

热与化学耦合非平衡对热流和 电子密度的影响*

唐锦荣 崔安青

中国科学院力学研究所, 北京 100080

摘要 采用单、双温度模型两种粘性激波层方程组对弹头驻点区非平衡流场作了数值模拟。计算结果表明, 在算例条件下热非平衡与化学非平衡的耦合效应对壁面热流和电子密度有明显影响。文中给出了完全催化壁和非催化壁两种情况下以及采用不同振动松弛时间公式时上述影响的变化规律。

关键词 热非平衡; 振动松弛; 双温度模型; 非平衡流动

中图分类号 V211.1

0 引言

在高空再入段, 气体粒子内自由度松弛时间、化学反应特征时间与宏观流动特征时间相比都不再是可忽略的小量, 因而需同时考虑热和化学非平衡效应^[1~3]。

本文采用单、双温度模型两种 VSL 方程组计算和分析了振动松弛和化学非平衡耦合效应对弹头驻点区壁面热流和流场电子密度的影响。

1 基本方程组和边界条件

对于速度小于 8 km/s 的战略导弹等飞行器再入问题, 热非平衡过程中只需计及振动内自由度松弛, 由文献[2,3]的双温度(平动-转动温度 T_T 和振动温度 T_V)模型 NS 方程组, 按通常方法简化可导得下列双温度模型 VSL 方程组(无量纲化)

$$\frac{\partial}{\partial x}(\gamma \rho u) + \frac{\partial}{\partial y}(\chi r \rho v) = 0 \quad (1)$$

$$\rho \left(\frac{u}{\chi} \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{k}{\chi} uv \right) = -\frac{1}{\chi} \frac{\partial p}{\partial x} + \varepsilon^2 \frac{\partial}{\partial y}(\tau_{xy}) + \varepsilon^2 \left(\frac{2k}{\chi} + \frac{\cos \theta}{r} \right) \tau_{xy} \quad (2)$$

$$\rho \left(\frac{u}{\chi} \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} - \frac{ku^2}{\chi} \right) = -\frac{\partial p}{\partial y} \quad (3)$$

* 国家自然科学基金和国防科工委资助项目。
本文于1995年7月4日收到, 11月14日收到修改稿。

$$\begin{aligned} \rho \frac{u}{\chi} \left(C_{PT} \frac{\partial T_T}{\partial x} + C_{vV} \frac{\partial T_V}{\partial x} \right) + \rho v \left(C_{PT} \frac{\partial T_T}{\partial y} + C_{vV} \frac{\partial T_V}{\partial y} \right) - \frac{u}{\chi} \frac{\partial p}{\partial x} - v \frac{\partial p}{\partial y} = \\ \varepsilon^2 (\chi r)^{-1} \frac{\partial}{\partial y} \left[\chi r \left(K_T \frac{\partial T_T}{\partial y} + K_V \frac{\partial T_V}{\partial y} \right) \right] - \varepsilon^2 \sum_{i=1}^{NS} \left[J_i \left(C_{PTi} \frac{\partial T_T}{\partial y} + \right. \right. \\ \left. \left. C_{vVi} \frac{\partial T_V}{\partial y} \right) \right] + \varepsilon^2 \mu^{-1} \tau_{\tau_{v_i}} - \sum_{i=1}^{NS} \dot{w}_i h_i \end{aligned} \quad (4)$$

$$\begin{aligned} \rho C_{vV} \left(\frac{u}{\chi} \frac{\partial T_V}{\partial x} + v \frac{\partial T_V}{\partial y} \right) = \varepsilon^2 (\chi r)^{-1} \frac{\partial}{\partial y} \left(\chi r K_V \frac{\partial T_V}{\partial y} \right) - \varepsilon^2 \frac{\partial T_V}{\partial y} \sum_{i=1}^{NS} J_i C_{vVi} + \\ \rho \sum_{i=1}^{NS} C_i [e_{Vi}(T_T) - e_{Vi}(T_V)] \tau_{v_i}^{-1} \end{aligned} \quad (5)$$

$$\rho \frac{u}{\chi} \frac{\partial C_i}{\partial x} + \rho v \frac{\partial C_i}{\partial y} = \dot{w}_i - \varepsilon^2 (\chi r)^{-1} \frac{\partial}{\partial y} (\chi r J_i) \quad (6)$$

$$p = [R^* / (\bar{M}^* C_{P\infty}^*)] \rho T_T \quad (7)$$

其中

$$\chi \equiv 1 + ky, \quad \varepsilon^2 \equiv (\mu_{\tau_{v_i}}^* / \rho_{\infty}^* U_{\infty}^* R_i^*)^{1/2}, \quad \tau_{\tau_{v_i}} \equiv \mu \left(\frac{\partial u}{\partial y} - \frac{ku}{\chi} \right)$$

$$C_{PT} = \sum_{i=1}^{NS} C_i C_{PTi}, \quad C_{PTi} = \begin{cases} \frac{5}{2} R_i & (i \text{ 为单原子组元时}) \\ \frac{7}{2} R_i & (i \text{ 为双原子组元时}) \end{cases}$$

$$R_i \equiv R^* / M_i^* C_{P\infty}^*, \quad C_{vV} = \sum_{i=1}^{NS} C_i C_{vVi}$$

对双原子组元

$$C_{vVi} = \frac{de_{Vi}(T_V)}{dT_V}, \quad e_{Vi}(T_x) = R_i \theta_{Vi} / [\exp(\theta_{Vi} / T_x) - 1],$$

$$T_x = T_T, T_V, \quad \tau_{v_i} = \tau_{v_i}^* / (R_i^* / U_{\infty}^*), \quad \tau_{v_i}^* = \left[\sum_{j=1}^{NS} (C_j \bar{M}^* / M_j^*) / \tau_{v_{ij}}^* \right]^{-1}$$

对单原子组元: $C_{vVi}, e_{Vi} = 0$, 并令 $\tau_{v_i} = 1$ 。

在上述方程组和表达式中, 上标 * 表示有量纲量, 下标 T 和 V 分别表示平动-转动和振动, C_{vVi}, e_{Vi} 和 θ_{Vi} 分别为组元的振动比热、平均振动能和振动特征温度, $\tau_{v_i}^*$ 和 $\tau_{v_{ij}}^*$ 分别为平动-转动自由度与振动自由度间能量交换源项中的 i 组元平均振动松弛时间和二组元振动松弛时间, 其它未说明的符号为采用 VSL 方程组时的通用符号(下同)。鉴于我们研究的是再入速度较低的问题, 振动能表达式采用的是谐振子模型公式, 方程(5)中上述能量交换源项采用的是未作高温修正的 Landau-Teller 公式^[1, 2]。关于振动松弛与化学反应速度间的耦合影响, 采用了不考虑“优先离解”效应的 CVD 模型^[4, 2], 并用文献[5]提出的平均温度 $T_s = \sqrt{T_T T_V}$ 来计算分子离解反应的正向速率常数以及此耦合影响。

当令 $T_T = T_V = T$ 时方程(1)~(4)、(6)、(7)即为单温度模型(热平衡而化学非平衡情况) VSL 方程组。

无滑移壁面($y = 0$)边界条件为

$$u = v = 0 \quad (8)$$

$$T_T = T_V = T_W \quad (\text{壁面处热平衡条件}) \quad (9)$$

$$\begin{cases} C_i = C_{iW,eq} & (\text{完全催化壁条件}) \\ \frac{\partial C_i}{\partial y} = 0 & (\text{非催化壁条件}) \end{cases} \quad (10)$$

$y = y_s$ 处的边界条件采用无滑移激波关系式, 在双温度模型中此关系式为

$$\rho_s v'_s = -\sin\alpha \quad (11)$$

$$u'_s = \cos\alpha \quad (12)$$

$$p_s = p_\infty + \sin^2\alpha + v'_s \sin\alpha \quad (13)$$

$$C_{i,s} = C_{i,\infty} \quad (14)$$

$$T_{V,s} = T_\infty \quad (15)$$

$$C_{PTS} T_{TS} + \sum_{i=1}^{NS} C_{i,s} e_{Vi} (T_{V,s}) = C_{PT\infty} T_\infty + \sum_{i=1}^{NS} C_{i,\infty} e_{Vi} (T_\infty) + \frac{1}{2} (1 - \rho_s^{-2}) \sin^2\alpha \quad (16)$$

$$p_s = [R^* / \bar{M}_s^* C_{P\infty}^*] \rho_s T_{TS} \quad (17)$$

$$u'_s = u_s \cos(\alpha - \theta) + v_s \sin(\alpha - \theta) \quad (18)$$

$$v'_s = v_s \cos(\alpha - \theta) - u_s \sin(\alpha - \theta) \quad (19)$$

其中, 下角标 s 表示激波的波后参数, u'_s 和 v'_s 分别为沿激波切向和法向的波后速度。

当令 $T_T = T_V = T$ 时, (8)~(10)、(11)~(14)和(16)~(19)即为单温度模型 VSL 方程组的相应边界条件。

2 算例和结果讨论

用上述方程组和边界条件, 采用通常的 7 组元空气化学模型和隐式差分格式^[7], 计算了再入速度 $U_\infty^* = 7.5 \text{ km/s}$, 钝头半径 $R_n^* = 0.1 \text{ m}$, 再入高度 $H^* = 70 \sim 90 \text{ km}$ (间隔 5 km) 和壁温 $T_w^* = 1000 \text{ K}$ 的驻点区流场。

关于振动松弛时间 $\tau_{V,ii}^*$, 已知的实验数据在温度范围和组元种类方面还很不完全, 有关的数值模拟中一般采用文献[8]在总结实验数据基础上提出的半经验公式, 但在此公式系数表中, 与空气有关的只有纯氧气中的 $\tau_{V,i}^*$ 和纯氮气中的 $\tau_{V,i}^*$, 因未给出上述单纯气体中的原子和分子组元成分, 无法根据此数据推算出我们需要的 $\tau_{V,ii}^*$ 。为研究不同振动松弛时间对流场数值模拟结果的影响, 本文采用下列两种 $\tau_{V,i}^*$ 计算公式

$$\tau_{V,i}^*(\text{空气}) = \tau_V^*(\text{空气}) = \begin{cases} \tau_{V,i}^* \equiv \tau_{V,N_2}^* (\text{氮气}) & (20) \\ \tau_{V,i}^* \equiv \tau_{V,O_2}^* (\text{氧气}) & (21) \end{cases}$$

其中 τ_{V,N_2}^* (氮气) 和 τ_{V,O_2}^* (氧气) 按文献[8]作了高温修正的公式(见文献[2])计算。在本文所涉及的温度范围内, $\tau_{V,i}^* \gg \tau_{V,i}^*$ 。

数值模拟结果表明, 在算例条件下, 对于流场速度和压力分布, 单、双温度模型两种 VSL 方程组的结果相差不大 ($< 5\%$), 而对于温度、密度和组元浓度分布, 两种结果有明显差别。

图1中给出了 $H^*=80\text{km}$ 时非催化壁和完全催化壁两种工况及两种振动松弛时间情况的流场电子密度的典型剖面, 其中, $U_\infty^*=7.5\text{km/s}$, $R_n^*=0.1\text{m}$, $n_{e-}=n_{e-}^*/n_i^*$, $n_i^*=1\text{cm}^{-3}$ 。计算结果表明, 振动松弛与化学非平衡的耦合效应对电子密度的影响随再入高度升高而增大。当 $H^*=70\text{km}$ 时, 在靠近壁面的区域上述影响可以忽略, 在远离壁面的区域, 振动平衡情况的电子密度 $n_{e-}^*{}_{-VE}$ 比振动松弛情况的电子密度 $n_{e-}^*{}_{-VR}$ 高数倍,

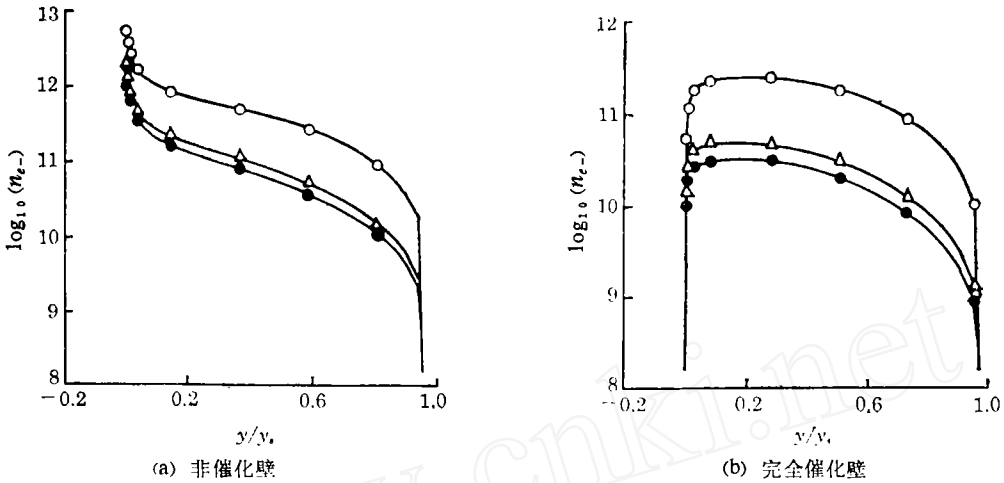


图1 电子密度剖面

Fig.1 Profiles of electron number density

—○— 振动平衡 —●— 振动非平衡 ($\tau_i^* = \tau_v^*$) —△— 振动非平衡 ($\tau_i^* = \tau_v'^*$)

而 $n_{e-}^*{}_{-VR}(\tau_v^*)$ 与 $n_{e-}^*{}_{-VR}(\tau_v'^*)$ 间的差别可忽略, 当 $H^*=80\text{km}$ 时, 在剖面的绝大部分区域 $n_{e-}^*{}_{-VE}$ 比 $n_{e-}^*{}_{-VR}$ 大 1 个量级以上, 而 $n_{e-}^*{}_{-VR}(\tau_v^*)$ 与 $n_{e-}^*{}_{-VR}(\tau_v'^*)$ 间的最大差别为 37%; 当 $H^*=90\text{km}$ 时, 在剖面的绝大部分区域 $n_{e-}^*{}_{-VE}$ 比 $n_{e-}^*{}_{-VR}$ 大 5 个量级以上, 而 $n_{e-}^*{}_{-VR}(\tau_v^*)$ 比 $n_{e-}^*{}_{-VR}(\tau_v'^*)$ 大 1 个量级以上。对于本文涉及的 $H^*\geq 70\text{km}$ 而 $U_\infty^* < 8\text{km/s}$ 的情况, 空气离解度较小, 主要电离反应为 $\text{N} + \text{O} \rightleftharpoons \text{NO}^+ + e^-$, 其电子组元 e^- 的反应生成率与氮原子 N 和氧原子 O 的浓度的乘积成正比。因此当振动松弛使流场中有效离解温度 $T_e = \sqrt{T_T T_V}$ 随再入高度增加而明显降低, 从而使双温度模型情况的 N 和 O 的浓度比单温度模型情况的相应浓度值都随之显著降低时, 此两种模型情况的电子密度的差别随再入高度增加而更加显著地变大。

图2(a)、(b)中给出了驻点壁面热流计算结果。在 70km 处, 非催化壁情况下有振动松弛时的热流 $q_{VR}^*(\tau_v^*)$ 和 $q_{VR}^*(\tau_v'^*)$ 分别比振动平衡时的 q_{VE}^* 增加约 24% 和 4%; 完全催化壁情况下 $q_{VR}^*(\tau_v^*)$ 和 $q_{VR}^*(\tau_v'^*)$ 分别比 q_{VE}^* 小 16% 和 30%。随再入高度增加上述两种情况下的 $q_{VR}^*(\tau_v^*)$ 和 $q_{VR}^*(\tau_v'^*)$ 的差别都逐渐减小。在 90km 处, 在相对误差 $\leq 1.5\%$ 的精度范围内 $q_{VEFC}^* \approx q_{VENC}^* \approx q_{VE}^*$, $q_{VRFC}^*(\tau_v^*) \approx q_{VRFC}^*(\tau_v'^*) \approx q_{VRNC}^*(\tau_v^*) \approx q_{VRNC}^*(\tau_v'^*) \approx q_{VR}^*$, 并且 q_{VR}^* 比 q_{VE}^* 小约 9% (下标 FC 和 NC 分别表示完全催化壁和非催化壁)。壁面热流的变化规律比较复杂主要有两个原因, 其一是壁面热流是由平动-转动热传导、振动热传导和扩散热流几部分组成, 不同情况下各部分的变化规律不同, 其二是壁面热流是局部参数, 它不仅与流场总体的非平衡过程 (振动非平衡一般为 $T_V <$

T_T 的振动“欠松弛”，而主要化学反应为分子离解为原子反应)有关，而且受到壁面附近局部区域非平衡过程(振动非平衡常为 $T_V > T_T$ 的振动“超松弛”，而主要化学反应为原子复合为分子的反应)的显著影响。当化学反应特征时间和振动态激发的松弛时间随高

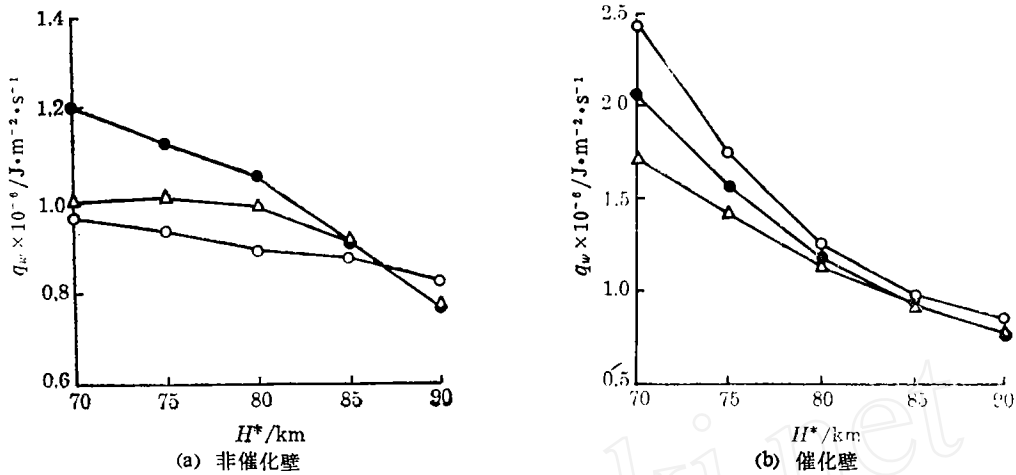


图 2 驻点壁面热流 ($U_\infty^* = 7.5 \text{ km/s}$, $R_n^* = 0.1 \text{ m}$, $T_W = 1000 \text{ K}$)

Fig.2 Wall heat flux at stagnation point ($U_\infty^* = 7.5 \text{ km/s}$, $R_n^* = 0.1 \text{ m}$, $T_W = 1000 \text{ K}$)

—○— 振动平衡 —●— 振动非平衡 ($\tau_{v,i}^* = \tau_{v,i}'^*$) —△— 振动非平衡 ($\tau_{v,i}^* = \tau_{v,i}'^*$)

度增加而增加到都远远大于流动特征时间时，化学非平衡和振动非平衡应分别趋向化学冻结和振动态冻结工况，上述 90km 处的各热流近似等式表明，对于壁面传热问题，在算例条件下当 $H^* \geq 90 \text{ km}$ 时可近似地按化学和振动态冻结流求解。

3 结 论

(1) 本文数值模拟结果表明，在算例条件下热非平衡与化学非平衡的耦合效应对弹头再入流场的电子密度剖面和壁面热流有明显影响。

(2) 内自由度间能量交换速率(源项)表达式中的振动松弛时间对上述计算结果有明显影响。对于多组元高温空气，有必要开展有关实验和理论研究，补充尚缺的一些重要的 $\tau_{v,i}^*$ 数据，提高其计算公式的精度。

参 考 文 献

- 1 Lee J H. Basic Governing Equations for the Flight Regimes of Aeroassisted Orbital Transfer Vehicles, AIAA Paper 84-1729, 1984.
- 2 Gnoffo P A et al. Conservation Equations and Physical Models for Hypersonic Air Flows in Thermal and Chemical Nonequilibrium, NASA TP-2867, 1989.
- 3 唐锦荣, 崔安青. 弱电离气体振动松弛和化学非平衡粘流的双温度模型研究. 中国科学院力学研究所科技报告, IMCAS STR-93019.
- 4 Marron P V, Treanor C E. Chemical Relaxation with Preferential Dissociation from Excited Vibrational Levels. *Phys. Fluids*, 1963, 6 (9)
- 5 Park C. Assessment of Two-Temperature Kinetic Model for Ionizing Air, AIAA Paper 87-1574, 1987.
- 6 Miner E W, Lewis C H. Hypersonic Ionizing Air Viscous Shock-Layer Flows over Nonanalytic Blunt Bodies, NASA CR-2550, 1975.
- 7 陶波, 唐锦荣. 再入小钝头锥化学非平衡粘性激波层的数值计算. 中国科学院力学研究所合同报告, IMCAS CR-93020.
- 8 Minlikan R C, White D R. Systematics of Vibrational Relaxation, *J. Chem. Phys.*, 1963, 39 (12)

Effects of Coupled Thermal and Chemical Nonequilibrium on the Electron Number Density Distribution and Wall Heat Transfer

Tang Jinrong Cui Anqing

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

Abstract The numerical solutions of VSL equation sets in one-temperature and two-temperature cases are obtained for flows in the stagnation region of a hypervelocity blunt body. The results indicated that there are remarkable effects of coupled thermal and chemical nonequilibrium on the wall heat transfer and electron number density in the flows; and the difference between the results for two different expressions of vibrational relaxation time are also notable.

Key words thermal nonequilibrium; vibrational relaxation; two-temperature model