

热化学非平衡对超高速钝体绕流影响的数值研究

高云亮¹ 王效廉¹ 董三强¹ 余文力¹ 姜宗林²

(1 西安二炮工程学院 陕西西安 710025)

(2 中国科学院力学研究所 北京 100190)

摘要: 本文通过求解考虑热化学非平衡的 11 组分 N-S 方程, 对超高速钝体绕流流场的非平衡化学反应特性和激波脱体距离进行了研究。通过典型流线上离解与复合反应速率的比较, 得出超高速钝体绕流处于显著的非平衡状态, 可以将流场分为离解反应主导区和复合反应主导区; 通过来流和波后不同非平衡程度激波脱体距离的比较, 得到气流总焓及各种形式的能量在来流和波后的分配是影响激波脱体距离的主要因素, 并给出了其影响规律。

关键词: 热化学非平衡 超高速流动 反应特性 脱体距离

0 引言

钝体绕流是超高速流动中的基础问题, 而激波脱体距离是其中一个很重要的参数。这是因为激波位置和激波形状直接决定了钝体表面的压力分布, 从而决定了飞行器的气动力特性。同时, 激波脱体距离也是超高速钝体绕流研究中的一个重要参数, 这是因为它对绕流气体发生的热化学现象非常敏感, 同时它也是一个比较直观、容易测量的物理量^[1]。在超高速钝体绕流中, 气流的动能与气体的离解能可比, 绕经钝体时会发生明显的化学反应。高温气体的化学反应能使气体的密度增加, 而激波脱体距离与滞止流线上的平均密度成反比^[2], 因而能够受到流动中热化学现象的明显影响。

本文通过求解考虑热化学非平衡的 N-S 方程, 得到超高速钝体绕流流场的数值解, 在此基础上研究了流场的非平衡反应特性及其对激波脱体距离的影响。

1 控制方程与物理模型

为了考虑超高速飞行器弓形激波后流动的非平衡状态及振动激发、离解甚至电离等热化学现象, 本文采用考虑粘性的二维平面或轴对称 Navier-Stokes 方程;

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial E}{\partial x} + \frac{\partial F}{\partial r} + G = \frac{\partial E_v}{\partial x} + \frac{\partial F_v}{\partial r} + G_v + W$$

其中 U 为守恒变量组成的矢量, E 、 F 、 E_v 、 F_v

分别为 x 、 r 方向上的对流通量矢量和粘性项矢量, G 、 G_v 为无粘和有粘的几何源项矢量, W 为化学与振动源项矢量^[3]。化学模型采用 Dunn & Kang 的 11 组分、20 反应的空气模型, 其组分为: N_2 、 O_2 、 NO 、 NO^+ 、 N_2^+ 、 O_2^+ 、 N^+ 、 O^+ 、 N 、 O 、 e^- ; 热力学模型采用考虑振动非平衡的双温度模型。

2 计算验证

我们对文献[4]中的实验进行了计算。实验模型为直径为 2in 的圆柱, 来流为部分离解的氮流, 单原子氮的质量百分数为 $\alpha_\infty = 0.073$, 来流的其它条件分别为: $T_\infty = 1833K$, $\rho_\infty = 5.349 \times 10^{-3} kg/m^3$, $u_\infty = 5590m/s$ 。

计算的密度等值线与实验干涉照片的比较如图 1 所示。从图中看出: 计算的激波形状与激波脱体距离与实验结果吻合很好, 密度等值线的形状和走向也基本相同。尤其本文关注的主要对象—激波脱体距离, 在实验和计算之间几乎看不出差别, 说明本文所用的计算方法能够正确地反应实验中出现的物理现象, 能够满足本文的需要。

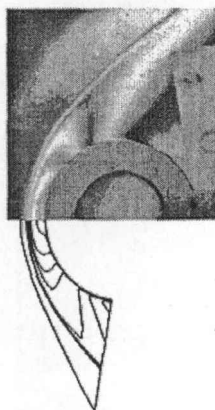


图1 计算与实验的比较

3 计算结果与分析

本文的计算以球头为例,说明超高速钝体绕流流场的非平衡化学反应特征及激波脱体距离的变化。为便于分析,选取单一组分氧气作为来流气体。如无特殊说明,来流条件为:马赫数 $M_\infty = 14$, 密度 $\rho_\infty = 5.01 \times 10^{-4} \text{ kg/m}^3$, 温度 $T_\infty = 300 \text{ K}$ 。壁面条件为:采用全催化壁面条件,壁温 $T_w = 300 \text{ K}$ 。计算中模型的头部半径为 $a = 0.04 \text{ m}$ 。

3.1 热化学非平衡流场中化学反应的特性

取图2中四条典型流线,我们给出了激波后流线上离解和复合反应速率的变化情况。以这四条流线为例,研究流场中化学反应的特点及其对流场流动的影响。

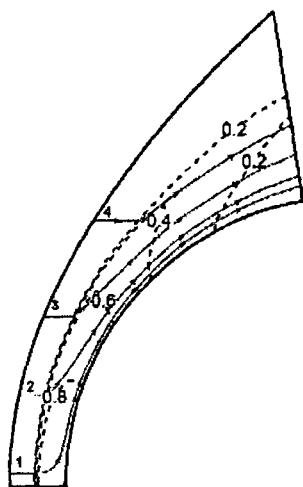


图2 压力等值线选取的四条典型流线

图3给出了沿着4条流线上原子氧O的质量百分数 α_o 的变化曲线。为了说明化学反应偏离平衡

的程度,图3中也给出了相应的化学平衡条件下原子氧 O_{eq} 的质量百分数。热非平衡情况下,文中给出的化学平衡组分是在 Park 的几何平均温度 $\sqrt{T \cdot T_w}$ 下得到的,而且由于 Dunn & Kang 的化学反应模型中没有平衡常数,计算平衡组分时采用了 Lighthill 理想离解气体模型的质量作用定律^[5]。图中的坐标是从流线与激波波阵面相交位置开始的。可以看到在激波附近,反应速率快速增加,在激波附近一定距离处离解分数达到最大值;随后在激波下游较远位置处,化学组分沿流线基本不发生变化,即化学反应冻结。

图3中,激波后沿流线离解组分与平衡离解组分有明显的差别,化学反应处于严重的非平衡状态。在离解反应速率等于复合反应速率时,即两条反应速率曲线的交点位置,离解分数达到最大值。沿靠近对称轴的流线,离解分数在激波附近很快就达到了最大值,然后开始减小,对于流线1原子组分冻结在平衡值以上。随着流线与对称轴距离的增大,离解组分最大值的位置距离激波阵面越远,流线2、3上离解与复合反应速率曲线的交点位置依次后移;距离对称轴更远的流线4,在求解的区域内离解分数已不能到达最大值。到达最大值之后,离解分数只发生很小的变化,化学反应冻结。对于距离对称轴较远的流线2、3、4,其离解分数的冻结值都在相应的平衡值以下。

与超高速钝体绕流的化学非平衡近似计算结果^[6]相比,在热化学非平衡流动中,紧靠激波阵面后首先有一个离解孕育(incubation)时间^[7,8],期间离解分数变化很慢,之后才发生较迅速的变化。与热平衡情况相比,离解反应速率明显减小,而复合反应速率在激波阵面附近甚至可能增加。因此,在热化学非平衡流动中,复合反应的影响变大,离解组分的增加非常缓慢,使得非平衡区宽度增加很多。

图3中同时给出了沿各条流线离解反应速率 $(d\alpha/dt)_d$ 和复合反应速率 $(d\alpha/dt)_c$ 的曲线,计算采用如下公式:

$$\left(\frac{d\alpha}{dt}\right)_d = \frac{\rho}{M_{A_2}}(1-\alpha)\exp\left(-\frac{\theta_d}{T_k}\right)X(\alpha, T_k)_d$$

$$\left(\frac{d\alpha}{dt}\right)_r = \frac{\rho^2\alpha^2}{M_A^2}X(\alpha, T_k)_r$$

其中 $X(\alpha, T) = 2C_1T^{\eta_1}\alpha + C_2T^{\eta_2}(1-\alpha)$, ρ 、 T 、 M 为气体的密度、温度和分子量; α 为离解质量百分数; C, η 为常数; A, A_2 表示碰撞对, 分别对应原子、分子。温度 T_k 为反应控制温度, 对于离解反应取 Park 的几何平均温度, 对于复合反应取平动温度。根据 Freeman^[9] 的论述, 超高速钝体非平衡流动中, 激波后 $X(\alpha, T_k)$ 与指数项相比变化很小, 可以近似认为不变。因此, 激波后离解反应速率随温度的变化主要由温度的指数项控制, 而复合反应速率主要由密度的变化控制, 所以激波后离解和复合反应冻结的机制是不同的。

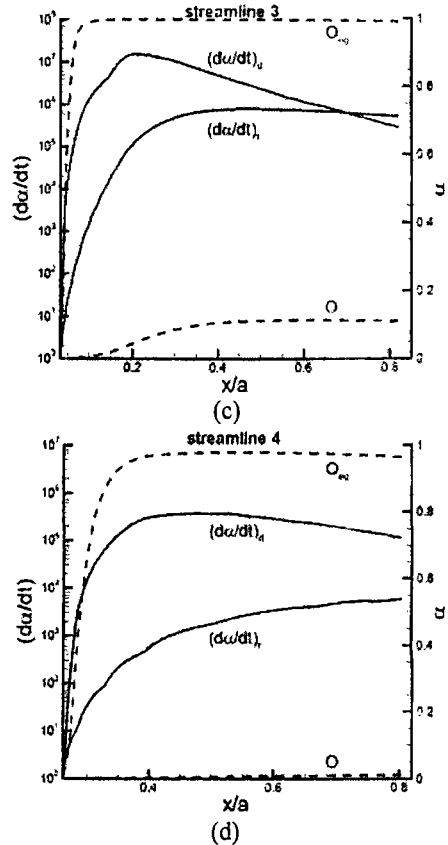
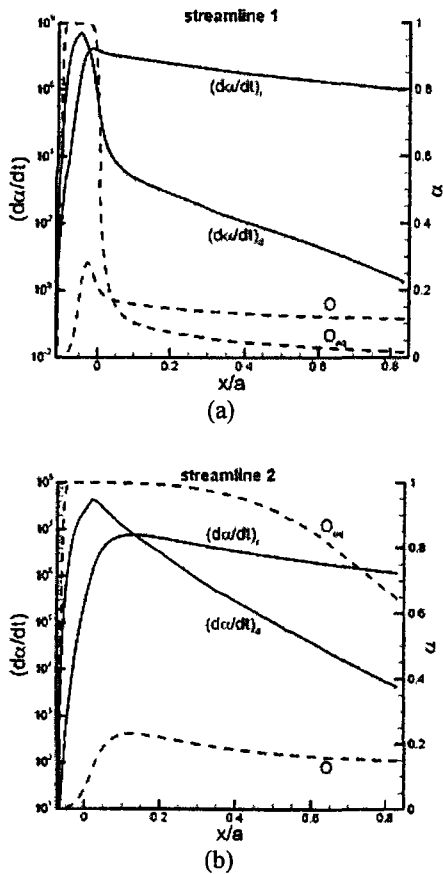


图 3 反应速率、离解分数沿流线的变化

通过图 3 中离解、复合反应速率沿各流线的变化, 看到激波下游离解反应速率下降较复合反应速率要快一些, 复合反应速率达到一定值以后变化非常缓慢, 而且离解和复合反应速率在距离对称轴越近的流线上变化越快, 离对称轴越远的流线上变化越慢。另外通过对比发现复合反应速率是不能忽略的, 尤其是靠近对称轴的流线, 在激波下游区域, 复合反应速率要比离解反应速率大得多, 说明越靠近对称轴的流线受复合反应的影响越显著。

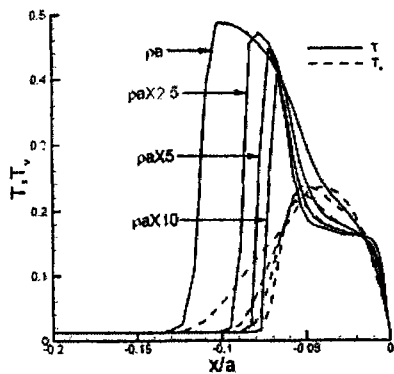
以离解与复合反应速率曲线的交点为界, 可以将沿流线的化学反应分为离解反应主导区和复合反应主导区。在离解反应主导区中, 发生非平衡离解过程, 原子组分不断增大。在两条曲线交点位置, 原子组分达到最大值, 之后进入复合反应主导区。在复合反应主导区中, 复合反应速率开始大于离解反应速率, 原子组分减少, 分子组分增加。

3.2 超高速绕流激波脱体距离的影响因素

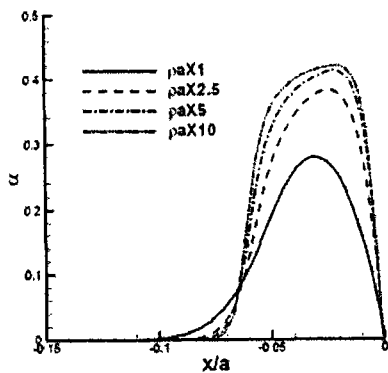
3.2.1 波后非平衡对激波脱体距离的影响

图 4 给出了双尺度律参数 $\rho_\infty a$ 变化时, 滞止流

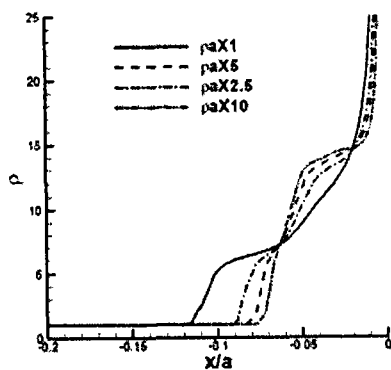
线上参数的分布情况。算例中, 双尺度律参数 $\rho_{\infty} a$ 的变化是通过调整来流密度 ρ_{∞} 来实现的, 其它参数保持不变。图中双尺度律参数标记为“ $\rho a \times 1$ ”算例的计算条件与本节开始提到的计算条件相同。这样, 图中的四个算例除双尺度律参数不同外, 气流的总焓和来流马赫数都是相同的。



(a) 滞止流线上平(振)动温度的分布



(b) 滞止流线上氧原子组分的分布



(c) 滞止流线上的密度分布

图4 不同双尺度律参数对激波脱体距离的影响

根据图4(a)平动温度 T 的计算曲线, 可以看出: 在气流总焓和来流马赫数不变的条件下, 随着双尺度律参数的增大, 激波脱体距离逐渐减小。在 $\rho_{\infty} a$

较小时, 改变 $\rho_{\infty} a$ 可以对脱体距离有较明显的影响; 而 $\rho_{\infty} a$ 较大时, $\rho_{\infty} a$ 的变化对激波脱体距离变弱。随后即使再进一步增加 $\rho_{\infty} a$ 的数值, 激波脱体距离也几乎不再发生明显变化。

双尺度律参数 $\rho_{\infty} a$ 的大小反应了流动的非平衡程度, 它的增加使振动、离解等非平衡过程向平衡靠近。在本算例中, $\rho_{\infty} a$ 的增加是通过密度增加来实现的, 密度增加, 振动、离解的速率加快, 而流动特征时间保持不变, 这样振动和离解过程就能够更快地向平衡状态趋近。由于计算的几种情况都处于热化学非平衡状态, 向平衡状态的趋近, 表现为离解分数 α 的增加, 如图4(b)所示, 和密度 ρ 的增加, 如图4(c)所示, 从而使激波脱体距离变小。对总焓一定的流动来讲, 其平衡态是一定的, 因此随着双尺度律参数的增加, 对激波脱体距离的影响越来越弱, 只能使其向平衡状态对应的值无限趋近。

3.2.2 来流非平衡对激波脱体距离的影响

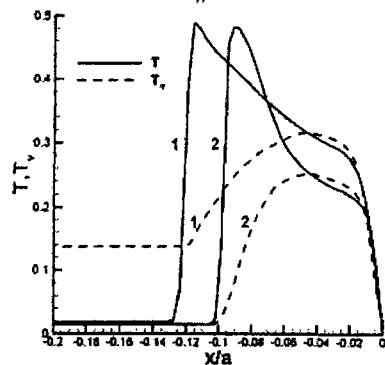
在超高速流动实验模拟中, 试验气流一般处于热化学非平衡状态。但真实飞行条件中, 来流都是平衡的, 那么非平衡来流得到的实验结果与真实飞行有什么异同, 是实验模拟首先要解决的问题。

下面以中国科学院力学研究所 JF-10 风洞^[10]的一种运行条件为例, 说明来流非平衡对超高速绕流激波脱体距离的影响。贮室总压 $p_0 = 19.6 \text{ MPa}$ 、总温 $T_0 = 7920 \text{ K}$ 是 JF-10 爆轰驱动激波风洞比较成熟的一组运行状态^[11], 其试验气流的具体参数见表1中的状态“1”。该试验气流处于显著的热化学非平衡状态, 气流的总焓为 15.5 MJ/kg , 其中动能占 79%, 化学能占 15%, 振动能占 3%, 其它形式的能量占 3%。表1中的状态“2”和状态“3”是根据状态“1”换算的平衡流和热平衡、化学非平衡流。状态“2”是保持热化学非平衡流的平动温度、密度和总焓不变, 将冻结的振动能和离解能转化为来流动能得到的平衡大气流。状态“3”是保持密度、速度、组分和总焓不变得到的热平衡、化学非平衡流。

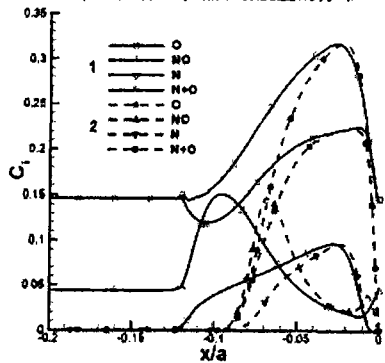
表 1 JF-10 来流能量分配的几种状态

	1 ^[11]	2 ^[11]	3
p_{∞} (Pa)	95	111	223
T_{∞} (K)	436	436	1014
$T_{v\infty}$ (K)	3210	436	1014
ρ_{∞} (kg/m ³)	6.73E-4	6.73E-4	6.73E-4
u_{∞} (m/s)	4990	5530	4990
O	0.146	~	0.146
O ₂	0.065	0.235	0.065
NO	0.044	~	0.044
N	8.4E-9	~	8.4E-9
NO ⁺	5.4E-7	~	5.4E-7
N ₂	0.745	0.765	0.745

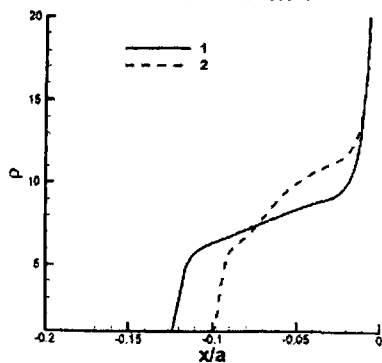
图 5 给出了状态“1”和状态“2”的计算结果。计算条件为: 球头模型半径 $a = 0.125m$, 采用完全催化等温壁面, 壁温 $T_w = 300K$ 。



(a) 滞止流线上平(振)动温度的分布



(b) 滞止流线上组分的分布



(c) 滞止流线上密度的分布

图 5 来流非平衡对激波脱体距离的影响

由图 5(a)中平动温度 T 的计算结果可知, 热化学非平衡来流“1”的激波脱体距离大于平衡来流“2”的激波脱体距离, 相差约 20%。热平衡、化学非平衡来流“3”的激波脱体距离, 与非平衡来流“1”的激波脱体距离相等(由于结果几乎没有差别, 未在图上画出)。为了找出影响脱体距离的因素, 我们还对两种适当调整的来流进行了计算。参数调整的原则是: 保持来流速度不变, 将来流变为热平衡的, 令温度分别等于热化学非平衡来流“1”的平动和振动温度。这样调整后, 来流的动能和冻结解离能保持不变, 总焓有较小的变化, 对激波后的状态没有明显影响。这两种调整来流得到的脱体距离与非平衡来流“1”也看不出差别, 由此得出结论: 平衡来流脱体距离的减小在于将来流中冻结的能量转移给来流的动能。该结论可以按照下面进行解释:

非平衡来流中, 已有部分分子发生离解, 这部分能量以化学能的形式贮存起来, 通过激波后仍被冻结, 不起作用。平衡来流中, 这部分能量被转移给来流动能, 通过激波后这部分能量和原来已有的动能一起转化为内能, 为气体的离解提供更多的能量、引起更多分子离解, 这可以从组分沿滞止流线的分布图 5(b)上可以看出来。

由于来流为空气, 反应化学成分比较复杂, 不便于直接观察分析, 因此离解空气的“二元模型^[12]”重新将组分归类。将所有的原子组分相加当作“空气原子”, 如图 5(b)中的曲线 C_{N+O} 。可以看到: 由于热化学非平衡来流“1”和平衡来流“2”总焓相等, 激波后原子组分 $N+O$ 的质量分数 C_{N+O} 最大值基本相等。但因为非平衡来流“1”在激波前已有部分离解, 所以经过激波平衡来流“2”有更多的分子发生离解, 密度增加更大, 从而脱体距离变小。由图 5(c)看到, 由于有更多分子发生离解, 平衡来流“2”的密度曲线有一个明显变化的区域。

来流非平衡对激波脱体距离的影响, 实际上反映来流中能量的分配对激波脱体距离的影响。在超高速流中, 激波后密度的变化, 主要受气体离解吸热的影响; 而激波后最终的离解状态是由来流的总

焓决定的, 总焓相等, 则最终的离解分数相同^[11]。所以, 经过激波气体离解的多少还与来流初始的离解分数有关。因此, 超高速钝体绕流中, 在来流总焓不变的条件下进行动能与内能的分配(如将模拟实验中非平衡来流转化为平衡来流)时, 如果涉及的能量不大、不足以引起来流中化学成分的变化, 则激波脱体距离基本不受能量重新分配的影响; 如果涉及的能量很大、足以引起来流化学组分的明显变化, 那么来流动能、内能的分配则会影响激波脱体距离的大小。

4 结论

本文通过求解考虑粘性的热化学非平衡流动方程组, 计算了多种条件下的超高速钝体绕流, 数值分析了绕流流场非平衡化学反应的基本特征和激波脱体距离的变化规律, 主要得到以下结论:

(1) 超高速钝体绕流流场可以分为非平衡离解区和反应冻结区, 热化学非平衡现象对流场特征有明显影响, 导致存在一个离解孕育时间, 使离解反应速率变小, 复合反应影响变大。驻点附近复合反应往往不能忽略, 越靠近对称轴的流动受到的影响越显著。以离解与复合反应速率曲线的交点为界, 可以将沿流线的化学反应分为离解反应主导区和复合反应主导区。

(2) 在超高速钝体绕流中, 气流总焓、双尺度律参数是影响激波脱体距离的主要参数, 脱体距离随它们的增大而减小, 几乎不受来流马赫数的影响。来流的能量分配和激波后振动能的弛豫对激波脱体距离有明显影响, 波后振动能弛豫速率的加快使脱体距离减小, 来流冻结能的增加使激波脱体距离增大。

参考文献:

- [1] Hornung, H. G. Smith, G. H. The influence of relaxation on shock detachment. *Journal of Fluid Mechanics*, 1979, 93: 225-239.
- [2] Anderson Jr J D. *Hypersonic and High Temperature Gas Dynamics*. New York: McGraw-Hill Book Company, 1989.
- [3] 高云亮. 超高速流动实验模拟方法及基础气动问题研究. 中国科学院力学研究所博士论文, 2008.
- [4] H. G. Hornung. Non-equilibrium dissociating nitrogen flow over spheres and circular cylinders. *J. Fluid Mech.* 1972, vol. 53, part 1, 149-176.
- [5] M. J. Lighthill. Dynamics of a dissociating gas-Part I Equilibrium flow. *J. Fluid Mech.* (1957), vol. 2, pp. 1-32.
- [6] C. Y. Wen. Hypervelocity flow over spheres. PhD thesis, Graduate Aeronautical Laboratories, Caltech, 1994.
- [7] Charles A. Brau, James C. Keck, and George F. Carrier. Transient Phenomena in Dissociative Reactions. *Physics of Fluids*, Volume 9, Issue 10, 1885-1895, 1966.
- [8] W. D. Breshears, P. F. Bird. Density gradient measurements of O₂ dissociation in shock waves. *The Journal of Chemical Physics*, vol.55 No.8 4017-4026, 1971.
- [9] N. C. Freeman. Nonequilibrium flow of an ideal dissociating gas. *J. Fluid Mech.* (1958) 4 407-425.
- [10] 俞鸿儒. 氢氧燃烧及爆轰驱动激波管. *力学学报*, 1999, 31(4): 389~396.
英文版: Yu H-R. *Oxyhydrogen Combustion and Detonation Driven Shock Tube*. *Acta Mechanica Sinica*, 1999, 15(2): 97~107.
- [11] 曾明. 高焓风洞流场测量的数值重建和非平衡效应的数值分析. 中国科学院力学研究所博士论文, 2007.
- [12] 卞荫贵, 徐立功. *气动热力学*. 合肥, 中国科学技术大学出版社, 1997.
- [1] Hornung, H. G. Smith, G. H. The influence of