高温化学非平衡效应对高超声速飞行器气动力/热影响的数值研究进展

莫凡¹, 高振勋^{1,2*}, 蒋崇文^{1,2}, 李椿萱^{1,2}

1. 北京航空航天大学航空科学与工程学院, 北京 100191;

2. 中国航天科技集团公司航天飞行器气动热防护实验室, 北京 100191

*联系人, E-mail: gaozhenxun@buaa.edu.cn

收稿日期: 2021-04-11; 接受日期: 2021-07-16; 网络出版日期: 2021-09-16

国家数值风洞工程项目(编号: NNW2018-ZT3A05)和国家自然科学基金(编号: 11872094)资助项目

摘要 本文主要针对高温化学非平衡效应对高超声速飞行器气动力热影响的数值研究进行了综述. 首先分析了高温化学非平衡流动数值模拟中的物理化学模型影响, 发现组分扩散系数模型会对完全催化壁条件下的气动热结果产生影响; 不同化学动力学模型对于激波/激波干扰等复杂流动区域预测的热流峰值差距甚至高达20%以上. 壁面催化效应对气动热影响显著, 有限催化模型目前仍在发展当中, 其中运用气固表面有限速率化学反应动力学方法得到催化反应速率的模型更具发展潜力. 材料烧蚀会在边界层内引入质量引射效应, 同时热解气体还会与边界层中的高温空气组分发生复杂化学反应, 总体上会显著降低气动热. 高温化学非平衡效应对飞行器表面压强的影响主要存在两种机制: 一种是激波后比热比变小会引起波后压强增大; 另一种是脱体激波角变小进而减小波后压强, 对航天飞机、返回舱等典型外形的升/阻力影响相对较小, 而对力矩影响较大. 最后, 高温化学非平衡效应对高超声速湍流边界层的脉动特性产生影响, 同时使壁面摩阻增加而热流降低, 但并未改变湍流边界层的速度、密度、温度和组分浓度的标度律.

关键词 高超声速, 化学非平衡, 催化/烧蚀, 气动力/热, 湍流边界层

PACS: 47.40.Ki, 82.40.Bj, 82.65.+r, 82.40.Ck, 47.27.nb

1 引言

当飞行器以较高马赫数在大气层内飞行时, 自由来流经飞行器头部产生的激波强烈压缩后, 大量动能转化为热能, 产生显著的高温化学非平衡效应, 即随着飞行马赫数的提高脱体激波后的高温空气将逐渐出

现振动能激发、空气分子离解/复合/电离化学反应、热力学非平衡(thermal non-equilibrium)、辐射传热等一系列复杂的物理化学现象^[1]. 由于高温化学非平衡效应广泛存在于航天飞机、返回舱、弹道导弹等各类再入飞行器以及巡航、滑翔的高超声速飞行器外部绕流中, 并会显著改变飞行器的气动力/热环境, 因此长

引用格式: 莫凡, 高振勋, 蒋崇文, 等. 高温化学非平衡效应对高超声速飞行器气动力/热影响的数值研究进展. 中国科学: 物理学 力学 天文学, 2021, 51: 104703
Mo F, Gao Z X, Jiang C W, et al. Progress in the numerical study on the aerodynamic and thermal characteristics of hypersonic vehicles: High-temperature chemical non-equilibrium effect (in Chinese). Sci Sin-Phys Mech Astron, 2021, 51: 104703, doi: [10.1360/SSPMA-2021-0110](https://doi.org/10.1360/SSPMA-2021-0110)

期以来受到了国内外学者的广泛研究^[2-4].

高温化学非平衡效应引起的一系列物理化学过程将大幅改变流场状态. 首先, 振动能激发将使空气的比热容不再为常数, 而成为随温度增加而增大的变量(完全激发温度范围内), 进而令脱体激波后的温度较完全气体明显下降, 激波脱体距离减小^[1]. 之后, 空气分子的离解/电离化学反应会进一步降低激波后的温度和脱体距离, 同时由于化学反应的时间尺度与流动的时间尺度相当, 流场中很多区域会呈现显著的化学非平衡效应^[2]. 在壁面附近边界层内, 由于壁面冷却作用离解后的原子将会有一部分复合为分子, 这会改变边界层内的流动参数. 进一步, 当壁面材料对原子复合反应有明显的催化效应时, 将在壁面形成组分浓度梯度从而会引起壁面的组分扩散热流^[5]. 对于烧蚀材料, 壁面边界层内可能会存在材料烧蚀化学反应及质量引射效应, 其也会显著改变气动热环境^[5]. 此外, 由于激波后的高温激发了组分粒子的振动、电子内能模态, 在高空低密度情况下, 由于粒子间相互碰撞频率较低, 内能模态激发过程往往伴随着振动能、电子能的松弛现象, 即所谓的热力学非平衡过程. 由于多原子分子振动能级的非平衡分布会影响离解反应速率, 同时原子电子激发能级的非平衡分布会影响电离反应速率, 因此热力学非平衡过程会与化学反应发生振动-离解、电子-电离耦合效应^[6,7]. 最后, 当飞行器以第二宇宙速度再入时, 此时由于激波后的超高温而需要考虑高温空气的辐射传热, 辐射传热对流场具有冷却作用并会抑制电离反应的进行, 同时在壁面传热构成会增加辐射传热量, 典型Apollo飞船外形在其再入过程中壁面辐射热流峰值可达总热流的30%以上^[8,9].

从以上关于高温化学非平衡效应的概述可以发现, 高温化学非平衡效应可以大幅改变激波后的温度分布、气体组分构成、热力学性质等, 同时在壁面附近还可能存在着催化/烧蚀等复杂化学过程, 因此其显著影响高超声速飞行器的气动热环境. 同时, 飞行器表面的气动力特性也势必会受到高温化学非平衡效应的影响. 航天飞机在飞行过程中出现的“俯仰异常”问题是其中著名的例证之一^[10], 即大攻角配平下, 实际飞行要求机身襟翼向下偏角16°, 为地面未考虑高温化学非平衡效应时预测值7.2°的两倍之多. 因此, 本文的主要目的是针对近期开展的高温化学非平衡效应对飞行器的气动力/热影响的相关研究进行综述. 考虑到高温化

学非平衡效应中的物理化学过程众多, 本文只关注其中的变比热以及化学非平衡效应(下文称高温化学非平衡效应), 不考虑热力学非平衡及辐射传热效应.

首先对考虑高温化学非平衡效应的数值模拟方法进行介绍, 包括控制方程、热力学参数、化学动力学模型等方面. 之后, 针对飞行器的气动热问题相关研究进行了综述, 重点分析了壁面催化、烧蚀等效应下的气动热变化规律. 接下来, 研究了航天飞机、返回舱等典型飞行器气动力、力矩、静/动导数受高温化学非平衡效应的影响规律. 最后, 针对高温化学非平衡效应对高超声速湍流边界层特性影响的基础研究也进行了综述.

2 高温化学非平衡效应的数值模拟方法

与量热完全气体不同, 高温化学非平衡流动下的控制方程还需考虑化学反应各组分及其输运特性对流动的影响. 在笛卡儿坐标系下, 含化学反应流动的Navier-Stokes (N-S)方程可写成如下守恒形式:

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho Y_s)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho Y_s u_j) &= \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho D_s \frac{\partial Y_s}{\partial x_j} \right) + \dot{\omega}_s, \quad s = 1, 2, \dots, ns, \\ \frac{\partial(\rho)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_j) &= 0, \\ \frac{\partial(\rho u_i)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_i u_j + \delta_{ij} p) &= \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j}, \\ \frac{\partial(\rho E)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho H u_j) &= \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\tau_{ij} u_i + \lambda \frac{\partial T}{\partial x_j} + \sum_{s=1}^{ns} \rho D_s h_s(T) \frac{\partial Y_s}{\partial x_j} \right), \end{aligned} \quad (1)$$

式中, ρ , u_i , p 与 T 分别为气体的密度、速度、压强与静温; E 为单位(体积)质量总能量:

$$E = \sum_{s=1}^{ns} Y_s h_s + \frac{1}{2}(u^2 + v^2 + w^2) - \frac{p}{\rho}. \quad (2)$$

H 为单位体积总焓, ns 为组分总数, Y_s , D_s , h_s 与 $\dot{\omega}_s$ 分别为组分 s 的质量分数、质量扩散系数、单位质量的绝对焓值以及单位时间单位体积的化学反应质量源项, λ 为混合气体的热传导系数, τ_{ij} 为分子剪应力张量, 可写为

$$\tau_{ij} = \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \mu \frac{\partial u_i}{\partial x_i} \delta_{ij}, \quad (3)$$

其中, μ 为混合气体的分子黏性系数.

对于量热完全气体, 只有平动能和转动能处于完

全激发状态, 比热比为常数, 内能是温度的线性函数. 但对于高温化学非平衡气体, 比热比不再是常数, 内能与温度也不再是线性关系. 现阶段各反应组分的热力学函数通常是作为温度函数以多项式的形式给出, 而多项式系数则通过拟合分子动理论得到^[11,12].

输运系数模型方面, 其所包括的黏性系数、热传导系数以及组分扩散系数均为化学反应混合物状态的热力学函数. 已有大量研究表明, 不同输运系数模型将会对高超声速飞行器壁面热流产生影响^[13,14]. 然而, 由于实验设备技术条件的限制, 在高温条件下难以直接测得气体的输运系数数据^[15], 而采用气体分子动理论获得输运系数成为目前的主要手段. 但是在计算网格上, 每一点均采用分子动理论获得气体输运系数又使得计算效率大大降低, 因此现阶段计算流体力学 (Computational Fluid Dynamics, CFD) 模拟中多采用混合方法^[15], 即根据温度拟合分子动理论得到单个组分的输运系数, 之后再采用 Wilke^[16] 理论加权混合得到混合气体输运系数.

Sarma^[15]认为现阶段基于混合模型得到的黏性系数和热传导系数在不太高的温度下与实验已有较好吻合, 但是有关多组分扩散系数的情况却并不令人满意, 尤其是在处理包含多种不同组分的高超声速化学非平衡流动时. 同时从实际计算角度出发, 完整的多组分扩散系数计算对计算资源需求巨大, 而采用 Stefan-Maxwell 方程虽简化了求解过程但仍面临很大的计算量^[17], 因此学者提出了基于质量分数梯度和摩尔浓度梯度两种近似求解方法^[17]. Gnoffo 等人^[18]针对摩尔浓度梯度形式所开展的研究表明, 输运系数的形式在完全非催化壁条件下对壁面热流没有影响, 在完全催化壁条件下才会产生显著差异. Sutton 和 Gnoffo^[17]以 Stefan-Maxwell 方程为基准, 针对完全催化壁条件下返回舱壁面热流对比了几种不同的组分扩散效应近似计算方法的差异性. 研究发现基于摩尔浓度梯度的近似方法计算壁面热流偏大, 而基于质量梯度的近似方法计算壁面热流偏小, 同时这种差异性随着来流速度的增大而增大. 而根据通量守恒对于两种梯度方法修正后, 可得到与 Stefan-Maxwell 方程相吻合的结果. 另外, 利用 Schmidt 数直接由黏性系数获得组分扩散系数时, 来流速度为 6 km/s 时, Schmidt 数取 0.5 时能够获得与修正的摩尔浓度方法较为一致的结果, 但来流速度达到 10.9 km/s 时, Schmidt 数方法的结果与修正的摩尔浓度

方法结果有明显差异.

另一方面, 对于含化学反应流动的 N-S 方程, 各组分间的化学反应过程及化学反应源项一般采用相应的化学反应动力学模型描述. 而对于以 N_2/O_2 为主要成分的空气而言, 不同学者发展了一系列的化学动力学模型, 包括常用的 Dunn Kang 模型^[19]、Gupta 模型^[11]、Park85 模型、Park87 模型^[20]以及 Park91 模型^[21], 它们均包含了 11 种组分 (N_2 , O_2 , N , O , NO , N^{2+} , O^{2+} , N^+ , O^+ , NO^+ , e^-).

针对钝头体外形的高超声速流动数值模拟研究, 文献[22–24]均得出了使用 Gupta 模型激波脱体距离更远的结论. 在 HEG 系列 $Ma_\infty=8.9$ 风洞试验数据基础上, Hannemann 等人^[22]的研究表明, Gupta 模型相对 Dunn Kang 模型和 Park85 模型, 对激波脱体距离的预测相对于实验结果误差更小. Wang 等人^[23]针对 $Ma_\infty=13$ 的 ELECTRE 外形计算显示, Gupta 模型下的激波脱体距离是 Park 类模型的约 1.1 倍. 在此来流条件下, 尽管激波位置发生了变化, 但是对最终壁面的热流密度分布并没有显著影响. 有学者进一步对来流马赫数更高的钝头体开展了研究^[23], 其中 $Ma_\infty=20.5$ 时 Apollo 返回舱的研究表明, Gupta 模型下激波脱体距离同样更远, 而且驻点附近的热流密度也更低, 而 Park87 和 Park91 模型下壁面热流密度相对更高. 针对 $Ma_\infty=20.985$ 时外形更为复杂的航天飞机的研究表明, 在头部脱体激波与机翼激波的干扰处, 不同化学动力学模型将会对壁面热流密度峰值产生显著的影响, 不同模型预测热流峰值差距甚至高达 20% 以上.

对于以上不同化学反应动力学模型对热流密度预测的差异性, Wang 等人^[23]认为主要有两点原因: 第一, 各模型中 O_2 和 N_2 的复合速率具有差异性, 且 Gupta 模型中 O_2 的离解速率以及 O_2 和 N_2 的复合速率与其他模型差异较大; 第二, 对于复杂外形的高超声速飞行器, 当流场中出现激波/激波干扰以及膨胀波等复杂流场结构时, 采用不同化学反应动力学模型都将对热流峰值产生不同的影响. 同时 Wang 等人^[23]也认为, 不同化学动力学模型的差异性将随着来流马赫数的增加以及飞行器外形复杂程度的增加而不断变大.

3 高温化学非平衡效应对气动热的影响研究

与完全气体相比, 高温化学非平衡效应由于大幅

降低激波后的温度,在不考虑其他效应下壁面热流密度将会下降.然而高温化学非平衡效应可能会导致壁面附近发生催化/烧蚀等复杂物理化学过程,这些效应对气动热产生显著影响,所以本节重点关注壁面催化效应和烧蚀效应对气动热的影响.

3.1 壁面催化效应对气动热的影响

高温化学非平衡效应下空气中的分子会发生显著的离解甚至进一步的电离,而离解之后的高温空气到达飞行器表面时,表面材料会对空气中的原子和离子产生显著的催化复合作用.这种催化复合作用将改变飞行器壁面附近各组分的质量分数梯度分布,引起流场中输运特性的改变,进而显著改变壁面热流密度的分布.已有研究表明,在 $V_\infty=8$ km/s情况下,关键部位防热材料表面的催化复合效应最高将带来近50%以上的气动热载荷^[25].因此为合理地模拟高超声速飞行器壁面的热流密度分布,必须考虑壁面催化效应.

在现阶段CFD方法中,通常以催化边界条件的形式模拟壁面催化效应.完全非催化(Non-Catalytic Wall, NCW)、完全催化(Full-Catalytic Wall, FCW)和超催化^[26](Super-Catalytic Wall, SCW)是高超声速飞行器气动热环境数值模拟中最常用的三种催化边界条件,且国内外学者已进行了大量的研究^[26-28].其中,苗文博等人^[28]针对RAM-CII外形高超声速飞行器的研究表明,在 $Ma_\infty=25.9$, $H=71$ km的来流条件下,完全催化热流将比完全非催化热流高约40%.然而,以上三种组分边界条件均不能反映实际发生的壁面催化过程,实际飞行中均为有限催化情况,因此为精确预测壁面热流密度,现阶段的研究多集中在有限催化^[26](Finite-Rate Catalysis, FRC)边界条件,以反映真实的壁面催化效应.

催化复合反应速率常数计算是有限催化边界计算模型的关键,根据催化复合反应速率常数计算方法的不同,有限催化模型主要分为两类^[29]:一类是给定催化复合系数,进而得到催化复合反应速率常数;另一类是对气固催化复合反应过程进行分析和建模,运用表面有限速率化学反应动力学方法,得到催化反应速率常数.

第一类有限催化模型方法相对简单,且有大量防热材料催化系数试验数据支持,因此应用相对广泛.对于此模型关键在于催化复合系数的取值,早期学者

多采用取为常数的催化复合系数进行研究^[29],然而Inger^[30]的实验表明催化复合系数往往与壁面材料和壁面温度有关.之后,Scott^[31]和Zoby等人^[32]分别给出了实验和飞行数据修正后氧原子和氮原子催化复合系数随温度拟合的公式.莫凡等人^[33]在此基础上选取了LENS系列激波风洞下标模返回舱的实验数据,验证了有限催化模型的合理性(如图1所示),之后使用Scott^[31]和Zoby等人^[32]的随温度拟合的催化复合系数公式,研究了在辐射平衡壁温下有限催化边界条件对高超声速飞行器钝双锥热环境的影响规律.图2和3表明,对于 $Ma_\infty=26.3$, $H=77.91$ km条件下的来流,钝双锥壁面大面积温度约为1150 K,而对于驻点温度峰值,不同催化条件下差异较大,其中完全催化驻点温度约为2400 K,有限催化约为2300 K,而完全非催化约为2100 K.另一方面,对于壁面热流,完全催化的壁面热流峰值比有限催化高约21%,完全非催化的壁面热流峰值比有限催化低约29%,而在大面积区域三种不同催化条件下,热流密度差异不大.

第二类有限催化模型方法相对复杂,但近年来随着对材料表面原子结构和势能场的研究更加深入,科研人员总结出了表面催化各步反应的反应速率取决于原子与表面的碰撞频率、碰撞后的反应概率以及反应活化能^[34,35],一系列基于反应过程和微细观参数的有限速率催化模型得以建立^[36,37],能够有效预测反应各催化复合过程对气动加热的影响.李芹等人^[38]建立了包括物理/化学吸附、Eley-Rideal (ER)复合、Lang-

图1 (网络版彩图)返回舱壁面热流与压强分布^[33]

Figure 1 (Color online) Heat flux and pressure distribution on the re-entry capsule surface [33].

图 2 (网络版彩图)完全催化、有限催化和非催化壁面温度对比^[33]. 插图为准点局部温度放大示意图

Figure 2 (Color online) Comparison of wall temperature among full catalytic, finite rate catalytic and non-catalytic [33]. The insert figure is the enlarged schematic diagram of temperature near the stagnation point.

图 3 (网络版彩图)完全催化、有限催化和非催化壁面热流对比^[33]. 插图为准点局部热流密度放大示意图

Figure 3 (Color online) Comparison of wall heat flux among full catalytic, finite rate catalytic and non-catalytic [33]. The insert figure is the enlarged schematic diagram of heat flux near the stagnation point.

muir-Hinshelwood (LH)复合的有限速率四步表面多相催化模型, 模型明确了各步反应速率的计算方法, 并被用于高超声速空气圆柱绕流的气动热计算, 计算结果如图4所示. 研究表明, 四步有限速率催化模型对金属材料表面的催化系数预测准确, 对圆柱表面的气动热

预测与实验结果相近. 杨肖峰等人^[39]针对火星大气建立了表1中模拟CO₂两步催化复合机制的复杂壁面边界模型, 并以70°球锥防热大底布局为研究对象, 开展了考虑CO₂两步催化复合作用的高超声速非平衡气动加热数值模拟研究, 图5给出了计算结果. 进一步的研究表明壁面CO₂结合和O₂结合并存, 且存在相互竞争关系, 壁面催化加热量随催化效率增大而单调增加; 同时CO₂两步催化路径权重与加热量存在非单调关联, 特定权重下两种路径联合作用的热流高于单个催化结果, 热流峰值所处权重与近壁相关组分浓度相关. 最后值得注意的是, 由于第二种模型对气固催化复合反应过程进行了详细分析和建模, 加深了人们对催化复合物理化学过程的理解, 同时可信度高且易于推广至不

图 4 (网络版彩图)完全催化、有限催化及完全非催化预测的圆柱表面气动热^[38]

Figure 4 (Color online) Aerodynamic heat of cylinder surface predicted by full-catalytic, finite rate catalytic and non-catalytic models [38].

表 1 CO₂离解气体混合物壁面两步催化反应机制^[39]

Table 1 Mechanism of two step catalytic reaction on the wall of CO₂ dissociation gas mixture [39]

序号	吸附	Eley-Rideal结合	解附
1	[Ad1]: $O^{+}_{(s)} \rightarrow O_{(s)}$	[ER1]: $O + O_{(s)} \rightarrow O_{2(s)}$	[De1]: $O_{2(s)} \rightarrow O_2^{+}_{(s)}$
2	[Ad1]: $O^{+}_{(s)} \rightarrow O_{(s)}$	[ER2]: $CO + O_{(s)} \rightarrow CO_{2(s)}$	[De2]: $CO_{2(s)} \rightarrow CO_2^{+}_{(s)}$
3	[Ad2]: $CO^{+}_{(s)} \rightarrow CO_{(s)}$	[ER3]: $O + CO_{(s)} \rightarrow CO_{2(s)}$	[De2]: $CO_{2(s)} \rightarrow CO_2^{+}_{(s)}$

图 5 有限速率催化条件下壁面热流计算值与实验值的对比结果^[39]

Figure 5 Comparison of numerical simulation and experimental results of wall heat flux under finite rate catalysis [39].

同的催化材料, 因此更具发展潜力。

3.2 壁面烧蚀效应对气动热的影响

对于采用烧蚀复合材料热防护系统的高超声速飞行器以高马赫数飞行时, 驻点附近往往面临着严重的气动加热。在气动加热初期, 烧蚀复合材料依靠自身的热容吸热消耗掉热传导进入材料内部的热量^[40]。当温度达到烧蚀复合材料的热解温度时, 材料中的高分子聚合物吸收热量发生热解^[41]。热解产生的气体及其他烧蚀气体从表面逸出引射进入边界层, 阻塞进入材料内部的部分气动加热热量, 即为热阻塞效应^[42,43]。而进入边界层的热解气体还会与边界层中的 O_2 等发生一系列复杂的化学反应^[41], 进一步影响高超声速飞行器的气动热环境。国内外针对烧蚀效应对高超声速飞行器气动热环境的影响均开展了一系列的研究, 其中碳基酚醛类烧蚀材料(Phenolic Impregnated Carbon Ablator, PICA)由于结构重量轻、热传导率低等优点而被广泛用于高超声速再入飞行器热防护中, 并成为各国学者研究的重点。

Olynick^[44]首次将辐射平衡壁面与烧蚀效应耦合, 研究了返回舱以12.6 km/s的再入速度进入地球大气后, PICA类热防护材料的烧蚀效应对返回舱气动热的影响。研究表明, 返回舱驻点热流和温度随再入时间呈先上升后下降的规律, 且二者峰值出现在 $V_\infty=11$ km/s, $H=60$ km的弹道点上, 同时与未烧蚀结果对比, 烧蚀效

应使得返回舱驻点温度峰值下降约13%, 热流峰值下降约33%。

之后随着人们对烧蚀效应研究的不断深入, 学者提出了多种不同的烧蚀化学动力学模型。为此, Martin等人^[45]针对三种常用的PICA类烧蚀材料的化学动力学模型进行了对比研究, 包括了Park等人^[46]的20组分模型、Suzuki等人^[47]的26组分模型以及Olynick等人^[48]的18组分模型。图6对比结果表明Suzuki模型与其他两种模型在壁面热流预测上差异巨大, 而Park模型和Olynick模型虽然在驻点附近热流一致, 但在下游区域仍出现了较大的差异性。因此显然需要一个更全面的化学反应动力学模型来描述这样一个物理化学过程。对此, Martin等人^[45]基于最新燃烧研究中的反应速率组装成了一个基本模型, 之后通过敏感性分析对基元反应进行简化并与实验结果对比, 得到了最终的包括38组分、158反应的化学动力学模型。Martin等人^[45]认为此模型可以更准确地描述地球大气再入条件下, 碳基酚醛类热防护材料烧蚀效应的化学过程以及对飞行器气动热环境的影响。

近两年, 国内也兴起了针对PICA类热防护材料烧蚀效应下所产生的质量引射对飞行器气动热的影响研究。其中, 栗斯尧等人^[49]针对ELECTRE球锥标模外形, 研究了头部区域存在质量引射时对其气动热环境的影响规律。研究表明头部区域质量引射效应将显著降低驻点附近热流密度, 且热流密度随着质量引射通量增加而线性降低, 同时对于弹体下游无引射区域, 头部质量引射也会导致其热流密度出现一定程度减小。

图 6 (网络版彩图)三种不同烧蚀模型热流对比^[45]

Figure 6 (Color online) Comparison of the total heat flux for the three ablation models [45].

4 高温化学非平衡效应对气动力的影响研究

高温化学非平衡效应通过改变飞行器表面的压强及摩擦系数分布而整体上影响飞行器气动力特性, 因此下文首先关注高温化学非平衡效应对飞行器表面的压强和摩擦系数的影响规律, 之后再介绍对飞行器升力、阻力及力矩等特性的影响.

4.1 高温化学非平衡效应对表面压强和摩擦系数分布的影响

施方成等人^[50]针对航天飞机外形开展了高温化学非平衡效应的影响研究, 重点分析了壁面压强分布的变化规律. 其数值实验以如图7所示的二维航天飞机模型为研究对象, 分别采用量热完全气体模型(Calorically Perfect Gas, CPG)、热完全气体模型(Thermally Perfect Gas, TPG)、化学反应混合气体模型(Chemical Reaction Gas, CRG)开展计算, 分析变比热效应与化学非平衡效应影响表面压强的机理. 图8给出了 $Ma_\infty=11.9$ 、攻角 $\alpha=38.3^\circ$ 和 $Ma_\infty=15.7$ 、攻角 $\alpha=42^\circ$ 来流条件下的压强分布对比(均为等温壁 $T_w=300\text{ K}$), 可以发现, 在下表面迎风区, 不同气体模型的计算结果呈现明显的差异. 主要表现为: 变比热效应与化学非平衡效应均会导致驻点区表面压强增大, 但下游腹部区表面压强减小. 在 $Ma_\infty=11.9$ 时下壁面的压强变化大部分由变比热效应引起, 而 $Ma_\infty=15.7$ 时变比热效应引起的压强变化程度仍然略大于化学反应引起的变化量.

图7 航天飞机二维简化外形^[50]

Figure 7 Two dimensional simplified shape of space shuttle [50].

为了解释以上压强变化产生的物理机理, 施方成等人^[50]首先引入了樊菁^[51]发展的考虑正激波前后比热比变化的双比热激波关系式, 理论分析发现激波后比热比变小可令波后的压强较对应的完全气体结果明显变大. 图9将数值模拟结果中脱体激波后的压强分布提取, 并与双比热关系式预测结果对比, 可以看出预测的正激波后驻点压强与数值结果吻合较好, 从而解释了变比热与化学非平衡效应令驻点区域压强变大的机理. 然而, 以上机理并不适用于解释下游腹部大面积区压强变小的结果, 因此引入了另外一个物理机制^[50]: 变比热和化学非平衡效应会令激波脱体距离变小, 从而下游脱体斜激波的激波角也会相应地减小(如图10所示), 激波角减小自然会使波后的压强变小, 从而导致腹部大面积区表面压强变小. 因此, 对于下游脱体斜激波后的压强, 存在两种物理机制: 一种是激波后比热

图8 (网络版彩图)航天机表面压强系数的变化曲线^[50]. 插图为驻点局部压强系数放大示意图. (a) $Ma_\infty=11.9$, $\alpha=38.3^\circ$; (b) $Ma_\infty=15.7$, $\alpha=42^\circ$

Figure 8 (Color online) Pressure coefficient distribution on spacecraft surface [50]. The insert figure is the enlarged schematic diagram of the pressure coefficient around the stagnation point. (a) $Ma_\infty=11.9$, $\alpha=38.3^\circ$; (b) $Ma_\infty=15.7$, $\alpha=42^\circ$.

图 9 (网络版彩图)脱体激波后压强分布曲线^[50]. 插图为驻点局部压强系数放大示意图. (a) $Ma_\infty=11.9$, $\alpha=38.3^\circ$; (b) $Ma_\infty=15.7$, $\alpha=42^\circ$

Figure 9 (Color online) Pressure distribution after shock wave [50]. The insert figure is the enlarged schematic diagram of the pressure coefficient around the stagnation point. (a) $Ma_\infty=11.9$, $\alpha=38.3^\circ$; (b) $Ma_\infty=15.7$, $\alpha=42^\circ$.

图 10 (网络版彩图) $Ma_\infty=11.9$ 时脱体激波位置对比^[50]. (a) CPG和TPG; (b) TPG和CRG

Figure 10 (Color online) Comparison of the positions of shock wave ($Ma_\infty=11.9$) [50]. (a) CPG and TPG; (b) TPG and CRG.

比变小会引起波后压强增大的趋势; 另一种是激波角变小进而减小波后压强的趋势. 当激波角变小占主导时, 下游激波后压强在变比热效应下则会降低. 由以上高温化学非平衡效应影响表面压强变化的机制可以推断, 高温化学非平衡效应并不总是引起飞行器抬头力矩增加, 这与飞行器的外形、飞行攻角、质心位置均相关.

对于壁面摩擦系数受高温化学非平衡效应的影响规律, 目前的研究较少. 张子健等人^[52]利用理论分析与数值模拟相结合的两步渐进方法, 研究了 $Ma_\infty=10$, $T_\infty=250\text{ K}$, $P_\infty=287\text{ Pa}$ 来流条件下, 层流边界层中振动激发变比热效应对二维斜劈的气动力/热特性的影响

规律. 研究发现由于斜激波后的变比热效应令温度显著降低而导致黏性系数显著变小, 同时密度显著变大, 从而边界层外缘的单位雷诺数升高、边界层厚度减小、速度梯度变大, 最终导致壁面摩擦系数升高, 但升高的幅度在 2% 以内. 李昭辉和高振勋^[53]针对来流马赫数 15 和 20 的平板湍流边界层开展了数值模拟研究, 同时考虑了变比热和化学反应效应. 与完全气体对比结果显示, 变比热效应和高温化学非平衡效应均使表面摩擦系数增大. 其中变比热效应使表面摩擦系数增幅较大, 而在此基础上发生的化学反应却令表面摩擦系数较变比热气体效应结果有所降低, 但仍大于完全气体的结果.

4.2 高温化学非平衡效应对典型飞行器气动力/力矩的影响

早在航天飞机的研制过程中已经发现高温化学非平衡效应会对飞行器气动特性产生明显影响. 航天飞机第一次飞行试验(STS-1)的数据表明^[54], 实际飞行的体襟翼偏角与根据风洞实验并以来流条件外推气动力特性而得到的体襟翼偏角预估值相比, 在 $Ma_\infty=12$ 时开始出现差异, 而当 Ma_∞ 达到16时, 实际飞行的体襟翼偏角为 16° , 明显大于预估的 7.2° . 后续的研究^[55-57]表明, 这一差异主要是由于风洞实验中未考虑高温化学非平衡效应, 而在实际飞行中高温化学非平衡效应诱导了附加的抬头力矩. 事实上, 从图10中二维航天飞机计算结果来看, 脱体斜激波角变小导致的下表面压强明显变小是高温化学非平衡效应增加抬头力矩的物理原因. 程晓丽等人^[58]对类航天飞机外形在 $Ma_\infty=20$ 、不同攻角和舵偏角条件下开展了详细的数值模拟分析, 发现在小攻角时高温化学非平衡附加的是低头力矩, 而在大攻角时才会附加抬头力矩. 对升力和阻力计算结果分析发现, 高温化学非平衡效应会使阻力系数降低, 小攻角升力会升高而大攻角升力反而会降低, 总体上高温化学非平衡效应对升阻力的改变在5%以下, 影响程度较小^[58].

针对返回舱外形气动力特性受高温化学非平衡的影响, 国内外学者也开展了广泛的研究, 包括地球大气以及火星大气不同环境^[59-66]. 针对联盟号返回舱^[63], 在 $Ma_\infty=30$, $\alpha=-16^\circ$ — -26° 范围内数值研究了返回舱气动特性变化规律, 同样发现高温化学非平衡效应引起返回舱前体迎风面压力系数增加和后体迎风面压力系数降低, 造成返回器升力系数增大约6%, 阻力系数增大约1.3%—3.3%, 升阻比增大3%左右, 同时引起低头力矩增大、配平攻角减小约 2.5° . 针对火星探路者返回舱外形在火星大气环境下分析了高温化学非平衡效应的影响^[65], 研究发现: 法向力基本不受影响而轴向力最大幅度会增加5.6%; 对于俯仰力矩, 在 -15° 以下的迎角范围内会附加抬头力矩, 而 -15° 以上的迎角则会附加低头力矩, 纵向压心系数最大有约58%的变化量.

除以上力/力矩特性的研究, 还对典型高超声速飞行器的静/动导数受高温化学非平衡效应的影响规律开展了研究^[67,68]. 选择了欧洲EXPERT钝头再入飞行

器外形, 基于Etkin模型的强迫振荡法, 在马赫数7.8—16的范围内辨识出其静/动稳定导数值^[68]. 通过与相应的完全气体结果对比发现, 高温化学非平衡效应对俯仰静/动稳定导数的影响是明显的. 从俯仰静导数来看, $Ma_\infty=7.8$ 条件下由于高温化学非平衡效应不强, 俯仰静导数只相差2.24%, 而 $Ma_\infty=16$ 时俯仰静导数相差多达53%. 各个飞行条件下, 考虑高温非平衡效应后俯仰静导数值的变化趋势均为负值变小, 因此高温化学非平衡效应实际上有助于提高EXPERT飞行器的俯仰静稳定性. 对俯仰动导数的影响趋势与静导数类似, 在 $Ma_\infty=7.8$ 条件下相差14%, 而 $Ma_\infty=16$ 时相差多达41.62%. 同样地, 高温化学非平衡效应也令俯仰动导数的负值变小, 说明也增加了EXPERT飞行器的动稳定性.

5 高温化学非平衡效应对高超声速湍流边界层影响研究

对于现阶段的高超声速飞行器, 其飞行高度往往较高, 表面流动也多为层流, 同时强激波后及壁面附近也将伴随着显著的高温化学非平衡效应. 因此以往对高温化学非平衡效应的研究多针对层流流动. 但是随着高超声速飞行器的不断发展, 未来高超声速飞行器将可能在25—40 km相对低的高度以较高的马赫数飞行. 此时, 由于来流雷诺数较高, 飞行器表面的层流边界层将进一步转换形成湍流边界层, 在此条件下高温化学非平衡效应对湍流边界层结构和湍流统计性质产生影响, 进而改变高超声速飞行器表面压强和气动力/热分布, 因此需开展高温化学非平衡效应与湍流的耦合作用研究.

然而, 由于受限于研究手段及应用需求, 国内外针对高温化学非平衡效应与湍流的耦合作用研究尚少, 数值模拟是研究这一问题的主要手段之一. 而针对湍流的数值模拟方法, 常用的雷诺平均N-S方程(Reynolds Average Navier-Stokes, RANS)和大涡模拟(Large Eddy Simulation, LES)由于引入了模型假设, 因此在对于包含高温化学非平衡效应与湍流耦合作用流场的数值模拟中普适性未知. 而直接数值模拟(Direct Numerical Simulation, DNS)方法无需引入任何模型, 因此更加适合用于开展湍流边界层与高温化学非平衡效应耦合现象的机理研究.

国外首先采用DNS方法开展了高温非平衡效应与湍流的耦合作用研究. Duan和Martín^[69]以马赫数为21和30 km高度下流过35°和8°楔形激波后的湍流边界层为背景流动, 分别设计了低焓和高焓的来流条件, 并采用一致的高温化学非平衡效应模型开展了DNS研究. 其中低焓来流马赫数为3.4, 高焓来流马赫数为9.4, 分别用以表征较弱的高温非平衡效应和较强的高温非平衡效应. 基于以上的来流条件, Duan和Martín^[69]发现, 高焓的边界层与低焓的边界层非常相似, 许多低焓流动的标度关系, 如平均速度的Van-Driest变换、Morkovin标度以及强雷诺比拟, 都可以在去除量热完全气体假设后推广到高焓流动. 此外, Duan和Martín^[69]还就高温化学非平衡效应对湍流统计量和气动力热的影响进行了研究, 其中气动力热方面重点对比了低焓和高焓来流下平板壁面的摩阻和热流密度. 结果表明: 随着来流总焓的增加, 高温化学非平衡效应更加显著, 壁面的摩阻和热流密度显著增加, 同时壁面处的摩擦应力脉动及热流密度脉动也将增强. 然而, 由于低焓来流和高焓来流下的马赫数、雷诺数等并不一致, 对比湍流统计量结果时可能由于来流条件的差异性而产生影响. 因此, Duan和Martín^[69]的DNS结果无法准确分析高温化学非平衡效应对湍流边界层中湍流统计量和气动力热的影响.

国内采用DNS方法研究高温化学非平衡效应与湍流的耦合作用起步较晚, 但已经有了一定的研究成果. 吴正园等人^[70]设计了 $Ma_\infty=7$, $P_\infty=50000$ Pa, $T_\infty=3000$ K的高焓来流条件, 并分别采用量热完全气体模型和化学反应模型开展了此条件下高超声速湍流平板边界层的DNS研究, 分析了高温化学非平衡效应对湍流统计量和气动力热等的影响规律. 图11给出了入口脉动边界所采用的湍流库方法, 并使用了Duan和Martín^[69]的方法进行转换, 最终计算得到的化学反应模型DNS瞬时流场温度云图如图12所示.

湍流统计平均量方面, 吴正园等人^[70]的研究表明高温化学非平衡效应将使边界层内的平均温度显著降低(图13), 平均密度升高, 而在边界层外高温化学非平衡效应不明显, 对平均温度和平均密度影响不大. 而对于湍流脉动量, 高温化学非平衡效应对温度脉动有较强的抑制作用(图14), 而对流向及壁面法向速度脉动和密度脉动的影响趋势在近壁面区域和边界层外层是相反的. 在近壁面区域, 流向及壁面法向速度脉动和密

图 11 (网络版彩图)入口湍流边界生成方法示意图^[70]

Figure 11 (Color online) Illustration of library based turbulent inflow generation method [70].

图 12 (网络版彩图)化学反应模型DNS瞬时流场温度云图^[70]

Figure 12 (Color online) Instantaneous temperature contour of DNS with chemical reaction model [70].

图 13 (网络版彩图)平均温度结果对比^[70]

Figure 13 (Color online) Comparison of means temperature results [70].

度脉动都被增强(图15), 而边界层外层, 高温化学非平衡效应则会抑制流向和壁面法向速度脉动和密度脉动. 但展向速度脉动在整个边界层内都被降低. 对于边

图 14 (网络版彩图)脉动均方根温度结果对比^[70]

Figure 14 (Color online) Comparison of root mean square (RMS) temperature results [70].

图 15 (网络版彩图)壁面法向速度脉动均方根对比^[70]

Figure 15 (Color online) Comparison of RMS of wall-normal velocity results [70].

界层内的雷诺应力(图16), 在 $y^+ < 500$ 的近壁区域内, 高温化学非平衡效应明显增大了雷诺应力值; 而在 $y^+ > 500$ 的区域, 高温化学非平衡效应反而使雷诺应力值减小。

湍流标度律作为一种湍流统计性质的普遍规律, 在湍流统计研究中具有非常重要的地位。为研究高温化学非平衡效应对湍流标度率的影响, 刘朋欣等人^[71]选取高超声速楔形体头部斜激波后的流动状态开展了量热完全气体模型、空气化学反应模型下高超声速湍流平板边界层的直接数值模拟研究, 并对高温化学非平衡湍流边界层的标度律进行了重点分析。其研究表明经典标度律理论在高温化学非平衡湍流边界层中仍然成立。在对数区, 各流动状态变量、各组分质量分数的Extended Self-Similarity (ESS)相对标度指数均介于K41理论值与SL理论值之间, 同时各组分质量分数的

ESS相对标度指数与SL理论值符合较好, 体现出组分时空分布具有较强的各向异性。

对于高温化学非平衡效应对平板壁面气动力/热的影响, 吴正园等人^[70]的研究表明, 高温化学非平衡效应使壁面平均压强增大, 并且增强了湍流引起的壁面压强脉动; 对于摩阻方面, 由于在 $y^+ < 500$ 的近壁区域内, 高温化学非平衡效应明显增大了雷诺应力值, 进而增强了湍流引起的动量交换, 从而使壁面处速度梯度增加, 最终使摩擦阻力增加(图17)。同时高温化学非平衡效应也将使壁面处温度梯度大幅降低, 因此最终壁面的平均热流密度下降(图18)。

6 结论

本文主要针对高温化学非平衡效应对高超声速飞

图 16 (网络版彩图)平均雷诺应力 $-\rho u'v'$ 结果对比^[70]

Figure 16 (Color online) Comparison of turbulent Reynolds stress $-\rho u'v'$ [70].

图 17 (网络版彩图)平均摩阻结果对比^[70]

Figure 17 (Color online) Comparison of mean skin friction results [70].

图 18 (网络版彩图)平均壁面热流结果对比^[70]

Figure 18 (Color online) Comparison of mean wall heat flux results [70].

行器的气动力热影响研究进行了综述. 主要的结论包括:

(1) 在高温化学非平衡流动的数值模拟中, 组分扩散系数模型会对完全催化壁条件下的气动热结果产生影响; 常用的Gupta的化学动力学模型比Dunn-Kang和Park的模型计算的脱体距离普遍更大, 对于激波/激波干扰等复杂流动区域, 不同化学动力学模型预测热流峰值差距甚至高达20%以上.

(2) 壁面催化效应对气动热影响显著, 目前发展的

有限催化模型主要有两类: 一类是基于催化复合系数获得催化反应速率; 另一类是运用气固表面有限速率化学反应动力学方法得到催化反应速率, 后者更具发展潜力. 材料烧蚀会在边界层内引入质量引射效应, 同时热解气体还会与边界层中的高温空气组分发生复杂化学反应, 总体上会显著降低气动热.

(3) 高温化学非平衡效应对飞行器表面压强的影响主要存在两种机制: 一种是激波后比热比变小会引起波后压强增大; 另一种是脱体激波角变小进而减小波后压强, 对飞行器气动力的影响趋势与飞行器外形、飞行攻角、质心位置均相关. 高温化学非平衡效应对航天飞机、返回舱等典型外形的升/阻力影响相对较小, 而对力矩影响较大. 此外, 针对EXPERT类飞行器的俯仰静/动导数的研究表明, 高温化学非平衡效应将会提高其俯仰静/动稳定性.

(4) 高温化学非平衡效应对高超声速湍流边界层的影响主要体现在: 抑制温度脉动、增强壁面压强脉动; 在边界层内层增强速度、密度脉动和雷诺应力, 而在边界层外层会对这些量产生抑制效应; 壁面摩擦增加而热流降低. 然而, 高温化学非平衡效应并未改变湍流边界层的速度、密度、温度和组分浓度的标度律.

参考文献

- Anderson J D. Hypersonic and High-Temperature Gas Dynamics. 2nd ed. Virginia: AIAA, 2006. 459
- Stalker R J. Hypervelocity aerodynamics with chemical nonequilibrium. *Annu Rev Fluid Mech*, 1989, 21: 37–60
- Tirsky G A. Up-to-date gasdynamic models of hypersonic aerodynamics and heat transfer with real gas properties. *Annu Rev Fluid Mech*, 1993, 25: 151–181
- Bertin J J, Cummings R M. Critical hypersonic aerothermodynamic Phenomena. *Annu Rev Fluid Mech*, 2006, 38: 129–157
- Candler G V. Rate effects in hypersonic flows. *Annu Rev Fluid Mech*, 2019, 51: 379–402
- Adamovich I V, Macheret S O, Rich J W, et al. Vibrational relaxation and dissociation behind shock waves. Part 1: Kinetic rate models. *AIAA J*, 1995, 33: 1064–1069
- Carlson L A, Gally T A. Effect of electron temperature and impact ionization on martian return AOTV flowfields. *J Thermophys Heat Transf*, 1991, 5: 9–20
- Johnston C O. Nonequilibrium Shock-Layer Radiative Heating for Earth and Titan Entry. Dissertation for Doctoral Degree. Virginia: Virginia Polytechnic Institute and State University, 2006
- Ried R C, Rochelle W C, Milhoan J D. Radiative Heating to the Apollo Command Module: Engineering Prediction and Flight Measurement. Technical Memorandum, Thermodynamics and Combustion, NASA. 1972
- Maus J R, Griffith B J, Szema K Y, et al. Hypersonic Mach number and real gas effects on Space Shuttle Orbiteraerodynamics. *J Spacecr Rockets*, 1984, 21: 136–141
- Gupta R N, Yos J M, Thompson R A, et al. 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. Technical Memorandum, Fluid Mechanics and Heat Transfer, NASA.

1990

- 12 McBride B J, Zehe M J, Gordon S. NASA Glenn Coefficients for Calculating Thermodynamic Properties of Individual Species. Technical Report, Physics of Elementary Particles and Fields, Glenn Research Center. 2002
- 13 Brenner G, Gerhold T, Hannemann K, et al. Numerical simulation of shock/shock and shock-wave/boundary-layer interactions in hypersonic flows. *Comput Fluids*, 1993, 22: 427–439
- 14 Brenner G, Prinz U. Numerical simulation of chemical and thermal nonequilibrium flows after compression shocks. In: AIAA 27th Thermophysics Conference. Nashville: AIAA, 1992-2879
- 15 Sarma G S R. Physico-chemical modelling in hypersonic flow simulation. *Prog Aerosp Sci*, 2000, 36: 281–349
- 16 Wilke C R. A viscosity equation for gas mixtures. *J Chem Phys*, 1950, 18: 517–519
- 17 Sutton K, Gnoffo P A. Multi-component diffusion with application to computational aerothermodynamics. In: 7th AIAA/ASME Joint Thermophysics and Heat Transfer Conference. Albuquerque: AIAA, 1998-2575
- 18 Gnoffo P A, Weilmuenster K J, Hamilton II H H. Computational aerothermodynamic design issues for hypersonic vehicles. In: AIAA 32nd Thermophysics Conference. Atlanta: AIAA, 1997-2473
- 19 Dunn M G, Kang S W. Theoretical and Experimental Studies of Reentry Plasmas. Contractor Report, Communications, Langley Research Center. 1973
- 20 Park C. Assessment of a two-temperature kinetic model for dissociating and weakly ionizing nitrogen. *J Thermophys Heat Transf*, 1987, 2: 8–16
- 21 Park C, Howe J T, Jaffe R L, et al. Chemical kinetic problems of future NASA missions. In: 29th Aerospace Sciences Meeting. Reno: AIAA, 1991-0464
- 22 Hannemann K, Schramm J M, Karl S, et al. Cylinder shock layer density profiles measured in high enthalpy flows in HEG. In: 22nd AIAA Aerodynamic Measurement Technology and Ground Testing Conference. St. Louis: AIAA, 2002-2913
- 23 Wang X Y, Yan C, Zheng Y K, et al. Assessment of chemical kinetic models on hypersonic flow heat transfer. *Int J Heat Mass Transf*, 2017, 111: 356–366
- 24 Hao J, Wang J, Lee C. Numerical study of hypersonic flows over reentry configurations with different chemical nonequilibrium models. *Acta Astronaut*, 2016, 126: 1–10
- 25 Dong W Z, Gao T S, Ding M S, et al. Numerical study of coupled surface temperature distribution and aerodynamic heat for hypersonic vehicles (in Chinese). *Acta Aeronaut Astronaut Sin*, 2015, 36(1): 311–324 [董维中, 高铁锁, 丁明松, 等. 高超声速飞行器表面温度分布与气动热耦合数值研究. *航空学报*, 2015, 36(1): 311–324]
- 26 Barbato M, Giordano D, Muylaert J, et al. Comparison of catalytic wall conditions for hypersonic flow. *J Spacecr Rockets*, 1996, 33: 620–627
- 27 Zhou K, Zhu X J, Ou D B, et al. Wall catalytic effects on aerodynamic heat of hypersonic flow (in Chinese). *Acta Aerodyn Sin*, 2020, 38(4): 660–667 [周凯, 朱晓军, 欧东斌, 等. 壁面催化效应对高超声速气动热影响研究. *空气动力学学报*, 2020, 38(4): 660–667]
- 28 Miao W B, Cheng X L, Ai B C. Flow configuration effects on mass diffusion part of heat-flux in thermal-chemical flows (in Chinese). *Acta Aerodyn Sin*, 2011, 29(4): 476–480 [苗文博, 程晓丽, 艾邦成. 来流条件对热流组分扩散项影响效应分析. *空气动力学学报*, 2011, 29(4): 476–480]
- 29 Ding M S, Dong W Z, Gao T S, et al. Computational analysis of influence of differences in local catalytic properties on aero-thermal environment (in Chinese). *Acta Aeronaut Astronaut Sin*, 2018, 39(3): 121588 [丁明松, 董维中, 高铁锁, 等. 局部催化特性差异对气动热环境影响的计算分析. *航空学报*, 2018, 39(3): 121588]
- 30 Inger G R. Nonequilibrium Hypersonic Stagnation Flow at Low Reynolds Numbers. Technical Report, EI Segundo, Aerospace Corporation. 1964
- 31 Scott C D. Catalytic recombination of nitrogen and oxygen on high-temperature. In: AIAA 15th Thermophysics Conference. Snowmass: AIAA, 1981-1477
- 32 Zoby E V, Gupta R N, Simmonds A L. Temperature-dependent reaction rate expressions for oxygen recombination. In: 22nd Aerospace Sciences Meeting. Reno: AIAA, 1984-0224
- 33 Mo F, Wang S Z, Gao Z X. Numerical simulation of finite catalysis model at the balanced radiation wall (in Chinese). *Phys Gases*, 2021, doi: 10.19527/j.cnki.2096-1642.0896 [莫凡, 王锁柱, 高振勋. 辐射平衡壁温下有限催化模型数值模拟. *气体物理*, 2021, doi: 10.19527/j.cnki.2096-1642.0896]
- 34 Cacciatore M, Rutigliano M, Billing G. Energy flows, recombination coefficients and dynamics for oxygen recombination on silica surfaces. In: 7th AIAA/ASME Joint Thermophysics and Heat Transfer Conference. Albuquerque: AIAA, 1998-2843

- 35 Bedra L, Rutigliano M, Balat-Pichelin M, et al. Atomic oxygen recombination on quartz at high temperature: Experiments and molecular dynamics simulation. *Langmuir*, 2006, 22: 7208–7216
- 36 Barbato M, Reggiani S, Bruno C, et al. Model for heterogeneous catalysis on metal surfaces with applications to hypersonic flows. *J Thermophys Heat Transf*, 2000, 14: 412–420
- 37 Armenise I, Barbato M, Capitelli M, et al. State-to-state catalytic models, kinetics, and transport in hypersonic boundary layers. *J Thermophys Heat Transf*, 2006, 20: 465–476
- 38 Li Q, Yang X F, Dong W, et al. Numerical simulation on influence of adsorption on surface heterogeneous catalysis process of hypersonic vehicle (in Chinese). *J Shanghai Jiaotong Univ*, 2021, 55(5): 52–61 [李芹, 杨肖峰, 董威, 等. 高超声速飞行器表面吸附特性对多相催化过程影响的数值模拟. 上海交通大学学报, 2021, 55(5): 52–61]
- 39 Yang X F, Gui Y W, Qiu B, et al. Numerical investigation on influence of surface two-step catalytic mechanism on non-equilibrium aerodynamic heating for high-enthalpy CO₂ flow (in Chinese). *J Natl Univ Def Technol*, 2020, 42(1): 108–116 [杨肖峰, 桂业伟, 邱波, 等. 高焓CO₂气流壁面两步催化机制对非平衡气动加热影响的数值模拟. 国防科技大学学报, 2020, 42(1): 108–116]
- 40 Jiang G Q, Liu L Y. *Heat Transfer of Hypersonic Gas and Ablation Thermal Protection* (in Chinese). Beijing: National Defense Industry Press, 2003 [姜贵庆, 刘连元. 高速气流传热与烧蚀热防护. 北京: 国防工业出版社, 2003]
- 41 Shi S B, Liang J, Liu Z G, et al. Endothermic mechanism of silica/phenolic composite under ablative environment (in Chinese). *J Solid Rock Technol*, 2013, 36(1): 113–118 [时圣波, 梁军, 刘志刚, 等. 高硅氧/酚醛复合材料烧蚀环境下的吸热机理. 固体火箭技术, 2013, 36(1): 113–118]
- 42 Amar A J, Blackwell B F, Edwards J R. Development and verification of a one-dimensional ablation code including pyrolysis gas flow. *J Thermophys Heat Transf*, 2009, 23: 59–71
- 43 Gokcen T, Chen Y K, Skokova K A, et al. Computational analysis of arc-jet stagnation tests including ablation and shape change. In: 41st AIAA Thermophysics Conference. San Antonio: AIAA, 2009-3592
- 44 Olynick D, Chen Y K, Tauber M. Forebody TPS sizing with radiation and ablation for the Stardust Sample Return Capsule. In: AIAA 32nd Thermophysics Conference. Atlanta: AIAA, 1997-2474
- 45 Martin A, Cozmuta I, Wright M J, et al. Kinetic rates for gas-phase chemistry of phenolic-based carbon ablator in atmospheric air. *J Thermophys Heat Transf*, 2015, 29: 222–240
- 46 Park C, Jaffe R L, Partridge H. Chemical-kinetic parameters of hyperbolic earth entry. *J Thermophys Heat Transf*, 2001, 15: 76–90
- 47 Suzuki K, Kubota H, Fujita K, et al. Chemical non-equilibrium ablation analysis of MUSES-C super-orbital reentry capsule. In: AIAA 32nd Thermophysics Conference. Atlanta: AIAA, 1997-2481
- 48 Olynick D, Chen Y K, Tauber M E. Aerothermodynamics of the stardust sample return capsule. *J Spacecr Rockets*, 1999, 36: 442–462
- 49 Su S Y, Shi Y L, Liu S, et al. Numerical study on the effect of head mass ejection on aerodynamic heating (in Chinese). In: Proceedings of the 19th National Hypersonic Aerodynamic/Thermal Symposium, 2020 [粟斯尧, 石义雷, 柳森, 等. 头部质量引射对气动加热影响数值研究. 见: 第十九届全国高超声速气动/热学术交流会论文集, 2020]
- 50 Shi F C, Gao Z X, Jiang C W, et al. Numerical study on influencing mechanisms of high-temperature effects on aerodynamic performance of re-entry vehicle (in Chinese). In: The 10th National Conference on Fluid Mechanics. Beijing: Chinese Society of Theoretical and Applied Mechanics, 2018 [施方成, 高振勋, 蒋崇文, 等. 高温气体效应对带翼再入飞行器气动特性影响机制研究. 见: 第十届全国流体力学学术会议论文摘要集. 北京: 中国力学学会, 2018]
- 51 Fan J. Criteria on high temperature gas effects around hypersonic vehicles (in Chinese). *Chin J Theor Appl Mech*, 2010, 42(4): 591–596 [樊菁. 高超声速高温气体效应判据. 力学学报, 2010, 42(4): 591–596]
- 52 Zhang Z J, Liu Y F, Jiang Z L. Effect of vibration excitation on hypersonic aerodynamic and aerothermodynamic (in Chinese). *Chin J Theor Appl Mech*, 2017, 49(3): 616–626 [张子健, 刘云峰, 姜宗林. 振动激发对高超声速气动/热影响. 力学学报, 2017, 49(3): 616–626]
- 53 Li Z H, Gao Z X. Study on the influence of high temperature real gas effect on the distribution of surface pressure and friction coefficient (in Chinese). In: Abstracts of Chinese mechanics Conference. Beijing: Chinese Society of Theoretical and Applied Mechanics, 2015 [李昭辉, 高振勋. 高温真实气体效应对表面压强及摩擦系数分布的影响规律研究. 见: 中国力学大会论文摘要集. 北京: 中国力学学会, 2015]
- 54 Kirsten P W, Richardson D F, Wilson C M. Predicted and flight test results of the performance, stability and control of the Space Shuttle from reentry to landing. In: *Shuttle Performance: Lessons Learned*. Hampton: AIAA, 1983
- 55 Maus J R, Griffith B J, Szema K Y. Hypersonic Mach number and real gas effects on space shuttle orbiter aerodynamics. In: 21st Aerospace

Sciences Meeting. Reno: AIAA, 1983-0343

- 56 Weilmuenster K J, Gnoffo P A, Greene F A. Navier-Stokes simulations of the shuttle orbiter aerodynamic characteristics with emphasis on pitch trim and body flap. In: AIAA 28th Thermophysics Conference. Orlando: AIAA, 1993-2814
- 57 Brauckmann G J, Paulson John W J, Weilmuenster K J. Experimental and computational analysis of Shuttle orbiter hypersonic trim anomaly. *J Spacecr Rockets*, 1995, 32: 758–764
- 58 Cheng X L, Miao W B, Zhou W J. Effects of real gas on aerodynamic characteristics of a hypersonic orbiter (in Chinese). *J Astronaut*, 2007, 28(2): 259–264 [程晓丽, 苗文博, 周伟江. 真实气体效应对高超声速轨道器气动特性的影响. 宇航学报, 2007, 28(2): 259–264]
- 59 Ivanov M S, Markelov G N, Gimelshein S F, et al. High-altitude capsule aerodynamics with real gas effects. *J Spacecr Rockets*, 1998, 35: 16–22
- 60 Pezzilella G, Votta R. Finite rate chemistry effects on the high-altitude aerodynamics of an Apollo-shaped reentry capsule. In: 16th AIAA/DLR/DGLR International Space Planes and Hypersonic Systems and Technologies Conference. Bremen: AIAA, 2009-7306
- 61 Horvath T J, O'Connell T F, Cheatwood F M N, et al. Experimental hypersonic aerodynamic characteristics of Mars surveyor 2001 precision lander with flap. *J Spacecr Rockets*, 2006, 43: 270–281
- 62 Moreira F C, Wolf W R, Azevedo J L F. Investigation of thermodynamic non-equilibrium in hypersonic flow over the Mars Pathfinder capsule. In: AIAA Scitech 2021 Forum. Virtual Event: AIAA, 2021-0491
- 63 Lv J M, Pan H L, Miao W B, et al. Impact of chemical non-equilibrium effect on aerodynamic characteristics of reentry capsules (in Chinese). *Spacecr Recov Remot Sens*, 2014, 35(3): 11–19 [吕俊明, 潘宏禄, 苗文博, 等. 化学非平衡效应对返回舱再入气动特性影响. 航天返回与遥感, 2014, 35(3): 11–19]
- 64 Lv J M, Cheng X L, Yu J J, et al. The effect of chemical non-equilibrium on aerodynamic characteristics of reentry vehicles (in Chinese). *Spacecr Environ Eng*, 2016, 33(4): 370–377 [吕俊明, 程晓丽, 俞继军, 等. 化学非平衡效应对返回舱气动特性的影响分析. 航天器环境工程, 2016, 33(4): 370–377]
- 65 Liang J, Li Z H, Du B Q, et al. Numerical research of real gas effect on MSL Mars entry aerodynamic characteristics. *Spacecr Recov Remot Sens*, 2017, 38(4): 8–16 [梁杰, 李志辉, 杜波强, 等. 真实气体效应对MSL火星进入气动特性的影响研究. 航天返回与遥感, 2017, 38(4): 8–16]
- 66 Liu Q Z, Dong W Z, Ding M S, et al. Numerical simulation of aerothermal environments and aerodynamic characteristics for Mars entry capsules (in Chinese). *Acta Aerodyn Sin*, 2018, 36(4): 642–650 [刘庆宗, 董维中, 丁明松, 等. 火星探测器气动热环境和气动特性数值模拟研究. 空气动力学报, 2018, 36(4): 642–650]
- 67 Liu H P, Wei L K, Gao Z X, et al. Numerical study of influence of high temperature effects on pitch rotation derivative for hypersonic reentry vehicles. In: 21st AIAA International Space Planes and Hypersonics Technologies Conference. Xiamen: AIAA, 2017-2308
- 68 Xu R Z. Study on the Influence of Transition Position and High Temperature Gas Effect on Static/Dynamic Stability of Hypersonic Vehicle (in Chinese). Dissertation for Master Degree. Beijing: Beihang University, 2019 [徐瑞志. 转捩位置及高温化学非平衡效应对高超声速飞行器静/动稳定性影响研究. 硕士学位论文. 北京: 北京航空航天大学, 2019]
- 69 Duan L, Martin M P. Direct numerical simulation of hypersonic turbulent boundary layers. Part 4. Effect of high enthalpy. *J Fluid Mech*, 2011, 684: 25–59
- 70 Wu Z Y, Mo F, Gao Z X, et al. Direct numerical simulation of turbulent and high-temperature gas effect coupled flow (in Chinese). *Acta Aerodyn Sin*, 2020, 38(6): 1111–1128 [吴正园, 莫凡, 高振勋, 等. 湍流边界层与高温化学非平衡效应耦合的直接数值模拟. 空气动力学学报, 2020, 38(6): 1111–1128]
- 71 Liu P X, Yuan X X, Sun D, et al. DNS of high-temperature turbulent boundary layer with chemical nonequilibrium (in Chinese). *Acta Aeronau Astronaut Sin*, 2021, 36(1): 311–324 [刘朋欣, 袁先旭, 孙东, 等. 高温化学非平衡湍流边界层直接数值模拟. 航空学报, 2021 36(1): 311–324]

Progress in the numerical study on the aerodynamic and thermal characteristics of hypersonic vehicles: High-temperature chemical non-equilibrium effect

MO Fan¹, GAO ZhenXun^{1,2*}, JIANG ChongWen^{1,2} & LEE Chun-Hian^{1,2}

¹ School of Aeronautic Science & Engineering, Beihang University, Beijing 100191, China;

² Laboratory of Aero-thermal Protection Technology for Aerospace Vehicles, China Aerospace Science and Technology Corporation, Beijing 100191, China

In this paper, the progress in the numerical study of high-temperature chemical non-equilibrium effects on the aerodynamic and thermal characteristics of hypersonic vehicles is reviewed. First, the influence of physicochemical models on the numerical simulation of high-temperature chemical non-equilibrium flow is analyzed. The results show that the diffusion coefficient model will affect the aerodynamic heating under the full catalytic wall; the difference between the predicted heat flux peak values of different chemical kinetic models for complex flow areas, such as in the case of shock wave/shock wave interference is greater than 20%. The wall catalytic effect on the aerodynamic heating is considerable. Finite catalytic models are still under development; among them, models using finite-rate chemical reaction kinetic methods for the gas-solid surface to obtain catalytic reaction rates have greater developmental potential. Material ablation introduces the mass injection effect into the boundary layer, while pyrolysis gases result in complex chemical reactions with the high-temperature air in the boundary layer, significantly reducing the overall aerodynamic heating. There are two main mechanisms of high-temperature chemical non-equilibrium effect on the surface pressure of aircraft. One is that the decrease in the specific heat ratio after the shock wave will cause an increase in pressure after the shock wave, and the other is that the decrease of detached shock wave angle will reduce the pressure after the shock wave. Although the high-temperature chemical non-equilibrium effect on the lift and drag of typical shapes, such as space shuttle and re-entry capsule, is relatively small, the effect on the moment is considerable. Finally, high-temperature chemical non-equilibrium affects the fluctuation characteristics of the physical quantity in the hypersonic turbulent boundary layer and increases the wall friction while reducing the heat flux; however, it does not change the scaling laws of velocity, density, temperature, and component concentration of the turbulent boundary layer.

hypersonic, chemical non-equilibrium, catalysis/ablation, aerodynamic/thermal, turbulent boundary layer

PACS: 47.40.Ki, 82.40.Bj, 82.65.+r, 82.40.Ck, 47.27.nb

doi: [10.1360/SSPMA-2021-0110](https://doi.org/10.1360/SSPMA-2021-0110)