

高超声速三维化学非平衡流动简化 NS 方程数值解

欧阳水吾 苏玉宏 谢中强
(北京空气动力研究所, 北京 100074)

摘要 本文研究用时间稳定法求解高超声速三维化学非平衡流动简化 NS 方程, 把整个非平衡流体动力学问题分裂为流体力学问题和化学问题. 流体力学与化学问题之间的耦合通过迭代方式加以处理. 考虑高温空气分解与电离, 七个化学组元, 并认为化学反应是以有限速率进行的. 差分格式采用无自由参数的混合反扩散格式, 激波及壁面处理应用特征线理论. 对来流攻角为 10° , 马赫数为 26, 飞行高度为 85km 的钝锥体, 给出了流场参数和物面加热率的数值计算结果.

关键词 分解, 电离, 时间稳定法, 化学非平衡, 混合反扩散格式, 简化 NS 方程

引 言

高超声速飞行器再入大气层时, 化学反应和电离效应对飞行器周围流场气动特性和物面热交换的影响必须予以考虑. 对有攻角钝头体三维化学非平衡黏性激波层流动用空间步长推进法计算是我们步入这一研究领域的首次探索^[1]. 国内已有不少研究工作者取得了很好的成果. 近年来, 国外对黏性流研究, 已把注意力集中在高超声速化学非平衡流上, 对化学非平衡流动, 尤其是三维 PNS 方程和 NS 方程进行数值计算^[3-7]. 目前国内开展三维问题数值计算还很少, 本文试图在工作 [1] 的基础上对三维化学非平衡流动, 采用时间稳定法对简化 NS 方程数值求解, 提高计算精度, 对有攻角钝锥体流场参数和气动加热率给出结果, 并与推进法结果进行比较.

一、多组元化学反应气体黏性流动基本方程

在一般正交曲线坐标系 (x, y, z) 中, h_1, h_2, h_3 分别为三个方向的拉梅系数, 具有化学反应的黏性流动的完全 NS 方程的守恒形式为

$$U_t + (F + F_v)_x + (G + G_v)_y + (H + H_v)_z + S = 0 \quad (1)$$

其中

$$U = h_1 h_2 h_3 [\rho, \rho u, \rho v, \rho w, \rho E, \rho C_i]^T \quad (2a)$$

本文于1992年12月31日收到第一稿, 1993年11月26日收到修改稿

$$F = h_2 h_3 [\rho u, \rho u^2 + P, \rho uv, \rho uw, (\rho E + P)u, \rho C_1 u]^T \quad (2b)$$

$$G = h_1 h_3 [\rho v, \rho v u, \rho v^2 + P, \rho vw, (\rho E + P)v, \rho C_1 v]^T \quad (2c)$$

$$H = h_1 h_2 [\rho w, \rho w u, \rho w v, \rho w^2 + P, (\rho E + P)w, \rho C_1 w]^T \quad (2d)$$

$$F_v = -h_2 h_3 [0, \Pi_{xx}, \Pi_{xy}, \Pi_{xz}, \Phi_x, J_{1x}]^T \quad (2e)$$

$$G_v = -h_1 h_3 [0, \Pi_{yx}, \Pi_{yy}, \Pi_{yz}, \Phi_y, J_{1y}]^T \quad (2f)$$

$$H_v = -h_1 h_2 [0, \Pi_{zx}, \Pi_{zy}, \Pi_{zz}, \Phi_z, J_{1z}]^T \quad (2g)$$

$$S = [S_1, S_2, S_3, S_4, S_5, S_6]^T \quad (2h)$$

式中 E 为单位质量气体的总能, H 为单位质量气体总焓, u 、 v 、 w 分别为 x 、 y 、 z 方向的速度分量.

$$S_1 \equiv 0$$

$$S_2 \equiv h_3 \frac{\partial h_1}{\partial y} (\rho uv - \Pi_{xy}) + h_2 \frac{\partial h_1}{\partial z} (\rho uw - \Pi_{xz}) - h_3 \frac{\partial h_2}{\partial x} (\rho v^2 + P - \Pi_{yy}) - h_2 \frac{\partial h_3}{\partial x} (\rho w^2 + P - \Pi_{zz})$$

$$S_3 \equiv h_3 \frac{\partial h_2}{\partial x} (\rho vu - \Pi_{yx}) + h_1 \frac{\partial h_2}{\partial z} (\rho vw - \Pi_{yz}) - h_3 \frac{\partial h_1}{\partial y} (\rho u^2 + P - \Pi_{xx}) - h_1 \frac{\partial h_3}{\partial y} (\rho w^2 + P - \Pi_{zz})$$

$$S_4 \equiv h_2 \frac{\partial h_3}{\partial x} (\rho wu - \Pi_{zx}) + h_1 \frac{\partial h_3}{\partial y} (\rho vw - \Pi_{zy}) - h_2 \frac{\partial h_1}{\partial z} (\rho u^2 + P - \Pi_{xx}) - h_1 \frac{\partial h_2}{\partial z} (\rho v^2 + P - \Pi_{yy})$$

$$S_5 \equiv 0$$

$$S_6 \equiv -h_1 h_2 h_3 \rho \omega_l$$

应力、耗散和扩散分量分别由 Π_{ij} 、 Φ_k 和 J_{ik} 表示. 式中 i, j, k 相应于 x, y, z .

$$\Pi_{ij} = \lambda \delta_{ij} \left[\frac{\partial}{\partial x_k} \left(\frac{u_k}{h_k} \right) + \frac{u_k}{h_i h_k} \frac{\partial h_i}{\partial x_k} \right] + \mu \left[\frac{h_i}{h_j} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{u_i}{h_i} \right) + \frac{h_j}{h_i} \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{u_j}{h_j} \right) \right] \quad (2i)$$

$$\Phi_i = u_i \Pi_{ij} + q_i \quad (2j)$$

$$q_i = -\frac{K}{h_i} \frac{\partial T}{\partial x_i} + \sum_l h_l J_{li} \quad (2k)$$

$$J_{li} = -\frac{M_l}{M_w} \sum_m \rho D_{im} \frac{\partial C_m}{h_i \partial x_i} \quad (2l)$$

$$\lambda = -\frac{2}{3} \mu \quad (2m)$$

K 为热传导系数, μ 为黏性系数, D_{lm} 为多组元扩散系数, q 为热交换率.
状态方程

$$P = \frac{R}{MC p_{\infty}^*} \rho T \quad (3)$$

R 为通用气体常数, \bar{M} 为气体混合物的平均分子量.

二、贴体坐标系中简化 NS 方程

应用贴体坐标系, 三个坐标依次为沿物面流动方向 s , 物面法向 n , 和周向 θ . 考虑薄层假设, 忽略 s 及 θ 方向的黏性项, 在低雷诺数条件下, 对方程适当简化. 为了便于计算, 把流体动力学问题与化学反应问题分裂求解. 对流体动力学方程, 选取五个特征变量为 ρ 、 u 、 v 、 w 、 T , 方程化为

$$\frac{\partial U}{\partial t} + A \frac{\partial U}{\partial s} + B \frac{\partial U}{\partial n} + C \frac{\partial U}{\partial \theta} = F \quad (4)$$

式中

$$U = [\rho, u, v, w, T]^T \quad (5a)$$

$$F = [F_1, F_2, F_3, F_4, F_5]^T \quad (5b)$$

$$F_1 = -\frac{1}{h_1 h_3} \left[\rho u \frac{\partial h_3}{\partial s} + \rho v \frac{\partial h_1 h_3}{\partial n} + \rho w \frac{\partial h_1}{\partial \theta} \right] \quad (5c)$$

$$F_2 = -\frac{uv}{h_1} \frac{\partial h_1}{\partial n} + \frac{v^2}{h_1 h_3} \frac{\partial h_3}{\partial s} - \frac{uw}{h_1 h_3} \frac{\partial h_1}{\partial \theta} + \frac{\varepsilon^2 \mu}{\rho h_1} \frac{\partial h_1}{\partial n} \left(\frac{\partial u}{\partial n} - \frac{u}{h_1} \frac{\partial h_1}{\partial n} \right) + \frac{\varepsilon^2}{\rho h_1 h_3} \frac{\partial}{\partial n} \left[h_1 h_3 \mu \left(\frac{\partial u}{\partial n} - \frac{u}{h_1} \frac{\partial h_1}{\partial n} \right) \right] \quad (5d)$$

$$F_3 = \frac{u^2}{h_1} \frac{\partial h_1}{\partial n} + \frac{w^2}{h_3} \frac{\partial h_3}{\partial n} \quad (5e)$$

$$F_4 = -\frac{uw}{h_1 h_3} \frac{\partial h_3}{\partial s} - \frac{vw}{h_3} \frac{\partial h_3}{\partial n} + \frac{u^2}{h_1 h_3} \frac{\partial h_1}{\partial \theta} + \frac{\varepsilon^2 \mu}{\rho h_3} \frac{\partial h_3}{\partial n} \left(\frac{\partial w}{\partial n} - \frac{w}{h_3} \frac{\partial h_3}{\partial n} \right) + \frac{\varepsilon^2}{\rho h_1 h_3} \frac{\partial}{\partial n} \left[h_1 h_3 \mu \left(\frac{\partial w}{\partial n} - \frac{w}{h_3} \frac{\partial h_3}{\partial n} \right) \right] \quad (5f)$$

$$F_5 = c^2 F_1 + \frac{\varepsilon^2}{\rho C_p h_1 h_3} \frac{\partial}{\partial n} \left(h_1 h_3 K \frac{\partial T}{\partial n} \right) + \frac{\varepsilon^2 \mu}{\rho C_p} \left(\frac{\partial u}{\partial n} - \frac{u}{h_1} \frac{\partial h_1}{\partial n} \right)^2 + \frac{\varepsilon^2 \mu}{\rho C_p} \left(\frac{\partial w}{\partial n} - \frac{w}{h_3} \frac{\partial h_3}{\partial n} \right)^2 - \frac{\varepsilon^2}{\rho C_p} \sum_{i=1}^{n_s} J_i C_{p_i} \frac{\partial T}{\partial n} - \frac{1}{\rho C_p} \sum_{i=1}^{n_s} h_i \omega_i \quad (5g)$$

$$A = \frac{1}{h_1} \begin{bmatrix} u & \rho & 0 & 0 & 0 \\ a & u & 0 & 0 & b \\ 0 & 0 & u & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & u & 0 \\ 0 & c^2 & 0 & 0 & u \end{bmatrix} \quad B = \begin{bmatrix} v & 0 & \rho & 0 & 0 \\ 0 & v & 0 & 0 & 0 \\ a & 0 & v & 0 & b \\ 0 & 0 & 0 & v & 0 \\ 0 & 0 & c^2 & 0 & v \end{bmatrix} \quad (5h)$$

$$C = \frac{1}{h_3} \begin{bmatrix} w & 0 & 0 & \rho & 0 \\ 0 & w & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & w & 0 & 0 \\ a & 0 & 0 & w & b \\ 0 & 0 & 0 & c^2 & w \end{bmatrix} \quad (5i)$$

化学组元连续方程

$$\frac{\partial C_l}{\partial t} + \frac{u}{h_1} \frac{\partial C_l}{\partial s} + v \frac{\partial C_l}{\partial n} + \frac{w}{h_3} \frac{\partial C_l}{\partial \theta} = \frac{\omega_l}{\rho} - \frac{\varepsilon^2}{\rho h_1 h_3} \frac{\partial}{\partial n} (J_l h_1 h_3) \quad (l = 1, 2, \dots, n_s) \quad (6)$$

式中

$$\varepsilon = \sqrt{\frac{\mu_{ref}^*}{\rho_{\infty}^* U_{\infty}^* R_n^*}} \quad (7)$$

其中 σ 为激波角, φ 为物面角, φ_s 为流向物面角, φ_θ 为周向物面角, ω_i 为组元 i 的化学反应生成速率.

三、系数矩阵特征分裂、特征值和特征矢量

在计算中需要将物理平面映射到计算平面, 采取了如下变换

$$\xi = s, \quad \eta = \varphi = g\left(\frac{n}{n_{sh}}\right), \quad \zeta = \theta \quad (8)$$

n_{sh} 为激波层厚度, $g\left(\frac{n}{n_{sh}}\right)$ 为网格加密函数, 并表示为

$$g(\bar{n}) = 1 - \left[\alpha + \frac{(1-\alpha)}{\ln\left(\frac{\beta+1}{\beta-1}\right)} \ln \frac{\beta - \bar{n}(2\alpha+1) + 1}{\beta + \bar{n}(2\alpha+1) - 1} \right] \quad (9)$$

变换的微分算子

$$\frac{\partial}{\partial s} = \frac{\partial}{\partial \xi} - \frac{\partial \varphi}{\partial \xi} \frac{\partial}{\partial \eta}, \quad \frac{\partial}{\partial n} = \frac{\partial \varphi}{\partial n} \frac{\partial}{\partial \eta} \quad (10a)$$

$$\frac{\partial}{\partial \theta} = \frac{\partial}{\partial \zeta} - \frac{\partial \varphi}{\partial \zeta} \frac{\partial}{\partial \eta}, \quad \frac{\partial}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial \tau} - \frac{\partial \eta}{\partial t} \frac{\partial}{\partial \eta} \quad (10b)$$

于是方程 (4) 化为

$$\frac{\partial U}{\partial \tau} + A \frac{\partial U}{\partial \xi} + D \frac{\partial U}{\partial \eta} + C \frac{\partial U}{\partial \zeta} = F \quad (11)$$

式中

$$D = \begin{bmatrix} \tilde{u} & -\rho\varphi_1 & \rho\varphi_2 & -\rho\varphi_3 & 0 \\ -a\varphi_1 & \tilde{u} & 0 & 0 & -b\varphi_1 \\ a\varphi_2 & 0 & \tilde{u} & 0 & b\varphi_2 \\ -a\varphi_3 & 0 & 0 & \tilde{u} & -b\varphi_3 \\ 0 & -c^2\varphi_1 & c^2\varphi_2 & -c^2\varphi_3 & \tilde{u} \end{bmatrix} \quad (12)$$

$$\tilde{u} = \eta_t - \varphi_1 u + \varphi_2 v - \varphi_3 w \quad (13a)$$

$$\varphi_1 = \frac{1}{h_1} \frac{\partial \varphi}{\partial \xi}, \quad \varphi_2 = \frac{\partial \varphi}{\partial \eta}, \quad \varphi_3 = \frac{1}{h_3} \frac{\partial \varphi}{\partial \zeta} \quad (13b)$$

$$a = \frac{1}{\rho} \left(\frac{\partial P}{\partial \rho} \right)_T, \quad b = \frac{R}{MCp_\infty^*}, \quad c = \sqrt{\frac{1}{\rho C_p} \left(\frac{\partial F}{\partial \rho} \right)_T} \quad (13c)$$

以下对矩阵 A 、 C 、 D 进行特征分裂：

矩阵 A 的特征值为

$$\Lambda_A = \frac{1}{h_1} \text{diag}(u, u, u, u - c, u + c) \quad (14)$$

对应的特征矢量是

$$(b, 0, 0, 0, -a)^T, (0, 0, 1, 0, 0)^T, (0, 0, 0, 1, 0)^T \\ \left(\frac{\rho}{c}, -1, 0, 0, c \right)^T, \quad \left(\frac{\rho}{c}, 1, 0, 0, c \right)^T$$

将矩阵分裂

$$A = T_A \Lambda_A T_A^{-1} \quad (15)$$

对矩阵 C 同样做法

$$\Lambda_C = \frac{1}{h_3} \text{diag}(w, w, w, w - c, w + c) \quad (16)$$

$$C = T_C \Lambda_C T_C^{-1} \quad (17)$$

最后对矩阵 D 进行特征分裂

$$\Lambda_D = \text{diag}(\tilde{u}, \tilde{u}, \tilde{u}, \tilde{u} - \Delta c, \tilde{u} + \Delta c) \quad (18)$$

$$\Delta = (\varphi_1^2 + \varphi_2^2 + \varphi_3^2)^{1/2} \quad (19)$$

$$D = T_D \Lambda_D T_D^{-1} \quad (20)$$

四、化学反应模型

考虑纯空气分子的非平衡化学反应：



气体组元为 N_2 , O_2 , N , O , NO , NO^+ , 以及 e^- 等 7 个组元, 其中 M_1 , M_2 , M_3 表示催化三体. 上述七个化学反应方程可以写成如下通式

$$\sum_{i=1}^{n_j} \alpha_{ri} X_i \xrightleftharpoons[k_{br}]{k_{fr}} \sum_{i=1}^{n_j} \beta_{ri} X_i \quad r = 1, 2, \dots, n_r \tag{22}$$

下标 r 表示化学反应方程式的序号, α_{ri} 及 β_{ri} 分别表示正向和逆向化学反应的当量系数, K_{fr} 及 K_{br} 分别表示正向和逆向化学反应的速率常数, X_i 表示化学组元成分或催化三体. 反应速率常数由如下关系式给出^[8]

$$K_{fr} = T^{C_{2r}} \exp\left(C_{0r} - \frac{C_{1r}}{T}\right) \tag{23}$$

$$K_{br} = T^{D_{2r}} \exp\left(D_{0r} - \frac{D_{1r}}{T}\right) \tag{24}$$

其中 C_{0r} , C_{1r} , C_{2r} , D_{0r} , D_{1r} , D_{2r} 是对应不同化学反应的化学反应常数, 每单位体积中组元 i 的质量生成率 ω_i 为

$$\frac{\omega_i}{\rho} = M_i \sum_{r=1}^{n_r} (\beta_{ri} - \alpha_{ri})(L_{fr} - L_{br}) \tag{25}$$

式中

$$\alpha_r = \sum_{j=1}^{n_j} \alpha_{rj} - 1, \quad \beta_r = \sum_{j=1}^{n_j} \beta_{rj} - 1 \tag{26a}$$

$$L_{fr} = K_{fr}(\bar{\rho})^{\alpha_r} \prod_{j=1}^{n_j} (\gamma_j)^{\alpha_{rj}}, \quad L_{br} = K_{br}(\bar{\rho})^{\beta_r} \prod_{j=1}^{n_j} (\gamma_j)^{\beta_{rj}} \tag{26b}$$

其中 $\bar{\rho}$ 的单位为 (mg/cm^3) .

$$\text{对于气体组元: } \gamma_j = \frac{C_j}{M_j} \quad j = 1, 2, \dots, n_s \tag{26c}$$

$$\text{对于催化三体: } \gamma_j = \sum_{i=1}^{n_s} Z_{(j-n_s),i} \gamma_i \quad j = (n_s + 1), \dots, n_j \tag{26d}$$

n_j 等于组元数加上催化三体数, n_s 为组元数, $Z_{(j-n_s),i}$ 为相对于惰性气体氩的三体催化效率.

在组元连续方程中, 组元浓度作为未知量出现, 生成速率项由下式给出

$$\frac{\omega_i}{\rho} = \omega_i^0 - \omega_i^1 C_i \quad (27)$$

其中

$$\omega_i^0 = M_i \sum_{r=1}^{n_r} (\Gamma_{ri}^+ L_{fr} + \Gamma_{ri}^- L_{br}) \quad (28a)$$

$$\omega_i^1 = \sum_{r=1}^{n_r} \left[\Gamma_{ri}^+ \left(\frac{L_{br}}{\gamma_i} \right) + \Gamma_{ri}^- \left(\frac{L_{fr}}{\gamma_i} \right) \right] \quad (28b)$$

$$\Gamma_{ri}^+ = \begin{cases} (\beta_{ri} - \alpha_{ri}) & \text{如果 } (\beta_{ri} - \alpha_{ri}) > 0 \\ 0 & \text{如果 } (\beta_{ri} - \alpha_{ri}) \leq 0 \end{cases} \quad (29a)$$

$$\Gamma_{ri}^- = \begin{cases} 0 & \text{如果 } (\beta_{ri} - \alpha_{ri}) \geq 0 \\ -(\beta_{ri} - \alpha_{ri}) & \text{如果 } (\beta_{ri} - \alpha_{ri}) < 0 \end{cases} \quad (29b)$$

$\frac{\omega_i}{\rho}$ 对温度 T 的导数为

$$\frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{\omega_i}{\rho} \right) = \frac{M_i}{T} \sum_{r=1}^{n_r} (\beta_{ri} - \alpha_{ri}) \times \left[\left(C_{2r} + \frac{C_{1r}}{T} - \alpha_r \right) L_{fr} - \left(D_{2r} + \frac{D_{1r}}{T} - \beta_r \right) L_{br} \right] \quad (30)$$

五、差分格式

计算中采用了文献 [2] 中的无自由参数的混合反扩散格式, 模型方程为

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial F}{\partial x} = 0' \quad (31)$$

设通量 F 可以分裂为

$$F = F^+ + F^- \quad (32)$$

这里

$$F^+ = A_+ U, \quad F^- = A_- U \quad (33a)$$

$$A_+ = S^{-1} \Lambda_+ S, \quad A_- = S^{-1} \Lambda_- S \quad (33b)$$

$$\text{设 } \Delta F_{i+1/2}^+ = F_{i+1}^+ - F_i^+, \quad \Delta F_{i+1/2}^- = F_{i+1}^- - F_i^- \quad (34)$$

格式如下

$$\frac{\partial U}{\partial t} = -\frac{1}{\Delta x} (H_{i+1/2} - H_{i-1/2}) \quad (35)$$

式中

$$H_{i+1/2} = (F_{i+1/2}^+)_L + (F_{i+1/2}^-)_R \tag{36}$$

$$(F_{i+1/2}^+)_L = F_i^+ + \frac{1}{2}\psi_{i+1/2}\Delta F_{i+1/2}^+ \tag{37}$$

$$(F_{i+1/2}^-)_R = F_{i+1}^- - \frac{1}{2}\psi_{i+1/2}\Delta F_{i+1/2}^- \tag{38}$$

而

$$F_i^+ + \frac{1}{2}\psi_{i+1/2}\Delta F_{i+1/2}^+ = F_i^+ + \frac{1}{2}\min\text{mod}(\Delta F_{i+1/2}^+, \Delta F_{i-1/2}^+) \tag{39}$$

$$F_{i+1}^- - \frac{1}{2}\psi_{i+1/2}\Delta F_{i+1/2}^- = F_{i+1}^- + \frac{1}{2}\min\text{mod}(\Delta F_{i+1/2}^-, \Delta F_{i-1/2}^-) \tag{40}$$

其中

$$\min\text{mod}(x, y) = \begin{cases} 0 & xy \leq 0 \\ x, y \text{ 中绝对值较小者} & xy > 0 \end{cases} \tag{41}$$

如果 $H_{i+1/2}$ 取 $H_{i+1/2}^n$, 这就是显式 (TVD) 格式, 如果 $H_{i+1/2}$ 取 $H_{i+1/2}^{n+1}$, 就是隐式 (TVD) 格式.

六、激波和物面边界条件处理

在流场求解过程中, 以激波为外边界, 采用激波装配法, 激波外法向单位矢量为

$$\mathbf{n} = n_1\mathbf{e}_s + n_2\mathbf{e}_n + n_3\mathbf{e}_\theta \tag{42}$$

$$\text{令 } C_s = \frac{1}{h_1} \frac{\partial n_{sh}}{\partial s}, \quad C_\theta = \frac{1}{h_3} \frac{\partial n_{sh}}{\partial \theta}, \quad \omega = \sqrt{1 + C_s^2 + C_\theta^2} \tag{43}$$

$$\text{于是有 } n_1 = -\frac{C_s}{\omega} = -C_s n_2, \quad n_2 = \frac{1}{\omega}, \quad n_3 = -n_2 C_\theta \tag{44}$$

其中 h_1, h_3 为拉梅系数, 其表示式为

$$h_1 = 1 + \kappa_s n_{sh} \eta \cos \varphi_s \tag{45}$$

$$h_3 = r(1 + \kappa_\theta n_{sh} \eta \cos \varphi_s) / \cos \varphi_\theta \tag{46}$$

来流速度分解为

$$u_\infty = \cos \alpha \cos \varphi + \sin \alpha \sin \varphi \cos \theta \tag{47a}$$

$$v_\infty = -\cos \alpha \sin \varphi + \sin \alpha \sin \varphi \cos \theta \tag{47b}$$

$$w_\infty = -\sin \alpha \sin \theta \tag{47c}$$

α 为攻角, φ 为物面角, θ 为周向角.

激波边界条件利用了修正的 Rankine-Hugoniot 关系式, 其中激波角为

$$\sigma = \arcsin|\mathbf{U}_\infty \cdot \mathbf{n}| \tag{48}$$

过激波的流体速度为

$$\mathbf{V}_{sh} = U_{\infty} + \sin \sigma \mathbf{n} - |\hat{\mathbf{V}}_{sh}| \mathbf{n} \quad (49)$$

式中 $\hat{\mathbf{V}}_{sh}$ 为激波法向速度.

假设无激波滑移, 对于化学组元浓度则有

$$C_{i,sh} = C_{i,\infty} \quad (50)$$

为了建立激波上的点与流场内点之间的关系, 利用特征线理论建立相容关系^[6]. 矩阵 D 的特征值所构成的特征矢量为

$$\left(a, -\frac{c\varphi_1}{\Delta}, \frac{c\varphi_2}{\Delta}, -\frac{c\varphi_3}{\Delta}, b \right) \quad (51)$$

用特征矢量 l 左乘方程 (11), 得出激波上的特征相容关系式

$$l \cdot \left(\frac{\partial U}{\partial \tau} + A \frac{\partial U}{\partial \xi} + D \frac{\partial U}{\partial \eta} + C \frac{\partial U}{\partial \zeta} \right) = \sum_{i=1}^5 F_i l_i \quad (52)$$

求解激波厚度时, 先给定激波厚度初值, 求解整个流场. 然后就可以依据方程 (52), 求出激波的加速度 $\frac{\partial^2 n_{sh}}{\partial \tau^2}$, 从而可得到下一时刻的激波速度 $\frac{\partial n_{sh}}{\partial \tau}$, 修正后可得到该时刻的激波厚度. 为此循环往复直至激波厚度收敛为止.

由 n 时刻的流场参数, 求解 $\frac{\partial^2 n_{sh}}{\partial \tau^2}$, 从而得出 $n+1$ 时刻的 $\frac{\partial n_{sh}}{\partial \tau}$.

$$\left(\frac{\partial n_{sh}}{\partial \tau} \right)^{n+1} = \left(\frac{\partial n_{sh}}{\partial \tau} \right)^n + \left(\frac{\partial^2 n_{sh}}{\partial \tau^2} \right)^n \Delta \tau \quad (53)$$

$$n_{sh}^{n+1} = n_{sh}^n + \left(\frac{\partial n_{sh}}{\partial \tau} \right)^n \Delta \tau \quad (54)$$

修正为

$$\left(\frac{\partial n_{sh}}{\partial \tau} \right)^{n+1} = \frac{1}{2} \left[\left(\frac{\partial n_{sh}}{\partial \tau} \right)^{n+1} + \left(\frac{\partial n_{sh}}{\partial \tau} \right)^n + \left(\frac{\partial^2 n_{sh}}{\partial \tau^2} \right)^{n+1} \Delta \tau \right] \quad (55)$$

$$n_{sh}^{n+1} = \frac{1}{2} \left[n_{sh}^{n+1} + n_{sh}^n + \left(\frac{\partial n_{sh}}{\partial \tau} \right)^{n+1} \Delta \tau \right] \quad (56)$$

物面边界条件为

$$\eta = 0, \quad u = v = w = 0, \quad T = T_w, \quad C_i = C_{iw} \quad (57)$$

在计算过程中, 同样利用特征线理论建立物面点与流场内点的特征相容关系. 在求解流场时, 先给定物面参数的初值, 然后求解出整个流场, 再利用相容关系式, 对物面参数予以修正. 每计算一次流场, 物面参数修正一次, 直到整个流场参数收敛为止.

七、数值方法、结果与分析

对来流攻角 10° , 飞行马赫数 26, 飞行高度 85km, 有效锥角 41.7° , 头部曲

率半径 1.322m，物形为双曲面钝头体的再入飞行流场和物面气动加热率，采用无自由参数的混合反扩散格式进行了数值计算。计算坐标系为贴体坐标系，流场网格点总数为：法向 × 流向 × 周向 = 51 × 31 × 17。求解时，首先给出整个流场各参数的初值，物面温度固定为 1360K，物面压力及化学组元浓度利用相同来流条件下，空间步长推进法的计算结果，根据冻结气流激波条件求出激波后的参数值。流场内的参数以线性分布给出。

计算中激波采用装配法，把流体动力学方程与化学组元方程分裂求解。给定流场初值后，固定组元浓度，先将连续方程，三个方向动量方程及能量方程耦合起来，计算出流场的密度、温度、以及三速度分量；然后固定流场参数，求解化学组元连续方程得出组元浓度，如此循环迭代计算，直到计算出整个流场参数的稳定值。

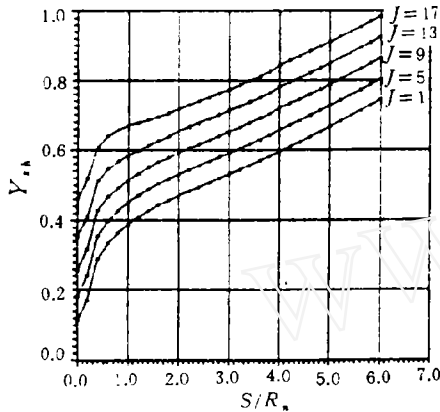


图 1 激波层厚度沿物面变化
Fig.1 Shock-Layer thickness distributions along a body surface

图 1 是钝锥体激波层厚度沿物面变化；图 2 为钝锥体物面热流率分布；图 3 是化学组元浓度沿法向分布；图 4 是钝锥体物面压力分布；图中 $J = 1$ 表示迎风面， $J = 17$ 表示背风面， $J = 1, 5, 9, 13, 17$ 分别表示周向角 $\theta = 0^\circ, 45^\circ, 90^\circ, 135^\circ, 180^\circ$ 。在计算条件相同的情况下，为了与文献 [1] 空间步长推进法的计算结果进行比较，在此给出如下结果：图 5 表示推进法的三维钝头体激波脱体距离；图 6 为推进法的钝头体迎风表面压力分布；图 7 是推进法的三维钝头体迎风面、背风面热流率分布。对

流场激波厚度比较图 1 与图 5，对压力分布比较图 4 与图 6，对热流分布比较图 2 与图 7，可以看出，激波层厚度和物面压力分布不仅变化趋势一致，在数值上也很接近；对热流分布来说，变化趋势是相同的。但数值上时间稳定法的结果低于推进法的结果。

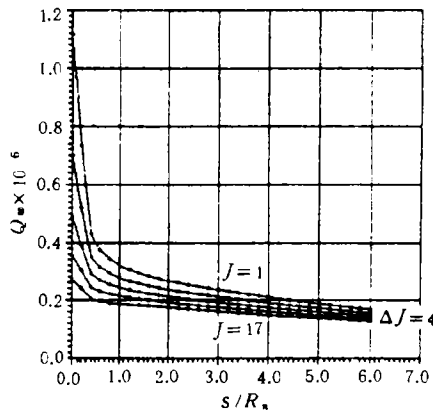


图 2 物面热流率分布
Fig.2 Surface heat transfer rate distributions

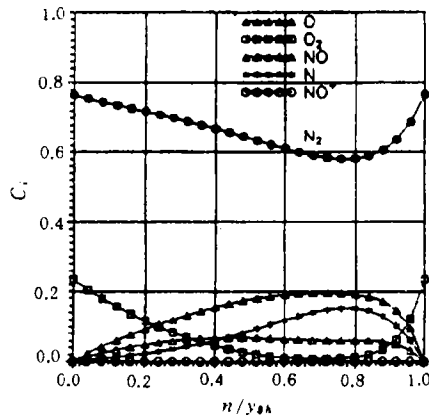


图 3 化学组元浓度场
Fig.3 Mass concentration profiles of chemical species

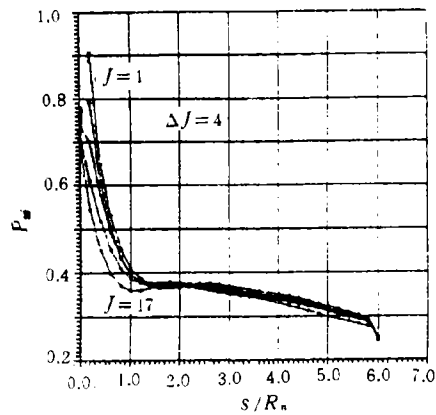


图 4 物面压力分布
Fig.4 Surface pressure distributions

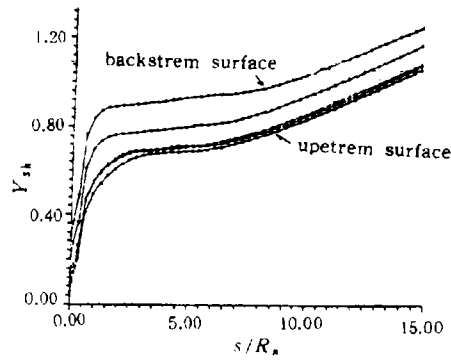


图 5 激波层厚度 (推进法)
Fig.5 Shock-Layer thickness distributions
(procedure steps downstream)

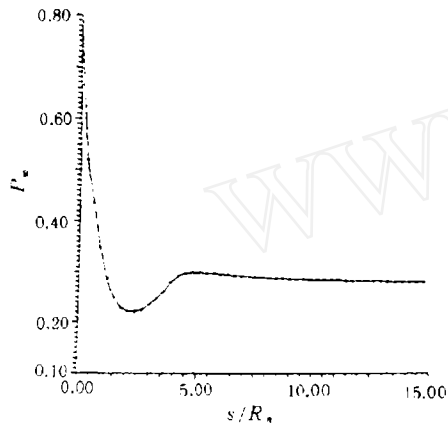


图 6 迎风面压力分布 (推进法)
Fig.6 Windward plane surface-pressure distribution
(procedure steps downstream)

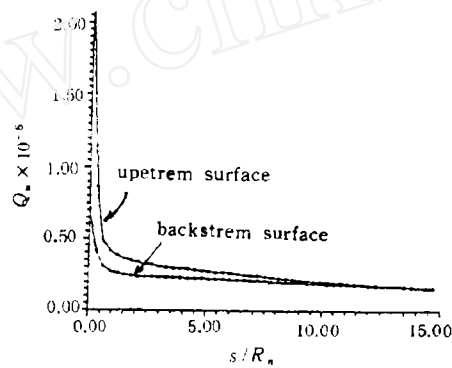


图 7 物面热流率分布 (推进法)
Fig.7 Surface heat transfer rate distribution
(procedure steps downstream)

八、结 论

1. 本文采用无自由参数的混合反扩散格式对三维化学非平衡流动的简化 NS 方程进行了时间稳定法数值计算, 能比较快的得到收敛解, 表明该方法用来计算化学非平衡问题是可行的.

2. 在计算条件相同情况下, 将本文的时间稳定法与文献 [1] 的空间步长推进法的计算结果加以比较, 对流场激波层厚度和物面压力分布有一致的结果. 两种数值方法对热流率分布的结果有较明显的差别, 时间稳定法结果低于推进法结果.

3. 在计算中采用将流体动力学问题与化学反应问题分裂处理的方法, 使数值解收敛较快, 节省机时, 在三维化学非平衡问题的计算中得到成功, 对工程实际应用有很好的价值.

4. 本文应用时间稳定法研究数值求解高超声速三维化学非平衡流动简化 NS 方程, 是本文作者 [1] 空间步长推进法数值求解工作的继续, 两种方法可以相互检验, 互为补充.

参 考 文 献

- 1 欧阳水吾, 苏玉宏. 高超音速有攻角钝头体三维化学非平衡黏性激波层流动数值计算. 宇航学报, 1992, (3):1-12
- 2 张涵信. 反扩散隐式方法的新发展. 工程力学与工程热物理学术会议论文集, 清华大学出版社, 1988: 162
- 3 Candler GV and MacCormack RW. The Computation of Hypersonic Ionized Flows in Chemical and Thermal Nonequilibrium. AIAA 88-0511
- 4 Bhutta Bilal A and Lewis Clark H. Three-Dimensional Hypersonic Nonequilibrium Flows at Large Angles of Attack. AIAA 88-2568
- 5 Josyula Eswar, Gaitonde Datta and Shang Joseph. Nonequilibrium Hypersonic Flow Solutions Using the Roe Flux-Difference Soplit Scheme. AIAA 91-1700
- 6 Buelow P, Tannehill J, Levalts J and Lawrence S. A Three-Dimensional Upwind Parabolized Navier-Stokes Code for Chemically Reacting Flows. AIAA 90-0394
- 7 Walters RW, Cinnella P, Slack DC and Halt D. Characteristic-Based Algorithms for Flows in Thermo-Chemical Nonequilibrium. AIAA 90-0393
- 8 Miner EW and Lewis CH. Hypersonic Ionizing Air Viscous Shock-Layer Flows over Nonanalytic Blunt Bodies. NASA CR-2550

NUMERICAL SOLUTION OF SIMPLIFIED NAVIER-STOKES EQUATIONS FOR HYPERSONIC THREE-DIMENSIONAL VISCOUS FLOWS WITH CHEMICAL NONEQUILIBRIUM

Ouyang Shuiwu Su Yuhong Xie Zhongqiang
(Beijing Institute of Aerodynamics, Beijing 100074, China)

Abstract In this paper the time-dependent method has been applied to the computation of simplified Navier-Stokes equations for hypersonic three-dimensional viscous flows with chemical nonequilibrium. The overall problem is decoupled into (a) a fluid mechanic problem and (b) a chemistry problem. The coupling between the fluid mechanics and the chemistry is treated in an iterative manner. For very high Mach number the air in the shock layer that envelops the body is at high temperature. The air may become appreciably dissociated and ionized. The degree of chemical reaction and ionization can have a significant affect on the nature of the flowfield. For the chemistry problem a seven species gas model has been applied to represent the finite rate chemically reacting air mixture. Zhang's mixing-anti-diffusing difference scheme without free parameter flux is used. The shock and surface boundary conditions are treated using flow characteristic theory. Computation is performed for the flowfield around a blunt cone reentry configuration at Mach 26, a flight altitude of 85km and 10 degree angle of attack. Numerical results are obtained for the flowfield parameters and surface heat transfer rates.

Key words dissociation, ionization, time-dependent method, chemical nonequilibrium, mixing-anti-diffusing differences scheme, Navier-Stokes equations.