

专题: 低温等离子体非平衡输运与主动调控

空气热化学模型对高焓非平衡流动及辐射特性影响*

闫聪¹⁾²⁾ 杜耀文^{1)†} 魏婧雯¹⁾ 孙素蓉¹⁾
黄河激²⁾ 耿金越²⁾ 王海兴^{1)‡}

1) (北京航空航天大学宇航学院, 北京 102206)

2) (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)

(2026年1月4日收到; 2026年3月18日收到修改稿)

随着高速飞行器飞行速度的提升及空域范围的拓展, 其面临的气动加热环境愈发复杂, 绕流流场呈现出显著的热化学非平衡特性, 而现有数值模拟所依赖的基础热化学与输运模型在高焓非平衡条件下的物理准确性和适用性仍存在较大不确定性. 本文针对飞行器再入及高速巡航过程中激波层内的气动热化学非平衡问题, 系统开展了多组分输运性质计算方法的对比研究, 并分析了不同化学反应模型对激波后区域热化学动力学演化及辐射特性的影响. 选取高空高马赫数与低空低马赫数两种典型飞行工况, 对碰撞辐射模型 (collisional-radiative model, CR)、Park 模型和 Gupta 模型在激波后区域的预测结果进行对比分析. 结果表明, 在高焓、强非平衡条件下, 不同模型对主要中性组分 (N_2 , O_2 , NO , N , O) 及电离组分 (N_2^+ , O_2^+ , NO^+ , N^+ , O^+ 和自由电子) 的数密度演化路径存在显著差异. 其中, CR 模型预测的分子离解与原子电离过程相对滞后, 而 Park 模型与 Gupta 模型给出的离解和电离速率明显更快, 这种差异主要源于各模型在振动能级处理及非平衡能级分布假设上的不同. 在此基础上, 耦合逐线法辐射输运模型, 计算了真空紫外至红外波段的辐射系数, 综合考虑原子与分子体系中束缚-束缚、束缚-自由及自由-自由等辐射跃迁机制. 研究结果表明, 在高空高马赫数条件下, 不同化学反应模型预测的激波后辐射输运通量差异显著, 化学反应模型的选取对激波层内化学组成及辐射特性的准确预测具有重要影响.

关键词: 高速飞行器, 非平衡效应, 化学反应模型, 辐射输运

DOI: 10.7498/aps.75.20260009

CSTR: 32037.14.aps.75.20260009

1 引言

航天器再入大气层及高速飞行器临近空间高速巡航过程中, 面临极端严酷的气动热环境. 在强激波作用下, 气体受到剧烈压缩并伴随显著黏性耗散, 其内能分配和化学组分演化表现出明显的热力

学与化学非平衡特征. 这些非平衡效应不仅改变激波层内流动结构、压力分布及壁面热流分布, 还直接影响热防护系统设计、气动外形优化以及再入和高速飞行阶段通信黑障的预测. 因此, 系统研究气动加热中的热化学非平衡现象, 对于提升新一代高速飞行器的安全性、机动性和任务可靠性具有重要意义^[1].

* 国家自然科学基金 (批准号: 12547156, 12535016, 12375245) 和飞行器流体物理国家重点实验室开放课题 (批准号: 2025-APF-KFQMJJ-06) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: dyw@buaa.edu.cn

‡ 通信作者. E-mail: whx@buaa.edu.cn

在高速绕流流场中, 流动、热弛豫、化学反应及粒子内部能量激发等等各物理化学过程特征时间尺度的相对大小, 决定了热化学非平衡效应的强弱. 在高空稀薄大气条件下, 分子碰撞频率降低, 热弛豫和化学反应过程显著延缓, 粒子难以实现热力学或化学平衡, 激波层内由此形成显著的非平衡特征. 随着飞行高度增大, 不同能量模态之间的平衡关系逐级被破坏, 粒子内部能量分布逐渐偏离 Boltzmann 平衡态^[2-4]. 非平衡不仅显著改变气体输运性质、化学反应动力学及辐射特性, 还通过影响激波结构、边界层发展及激波-边界层相互作用, 对流场特性和气动力热产生重要影响. 对于输运性质, 黏性、热导率和扩散系数不再仅由单一温度和压力决定, 而强烈依赖于组分分布及多模态温度^[5-7]. 对于化学模型, 需要采用具备多尺度非平衡表征能力的热化学动力学模型, 包括多温度能量方程以及更完整的组分反应体系; 对于辐射特性, 则必须构建能够描述宽谱段、多机制辐射输运的非平衡辐射模型. 因此, 只有发展考虑热化学非平衡效应的输运性质、化学动力学和辐射特性计算方法, 才能实现对非平衡流场及其气动力热性能的合理预测.

高速飞行器气动热预估的可靠性在很大程度上取决于高温空气输运性质的准确性. 其计算方法经历了从半经验公式到严格动理学理论再到量子化学修正的发展过程. 早期的 Sutherland 公式或幂函数律等半经验模型适用于中低温条件, 但在温度超过约 2000 K 后, 因未考虑组分分解及分子内能激发影响, 适用性受到限制. 随后, 以 Wilke 混合定则和 Blottner 模型为代表的方法逐渐成为工程计算流体动力学 (computational fluid dynamics, CFD) 中的常用选择, 并通常结合 Eucken 修正补偿分子内能对热传导的贡献. 随着高温气体动力学理论的发展, 基于 Chapman-Enskog 理论的严格动理学方法逐步成熟, 其中 Gupta 等^[8]于 1989 年提出的模型至今仍被广泛用于非平衡流场输运性质的评估与对比. 但受限于早期基础数据不足, 该模型在高温、强解离和电离条件下对真实相互作用的描述精度不足, 导致输运系数准确性下降; 同时, 对强电离条件下电子导热和多组分扩散的预测能力也有限. 相比之下, 近年来 Murphy^[9,10]和 Capitelli 等^[11,12]基于 Chapman-Enskog 高阶近似发展了从微观碰撞出发的高温空气体系输运性质计算方法. 其输运系数由多组分 Boltzmann 方程系统严格推导获得, 避免了大量经验拟合, 对电离、电子输运

及非平衡状态的处理更加物理一致, 在高焓条件下能更真实地反映输运性质对化学组成和温度分离的依赖关系, 显著提高了计算精度. 近年来研究逐步转向覆盖宽温区、考虑多物理过程耦合的精细化建模方法. 在高焓条件下, 研究者引入分子动力学模拟及基于量子化学势能面的碰撞积分标定方法, 以降低传统模型的不确定性; 同时发展了能够区分平动、转动、振动及电子能级的多温度输运模型, 以更准确刻画非平衡条件下的能量输运行为^[13]. 此外, 结合机器学习方法对高保真输运模型进行降阶处理, 以实现计算精度与效率的兼顾, 也是当前研究的重要方向之一.

高速飞行器气动热计算中所采用的化学非平衡动力学模型的发展, 可追溯至 20 世纪 70—90 年代, 代表性模型包括 Dunn-Kang 模型^[14]、Gupta-Yos 模型^[8]以及 Park 系列模型^[15,16]等. Dunn-Kang 模型是较早建立的系统化有限速率化学动力学模型之一, 主要适用于中等焓值条件下的非平衡化学反应计算, 因计算效率高、实现简单而曾被广泛应用, 但其单温度假设及相对陈旧的反应速率参数限制了其在高焓条件下的预测精度. 为克服单温度框架的不足, Park 发展了双温度热化学非平衡模型, 将平动-转动温度与振动-电子温度分离, 通过引入有效控制温度描述振动-解离耦合效应, 并对电子碰撞电离及相关辐射过程进行了改进. 该模型显著提升了高焓非平衡流场的模拟能力, 但仍存在分子解离速率偏高、双温度假设适用性有限等问题. Gupta-Yos 模型则侧重于高温空气热力学与输运性质建模, 通过多项式拟合给出高温范围内的物性参数, 并采用 Wilke/Yos 混合律处理多组分气体混合问题, 尤其适用于高度离子化流动条件. 该模型在输运性质计算方面具有较强鲁棒性, 但对多温度非平衡效应的描述相对简化, 通常需与其他化学动力学模型耦合使用. 总体而言, 这些经典模型为高焓气动热数值模拟奠定了基础, 但仍存在预测精度不足和适用范围受限的问题.

在高速飞行器气动热分析中, 辐射特性的准确预测对工程设计与安全评估具有重要意义. 在高马赫数再入或超轨道返回任务中, 激波层高温气体辐射热流往往成为主导热负荷组成部分, 尤其在再入早期阶段, 辐射热流可占总热流的 30% 以上, 甚至在月球/火星返回等极端条件下达到数 MW/m² 量级, 远超过对流热流^[17]. 激波层内强烈热化学非平衡导致平动、转动、振动和电子激发等能量模态温

度显著分离, 化学组分分布和电子能级分布严重偏离局部热力学平衡假设, 使辐射发射与吸收过程高度依赖于粒子内态分布和多温度特征. 现有气动热辐射计算方法的不足在于对强热化学非平衡的描述仍较为简单: 多数工程模型依赖局域热力学平衡或多温假设, 难以反映由少数高能粒子和特定碰撞路径主导的激发、解离与电离过程; 辐射与化学反应通常被弱耦合甚至解耦处理, 辐射对能级布居、反应速率及流场结构的反馈作用被忽略, 使得在极高焓、强非平衡区域中对辐射强度、光谱分布及辐射热流的预测仍存在较大不确定性.

针对高焓高速飞行条件下气动热化学非平衡效应建模中的关键问题, 近年来作者围绕高速飞行器气动热环境预测所涉及的空气体系输运性质、化学反应动力学模型及辐射特性开展了较为系统的研究. 由于高速飞行器表面气动热流通常由对流传热、壁面化学反应热及辐射传热 3 部分组成, 而其准确预测分别依赖于输运性质、化学反应动力学模型及辐射特性的合理表征, 因此有必要围绕上述 3 个方面开展系统研究. 本文首先评估了不同输运计算方法对基础参数表征的差异. 针对高焓流动中热化学非平衡过程的准确描述, 对碰撞-辐射模型、Park 模型及 Gupta 模型在激波后区域热化学非平衡过程预测中的差异进行了对比研究. 在此基础上, 为进一步分析非平衡流动中辐射特征, 构建了基于高光谱分辨率的辐射输运计算模型, 综合评估了不同化学反应模型在不同飞行工况下对激波层内化学组成演化及辐射特性预测的影响, 明确了模型选择在热化学非平衡流动模拟中的关键作用, 并为高速飞行器气动热环境预测及热防护系统设计提供了参考.

2 空气体系输运性质计算

本节对 Gupta-Yos 模型与基于本课题组开发的高阶 Chapman-Enskog 程序计算的空气输运性质进行系统对比, 考察两种方法在典型高焓条件下的预测差异, 评估其对气动热计算结果的影响, 为后续非平衡流场模拟中的模型选取提供依据.

2.1 Gupta-Yos 输运性质计算方法

Gupta-Yos 模型假设空气由多种成分组成 (N_2 , O_2 , NO , N , O , N^+ , O^+ , e^- 等), 采用简化方法估算碰撞积分: 1) 对于中性粒子, 使用经验公式或

查表法确定碰撞积分; 2) 对于电子-中性/离子相互作用, 通常采用固定动量转移截面; 3) 对于离子-中性相互作用, 使用硬球模型计算碰撞积分, 忽略了长程效应.

进一步基于 Chapman-Enskog 理论计算各组分的输运系数, 以黏性系数为例:

$$\mu = \frac{5}{16} \frac{\sqrt{\pi m k_B T}}{\sigma^2 \Omega^{(1,1)}}, \quad (1)$$

其中, m 为分子质量, k_B 为玻尔兹曼常数, T 为温度, σ 为碰撞直径, $\Omega^{(1,1)}$ 为碰撞积分.

对于多组分气体混合物, 使用 Wilke 半经验方法计算混合物的有效输运系数:

$$\mu = \frac{1}{\sum \frac{x_i}{\mu_i}}. \quad (2)$$

值得注意的是, Wilke 混合定律的使用仅限于研究中性气体在中等速度或者温度低于 10000 K 的情况下, 对于超出这个范围电离气体, 由于电子、离子之间的强相互作用, 无法通过简单的混合法则来计算混合输运性质.

2.2 Chapman-Enskog 高阶近似计算方法

Chapman-Enskog 高阶近似方法^[18]建立在 Boltzmann 积分-微分方程的严格求解基础上, 通过假设粒子分布函数相对于局部 Maxwellian 分布仅存在小扰动, 并采用 Sonine 多项式展开该扰动函数进行级数展开, 从而将输运系数表示为括号积分的线性组合. 与传统一阶近似仅保留 Sonine 多项式的前两项不同, 高阶近似方法保留了更多项, 通过求解相应阶数的线性方程组获得更精确的收敛解. 这种高阶展开能够更全面地捕捉分子、原子、离子与电子之间的复杂碰撞相互作用, 从而显著提高高温空气体系输运性质的计算精度, 避免了传统经验拟合-混合规则方法在高度电离或非平衡条件下的系统性偏差^[19-21]. 其具体计算流程如下.

相对于重粒子而言, 电子的质量小, 对黏性的贡献很微弱, 因此本文在计算空气体系的黏性系数时只考虑重粒子的影响, 采用一阶 Sonine 多项式展开计算:

$$\mu = - \frac{5\sqrt{2\pi k_B T_h}}{2|Q_{ij}^{00}|} \begin{vmatrix} Q_{ij}^{00} & n_j \sqrt{m_j} \\ n_j & 0 \end{vmatrix}, \quad (3)$$

其中 T_h 为重粒子平动温度; Q_{ij}^{00} 为 $i \times j$ 阶矩阵; i, j 从 1 到 l ; l 为重粒子个数; n_j 为粒子数密度; m_j 为

粒子质量.

气体的热导率包括平动转动热导率和振动电子热导率, 分别用 λ_{tr} 和 λ_{ve} 来表示. 对于空气体系, 平动转动热导率由重粒子平动热导率决定, 振动电子热导率除考虑电子热导率外, 还需加入分子内部热导率的影响, 可归纳为 (4) 式—(6) 式.

重粒子平动热导率采用二阶展开:

$$\lambda_{tr,h} = -\frac{75k_B}{8} \frac{\sqrt{2\pi k_B T_h}}{|q|} \begin{pmatrix} q_{ij}^{00} & q_{ij}^{01} & 0 \\ q_{ij}^{10} & q_{ij}^{11} & n_i \\ 0 & n_j/\sqrt{m_j} & 0 \end{pmatrix}, \quad (4)$$

其中 q_{ij} 为与碰撞积分有关的矩阵系数.

电子平动热导率采用 Sonine 多项式三阶展开形式:

$$\lambda_{tr,e} = \frac{75n_e^2 k_B}{8} \left(\frac{2\pi k_B T}{m_e} \right)^{1/2} \left[q^{11} - \frac{(q^{12})^2}{q^{22}} \right]^{-1}, \quad (5)$$

式中 q^{mp} 与电子相关碰撞积分有关, m_e 为电子质量, n_e 为电子数密度.

分子内部热导率如下所示:

$$\lambda_{int} = \sum_{i=1}^m \frac{\rho D_{ii}}{RT_{ve}} \left(C_{p,i} - \frac{5}{2}R \right) \cdot \left(\sum_{j=1}^m \frac{x_j D_{ii}}{x_i D_{ij}} \right)^{-1}, \quad (6)$$

式中 ρ 为气体密度; D_{ii} 和 D_{ij} 分别是组分 i 的自扩散系数以及组分 i, j 之间的二元扩散系数; R 为通用气体常数; T_{ve} 为振动电子温度; $C_{p,i}$ 为组分 i 的定压比热; p 为气体压强; x_i 为组分 i 的摩尔分数.

2.3 不同计算方法获得的空气体系输运性质比较

图 1 给出了 1 atm ($1 \text{ atm} = 1.01325 \times 10^5 \text{ Pa}$) 条件下, 300—30000 K 温度范围内不同计算方法得到的空气体系黏性系数和热导率, 其中曲线 LAMP 表示本研究组采用 Chapman-Enskog 高阶近似计算模型获得的空气性质. 比较图 1(a) 所示的黏性系数可以看出, 不同模型计算的空气黏性系数均呈现先上升后下降的趋势, 峰值出现在约 5000—15000 K 温度区间, 反映了空气在高温下发生解离和电离导致的组分变化和碰撞效应增强. 低温区 (300—5000 K), 所有模型结果高度一致, 黏性系数随温度线性增大, 差异小于 5%, 其中 Sutherland-Eucken-Wilke 和 PowerLaw-Eucken-Wilke 略高于

其他模型, 表明这些经验公式在未解离空气中表现良好. 中温区 (5000—15000 K), 模型开始显著分化: PowerLaw-Eucken-Wilke 和 CEA-Wilke 预测值较高, Blottner-Eucken-Wilke, Gupta-Yos 和 LAMP 较低. 这反映了 Blottner, Gupta, LAMP 模型更好地捕捉了分子解离对碰撞积分的影响, 导致黏性系数峰值提前且幅度减小, 而 PowerLaw 的简单幂律近似在解离区过高估计黏性数值, LAMP 的高阶展开则更精确考虑了多组分交互, 进一步抑制峰值. 高温区 ($>15000 \text{ K}$), 所有曲线急剧下降, 主要因电离增强电子贡献的长程作用力占据主导, 但 Sutherland 模型下降最慢, Gupta-Yos 和 LAMP 最接近真实物理过程, 与其他模型计算结果的差异可达 20%—30%.

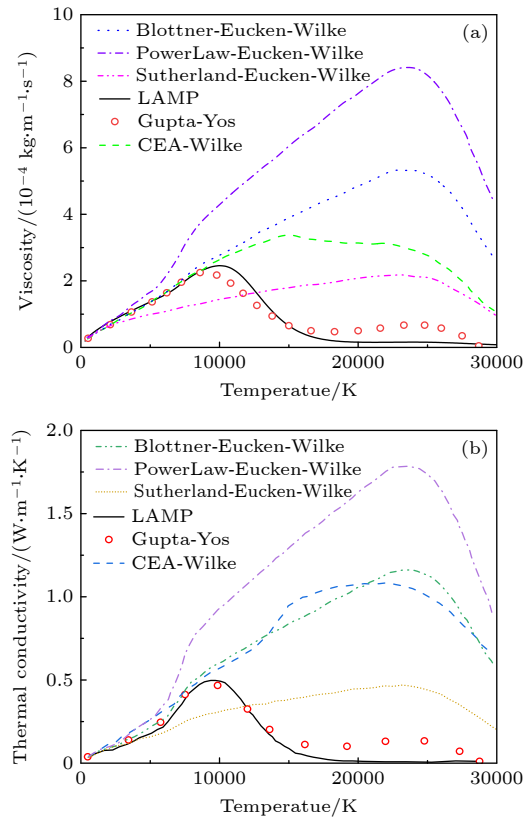


图 1 不同模型计算获得的黏性系数 (a) 和冻结热导率 (b) 随温度的变化

Fig. 1. Variation of (a) viscosity coefficients and (b) frozen thermal conductivity with temperature under different pressures.

图 1(b) 给出了在 1 atm 条件下、300—30000 K 温度范围内, 不同输运模型预测的空气体系热导率随温度的变化. 其中, Sutherland-Eucken-Wilke, Blottner-Eucken-Wilke, PowerLaw-Eucken-Wilke

以及 Gupta-Yos 方法均基于经验或半经验形式的单组分输运系数模型, 并通过相应的混合规则获得多组分气体的等效热导率; CEA-Wilke 模型则在 Chapman-Enskog 一阶近似框架下, 结合化学平衡组成, 计算单组分输运性质并通过 Wilke 混合规则得到混合气体热导率; LAMP 曲线表示基于高阶 Chapman-Enskog 展开的输运计算结果, 其单组分及多组分输运性质通过微观碰撞积分求解获得, 并假定分子振动能级满足 Boltzmann 分布. 从图 1(b) 可以看出, 在低温区 (300—5000 K), 空气以分子组分为主, 能量输运主要由平动和转动自由度贡献, 各模型预测结果整体一致, LAMP 与经典工程模型具有良好一致性. 进入中温区 (5000—10000 K) 后, 随着分子振动激活及初始解离过程的发生, 空气体系化学组成和有效输运截面快速变化, 模型间差异明显放大. LAMP 模型在该区间预测的热导率显著升高并出现峰值, 主要反映了分子向原子转化过程中比热特性及微观碰撞输运性质的变化, 而非振动非平衡输运的直接贡献. 相比之下, 基于经验关联和混合规则的模型难以准确描述该过渡区内输运性质的快速变化. 对于高温区 ($T > 10000$ K), 空气体系处于强解离并伴随明显电离状态, 电子输运对热导率起主导作用. Gupta-Yos 和 CEA-Wilke 模型由于对电离与电子贡献采用经验或平衡处理, 在高温区预测的热导率偏低; 而 LAMP 模型能够更一致地描述电子-重粒子碰撞对热导率的增强作用.

由上述计算结果可以看出, 在低温近平衡条件下 (300—5000 K), 各类工程输运模型 (如 Sutherland-Eucken-Wilke, PowerLaw-Eucken-Wilke, Blottner-Eucken-Wilke, CEA-Wilke 以及 Gupta-Yos) 在空气体系黏性系数和热导率的预测上表现出较好一致性, 差异通常小于 5%—10%. 这是因为该区空气主要为未解离分子, 经验关联和简化混合规则 (如 Wilke 公式) 能有效捕捉基本碰撞效应. 然而, 在中高温解离与电离显著条件下 (5000—30000 K), 基于经验关联和混合规则的传统模型 (如 Sutherland 和 PowerLaw) 存在明显不确定性, 其预测的峰值幅度过大, 因忽略复杂碰撞机制而导致高焓区误差达 20%—50%; Blottner 和 CEA 模型通过曲线拟合或一阶 Chapman-Enskog 近似略有改善中等温度区间精度, 但仍受经验参数限制, 在电离区偏差明显; Gupta-Yos 模型作为优化

半经验框架, 通过针对高温空气的碰撞积分拟合, 更准确捕捉离子-电子相互作用, 峰值预测较低且更接近物理现实. 相比之下, 基于高阶 Chapman-Enskog 动理论求解的 LAMP 模型在整个温度范围内表现出较好的物理一致性. 该模型通过采用更高阶展开并结合合理的相互作用势函数, 对微观碰撞积分进行直接计算, 能够更加敏感地刻画空气体系输运性质对化学组成演化 (如分子解离及电离组分变化) 以及微观碰撞机制变化的响应. 因此, LAMP 模型在高温、高焓条件下具有更高的计算可靠性, 可作为气动热数值模拟中的输运物性数据来源.

在高速飞行器气动热环境模拟中, 不同大气压力水平 (0.1 atm, 1 atm, 10 atm) 可用于代表飞行器在不同高度、速度或轨迹阶段所经历的典型外部环境条件. 其中, 0.1 atm (约 10 kPa) 通常对应于高空或再入后期阶段, 此时气体密度较低, 飞行器速度已明显下降 (通常低于约 10 Ma), 化学反应程度受限, 流场趋于弱解离或近冻结状态; 1 atm 条件可代表中低空再入或地面试验条件, 在较高温度下分子解离显著、电离程度仍相对有限, 化学非平衡效应对输运性质具有重要影响, 该工况常被用于类比再入峰值加热阶段附近的典型热化学环境; 而 10 atm 条件则对应于再入过程中局部高动压或高压压缩区域, 在该条件下高温解离与电离过程显著增强, 粒子间碰撞频率显著提高. 图 2 给出了基于 Chapman-Enskog 高阶展开方法, 在上述不同压力条件下空气体系黏性系数与热导率随温度变化的计算结果. 可以看出, 压力对输运性质的影响主要通过改变化学组成 (解离、电离程度) 及微观碰撞特性间接体现.

对于黏性系数 (图 2(a)), 在低温区不同压力下的黏性系数基本重合, 表明在分子主导、近平衡状态下, 黏性主要由分子热运动和分子-分子碰撞决定, 对压力不敏感. 进入中温区 (约 5000—10000 K) 后, 随着分子解离过程的发生, 黏性系数出现明显峰值, 且峰值位置随压力升高向高温方向移动. 这是由于高压条件下解离被推迟, 需要更高温度才能实现相同程度的分子解离. 在高温区 ($T > 10000$ K), 黏性系数随温度升高反而下降并逐渐趋于平缓, 反映出原子气体和带电粒子占主导后, 碰撞截面与有效平均自由程的变化对黏性起控制作用, 此时高压条件下的黏性系数整体高于低压结果.

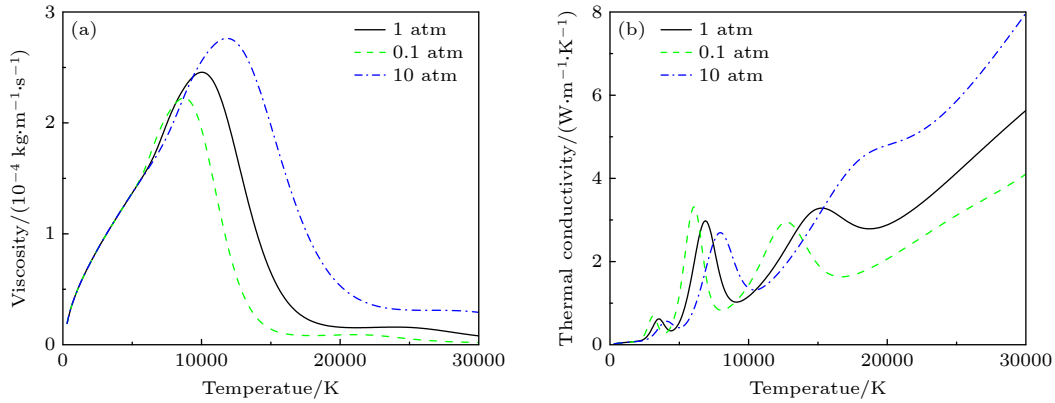


图 2 不同压力下黏性系数 (a) 和热导率 (b) 随温度的变化

Fig. 2. Variation of (a) viscosity coefficients and (b) thermal conductivity with temperature under different pressures.

对于热导率 (图 2(b)), 低温区内不同压力下热导率同样差异较小, 能量输运主要由分子平动和转动贡献. 随着温度升高至中温区, 热导率出现明显的非单调变化和多峰结构, 其位置和幅值对压力高度敏感. 这一特征源于分子解离和初始电离过程中, 比热和输运通道数目快速变化, 不同压力下化学组成演化路径不同, 导致热导率变化存在显著差异. 在高温区, 随着电离程度加深, 电子输运逐渐占据主导地位, 热导率随温度快速升高, 且高压条件下由于电子-重粒子碰撞增强, 预测的热导率显著高于低压情况.

图 2 表明, 在基于 Chapman-Enskog 高阶展开的输运模型中, 压力通过改变气体化学组成的演化及微观碰撞机制, 对中高温区黏性系数和热导率的变化特征产生显著影响. 上述结果表明, 在高速气动热环境计算中, 采用 Chapman-Enskog 高阶展开模型对于准确捕捉压力与温度的耦合效应具有重要意义, 而简化模型可能低估这一耦合作用.

3 空气体系化学动力学模型及组分计算

为系统评估不同化学动力学模型对高焓流动的组分预测结果的影响, 本文选取广泛应用的经典 Park 模型、Gupta 总包空气有限速率化学反应模型以及本团队近年来发展的碰撞辐射模型, 开展一维激波后流动参数的对比计算. 通过在相同流动条件下, 对温度演化、组分数密度以及关键热力学与输运参数的弛豫过程进行求解与比较, 分析不同模型在反应路径、速率控制机理及非平衡效应上的差异及其对激波后流场结构的影响, 从而为后续高速气动热与辐射耦合计算中化学模型的选取和改

进提供依据.

3.1 常用的总包空气体系有限速率热化学非平衡模型

有限速率化学反应模型通常将高温空气体系中的化学组分视为整体处理, 而不显式区分其内部粒子能级结构, 并假定粒子的振动、电子激发及转动等内部能级处于 Boltzmann 分布状态. 不同组分之间化学反应过程的快慢通过全局速率系数加以表征. 在此框架下, Dunn-Kang, Park 以及 Gupta 等相继发展了一系列经典的总包化学反应模型. 尽管这些模型在形式上具有相似的基本假设, 但在反应机理描述、反应路径设置及反应速率参数取值等方面仍存在显著差异.

3.1.1 Park 化学反应模型

Park 化学反应模型采用双温度框架, 引入振动-解离耦合, 通过有效控制温度调整解离速率, 处理振动、电子激发与化学反应的耦合, 包含 11 种物种、20—30 个反应, 并发展了多个版本不断优化速率常数.

Park 模型正反应速率系数由 Arrhenius 公式计算:

$$k_f = AT_{c,f}^\beta \exp\left(-\frac{E_a}{k_B T_{c,f}}\right), \quad (7)$$

其中, A 为指前因子, β 为温度指数, E_a 为反应活化能, $T_{c,f}$ 为化学反应的控制温度. 逆反应速率系数由化学反应平衡常数计算得出:

$$k_b = \frac{k_f}{K_{eq}}, \quad (8)$$

其中,

$$k_{\text{eq}} = \exp\left(\frac{A_0}{Z} + A_1 + A_2 \ln Z + A_3 Z + A_4 Z^2\right), \quad (9a)$$

$$Z = 10000/T. \quad (9b)$$

拟合系数 A_0 — A_4 由文献 [16] 给出. Park 模型中部分反应参数如表 1 所列.

表 1 Park 模型的部分化学反应式及反应速率系数

Table 1. Some chemical reaction equations and reaction rate coefficients of the Park model.

反应式	$A/(\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{s}^{-1})$	β	E_a/K
$\text{O}_2 + \text{N}_2 \leftrightarrow \text{O} + \text{O} + \text{N}_2$	2×10^{21}	-1.5	59500
$\text{O}_2 + \text{O}_2 \leftrightarrow \text{O} + \text{O} + \text{O}_2$	2×10^{21}	-1.5	59500
$\text{O}_2 + \text{N} \leftrightarrow \text{O} + \text{O} + \text{N}$	1×10^{22}	-1.5	59500
$\text{O}_2 + \text{NO} \leftrightarrow \text{O} + \text{O} + \text{NO}$	2×10^{21}	-1.5	59500
$\text{O}_2 + \text{O} \leftrightarrow \text{O} + \text{O} + \text{O}$	1×10^{22}	-1.5	59500
$\text{N}_2 + \text{N}_2 \leftrightarrow \text{N} + \text{N} + \text{N}_2$	7×10^{21}	-1.6	113200
$\text{N}_2 + \text{O}_2 \leftrightarrow \text{N} + \text{N} + \text{O}_2$	7×10^{21}	-1.6	113200
$\text{N}_2 + \text{N} \leftrightarrow \text{N} + \text{N} + \text{N}$	3×10^{22}	-1.6	113200
$\text{N}_2 + \text{NO} \leftrightarrow \text{N} + \text{N} + \text{NO}$	7×10^{21}	-1.6	113200
$\text{N}_2 + \text{O} \leftrightarrow \text{N} + \text{N} + \text{O}$	3×10^{22}	-1.6	113200
$\text{NO} + \text{N}_2 \leftrightarrow \text{N} + \text{O} + \text{N}_2$	5×10^{15}	0	75500
$\text{NO} + \text{O}_2 \leftrightarrow \text{N} + \text{O} + \text{O}_2$	5×10^{15}	0	75500
$\text{NO} + \text{N} \leftrightarrow \text{N} + \text{O} + \text{N}$	1.1×10^{17}	0	75500
$\text{NO} + \text{NO} \leftrightarrow \text{N} + \text{O} + \text{NO}$	5×10^{15}	0	75500
$\text{NO} + \text{O} \leftrightarrow \text{N} + \text{O} + \text{O}$	1.1×10^{17}	0	75500
$\text{N}_2 + \text{O} \leftrightarrow \text{NO} + \text{N}$	6.4×10^{17}	-1.9	38400
$\text{NO} + \text{O} \leftrightarrow \text{O}_2 + \text{N}$	8.4×10^{12}	0	19450

3.1.2 Gupta 化学反应模型

Gupta 化学反应模型注重反应机理和速率参数的系统整理与一致性. 该模型基于大量实验数据与理论分析, 对空气体系中关键反应过程及其速率系数进行更为细致的标定和更新, 并通常与 Gupta-Yos 输运性质模型配套使用. Gupta 模型的反应速率系数均由 Arrhenius 公式计算, 具体参数如表 2 所列.

3.2 高温空气碰撞辐射模型

空气体系碰撞辐射模型是一种用于描述高温空气中强热化学与辐射非平衡的精细物理模型. 本文采用的高温空气碰撞辐射模型将空气体系建模为包含 11 种基本组分的多相混合气体, 具体包括: N_2 、 O_2 、 NO 分子, N 、 O 原子, N_2^+ 、 O_2^+ 、 NO^+ 、

表 2 Gupta 模型的部分化学反应式及反应速率系数

Table 2. Some chemical reaction equations and reaction rate coefficients of the Gupta model.

反应式	$A/(\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{s}^{-1})$	β	E_a/K
$\text{O}_2 + \text{N} \leftrightarrow 2\text{O} + \text{N}$	3.6×10^{18}	-1	59400
$\text{O}_2 + \text{NO} \leftrightarrow 2\text{O} + \text{NO}$	3.6×10^{18}	-1	59400
$\text{O}_2 + \text{N}_2 \leftrightarrow 2\text{O} + \text{N}_2$	7.2×10^{18}	-1	59400
$\text{O}_2 + \text{O} \leftrightarrow 2\text{O} + \text{O}$	9×10^{19}	-1	59400
$\text{O}_2 + \text{O}_2 \leftrightarrow 2\text{O} + \text{O}_2$	3.24×10^{19}	-1	59400
$\text{N}_2 + \text{O} \leftrightarrow 2\text{N} + \text{O}$	1.92×10^{17}	-0.5	113100
$\text{N}_2 + \text{NO} \leftrightarrow 2\text{N} + \text{NO}$	1.92×10^{17}	-0.5	113100
$\text{N}_2 + \text{O}_2 \leftrightarrow 2\text{N} + \text{O}_2$	1.92×10^{17}	-0.5	113100
$\text{N}_2 + \text{N} \leftrightarrow 2\text{N} + \text{N}$	4.15×10^{22}	-1.5	113100
$\text{N}_2 + \text{N}_2 \leftrightarrow 2\text{N} + \text{N}_2$	4.7×10^{17}	-0.5	113100
$\text{NO} + \text{O}_2 \leftrightarrow \text{N} + \text{O} + \text{O}_2$	3.97×10^{20}	-1.5	75600
$\text{NO} + \text{N}_2 \leftrightarrow \text{N} + \text{O} + \text{N}_2$	3.97×10^{20}	-1.5	75600
$\text{NO} + \text{O} \leftrightarrow \text{N} + 2\text{O}$	7.8×10^{20}	-1.5	75600
$\text{NO} + \text{N} \leftrightarrow 2\text{N} + \text{O}$	7.8×10^{20}	-1.5	75600
$\text{NO} + \text{NO} \leftrightarrow \text{N} + \text{O} + \text{NO}$	7.8×10^{20}	-1.5	75600
$\text{N}_2 + \text{O} \leftrightarrow \text{N} + \text{NO}$	6.75×10^{13}	0	37500
$\text{O} + \text{NO} \leftrightarrow \text{N} + \text{O}_2$	3.18×10^9	1	19700

N^+ 、 O^+ 离子及自由电子. 该模型对电子基态分子 N_2 ($X^1\Sigma_g^+$) 和 O_2 ($X^3\Sigma_g^-$) 分别构建了 68 个振动态与 47 个振动态的精细能级结构, 并系统纳入了分子及其离子的电子激发态 (未区分振动能级). 原子体系方面, N 原子和 O 原子分别建立了 46 个和 40 个电子激发态模型, 而 N^+ 、 O^+ 离子则仅考虑其电子基态. 所有电子激发能级数据均采用美国国家标准与技术研究院 (National Institute of Standards and Technology of the United States, NIST) 数据库的参数. 表 3 完整列出了该模型构建的 248 个独立能级及电子组分的详细分类与能级参数.

高温空气碰撞辐射模型系统构建了完整的粒子碰撞反应网络, 涵盖以下核心物理过程: 电子与重粒子碰撞引发的振动激发/弛豫、分子振动解离、电子激发跃迁、分子电离、原子激发与电离、激发态粒子间的能量转移、带电粒子电荷交换反应及中性粒子的交换过程. 图 3 直观展示了该碰撞辐射体系的拓扑结构. 其中重粒子碰撞速率由平动温度 T_{tr} 控制, 而涉及电子的碰撞过程则受电子温度 T_e 支配. 基于细致平衡原理, 逆反应速率通过 Boltzmann 分布、Guldberg-Waage 平衡常数及 Saha 方程计算获得, 构建了包含约 4×10^4 个正

表 3 碰撞辐射模型考虑的组分与能级
Table 3. The components and energy levels considered in the collision radiation model.

粒子类型	组分	能级
分子	N ₂	X ¹ Σ _g ⁺ (v = 0→67), A ³ Σ _u ⁺ , B ³ Π _g , W ³ Δ _u , B' ³ Σ _u ⁻ , a' ¹ Σ _u ⁻ , a ¹ Π _g , w ¹ Δ _u , G ³ Δ _g , C ³ Π _u , E ³ Σ _g ⁺
	O ₂	X ³ Σ _g ⁻ (v = 0→46), a ¹ Δ _g , b ¹ Σ _g ⁺ , c ¹ Σ _u ⁻ , A' ³ Δ _u , A ³ Σ _u ⁺ , B ³ Σ _u ⁻ , f ¹ Σ _u ⁺
	NO	X ² Π, a ⁴ Π, A ² Σ ⁺ , B ² Π, b ⁴ Σ ⁻ , C ² Π, D ² Σ ⁺ , B' ² Δ, E ² Σ ⁺ , F ² Δ
分子离子	N ₂ ⁺	X ² Σ _g ⁺ , A ² Π _u , B ² Σ _u ⁺ , a ⁴ Σ _u ⁺ , D ² Π _g , C ² Σ _u ⁺
	O ₂ ⁺	X ² Π _g , a ⁴ Π _u , A ² Π _u , b ⁴ Σ _g ⁻
	NO ⁺	X ¹ Σ ⁺ , a ³ Σ ⁺ , b ³ Π, W ³ Δ, b' ³ Σ ⁻ , A' ¹ Σ ⁺ , W ¹ Δ, A ¹ Π
原子	N	4S ⁰ , 2D, 2P, ... (46 levels)
	O	3P, 1D, 1S, ... (40 levels)
原子离子	N ⁺	3p
	O ⁺	4S ⁰
电子	e	—

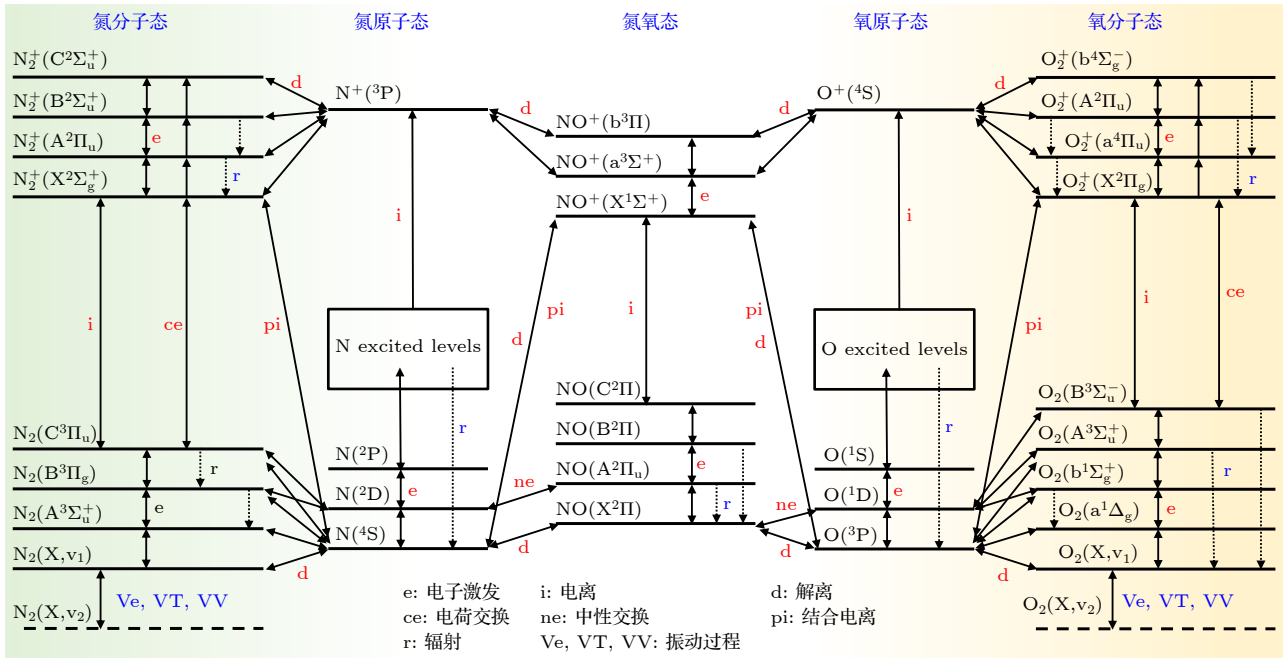


图 3 高温空气碰撞辐射模型粒子-反应关系图
Fig. 3. High-temperature air CR model particle-reaction relationship diagram.

向与逆向碰撞通道的完整反应网络. 模型中所有碰撞过程的参数选择及速率系数详见文献 [22–24].

前期工作已系统开展了高温空气碰撞辐射模型的合理性验证 [23], 并在地面激波管试验和飞行实验场景下对比了碰撞辐射模型与 Park 及 Gupta 模型计算获得的组分分布、辐射特征和热流结果. 计算结果表明: 相较于经典的 Park 模型和 Gupta 模型, 本文所采用的碰撞辐射模型在流动参数、辐射特性等方面表现出更好的预示能力, 证明了高温

空气碰撞辐射模型能够更加合理准确地预测高焓流动的非平衡热化学物理过程.

3.3 激波后热化学非平衡反应动力学差异

针对飞行器再入过程中驻点线附近的一维激波后流动, 本文比较了不同化学反应模型对等离子体参数演化特性的预测差异, 以揭示模型选择对结果的影响. 图 4 给出了一维激波流动的示意图, 计算域沿 x 轴正方向展开 ($x > 0$), 对应激波后区域.

激波前缘 ($x = 0$) 被视为不连续界面, 马赫数、压力和温度等流动参数在此处发生跃变, 激波后初始状态由 Rankine-Hugoniot 关系确定. 为对比不同再入工况下热化学反应动力学特性的差异, 本文选取低空低马赫数工况 ($H = 40$ km, $Ma = 15$) 和高空高马赫数工况 ($H = 60$ km, $Ma = 30$) 作为典型算例进行分析.



图4 一维激波后流动示意图

Fig. 4. One-dimensional shock wave post-computation domain.

描述激波后流动的控制方程组如下.

组分连续性方程:

$$\frac{d}{dx}(\rho_i u) = m_i(\omega_{i,c} + \omega_{i,r}), \quad (10)$$

式中, u 为流动速度, ρ_i 为粒子 i 的密度, m_i 为粒子 i 的质量, $\omega_{i,c}$ 和 $\omega_{i,r}$ 分别为粒子 i 的碰撞生成源项和辐射生成源项.

动量守恒方程:

$$\frac{d}{dx}(\rho u^2 + p) = 0, \quad (11)$$

式中, ρ 为气体总密度, p 为气体压强.

重粒子平动转动能量方程:

$$\frac{d}{dx} \left[u \left(e_{t,h} + e_{r,h} + p_h + \rho_h \frac{u^2}{2} \right) \right] = Q_{eh,elas} + Q_{h,inelas}, \quad (12)$$

式中 $e_{t,h}$ 为重粒子平动能量, $e_{r,h}$ 为重粒子转动能量, ρ_h 为重粒子密度, $Q_{eh,elas}$ 和 $Q_{h,inelas}$ 分别为重粒子弹性碰撞能量源项和非弹性碰撞能量源项.

电子能量方程:

$$\frac{d}{dx} \left[u \left(e_e + p_e + \rho_e \frac{u^2}{2} \right) \right] = -Q_{eh,elas} + Q_{e,inelas}, \quad (13)$$

式中, e_e 为电子能量, ρ_e 为电子密度, $Q_{e,inelas}$ 为非弹性碰撞引起的电子能量源项.

3.3.1 低空低马赫条件下热化学反应动力学过程

图5展示了在低空低马赫数 ($H = 40$ km, $Ma = 15$) 条件下, 采用3种化学反应模型——CR模型、Park模型和Gupta模型——计算所得的激

波后温度随激波距离变化的演化规律. 从图5可以看出, 各模型在激波后区域表现出不同的温度演化特征. 在平动-转动温度的演化方面, 各模型均显示其在激波附近初始值接近 12000 K, 随后随着距离增大而逐渐下降, 最终趋于约 5500 K 的稳态值. 然而, 不同模型的弛豫速率存在明显差异: CR模型中平动-转动温度下降最慢, 而Park和Gupta模型的重粒子平动-转动温度变化相对迅速, 体现出明显的振动-平动能弛豫效率差异. CR模型预测的电子温度在靠近激波处 10^{-4} m 处上升, 并在约 10^{-2} m 处趋于稳定, 表明该模型假设下能量向平动-转动自由度的传递效率较低, 弛豫过程较慢. 相比之下, Park模型与Gupta模型预测的电子温度上升趋势较为迅速, 且更快地达到稳定和平衡. 在振动温度方面, Park和Gupta模型采用了电子-振动能量平衡假设, 然而CR模型的计算结果表明二者之间存在显著的非平衡特征, 振动激发过程的弛豫效率显著强于电子, 这表明传统双温度假设在激波后非平衡弛豫前期并不总是完全适用.

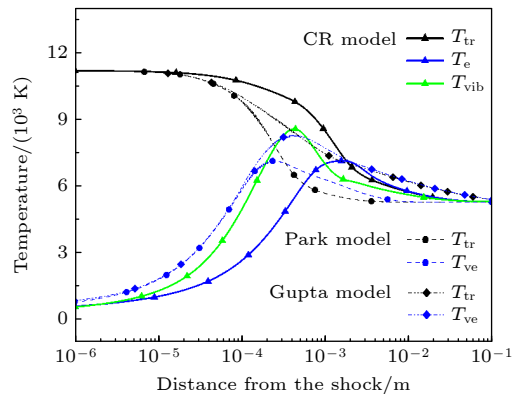


图5 $H = 40$ km, $Ma = 15$ 条件下不同模型得到的激波后温度演变

Fig. 5. Evolution of post-shock temperature obtained by the different models under the condition of $H = 40$ km, $Ma = 15$.

图6展示了在低空低马赫 ($H = 40$ km, $Ma = 15$) 下, 采用CR模型、Park模型和Gupta三种化学反应模型计算得到的激波后主要化学组分的数密度分布演化规律. 图6(a)描绘了主要中性组分 N_2 , O_2 , NO , N , O 的数密度随距激波距离的变化. 在所有模型中均表现出明显的离解趋势. 随着距离增大, N_2 数密度逐渐下降, Park模型预测的离解速率较快, 而CR与Gupta模型则相对保守, 表明不同模型对分子离解反应速率常数的假设存在差异.

图 6(b) 展示了主要电离组分 N_2^+ , O_2^+ , NO^+ , N^+ , O^+ 离子及自由电子的数密度演化, 这些组分是强电离环境下能量耗散和辐射的重要载体. 电子和离子数密度在所有模型中均呈现快速上升趋势, Park 模型预测的电子密度最高, 且电离起始点更靠前, 表明其对电离反应的阈值能量或截面参数设定更为敏感, 导致更强的电离效应. 而 CR 模型预测的电离过程远远落后于 Park 和 Gupta 模型, 这与模型所采用的非玻尔兹曼能级假设有很大关系. 总体而言, 3 种化学反应模型在激波后区域对化学组分的演化路径存在显著差异, 尤其体现在解离和电离程度上, CR 模型普遍预测更慢的原子浓度和离子数密度, 而 Park 和 Gupta 模型预测的反应更为迅速. 这主要是因为 Park 和 Gupta 模型中的振动和电子激发能级分布遵循玻尔兹曼假设, 导致了对解离和电离反应速率的显著高估, 而 CR 模型所采用的非玻尔兹曼能级假设则更加合理准确地评估激波后的非平衡化学反应过程.

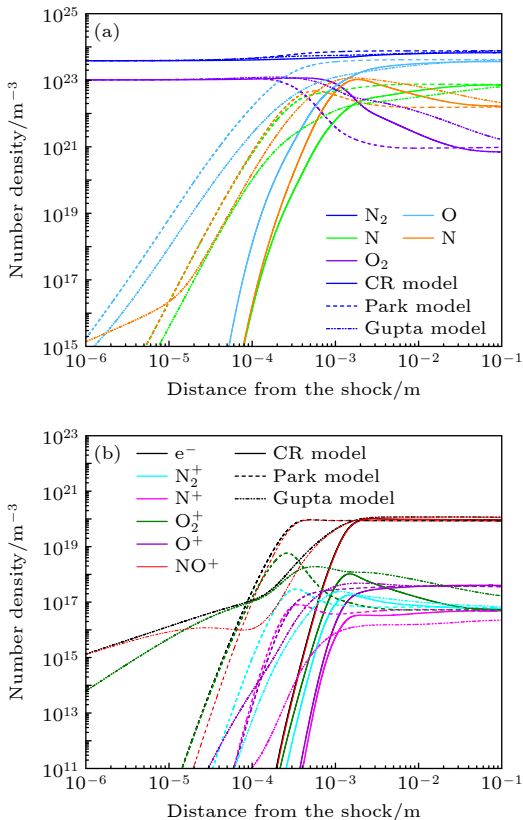


图 6 $H = 40$ km, $Ma = 15$ 条件下不同模型得到的激波后化学组分演变
Fig. 6. Evolution of post-shock chemical components obtained by the different models under the condition of $H = 40$ km, $Ma = 15$.

3.3.2 高空高马赫条件下热化学反应动力学过程

图 7 展示了在高空高马赫数 ($H = 60$ km, $Ma = 30$) 条件下, 3 种化学反应模型计算所得的激波后温度随激波距离变化的演化规律. 从图 7 可以看出, 各模型在激波后表现出不同的温度演化特征. 该工况对应于典型高速飞行环境, 具有极高的焓值和强烈非平衡热力学效应.

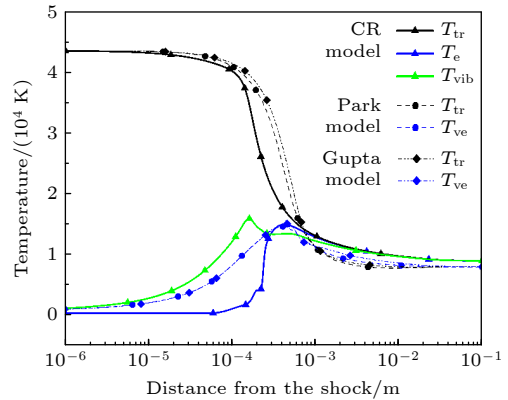


图 7 $H = 60$ km, $Ma = 30$ 条件下不同模型得到的激波后温度演变
Fig. 7. Evolution of post-shock temperature obtained by the different models under the condition of $H = 60$ km, $Ma = 30$.

从图 7 可以看出, 在如此极端的飞行条件下, 3 种化学反应模型在激波后区域表现出显著不同的非平衡温度演化行为, 反映出其在描述高温气体能量传递机制方面的差异性. 所有模型均显示平动-转动温度在激波附近迅速下降, 这是由于激波压缩导致的初始高温状态向下游逐渐弛豫的结果. CR 模型预测的平动-转动温度下降最为剧烈, 而 Park 与 Gupta 模型的平动-转动温度衰减相对缓慢, 且在相同距离范围内仍处于较高水平. 表明这些模型对平动-转动自由度的能量弛豫过程建模更为保守, 这与双温度假设下对振动-平动弛豫速率评估忽略了高能级激发过程有关. 电子温度在靠近激波处几乎为零, 随后迅速上升, 之后因电子-分子碰撞激发及电离过程导致能量转移而逐渐下降. 值得注意的是, CR 模型中电子温度的上升起始点更晚, 约为 10^{-4} m, 说明该模型对电子激发和电离过程的预测更为缓慢; 相比之下, Park 与 Gupta 模型中振动-电子温度的增长更为迅速, 约为 10^{-5} m. 相较于低空低马赫条件而言, CR 模型预测的振动温度与电

子温度差异进一步增强,表明在更高工况下,振动-电子平衡假设更加无法适用于气动热建模.

总体而言,不同化学反应模型在描述激波后温度场的非平衡特性方面存在显著差异,尤其是在电子与振动温度的弛豫路径上表现尤为明显.这主要源于各模型化学动力学机制(如反应速率常数、活化能、截面函数等)和能量耦合机制(如电子-振动、振动-平动、化学反应放热等过程的耦合效率)等方面的差异,CR模型能够充分有效地表征非平衡能级激发和退激发过程带来的热化学弛豫影响,因此能够更合理有效地表征激波后的非平衡过程,这对于准确预测激波层内的温度分布、辐射特性及气动热载荷至关重要.

图8为高空高马赫数($H = 60 \text{ km}$, $Ma = 30$)条件下采用CR, Park和Gupta三种化学反应模型计算得到的激波后主要化学组分的数密度分布演化规律.该工况对应于典型高速再入或巡航环境,具有极高的总焓与强烈的非平衡热化学效应.图8(a)描绘了主要中性组分 N_2 , O_2 , NO , N , O 的

数密度随距激波距离的变化. CR模型预测其解离速率最慢,而Park与Gupta模型预测的解离过程更为迅速,这与不同模型所采用的振动能级假设有很大关系.图8(b)展示了主要电离组分 N_2^+ , O_2^+ , NO^+ , N^+ , O^+ 离子及自由电子的数密度演化.可见相比于低空低马赫条件而言,该条件下电离反应更为剧烈,主导的离子产物为原子离子,同时CR模型预测的电离过程远远落后于Park与Gupta模型.这是由于CR模型能够合理表征激波后的非玻尔兹曼能级分布,从而避免了传统模型对总包反应速率的过高评估.

4 空气体系辐射特性预测

为深入探讨高温空气热化学非平衡效应对激波后辐射特性的影响,本文在典型一维激波条件下,对3种代表性化学反应模型的非平衡辐射输运结果进行对比分析,包括经典的Park模型、Gupta有限速率化学反应模型以及基于碰撞-辐射机理的辐射输运模型.

4.1 非平衡辐射输运模型

为精确描述高温空气流场的辐射传输特性与输运行为,构建了基于高光谱分辨率的辐射输运模型(radiative transfer equation, RTE),采用逐线计算方法对真空紫外(vacuum ultraviolet, VUV)至红外(infrared, IR)波段范围内的辐射系数进行系统计算.本文采用的模型全面涵盖以下跃迁机制.

4.1.1 原子跃迁过程

1) 束缚-束缚跃迁: 纳入N原子1309条及O原子910条电子能级跃迁,谱线强度与跃迁概率参数源自NIST数据库^[25].发射系数通过多机制耦合模型计算,综合斯塔克展宽、自然展宽、压力展宽及多普勒展宽效应,并基于非平衡态基尔霍夫定律推导吸收系数^[26,27].

2) 束缚-自由跃迁: 通过TOPbase数据库获取各激发态粒子的光电离吸收截面,结合基尔霍夫定律确定发射系数^[28].

3) 自由-自由跃迁: 采用类氢原子吸收截面修正公式计算发射与吸收系数^[29].

4.1.2 分子跃迁过程

1) 束缚-束缚跃迁: 针对 N_2 , NO , O_2 及 N_2^+ 分

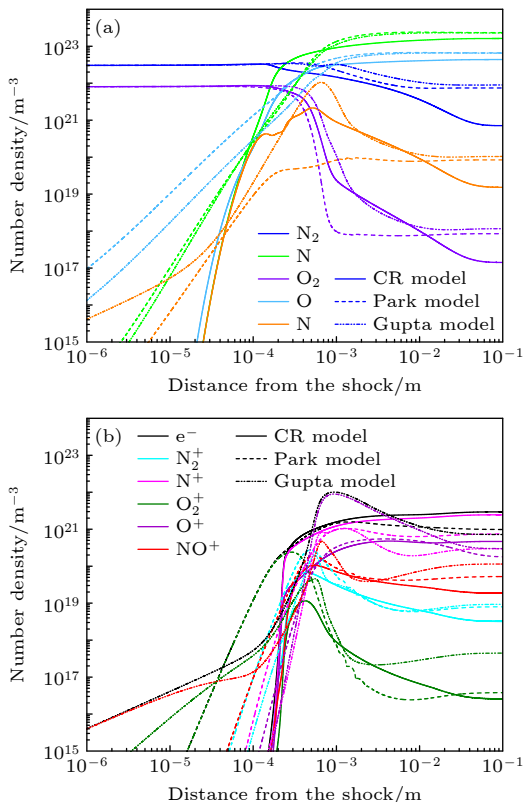


图8 $H = 60 \text{ km}$, $Ma = 30$ 条件下不同模型得到的激波后化学组分演变

Fig. 8. Evolution of post-shock chemical components obtained by the different models under the condition of $H = 60 \text{ km}$, $Ma = 30$.

子体系, 构建包含电子激发、振动跃迁与转动跃迁等能级网络. 跃迁概率由振动-电子跃迁矩与转动线强函数的乘积确定, 结合普朗克函数推导发射/吸收系数^[29-31].

2) 束缚-自由跃迁: 涵盖分子光电离与光解离过程, 基于实验测量的吸收截面直接计算吸收与发射系数^[32].

所有跃迁过程的详细分类见表 4. 该模型通过详细计算不同跃迁机制的辐射特性, 实现了对高温空气复杂辐射行为的多尺度精确建模.

表 4 辐射输运模型考虑的跃迁过程

Table 4. Transition processes considered in the radiation transport model.

组分	跃迁类型	辐射跃迁过程
N	束缚-束缚	$N(i) \leftrightarrow N(j < i) + h\nu$
	束缚-自由	$N^+ + e \leftrightarrow N(i) + h\nu$
	自由-自由	$N(i) + e_h \leftrightarrow N(i) + e_l + h\nu$
O	束缚-束缚	$O(i) \leftrightarrow O(j < i) + h\nu$
	束缚-自由	$O^+ + e \leftrightarrow O(i) + h\nu$
	自由-自由	$O(i) + e_h \leftrightarrow O(i) + e_l + h\nu$
N ₂	束缚-束缚	$N_2(B^3\Pi_g) \leftrightarrow N_2(A^3\Sigma_u^+) + h\nu$
		$N_2(C^3\Pi_u) \leftrightarrow N_2(B^3\Pi_g) + h\nu$
		$N_2(c'_4\Sigma_u^+) \leftrightarrow N_2(X^1\Sigma_g^+) + h\nu$
		$N_2(c'_3\Pi_u) \leftrightarrow N_2(X^1\Sigma_g^+) + h\nu$
		$N_2(b^1\Pi_u) \leftrightarrow N_2(X^1\Sigma_g^+) + h\nu$
		$N_2(b^1\Sigma_u^+) \leftrightarrow N_2(X^1\Sigma_g^+) + h\nu$
		$N_2(o_3^1\Pi_u) \leftrightarrow N_2(X^1\Sigma_g^+) + h\nu$
束缚-自由	连续谱	
N ₂ ⁺	束缚-束缚	$N_2^+(B^2\Sigma_u^+) \leftrightarrow N_2^+(X^2\Sigma_g^+) + h\nu$
		$N_2^+(A^2\Pi_u) \leftrightarrow N_2^+(X^2\Sigma_g^+) + h\nu$
		$N_2^+(C^2\Sigma_u^+) \leftrightarrow N_2^+(X^2\Sigma_g^+) + h\nu$
NO	束缚-束缚	$NO(B^2\Pi_r) \leftrightarrow NO(X^2\Pi_r) + h\nu$
		$NO(A^2\Sigma^+) \leftrightarrow NO(X^2\Pi_r) + h\nu$
		$NO(C^2\Pi_r) \leftrightarrow NO(X^2\Pi_r) + h\nu$
		$NO(D^2\Sigma^+) \leftrightarrow NO(X^2\Pi_r) + h\nu$
		$NO(B'^2\Delta) \leftrightarrow NO(X^2\Pi_r) + h\nu$
		$NO(E^2\Sigma^+) \leftrightarrow NO(X^2\Pi_r) + h\nu$
O ₂	束缚-束缚	$O_2(B^3\Sigma_u^-) \leftrightarrow O_2(X^3\Sigma_g^-) + h\nu$
	束缚-自由	连续谱

如图 9 所示, 采用球帽近似假设计算沿飞行器一维驻点线的辐射输运, 将球立体角离散为 $\pi/18$

的单元, 并将 70—6200 nm 的波长范围等间隔分割为 613001 个波长点, 空间离散与流场网格一致.

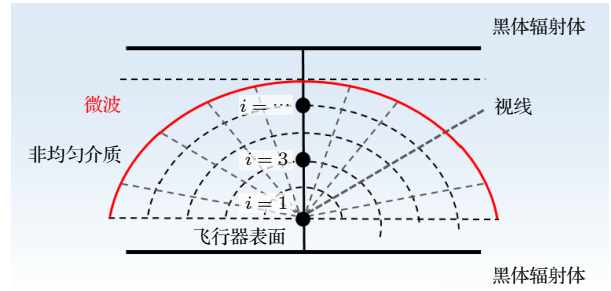


图 9 求解辐射输运方程所采用的球帽模型及其空间离散 Fig. 9. Spherical cap model used for solving the radiation transport equation and its spatial discretization.

4.2 不同模型预测的气体辐射系数差异

图 10 展示了在低空低马赫 ($H = 40$ km, $Ma = 15$) 下, 采用 CR 模型、Park 模型和 Gupta 三种化学反应模型计算得到的激波后 5 cm 处的辐射发射系数和吸收系数的分布. 图 10(a) 中 3 种模型均表现出显著的多谱带辐射特性, 主要源于分子振动-转动跃迁、原子激发态跃迁以及电离复合过程. 在红外至可见光波段, 所有模型在此区域均有较弱但连续的辐射贡献, 主要来自 N_2 和 O_2 的振动-转动带系 (如第一正带、第二正带等). 其中, Gupta 模型在该区域的发射强度最高, 且存在明显宽频结构; Park 模型次之, CR 模型则相对最低, 这主要与流场内分子组分的分布差异有关. 在紫外和真空紫外波段出现多个尖锐谱线与宽带结构, 主要源自原子激发态的电子跃迁以及部分分子光致解离过程. Gupta 模型在此区间表现出最强的发射峰值, 说明其对激发态粒子浓度的预测更高; Park 模型的发射强度略低, 且谱线分布较为稀疏; CR 模型虽在局部位置 (如 8 eV 附近) 有较强发射, 但整体强度较低, 这主要是由于采用了非玻尔兹曼分布假设导致高能级跃迁偏低. 图 10(b) 展示了对应波段的吸收系数分布, 反映了气体对入射辐射的吸收能力, 其物理机制与发射密切相关. 红外至可见光波段吸收系数普遍较低, 在紫外至 VUV 波段吸收系数随光子能量迅速上升, 3 个模型在此区域均表现出较强的吸收能力, 且吸收谱线密集、起伏剧烈.

图 11 展示了在高空高马赫 ($H = 60$ km, $Ma = 30$) 下, 采用 CR 模型、Park 模型和 Gupta 三种化学反应模型计算得到的激波后 5 cm 处的辐射发射

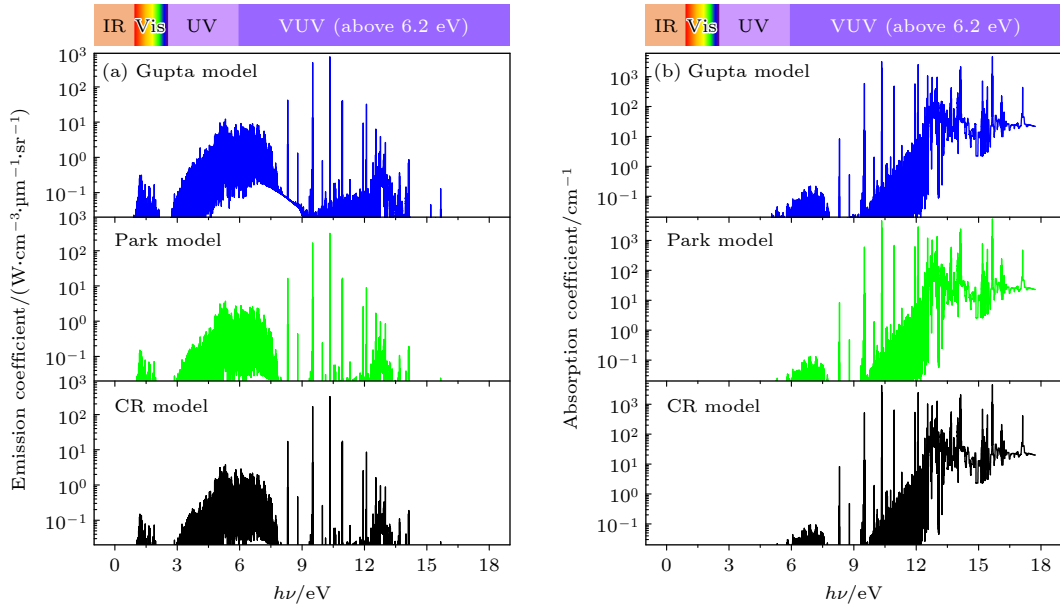


图 10 $H = 40$ km, $Ma = 15$ 条件下不同模型得到的激波后 5 cm 处辐射系数

Fig. 10. Evolution of post-shock radiation coefficients at 5 cm behind the shock wave obtained by the different models under the condition of $H = 40$ km, $Ma = 15$.

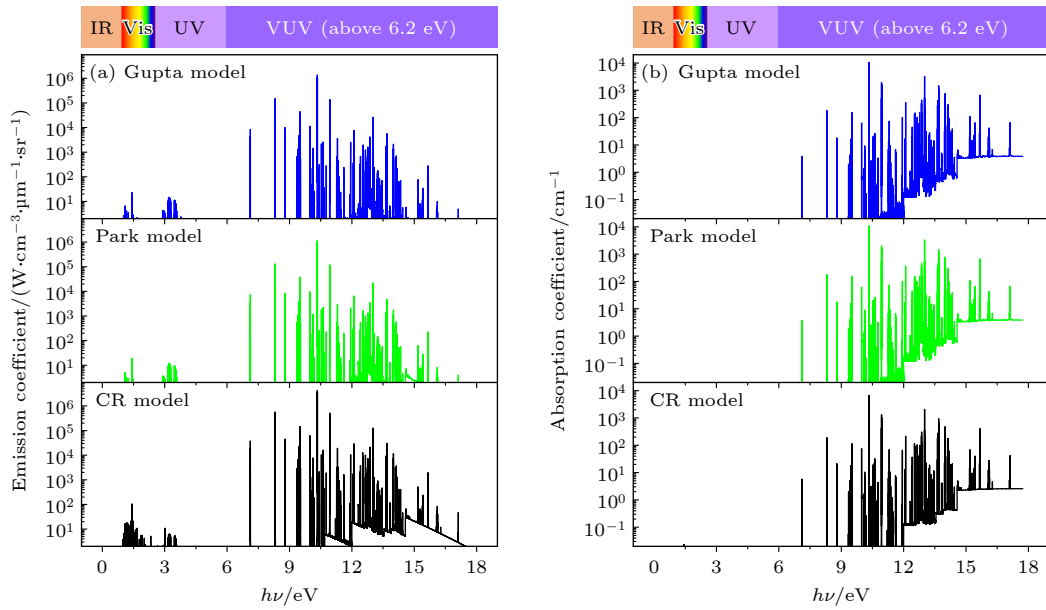


图 11 $H = 60$ km, $Ma = 30$ 条件下不同模型得到的激波后 5 cm 处辐射系数

Fig. 11. Evolution of post-shock radiation coefficients at 5 cm behind the shock wave obtained by the different models under the condition of $H = 60$ km, $Ma = 30$.

系数和吸收系数的分布. 相比于低空低马赫条件而言, 该条件下发射系数主要分布于红外、可见光及真空紫外波段范围的原子谱线, 这是由于该条件下气体解离程度较高, 原子辐射跃迁成为主导的辐射发射过程. 此外, CR 模型预测了最高的辐射发射能力, 而 Gupta 和 Park 模型预测的发射系数较低, 这主要与图 7 中预测的更高平衡温度有关, 高温导致了更加强烈的辐射发射能力.

4.3 非平衡辐射输运过程差异

图 12 展示了在不同条件下, 采用 CR 模型、Park 模型和 Gupta 三种化学反应模型计算得到的激波后 5 cm 处的辐射强度随光子能量的分布特征. 基于前序步骤中获得的辐射发射系数与吸收系数, 通过求解辐射输运方程获得了图 12 沿视线方向的净辐射强度.

在图 12(a) 中, 3 种模型均表现出以紫外波段 (UV, 约 4—9 eV) 为主导的辐射特性, 这主要源于分子振动-转动激发和原子激发态跃迁过程. Gupta 模型在 5—7 eV 区域形成宽而强的辐射峰, 峰值接近 $300 \text{ W}\cdot\text{cm}^{-2}\cdot\mu\text{m}^{-1}\cdot\text{sr}^{-1}$, 且谱线结构复杂, 包含大量尖锐的共振线, 整体辐射强度最高, Park 模型辐射强度略低于 Gupta 模型, 但整体分布接近于 Gupta 模型预测结果. CR 模型预测的辐射强度显著偏低, 这与所采用的能级分布密切相关. 在图 12(b) 中, 飞行高度更高、马赫数更大, 导致气体温度更高、电离程度更强, 辐射特性发生显著变化. Gupta 和 Park 模型在红外、可见光和真空紫外范围内出现多个尖锐的窄线峰, 这与原子的束缚-束缚跃迁有关. CR 模型预测的谱线强度更高, 且主要分布于

真空紫外范围, 这表明其辐射跃迁主要由高能级之间的束缚-束缚跃迁所主导, 这进一步表明了采用非平衡能级分布假设的必要性.

对比不同工况而言, 在低空低马赫条件下, 辐射以分子振转和原子激发为主, 表现为宽频带、中等强度的 UV 辐射; 而在高空高马赫条件下, 电离与离子重组主导, 辐射呈现窄线、高强度、高能化特征, VUV 波段贡献显著增强. 图 12 揭示了不同化学反应模型在不同飞行条件下对激波后辐射场的预测能力差异, 表明了选择合适化学动力学模型与辐射物理模型相结合的重要性.

图 13 展示了在不同条件下, 采用 CR 模型、Park 模型和 Gupta 三种化学反应模型计算得到的激波后辐射输运通量, 是评估气动热载荷与热防护

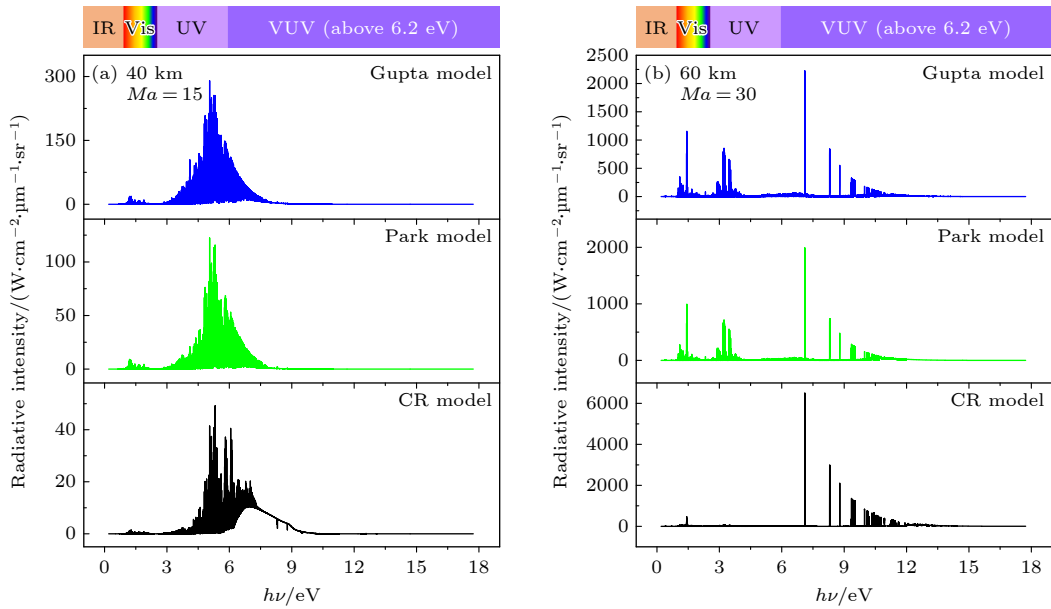


图 12 不同条件下不同模型得到的激波后 5 cm 处辐射强度分布

Fig. 12. Radiation intensity distribution at 5 cm downstream of the shock wave obtained by different models under different conditions.

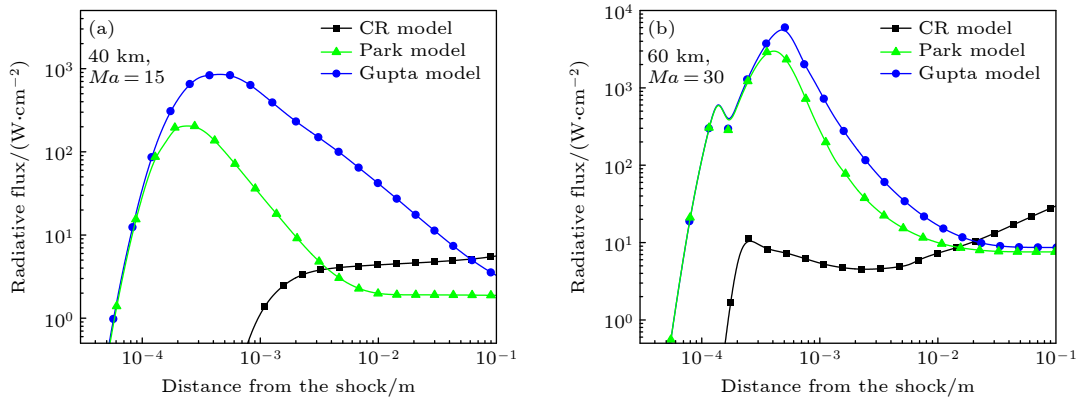


图 13 不同条件下不同模型得到的激波后辐射输运通量

Fig. 13. Post-shock radiative flux obtained by different models under different conditions.

系统性能的关键参数. 在图 13(a) 低空低马赫条件 ($H = 40 \text{ km}$, $Ma = 15$) 下, 3 种模型均表现出典型的“先上升后下降”趋势, 反映辐射源在激波层内由强非平衡向准平衡过渡的过程. Gupta 模型辐射通量在 10^{-4} m 处迅速上升, 在 $5 \times 10^{-4} \text{ m}$ 达到峰值, 约为 10^3 W/cm^2 , 随后逐渐衰减至 0.1 m 处的约 5 W/cm^2 , Park 模型预测的峰值显著低于 Gupta 模型. 而 CR 模型在 10^{-5} m 之前无明显辐射响应, 直到 10^{-4} m 后才缓慢上升, 在 10^{-3} m 附近达到约 10 W/cm^2 的平台值, 并保持至下游. 其整体辐射通量最低, 这主要与 CR 模型所采用的非玻尔兹曼能级假设有关, 这表明了采用准确能级分布预测的必要性. 在图 13(b) 高空高马赫条件 ($H = 60 \text{ km}$, $Ma = 30$) 下, 飞行高度更高、马赫数更大, 导致气体辐射通量远远高于低空低马赫条件, 同样由于 CR 模型采用了非玻尔兹曼能级假设, CR 模型预测的辐射通量较低.

综上所述, 以上结果揭示了不同化学反应模型在预测激波后辐射输运通量方面的显著差异, 基于总包化学反应模型计算得到的辐射输运通量整体远高于 CR 模型计算结果, 这主要与其所采用玻尔兹曼分布假设导致的能级布居高估有关, 最终会导致热流预测偏高, 热防护设计冗余量过大, 进而不利于飞行器整体设计性能的提高. CR 模型对非平衡能级分布 (特别是电子激发态) 和离子-中性碰撞动力学的准确描述能够有效表征激波后的激发态粒子分布, 能够合理描述非平衡化学动力学与辐射物理过程, 从而准确预测辐射输运过程, 有助于提升高空高速条件下新一代飞行器气动热环境及光学特征预测精度.

5 结 论

在高速飞行条件下, 激波层内气体处于高度非平衡状态, 其热化学演化过程对所采用的物性计算方法、化学反应模型和辐射模型极为敏感. 本文对比了不同输运性质计算方法、Park 模型、Gupta 模型以及碰撞辐射模型在典型高空高马赫数和低空低马赫数工况下的预测能力, 结果表明:

1) 低温区 (约 $300\text{--}3000 \text{ K}$) 不同空气输运性质模型预测结果差异较小; 中高温区差异显著增大, 其中 PowerLaw-Eucken-Wilke 模型在高温区明显高估热导率. Gupta-Yos 模型在一定程度上改

善了中高温区输运性质的连续性, 但仍受限于混合规则和简化假设. 相比之下, 基于高阶 Chapman-Enskog 展开的输运模型具有更严格的动理学基础, 能够自洽描述多组分高温空气的输运行为.

2) 在高焓强非平衡条件下, CR 模型预测的 N_2/O_2 解离速率及 N/O 电离速率显著低于 Park 模型和 Gupta 模型; 在高空高马赫数条件下, CR 模型表现出更明显的电离起始位置后移和反应滞后特征. 工程应用中, 有限速率化学模型在中低空或弱非平衡条件下仍具有较高效率和可用性, 但在高焓稀薄流动环境下, 建议采用 CR 模型或引入非平衡修正的化学动力学描述, 以避免对电离度和辐射强度的系统性高估.

3) 不同化学反应模型对激波后组分演化路径的预测存在显著差异, 这种差异会进一步放大并体现在辐射系数、辐射强度及辐射通量的计算结果中. 尤其在强非平衡条件下, CR 模型通过求解非 Boltzmann 能级布居, 准确描述电子激发态及碰撞动力学过程, 能够更合理地描述激波后激发态粒子分布及其对辐射输运的影响. 工程应用中, 建议在常规热环境评估中采用简化辐射模型以降低计算成本, 而在高空高速再入等辐射主导工况下, 优先引入 CR 模型与高光谱辐射计算方法, 以提高气动热与热防护设计的可靠性.

综上所述, 在高焓、强非平衡的高速飞行环境中, 空气体系输运性质、化学反应和辐射模型的选择不仅影响热化学非平衡过程的物理真实性, 更对辐射特性与热防护设计具有决定性意义. 因此, 未来高速飞行器气动热环境模拟应充分考虑模型对非平衡能级结构、能量耦合机制及反应动力学细节的描述能力, 以提升预测精度与工程可靠性.

参考文献

- [1] Gnoffo P A 1999 *Annu. Rev. Fluid Mech.* **31** 459
- [2] Sun S R, Wang H X 2014 *Chin. Phys. Lett.* **31** 095205
- [3] Sun S R, Wang H X, Zhu T 2020 *Contrib. Plasma Phys.* **60** e201900094
- [4] Sun S R, Wang H X, Zhu T, Murphy A B 2020 *Plasma Chem. Plasma Process.* **40** 261
- [5] Petrov G M, Petrova T B, Maxwell J R, Peñano J R 2025 *Plasma Sources Sci. Technol.* **34** 095004
- [6] Petrova T B, Petrov G M, Peñano J R 2024 *Plasma Sources Sci. Technol.* **33** 115008
- [7] D'Angola A, Colonna G, Gorse C, Capitelli M 2008 *Eur. Phys. J. D* **46** 129
- [8] Gupta R N, Yos J M, Thompson R A, Lee K P 1989 *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 Report Number: NAS 1.61:1232

- [9] Murphy A B 1995 *Plasma Chem. Plasma Process.* **15** 279
- [10] Murphy A B 2001 *J. Phys. D: Appl. Phys.* **34** R151
- [11] Capitelli M, Colonna G, Gorse C, D'Angola A 2000 *Eur. Phys. J. D* **11** 279
- [12] Capitelli M, Gorse C, Longo S, Giordano D 2000 *J. Thermophys. Heat Transfer* **14** 259
- [13] Kim J G, Kang S H, Park S H 2020 *Int. J. Heat Mass Transfer* **148** 119059
- [14] Kang S W, Dunn M G 1973 *Theoretical and Experimental Studies of Reentry Plasmas* Report Number: CAL-AF-3093-A-2
- [15] Park C 1989 *J. Thermophys. Heat Transfer* **3** 233
- [16] Park C 1993 *J. Thermophys. Heat Transfer* **7** 385
- [17] Jo S M, Kwon O J, Kim J G 2020 *Int. J. Heat Mass Transfer* **153** 119566
- [18] Chapman S, Cowling T G 1958 *The Mathematical Theory of Non-uniform Gases* (Cambridge: Cambridge University Press)
- [19] Chen S Q, Wang H X 2012 *Chin. Phys. Lett.* **29** 025201
- [20] Wang H X, Sun S R, Sun W P 2015 *Plasma Chem. Plasma Process.* **35** 543
- [21] Wang H X, Sun S R, Chen S Q 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 195203 (in Chinese) [王海兴, 孙素蓉, 陈士强 2012 物理学报 **61** 195203]
- [22] Du Y W, Sun S R, Tan M J, Huang H J, Yan C, Meng X, Chen X, Wang H X 2023 *J. Fluid Mech.* **977** A39
- [23] Du Y W, Sun S R, Tan M J, Zhou Y, Chen X, Meng X, Wang H X 2022 *Acta Astronaut.* **193** 521
- [24] Du Y W, Sun S R, Wang H X, Huang H J, Yan C, Meng X, Chen X 2025 *Phys. Fluids* **37** 037136
- [25] Kramida A, Ralchenko Y, Reader J, NIST ASD Team 2024 NIST Atomic Spectra Database (Version 5.12) Available: <https://physics.nist.gov/asd> [2026-1-3]
- [26] Johnston C O, Hollis B R, Sutton K 2008 *J. Spacecr. Rockets* **45** 1185
- [27] Chauveau S, Perrin M Y, Rivière P, Soufiani A 2002 *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **72** 503
- [28] Kirby K, Constantinides E R, Babeu S, Oppenheimer M, Victor G A 1979 *At. Data Nucl. Data Tables* **23** 63
- [29] Peach G 1962 *Mon. Not. R. Astron. Soc.* **124** 371
- [30] Laux C O, Kruger C H 1992 *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **48** 9
- [31] Earls L T 1935 *Phys. Rev.* **48** 423
- [32] Kovacs I 1972 *Phys. Today* **25** 54

SPECIAL TOPIC—Non-equilibrium transport and active control strategy in low-temperature plasmas

Influence of air thermochemical models on high-enthalpy nonequilibrium flows and radiative characteristics*

YAN Cong¹⁾²⁾ DU Yaowen^{1)†} WEI Jingwen¹⁾ SUN Surong¹⁾

HUANG Heji²⁾ GENG Jinyue²⁾ WANG Haixing^{1)‡}

1) (*School of Astronautics, Beihang University, Beijing 102206, China*)

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

(Received 4 January 2026; revised manuscript received 18 March 2026)

Abstract

With the continuous increase in flight velocity and the expansion of operational airspace for high-speed vehicles, the aerodynamic heating environment they encounter has become increasingly complex. The surrounding flow field generally exhibits pronounced thermochemical nonequilibrium characteristics, which place higher demands on the accuracy and reliability of the fundamental thermochemical and transport data used in numerical simulations.

This study focuses on the thermochemical nonequilibrium phenomena within the shock layer during atmospheric reentry and high-speed cruise of high-speed vehicles. Starting from a comparative analysis of multicomponent transport property calculation methods, the effects of different chemical reaction models on the thermochemical kinetic evolution and radiative characteristics in the post-shock region are systematically investigated. Two representative flight conditions—high-altitude/high-Mach and low-altitude/low-Mach regimes—are considered. A comparative analysis is conducted among the Collisional-Radiative (CR) model, the Park model, and the Gupta model with respect to their predictions in the post-shock region.

The results show that under high-enthalpy and strongly nonequilibrium conditions, significant discrepancies exist among different models in predicting the number density evolution of major neutral species (N_2 , O_2 , NO , N , O) and ionized species (N_2^+ , O_2^+ , NO^+ , N^+ , O^+ , and free electrons). Specifically, the CR model predicts relatively delayed molecular dissociation and atomic ionization processes, whereas the Park and Gupta models yield significantly faster dissociation and ionization rates. These differences mainly arise from the distinct treatments of vibrational energy levels and assumptions regarding nonequilibrium energy distributions in each model.

On this basis, a radiative transfer model is further developed. The line-by-line (LBL) method is employed to calculate radiative coefficients across the spectral range from vacuum ultraviolet to infrared, accounting for bound-bound, bound-free, and free-free radiative transitions in both atomic and molecular systems. The results indicate that, under high-altitude and high-Mach conditions, substantial differences exist in the predicted post-shock radiative heat flux among different chemical reaction models. The selection of the chemical reaction model therefore plays a critical role in accurately predicting both the chemical composition and radiative characteristics within the shock layer.

Keywords: high-speed vehicles, non-equilibrium effects, chemical reaction models, radiative transport

DOI: [10.7498/aps.75.20260009](https://doi.org/10.7498/aps.75.20260009)

CSTR: [32037.14.aps.75.20260009](https://cstr.cn/32037.14.aps.75.20260009)

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 12547156, 12535016, 12375245) and the Research Fund of National Key Laboratory of Aerospace Physics in Fluids (Grant No. 2025-APF-KFQMJJ-06).

† Corresponding author. E-mail: dyw@buaa.edu.cn

‡ Corresponding author. E-mail: whx@buaa.edu.cn

空气热化学模型对高焓非平衡流动及辐射特性影响

闫聪 杜耀文 魏婧雯 孙素蓉 黄河激 耿金越 王海兴

Influence of air thermochemical models on high-enthalpy nonequilibrium flows and radiative characteristics

YAN Cong DU Yaowen WEI Jingwen SUN Surong HUANG Heji GENG Jinyue WANG Haixing

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 75, 090503 (2026) DOI: 10.7498/aps.75.20260009

CSTR: 32037.14.aps.75.20260009

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.75.20260009>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

高温化学非平衡与表面微孔隙效应对边界层稳定性影响

Influence of high-temperature chemical non-equilibrium and surface micropore effect on boundary layer stability

物理学报. 2025, 74(12): 124701 <https://doi.org/10.7498/aps.74.20250269>

壁面催化对高温非平衡流场磁控效果影响分析

Analysis of wall catalytic effects on magnetohydrodynamic control of high-temperature non-equilibrium flow field

物理学报. 2025, 74(2): 024701 <https://doi.org/10.7498/aps.74.20241307>

纳秒激光作用下金属靶烧蚀-等离子体演化-辐射的耦合模型

Coupling model of metallic target ablation-plasma evolution-radiation under nanosecond laser irradiation

物理学报. 2026, 75(5): 024701 <https://doi.org/10.7498/aps.75.20251464>

离散Boltzmann方程的求解: 基于有限体积法

Solution of the discrete Boltzmann equation: Based on the finite volume method

物理学报. 2024, 73(11): 110504 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20231984>

氩气感应耦合等离子体非平衡特性分析

Non-equilibrium characteristics analysis of argon inductively coupled plasma

物理学报. 2025, 74(23): 235215 <https://doi.org/10.7498/aps.74.20251186>

静态强磁场对临近空间飞行器中天线辐射性能的影响

Influence of static strong magnetic field on antenna radiation in hypersonic vehicle

物理学报. 2022, 71(8): 085202 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20212044>