

文章编号: 1001-2486(2011)04-0012-07

基于敏感性分析的DF化学动力学模型的简化*

邵艳, 周进, 林志勇, 赖林

(国防科技大学 航天与材料工程学院, 湖南 长沙, 410073)

摘要: 基于两种燃料体系下的DF详细化学反应动力学模型, 利用敏感性分析的方法, 分别提出了相应的简化反应机理。简化过程中发现, 仅考虑DF“冷反应”泵浦过程, 忽略掉高振动激发态, 忽略掉D₂和DF分子的离解复合反应对整个系统影响不大。DF分子之间以及DF与D、D₂、HF之间的能量转移反应具有较高的敏感性。简化机理在有效概括DF化学反应过程的同时尽量减少了反应组分和基元反应方程, 很大程度上减少了计算量, 更适合与三维流场数值仿真程序或软件进行耦合计算。

关键词: 氟氧化学激光器; 敏感性分析; 化学反应动力学; 简化; 平衡温度

中图分类号: TN248.5 **文献标识码:** A

Simplification of a DF Chemical Laser Kinetic Model Based on the Sensitivity Analysis

SHAO Yan, ZHOU Jin, LIN Zhi-yong, LAI Lin

(College of Aerospace and Material Engineering, National Univ. of Defense Technology, Changsha 410073, China)

Abstract: Based on the detailed DF chemical kinetic models of two different fuel systems, the relevant simplified chemical kinetic mechanisms were presented with the method of sensitivity analysis. It is found that considering the DF “cold reaction” pumping reactions, ignoring DF higher excited vibrational states and omitting the recombination-dissociation reactions have little effect on the total system. The energy transfer reactions in DF and DF deactivations by D, D₂ and HF exhibits strong sensitivity to the chemical kinetics. Compared with the detailed mechanism, the simplified mechanism describes the general DF combustion process effectively, and at the same time reduces the species, element reactions and computational costs to a great extent. Therefore it fits more with coupling with three-dimensional flowfield numerical simulation code or software.

Key words: DF chemical laser; sensitivity analysis; chemical kinetic model; simplification; equilibrium temperature

由于DF化学动力学模型中包含的组分与反应非常多, 如果直接使用详细反应模型计算激光器流场, 会使求解变量的数目和方程过于庞大, 耗费大量的机时和内存, 从而影响计算效率, 另外因为化学动力学模型中一般既包括反应速率快、特征时间尺度小的基元反应, 也包括反应速率慢、特征时间尺度大的基元反应, 这时微分方程的特征值差别明显, 特征矩阵的条件数很大, 形成了计算的刚性问题。所以在数值模拟之前, 需要对详细反应模型进行充分的分析和合理的简化, 一方面要求能反映所关心问题的本质, 另一方面能减少计算量和所需的内存, 并降低问题的刚性^[1-3]。

目前很少有文献对DF化学反应模型的简化进行过详细讨论, 如何在保证一定计算精度的前提下, 在准确描述燃烧特性的同时, 尽量去除对燃

烧过程没有明显影响的组分和基元反应是值得深入研究的问题。常用的简化化学反应动力学模型的方法主要有两种, 敏感性分析和准稳态假设方法^[2]。敏感性分析方法能够深入直观分析组分、基元反应、反应条件等因素对系统反应参数变化的敏感程度^[4-7], 近年来应用渐广。本文采用敏感性分析方法针对两个DF化学反应实例进行简化, 均得到了比较好的结果。

1 简化化学动力学模型的敏感性分析

1.1 冗余组分判断

一个反应模型中的组分一般可分为重要组分、关键组分和冗余组分三类: 重要组分是反应系统中必不可少的组分, 如反应物、生成的最终产物等; 关键组分是对重要组分的生成与消耗起重要

* 收稿日期: 2010-12-11

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(11002158)

作者简介: 邵艳(1981—), 女, 博士生。

作用的组分,如一些重要的自由基;冗余组分是对重要组分与反应系统影响很小的组分。找出并删除对特定问题影响不大的冗余组分是化学反应模型简化的一个重要环节^[8]。

进行冗余组分判断前,先确定重要组分,再通过下式找出关键组分和冗余组分:

$$b_j = \sum_{i=1}^{N_s} \left(\frac{c_i}{p_i} \frac{dp_i}{dc_j} \right)^2 = \sum_{i=1}^{N_s} \left(\frac{d \ln p_i}{d \ln c_j} \right)^2 \quad (1)$$

其中, p_i 为重要组分 i 的生成速率, c_j 为需要进行重要性判断的组分 j 的摩尔浓度, b_j 为组分 j 的重要性判据参数,其物理意义为所有重要组分的生成速率对组分 j 的浓度变化的敏感性系数的平方总和,较小的 b_j 值对应的组分认为是冗余组分,较大的 b_j 值对应的组分认为是关键组分。删去冗余组分及包含此组分的反应,可得到初步的基干反应模型。

1.2 冗余反应判断

以上所建立的基干反应中,仍然有大量的反应对整个反应过程的影响很小,需要进行进一步分析简化。采用组分生成速率对反应速率系数的敏感性矩阵进行分析^[9]:

$$F_{ij} = \frac{k_j}{p_i} \frac{\partial \ln p_i}{\partial \ln k_j} \quad (2)$$

其中, F_{ij} 表述第 i 种组分生成速率对第 j 个基元

表 1 燃烧的初始条件((NF₃ + H₂ + He)/D₂ 燃料体系)

Tab.1 Initial combustion conditions for (NF₃ + H₂ + He)/D₂ system

Parameter	Initial condition					
Static pressure (Pa)	1200					
Static temperature (K)	300					
Mole Fraction of species	F	F ₂	He	HF	N ₂	D ₂
	0.0679	0.000314	0.583	0.1616	0.0565	0.1307

可以看出,混合气体中 F₂ 含量很少,简化的第一步是删除 F₂ 组分,需要把相应浓度进行处理,加入到 He 或 N₂ 中,3 种情况下燃烧的温度曲线如图 1 所示,通过分析比较发现,虽然 He 的摩尔浓度更大,但是加入到 He 中所得到的误差与加入到 N₂ 的误差基本相同,而且删除 F₂ 组分对反应开始阶段影响基本很小,只是在反应达到平衡后有一定的差别,平衡温度略低一点。

由于 DF 高振动激发态分子含量很少,而且碰撞去激活很快,确定该反应系统的重要组分是 DF(0~4)。根据所选的重要组分,进行敏感性分析发现 DF(5)、F₂、DF(6)3 种组分相对不太重要,特别是在着火初期。删除 DF(5)、F₂、DF(6)3 种

反应的反应速率系数的敏感性,通过求解由此矩阵构成的 $[F_{ij}]^T [F_{ij}]$ 矩阵的特征值来判定反应 j 对反应系统的影响程度,对于较大的特征值而言,当其特征矢量的分量值较大时,所对应基元反应的化学反应常数发生变化才会使各组分反应速率产生较大的变化^[2],也就是说, $[F_{ij}]^T [F_{ij}]$ 矩阵的较大特征值的特征矢量中绝对值较大的分量所对应的基元反应是系统中的重要反应,在简化过程中应予以保留^[7]。根据反应模型精度的要求,设定特定的阈值删除影响较小的反应,建立最终的基干反应模型。

2 简化 DF 化学反应动力学模型算例

2.1 (NF₃ + H₂ + He)/D₂ 燃料体系的简化模型

DF/HF 化学激光器的数值模拟及性能分析中一般采用经典的化学动力学模型^[10-14]。文献[15]综合以上反应模型,给出了针对(NF₃ + H₂ + He)/D₂ 燃料体系,DF 化学激光器“热反应”系统的 14 组分 111 方程模型,即该反应系统下的详细化学反应模型,其中可逆反应被看作正、逆两个反应。在喷管段燃烧的初始条件如表 1 所示,热力学数据取自通用的 CHEMKIN 4.0^[16],并调用该软件包中的 Senkin 代码进行敏感性分析。

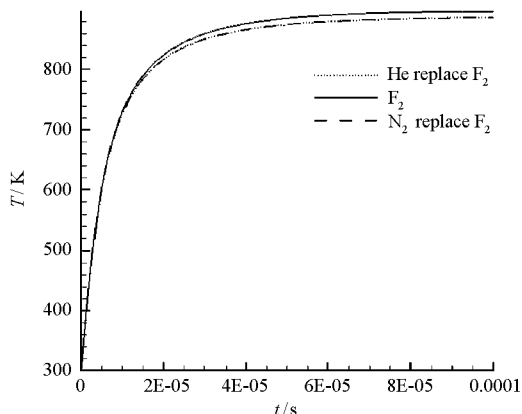


图 1 3 种情况下燃烧的温度曲线

Fig.1 Temperature profile with time for three conditions

组分及相应反应后,得到 11 组分 58 步反应的简化动力学模型,如表 2 所示。与详细化学反应动力学模型相比,发现除了在着火过程中的一小段,

简化反应得到的温度略偏低,初期和平衡段温度都很一致。

表 2 11 组分 58 步反应的化学动力学模型(算例 1)

Tab.2 11 species 58 step chemical kinetic models (case1)

1 $F + D_2 \Rightarrow DF-1 + D$	2 $F + D_2 \Rightarrow DF-2 + D$	3 $F + D_2 \Rightarrow DF-3 + D$	4 $F + D_2 = DF-4 + D$
5 $2D + M \Rightarrow D_2 + M$	6 $2D + D_2 \Rightarrow 2D_2$	7 $3D \Rightarrow D_2 + D$	8 $DF-0 + M \Rightarrow D + F + M$
9 $DF-1 + M \Rightarrow D + F + M$	10 $DF-2 + M \Rightarrow D + F + M$	11 $DF-3 + M \Rightarrow D + F + M$	12 $DF-4 + M \Rightarrow D + F + M$
13 $2DF-1 = DF-0 + DF-2$	14 $2DF-2 = DF-1 + DF-3$	15 $DF-3 + DF-0 = DF-2 + DF-1$	16 $2DF-3 = DF-2 + DF-4$
17 $DF-4 + DF-0 = DF-3 + DF-1$	18 $DF-4 + DF-1 = DF-3 + DF-2$	19 $DF-1 + F \Rightarrow DF-0 + F$	20 $DF-1 + HE \Rightarrow DF-0 + HE$
21 $DF-1 + HF \Rightarrow DF-0 + HF$	22 $DF-1 + HF \Rightarrow DF-0 + HF$	23 $DF-1 + D_2 \Rightarrow DF-0 + D_2$	24 $DF-1 + N_2 \Rightarrow DF-0 + N_2$
25 $DF-1 + N_2 \Rightarrow DF-0 + N_2$	26 $DF-1 + D \Rightarrow DF-0 + D$	27 $DF-1 + DF \Rightarrow DF-0 + DF$	28 $DF-1 + DF \Rightarrow DF-0 + DF$
29 $DF-2 + F \Rightarrow DF-1 + F$	30 $DF-2 + HE \Rightarrow DF-1 + HE$	31 $DF-2 + HF \Rightarrow DF-1 + HF$	32 $DF-2 + HF \Rightarrow DF-1 + HF$
33 $DF-2 + D_2 \Rightarrow DF-1 + D_2$	34 $DF-2 + N_2 \Rightarrow DF-1 + N_2$	35 $DF-2 + N_2 \Rightarrow DF-1 + N_2$	36 $DF-2 + D \Rightarrow DF-1 + D$
37 $DF-2 + DF \Rightarrow DF-1 + DF$	38 $DF-2 + DF \Rightarrow DF-1 + DF$	39 $DF-3 + F \Rightarrow DF-2 + F$	40 $DF-3 + HE \Rightarrow DF-2 + HE$
41 $DF-3 + HF \Rightarrow DF-2 + HF$	42 $DF-3 + HF \Rightarrow DF-2 + HF$	43 $DF-3 + D_2 \Rightarrow DF-2 + D_2$	44 $DF-3 + N_2 \Rightarrow DF-2 + N_2$
45 $DF-3 + N_2 \Rightarrow DF-2 + N_2$	46 $DF-3 + D \Rightarrow DF-2 + D$	47 $DF-3 + DF \Rightarrow DF-2 + DF$	48 $DF-3 + DF \Rightarrow DF-2 + DF$
49 $DF-4 + F \Rightarrow DF-3 + F$	50 $DF-4 + HE \Rightarrow DF-3 + HE$	51 $DF-4 + HF \Rightarrow DF-3 + HF$	52 $DF-4 + HF \Rightarrow DF-3 + HF$
53 $DF-4 + D_2 \Rightarrow DF-3 + D_2$	54 $DF-4 + N_2 \Rightarrow DF-3 + N_2$	55 $DF-4 + N_2 \Rightarrow DF-3 + N_2$	56 $DF-4 + D \Rightarrow DF-3 + D$
57 $DF-4 + DF \Rightarrow DF-3 + DF$	58 $DF-4 + DF \Rightarrow DF-3 + DF$		

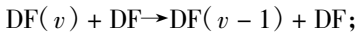
注:表中 M 为第三体

需要说明的是,对于类似下列反应的情形:



$$k(v) = v \times 1.2e11 T^{-1} + v \times 0.14 T^{2.96}$$

一般处理成两个相互独立的单向基元反应:



$$k_1(v) = v \times 1.2e11 T^{-1};$$

$$k_2(v) = v \times 0.14 T^{2.96}$$

分析 4 个温度点(301K、405K、500K 和 700K)

下的矩阵 $[F_{ij}]^T [F_{ij}]$ 的特征值和特征矢量,结果如表 3 所示,表中绝对值较大的特征矢量分量后括号中的数字对应基元反应的序号。由此可以得到一个由 23 步反应组成的简化化学动力学模型。

这 23 个反应的序号为:1,2,3,4,13,14,15,16,17,18,21,23,26,27,31,33,36,41,43,46,51,53,56。从图 2 可以看出,除了在中段燃烧温度有一定的偏差,平衡后温度略低外,其他符合很好。说明去除的冗余反应对最终的化学平衡有一定的影响,但影响不大。图 2 中还比较了采用文献[17]中的两种简化模型对燃烧温度的影响,可以发现采用 39 步反应的简化模型与用敏感性分析简化出的 58 步反应模型得到的燃烧温度曲线符合得非常好,但 23 步反应的简化模型在着火过程中与详细反应模型相比温度差别较大,但在一定误差允许范围内也能满足一些实际应用的需要。

表 3 矩阵 $[F_{ij}]^T [F_{ij}]$ 的特征值和特征矢量分析

Tab.3 Eigenvalues and eigenvector analysis of matrix $[F_{ij}]^T [F_{ij}]$

序号	特征值	绝对值较大的特征矢量分量及其反应序号
1	6.362 03	-0.74(1), -0.48(2), -0.38(3), -0.19(21)
2	3.402 75	-0.59(1), 0.56(2), 0.51(3), -0.23(21)
3	2.641 58	-0.92(4), -0.34(3)
4	2.046 43	0.69(3), -0.63(2), -0.34(4)
5	0.454 06	-0.54(21), 0.40(53), 0.30(43), 0.26(51), 0.26(41), -0.24(23), -0.19(17), 0.19(36), -0.18(2), 0.18(46), 0.18(31), 0.17(1)
6	0.359 67	0.65(21), 0.34(53), 0.30(23), -0.28(1), 0.26(43), 0.22(41), 0.22(51), 0.17(36), 0.16(46)
7	0.081 56	-0.78(17), -0.47(15), -0.24(18), -0.16(31)
8	0.027 79	0.64(18), -0.31(53), 0.31(36), -0.27(15), 0.27(31), 0.21(16), -0.20(51), -0.20(13), 0.20(33)
9	0.012 90	-0.42(43), -0.37(16), -0.33(41), 0.33(14), -0.27(46), 0.27(53), -0.25(17), 0.23(15), 0.22(31), 0.21(36), 0.16(18), 0.16(51), 0.15(33)
10	0.004 16	-0.62(36), 0.41(51), 0.39(18), -0.32(46), 0.29(41), -0.19(56), 0.12(14)
11	0.001 50	0.43(46), 0.36(18), -0.35(36), 0.35(56), -0.34(51), 0.26(13), 0.23(53), 0.20(14), -0.19(41), -0.15(33)
12	0.000 78	0.48(16), 0.43(13), 0.35(15), -0.35(17), 0.30(26), -0.25(46), 0.21(27), 0.16(41)

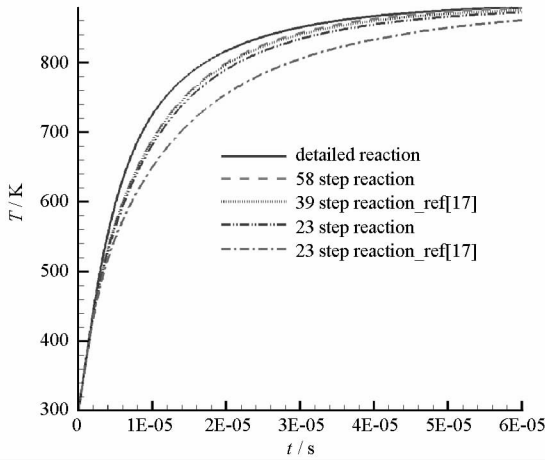


图 2 采用简化反应模型前后燃烧的温度曲线(算例 1)

Fig.2 Temperature profile with time using detailed and reduced models (case 1)

表 4 更加清晰地揭示了这四种简化模型所保留的基元反应之间的区别,因为 58 步和 39 步简化模型对计算燃烧温度的区别非常小,这表明忽略 He、N₂ 分子与 DF 激发态分子的能量转移反应是可行的,这些反应进行得比较缓慢,将其忽略几乎不会影响激光器的性能^[18]。另外,离解复合反应(b)和(c)也可以忽略。

比较 39 步^[17]和 23 步简化模型发现,(e)式和(g)式反应速率的第二项与第一项相比对反应系统的影响可以忽略,F 原子与 DF 激发态分子的碰撞去激活反应也可以不考虑。23 步^[17]简化模型忽略了 DF 激发态分子与 D 原子的能量转移反应,致使着火过程的温度降低,会对计算带来一定的误差。

表 4 DF 简化化学动力学模型

Tab.4 DF reduced chemical kinetic models

序号	反应方程式($v = 1, 2, 3, 4$)	(NF ₃ + H ₂ + He)/D ₂			(NF ₃ + C ₂ H ₄ + He)/D ₂		
		燃料体系			燃料体系		
		58 步	39 步 ^[17]	23 步	23 步 ^[17]	62 步	22 步
泵浦、离解复合反应							
(a)	F + D ₂ → DF(v) + D DF(4) + D → F + D ₂	✓	✓	✓	✓	✓	✓
(b)	D + D + M → D ₂ + M	✓				✓	
(c)	DF(v) + M → D + F + M	✓				✓	
DF(v)与 DF(v)的 V - V 碰撞							
(d)	DF(v) + DF(v') ↔ DF($v + 1$) + DF($v' - 1$) DF(v) + DF(v') ↔ DF($v - 1$) + DF($v' + 1$)	✓	✓	✓	✓	✓	✓
DF(v)与 DF 的 V - T 碰撞							
(e)	DF(v) + DF → DF($v - 1$) + DF $k(v) = v \times 1.2e11 T^{-1}$ $+ v \times 0.14 T^{2.96}$ (m ³ /kmol·s)	✓	✓			✓	
DF(v)与 D ₂ 的 V - T 碰撞							
(f)	DF(v) + D ₂ → DF($v - 1$) + D ₂	✓	✓	✓	✓	✓	✓
DF(v)与 HF 的 V - T 碰撞							
(g)	DF(v) + HF → DF($v - 1$) + HF $k(v) = v \times 1.9e11 T^{-1}$ $+ v \times 0.135 T^3$ (m ³ /kmol·s)	✓	✓	✓	✓	✓	✓
DF(v)与 D、F、He、N ₂ 的 V - T 碰撞							
(h)	DF(v) + D → DF($v - 1$) + D	✓	✓	✓		✓	
(i)	DF(v) + F → DF($v - 1$) + F	✓	✓			✓	
(j)	DF(v) + He → DF($v - 1$) + He	✓				✓	
(k)	DF(v) + N ₂ → DF($v - 1$) + N ₂	✓				✓	
DF(v)与 CF ₄ 的 V - T 碰撞							
(l)	DF(v) + CF ₄ → DF($v - 1$) + CF ₄					✓	

图3给出了分别运用详细反应模型和11组分23步反应的简化模型计算出的DF激发态分子随时间的变化历程,可以看到,DF激发态分子能级越高,摩尔百分比越低,除了基态DF分子以外,其他DF分子含量先增大后减小,因为泵浦反应(a)使得释放的能量有选择性地进入DF(1~4)分子中,造成产物分子的非平衡分布,然后DF(1~4)分子又通过能量转移反应(d)~(k)交换能量使非平衡趋于平衡,这将导致DF(1~4)分子的消耗。由图3定量分析结果可以看出,简化反应模型与详细模型吻合得比较好,都能较好地预测生成物DF激发态组分非定常的变化过程。

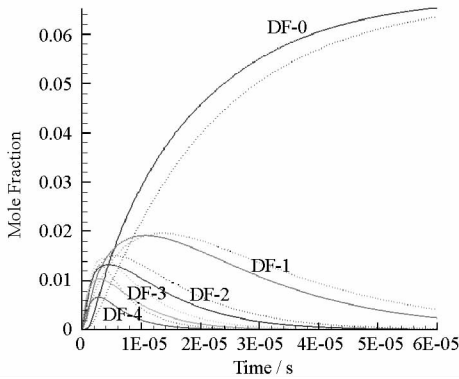


图3 采用详细/11组分23步简化模型计算DF分子摩尔浓度随时间的变化 (实线/虚线代表详细/简化模型)

Fig. 3 DF mole fraction with time using detailed and 11 species 23 step models

为了进一步了解采用敏感性分析方法得到的简化模型与详细反应模型相比,对于模拟DF化学激光器内物理过程和预测其性能参数的差别,选取文献[15]中的高超声速低温喷管和光腔耦合段作为研究对象,计算区域和计算参数的选择与文献[15]相同。

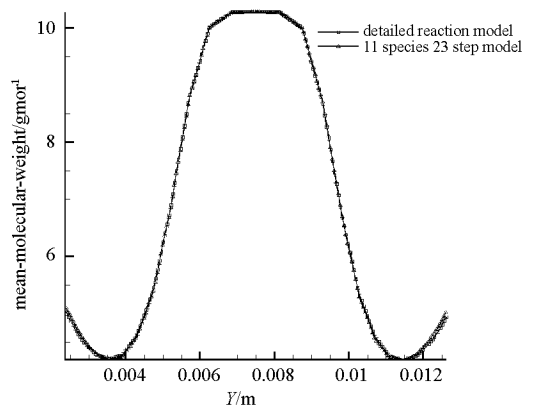
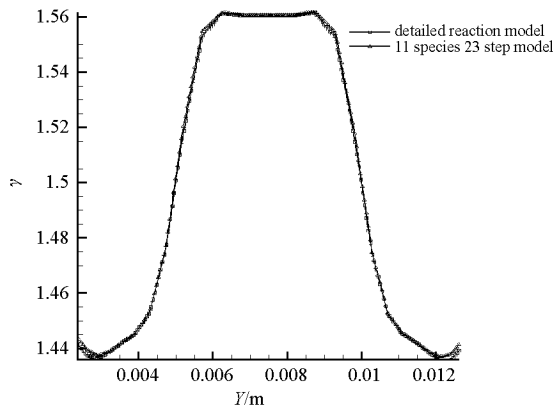


图4 采用详细和简化反应模型计算得到的NEP中心线上比热比(左)和平均分子量(右)曲线

Fig. 4 The specific heat ratio (left) and mean molecular weight (right) curves along the centerline of NEP using detailed and reduced reaction models

图4为分别采用详细反应模型和11组分23步简化模型计算得到的喷管出口平面(NEP)中心线上气流比热比和平均分子量的曲线,可以看出,组分的简化对混合气体的热力学参数造成的影响很小,因为去除的高振动态DF(5)和DF(6)分子的摩尔百分比非常小,如图3所示,这两种组分的摩尔百分比一定比DF(4)的还小,也就是小于0.005;另外,表1中给出的初始来流组分的摩尔百分比, F₂含量仅占0.000314,所以将DF(5)、DF(6)和F₂忽略不会影响流场的气动和热力学性能。

图5给出的是分别采用两种化学反应动力学模型计算得到的P₂(9)支谱线的小信号增益系数(SSG)的分布情况。P₂(9)支谱线是DF化学激光器输出的典型谱线,其小信号增益系数可以作为评价化学反应动力学模型优劣的重要指标。根据光腔流场中温度、混合气体密度以及跃迁上下能级粒子的质量分数,可以求出特定谱线的小信号增益系数^[15]。与详细反应模型相比,采用简化模型计算得到的SSG的最小值几乎不变,最大值增大了18%,因为忽略了某些分子对DF激发态分子的去激活反应,而且简化带来的燃烧温度降低也会使SSG增大,这点可以从小信号增益的计算公式^[15]得出。本文还计算了两种反应模型下DF基态分子以及激发态DF(1)、DF(2)沿流向的分布,结果显示,运用敏感性分析得到的11组分23步简化模型对主要生成物DF(v)的分布影响也不大。计算过程中发现,对单个燃烧算例而言,简化模型的使用会使得计算效率提高2倍以上,说明简化模型在较全面地概括该燃料体系下的反应动力学机理的同时,较大幅度地减少了计算量、节约了计算时间和资源,简化带来的误差也比较小。

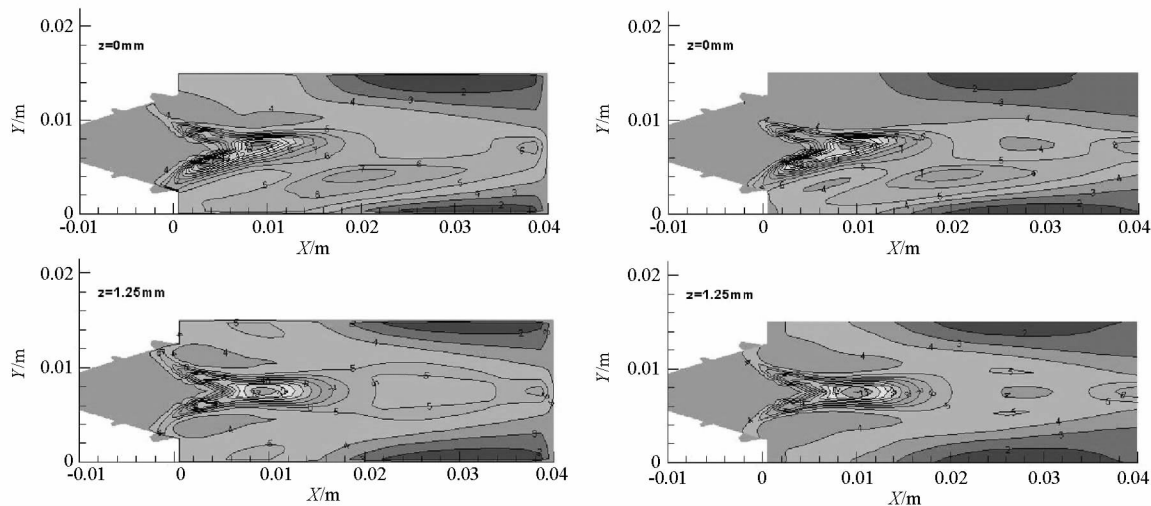


图5 采用详细反应模型(左)和11组分23步简化模型(右) $P_2(9)$ 谱线在Z截面上SSG的分布(单位: m^{-1})

Fig.5 The $P_2(9)$ SSG distribution at Z cross sections using detailed chemical kinetic model (left) and 11species 23 step reduced model (right) (Unit: m^{-1})

2.2 $(\text{NF}_3 + \text{C}_2\text{H}_4 + \text{He})/\text{D}_2$ 燃料体系的简化模型

针对 $(\text{NF}_3 + \text{C}_2\text{H}_4 + \text{He})/\text{D}_2$ 燃料体系,DF化学激光器“热反应”系统的详细化学动力学模型为15组分117方程模型,即在算例1的详细反应模型的基础上增加了 CF_4 组分,因此也增加了 CF_4 与DF激发态分子的能量转移反应,共6个。

同样,混合气体中 F_2 含量也很少,简化的第一步是找出冗余组分,将 F_2 组分相应浓度进行处理,加入到He或 N_2 中都是可以的,对计算结果影响较小。选择重要组分为DF(0~4),进行敏感性分析发现能够删除DF(5)、 F_2 、DF(6)3种组分及相应反应,得到12组分62步反应的简化动力学模型。从图6中可以看出,该简化模型与详细化学反应动力学模型相比,燃烧温度整体符合得很好,初期和平衡段温度非常一致。

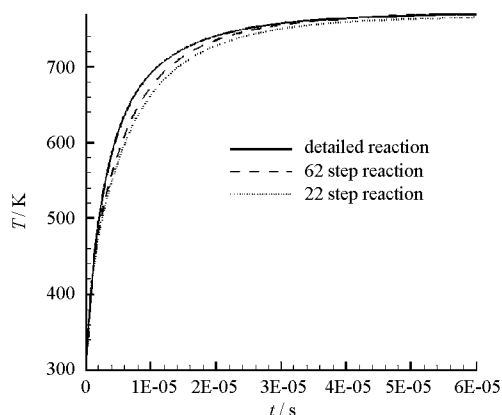


图6 采用简化反应模型前后燃烧的温度曲线(算例2)

Fig.6 Temperature profile with time using detailed and reduced models(case 2)

按照算例1的方法去除冗余反应,限于篇幅,

特征值和特征矢量的分析过程在这里不再赘述。简化后得到12组分22步反应的化学动力学模型。运用这个简化模型计算得到的燃烧平衡温度仅在中间段有一定偏差,平衡段温度略低。这同时也说明对整个系统比较关键的基元反应是DF激发态分子与 D_2 、D和HF的能量转移反应。

3 结论

利用敏感性分析的方法,针对 $(\text{NF}_3 + \text{H}_2 + \text{He})/\text{D}_2$ 燃料体系,去除了其详细机理中的不重要的组分及基元反应,提出了11组分23步反应组成的简化化学反应动力学机理,计算燃烧温度曲线以及反应生成的DF激发态组分浓度的变化历程与详细机理较为吻合,同时该简化机理明显地减少了计算量。采用同样的方法,针对 $(\text{NF}_3 + \text{C}_2\text{H}_4 + \text{He})/\text{D}_2$ 燃料体系提出了12组分22步反应的简化机理,因为简化反应机理的计算精度与工况密切相关,虽然多了 CF_4 这个组分,但由于 CF_4 对DF激发态分子的去激活基本可以忽略不计,得到的简化反应模型的方程个数反而少于 $(\text{NF}_3 + \text{H}_2 + \text{He})/\text{D}_2$ 燃料体系。

考察两种燃料体系下的简化反应体系可以发现,只考虑DF(0~4),忽略掉碰撞去激活很快的高振动激发态DF(5)、DF(6),忽略 D_2 与DF分子的离解复合反应以及DF分子与F、He、 N_2 的能量转移反应对整个反应体系的影响很小。

与DF详细化学反应动力学机理相比,简化模型有效的减少了反应组分和方程,耦合到流场计算中能大大减少求解变量和求解方程的数目,

从而能大幅提高计算效率。

参考文献:

- [1] Law C K, Sung C J, Wang H, et al. Development of Comprehensive Detailed and Reduced Reaction Mechanism for Combustion modeling [R]. AIAA Paper 2002-0331, 2002.
- [2] Griffiths J F. Reduced Kinetic Models and Their Application to Practical Combustion Systems [J]. Progress in Energy and Combustion Science, 1995, 21(1): 25-107.
- [3] Miller J A, Kee R J. Chemical Kinetics and Combustion Modeling [J]. Annual Review in Physical Chemistry, 1990, 41: 345-387.
- [4] Turányi T. Applications of Sensitivity Analysis to Combustion Chemistry [J]. Reliability Engineering and System Safety, 1997, 57(1): 41-48.
- [5] Turányi T. Sensitivity Analysis of Complex Kinetic Systems: Tools and Applications [J]. Journal of Mathematical Chemistry, 1990, 5(3): 203-248.
- [6] 董刚, 刘宏伟, 陈义良. 通用甲烷层流预混火焰的半详细化学动力学机理 [J]. 燃烧科学与技术, 2002, 8(1): 44-48.
- [7] 钱炜祺. 用灵敏度法简化化学反应动力模型 [J]. 空气动力学学报, 2004, 22(1): 88-92.
- [8] 林志勇. 高静温超声速预混气爆震起爆与发展过程机理研究 [D]. 长沙: 国防科学技术大学, 2008.
- [9] Chen J Y. A General Procedure for Constructing Reduced Reaction Mechanisms with Given Independent Relations [J]. Combustion Science and Technology, 1988, 57(1-3): 89-94.
- [10] Cohen N, Bott J F. A Review of Rate Coefficients in the $H_2 - F_2$ Chemical Laser System [R]. SAMSO-TR-76-82, 1976.
- [11] Gross R W F, Bott J F. Handbook of Chemical Lasers [M]. John Wiley & Sons, 1976.
- [12] Cohen N. A Review of Rate Coefficients in the $D_2 - F_2$ Chemical Laser System [R]. ADA043812, 1977.
- [13] Cohen N. A Review of Rate Coefficients in the $H_2 - F_2$ Chemical Laser System-supplement [R]. SAMSO-TR-78-41, 1978.
- [14] Manke G C, Hager G D. A Review of Recent Experiments and Calculations Relevant to the Kinetics of the HF Laser [J]. J. Phys. Chem. Ref. Data, 2001, 30(3): 713-733.
- [15] 袁圣付. 连续波 DF/HF 化学激光器新型增益发生器的理论设计 [D]. 长沙: 国防科学技术大学, 2002.
- [16] Kee R J, Rupley F M, Coltrin M E, et al. Chemkin Collection. Release 4.0 [M]. Reaction Design, Inc., San Diego, CA, 2004.
- [17] 邵艳, 周进, 赖林, 等. DF 化学激光器反应动力学模型的简化及其有效性分析 [J]. 光电工程, 2010, 37(1): 115-119.
- [18] Zelaany S W, Driscoll R J, Raymonda J M, et al. Modeling of DF/HF CW Lasers: An Examination of Key Assumptions [R]. AIAA Paper 77-0063, 1977.