

高超声速风洞热化学非平衡流场辐射谱的数值计算*

曾明，黄华，柳军，瞿章华

(国防科技大学航天与材料工程学院，湖南长沙 410073)

摘要：以轴对称的热化学非平衡 N-S 方程为控制方程，采用双温度 11 组元反应气体模型，数值求解高超声速热化学非平衡流场。在此基础上，采用“线—线”精细辐射模型计算流场的辐射谱特性，在 0.15~2 μm 区间计算了 40000 个光谱分布点处的辐射发射、吸收系数，得到了高焓风洞实验条件下的流场辐射光谱分布及该条件下主要辐射组元 NO 的辐射光谱分布。计算表明，振动温度对辐射有重要影响。

关键词：高焓风洞；热化学非平衡模型；辐射；数值计算

中图分类号：V211.22 **文献标识码：**A

Numerical Computation of Radiation Spectrum in Hypersonic Tunnel Thermochemical Nonequilibrium Flowfield

ZENG Ming, HUANG Hua, LIU Jun, QU Zhang-hua

(College of Aerospace and Material Engineering, National Univ. of Defense Technology, Changsha 410073, China)

Abstract: Taking symmetric full Navier-Stokes equations as governing equations, using two temperature and 11 species reacting air model, the hypersonic thermochemical nonequilibrium flow is simulated numerically. Then by using the "line-by-line" radiation model to compute radiation characteristics for the flowfield, the emission and absorption coefficients for 40000 wavelength points in 0.15~2 μm are calculated. The radiation spectrum of air mixture and the main radiation specie NO in high enthalpy wind tunnel experiments is obtained. The calculation results indicate that vibration temperature exerts important effects on radiation.

Key words: high enthalpy tunnel; thermochemical nonequilibrium model; radiation; numerical computation

高超声速飞行器重返大气层的高空飞行阶段中气体处于非平衡态，产生很强的辐射，再入体在高空阶段的光谱信号特征成为目标识别的重要标志。因此，有必要对再入体高空非平衡辐射流场进行相应的研究。辐射模型由平衡辐射至非平衡辐射，对气体的辐射特性由连续辐射近似至精确的原子线、分子带及连续谱模拟^[1]。研究表明，在高空条件下采用热力平衡的模型计算再入体辐射可能导致物理失真。

1 控制方程

轴对称热化学非平衡流的 N-S 方程^[2]为

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial F}{\partial x} + \frac{\partial G}{\partial y} + H = \frac{1}{Re} \left(\frac{\partial F_v}{\partial x} + \frac{\partial G_v}{\partial y} + H_v \right) + W \quad (1)$$

式中 $U = (\rho C_1, \rho C_2, \dots, \rho C_{ns}, \rho u, \rho v, E, E_v)^T$, $W = (\dot{w}_1, \dot{w}_2, \dots, \dot{w}_{ns}, 0, 0, 0, S_v)^T$, 其中 \dot{w}_i 是化学反应源项, E_v 为总振动能, S_v 为振动能生成率。

热化学模型采用热力与化学都是非平衡的双温度 11 组元模型^[2]。化学组分为： N_2 、 O_2 、 N 、 O 、 NO 、 NO^+ 、 N_2^+ 、 O_2^+ 、 N^+ 、 O^+ 、 e^- 。在双温度近似下，不同的反应采用不同的控制温度。如离解反应由平动温度 T 和振动温度 T_v 共同作用，反应特征温度为 $T_d = \sqrt{TT_v}$ 。振动松弛时间采用 Park 修正的 Millikan 和 White 振动松弛模型^[1]。

* 收稿日期：2001-11-28

基金项目：湖南省自然科学基金(00JJY1001)和中科院力学所 LHD 开放课题项目(2001-16)

作者简介：曾明(1971-),女,硕士,副教授。

2 流场辐射谱计算

本文采用“线-线”精细辐射模型,通过对气体中分子、原子组元的辐射跃迁进行详细的逐条计算,得到有关光谱范围内辐射发射和吸收系数的计算结果,从而得到辐射场的详细分布。

2.1 不同能级上的粒子分布

热化学非平衡流场计算可以求出各组元的浓度,但辐射特性计算尚需确定各组元粒子浓度按能级的分布。在热力非平衡条件下,在任一电子态能级上,其粒子数密度 N_i 的改变率由生成率、消除率和扩散率共同决定:

$$\frac{DN_i}{Dt} = \text{生产率} - \text{消除率} + \text{扩散率} \quad (2)$$

本文作准定态假设^[1],即假设生成率与消除率大致相等,由此确定不同能级的粒子占有数。

2.2 发射系数

对于原子辐射,需要考虑束缚-束缚、束缚-自由和自由-自由辐射,文献[4]指出任何复杂原子系统的高激发态皆与氢原子的激发态极为类似,因此可将氢原子的有关研究结果推广到多电荷的类氢离子中。

对于分子辐射,分子光谱一般包含有若干谱带系,不同的谱带系相对于不同的电子态能级跃迁;一个谱带系含有若干谱带,不同的谱带相对于不同振动能级的跃迁;同一谱带中又包含有不同的谱线,每一条谱线相对于转动能级的跃迁。因此,为了得到谱带的精细结构,必须对转动线逐条进行详细计算。对于单独一条转动线来说,由自发发射而产生的光谱总强度 E 为^[5]

$$E = \left\{ \frac{16\pi^3 c N_u \bar{\nu}^4}{3(2J'+1)} \right\} \left\{ \frac{\sum | \text{Re}(\bar{R}_{v'v''}) |^2}{d_u} q_{v'v''} \right\} \{ S_{J'A'}^J \} 10^{-7} \text{ (W/cm}^3 \cdot \text{sr)} \quad (3)$$

式中 c 为光速, N_u 为处于电子振转高态的粒子数, d_u 为电子兼并度, $q_{v'v''}$ 为 Franck-Condon 系数, $\sum | \text{Re}(\bar{R}_{v'v''}) |^2$ 为电子跃迁矩平方和, $S_{J'A'}^J$ 为线谱强度系数。由于多普勒增宽、碰撞增宽等增宽机制,每一跃迁对应于一条随频率散布的谱线。实际计算时,本文采用 Voigt 剖面^[1]来表示每一谱线的强度随频率的分布。

2.3 吸收系数

在研究辐射输运时同时用到发射系数和吸收系数。热力平衡时,吸收系数与发射系数由基尔霍夫法则^[1]相联系。本文讨论热力非平衡条件,发射系数 ϵ_ν 和吸收系数 k_ν (包含受激发射)之间的联系公式为^[3]

$$\frac{\epsilon_\nu}{k_\nu} = \frac{2h\nu^3}{c^2} \left(\frac{N_m g_n}{N_n g_m} - 1 \right)^{-1} \quad (4)$$

式中 N_m, N_n, g_m, g_n 为 m, n 能级上的粒子数密度和兼并度。该式直接采用有关跃迁的高态与低态的粒子分布之比计算辐射吸收系数。

3 算例

采用 NND 格式^[6]求解轴对称热化学非平衡 N-S 方程组,采用时间预处理技术解决化学源项与振动源项给计算带来的刚性问题。得到高超声速非平衡流场特性后,选取在高温气体辐射中起较大作用的 $N_2, O_2, N, O, N_2^+, NO, N^+, O^+, e^-$ 等作为辐射组元^[3],对 40000 个光谱分布点处的辐射发射系数和吸收系数进行计算,得到辐射流场的谱特性。

3.1 验证性计算

先对在 Avco Everett 实验室进行的激波管实验^[7]条件作辐射特性计算,将体发射系数光谱分布计算结果与实验结果进行了比较。图 1 为计算结果与实验结果的对比。由该图可知,计算结果与实验结果相比仍有一定差距,在 $0.3 \sim 0.5 \mu\text{m}$ 范围计算结果偏高, $0.6 \mu\text{m}$ 以上计算结果偏低。但计算结果

与实验结果量级、趋势和峰值点均接近，因此认为计算模型基本反应了辐射场的真实情况。

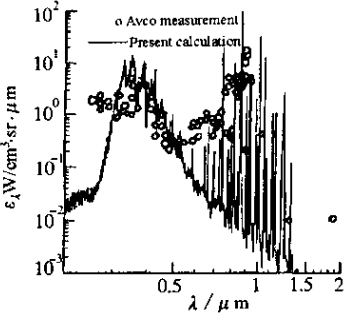


图1 Avco 实验及本文计算结果

Fig.1 Avco experiment and present computation results

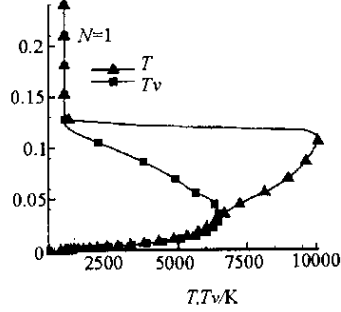


图2 驻点线温度剖面

Fig.2 Temperature profile on stagnation line

3.2 高焓风洞条件下的流场辐射光谱计算

计算条件为高焓风洞条件：来流速度 $V_\infty = 4430\text{m/s}$ ， $\rho_\infty = 1.1 \times 10^{-3}\text{kg/m}^3$ ， $T_\infty = 872\text{K}$ ， $\text{Re}_\infty = 6379.9$ ， $T_w = 300\text{K}$ 。算例外形为一球锥，半锥角 9° ，头部半径 0.05m 。计算网格节点数为 31×121 ，壁面采用全催化条件。光谱计算范围为 $0.15 \sim 2\mu\text{m}$ ，取 40000 个光谱分布点，计算辐射特性的谱分布。

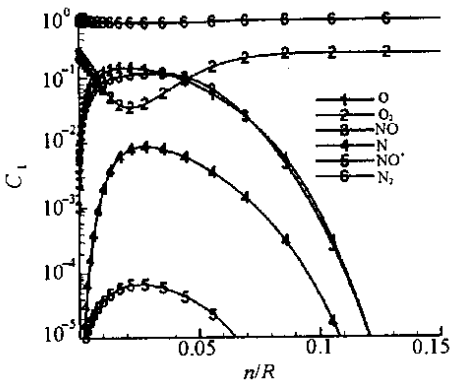


图3 驻点线主要组元分布剖面

Fig.3 Main species profile on stagnation line

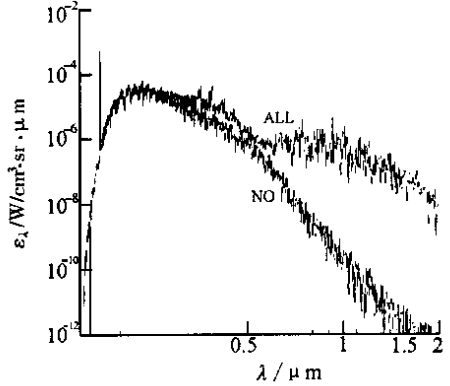


图4 A 点全体组元与 NO 组元的体发射系数谱分布

Fig.4 Emission coefficients of air and NO at A

作为辐射特性计算的基础，图 2 为驻点线平动温度 T 和振动温度 T_v 剖面，图 3 给出了驻点线主要组元质量分数剖面。取驻点线上两点计算辐射特性，A 点 $T = 8792\text{K}$ ， $T_v = 5074\text{K}$ ， $\rho/\rho_\infty = 6.814$ ；B 点 $T = 6487\text{K}$ ， $T_v = 6483\text{K}$ ， $\rho/\rho_\infty = 8.782$ ，组元质量分数见表 1。

表1 计算点组元质量分数

Tab.1 Species mass fraction

计算点	O ₂	N ₂	O	NO	N
A	.1855678E+0	.7480696E+0	.3102432E-1	.3348553E-1	.1837157E-2
B	.4629095E-1	.7031596E+0	.1258489E+0	.1162400E+0	.8396126E-2
计算点	NO ⁺	N ₂ ⁺	O ₂ ⁺	N ⁺	O ⁺
A	.9378709E-5	.4093273E-7	.6112877E-5	.5301738E-9	.5801389E-7
B	.6342081E-4	.9643342E-7	.9002823E-6	.2217206E-8	.8146367E-7

图 4 为 A 点在 $0.15 \sim 2\mu\text{m}$ 范围内全体辐射组元的体发射系数与 NO 组元的体发射系数的谱分布。可见在本文算例条件下，NO 为主要的辐射组元，尤其在 $0.15 \sim 0.35\mu\text{m}$ 范围，NO 组元的发射占绝大部分。

图 5 为 A 点 NO 组元在 $0.21 \sim 0.25\mu\text{m}$ 区间体发射系数的谱分布，在此区间发射系数有峰值。这些峰值对应的波长分别为 2140\AA ， 2240\AA ， 2350\AA ， 2440\AA ，这与 NO β 、NO γ 的典型发射谱线很接近。

图6为A、B两点全体组元发射系数谱分布计算结果的比较。B点接近于热力平衡， $T = 6487\text{K}$ ， $T_v = 6483\text{K}$ ，虽然平动温度 T 低于A点（ 8792K ），但振动温度 T_v 高于A点（ 5074K ）。B点的发射系数比A点约高两个量级，由此可见振动温度对辐射的重要影响。

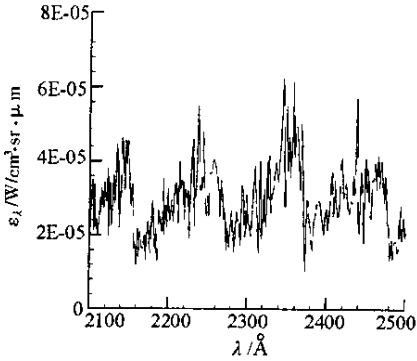


图5 A点NO组元的体发射系数($\lambda = 0.21 \sim 0.25\mu\text{m}$)

Fig.5 Emission coefficients of NO($\lambda = 0.21 \sim 0.25\mu\text{m}$) at A

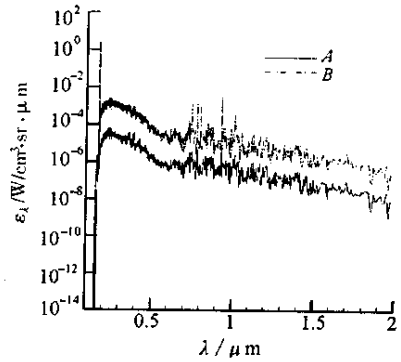


图6 A点、B点全体组元体发射系数谱分布

Fig.6 Emission coefficients of air at A and B

5 结论

(1) 采用精细的“线-线”辐射模型，可以得到辐射光谱分布的详细结果，用于流场的辐射特性研究。

(2) 高焓风洞实验条件下，NO为主要的辐射组元。在 $0.21 \sim 0.25\mu\text{m}$ 区间其发射系数出现峰值。

(3) 在高超声速条件下，辐射峰值不在平动温度峰值附近，而是在振动温度峰值附近。由此看出，作为振动激发决定因素的振动温度对辐射有着重要影响。需采用双温度的热化学非平衡模型求解非平衡流场，进而进行辐射特性计算。

参考文献：

- [1] Park C. Nonequilibrium Hypersonic Aerothermodynamics [M]. John Wiley & Sons Inc, 1990.
- [2] 曾明. 载人飞船等离子体鞘电子密度分布的数值计算 [J]. 国防科技大学学报, 2001, 23 (1).
- [3] 黄华. 耦合辐射的非平衡流场数值研究 [D]. 国防科技大学博士学位论文, 2000.
- [4] 泽尔道维奇, 莱依捷尔著, 张树材译. 激波和高温流体动力学现象物理学 [M]. 北京: 科学出版社, 1980.
- [5] Arnold J, Cooper D, Park C. Line-by-Line Transport Calculations for Jupiter Entry Probes [R]. AIAA 79-1082, 1979.
- [6] 张涵信. 无波动、无自由参数耗散差分格式 [J]. 空气动力学学报, 1989, 6 (2).
- [7] Richard A Allen, Rose P H, Camm J C. Nonequilibrium and Equilibrium Radiation at Super-Satellite Re-entry Velocities [R]. Research Report 156. BSD-TDR-62-349, Avco-Everett Research Laboratory, September 1962.

