

# Reduced Kinetic Model of RP-1/O<sub>2</sub> Mixture Combustion for CFD modeling of Rocket Engines

**Andrey V. Lepikhov**

*Open Joint Stock Company «Academician V.P. Makeyev State Rocket Centre»,  
Miass, Chelyabinskaya oblast, 456300, Russia  
avlepykhov@yandex.ru*

## **Abstract**

Computational model for combustion of the RP-1 kerosene and liquid oxygen mixture is developed. Constants of the reaction rates are presented. Model verification is performed by NASA CEA code comparison in the pressure and the stoichiometric ratio of fuel component range specific for a chamber of rocket engines. Results of computational modeling of the rocket engine RD-170 / RD-180 are described. The model predictions agreed reasonably with known experimental and computational data.

Keywords: nozzle, burning, kinetic mechanism, CFD, liquid rocket engine, RP-1

УДК 519.6

# Упрощенная кинетическая схема горения смеси RP-1/O<sub>2</sub> для CFD-расчетов ракетных двигателей

**А.В. Лепихов**

*АО «ГРЦ Макеева», Россия, Челябинская область, г. Миасс, 456300  
avlepikhov@yandex.ru*

## Аннотация

Разработана численная модель для задачи горения топливной смеси керосина марки RP-1 и кислорода, приведены кинетические константы реакций. Приведены результаты термодинамических расчетов в диапазоне давлений и стехиометрических соотношений компонент топлива, характерных для камер сгорания ракетных двигателей. Описаны результаты численного моделирования ракетного двигателя РД-170/РД-180, демонстрирующие согласование данного механизма с известными паспортными и расчетными данными.

Ключевые слова: сопло, газодинамика, горение, кинетическая схема, численное моделирование, керосин, жидкостный ракетный двигатель, RP-1

## 1. Введение

Моделирование газодинамических процессов в струе, истекающей из жидкостного ракетного двигателя (ЖРД), начиная от камеры сгорания (КС) имеет большое значение при постановке вычислительных экспериментов для таких задач, как лучисто-конвективное воздействие в донной области ракеты и ударно-волновые нагрузки на стартовое сооружение при запуске ЖРД первой ступени. Точность компьютерного моделирования в такой задаче существенно зависит от распределения газодинамических параметров на срезе сопла в ядре потока и в пограничном слое, свойств смеси сопловых газов, профиля сопла [1].

Основной целью данной работы является разработка вычислительно эффективной кинетической схемы для моделирования изменения газодинамических параметров потока в камере сгорания кислород/керосиновой ЖРД, сопле и истекающей из него струе. Акцент сделан на конкретной марке керосина RP-1, что связано с необходимостью численного моделирования и анализа наземных и летных экспериментальных исследований струйных течений, выполненных ранее в США с использованием данной марки керосина.

Керосин является одним из наиболее часто используемых на первых ступенях ракет топлив. Разработке кинетических схем горения керосина посвящено большое количество работ. Обзор по данной тематике можно найти, например, в [2, 3]. Детальные кинетические схемы горения керосина включают в себя более 300 компонентов и двух тысяч реакций [4], что приемлемо при моделировании непосредственно камеры сгорания, но недопустимо для задач моделирования струйных течений, т.к. приводит к большим затратам вычислительных ресурсов.

В работе [5] представлена редуцированная кинетическая схема для керосина марки RP-1, включающая 10 компонент и 17 реакций. Данная схема ориентирована на CFD-расчеты газодинамики и излучения струй ЖРД, однако содержит гетерогенные реакции, которые не могут быть заданы стандартными средствами универсальных САЕ-пакетов. Отсутствуют результаты тестирования кинетической схемы в условиях, характерных для камеры сгорания ЖРД.

В работе [4] представлена редуцированная кинетическая схема, включающая 9 компонент и 10 реакций. Однако следуя работе [3] эффективные параметры керосина отличаются от

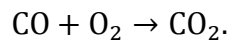
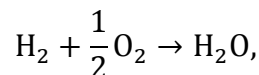
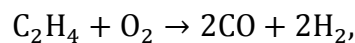
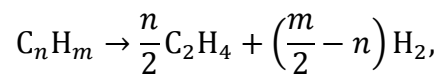
марки RP-1 в сторону значительного уменьшения молекулярного веса (более чем на 15%) и теплоемкости. Здесь, как и в работе [5], отсутствуют результаты тестирования предложенной кинетической схемы.

В данной работе предложена численная модель на базе упрощенной кинетической схемы горения керосина марки RP-1 в кислороде (RP-1/O<sub>2</sub>), ориентированной на условия, характерные для камер сгорания жидкостных ракетных двигателей.

В разделе 2 приведен набор реакций физико-химической кинетики для моделирования горения смеси RP-1/O<sub>2</sub>, показаны результаты термодинамических расчетов для диапазона массового соотношения кислорода и керосина (O/F) в топливной смеси от 1.6 до 4.4. Описание методики численного моделирования сопла ракетного двигателя на примере РД-170 и РД-180 от камеры до среза приведены в разделе 3. В разделе 4 приведено сравнение результатов моделирования с имеющимися экспериментальными и расчетными данными. В разделе 5 выполнен анализ сеточной зависимости численного решения.

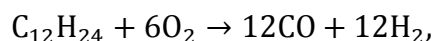
## 2. Модель горения смеси RP-1/O<sub>2</sub>

Упрощенная кинетическая схема процесса горения керосин-кислородной смеси (RP-1/O<sub>2</sub>) разработана на основе моделей, предложенных в работах [4, 5]. В соответствии с [6] глобальная кинетическая модель горения углеводородных топлив может быть записана в виде четырех брутто-реакций:



Для целей настоящей работы ключевым фактором является точность описания физико-химических процессов при догорании компонента H<sub>2</sub> в сопле ракетного двигателя и догорание компонента CO в истекающей сверхзвуковой струе. В связи с этим, в модель горения RP-1/O<sub>2</sub> включено детальное описание механизма догорания компонент H<sub>2</sub> и CO, приведенное в работе [4] (см. реакции № 2–10, табл. 1).

Процесс разложения керосина марки RP-1 представлен одной брутто-реакцией, записываемой в следующем виде:



где компонент C<sub>12</sub>H<sub>24</sub> является эффективным компонентом с термодинамическими характеристиками, соответствующими керосину марки RP-1.

В качестве энтальпии образования эффективного компонента C<sub>12</sub>H<sub>24</sub> вместо величины  $\Delta H_f^\theta = -380$  кДж/моль, принятой в [5], в данной работе используется величина  $\Delta H_f^\theta = -450$  кДж/моль, дающая более точное совпадение с [7] и результатами расчета кодом NASA CEA в диапазоне давлений и температур, характерных для камеры сгорания ракетного двигателя.

Термодинамические свойства эффективного компонента C<sub>12</sub>H<sub>24</sub> приняты аналогично [5]. Теплофизические свойства остальных компонентов приняты в соответствии с [8].

Коэффициенты для выражения скорости реакции, записываемой в аррениусовском виде, приведены в табл. 1, реакция №1. Константы А, В и Е подбирались для соответствия времени задержки воспламенения формуле, приведенной в [3] для диапазона температур от 700 К до 1500 К.

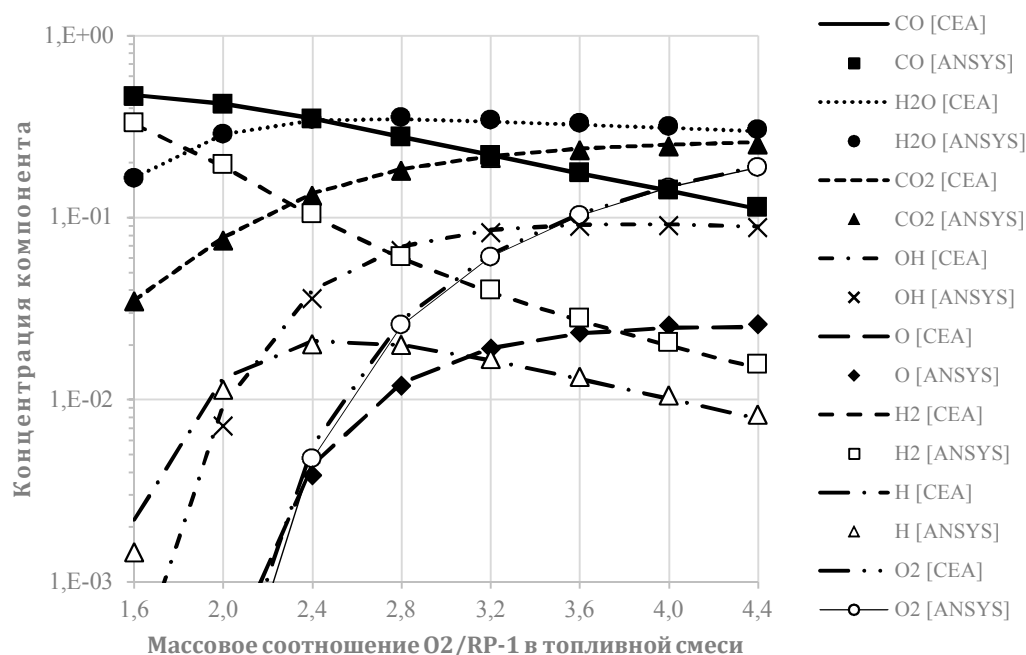
Таблица 1

Упрощенная кинетическая схема горения смеси RP-1/O<sub>2</sub>.  $k_f = A \cdot T^B \cdot e^{-E/RT}$ 

№ п/п	Реакция	A	B	E
1	$C_{12}H_{24} + 6O_2 \Rightarrow 12CO + 12H_2$	2.0E+13	0.0	2.177E+08
2	$CO + O + M \rightleftharpoons CO_2 + M$	5.3E+10	0.0	-1.900E+07
3	$CO + OH \rightleftharpoons H + CO_2$	4.4E+03	1.5	-3.098E+06
4	$H_2 + O_2 \rightleftharpoons OH + OH$	1.7E+10	0.0	2.010E+08
5	$H + O_2 \rightleftharpoons O + OH$	2.6E+11	0.0	7.033E+07
6	$OH + H_2 \rightleftharpoons H + H_2O$	2.2E+10	0.0	2.156E+07
7	$O + H_2 \rightleftharpoons OH + H$	1.8E+07	1.0	3.726E+07
8	$OH + OH \rightleftharpoons H_2O + O$	6.3E+10	0.0	4.560E+06
9	$H + H + M \rightleftharpoons H_2 + M$	6.4E+14	-1.0	0.0
10	$H + OH + M \rightleftharpoons H_2O + M$	2.2E+19	-2.0	0.0

Примечание: Эффективность M составляет 2.5 для компонента H<sub>2</sub>, 16 для H<sub>2</sub>O и 1 для остальных компонент. Размерность принята в джоулях, молях\*10<sup>-3</sup>, м<sup>3</sup>, секундах.

Сравнение расчета горения смеси RP-1/O<sub>2</sub> в программе ANSYS Fluent, выполненного в соответствии с данной моделью, с результатами термодинамического расчета в программе NASA CEA [9] показало хорошее согласование результатов по параметрам температуры и парциального состава компонентов. Результаты расчетов для давления  $P = 263$  атм приведены на рис. 1, 2 и 3. Как можно заметить на рис. 1 и 2, для массового соотношения кислорода и керосина в диапазоне от 2.0 до 3.6 отличия по величине температуры и парциального состава в смеси продуктов сгорания не превысили 1%. Для случая с недостатком кислорода ( $O/F < 2.0$ ) рассогласование с результатами расчетов кодом NASA CEA растет ввиду того, что среди продуктов сгорания появляются существенные доли углерода в твердой фазе, CH<sub>4</sub>, и других компонент, не включенных в упрощенную кинетическую модель.

Рис. 1. Сравнение концентрации компонент в продуктах сгорания топливной смеси RP-1/O<sub>2</sub>

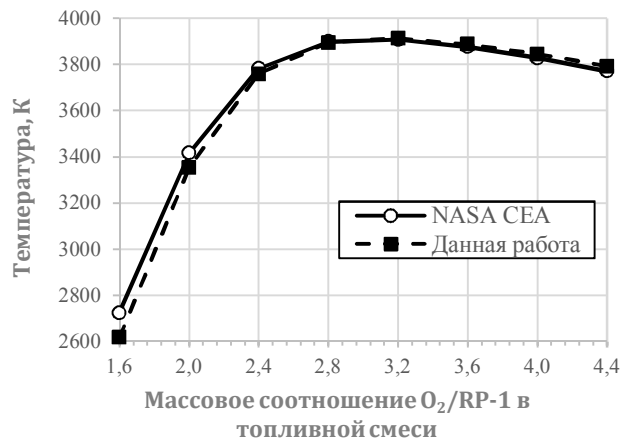


Рис. 2. Зависимость температуры пламени от массового соотношения компонент RP-1 и O<sub>2</sub> в топливной смеси

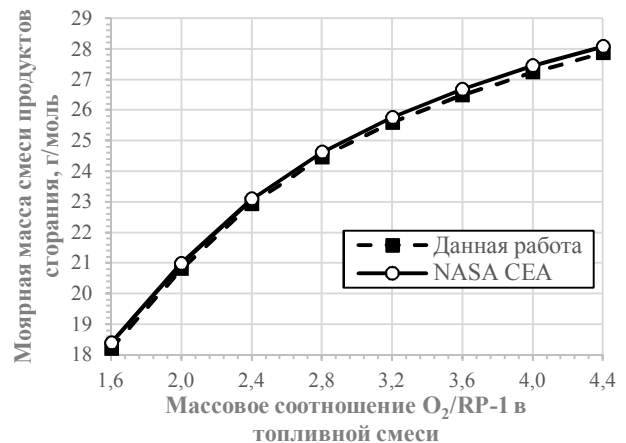


Рис. 3. Зависимость молярной массы смеси продуктов сгорания от массового соотношения компонент RP-1 и O<sub>2</sub> в топливной смеси

### 3. Численный эксперимент

Задача горения топливной смеси RP-1/O<sub>2</sub> в камере сгорания и истечения через профилированное сопло двигателя РД-170/РД-180 рассматривается в двумерной осесимметричной постановке. С точки зрения вычислительного эксперимента, камеры двигателей РД-170 и РД-180 отличаются по существу массовым расходом компонентов топлива и массовым соотношением компонентов топливной смеси (см. табл. 2).

Таблица 2

Параметры топливной смеси на входе в КС

Название ДУ	O/F	Массовый расход, кг/с	Температура, К
РД-170 [7]	2.60	598.25	137
РД-180 [10]	2.72	625.10	130

Для тестирования предложенной численной модели выполнено сравнение результатов расчетов с данными [7, 10] и расчетом, выполненным в [5].

Вычислительная модель сопла в осесимметричной постановке включает в себя уравнения Навье-Стокса, неразрывности, сохранения энергии в форме уравнения теплопроводности, сохранения массы химических компонент и уравнение для моделирования турбулентных пульсаций методом kw-SST. Интегрирование системы уравнений методом конечных объемов выполняется средствами CAE-пакета ANSYS Fluent.

Дискретизация расчетной области выполнена на гексаэдральной сетке, ориентированной по потоку со сгущениями в районе стенки сопла, критического сечения и входного сечения КС. Сеточная сходимость оценивается однократно на примере РД-170 для варианта с массовым соотношением компонентов топлива O/F=2.60.

Подача в камеру сгорания полностью перемешанной кислород-керосиновой смеси задана массовым расходом и средней по объему температурой. На срезе сопла задаются стандартные на уровне моря параметры давления и температуры. Исходные данные на входе в камеру сгорания приведены в табл. 2.

Учитывая данные работы [11] в расчетах была принята эффективная температура стенки камеры сгорания и поверхности стенки сопла, равная 900 К.

Система уравнений, составляющих вычислительную модель, решалась в нестационарной постановке с шагом  $\tau = 10^{-5}$  с до установления стационарного решения с использованием сопряженного «pressure-based» решателя (термин ANSYS Fluent) и неявной схемы 2-го порядка точности. Полностью сопряженный «density-based» решатель, предпочтительный [12] в расчетах сверхзвуковых течений со значительными градиентами давления и плотности, в данном случае не обеспечивает сходимости решения по невязкам ввиду наличия значительной дозвуковой зоны в камере сгорания. Использование «pressure-based» решателя в данной задаче существенно затруднено, ввиду больших нестационарных процессов, приводящих к изменению плотности, температуры и химического состава газовой смеси в камере сгорания на этапе запуска ЖРД. Для обеспечения устойчивости, процесс решения разбивается на три этапа.

На первом этапе решения поле течения рассчитывалось без учета физико-химических превращений. На втором этапе решения выполнялась инициация горения путем задания сверхкритической температуры в камере сгорания. Величина факторов релаксации по переменным «плотность» и «компоненты» на данном этапе уменьшалась до 0.8 и 0.95 соответственно. На третьем этапе, после установления температуры и давления на срезе сопла, факторы релаксации устанавливаются равными 1. Расчет считается сошедшимся после установления следующих параметров: давление и температура в камере сгорания и на срезе сопла, скорость и концентрация компонент на срезе сопла.

#### 4. Результаты расчетов

В табл. 3 представлено сравнение результатов численного моделирования с данными [7, 10]. Как можно заметить, расчет дает хорошее согласование по величине давления в КС и на срезе сопла. Вместе с этим, можно отметить следующие регулярно наблюдаемые отличия:

- превышение на 2–4% температуры в КС;
- превышение на 3–4% величины тяги двигателя.

Указанные рассогласования могут быть объяснены такими допущениями, принятыми при разработке непосредственно численной модели, как отсутствие моделирования смешения компонентов топлива, отсутствие моделирования дожигания газовой смеси, направленной на работу турбонасосного агрегата двигателя, отличием реальной температуры компонентов топлива от задаваемых в расчете и др.

Вместе с этим, отличие по тяге в 2–4% не превышает типичной погрешности исходных данных по величине массового расхода, температуры и соотношения компонентов на входе в двигатель.

Сравнение компонентного состава смеси сопловых газов температуры на срезе двигателя РД-170 с данными термодинамического расчета [5] представлено на рис. 4,а. Хорошее согласование по концентрации основных компонент  $\text{CO}$ ,  $\text{CO}_2$ ,  $\text{H}_2\text{O}$  и  $\text{H}_2$  достигается для массовых соотношений топливной смеси в диапазоне от 2.4 до 3.6. Температура в КС и на срезе сопла (см. рис. 4,б) хорошо совпадает с результатами расчетов [5] в диапазоне соотношений топливной смеси от 2.0 до 4.0.

Таблица 3

Сравнение результатов численного моделирования и паспортных данных для двигателей РД-170/180

Параметр	РД-170		РД-180	
	расчет	[7]	расчет	[10]
Давление в КС, атм	244.7	245.3	252.7	253.3
Температура в КС, К	3830	3676	3858	–
Среднее давление на срезе сопла, кПа	71.4	71.6	77.4	–
Тяга в вакууме, кН	8169	7907	4276	4153

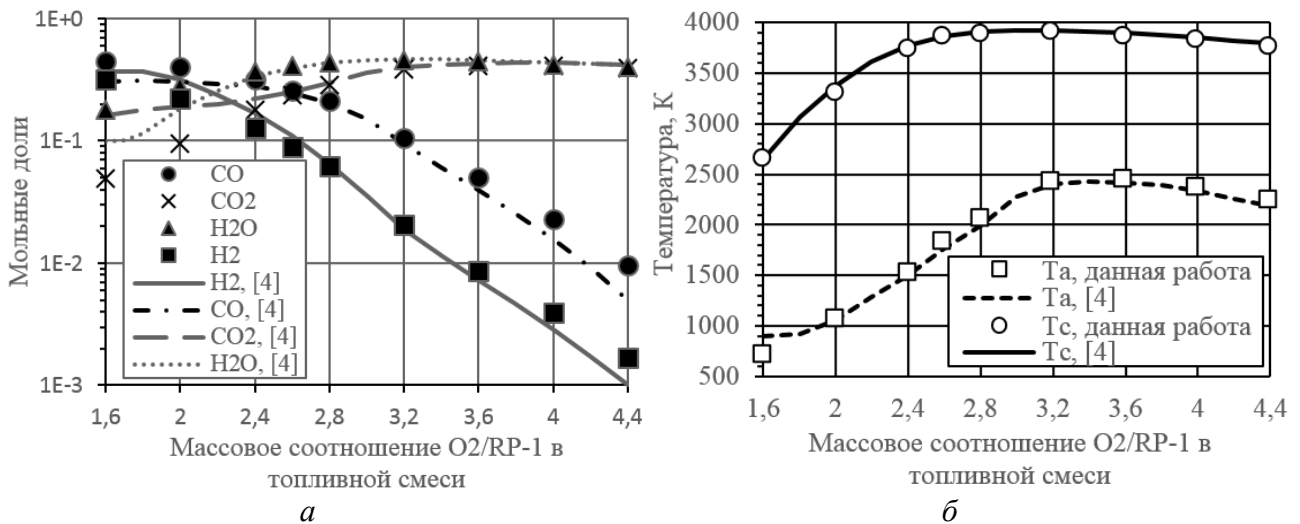


Рис. 4. Сравнение результатов расчетов сопла двигателя РД-170 с данными работы [5]

## 5. Оценка независимости решения от расчетной сетки

Параметризация сеточной дискретизации расчетной области выполнена по трем параметрам:

- $N_1$  – количество расчетных ячеек вдоль оси симметрии в КС;
- $N_2$  – количество расчетных ячеек вдоль оси симметрии в расширяющейся части сопла;
- $N_3$  – количество расчетных ячеек в радиальном направлении.

Некоторая выборка из результатов параметрических расчетов приведена в табл. 4. Изменение количества ячеек в продольном направлении внутри КС (варианты *a* и *б*) незначительно влияет на интегральные газодинамические характеристики в окрестности среза сопла. Нижняя граница значения параметра  $N_1$  определяется потребностями достижения сходимости решения по невязкам до заданного уровня.

Вариации параметра  $N_3$  (варианты *a*, *д*, *з*, *ж*) в значительной степени влияют на профиль газодинамических параметров в радиальном направлении не оказывая однако существенного влияния на осредненную величину давления, температуры и скорости на срезе сопла. В данной задаче значение параметра  $N_3$  равное 60 обеспечивает сходимость по невязкам до уровня  $10^{-5}$  и дает решение, отличающееся от решения на более подробных сетках менее, чем на 1%.

Таблица 4

### Результаты численного моделирования РД-170 на различных расчетных сетках

Вариант	Расчетная сетка, яч			Осредненные параметры на срезе сопла			
	$N_1$	$N_2$	$N_3$	$P$ , кПа	$V$ , м/с	$T$ , К	Тяга, кН
<i>a</i>	60	120	60	74.5	3190	1872	7633
<i>б</i>	100	120	60	74.2	3193	1866	7641
<i>в</i>	60	240	60	71.4	3223	1812	7713
<i>г</i>	60	120	100	74.3	3192	1868	7638
<i>д</i>	60	120	30	73.2	3200	1831	7657
<i>з</i>	60	80	60	76.9	3163	1919	7568
<i>е</i>	60	300	60	71.1	3227	1807	7722
<i>ж</i>	60	400	70	70.8	3229	1800	8179

Наибольшее влияние на осредненные газодинамические характеристики сопла оказывает сеточное разрешение расширяющейся части сопла в продольном направлении (параметр  $N_2$ ). По величине тяги (варианты *a*, *b*, *e*, *ж*) сеточная сходимость расчетов достигается для варианта расчета «*b*». Вариант сеточной дискретизации расчетной области «*b*» использован при моделировании сопла двигателя РД-170/РД-180, результаты которого описаны в разделе 4.

## 6. Заключение

В работе предложена упрощенная и вычислительно эффективная кинетическая схема горения керосин/кислородной смеси. В процессе вычислительных экспериментов подобрана энталпия образования для керосина марки RP-1. Выполнено сравнение результатов расчетов с доступными в открытой печати данными по двигателям РД-170/РД-180.

Дальнейшую работу в данном направлении планируется акцентировать на валидации модели горения для других двигательных установок, моделировании фазового превращения и перемешивания топлива с окислителем в камере сгорания, а также процессов догорания в дальнем поле струйного течения.

## Литература

1. Musial N.T., James J.W. Base Flow Characteristics for Several Four-clustered Rocket Configurations at Mach Numbers from 2.0 to 3.5 // NASA Technical Note D-1093. 1961.
2. Герасимов Г.Я., Лосев С.А. Кинетические модели горения керосина и его составляющих // Инженерно-физический журнал, 2005. Т. 78 № 6, С. 14–25.
3. Franzelli B., Ribet E., Sanjose M., Poinso T. A two-step chemical scheme for kerosene-air premixed flame // Combustion and Flame vol. 157, 2010. pp. 1364–1373.
4. Choi J. A Quasi Global Mechanism of Kerosene Combustion for Propulsion Applications, 47th AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference & Exhibit, Joint Propulsion Conferences, <http://dx.doi.org/10.2514/6.2011-5853>.
5. Wang T. Thermophysics Characterization of Kerosene Combustion, Journal of Thermophysics and Heat Transfer, Vol. 15, No. 2 (2001), pp. 140–147. <http://dx.doi.org/10.2514/2.6602>
6. Hautman D. J., Dryer F. L., Schug K. P., Glassman I. A Multiple-step Overall Kinetic Mechanism for the Oxidation of Hydrocarbons//Combustion Science and Technology. 1981. Vol. 25, No. 5–6, pp. 219–235. <http://dx.doi.org/10.1080/00102208108547504>
7. Sutton G.P., Biblarz O. Rocket Propulsion Elements. 2001. 7<sup>th</sup> Edition.
8. McBride B.J., Gordon S., Reno M.A. Coefficients for Calculating Thermodynamic and Transport Properties of Individual Species // NASA Technical Memorandum 4513, 1993.
9. Gordon S. McBride B. J., "Computer Program for Calculation of Complex Chemical Equilibrium Compositions and Applications," NASA Reference Publication 1311 (1996).
10. Tanner, L.G. Development and Characteristics of the Russian / American RD-180 Rocket Engine, AIAA Liquid Propulsion Short Course, 38th Joint Propulsion Conference, Indianapolis, IN, July 2002.
11. Fedorov V., Chvanov V., Chelkis F., Ivanov N., Lozinskay I., Buryak A. The Chamber Cooling System of RD-170 Engine Family: Design, Parameters, and Hardware Investigation Data, 42nd AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference & Exhibit, Joint Propulsion Conferences, <http://dx.doi.org/10.2514/6.2006-4363>
12. Sasanapuri B., Kumar M., Wirogo S., Kurbatskii K.A. Numerical Simulation of a Hypersonic Cruise Nozzle // 51st AIAA Aerospace Sciences Meeting including the New Horizons Forum and Aerospace Exposition, 07–10 January 2013, Grapevine (Dallas/Ft. Worth Region), Texas DOI: 10.2514/6.2013-492

Статья поступила в редакцию 22 августа 2016 г.