

高超声速三维化学非平衡流动的数值模拟

马辉 赵烈 王发民

(中国科学院力学研究所, 北京 100080)

摘 要: 高温非平衡化学应对高超声速再入飞行器绕流流场的气动热特性有较大影响. 通过采用有限体积 NND (Non-oscillatory, containing No free parameters and Dissipative scheme) 格式求解三维 N-S 方程, 分别计算了小攻角条件下球锥的完全气体粘性流场和化学反应非平衡气体流场. 比较并分析了化学非平衡作用对三维高超声速钝头体绕流流场的影响. 所得结果与国外文献结果符合的较好, 证明了计算方法与程序的有效性和实用性.

关键词: 化学非平衡; 三维计算; 高超音速再入; TVD 格式; 热流

中图分类号: V 211. 24

文献标识码: A

文章编号: 1001-5965(2004)02-0168-05

Numerical simulations of hypersonic three-dimensional chemical non-equilibrium flows

Ma Hui Zhao Lie Wang Famin

(Institute of Mechanics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100080, China)

Abstract: High temperature chemical non-equilibrium phenomena have a great effect on the flow field around a reentry vehicle. A three dimensional Navier-Stokes equations were solved by implicit finite volume NND scheme. Both ideal gas viscous flow and chemical non-equilibrium flow were calculated for a sphere-cone at a small attack angle. The results of the two flows were compared and the effect of chemical non-equilibrium was analyzed. The result is in good agreement with the reference paper. That proves that our method and programs are effective and practical.

Key words: chemical non-equilibrium; three-dimensional calculation; hypersonic reentry; TVD scheme; heat transfer rate

目前, CFD (Computational Fluid Dynamics) 方法已经成为公认的合理方法用于确定钝头体高超声速飞行器再入过程的气动力、气动热环境. 在上个世纪 80 年代, Shinn 等人在计算航天飞机 STS-2 在 50 ~ 80 km 高度范围内的气动性质时发现, 采用化学非平衡气体计算的流场与采用化学平衡气体计算的流场差别较大, 化学非平衡气体所得热流值明显低于平衡气体的计算结果, 而与飞行试验的测量结果符合的较好. 在再入过程所经历的轨道上, 高温气体化学反应现象对飞行器的气动热、气动力有十分重要的影响, 尤其是对波后流场的温

度分布和表面热流影响显著. 由于可重复使用飞行器的防热措施主要是表面辐射, 确定其再入过程的表面热流率的大小是进行热防护系统设计的关键.

高温化学非平衡流动热流计算方面存在两个问题, 首先, 对于三维复杂外流的湍流计算在壁面的范围内要有足够多的网格来模拟才能保证精度, 但网格的密度受到计算效率和计算机资源的限制. 其次, 化学非平衡所引起的刚性问题产生了计算的不稳定性和收敛困难的问题, 在三维计算中尤其突出. 针对上面的问题, 首先采用积分方法

收稿日期: 2002-09-28

作者简介: 马辉(1973-), 女, 黑龙江齐齐哈尔人, 博士生, ma_hui@mail.iapcm.ac.cn.

计算粘性项,并使用混合长度理论进行了壁面剪切力的修正来解决壁面网格精度问题,这种方法具有守恒性好,精度高的特点.同时,对化学非平衡源项采用隐式全耦合方法,在采用时间预处理矩阵来克服刚性问题的同时,根据化学反应流场的两个稳定性判据来对时间步长进行松弛处理以保证计算的稳定性.

以我国升力体布局重复使用航天器为研究背景,以相同头半径的球锥为模型,采用该飞行器轨道点上的环境参数,模拟了钝头体三维化学非平衡绕流流场,得到了与文献符合得较好的驻点热流值.分析比较了完全气体粘性流场和化学反应气体非平衡流场的计算结果,讨论了化学非平衡效应对流场气动特性的影响.

1 控制方程

笛卡尔坐标系下三维守恒 N-S 方程组的积分形式可写成

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho dV + \int_V \rho \mathbf{V} \cdot d\mathbf{S} = \\ \int_V \rho D_i \nabla y_i \cdot d\mathbf{S} + \int_V \rho \dot{m}_i dV \\ \frac{\partial}{\partial t} \int_V (\rho \mathbf{V}) dV + \int_V \rho \mathbf{V} (\mathbf{V} \cdot d\mathbf{S}) = \int_V \rho \mathbf{F} \cdot d\mathbf{S} \\ \frac{\partial}{\partial t} \int_V E dV + \int_V E \mathbf{V} \cdot d\mathbf{S} = \\ \int_V \rho \mathbf{V} \cdot d\mathbf{S} + \int_V \rho \mathbf{V} \cdot d\mathbf{S} \\ k \nabla T \cdot d\mathbf{S} + \int_V \rho h_i D_i \nabla y_i \cdot d\mathbf{S} \end{aligned}$$

状态方程为

$$p = \sum_{i=1}^{ns} \rho_i R_i T$$

声速为

$$a^2 = \sum_{s=1}^{ns} c_s \frac{\partial}{\partial s} + \frac{\partial}{\partial (E)} [H - (u^2 + v^2 + w^2)]$$

其中, $\mathbf{V} = u\mathbf{i} + v\mathbf{j} + w\mathbf{k}$; \dot{m}_i 为组元 i 的质量生成率; D_i 为组元 i 的扩散系数; y_i 为组元 i 的质量分数; $\mathbf{F} = - \left[p + \frac{2}{3} \mu \text{div}(\mathbf{V}) \right] \mathbf{I} + 2\mu \mathbf{S}$; \mathbf{S} 为应变张量; \mathbf{I} 为单位矩阵.

由于主要研究问题为飞行器再入大气层过程中的气动加热,因此在选择化学反应模型时忽略了流场的电磁特性的影响,选用了 5 组元、11 反应的化学模型.正逆反应速率常数采用 Dunm-Kang 模型计算.

2 数值方法

2.1 数值方法

对无粘项的计算,计算格式采用了一种基于 NND 思想构造的 TVD 格式^[1],由于 NND 格式的二阶粘性耗散项是直接对通量取 minmod 的,

$$G_i^+ = \frac{1}{2} \min \text{mod} \left(\rho_{i-1/2} H^+, \rho_{i+1/2} H^+ \right)$$

这在三维计算中容易产生三维不对称性,通过对通量的雅克比矩阵取 minmod,克服了三维对称性不好的问题,

$$G_i^+ = \frac{1}{2} R_{i+1/2} \min \text{mod} \left(\rho_{i-1/2} R_{i+1/2}^{-1} \rho_{i-1/2} \mathbf{U}, \rho_{i+1/2} R_{i+1/2}^{-1} \rho_{i+1/2} \mathbf{U} \right)$$

对于三维高温化学反应流动计算,需要在 $y^+ < 30$ 这一很薄的壁面附近,保证有足够多的网格点以模拟温度、速度、组元浓度梯度很大的物理化学和流动特性,为此应用了以下几点措施以提高计算精度:

1) 对粘性项的计算,为了克服差分算法误差较大的缺点,根据梯度和散度的定义,采用积分的方法计算粘性项

$$\text{grad} \frac{1}{V} \left[\sum_{l=1}^6 S_{lx} \mathbf{i} + \sum_{l=1}^6 S_{ly} \mathbf{j} + \sum_{l=1}^6 S_{lz} \mathbf{k} \right]$$

其中, \mathbf{e}_l 为一标量; S_l 为在面 l 上的值; S_l 为 l 面的面积矢量; V 为六面体体积.这样保证了粘性扩散项的守恒性,提高了计算的精度^[2].

压力项和表面热流的积分方法计算公式分别为

$$\begin{aligned} p = p + \frac{2}{3V} \mu \left(\sum_{l=1}^6 u_l S_{lx} + \sum_{l=1}^6 v_l S_{ly} + \sum_{l=1}^6 w_l S_{lz} \right) \\ q_n \cdot \mathbf{S} |_{\text{wall}} = - \left[k \nabla T \cdot d\mathbf{S} + \sum_{i=1}^{ns} \rho_i h_i D_i \nabla y_i \cdot d\mathbf{S} \right] \end{aligned}$$

2) 对壁面热流率影响较大的另一个重要的因素是壁面剪切力的计算,为了使热流计算得更精确,采用湍流的混合长度理论对壁面剪切力修正.通过对下式进行迭代,求得壁面剪切力

$$\frac{u_1}{(w/w_1)^{1/2}} = \frac{1}{\kappa} \left[E y_1 \frac{(w/w_1)^{1/2}}{\mu_w} \right]$$

其中, u_1 和 y_1 分别为离开壁面第一个网格点的速度和距离; κ 和 E 为经验系数.

3) 差分格式另一个特点是简化了雅克比矩阵 \bar{C} 的左右特征矩阵 R, R^{-1} 的计算

$$R = \begin{bmatrix} sr & 0 & 0 & Y_s & Y_s \\ u & k_3 & -k_2 & u + ak_1 & u - ak_1 \\ v & 0 & k_1 & v + ak_2 & v - ak_2 \\ w & -k_1 & 0 & w + ak_3 & w - ak_3 \\ |u|^2 - \frac{r}{a^2} & uk_3 - wk_1 & -uk_2 + vk_1 & H + a & H - a \end{bmatrix}$$

$$R^{-1} = \begin{bmatrix} sr - \frac{r}{a^2} Y_s & \frac{u}{a^2} Y_s & \frac{v}{a^2} Y_s & \frac{w}{a^2} Y_s & -\frac{r}{a^2} Y_s \\ -\frac{k_3 - v}{k_1} & k_3 & \frac{k_2 k_3}{k_1} & \frac{k_3^2 - 1}{k_1} & 0 \\ \frac{k_2 - v}{k_1} & -k_2 & \frac{1 - k_2^2}{k_1} & \frac{k_2 k_3}{k_1} & 0 \\ \frac{r - a}{2a^2} & \frac{k_1}{2a} - \frac{u}{2a^2} & \frac{k_2}{2a} - \frac{v}{2a^2} & \frac{k_3}{2a} - \frac{w}{2a^2} & \frac{r}{2a^2} \\ \frac{r + a}{2a^2} & -\frac{k_1}{2a} - \frac{u}{2a^2} & -\frac{k_2}{2a} - \frac{v}{2a^2} & -\frac{k_3}{2a} - \frac{w}{2a^2} & \frac{r}{2a^2} \end{bmatrix}$$

从文献[3]中可知,这种分开写的左右特征向量矩阵的计算要比统一格式的计算量要少.其中 k_1 、 k_2 和 k_3 为任意常数,上式为 $k_1 = 0$ 时的形式.在计算过程中,由于每一时间步的计算都需要多次调用左右特征矩阵,因此这种简化有效的节省了计算时间.

2.2 化学源项的处理

在真实的时间尺度上,流场流动参数和化学组元的变化速率存在一定的差异,实际上在源项 $S(U)$ 中隐含了化学非平衡的迟豫时间 $\tau_{chem} = \left(\frac{\partial \cdot}{\partial t}\right)^{-1}$,而流动的宏观时间尺度为 $\tau_{flow} = \frac{x}{u+a}$,对于非平衡问题实际上存在两个时间稳定性判据:

1) 时间步长 τ 必须考虑非平衡松弛过程,应小于系统中有限速率最快的过程 $\tau < B \tau_{chem}$;

2) 根据双曲型方程的稳定性判据,时间步长 τ 必须满足 $\tau < k \tau_{flow}$.

其中, B 为无量纲参数,可根据经验取 $B < 1$ 或 $B < 0.1$; k 为与所取格式有关的系数; a 为当地声速.

当 $\tau_{chem} \ll \tau_{flow}$ 时,就会产生刚性问题.采用时间预处理矩阵的方法来改善这种时间刚性,但实际计算中时间预处理矩阵的作用会受到限制,只有在时间预处理矩阵真正反映了化学反应特征时间时,它才能真正发挥作用.在计算的初期,由于完全气体流场所得的温度场要比化学非平衡气体的温度场高的多,会引起化学源项的“过度”调整.

此时计算的时间步长是根据流场的流动特征时间来选的,这就需要特别注意非平衡现象对时间步长引入的稳定性判据.时间步长的选取不能太大,否则会由于严重的刚性而导致计算不收敛.因此可对时间步长采用某种处理, $\tau = k_1 \tau_{flow}$,其中, k_1 为参考流场内化学非平衡特征时间而取的经验参数,其范围为 $1.0 \times 10^{-2} < k_1 < 1.0$.

3 计算算例和结果分析

计算的流场环境取为可重复使用航天器的轨道点之一,分别进行了完全气体粘性N-S方程流场和化学反应非平衡流场的计算.计算高度为67.4 km,温度为266.6 K,来流马赫数 $Ma = 11.17$,攻角 11.75° ,密度 $1.18 \times 10^{-4} \text{ kg/m}^3$,雷诺数为 4.707×10^3 .在物面边界上,采用无滑移、等温壁条件 $T_w = 1100 \text{ K}$,并假设壁面为完全催化壁,压力法向导数为零.外边界采用自由来流条件.出口参数利用一阶外推原始变量的方法求得.粘性系数和热传导系数分别采用了Blotter的拟合公式和Eucken半经验公式计算,扩散系数采用二元模型简化,根据Lewis数定义计算.

网格的结构和精度对计算的影响较大.特别是垂直于物面的网格的精度对密度和温度的计算有显著的影响.计算的收敛与网格的精度有关,网格过稀会加剧化学反应的刚性,从而导致计算发散.但网格过密会影响计算速度,同时也要求有大容量的计算机内存.由文献[4]可知,要保证钝头

体热流计算的精度,壁面网格雷诺数 $Re_x = a/\mu$ 应在 1~2 的量级之间.

图 1 为本文所采用网格的壁面网格雷诺数.由图中可看出网格雷诺数在 2 左右,满足了文献 [4] 的要求.在 $s = 0.1$ 时网格雷诺数出现的下降,是由于计算所得的温度在这两个点上出现上升引起的.

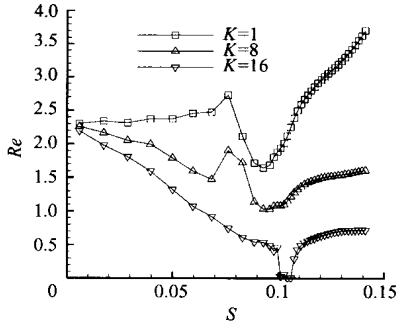


图 1 壁面网格雷诺数

表 1 为计算所得驻点热流值与文献值的比较,从表中可看到,计算值与文献值具有相同的量级,因此,证明了计算方法在热流计算上是可靠的.非平衡流场计算所得驻点热流比粘性流场计算所得驻点热流值低,这主要是由于波后化学反应吸收能量,引起温度降低,从而导致壁面热流率的降低.从表中可以看出,非平衡气体物面压力要高于完全气体物面压力,这是由于激波更贴近壁面,使得壁面压力略有升高.

表 1 驻点热流密度和压力值的比较

对比量	完全气体	非平衡气体	文献[5]
$Q/(MW \cdot m^{-2})$	0.142	0.0763	0.06
P/Pa	1079.16	921.949	

图 2 为化学非平衡流场温度等值线图,其驻点温度为 6 105.55 K.

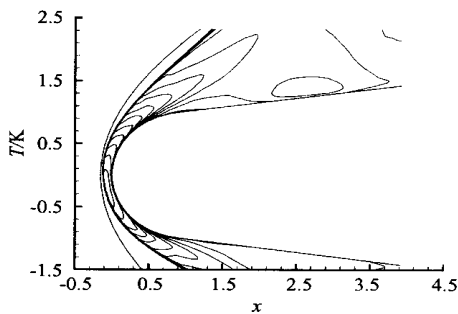


图 2 化学非平衡流场温度等值线

图 3 为完全气体流场温度等值线图,其驻点温度为 4 743.83 K. 由于波后的化学反应吸热使得

波后气体温度明显下降.

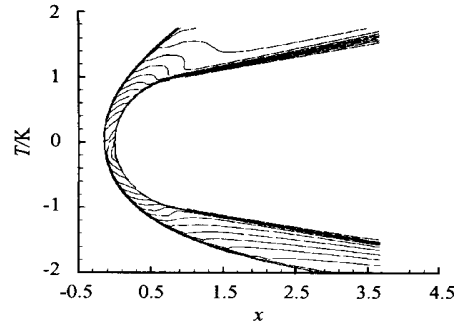


图 3 完全气体流场温度等值线图

图 4 为完全气体流场与非平衡气体流场的激波脱体距离的比较,从图中可以看出,由于化学反应非平衡的作用,激波更靠近壁面.

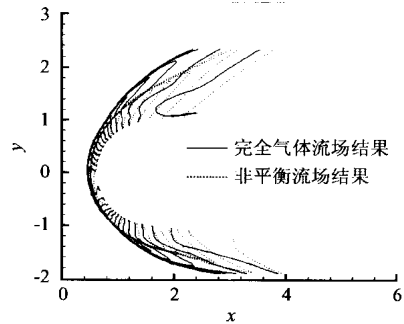


图 4 激波脱体距离的比较图

图 5 为驻点线上各组元质量分数的分布.从图中可以看出,激波后氧气基本完全离解,而氮气的离解较少,激波后的气体主要由氮分子、氮原子和氧原子组成.

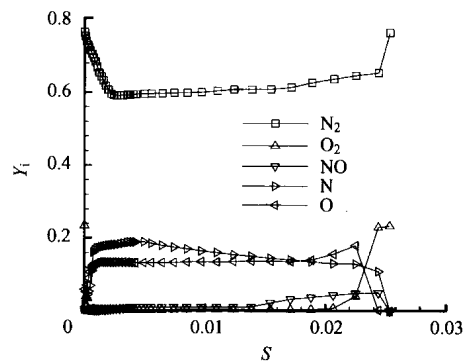


图 5 沿驻点线组元质量分数的分布

图 6 为完全气体与非平衡气体物面热流分布的比较.从图中可以看出,非平衡气体流场的物面热流低于完全气体流场,由于考虑了激波后的化学反应使得激波层内的温度比完全气体流场的温度大大降低,因此非平衡流场所得的物面热流值低于完全气体流场的结果.

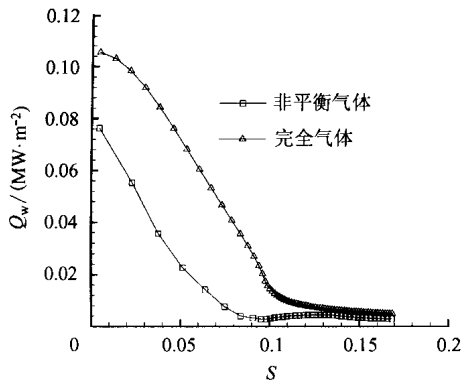


图6 物面热流分布

4 结束语

本文采用有限体积法 NND 格式求解了化学非平衡流场,对粘性项采用积分方法以及采用混合长度理论对壁面剪切力进行修正,讨论了在非平衡流计算中时间步长和空间步长(及网格精度)的选取方法,求得了比较精确的流场参数,得到较为准确的热流分布.通过对完全气体流场结果与化学非平衡气体流场结果比较,分析了化学反应对流场气动力、气动热特性的影响.计算结果表明,计算方法和计算程序是合理的,能正确地模拟

高超声速钝头体再入过程中的化学反应非平衡流场.

参考文献 (References)

- [1] 陈让福. 三维高超声速无粘定常绕流的数值模拟[D]. 北京: 北京大学数学系, 1991
Chen Rangfu. Numerical simulation of inviscid steady hypersonic flow around three dimensional body[D]. Beijing: College of Mathematics Science, Peking University, 1991 (in Chinese)
- [2] 封建湖. 三维进气道系统流场的数值模拟研究[D]. 西安: 西北工业大学航空发动机系, 1995
Feng Jianhu. Numerical simulation study of three dimensional flow field of inlet system[D]. Xi'an: Dept. of Aeroengine and Thermal Power Engineering, Northwestern Polytechnical University, 1995 (in Chinese)
- [3] Goffio P A. An upwind-biased point-implicit relaxation algorithm for viscous compressible perfect-gas flows[R]. NASA TP-2953, 1990
- [4] Whitfield D L, Janus J M. Three-dimensional unsteady euler equations solution using flux vector splitting[R]. AIAA 84-1552, 1984
- [5] David Olynick. Trajectory-based thermal protection system sizing for an X-33 winged vehicle concept[J]. Journal of Spacecraft and Rockets, 1998, 35(3): 249 ~ 257
- [6] Kim S L, Jeung I S, Park Y H. Approximate jacobian methods for efficient calculation of reactive flows[R]. AIAA 2000-3384, 2000

北京航空航天大学研究中心

BUAA - CAST 研发中心
微传感器技术中心
直升机研究中心
微电子研究中心
GPS 工程研究中心
隐身与反隐身研究中心
风切变技术研究中心
石化工程高新技术开发中心
飞行器计算机辅助设计中心
测探技术研究中心

空中交通管制研究中心
螺旋桨研究与发展中心
生物医学工程研究中心
软件科学研究中心
无人驾驶飞行器研究中心
机器人研究中心
复合材料研究中心
微小型飞行器研究中心
计算机与信息研发中心