

高能解离流动物性计算

肖应超, 刘 宇, 张国舟, 张振鹏

(北京航空航天大学 宇航学院, 北京 100083)

摘 要: 为准确进行电弧喷射推力器非平衡流动分析, 对高能解离流动化学动力学过程、热力学性质、输运性质和电磁特性进行了数值计算. 采用有限速率化学动力学模型计算解离组分, 采用基于配分函数法和维里系数法的曲线拟合计算热力学性质, 采用经典 Chapman-Enskog 方法获得多组分混合气体输运性质, 采用由电子运动方程和统计力学碰撞理论推导出的公式计算电导率和电子漂移率. 通过计算示例了温度在 $3.0 \times 10^3 \sim 2.0 \times 10^4$ K 和压强为 0.1 Pa~1 MPa 范围的 N_2 解离物性.

关键词: 电弧喷射推力器; 高能流动; 化学动力学; 热物性; 数值计算

中图分类号: V 439

文献标识码: A

文章编号: 0254-0037(2007)04-0355-07

近年来, 等离子体推进技术已经成为国际空间推进技术研究的热点, 高能解离流动过程是其比较重要的工作过程, 而高能解离物性对流动过程具有重大的影响. 例如: 电弧喷射推力器流动覆盖的温度和压强范围十分宽广, 由于电弧能量输入集中而推力器尺寸微小, 推力器内部参数梯度很大, 电弧中心区接近于化学平衡状态而膨胀区接近于化学冻结状态, 主流区接近于局域热力学平衡状态而电极鞘层区严重偏离热力学平衡状态. 多流动区域多流态的存在造成推力器内部高能解离流动热物性变化非常复杂、剧烈, 而流动热力学性质决定着流动能量分配, 输运性质决定着物质、动量和能量的传输, 电磁特性决定着电弧特性和电能输入过程, 要准确进行推力器内部流动分析首先必须完善流动物性计算. 国外比较完善的研究对高能解离流动物性尤其是输运性质一般都采用阶数比较低的近似计算^[1-4], 国内相关研究采用的方法与其类似或更加粗略. 为了更加准确地计算, 本文对高能解离流动化学动力学过程、热力学性质、输运性质和电磁特性进行了计算研究, 通过计算示例分析了高温部分离子化 N_2 在 $3.0 \times 10^3 \sim 2.0 \times 10^4$ K 温度范围和 0.1 Pa~1 MPa 压强范围的热力学性质、输运性质和电磁特性, 计算方法能扩展到更加广泛的应用范围.

1 化学动力学过程的模拟

在进行非平衡流动分析时, 流体力学控制方程中包含组分生成率, 因此合理选择有效组分以及准确把握化学动力学过程对准确进行流动分析具有重要意义. 在 $3.0 \times 10^3 \sim 2.0 \times 10^4$ K 和 0.1 Pa~1 MPa 范围内, 部分离子化 N_2 应该考虑的有效组分包括 N_2 、N、 N^+ 、 N_2^+ 和 e^- , 这里采用的化学反应模型为 5 组分 5 反应的有限速率化学动力学模型, 反应方程式如下(反应速率常数参见文献[5-8]):



收稿日期: 2006-04-03.

基金项目: 博士生创新性研究基金.

作者简介: 肖应超(1979-), 男, 湖北孝感人, 博士生.

非平衡组分与流动非平衡程度有关,这里只计算平衡组分来示例流动分析中非平衡组分的计算.平衡状态下反应系统内各组分生成率为0,因此平衡组分有2种计算方法:第1种是针对每种组列出平衡方程,非线性平衡方程组可采用牛顿迭代法求解;第2种方法是给出反应系统初始组分,使其在定温、定压下经历有限速率化学动力学过程达到平衡状态,可以采用经典龙格-库塔法计算出平衡浓度.

图1为N₂解离平衡组分摩尔分数随温度、压强的分布.在计算温度、压强范围内,x(N₂⁺)相当小(最高只有10⁻⁴量级),主要有效组分还是N₂、N、N⁺和e⁻.给定压强(80 kPa)下,随温度升高,分解、电离反应加强,x(N₂)减小.温度较低时分解反应占主导地位,x(N)随温度升高而增大,当温度升高到一定程度后,N₂几乎完全分解,x(N)随温度升高而减小,x(N⁺)随温度升高一直增大.温度较低时,N-N复合电离是主要电离反应,x(N₂⁺)随温度升高而增大,温度升高到一定程度后,N-e⁻碰撞电离成为主要电离反应,随着温度的升高,x(N)的减小和e⁻摩尔分数的增大,x(N₂⁺)减小.给定温度(1.0×10⁴ K)下,随着压强的升高,复合反应加强.x(N₂)增大,x(N⁺)减小,而x(N)和x(N₂⁺)的变化则与N-N复合、N⁺-e⁻复合的相对强弱有关(见图2).

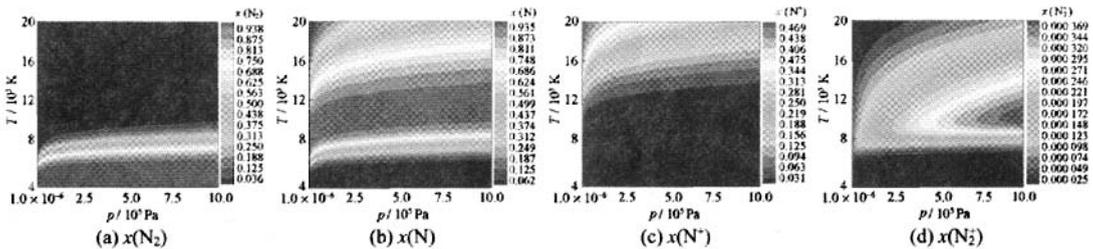


图1 N₂解离组分摩尔分数随温度压强的分布

Fig.1 Molar fractions of nitrogen ingredients under dissociation and ionization

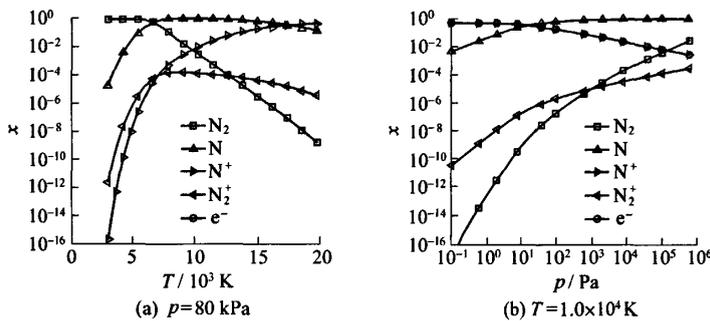


图2 N₂解离组分摩尔分数曲线

Fig.2 Molar fraction curves of nitrogen ingredients

2 高能解离流动热力学性质的计算

流动分析考虑的主要热力学性质包括定压比热容和焓,组分热力学性质要根据组分各自的热力学温度采用配分函数法或维里系数法计算,本文在温度低于和高于6.0×10³ K时,分别采用基于配分函数法和维里系数法的曲线拟合进行计算,混合气体热力学性质由组分热力学性质通过相应的混合定律计算^[8].随着温度的升高和压强的减小,解离N₂的比焓和冻结定压比热容均增大(见图3).在一定压强下,随着温度的升高,各组分比焓增大且大比焓组份份额增大,总比焓增大,主要有效组分比热容增大,冻结定压比热容也增大(见图4).

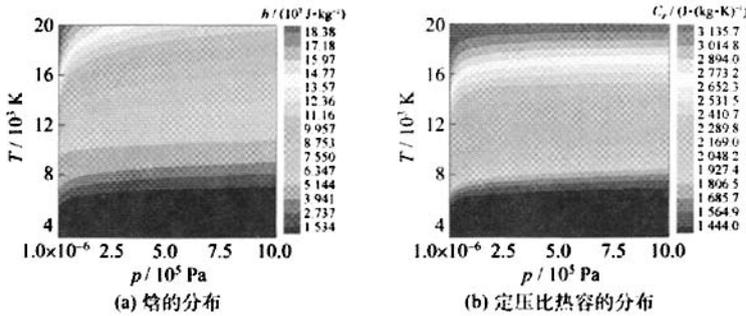


图 3 解离 N₂ 热力学性质随温度压强的分布

Fig. 3 Thermodynamic properties of nitrogen under dissociation and ionization

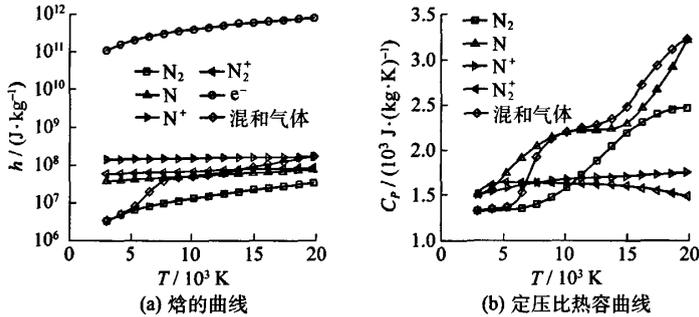


图 4 80 kPa 压强下 N₂ 解离组分热力学性质曲线

Fig. 4 Thermodynamic property curves of nitrogen ingredients at 80 kPa

3 高能解离热力学平衡流动输运性质的计算

3.1 单一组分输运性质的计算

流动分析需要的输运性质包括黏性系数、导热系数和扩散系数，输运性质的计算依赖于粒子间碰撞积分的计算，粒子间平均碰撞积分是温度和组分的函数，采用碰撞积分计算输运性质的表达式可以由严格 Chapman-Cowling 近似得到。单一组分黏性系数 μ_i 和冻结导热系数 $\lambda_{f,i}$ 可采用近似公式计算为

$$\mu_i = \frac{5 \sqrt{\pi m_i k T}}{16 \pi \Omega_{ii}^{(2,2)}} \quad \lambda_{f,i} = \lambda_{tr,i} + \lambda_{int,i} = \frac{k}{m_i} \left[\frac{15}{4} + \frac{6}{5} \frac{\bar{\Omega}_{ii}^{(2,2)}}{\Omega_{ii}^{(1,1)}} \left(\frac{C_{p,i}}{R_{univ}} - \frac{5}{2} \right) \right] \mu_i \quad (1)$$

式中， $\lambda_{tr,i}$ 是平动导热系数； $\lambda_{int,i}$ 是热力学能量激发态导热系数； m_i 是粒子质量； k 是玻耳兹曼常数； T 是组分热力学平衡温度。粒子对类型不同，粒子间碰撞积分计算方法不同。

压强一定(80 kPa)时，随着温度的升高，各组分的黏性系数和导热系数均增大，温度对带电组分黏性系数和导热系数的影响相对较大，带电组分黏性系数相对小得多，而电子由于质量很小，黏性系数非常小(见图 5)。温度一定(1.0×10^4 K)时，由于压强会影响电子浓度，随着压强的增大，带电组分黏性系数和导热系数增大，而中性组分黏性系数和导热系数不变(见图 6)。

3.2 部分离子化气体混合物输运性质的计算

采用经典 Chapman-Enskog 方法可直接由 Boltzmann 方程得到多组分混合气体输运性质的严格动力学理论公式，通常的计算采用 1 阶近似。在用于计算混合气体黏性系数和平动导热系数的大部分 Chapman-Enskog 近似公式中，碰撞引起的一种组分到另一种组分的动量和能量传递都被忽略了或根据经验取为常数，实际上，考虑以上过程也能得到比较简单的计算公式为

$$(\mu/\lambda_{tr})_{mixture} = \frac{\sum_{i=1}^{NS} x_i/(A_i + a_{av})}{\sum_{i=1}^{NS} x_i - a_{av} \sum_{i=1}^{NS} x_i/(A_i + a_{av})}$$

$$a_{av} = \frac{\sum_{i=1}^{NS} \sum_{j=1}^{NS} x_i x_j \left(\frac{1}{A_i} - \frac{1}{A_j}\right)^2 a_{ij}}{\sum_{i=1}^{NS} \sum_{j=1}^{NS} x_i x_j \left(\frac{1}{A_i} - \frac{1}{A_j}\right)^2} \quad A_i = \sum_{j=1}^{NS} x_j A_{ij} \quad (2)$$

在式(2)中计算黏性系数时

$$a_{ij} = \frac{2\Delta_{ij}^{(i)} - \Delta_{ij}^{(2)}}{m_i + m_j} \quad A_{ij} = \frac{\Delta_{ij}^{(2)}}{m_i}$$

计算平动导热系数时

$$a_{ij} = \frac{2 m_i m_j [(16.5 - 3.6 B_{ij}^*) \Delta_{ij}^{(1)} - 4 \Delta_{ij}^{(2)}]}{15 k (m_i + m_j)^2}$$

$$A_{ij} = \frac{2 [8 m_i m_j \Delta_{ij}^{(2)} + (m_i - m_j)(9 m_i - 7.5 m_j + 3.6 B_{ij}^* m_j) \Delta_{ij}^{(1)}]}{15 k (m_i + m_j)^2}$$

其中

$$\Delta_{ij}^{(1)} = \frac{8}{3} \left[\frac{2 m_i m_j}{\pi k T (m_i + m_j)} \right]^{1/2} \overline{\Omega}_{ij}^{(1,1)} \quad \Delta_{ij}^{(2)} = \frac{16}{5} \left[\frac{2 m_i m_j}{\pi k T (m_i + m_j)} \right]^{1/2} \overline{\Omega}_{ij}^{(2,2)}$$

$$B_{ij}^* = \frac{5 \overline{\Omega}_{ij}^{(1,2)} - 4 \overline{\Omega}_{ij}^{(1,3)}}{\overline{\Omega}_{ij}^{(1,1)}}$$

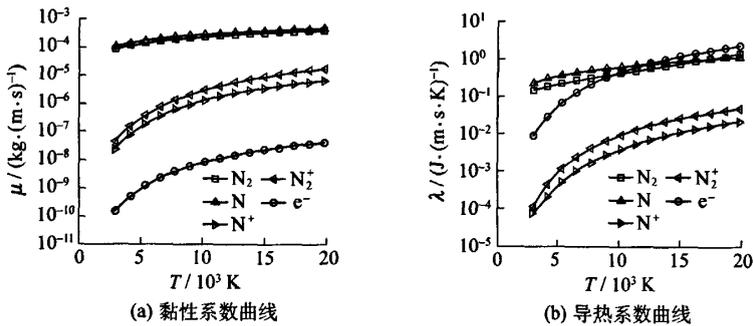


图5 80 kPa 压强下 N₂ 解离组分输运性质曲线

Fig.5 Transport property curves of nitrogen ingredients at 80 kPa

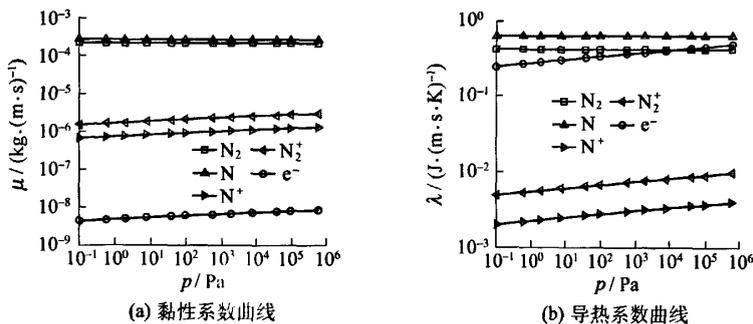


图6 1.0 × 10⁴ K 温度下 N₂ 解离组分输运性质曲线

Fig.6 Transport property curves of nitrogen ingredients at 1.0 × 10⁴ K

其他热力学能量模式对导热系数贡献的计算公式见文献[8]。采用 Chapman-Enskog 近似也可以得到二元扩散系数 D_{ij} 的表达式,进一步可以得到 i 组分总扩散系数为

$$D_{ij} = \frac{3[\pi kT(m_i + m_j)]^{1/2}}{8\pi\bar{\Omega}_{ij}^{(1,1)}(2m_i m_j)^{1/2} \sum_{i=1}^{NS} n_i} = \frac{1}{\Delta_{ij}^{(1)} \sum_{i=1}^{NS} n_i} \quad D_i = \frac{\sum_{j=1, j \neq i}^{NS} x_j}{\sum_{j=1, j \neq i}^{NS} \left(\frac{x_j}{D_{ij}}\right)} \quad (3)$$

图 7 为解离 N_2 运输性质随温度压强的分布,总体来说,随温度的升高,黏性系数先增大后减小,而冻结导热系数增大。在高温下,随着压强的增大,黏性系数和冻结导热系数均增大;在低温下,随着压强的增大,黏性系数和冻结导热系数均减小;在某个中间温度范围内,黏性系数随着压强的增大先增大后减小、冻结导热系数情况类似。如在 80 kPa 下,随着温度的升高,黏性系数先增大后减小、冻结导热系数增大;在 1.0×10^4 K 下,随着压强的增大,黏性系数增大、冻结导热系数先增大后减小(见图 8)。

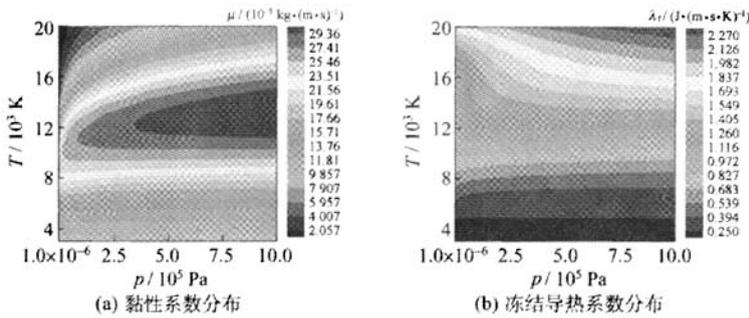


图 7 解离 N_2 运输性质随温度压强的分布

Fig. 7 Transport properties of nitrogen under dissociation and ionization

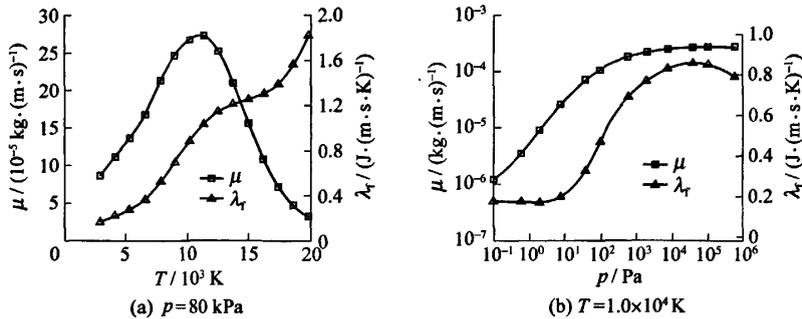


图 8 解离 N_2 运输性质曲线

Fig. 8 Transport property curves of nitrogen under dissociation and ionization

3.3 部分离子化气体混合物电磁特性的计算

在电磁流体动力学中需要考虑双极性电场作用,对带电粒子采用修正后的双极性扩散系数。由电子运动方程和统计力学碰撞理论可推导出部分离子化气体的电导率和电子漂移率。在本文温度、压强范围内进行计算,由图 9(a)可看出,不考虑双极性电场时,电子的自由扩散系数比化学式量大的重带电粒子的要大得多,在低温下表现尤为明显;考虑双极性电场时,由于要趋于电中性,电子的双极性扩散系数与重带电粒子的趋于一致。温度较低时, N_2^+ 是主要离子组分,电子的双极性扩散系数与 N_2^+ 组分的基本相同;高温时, N^+ 是主要离子组分,电子的双极性扩散系数则与 N^+ 组分的基本相同。考虑双极性电场后,电子扩散系数大幅度减小,同样这在低温下表现尤为明显,而重带电粒子组分扩散系数明显增大。由图 9(b)可以看出,总体来说,随压强的增大各组分扩散系数均减小;压强非常小时,各组分扩散系数都很大,电子扩散

系数与主要离子组分 N^+ 的比较接近, 双极性电场对带电粒子组分扩散系数的影响已经不太明显了. 采用双极性扩散系数对于带有电离反应的非平衡流动组分分布数值模拟预计的准确性具有重要意义. 在 80 kPa 压强下, 随温度的升高, 解离 N_2 电导率增大, 这主要是由于随着温度的升高, 电子浓度很快增大、而电子漂移率先增大后减小, 因为与粒子浓度及有效碰撞截面相比, 电子平均热速度在低温时变化相对较小, 而在高温时变化相对较大; 在 1.0×10^4 K 温度下, 随着压强的增大, 电导率先增大后减小、电子漂移率减小, 这主要是由于随着压强的增大, 电子重粒子碰撞频率和电子浓度均增大, 但电子浓度在压强较小时变化相对较大而在压强较大时变化相对较小(见图 10).

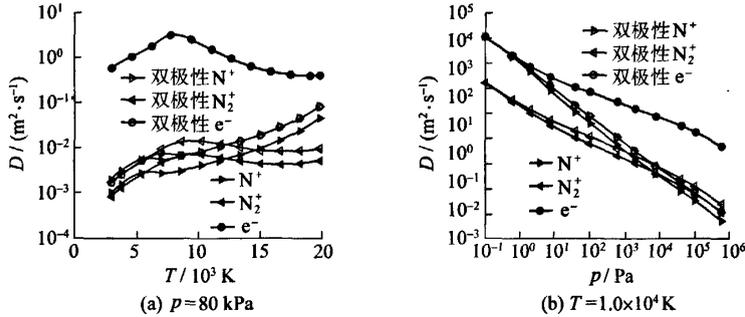


图 9 N_2 解离组分扩散系数曲线

Fig. 9 Diffusion coefficient curves of nitrogen ingredients

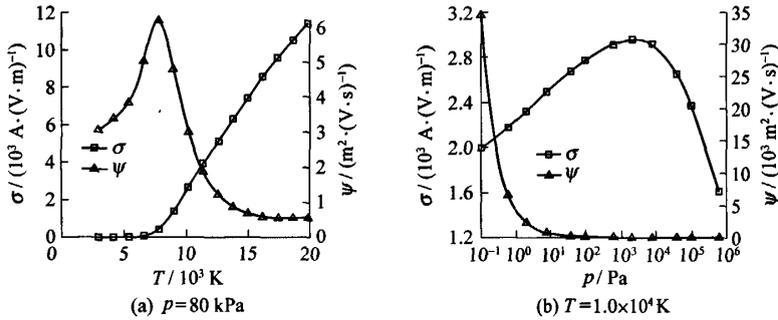


图 10 解离 N_2 电磁特性曲线

Fig. 10 Electromagnetic characteristic curves of nitrogen under dissociation and ionization

4 高能解离热力学非平衡流动输运性质的计算

热力学非平衡混合气体黏性系数和平动导热系数的计算需要区分粒子间碰撞控制温度, 其中重粒子间碰撞积分可以采用重粒子平动温度进行估计, 电子碰撞积分则可采用电子温度估计. 总平动导热系数可分为重粒子平动导热系数和自由电子平动导热系数 2 部分^[8]. 总热流矢量的第 k 分量可表达为

$$q^k = -(\lambda_{tr}^* + \lambda_{rot}) \frac{\partial T}{\partial x^k} - \lambda_{vib} \frac{\partial T_v}{\partial x^k} - \lambda_{el} \frac{\partial T_{el}}{\partial x^k} - \lambda_e \frac{\partial T_e}{\partial x^k} + \sum_{i=1}^{NS} \rho_i h_i V_i^k \quad (4)$$

式中, λ_{tr}^* 为重粒子平动导热系数; λ_{rot} 为转动导热系数; λ_{vib} 为振动导热系数; λ_{el} 为电子激发态导热系数; λ_e 为自由电子导热系数; T , T_v , T_{el} 和 T_e 分别为平动-转动温度、振动温度、电子激发态温度和电子温度, x^k 是广义直角坐标的第 k 分量, 最后 1 项是热流矢量扩散部分, 与流动非平衡性有关, 可以在具体流动分析中计算. 重粒子平动导热系数、自由电子平动导热系数以及不同的热力学能量激发态(转动能量部分和完全激发态、振动能量部分和完全激发态、电子激发态)导热系数要根据具体非平衡特征由不同的表达式^[8]进行计算. 对于考虑电子非平衡和振动非平衡的热力学非平衡流动, 电子能量方程和振动能量方程

分别涉及到电子热流和振动热流的计算^[8].

5 结束语

本文对高能解离流动化学动力学过程、热力学性质、输运性质和电磁特性进行了研究,通过计算示例分析了高温部分离子化 N_2 在 $3.0 \times 10^3 \sim 2.0 \times 10^4$ K 温度和 $0.1 \text{ Pa} \sim 1 \text{ MPa}$ 压强范围内的解离组分、热力学性质、输运性质和电磁特性,计算方法能扩展到更加广泛的温度、压强范围. 本文计算不仅考虑了各种热力学能量模式的贡献,而且考虑了不同粒子间相互作用引起的动量和能量的传递以及较为准确的混合定律的运用,对于准确进行电弧喷射推力器非平衡流和高超声速飞行器绕流等高能流动分析具有重要意义.

参考文献:

- [1] MEGLI T W, KRIER H, BURTON R L. Plasmodynamics model for nonequilibrium processes in N_2/H_2 arcjets[J]. Journal of Thermophysics and Heat Transfer, 1996, 10(4): 554-562.
- [2] MEGLI T W, KRIER H, BURTON R L. Two-temperature plasma modeling of nitrogen/hydrogen arcjets[J]. Journal of Propulsion and Power, 1996, 12(6): 1062-1069.
- [3] SANTOVINCENZO A, DEININGER W D, LORENZO G D. Numerical simulation of a low power arcjet thruster[C]// IEPC-97-011. Cleveland, Ohio: Electric Rocket Propulsion Society, 1997.
- [4] ROBERTSON D, MARTINEZ-SANCHEZ M. Two dimensional numerical simulations of a cesium seeded hydrogen arcjet [R]// AIAA-98-4036. Cambridge, MA: MIT, 1998.
- [5] CARLSON L A, GALLY T A. Effect of electron temperature and impact ionization on martian return AOTV flowfields[J]. Journal of Thermophysics and Heat Transfer, 1991, 5(1): 9-19.
- [6] CARLSON L A, GALLY T A. Nonequilibrium chemical and radiation coupling, Part I: theory and models[J]. Journal of Thermophysics and Heat Transfer, 1992, 6(3): 385-391.
- [7] GALLY T A, CARLSON L A, GREEN D. Flowfields coupled excitation and radiation model for nonequilibrium reacting flows[J]. Journal of Thermophysics and Heat Transfer, 1993, 7(2): 285-293.
- [8] GUPTA R N, YOS J M, THOMPSON R A. A review of reaction rates and thermodynamic and transport properties for the 11-species air model for chemical and thermal nonequilibrium calculations to 30 000 K[R]// NASA-TM-101528. Washington DC: NASA, 1989.

Calculations of Thermophysical Properties of High Energy Flow With Dissociation and Ionization

XIAO Ying-chao, LIU Yu, ZHANG Guo-zhou, ZHANG Zhen-peng

(Astronautics School, Beijing University of Aeronautics and Astronautics, Beijing 100083, China)

Abstract: To achieve exact analysis of non-equilibrium flow within arcjet, numerical calculations of chemical kinetics, thermodynamic properties, transport properties, and electromagnetic characteristics of high energy flow with dissociation and ionization were carried out. A finite rate chemical kinetic model was adopted to compute the components under dissociation and ionization. The curve fits based on partition function approach and virial coefficient method were used to calculate the thermodynamic properties, and the mixing laws from the classical Chapman-Enskog procedure were introduced to obtain the transport properties of multicomponent gas mixtures. The electrical conductivity and electronic mobility were estimated by formulas derived from the motion equation of electrons and the statistical mechanics. The thermophysical properties of nitrogen under dissociation and ionization are presented by the calculations in the range of 3.0×10^3 to 2.0×10^4 K and 0.1 Pa to 1 MPa .

Key words: arcjet thruster; high energy flow; chemical kinetics; thermophysical properties; numerical calculation