

# 高超声速飞行流场中的最大氧离解度分析<sup>1)</sup>

陈松 孙泉华<sup>2)</sup>

(中国科学院力学研究所高温气体动力学国家重点实验室, 北京 100190)

**摘要** 针对大气层内高超声速飞行时的化学非平衡现象, 建立了沿驻点线流动的空气中氧离解度的计算模型. 模型假设氮气在氧气未充分离解时不发生离解, 并且不涉及边界层内的复合反应. 理论计算发现, 空气中氧的离解度随飞行高度的增加呈先增后减的非单调变化规律, 其原因是由于化学反应平衡移动与非平衡效应相互作用的结果. 这一结论得到了数值模拟结果的验证, 同时也解释了文献中当飞行高度较高时真实气体效应减弱的现象. 基于驻点线的近似理论模型, 计算得到了轴对称钝头体绕流流场中的最大氧离解度及边界层外缘温度随飞行速度和高度变化的等值线图, 相关结果可以为工程设计所用.

**关键词** 高超声速流动, 化学非平衡, 氧离解度, 钝头体绕流

中图分类号: V211.22 文献标识码: A doi: 10.6052/0459-1879-13-146

## 引言

飞行器在大气层内作高超声速飞行时, 来流经过头部强激波压缩后达到很高的温度, 引发空气发生复杂的热化学变化. 由于气动热环境等方面的约束, 高超声速飞行通常在较低密度的大气中进行. 此时非平衡松弛过程变得重要, 在很大程度上影响到飞行器的气动性能, 使得热化学非平衡效应成为飞行器设计的一个重要因素<sup>[1]</sup>.

对于高超声速飞行可能遇到的气体热化学变化, Gupta 等<sup>[2]</sup>以半径为 0.305m 的球头为外形, 总结了飞行流场驻点区的热化学现象, 给出了氧气和氮气的各种过程(包括振动能激发、离解、电离)在飞行速度和高度范围的发生区间. 但其依据的是早期的平衡气体模型, 不能体现非平衡效应的影响. 近年来, 有关非平衡影响的数值模拟工作逐渐增多<sup>[3-5]</sup>. 如, Park 等<sup>[3]</sup>用数值方法求解 Navier-Stokes 方程, 分析了高度 50~85 km 范围内真实气体效应对二维椭圆翼的影响, 发现热化学非平衡效应对气动性能影响随高度增大而减弱的现象. Holman 等<sup>[5]</sup>在分析连续性失效问题时也发现高克努森 (Knudsen) 数 (分子平均自由程与特征距离之比) 流动的离解不显著, 甚至可忽略. 这种非平衡效应受高度影响的原因往往被简单归结为流动趋于冻结, 而缺乏足够的理

论分析.

现有理论分析工作主要基于 Lighthill<sup>[6]</sup>于 1957 年提出的“理想解离气体”(ideal dissociating gas, IDG)模型 (Freeman<sup>[7]</sup>随后将其推广到了非平衡流动). 如 Wen 等<sup>[8]</sup>和 Belouaggadia 等<sup>[9]</sup>理论分析了激波脱离距离, Sanderson 等<sup>[10]</sup>研究了激波相互作用问题. 最近, 王智慧等采用 IDG 模型近似解析求解了正激波后的流动参数<sup>[11]</sup>, 并结合激波映射的思想研究了钝头体前缘热流问题<sup>[12]</sup>. 所得到的近似解析表达式可以为工程快速分析所用. 目前有关 IDG 模型的研究工作以氮的离解为主, 缺少高超声速飞行面临的大气环境条件下的分析.

针对高超声速飞行环境, 需要考虑氧气和氮气混合物的离解, 原则上可以借鉴王智慧<sup>[12]</sup>的分析方法研究沿驻点线的流动及壁面热流. 然而, 飞行器壁面附近的边界层内包含黏性、扩散以及传热等多种物理作用, 解析分析涉及的近似较多, 降低了结果的可靠性. 相对而言, 边界层外的流动可采用成熟的无黏流理论分析. 特别是气体的最大离解度一般位于边界层外缘 (边界层内以复合反应为主), 分析无黏流动仍可以得到气体离解的主要特征. 由于氧气先于氮气离解, 本文分析高超声速飞行器随飞行高度和速度变化时的氧离解情况.

2013-05-10 收到第 1 稿, 2013-06-27 收到修改稿.

1) 国家自然科学基金资助项目 (90816012, 91116013, 11111120080).

2) 孙泉华, 研究员, 主要研究方向: 稀薄气体及非平衡流动. E-mail: qsun@imech.ac.cn

### 1 问题描述

一般在高超声速飞行流场中, 脱体激波后的区域温度最高, 其间的化学反应最活跃. 脱体激波主要由飞行器头部和机翼前缘产生, 而头部和翼前缘可简化为轴对称或二维钝头体模型. 钝头体流动的基本物理图像见图 1, 其流场呈典型的三层结构, 即头激波前均匀来流区、波后无黏区及边界层. 来流经激波压缩后, 速度降低、温度升高; 在波后无黏区, 气流得到进一步压缩, 速度逐渐下降, 焓值升高, 分子的振动能激发, 氧气开始离解, 在较高的温度下氮气也会离解, 这些热化学变化将引起温度下降; 在边界层内, 温度骤然下降, 化学变化以复合反应为主.

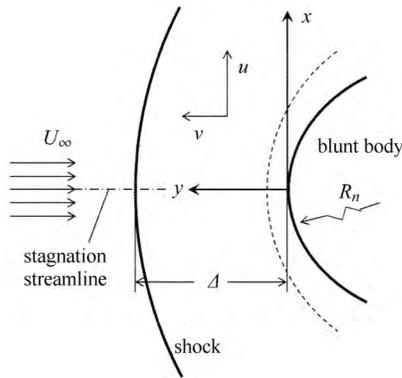


图 1 钝头体流动示意图

Fig. 1 Schematics of blunt body flow

上述气流变化在驻点线最为明显. 在驻点线, 头激波表现为正激波, 波后温度高, 热化学变化大, 因此专门对驻点线流动作理论分析. 在图 1 所示的笛卡尔坐标系下, 边界层外的驻点线流动为

$$u = 0 \tag{1a}$$

$$vv_y + p_y/\rho = 0 \tag{1b}$$

$$h + v^2/2 = h_\infty + U_\infty^2/2 \tag{1c}$$

其中,  $u, v$  分别为  $x, y$  方向的速度分量;  $\rho, p, h$  分别为密度, 压力和比焓.

然而流动参数与化学反应密切相关. 考虑到氮气的离解特征温度 (113 500 K) 显著高于氧气 (59 750 K), 在氧气还未完全离解之前, 氮气的离解通常是很少的, 因此将氮气视为惰性气体, 而对氧气采用 IDG 模型进行建模. 在此假设下, 气体由  $N_2, O_2$  和  $O$  三种组分构成, 混合物的化学状态可以用氧

气的离解度  $\alpha$  来表示

$$\alpha = \rho_O / (\rho_{O_2} + \rho_O) = \rho_O / (s\rho) \tag{2}$$

标准大气中氧气的质量含量  $s = 0.233$ . 氧原子和氧分子的含量相应为  $\alpha s$  和  $(1 - \alpha)s$ . 混合物的压力和比焓可表示为

$$p = (1 + \alpha + S_0) s\rho RT \tag{3}$$

$$\frac{h}{sRT} = 4\alpha + 1 + \frac{\theta_d}{T}\alpha + \frac{5 + \xi_{v,O_2}}{2}(1 - \alpha) + \frac{7 + \xi_{v,N_2}}{2}S_0 \tag{4}$$

其中,  $S_0 = (1 - s)M_{O_2} / (sM_{N_2})$ ,  $R$  为氧分子的气体常数;  $\theta_d$  为氧气的离解特征温度,  $\xi_{v,O_2}$  和  $\xi_{v,N_2}$  分别为氧气和氮气的振动自由度, 为温度的函数 [13].

式 (1) ~ 式 (4) 并不能完全确定驻点线的流动, 需要结合化学反应速率以及对速度等作一些合理近似. 下节具体推导化学非平衡对流动影响的解析表达式.

### 2 驻点线流动的化学非平衡近似理论

#### 2.1 化学反应与流动的耦合

非平衡松弛过程由化学反应速率方程决定, 氧气的离解-复合反应可表示为



其中,  $M$  代表  $O_2, O$  和  $N_2$ , 相应的正反应速率为  $k_{f,1}, k_{f,2}$  和  $k_{f,3}$ . 根据 Park [14] 的化学反应数据  $k_{f,1} = k_{f,3}, k_{f,2}/k_{f,1} \approx 3$ , 其值由阿累尼乌斯 (Arrhenius) 公式计算, 即  $k_{f,1} = C_{f,1}T^\eta e^{-\theta_d/T}$ , 具体参数见表 1. 逆反应速率通过平衡常数  $K_{eq}$  计算. 根据这些反应数据, 氧的离解率可推导得到

$$\frac{d\alpha}{dt} = \frac{v d\alpha}{dy} = \frac{k_{f,1} s \rho}{M_{O_2}} (5\alpha + S_0 + 1) \left( 1 - \alpha - \frac{4\rho s \alpha^2}{M_{O_2} K_{eq}} \right) \tag{6}$$

表 1 化学反应参数值

Table 1 Constants for chemical reaction evaluation

$\rho_d / (\text{kg} \cdot \text{m}^{-3})$	$C_{f,1} / (\text{m}^3 \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{s}^{-1})$	$\theta_d / \text{K}$	$\eta$
$1.5 \times 10^5$	$9.68 \times 10^{16}$	59 750	-2.0

为方便分析, 分别以  $\rho_\infty, U_\infty, \theta_d, \rho_\infty U_\infty^2$  对密度、速度、温度和压力进行无量纲化. 则根据速率方程 (6) 及状态方程 (3), 沿驻点线的离解度变化可表示为

$$\frac{d\alpha}{dy} = \frac{\bar{p} \bar{T}^{\eta-1}}{l_d \bar{v}} \frac{5\alpha + 1 + S_0}{\alpha + 1 + S_0} \left[ (1 - \alpha) e^{-1/\bar{T}} - \frac{s \bar{p}}{\rho_d} \alpha^2 \right] \tag{7}$$

其中,  $l_d = \frac{U_\infty M_{O_2}}{2\mu C_{f,1} \rho_\infty \theta_d^l}$  为无量纲过程中出现的常数, 具有长度量纲;  $\rho_d = M_{O_2} K_{eq} e^{\theta_d/T} / 4$ , 在 IDG 气体模型中定义为特征密度, 随温度的变化缓慢, 可近似为常数.

离解度的变化与温度密切相关. 对于足够引起显著离解的强激波, 其波后动能相对总焓来说是很小的. 如果忽略波后动能, 根据焓的式 (4) 及守恒式 (1c), 可得到波后温度的近似显式表达式为

$$\bar{T} \approx \frac{7(1+S_0)\bar{T}_\infty + 2\mu/s - 2\alpha}{(3-\xi_{v,O_2})\alpha + (7+\xi_{v,O_2}) + (7+\xi_{v,N_2})S_0} \quad (8)$$

其中  $\mu = U_\infty^2 / (2R\theta_d)$  表示来流动能与氧离解能之比. 进一步采用紧挨激波的波后温度  $T_s$  近似计算  $\xi_{v,O_2}$  和  $\xi_{v,N_2}$ , 那么波后无量纲温度仅是离解度的函数, 即  $\bar{T} = \bar{T}(\alpha)$ .

式 (7) 还与压力和密度有关. 激波波后的压力沿驻点线的变化通常不超过 5%~10%, 可近似认为等于常数<sup>[9]</sup>. 考虑到在驻点处  $p \approx \rho_\infty U_\infty^2$  以及紧挨激波的波后压力可以由来流确定, 波后压力采用两者平均值近似

$$p_c = \frac{p_s + \rho_\infty U_\infty^2}{2} \quad (9)$$

在对压力作常数假设后, 根据状态方程 (3),  $\bar{\rho}$  可由  $\bar{p}_c$  和  $\bar{T}$  来表示.

为方便对式 (7) 进行积分, 引入一个辅助参数

$$\chi = \int_0^s \frac{\bar{p}}{\bar{v}} ds = \int_\Delta^{s-\Delta} \frac{\bar{p}}{\bar{v}} dy \quad (10)$$

其中,  $s$  为沿流线从激波到下游的距离,  $\Delta$  为激波的脱体距离. 则离解度方程 (7) 可化为

$$\chi = \int_0^\alpha f^{-1}(\alpha) d\alpha \quad (11)$$

其中

$$f(\alpha) = \frac{\bar{T}^{\eta-1}}{l_d} \frac{5\alpha + 1 + S_0}{\alpha + 1 + S_0} \left[ (1-\alpha)e^{-1/\bar{T}} - \frac{s\bar{p}}{\bar{\rho}_d} \alpha^2 \right]$$

式 (11) 右边仅是  $\alpha$  的函数, 与速度和位置无关, 可通过简单数值积分求解. 在实际应用中, 给定离解度  $\alpha$  (应小于平衡离解度), 可积分求出对应的  $\chi$ , 然后再由式 (10) 求出与  $\alpha$  对应的位置值  $y$ . 当然式 (10) 的计算还与速度有关. 激波后的速度分布近似呈线性分布<sup>[15]</sup>, 即  $\bar{v} = y\bar{v}_s/\Delta$ . 其中  $v_s$  为紧挨激波的波后速度. 此时,  $\chi$  可直接积分

$$\chi = \int_\Delta^{s-\Delta} \frac{\bar{p}_c \Delta}{y\bar{v}_s} dy = \frac{\Delta \bar{p}_c}{\bar{v}_s} \ln \left( \frac{\Delta - y}{\Delta} \right) \quad (12)$$

至此, 边界层外的驻点线流动表达式完全确定. 其中激波脱体距离可根据 Wen<sup>[8]</sup> 的理论计算, 而紧挨激波波后的参数由激波关系导出为

$$\bar{v}_s = \frac{1}{\bar{\rho}_s} = \frac{1 - \sqrt{1 - 2s(1+S_0)\bar{T}_s/\mu}}{2} \quad (13a)$$

$$\bar{T}_s = \frac{2\mu/s + 7(1+S_0)\bar{T}_\infty - v_s^2/(R\theta_d s)}{7 + \xi_{v,O_2} + (7 + \xi_{v,N_2})S_0} \quad (13b)$$

## 2.2 激波脱体距离及边界层厚度计算

激波脱体距离一般由无黏理论预测的激波脱体距离  $\Delta_{inv}$  加上边界层修正计算, 即  $\Delta = \Delta_{inv} + \delta^*$ , 其中  $\delta^*$  为考虑黏性作用的边界层位移距离.

在连续流的范畴下, 边界层的影响是很小的, 激波脱体距离主要由  $\Delta_{inv}$  所决定. 本文采用 Wen<sup>[16]</sup> 的含化学反应的  $\Delta_{inv}$  计算方法.

无黏流理论预测的激波脱体距离形式上为

$$\frac{\Delta_{inv} \rho_{av}}{2R_n \rho_\infty} = \tilde{\Delta} \frac{\rho_{av}}{\rho_s} = L \quad (14)$$

其中,  $\tilde{\Delta}$  为无量纲后的激波脱体距离, 平均密度  $\rho_{av}$  是一个与化学反应速率有关的量, 轴对称问题的  $L = 0.41$ . 根据 Wen 的理论<sup>[8]</sup>,  $\tilde{\Delta}$  可表示为无量纲反应速率  $\tilde{\Omega}$  的函数. 这里  $\tilde{\Omega}$  定义为

$$\tilde{\Omega} = \frac{2R_n}{\rho_s v_\infty} \left( \frac{d\rho}{dt} \right)_s = -\frac{2R_n}{\rho_s v_\infty} \frac{1}{h_\rho} \left( \sum_{i=2}^{N_s} h_{c_i} \frac{dc_i}{dt} \right)_s \quad (15)$$

其中, 下标  $s$  表示紧邻波后的值,  $h_\rho$  和  $h_{c_i}$  分别表示焓对密度及  $c_i$  组分的偏导数.  $c_i$  表示第  $i$  组分的质量分数, 对于本文的简化空气模型,  $c_2 = s\alpha$ ,  $c_3 = s(1-\alpha)$ . 若用下标 “ $\delta$ ” 和 “ $e$ ” 表示边界层外缘的及化学平衡时的值. 则当流体微团在边界层外缘未达到平衡 (即  $\rho_\delta < \rho_e$ ) 时, 无量纲激波脱体距离可写为

$$\tilde{\Delta} = \frac{1}{\tilde{\Omega}} \left[ -1 + (1 + 2L\tilde{\Omega})^{1/2} \right] \quad (16)$$

而当  $\tilde{\Omega}$  足够大, 流体微团在边界层外缘达到平衡 (即  $\rho_\delta = \rho_e$ ) 时,  $\tilde{\Delta}$  表达式为

$$\tilde{\Delta} = \frac{\rho_s}{\rho_e} \left[ L + \frac{1}{2\tilde{\Omega}} \left( \frac{\rho_e}{\rho_s} - 1 \right)^2 \right] \quad (17)$$

将化学反应速率方程 (6) 代入无量纲速率表达式, 最终求出  $\Delta_{inv}$  的大小. 其中  $\rho_s$  和  $\rho_e$  可通过冻结和平衡正激波关系式得到.

对于边界层位移距离, 可近似认为  $\delta^*$  正比于边界层厚度  $\delta$ <sup>[12]</sup>, 即  $\delta^* = c\delta$ . 而边界层厚度可采用类似平板边界层的计算方法得到<sup>[12]</sup>, 为

$$\frac{\delta}{R_n} \approx c' \left( 1 + \frac{T_w}{T_{st}} \right)^{\omega/2} \frac{Ma_\infty^\omega}{\sqrt{Re_\infty}} \quad (18)$$

其中,  $T_w$  和  $T_{st}$  分别表示壁面和驻点温度,  $\omega$  为黏性的温度指数, 对于空气  $\omega = 0.75$ .  $c'$  为一个比例常数, 对于轴对称问题约为 0.2 左右. 最后, 通过与数值模拟结果的比较,  $c$  可近似取为 0.75. 由于边界层位移厚度相对较小,  $c$  的取值对结果的影响不大.

### 3 数值模拟验证

为检验上述近似理论, 本文针对半径  $R_n = 0.305 \text{ m}$  的球头外形, 采用数值软件 SPACER 模拟了一系列钝头体流动的流场作为比较. SPACER 采用的是有限体积法数值求解 Navier-Stokes 方程, 其完全气体模型已被用于典型高超声速飞行器的气动性能评估<sup>[17]</sup>, 在此仅就对使用的热化学非平衡模型作一些说明. 空气中氧气离解反应的描述与化学反应式 (5) 一致. 组分黏性系数采用基于碰撞积分的表达式, 热导系数采用欧肯 (Eucken) 关系式; 混合物黏性系数及热导率的计算采用威尔克 (Wilke) 混合定律; 扩散系数采用  $Sc = \mu/(\rho D)$  计算, 取值为 0.5; 相关公式及参数见 Anderson<sup>[13]</sup> 的经典教材. 在数值模拟过程中, 选取热流作为指标进行了网格独立性测试. 不同高度的来流参数取自标准大气数据. 壁面条件为无催化等温壁, 壁温  $T_w = 300 \text{ K}$ .

图 2 给出了高度  $H = 20 \text{ km}$ , 速度  $U_\infty = 3500 \text{ m/s}$  来流条件下, 数值模拟得到的驻点线压力和速度分布. 结果比较表明, 本文所作的压力为常数、速度线性分布的近似比较合理, 能较好地反应流动的实际情况.

为验证驻点线上的氧离解度的理论计算, 采用 SPACER 模拟了几个代表性高度和速度下的钝头体流动. 图 3 为  $U_\infty = 3500 \text{ m/s}$  和  $4250 \text{ m/s}$  时,  $H = 20 \sim 60 \text{ km}$  高度的理论计算与数值模拟结果的比较. 图中实线表示理论预测的结果, 点画线为数值计算结果. 由图中对比可见, 虽然计算得到的离解度曲线与数值结果存在一定误差, 但  $\alpha$  的变化趋势及最大离解度 (边界层外缘处) 都符合的相当不错. 激波脱体距离也基本符合. 特别当高度较低时, 尽管激波后的离解度分布有一定位移差异, 但由于流场中氧气离解已达到平衡, 理论预测的最大离解度与数值计

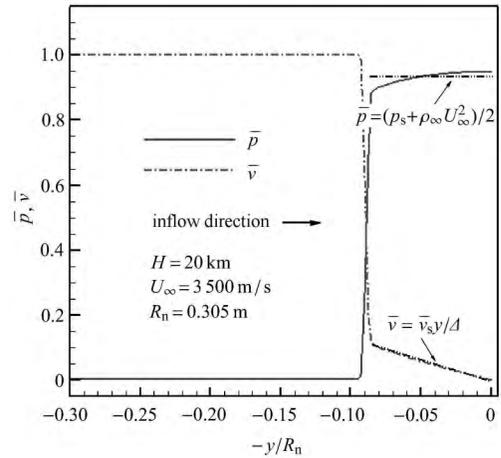
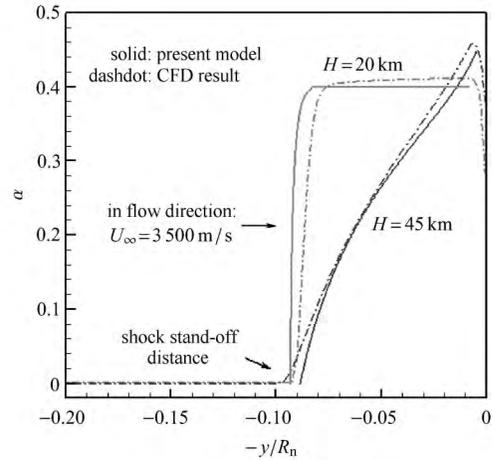
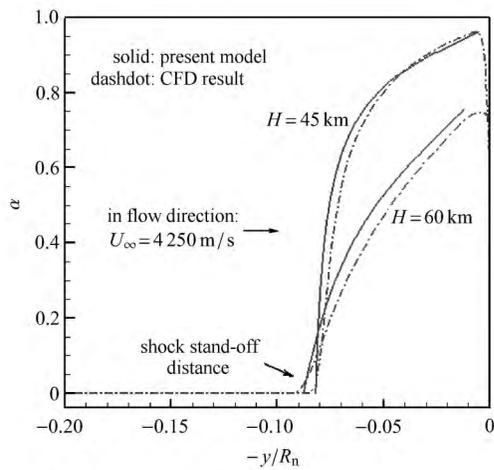


图 2 驻点线压力及速度的数值模拟结果与理论比较

Fig. 2 Comparison of pressure and velocity along the stagnation line between numerical data and present approximation



(a)  $U_\infty = 3500 \text{ m/s}$



(b)  $U_\infty = 4250 \text{ m/s}$

图 3 驻点线离解度的理论计算结果与数值结果的比较

Fig. 3 Comparison of oxygen dissociation degree between present model and CFD results

算仍很接近.

对比以相同速度在不同高度飞行时的结果发现, 飞行高度越高, 波后化学反应越慢, 但驻点附近的最大离解度却并不一定降低, 具体原因将在下一节讨论. 另一方面, 在同一高度 ( $H = 45 \text{ km}$ ) 以不同速度 ( $U_\infty = 3500 \text{ m/s}$  和  $4250 \text{ m/s}$ ) 飞行时的结果发现, 来流速度越高, 波后的化学反应速率越快, 相应的离解度也越大. 另外, 数值计算表明, 当飞行高度较高 ( $H = 60 \text{ km}$ ) 时,  $\alpha$  在边界层内几乎保持不变; 而在其他几个高度下,  $\alpha$  在边界层内都有急剧下降; 说明壁面处的复合反应只有在高度较低时才显著.

通过以上比较, 总体来说驻点线的近似理论给出的结果令人满意, 能够较好地预测不同来流条件下钝头体驻点线的化学反应程度. 图 3 的结果也表明, 当飞行高度较高时, 化学非平衡效应明显, 实际离解度低于平衡气体模型预测的数值. 由于近似理论可以快速计算沿驻点线的边界层外流动, 因此可以对飞行器在较大的高度和速度范围, 比较分析氧的离解度情况.

#### 4 高超声速飞行中化学非平衡现象和最大氧离解度分析

在不同的来流条件, 化学非平衡的程度有所不同. 通常以  $Da$  (流动特征时间  $\tau_f$  与化学反应松弛特征时间  $\tau_c$  之比) 来反映化学非平衡的强弱. 特别地,  $Da \rightarrow 0$  和  $Da \rightarrow \infty$  分布对应着冻结和平衡两个极限状态. 在高超声速流动中, 化学反应是否在驻点线能达到平衡, 取决于飞行器头部半径、速度和高度等诸多因素.

图 4 比较了 2 个不同半径 ( $R_n = 0.305 \text{ m}$  和  $0.025 \text{ m}$ ) 的球头以  $U_\infty = 3500 \text{ m/s}$  飞行时在不同高度下的最大离解度  $\alpha_\delta$ . 图中实线为近似理论结果, 符号为数值计算结果. 首先, 理论结果与数值数据符合很好, 进一步验证了近似理论的有效性.

其次, 图 4 中的氧离解度随高度增加呈先增大后减小的非单调变化规律. 离解度的这种变化趋势的内在原因可以从平衡移动和非平衡效应两方面来解释. 根据化学反应平衡移动原理, 当飞行高度增大, 压力下降, 离解-复合反应式 (5) 将向离解方向移动, 引起  $\alpha_e$  增大. 在较低高度下, 化学反应松弛距离小, 驻点区总能达到化学平衡, 即  $\alpha_\delta = \alpha_e$ . 由于平衡离解度只取决于来流条件, 因此不同球头的  $\alpha_\delta$  相互重合, 且随高度增加而增加. 但是随着高度的

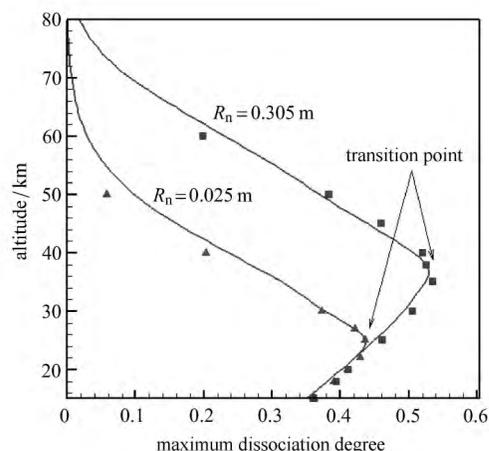


图 4 最大氧离解度随高度变化的计算结果对比 (曲线为理论计算结果, 符号为数值模拟结果)

Fig. 4 Comparison between theoretical and numerical results for the maximum dissociation degree. Lines: theoretical results, symbols: CFD results

进一步增加, 化学松弛距离增加, 在驻点附近不再能达到平衡状态. 此时  $\alpha_\delta$  将由化学松弛方程所决定, 并与球头半径有关. 对比两个半径的离解度曲线, 发现半径小的 ( $R_n = 0.025 \text{ m}$ ) 的离解度曲线的拐点位置更低. 这是因为半径小的球头的脱体激波距离小, 化学反应持续过程短, 造成氧的离解度小. 同时也说明前缘半径小的钝头体更易出现化学非平衡现象. 当流动处于化学非平衡状态时, 相同高度下, 半径大的钝头体离解度大.

高超声速飞行器希望能在不同高度以不同速度飞行, 涉及的化学反应可能处于冻结、非平衡或平衡状态, 对飞行器气动性能的影响也会有很大差异. 为考察化学非平衡对空气中氧气离解反应的实际影响, 进一步对高度  $H = 20 \sim 85 \text{ km}$ , 速度  $U_\infty = 2500 \sim 5500 \text{ m/s}$  范围内的大气来流条件进行了理论计算. 具体计算中, 由于迭代求解  $\alpha_e$  时需要初始值, 采用前一高度的计算结果作为后一高度的初始值的办法, 减少了迭代次数, 使得计算能够较快进行. 计算由程序自动执行, 整个过程约需数值模拟一个算例的时间. 最终计算结果见图 5.

图 5(a) 为半径  $0.305 \text{ m}$  球头的最大氧离解度在速度-高度坐标下的等值线图. 不妨认为  $\alpha < 0.01$  时, 氧气的离解可以忽略, 而当  $\alpha > 0.95$  时氧气离解完毕, 则这 2 条等值线划分出了氧气离解的大致区间. 图中的双点划线是 Gupta 文中给出的氧气离解开始和结束的位置<sup>[2]</sup>, 依据的是早期 Hansen 等<sup>[18]</sup> 的

平衡气体模型. 对比目前的理论结果和早期近似结果可以发现, 当高度较低时, 离解度随高度增大而增大, 氧离解区间与平衡气体模型结果近似一致. 但当高度进一步增大, 超过非平衡拐点时, 离解度等值线开始向速度大的方向弯曲. 这里非平衡拐点指的是边界层外缘的化学过程由平衡态转向非平衡态的高度点, 图中以虚线表示不同速度下的点集, 即非平衡转折线. 由于化学非平衡现象的出现, 要使氧气发生同样程度的离解需要更大的来流动能, 这与平衡气体模型有着本质的不同. 当然, 在氧气大部分离解时, 氮气也会开始离解, 氮气作为惰性气体的假设将会失效.

最大氧离解度的等值线直观地反映了典型高超声速条件下氧气的离解程度. 当飞行高度较低、速度较大时, 氧气大部分发生离解. 相反, 则离解反应较弱, 甚至可以忽略. 由于半径小的钝头体更易出现非平衡, 在本文所作假设成立的前提下, 随前缘半径减小, 等值线开始向右弯曲的位置所对应高度将会降低. 那么, 在速度-高度坐标上的化学冻结区域将有所扩大, 而氮气离解区域减小.

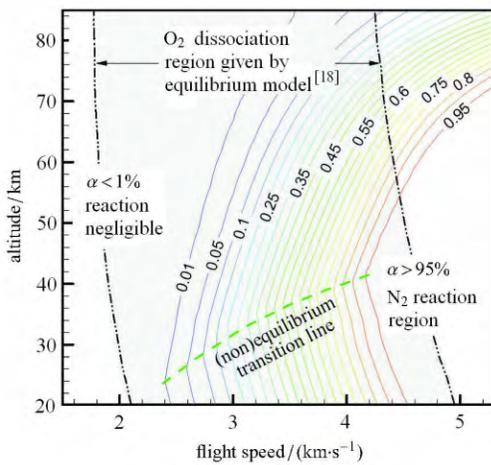
相应的边界层外缘温度的计算结果见图 5(b). 等值线上的数值为有量纲的结果, 同时来流温度随高度变化有一定差异. 根据传统的兰金-雨贡纽关系式, 在来流温度一定的条件下, 完全气体模型波后的温度仅是马赫数的函数. 但对于化学非平衡流动, 由图中可以看出波后温度还与飞行高度相关. 根据式 (8) 可知, 波后温度随离解度增大而近似线性减小. 因此, 图 5(b) 中温度等值线的弯曲方向与离解度等值线相反. 但在离解度很低的区域, 离解反应影响不大, 温度随高度变化很小. 右下角双点划线内的区域为氮离解区, 已超出本文模型的适用范围了.

### 5 结 论

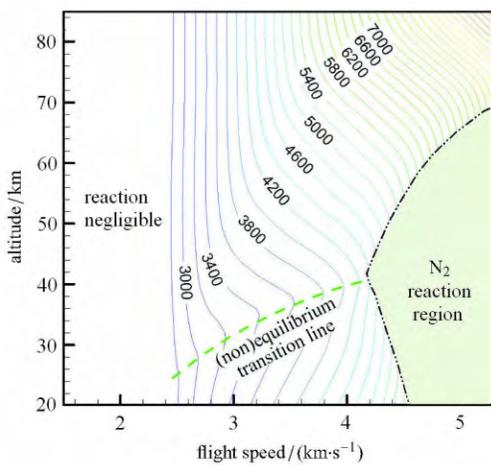
本文通过构建钝头体边界层外流动的准一维模型, 从理论上分析了大气层内高超声速飞行过程中化学非平衡效应的变化规律及最大氧离解度的变化. 其中氧气的离解反应采用理想解离气体 (IDG) 模型描述, 而氮气被视为惰性气体. 理论计算表明, 当飞行速度一定时, 随飞行高度的不断增大, 氧的离解度呈先增加后减小的非单调变化趋势. 其原因是由于化学反应平衡移动及非平衡效应相互作用的结果. 这一结论得到了数值模拟结果的验证, 同时也解释了文献中当飞行高度较高时真实气体效应减弱的现象.

基于驻点线的近似理论模型, 计算了典型高超声速飞行条件下, 轴对称钝头体前缘边界层外的流动状态, 得到了氧的最大离解度及边界层外缘温度随飞行速度和高度变化的等值线图. 受非平衡效应的影响, 氧的离解区间偏离文献中平衡气体模型给定的范围, 而向速度增大的方向弯曲. 同时, 边界层外缘温度也受飞行高度的影响. 相关结果对于飞行器的工程设计有一定参考意义.

本文的近似理论考虑了连续流条件下的氧气的离解情况, 可以快速地估计边界层外的驻点线流动和化学反应. 对于更高速度的流动, 需要考虑氮气的



(a)



(b)

图 5 半径 0.305 m 球头边界层外缘计算结果

(a) 最大氧离解度; (b) 温度 (K)

Fig. 5 Predicted maximum dissociation degree (a) and temperature (b) at external edge of the boundary layer for a sphere with a radius of 0.305 m

离解. 还有, 随着飞行高度的增加, 稀薄气体效应逐渐明显, 激波和边界层的厚度将增加, IDG 模型成立的前提也会逐渐失效. 因此, 更深入的工作应该进一步考虑这些因素的影响.

### 参 考 文 献

- 1 Bertin JJ, Cummings RM. Critical hypersonic aerothermodynamic phenomena. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 2006, 38: 129-157
- 2 Gupta RN, Yoss JM, Thompson RA, et al. A review of reaction rates and thermodynamic and transport properties for an 11-species air model for chemical and thermal nonequilibrium calculations to 30000 K. NASA-RP- 1232, 1990
- 3 Park C, Yoon S. Calculation of real-gas effects on airfoil aerodynamic characteristics. *Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, 1993, 7(4): 727-729
- 4 Knight D, Longo J, Drikakis D. et al. Assessment of CFD capability for prediction of hypersonic shock interactions. *Progress in Aerospace Sciences*, 2012, 48-49: 8-26
- 5 Holman TD, Boyd ID. Effects of continuum breakdown on hypersonic aerothermodynamics for reacting flow. *Physics of Fluids*, 2011, 23(2): 1-15
- 6 Lighthill MJ. Dynamics of a dissociating gas. Part I, equilibrium flow. *Journal of Fluid Mechanics*, 1957, 2(1): 1-32
- 7 Freeman NC. Non-equilibrium flow of an ideal dissociating gas. *Journal of Fluid Mechanics*, 1958, 4(4): 407-425
- 8 Wen CY, Hornung HG. Non-equilibrium dissociating flow over spheres. *Journal of Fluid Mechanics*, 1994, 299: 389-405
- 9 Belouaggadia N, Olivier H, Brun R. Numerical and theoretical study of the shock stand-off distance in non-equilibrium flows. *Journal of Fluid Mechanics*, 2008, 607: 167-197
- 10 Sanderson SR, Hornung HG, Sturtevant B. Aspects of planar, oblique and interacting shock waves in an ideal dissociating gas. *Physics of Fluids*, 2003, 15(6): 1638-1649
- 11 Wang ZH, Bao L, Tong BG. Theoretical modeling of the chemical non-equilibrium flow behind a normal shock wave. *AIAA Journal*, 2012, 50(2): 494-499
- 12 王智慧. 尖化前缘气动加热受稀薄气体效应和非平衡真实气体效应的工程理论.[博士论文]. 北京: 中国科学院研究生院, 2011 (Wang Zhihui. A theoretical modelling of aeroheating on sharpened noses under rarefied gas effects and nonequilibrium real gas effect. [PhD Thesis]. Beijing: University of Chinese Academy of Sciences, 2011 (in Chinese))
- 13 Anderson JD. Hypersonic and High Temperature Gas Dynamics. New York: McGraw-Hill Book Company, 2006
- 14 Park C. Assessment of two-temperature kinetic model for ionizing air. *Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, 1987, 3(3): 233-244
- 15 Olivier H. A theoretical model for the shock stand-off distance in frozen and equilibrium flows. *Journal of Fluid Mechanics*, 2000, 413: 345-353
- 16 Wen CY. Hypervelocity flow over spheres. [PhD Thesis]. Pasadena: Caltech, 1994
- 17 朱辉玉, 王刚, 孙泉华等. 典型气动布局高超声速飞行的气动力数值评估. *空气动力学学报*, 2012, 30(3): 365-372 (Zhu Huiyu, Wang Gang, Sun Quanhua, et al. Numerical evaluation on aerodynamics of typical hypersonic configurations for hypersonic flight. *Acta Aerodynamica Sinica*, 2012, 30(3): 365-372 (in Chinese))
- 18 Hansen CF, Steve SP. A review of the thermodynamic, transport, and chemical reaction rate properties of high-temperature air. NACA TN 4395, 1958: 1-33

(责任编辑: 刘希国)

## ANALYSIS OF MAXIMUM DISSOCIATION DEGREE OF OXYGEN DURING HYPERSONIC FLIGHT<sup>1)</sup>

Chen Song Sun Quanhua<sup>2)</sup>

*(State Key Laboratory of High Temperature Gas Dynamics, Institute of Mechanics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China)*

**Abstract** A theoretical model is established to calculate the dissociation degree of oxygen along the stagnant streamline of airflow, which is used to study the chemical nonequilibrium phenomena during hypersonic flight. The model assumes that nitrogen will not dissociate before oxygen undergoes serious dissociation. The recombination reaction in the boundary layer is also excluded in the model. It is found that, the dissociation degree of oxygen first increases and then decreases as the flight altitude increases, which is due to the competence between the equilibrium shift and nonequilibrium effect. This observation is confirmed by CFD simulations, and can be used to explain the phenomenon of the decline of real gas effects with increasing flight altitude in the literature. Using the developed model, the maximum dissociation degree of oxygen and temperature at the external edge of the boundary layer, are evaluated for hypersonic flows over a blunt body that cover a wide range of flight speeds and altitudes. The results are useful for engineering applications.

**Key words** hypersonic flow, chemical nonequilibrium, oxygen dissociation degree, blunt body flow

---

Received 10 May 2013, revised 27 June 2013.

1) The project was supported by the National Natural Science Foundation of China (90816012, 91116013, 1111120080).

2) Sun Quanhua, professor, research interests: rarefied gas dynamics and nonequilibrium flow. E-mail: qsun@imech.ac.cn