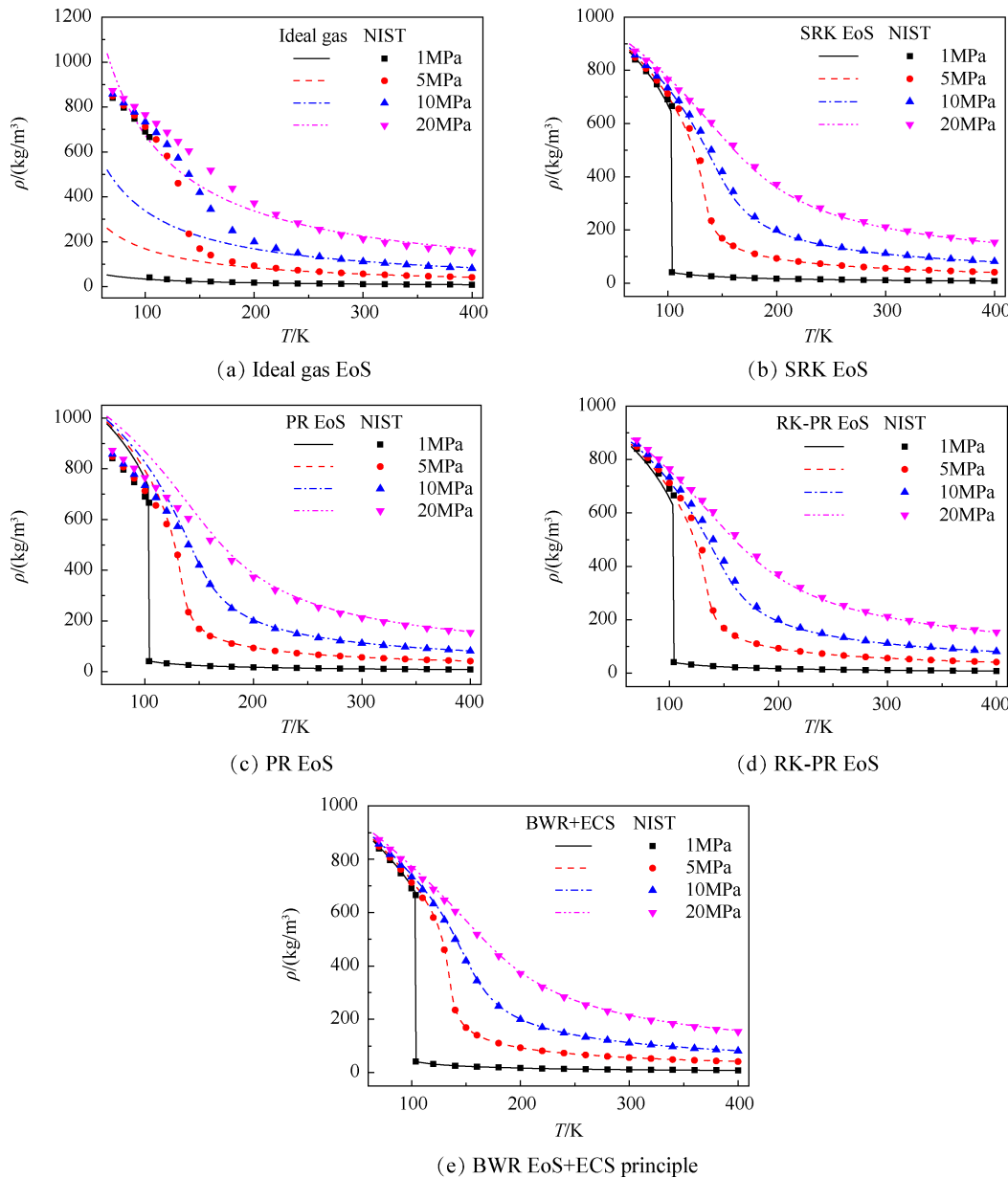
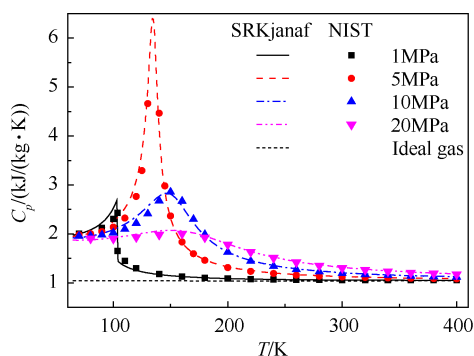
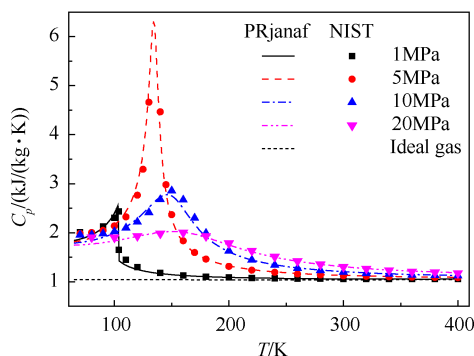


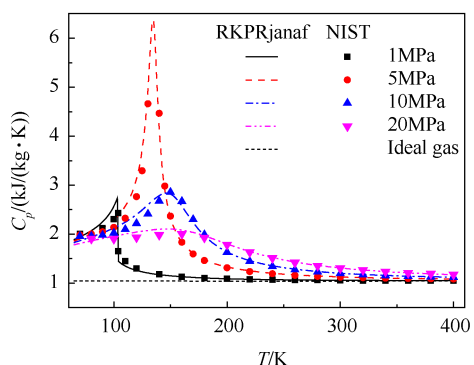
Fig. 6 Density of N<sub>2</sub> versus temperature for different pressure based on different EoS



(a) Based on SRK EoS



(b) Based on PR EoS

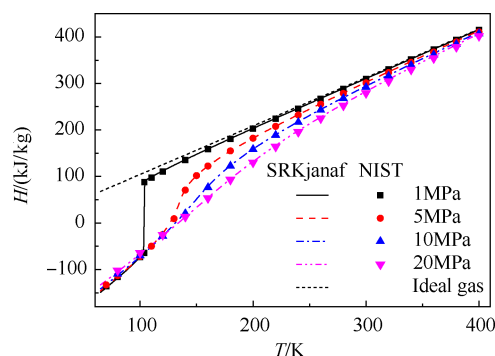


(c) Based on RK-PR EoS

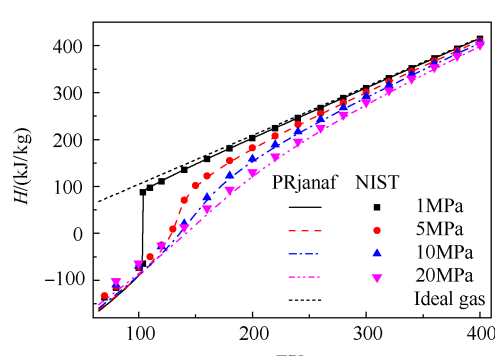
Fig. 7 Constant-pressure specific heat of  $N_2$  versus temperature for different pressure based on cubic EoS

程,所以在跨临界流动中将其称为“虚假沸腾”现象,相应的温度称为“虚假沸点  $T^{vb}$ ”,其对应着给定压力下定压比热达到最大值的温度。对比基于不同立方型状态方程的计算结果,发现虽然不同状态方程在预测密度时会表现出一定偏差,但对于定压比热和焓的预测均未出现明显偏差。

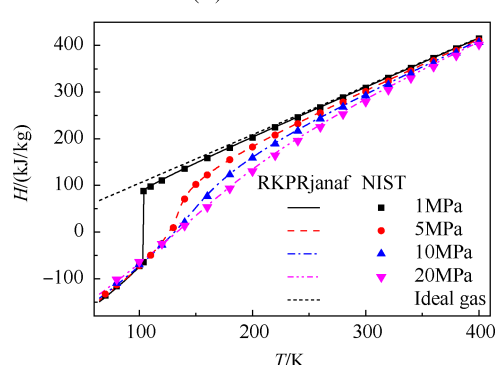
图 9 和 10 分别给出了采用 Chung 方法和 Ely-Hanley 对比态方法计算的输运性质及其与 NIST 数据的对比。需要强调的是,Chung 方法的精度很大程度上依赖于密度值。因此,在采用合适的状态方程获得精确的密度之后,采用 Chung 方法可以正确预测出氮的粘度和导热率。类似地,Ely-Hanley 方法同样可以获得较为精确的计算结果。但上述两种方法对于



(a) Based on SRK EoS



(b) Based on PR EoS



(c) Based on RK-PR EoS

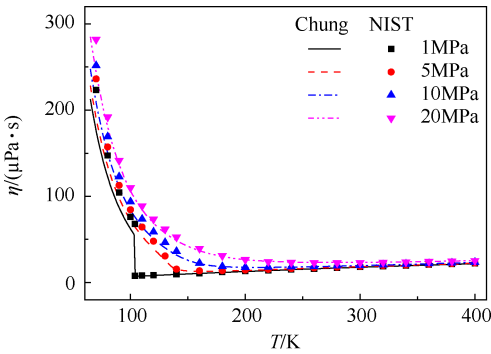
Fig. 8 Enthalpy of  $N_2$  versus temperature for different pressure based on cubic EoS

导热率的计算精度均略低于粘度,其原因为导热过程的物理机制比较复杂,同时包含来源于分子碰撞以及内部自由度的两部分能量传递。

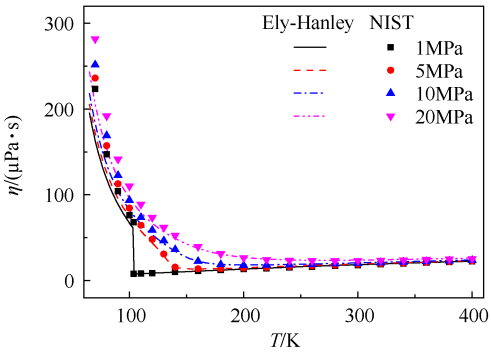
综合上述各物性计算结果可以看到,高压下的真实流体特征对于流体物性的影响主要体现在低温区域,而在高温区域则与理想气体模型偏差不大。因此,在描述超临界环境下的低温流体流动与燃烧问题时,必须采用合适的模型来说明高压、低温区域的真实流体特征。

### 3.2 低温射流喷注过程数值仿真及分析

为了验证上文所开发的均相求解器,结合 DLR 的 RCM-1 低温液氮喷注试验进行数值模拟。试验中将液氮通过单个圆形喷嘴喷注到超临界氮气环境

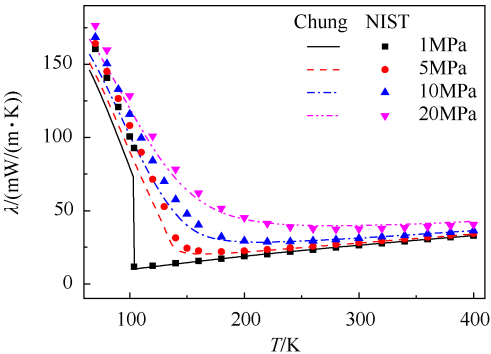


(a) Chung method

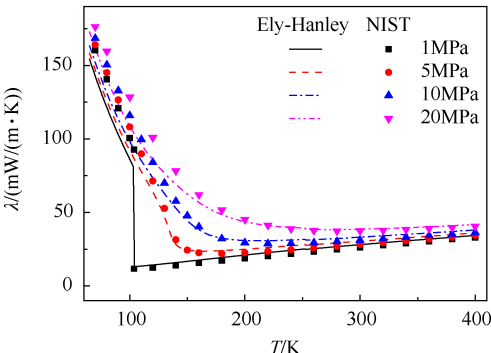


(b) Ely-Hanley based on ECS principle

Fig. 9 Viscosity of  $N_2$  versus temperature for different pressure



(a) Chung method



(b) Ely-Hanley based on ECS principle

Fig. 10 Thermal conductivity of  $N_2$  versus temperature for different pressure

中<sup>[31]</sup>,图 11 给出了试验及计算区域的结构示意图。试验工况参数见表 2。

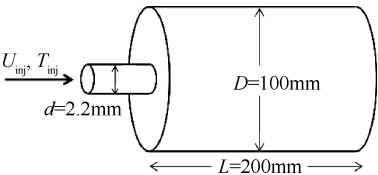


Fig. 11 Schematic geometry and the computational domain of the chamber and injector for  $LN_2$  jets

Table 2 Operation conditions in experiment

| Chamber pressure/MPa | Chamber temperature/K | Injection velocity/(m/s) | Injection temperature/K |
|----------------------|-----------------------|--------------------------|-------------------------|
| 5.98                 | 298                   | 5.47                     | 128.7                   |

为了保证流场仿真中所采用的网格足以准确捕捉高压下流体性质大梯度变化区域的流场发展特性,初步选择三种不同的网格精度来进行网格无关性验证,其径向、周向、轴向网格数分别为 Grid 1( $40 \times 84 \times 100$ ),Grid 2( $60 \times 112 \times 160$ ),Grid 3( $110 \times 160 \times 200$ )。对应的网格最小尺度分别为:0.082mm,0.062mm 和 0.043mm。图 12 中给出了采用三种网格计算的轴向位置  $x/d=5$  处密度沿径向分布及其与试验数据的对比。可以看到,三种网格的计算结果差异很小,尤其是 Grid 2 和 Grid 3。所以可认为上述的网格精度可以满足本文对于超临界环境下低温射流喷注过程数值仿真的需求,在后续计算中将采用 Grid2。

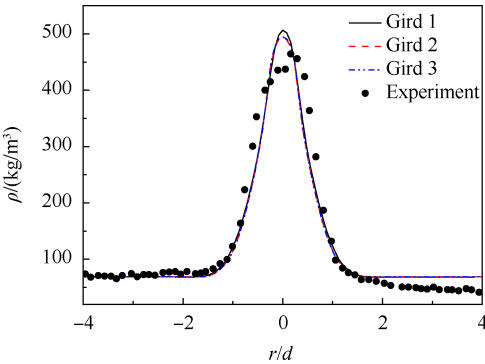


Fig. 12 Density distributions at the axial stations  $x/d=5$  based on different grid for Model 2

为了进一步对比不同模型对于超临界流动问题的适用性,采用所开发求解器分别调用表 3 中的不同热物理模型包。图 13 给出了不同模型包计算的轴向位置  $x/d=5$  和  $x/d=25$  处密度沿径向分布,及其与试验数据对比。可以看到,在靠近喷嘴出口的  $x/d=5$  轴向位置处,采用 Model 1~4 中各真实流体模型的结果均

与试验数据符合较好,而 Model 5 中基于理性气体模型的结果显著低估低温核心区的密度值,中心线上误差高达 68.9%,其原因为理性气体模型未能考虑高压下真实流体的压缩因子。在下游的  $x/d=25$  轴向位置处,虽然随着射流不断加热,其温度逐渐升高,真实流体特征大幅减弱,但理想气体模型计算结果仍存在较大偏差,而采用各真实流体模型的计算结果整体上仍与试验数据符合较好。

针对局部区域的误差,分析其原因主要为:(1)计算中采用的是绝热边界条件,忽略了喷嘴内壁向低温液氮射流的加热,这可能会导致计算所得的射流温度偏低,密度偏高。(2)采用低压下的湍流模型在模拟超临界环境下的湍流结构时会存在一定误差。根据第 3.1 节中的相关计算可看出在跨临界转变区域,流体密度对温度变化非常敏感,所以上述两点因素对温度预测中一个较小的误差将会导致密度预测出现明显偏差。

Table 3 Various thermo-physical model packages

| Model package | EoS        | Thermo          | Transport      |
|---------------|------------|-----------------|----------------|
| Model 1       | SRKGas     | SRKjanafThermo  | ChungTransport |
| Model 2       | PRGas      | PRjanafThermo   | ChungTransport |
| Model 3       | RKPRGas    | RKPRjanafThermo | ChungTransport |
| Model 4       | BWRGas+ECS | SRKjanafThermo  | ECSTransport   |
| Model 5       |            | Ideal-Gas model |                |

详细对比采用不同真实流体模型的计算结果, Model 2,4 的计算误差相对更小,尤其是在轴向位置  $x/d=25$  处。结合图 14 可以看到,在密度变化最剧烈的跨临界转变区,PR EoS 和基于 BWR EoS 的对比态方法误差明显小于 SRK EoS 和 RK-PR EoS 的。同时,根据上述误差分析中第一点,数值计算的密度分布应该偏高于实际值。因此,认为 Model 2,4 的计算结果更合理。另外,在计算效率方面,基于立方型状态方程热物理模型包的 Model 1~3 三者较为接近,均比 Model 4 的小一个数量级,其原因为后者在采用对比态方法求解密度时需要大量迭代计算,导致计算速度较慢。因此,综合计算精度和效率,针对氮这类简单分子,在进行超临界流动问题数值模拟时,建议选择 Model 2 中的 PR EoS 及相关模型。

为了进一步认识超临界环境下低温射流的详细流动特征和结构,图 15 给出了采用 Model 2 计算的射流温度场和密度场分布。由于环境压力 5.98MPa 大于氮的临界压力,此时已不再存在气液相平衡现象,

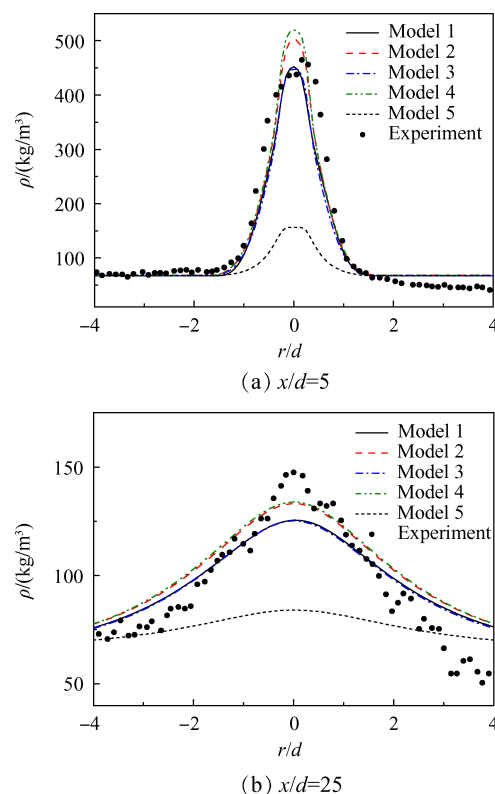


Fig. 13 Radial density distributions at different axial stations

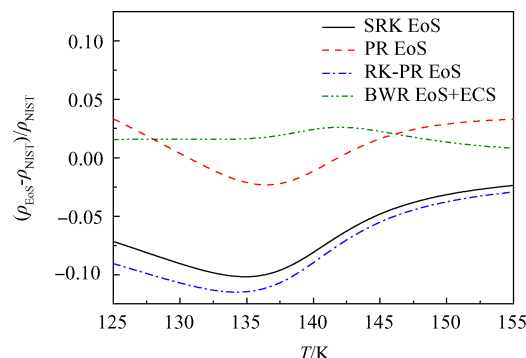


Fig. 14 Error analysis for density of  $N_2$  in trans-critical temperature region at 5.98MPa

所以在靠近喷嘴出口的上游区域,射流核心区表面附近温度沿径向的大梯度变化将导致密度出现大梯度、连续状分布,如图 13(a) 和 15(b) 所示,射流会在很小的径向距离内由具有液态性质的高密度核心快速过渡为具有气态性质的低密度区。随着射流向下游发展,其温度逐渐增高,核心区密度快速下降,并与环境中高温氮气逐渐混合。

另外,虽然射流初始喷注温度 128.7K 大于氮的临界温度 126.2K,但由于室压 5.98MPa 所对应的虚假沸点为 139.1K,要高于喷注温度 128.7K。所以射流在发展过程中必然会经历跨临界转变,即出现对应于最大比热点的虚假沸腾现象。此时由于比热出现

较高的尖峰分布,所以将导致射流升温速度较慢,而体积膨胀迅速,如图16中所示的轴向位置约 $7 < x/d < 10$ 区域内的定压比热、温度和密度分布。根据图16(a)还可以看到,上游低温区域压缩因子明显 $<1$ ,表明此处的低温射流核心明显偏离于理想气体特征,所以在数值仿真时必须考虑高压环境下的真实流体效应。

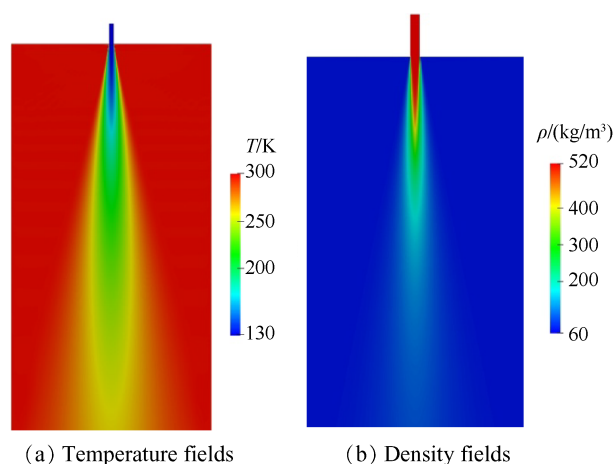


Fig. 15 Temperature and density fields of  $\text{LN}_2$  jet

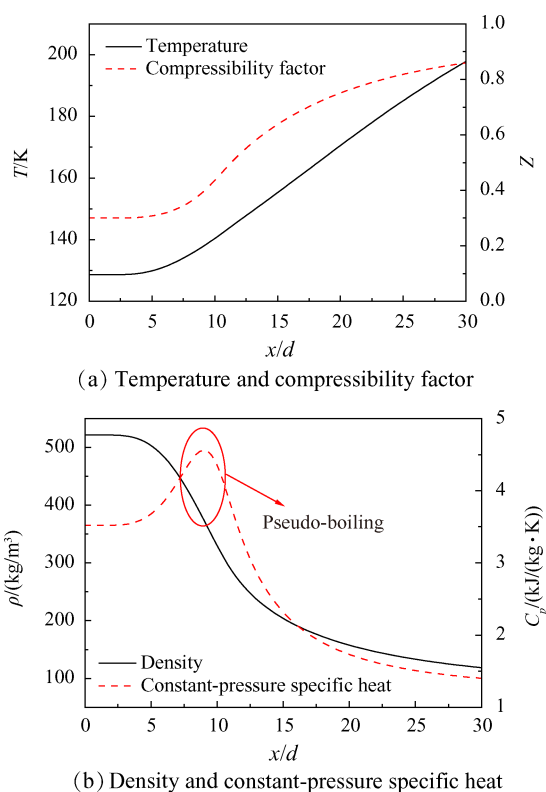


Fig. 16 Axial distributions of temperature, compressibility factor, density and constant-pressure specific heat along the centerline for  $\text{LN}_2$  jet

## 4 结 论

针对超临界环境下的流动和燃烧过程,将多种

真实流体模型写入到 OpenFOAM 中,开发出具有广泛通用性的真实流体热物理模型库,以及适用于描述低温流体流动过程的均相求解器,并对流体热物理性质及低温射流喷注过程进行计算,得到以下结论:

(1) 高压下的真实流体特征对于流体物性的影响主要体现在低温区域,本文所建立的真实流体模型库可以在任意热力学状态范围内正确预测出流体热物性。

(2) 本文所开发的均相求解器可正确预测超临界环境下低温射流的详细流动特征和结构,而理想气体模型则会大幅低估射流核心区密度分布,中心线上误差高达 68.9%;综合考虑计算精度和效率,针对氮这类简单分子,选择 PR EoS 及相关模型更适用于超临界流动问题的求解。

(3) 低温射流跨临界喷注过程中,局部区域所发生的虚假沸腾现象会导致射流升温速率降低,体积膨胀速率加快;而且射流核心区压缩因子明显 $<1$ ,在数值仿真时必须考虑高压环境下的真实流体效应。

## 参考文献

- [1] Mayer W, Schik A, Shcaffler M, et al. Injection and Mixing Processes in High-Pressure Liquid Oxygen/Gaseous Hydrogen Rocket Combustors[J]. *Journal of Propulsion and Power*, 2000, 16(5): 823-828.
- [2] Branam R, Mayer W. Characterization of Cryogenic Injection at Supercritical Pressure[J]. *Journal of Propulsion and Power*, 2003, 19(3): 342-355.
- [3] Mayer W, Telaar J, Branam R, et al. Raman Measurements of Cryogenic Injection at Supercritical Pressure[J]. *Heat and Mass Transfer*, 2003, 39(8-9): 709-719.
- [4] Oschwald M, Schik A, Klar M, et al. Investigation of Coaxial  $\text{LN}_2$ - $\text{GH}_2$  Injection at Supercritical Pressure by Spontaneous Raman Scattering[R]. *AIAA 99-2887*.
- [5] Chehroudi B, Cohn B R, Talley D. Cryogenic Shear Layers Experiments and Phenomenological Modeling of the Initial Growth Rate under Subcritical and Supercritical Conditions[J]. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, 2002, 23(5): 554-563.
- [6] Chehroudi B, Talley D, Coy E. Visual Characteristics and Initial Growth Rates of Round Cryogenic Jets at Subcritical and Supercritical Pressures[J]. *Physics of Fluids*, 2002, 14(2): 850-861.
- [7] Chehroudi B, Talley D. Interaction of Acoustic Waves with a Cryogenic Nitrogen Jet at Sub- and Supercritical Pressures[R]. *AIAA 2002-0342*.
- [8] Davis D W, Chehroudi B. Measurements in an Acousti-

- cally-Driven Coaxial Jet under Supercritical Conditions [J]. *Journal of Propulsion and Power*, 2007, 23(2): 364-374.
- [9] Zong N. Modeling and Simulation of Cryogenic Fluid Injection and Mixing Dynamics under Supercritical Conditions [D]. *Park: The Pennsylvania State University*, 2005.
- [10] Zong N, Yang V. Near-Field Flow and Flame Dynamics of LOX/Methane Shear-Coaxial Injector under Supercritical Conditions [J]. *Proceedings of the Combustion Institute*, 2007, 21(2): 2309-2317.
- [11] Terashima H, Kawai S, Yamanishi N. High-Resolution Numerical Method for Supercritical Flows with Large Density Variations [J]. *AIAA Journal*, 2011, 49(12): 2658-2672.
- [12] Schmitt T, Selle L, Ruiz A, et al. Large-Eddy Simulation of Supercritical-Pressure Round Jets [J]. *AIAA Journal*, 2010, 48(9): 2133-2144.
- [13] Park T S. LES and RANS Simulations of Cryogenic Liquid Nitrogen Jets [J]. *The Journal of Supercritical Fluids*, 2012, 72(12): 232-247.
- [14] Li L, Xie M, Wei W, et al. Numerical Investigation on Cryogenic Liquid Jet under Transcritical and Supercritical Conditions [J]. *Cryogenics*, 2018, 89: 16-28.
- [15] Banut D. Thermodynamic Analysis and Numerical Modeling of Supercritical Injection [D]. *Stuttgart: University of Stuttgart*, 2015.
- [16] Pons L, Darabiha N, Candel S, et al. Mass Transfer and Combustion in Transcritical Non-Premixed Counterflows [J]. *Combustion Theory and Modelling*, 2009, 13(1): 57-81.
- [17] Kim T, Kim Y, Kim S-K. Real-Fluid Flamelet Modeling for Gaseous Hydrogen/Cryogenic Liquid Oxygen Jet Flames at Supercritical Pressure [J]. *The Journal of Supercritical Fluids*, 2011, 58(2): 254-262.
- [18] Wang X J, Huo H F, Yang V. Effects of Flow Strain Rates on Counterflow Diffusion Flames at Subcritical and Supercritical Pressures: Oxygen/Methane Mixture [R]. *AIAA* 2014-0650.
- [19] 王亚洲, 华益新, 孟 华. 超临界压力下低温甲烷的湍流传热数值研究 [J]. *推进技术*, 2010, 31(4): 606-611. (WANG Ya-zhou, HUA Yi-xin, MENG Hua. Numerical Investigation of Turbulent Heat Transfer of Cryogenic-Propellant Methane under Supercritical Pressures [J]. *Journal of Propulsion Technology*, 2010, 31(4): 606-611.)
- [20] Pizzarelli M, Nasuti F, Onofri M, et al. Heat Transfer Modeling for Supercritical Methane Flowing in Rocket Engine Cooling Channels [J]. *Applied Thermal Engineering*, 2015, 75(1): 600-607.
- [21] Jarczyk M, Pfitzner M. Large Eddy Simulation of Supercritical Nitrogen Jets [R]. *AIAA* 2012-1270.
- [22] Müller H, Pfitzner M, Matheis J, et al. Large-Eddy Simulation of Coaxial  $\text{LN}_2/\text{GH}_2$  Injection at Trans- and Supercritical Conditions [R]. *AIAA* 2015-0843.
- [23] Bellan J. Theory, Modeling and Analysis of Turbulent Supercritical Mixing [J]. *Combustion Science and Technology*, 2006, 178(1-3): 253-281.
- [24] Selle L C, Okong'o N A, Bellan J, et al. Modelling of Subgrid-Scale Phenomena in Supercritical Transitional Mixing Layers: A Priori Study [J]. *Journal of Fluid Mechanics*, 2007, 593: 57-91.
- [25] Li P F, Lei F P, Zhou L X, et al. Investigation of Real-Fluid Characteristics in High-Pressure Liquid Rocket Engines [C]. *Guadalajara: 67th International Astronautical Congress*, 2016.
- [26] Poling B E, Prausnitz J M, O'Connell J P. The Properties of Gases and Liquids [M]. 赵红玲, 王凤坤, 陈圣坤, 等, 译. 北京: 化学工业出版社, 2006.
- [27] Cismonti M, Mollerup J. Development and Application of a Three-Parameter RK-PR Equation of State [J]. *Fluid Phase Equilibria*, 2005, 232(1-2): 74-89.
- [28] Ely J F, Hanley H J. Prediction of Transport Properties. 1. Viscosity of Fluids and Mixtures [J]. *Industrial and Engineering Chemistry Fundamentals*, 1981, 20(4): 323-332.
- [29] Chung T H, Ajlan M, Lee L L, et al. Generalized Multi-parameter Correlation for Nonpolar and Polar Fluid Transport Properties [J]. *Industrial and Chemical Engineering Research*, 1988, 27(4): 671-679.
- [30] Ely J F, Hanley H J. Prediction of Transport Properties. 2. Thermal Conductivity of Pure Fluids and Mixtures [J]. *Industrial and Engineering Chemistry Fundamentals*, 1983, 22(1): 90-97.
- [31] Tellar J, Schneider G, Hussong J, et al. Cryogenic Jet Injection: Description of Test Case RCM 1 [C]. *Lampoldshausen: Proceedings 2nd International Workshop on Rocket Combustion Modeling*, 2001.

(编辑: 史亚红)