

一种化学反应平衡流激波关系的求解方法

张子健 刘云峰 姜宗林

(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 化学反应普遍存在于自然界中, 而气体流动作为自然界的一个基本物理现象, 也时常伴随着化学反应的发生。在高超声速飞行器飞行时, 激波压缩产生高温, 使空气发生热化学反应。在高超声速推进中, 激波诱导燃烧产生爆轰波是吸气式推进的新概念。激波与化学反应的强耦合是化学反应流中很重要的物理化学现象。本文从理论上给出了一种化学反应平衡流的激波关系的迭代求解方法。研究表明, 该方法具有简单、精确、可操作性强、稳定性好等优点。

关键词: 化学反应平衡流, 激波关系, 理论计算, 迭代法

一、引言

化学反应普遍存在于自然界中, 而气体流动作为自然界的一个基本物理现象, 也时常伴随着化学反应的发生。工程实践中, 化学反应流更是高超声速飞行器及其推进系统的基本研究对象。在高超声速飞行器飞行过程中, 高速空气经激波压缩产生极端高温环境, 此时空气分子发生振动激发、解离和电离等热化学反应, 被称为高温气体效应。在高超声速推进中, 激波诱导燃烧产生爆轰波是吸气式推进的新概念。无论是高温气体效应还是爆轰波, 它们都是激波诱导化学反应发生的物理化学现象, 化学反应与激波是强耦合的。从理论上分析和求解存在化学反应的激波关系是研究高温气体效应和爆轰现象的一个重要手段, 也是深入认识化学反应流的一个重要方面。

二、理论计算方法

2.1 假设和模型

假设激波前后都是多组分均匀混合气体, 激波前的气流参数和气体组成都已知, 求激波后的气流参数和气体组成。对每种气体成分, 不同温度下分子自由度激发程度不同, 其能量是温度的非线性函数, 采用 NASA 的 Glenn 数据库对其进行分段多项式拟合:

$$\frac{H^0(T)}{R_0 T} = -a_1 \frac{1}{T^2} + a_2 \frac{\ln T}{T} + a_3 + \frac{1}{2} a_4 T + \frac{1}{3} a_5 T^2 + \frac{1}{4} a_6 T^3 + \frac{1}{5} a_7 T^4 + b_1 \frac{1}{T} \quad (1)$$

设多组分混合气体中组分数为 n_{sp} , 各组分气体的质量分数为 m_i , 则混合气体的比焓为:

$$h(T) = \sum_{i=1}^{n_{sp}} m_i h_i(T) \quad (2)$$

在化学平衡流中, 气体组成是温度和压力的非线性函数, 与激波耦合求解极其复杂, 计算中采用迭代法求解。先假设激波波后的一个气体组成, 然后采用变组分的激波关系求解出激波波后的压力和温度, 再根据化学平衡求出该温度和压力下新的气体组成, 反复迭代直至收敛。

2.2 变组分正激波关系

正激波前后气体组成不同,且每一气体成分都是非量热完全气体,此时正激波关系没有解析表达式,采用牛顿迭代法进行求解:

$$u_{2,i+1} = u_{2,i} - f(u_{2,i}) / f'(u_{2,i}) \quad (3)$$

$$f(u_2) = h_2(T_2) + \frac{1}{2}u_2^2 - h_1(T_1) - \frac{1}{2}u_1^2, \quad T_2 = \frac{1}{R_2} \left(\frac{R_1 T_1}{u_1} + u_1 - u_2 \right) u_2 \quad (4)$$

$$f'(u_2) = \frac{dh_2}{dT_2} \cdot \frac{dT_2}{du_2} + u_2 = \frac{c_p(T_2)}{R_2} \cdot \left(\frac{R_1 T_1}{u_1} + u_1 - 2u_2 \right) + u_2 \quad (5)$$

2.3 变组分斜激波关系

对斜激波关系的求解仍采用牛顿迭代法:

$$\beta_{i+1} = \beta_i - f(\beta_i) / f'(\beta_i) \quad (6)$$

$$\begin{cases} f(\beta, u_{2n}, T_2) = h_2(T_2) + \frac{1}{2}u_{2n}^2 - h_1(T_1) + \frac{1}{2}u_1^2 \sin^2 \beta \\ T_2(\beta, u_{2n}) = \frac{1}{R_2} \left(\frac{R_1 T_1}{u_1 \sin \beta} + u_1 \sin \beta - u_{2n} \right) \cdot u_{2n} \\ u_{2n}(\beta) = u_1 \cos \beta \tan(\beta - \theta) \end{cases} \quad (7)$$

$$f'(\beta) = \frac{df}{d\beta} = \frac{\partial f}{\partial \beta} + \frac{\partial f}{\partial u_{2n}} \cdot \frac{du_{2n}}{d\beta} + \frac{\partial f}{\partial T_2} \cdot \left(\frac{\partial T_2}{\partial \beta} + \frac{\partial T_2}{\partial u_{2n}} \cdot \frac{du_{2n}}{d\beta} \right) \quad (8)$$

2.3 化学平衡组分计算

对于给定温度 T 和压力 p 下化学平衡组分的求解,采用的是 NASA 的最小自由能法。先假设各组分气体的摩尔数为 y_i , 根据线性方程组式(9)求出 λ_i 和 $\Sigma x_i / \Sigma y_i$, 再代入式(10)求出新的摩尔数 x_i , 反复迭代直至收敛。

$$\begin{cases} \sum_{j=1}^{nEl} \lambda_j \sum_{i=1}^{nSp} y_i a_{ij} = \sum_{i=1}^{nSp} d_i, \quad d_i \equiv y_i \left(\frac{G_i^0}{RT} + \ln \frac{y_i}{\sum y_i} + \ln p \right) \\ \sum_{i=1}^{nSp} (-a_{ij} d_i) + \sum_{i=1}^{nSp} \frac{x_i}{y_i} \sum_{i=1}^{nSp} y_i a_{ij} + \sum_{k=1}^{nEl} \lambda_k \sum_{i=1}^{nSp} a_{ik} a_{ij} y_i - b_j = 0, \quad j=1, \dots, nEl \end{cases} \quad (9)$$

$$x_i = -d_i + y_i \left(\frac{\sum x_i}{\sum y_i} + \sum_{j=1}^{nEl} \lambda_j a_{ij} \right) \quad (10)$$

三、结论

研究表明,提出的求解化学反应平衡流激波关系的方法具有简单、精确、可操作性强、稳定性好等优点,是研究化学反应平衡流的重要手段。