



考虑稀薄效应的再入飞行器前缘热化学反应与烧蚀模型研究

汪旭 肖天白 张勇豪 陈松

An investigation of thermochemical reaction and aerodynamic ablation model on leading edges of reentry vehicles considering rarefaction effect

WANG Xu, XIAO Tianbai, ZHANG Yonghao, CHEN Song

引用本文:

汪旭, 肖天白, 张勇豪, 等. 考虑稀薄效应的再入飞行器前缘热化学反应与烧蚀模型研究[J]. *空气动力学学报*, 2025, 43(0): 1–12. DOI: 10.7638/kqdlxxb-2024.0173

WANG Xu, XIAO Tianbai, ZHANG Yonghao, et al. An investigation of thermochemical reaction and aerodynamic ablation model on leading edges of reentry vehicles considering rarefaction effect[J]. *Acta Aerodynamica Sinica*, 2025, 43(0): 1–12. DOI: 10.7638/kqdlxxb-2024.0173

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7638/kqdlxxb-2024.0173>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

分子气体稀薄效应的动理学建模

Kinetic modeling of rarefied molecular gas dynamics

空气动力学学报. 2022, 40(2): 1–30 <https://doi.org/10.7638/kqdlxxb-2021.0378>

SiC界面热化学反应演化响应机理研究

Evolution and response mechanisms of interfacial thermochemical reactions for silicon carbide materials

空气动力学学报. 2024, 42(4): 96–104 <https://doi.org/10.7638/kqdlxxb-2023.0161>

一种求解低速跨流域流固耦合问题的离散统一气体动理学格式

A discrete unified gas kinetic scheme for solving fluid–structure interaction problems in low–speed continuum and rarefied flows

空气动力学学报. 2022, 40(3): 87–97 <https://doi.org/10.7638/kqdlxxb-2021-0312>

热化学非平衡高超声速平板边界层线性稳定性分析

Linear stability analysis of hypersonic boundary layer on a flat–plate with thermal–chemical non–equilibrium effects

空气动力学学报. 2020, 38(2): 316–325 <https://doi.org/10.7638/kqdlxxb-2019.0155>

高速飞行器结构/气动/推力耦合动力学建模方法

Dynamic modeling of a hypersonic vehicle with structure, aerodynamic and propulsion coupling

空气动力学学报. 2024, 42(10): 19–29 <https://doi.org/10.7638/kqdlxxb-2023.0180>

面对面呼吸飞沫传播和防护的流体力学初步分析

Preliminary fluid dynamics analysis on face–to–face respiratory droplets transmission and protection

空气动力学学报. 2021, 39(2): 133–141 <https://doi.org/10.7638/kqdlxxb-2020.0098>

地址: 四川省绵阳市二环路南段8号11信箱9分箱

电话: 0816-2463375

Email: kqdlxxb@163.com



关注微信公众号

获得更多资讯信息

文章编号: 0258-1825(2025)00-0001-12

考虑稀薄效应的再入飞行器前缘热化学反应与烧蚀模型研究

汪旭^{1,2}, 肖天白^{1,3}, 张勇豪^{1,3}, 陈松^{4,5,*}

(1. 中国科学院力学研究所 流体力学交叉研究中心, 北京 100190; 2. 中国科学院大学 未来技术学院, 北京 101408;
3. 中国科学院大学 工程科学学院, 北京 100049; 4. 北京航空航天大学 航空科学与工程学院, 北京 100191);
5. 杭州市北京航空航天大学国际创新研究院(北京航空航天大学国际创新学院), 杭州 311115)

摘要: 高温气流与飞行器表面材料的多物理、化学作用导致飞行器表面形貌的显著变化, 影响流动结构演化与飞行器气动力、热特性。准确预测再入过程的表面材料烧蚀过程对于飞行器热防护系统的设计至关重要。现有的气动烧蚀数值模拟研究主要针对固定壁面温度条件的流场变化, 忽视了烧蚀过程中复杂化学反应与壁面材料性质差异导致的升温过程及烧蚀形貌的影响。本研究基于直接模拟蒙特卡洛 (DSMC) 方法, 耦合壁面能量守恒方程, 采用开源程序 SPARTA 对飞行器再入时的气动加热过程开展解耦分析。以柱体模型为例, 综合激波后的气-气与气-固化学反应, 对解耦后的壁面升温 and 模型烧蚀两个过程分别建立了相应的控制方程, 并分析了在二维条件下的热化学反应与气动烧蚀机制。研究表明, 本文开发的可计算烧蚀模型不仅能够提升激波后气体分子内能采样的准确性, 也能够复现文献中已有的烧蚀形貌。该方法能够为深入理解变壁面温度下的复杂热化学非平衡现象提供理论依据与数据支撑。

关键词: 高速流动; 非平衡流动; 气动烧蚀; 稀薄气体动力学; 计算流体力学

中图分类号: V411.8 文献标识码: A doi: 10.7638/kqdlxxb-2024.0173

An investigation of thermochemical reaction and aerodynamic ablation model on leading edges of reentry vehicles considering rarefaction effect

WANG Xu^{1,2}, XIAO Tianbai^{1,3}, ZHANG Yonghao^{1,3}, CHEN Song^{4,5,*}

(1. Centre for Interdisciplinary Research in Fluids, Institute of Mechanics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China;
2. School of Future Technology, University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 101408, China;
3. School of Engineering Science, University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 101408, China;
4. School of Aeronautic Science and Engineering, Beihang University, Beijing 100191, China;
5. International Innovation Institute, Beihang University, Hangzhou 311115, China)

Abstract: High-temperature airflow interacts with the surface materials of aircraft through multiple physical and chemical processes, significantly altering the aircraft's surface morphology. This affects the evolution of flow structures as well as the aerodynamic and thermal characteristics of the surface. Accurate prediction of the ablation process during re-entry is crucial for designing thermal protection systems. However, existing studies on aerodynamic ablation primarily focus on flow fields under fixed wall temperature conditions, neglecting the impacts of complex chemical reactions and differences in wall material properties on heating and ablation morphology. This study employs the direct simulation Monte Carlo (DSMC) method, coupled with the wall

收稿日期: 2024-10-29; 修订日期: 2024-12-27; 录用日期: 2024-12-29

基金项目: 国家自然科学基金(12302381); 中国科学院稳定支持基础研究领域青年团队计划(YSTR-107); 高温气体动力学国家重点实验室开放课题(2023KF15)

作者简介: 汪旭(2002—), 男, 安徽阜阳人, 博士研究生, 研究方向: 高温气体动力学. E-mail: wangxu242@ucas.mails.ac.cn

通信作者: 陈松*, 副教授, 研究方向: 稀薄气体动力学, 高速烧蚀. E-mail: chensong@buaa.edu.cn

引用格式: 汪旭, 肖天白, 张勇豪, 等. 考虑稀薄效应的再入飞行器前缘热化学反应与烧蚀模型研究[J]. 空气动力学学报, 2025, 43(X): 1-12.

WANG X, XIAO T B, ZHANG Y H, et al. An investigation of thermochemical reaction and aerodynamic ablation model on leading edges of reentry vehicles considering rarefaction effect[J]. Acta Aerodynamica Sinica, 2025, 43(X): 1-12(in Chinese). doi: 10.7638/kqdlxxb-2024.0173

energy conservation equation, and utilizes the open-source program SPARTA to analyze the aerodynamic heating process during high-speed flight. Taking a cylindrical model as an example, this study establishes separate control equations for wall heating and material ablation. By integrating gas-gas and gas-solid chemical reactions, the new ablation model is used to analyze aerodynamic ablation mechanisms of different wall materials. The results indicate that the proposed ablation model enhances the accuracy of internal energy sampling of particles post-shock and replicates existing erosion morphologies from literature. This method offers theoretical basis and data support for understanding complex thermochemical non-equilibrium phenomena under variable wall temperatures.

Keywords: high-speed flow; non-equilibrium flow; aerodynamic ablation; rarefied gas dynamics; computational fluid dynamics

0 引言

随着我国航天事业的快速发展,先进机动空天飞行器逐渐成为研究热点。先进机动空天飞行器在高速巡航与再入飞行过程中,飞行器表面发生剧烈的气动加热,在前缘等关键部位产生极高的局部温度,威胁飞行器的飞行安全。在高速流动过程中,气体分子处于热力学、热化学非平衡态,分子的内能模态被激发,并可能会发生解离、交换、复合、电离等化学反应,使其热力学性质发生本质变化,呈现非完全气体性质^[1]。这些高能气体分子与飞行器表面发生剧烈的能量交换,其温度急剧升高并可能与壁面材料分子之间发生化学反应,导致结构损伤与材料失效^[2],如图1所示。为了减少极端气动加热环境带来的危害,高速飞行器在机翼前缘等关键部位普遍配备了热防护系统(thermal protective system, TPS)。如何准确预测气动加热效应导致的热防护材料响应与烧蚀是当前空气动力学的研究热点^[3]。

飞行器表面烧蚀是一个复杂的多场耦合问题。在烧蚀过程中,飞行器前缘在流场气动加热效应的影响下,发生烧蚀并产生界面退缩;形貌变化影响飞行

器气动外形,改变飞行器表面的气动力与气动热^[4]。构建多场耦合烧蚀模型需要结合3方面的工作:一方面,烧蚀过程中的气动加热来自于对来流的热化学非平衡特性的准确分析。杜耀文等^[5]和高铁锁等^[6]综合考虑了高速飞行器飞行过程中所承受的对流加热和辐射加热。杨俊沅等^[7]基于非线性耦合本构关系描述局部稀薄非平衡流动和物面气动热的性能。Chen等^[8]则分析了不同化学反应模型对非平衡流动气体分子内能计算的影响。另一方面,来流的气动加热和实际能被飞行器前缘等关键部位吸收的热量之间并不对等,而是会受到壁面材料物理性质与化学性质的多重影响。在微观尺度上,Reed等^[9]通过气固关键反应步骤的动力学图分析了原子氧和氮与特定壁面材料的烧蚀机理。曹盈菲等^[10]利用反应分子动力学,构建气体分子与固体分子之间的热化学反应模型来提供壁面附近的热化学反应动力学特征。在宏观尺度上,郑子均等^[11]、周印佳等^[12]和孙学文等^[13]均采用傅里叶导热定律与能量守恒方程结合的方式来分析材料传热并为材料烧蚀提供数据。最后,由于壁面烧蚀是一个非定常问题,流场和飞行器边界的动态演化对仿真过程提出挑战。针对多场耦合的非定常数值模拟问题,杨凯威等^[14]利用有限元软件,通过自编热流加载和烧蚀移动边界用户子程序,建立了高速空气舵前缘三维烧蚀和温度场耦合的计算方法。龙丽萍等^[15]通过对气动、烧蚀和结构热响应计算程序的耦合和迭代,获得了与鼻尖再入烧蚀实验数据几乎一致的结果。

对于临近空间稀薄来流条件下的流场模拟,传统的计算流体力学方法将不再给出可靠的计算结果,须采用以直接模拟蒙特卡罗(direct simulation Monte Carlo, DSMC)方法为代表的气体动力学描述。随着DSMC方法的发展,已有多数值模拟代码或软件被相继开发用以开展相关研究,如DS2V^[16]、DS3V^[17]、MONACO^[18]、dsmcFoam+^[19],和SPARTA^[20]等。这

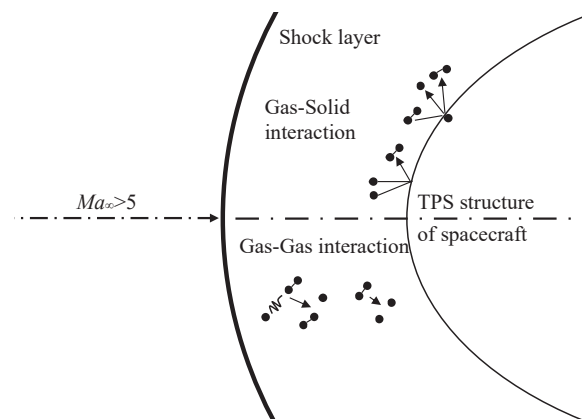


图1 烧蚀过程中复杂的物理和化学反应

Fig. 1 Schematic of complex physical and chemical reactions during the ablation process

些软件和程序在设计时根据应对问题的不同采用了不同的处理方式和模拟逻辑, 包括粒子碰撞模型、粒子碰撞后的能量分配和模拟化学反应的热化学模型等。梁杰等^[21]将混合网格和网格自适应技术应用到 DSMC 方法中来模拟大型飞行器的再入过程, 并采用一维传热模型分析了飞行器在不同海拔高度的烧蚀情况。Achambath 等^[22]通过与 CFD 估算结果比较, 展现了 DSMC 方法具备计算 TPS 结构材料响应所需相关表面性质的能力。Stern 等^[23]则开发了可以处理由 Fibergen 生成的微观结构的 DSMC 数值计算工具, 并能够比较多孔 TPS 材料在表面烧蚀和深度体积烧蚀两种烧蚀方式上的差异。Bott 等^[24]基于典型的几何形状, 对 SPARTA 原始烧蚀程序的结果准确性进行测试, 发现 SPARTA 程序无法展现烧蚀过程中几何外形前缘和后缘的烧蚀形貌差异。他们通过分析 SPARTA 程序处理壁面热流的方程, 利用无量纲化和修改壁面能量守恒方程的形式, 在方柱外形上得到了符合真实流动过程的定性结果, 但是对于圆柱外形仍没有得到满意的烧蚀结果。甘驰等^[25]针对圆柱外形, 对网格依赖性问题进行了分析, 并测试了球锥以及带有微小粗糙元的斜楔体。修改后的 SPARTA 程序能够得到与温度场结果基本吻合的圆柱烧蚀结果, 但在处理稍复杂的球锥问题上, 与实验结果仍有一定出入。

考虑到 SPARTA 程序现有的烧蚀模型还没有涉及到壁面结构和传热模型, 而且现在对烧蚀过程中气体分子的内能描述不够准确, 本文基于最新版本的 SPARTA 程序^[26], 通过分析真实流动过程和引入传热模型, 提出了涵盖变壁温效应和材料响应的气动烧蚀模型, 并利用高速条件下的二维圆柱绕流算例对模型进行了验证, 最后针对球锥开展数值模拟和讨论。

1 数值方法

在高速流动过程中, 高速气体分子之间、高速气体分子与飞行器壁面材料分子之间互相碰撞, 发生剧烈的能量交换, 出现一系列复杂的热化学非平衡现象。这一现象在宏观上表现为激波后的空气温度急剧升高, 飞行器面临严峻的气动加热环境并在前缘处发生壁面烧蚀。因此, 准确描述高速流动过程中出现的热化学非平衡现象对合理预测飞行器再入时的烧蚀过程至关重要。

1.1 SPARTA 程序和热化学模型

为了准确描述气动烧蚀过程中气体分子的内能

传递过程, 首先需要对 DSMC 程序所使用的热化学模型进行深入分析和测试。本文将以二维圆柱绕流为例, 详细考察其对热化学非平衡流动的模拟能力, 并对相关源代码做必要的改进。

热化学非平衡现象包括热非平衡和化学非平衡两部分。在处理热非平衡方面, 当两个具有内能的分子之间发生碰撞时, 一般来说, 两个分子的内能都会发生变化。然而, 由于 DSMC 方法是一种随机模拟方法, 它只关注如何精确模拟分子分布函数的变化, 而不是模拟系统中每个原子的细节。因此, 在 DSMC 仿真中, 如何选择碰撞对进行内能交换是一个关键的问题。烧蚀过程需要多种气体参与进行, 因此这个选择过程需耦合不同组元的弛豫概率和内能再分配过程。目前, 应用于分子内能弛豫的非弹性碰撞选择过程一般有 3 种, 分别是: 配对选择、允许双重弛豫的粒子选择和禁止双重弛豫的粒子选择。配对选择情况下, 一旦选择碰撞对, 碰撞对中的两个粒子的能量都要重新分配。允许双重弛豫情况下, 碰撞对中的每个粒子都用非弹性碰撞的概率来单独测试是否发生弛豫。而在禁止双重弛豫的情况下, 只选择一个粒子进行能量弛豫, 仅当第一个粒子未被选择用于非弹性碰撞时, 才会对该碰撞对中的第二个粒子判断是否会发生非弹性碰撞和能量弛豫的过程。Boyd 等^[27]指出, 在非弹性碰撞的选择过程中, 建议使用禁止双重弛豫的粒子选择过程, 因为该方法可以确保对于同一组特定碰撞对的碰撞数在接近平衡极限时的 DSMC 模拟结果与采用连续介质表达式的 CFD 模拟结果精确一致。

对于 SPARTA 开源程序, 其在非弹性碰撞对的选择上采用的是允许双重弛豫。Chen 等^[8]在零维热浴仿真测试中观察到禁止双重弛豫的粒子选择方案的结果优于 SPARTA 程序的结果, 并且更接近理论解。在典型的 DSMC 方法中, 对于碰撞对中的粒子 i , 其转动能弛豫概率为^[28]:

$$P_{\text{rot},i} = \frac{\zeta_{\text{tr}} + \zeta_{\text{rot},i}}{\zeta_{\text{tr}}} / Z_{\text{rot},i} \quad (1)$$

而 SPARTA 程序在处理过程中实际采用的转动能弛豫概率为:

$$P_{\text{rot},i} = 1 / Z_{\text{rot},i} \quad (2)$$

其中: $P_{\text{rot},i}$ 是粒子 i 的转动能弛豫概率, $Z_{\text{rot},i}$ 是粒子 i 的转动碰撞数, ζ_{tr} 是选中碰撞对的平动自由度, $\zeta_{\text{rot},i}$ 是粒子 i 的转动自由度。直观比较两组公式的区别可知, SPARTA 程序计算的碰撞对转动能松弛概率偏小, 从而会使碰撞对中的粒子在接近平衡极限时, 其

平动能向转动能传递的能量更少。

在处理化学非平衡方面,对于高温气体流动,气体分子的振动能被激发,化学反应开始发生。在DSMC数值模拟中,大部分碰撞对不会被选中进行化学反应,这是因为许多碰撞对计算得到的发生化学反应的概率 P_{react} 为零,或者通常很小。因此,DSMC模拟中最常用的策略就是在选择一对粒子进行碰撞后,首先测试该碰撞对是否发生化学反应。如果该碰撞对不被接受进行化学反应,则对其进行在热非平衡部分中提到的禁止双重弛豫的粒子选择过程。而当该碰撞对被接受进行化学反应时,DSMC程序最常用的化学反应概率模型是Bird^[29]提出的总碰撞能量(total collision energy, TCE)模型。由于在碰撞过程中有新组元的形成和旧组元的消失,所有生成物组元的性质在每次反应碰撞期间都会更新,因此,在发生化学反应的碰撞中,碰撞对的能量再分配过程是以不同的方式处理的。通常,DSMC程序首先从总碰撞能中减去因化学反应而去除的化学键能,然后使用从平衡分布中取样的Borgnakke-Larsen(BL)^[30]技术将剩余能量重新分配到生成物组元的各种能量模式中。对于SPARTA程序,其化学反应后的能量再分配逻辑如图2所示。

图2中, $\epsilon_{\text{coll}} - \epsilon_a$ 代表碰撞对的碰撞能减去化学反应的化学能后需要分配的能量; ϵ_{coll} 代表碰撞对的

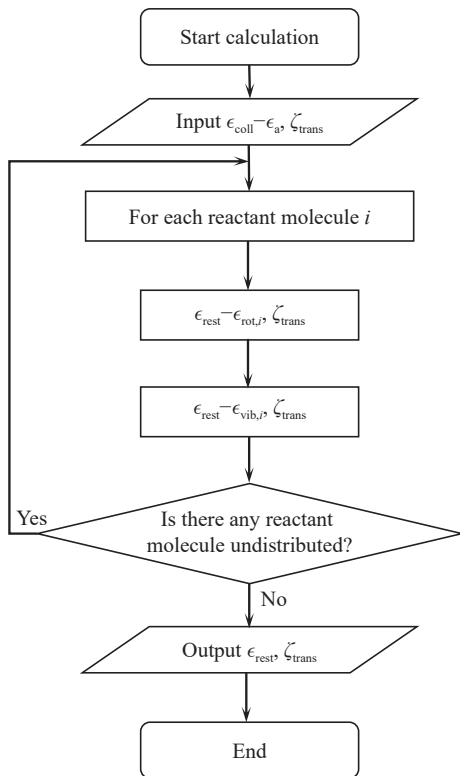


图2 SPARTA程序化学反应后能量的再分配示意图

Fig. 2 Energy distribution after chemical reactions in SPARTA

碰撞能,包括碰撞对的相对平动能和两个碰撞粒子所有内模态的能量之和; ϵ_a 代表碰撞对发生化学反应所需的活化能; ϵ_{rest} 代表分配过程中碰撞对剩余的能量; $\epsilon_{\text{rot},i}$ 和 $\epsilon_{\text{vib},i}$ 分别代表分配过程中分配给每个粒子的转动能和振动能; ζ_{trans} 代表碰撞对的平动自由度。由图2所示,SPARTA程序首先计算碰撞对发生化学反应后剩余的总能量 $\epsilon_{\text{coll}} - \epsilon_a$,然后把发生化学反应后的能量按照BL技术分配到生成物组元的各种能量模式中,分配策略是按照粒子顺序给每个粒子分配转动能和振动能,最后再分配平动能。而典型DSMC方法一般的策略是按照模态顺序,先给所有生成物分子分配振动能,然后再分配转动能,最后分配平动能^[27]。此外,SPARTA程序在采用BL方法分配碰撞后的能量时,只考虑被分配模态自由度和碰撞对的平动自由度,而不考虑剩余未分配的模态的自由度,这会对粒子对碰撞后的能量分配准确性造成严重的误差。

1.2 圆柱绕流算例验证

本文将基于图3所示的二维圆柱绕流算例^[31],对比采用SPARTA程序与采用传统DSMC方法的MONACO程序^[31]的区别。Boyd等开发的MONACO程序已经在热浴实验中验证了其模拟化学成分和模拟气体分子内能分布方面的准确性^[32],其仿真计算的圆柱算例在热非平衡条件下和化学非平衡条件下的结果与其他代码均保持一致^[31]。

为了节省计算资源,本文仅对四分之一圆柱模型进行流场仿真。图3左侧为切分流场后的来流边界,右侧为出口流边界,下方是二维对称边界,右下方则是圆柱表面的固体边界。算例采用的自由来流参数

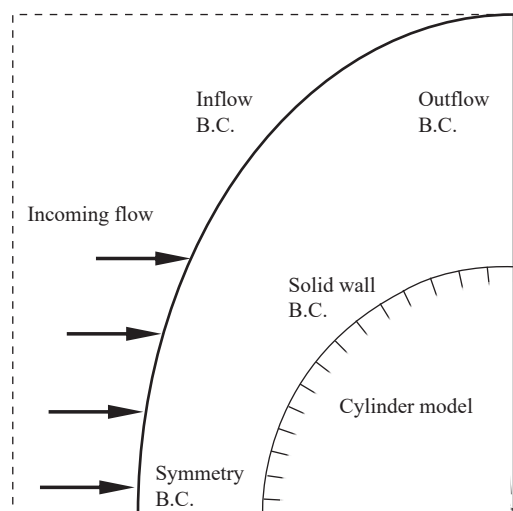


图3 圆柱算例的计算域示意图^[31]

Fig. 3 Schematic of the computational domain for the cylindrical case^[31]

如表 1 所示, 相当于海拔 86 km 处的大气条件。

表 1 二维圆柱绕流算例参数设置表

Table 1 Simulation parameters of 2D cylinder case

参数	参数值
来流速度(V)/($\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$)	6813
来流温度(T)/K	187
来流密度(ρ_{num})/ m^{-3}	1.433×10^{20}
圆柱模型半径(R)/m	1
来流可努森数(Kn)	3.61

圆柱绕流验证算例采用文献 [31] 中使用的变径硬球模型 (VHS), 转动碰撞数和振动碰撞数的设置均与文献保持一致。在烧蚀预测仿真中, 本文则采用更符合真实物理过程的变径软球模型 (VSS) 进行计算。算例选用入口边界处网格尺寸作为特征长度, 用来流平均自由程计算来流克努森数。

1.2.1 热非平衡条件下的算例验证

图 4 为热非平衡条件下 SPARTA 原始程序计算结果与文献 [31] 结果的对比。SPARTA 原始程序见文献 [26]。

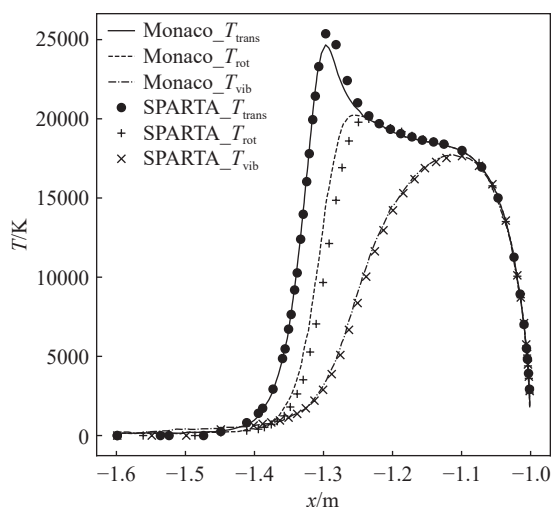


图 4 热非平衡条件下原始 SPARTA 程序计算得到的驻点线温度分布与文献 [31] 结果对比

Fig. 4 Comparison of temperature profiles along the stagnation streamline under thermal non-equilibrium conditions between default SPARTA and reference [31]

图 4 显示 SPARTA 原始程序的计算结果与 MONACO 程序的计算结果在圆柱近壁面处符合性非常好, 此处位于前缘驻点, 流动趋于热平衡状态。但是, 对于激波后的强非平衡流动, SPARTA 原始程序得到的平动温度要高于文献结果, 而气体分子转动温度则明显偏低。这说明 SPARTA 原始程序的热化学模型中, 转动能量没有充分弛豫, 而使其有部分能量没有从平动能分配到转动能量上。本文对 SPARTA 原始程序进行了修正, 首先在非弹性碰撞选择过程中采用禁止双松弛

的粒子选择方案, 然后将粒子的转动能量弛豫概率由公式 (2) 修正为公式 (1)。图 5 是修正后的 SPARTA 程序与 MONACO 程序仿真计算结果的对比, 此时两者结果完全一致。

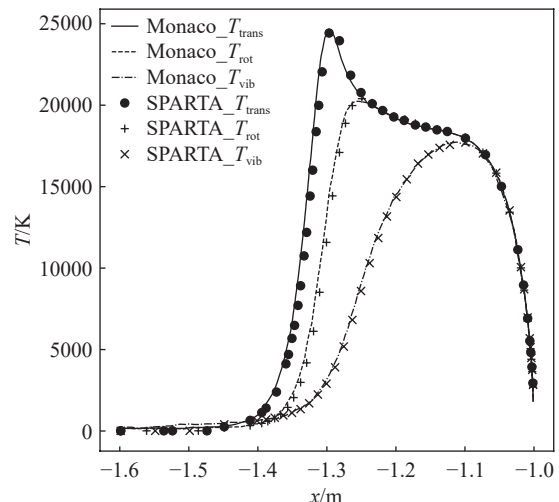


图 5 热非平衡条件下修正后的 SPARTA 程序计算得到的驻点线温度分布与文献 [31] 结果对比

Fig. 5 Comparison of temperature profiles along the stagnation streamline under thermal non-equilibrium conditions between modified SPARTA and reference [31]

1.2.2 化学非平衡条件下的算例验证

在修正 SPARTA 程序的内能松弛模型后, 本文采用典型的五组分 19 反应模型 [31] 进一步分析其化学非平衡流动的模拟结果。表 2 即是本文测试算例采用的 19 化学反应反应速率参数表, A 、 b 为阿伦尼乌斯公式里的经验系数。

图 6 为化学非平衡条件下 SPARTA 原始程序计算结果与文献 [31] 结果的对比。

从图 6 中的比较结果可知, SPARTA 原始程序计算的气体分子内能分布整体比 MONACO 程序计算的结果低。气体分子的平动能和转动能不仅在激波位置处低于文献结果, 还在近壁面气体分子趋于热化学平衡的位置处低于文献结果。这说明 SPARTA 原始程序在仿真过程中发生了过多的化学反应, 从而使得气体分子过多的释放能量, 而没有达到理论中的平衡状态。

本文对 SPARTA 原始程序的热化学反应部分按照典型 DSMC 方法采用的策略进行修正, 即修正后的 SPARTA 程序在采用 BL 方法分配碰撞后的能量时, 将按照模态顺序, 先给所有生成物分子分配振动能, 然后再分配转动能和平动能 [27]。同时, 修正后的 SPARTA 程序在分配能量的过程中, 将考虑剩余未分配的模态的自由度。图 7 即是修正后的 SPARTA 程

表 2 19 化学反应反应速率参数设置表^[31]Table 2 Reaction rate parameters of 19 chemical reactions^[31]

序号	化学反应	生成热 $E_f/10^{-19} \text{ J}$	A	b	活化能 $E_a/10^{-19} \text{ J}$
1	$\text{O}_2 + \text{N} \rightarrow \text{O} + \text{O} + \text{N}$	8.197	1.1×10^{-10}	-1.0	8.197
2	$\text{O}_2 + \text{NO} \rightarrow \text{O} + \text{O} + \text{NO}$	8.197	1.1×10^{-10}	-1.0	8.197
3	$\text{O}_2 + \text{N}_2 \rightarrow \text{O} + \text{O} + \text{N}_2$	8.197	1.3×10^{-10}	-1.0	8.197
4	$\text{O}_2 + \text{O}_2 \rightarrow \text{O} + \text{O} + \text{O}_2$	8.197	5.33×10^{-11}	-1.0	8.197
5	$\text{O}_2 + \text{O} \rightarrow \text{O} + \text{O} + \text{O}$	8.197	1.5×10^{-10}	-1.05	8.197
6	$\text{N}_2 + \text{O} \rightarrow \text{N} + \text{N} + \text{O}$	15.67	4.0×10^{-12}	-0.54	15.67
7	$\text{N}_2 + \text{O}_2 \rightarrow \text{N} + \text{N} + \text{O}_2$	15.67	1.5×10^{-11}	-0.68	15.67
8	$\text{N}_2 + \text{NO} \rightarrow \text{N} + \text{N} + \text{NO}$	15.67	1.5×10^{-11}	-0.68	15.67
9	$\text{N}_2 + \text{N}_2 \rightarrow \text{N} + \text{N} + \text{N}_2$	15.67	4.1×10^{-12}	-0.62	15.67
10	$\text{N}_2 + \text{N} \rightarrow \text{N} + \text{N} + \text{N}$	15.67	1.0×10^{-11}	-0.68	15.67
11	$\text{NO} + \text{N}_2 \rightarrow \text{N} + \text{O} + \text{N}_2$	10.43	2.1×10^{-10}	-1.0	10.43
12	$\text{NO} + \text{O}_2 \rightarrow \text{N} + \text{O} + \text{O}_2$	10.43	2.0×10^{-10}	-1.0	10.43
13	$\text{NO} + \text{NO} \rightarrow \text{N} + \text{O} + \text{NO}$	10.43	1.0×10^{-10}	-1.0	10.43
14	$\text{NO} + \text{O} \rightarrow \text{N} + \text{O} + \text{O}$	10.43	4.0×10^{-10}	-1.1	10.43
15	$\text{NO} + \text{N} \rightarrow \text{N} + \text{O} + \text{N}$	10.43	4.0×10^{-10}	-1.1	10.43
16	$\text{NO} + \text{O} \rightarrow \text{O}_2 + \text{N}$	2.719	2.3×10^{-19}	0.50	2.719
17	$\text{N}_2 + \text{O} \rightarrow \text{NO} + \text{N}$	5.175	0.8×10^{-16}	0	5.175
18	$\text{O}_2 + \text{N} \rightarrow \text{NO} + \text{O}$	-2.719	4.0×10^{-15}	-0.39	0.2
19	$\text{NO} + \text{N} \rightarrow \text{N}_2 + \text{O}$	-5.175	5.0×10^{-16}	-0.35	0.2

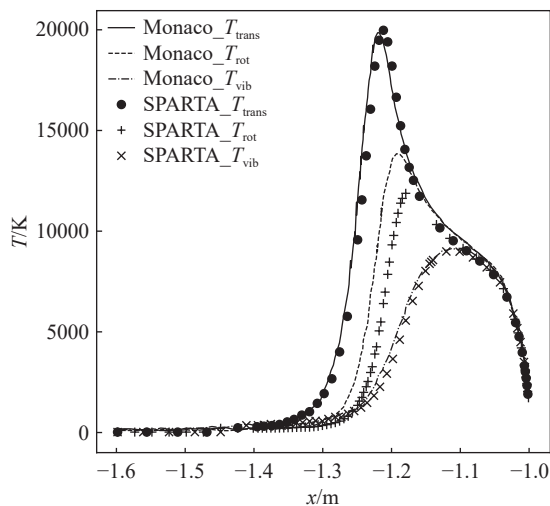


图 6 化学非平衡条件下 SPARTA 原始程序计算得到的驻点线温度分布与文献 [31] 结果对比

Fig. 6 Comparison of temperature profiles along the stagnation streamline under chemical non-equilibrium conditions between default SPARTA and reference [31]

序与 MONACO 程序仿真计算结果的对比。

图 7 清楚地展现了修正后的 SPARTA 程序结果更接近 MONACO 程序的仿真结果。在近壁面气体分子热化学接近平衡的位置, 修正后的 SPARTA 程序的结果已经可以达到与文献一致的水平。但是在来流到激波前的位置, 修正后的 SPARTA 程序捕捉到的气体分子平动能分布高于文献结果。这可能是由于此处的网格粒子数相对于激波后的网格粒子数较少, 导致 SPARTA 程序模拟得到的气体分子内能分

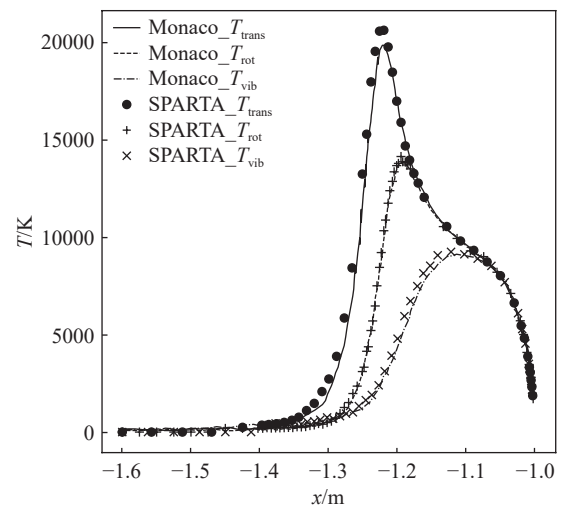


图 7 化学非平衡条件下修正后的 SPARTA 程序计算得到的驻点线温度分布与文献 [31] 结果对比

Fig. 7 Comparison of temperature profiles along the stagnation streamline under chemical non-equilibrium conditions between modified SPARTA and reference [31]

布与文献结果有一定的偏差。模拟结果说明了本文修正后的 SPARTA 程序具备在化学反应条件下精细模拟近壁面处气体分子内能弛豫的能力, 可以用来处理烧蚀问题关注的近壁面热化学非平衡问题。

2 烧蚀建模

气动烧蚀是一个涉及多物理、化学效应的复杂流固耦合过程。本文从真实的气体分子输运过程出发, 分析烧蚀过程中的烧蚀能量来源, 并对壁面处复杂的

气固反应进行建模。

2.1 气固边界处的能量交换

在用粒子法进行烧蚀过程仿真时，模型壁面吸收的能量来自气体分子和壁面之间的碰撞。根据上一节对热化学非平衡现象的分析，在选定粒子法烧蚀过程的烧蚀能量来源时，气体分子因为其模态被激发而具有的转动能量和振动能量应该和平动能量一同考虑。同时，考虑到真实情况下，高能气体分子将会很容易和高温壁面进行复杂的多物理、多化学作用。因此，进一步分析气固边界的能量传递过程是必要的。在设计再入飞行器热防护系统时，来流的气动加热、壁面的热辐射以及壁面内的热传导是构建壁面能量守恒关系式的三个主要部分^[21]。根据上一节的分析，来流的气动加热 q_{aero} 应该包括气体分子的平动能流 q_{tr} 、转动能流 q_{rot} 和振动能流 q_{vib} 。在烧蚀过程中，除了来流的气动加热，高温壁面释放的热辐射 q_{rad} 会达到不可忽视的量级，它与来流气动加热的净能流 q_{absorb} 将会被壁面吸收，从而使得壁面温度上升，如图 8 所示。

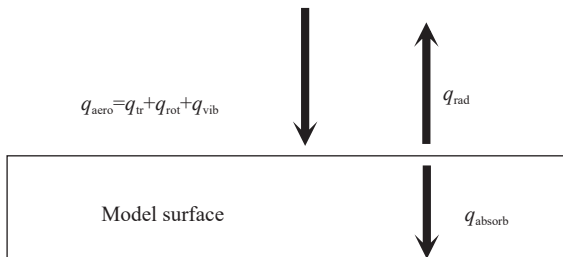


图 8 壁面微元的能量传递过程

Fig. 8 Energy transfer process of wall surface

但是，只考虑能量的传递而忽视材料特性的烧蚀机理，是无法准确预测烧蚀过程的。材料的烧蚀往往要考虑材料本身的烧蚀性能以及材料表面形貌对来流的影响^[15]。不同形貌的壁面特征可能会放大或缩小来流的气动加热作用。因此，本文所考虑的气固边界能量传递过程额外考虑了模型表面的粗糙特征对烧蚀过程的影响以及气固边界上的化学反应 q_{chem} ，如图 9 所示。

2.2 阶段一：壁面升温阶段

本文以是否达到壁面熔化的临界温度为判据，将烧蚀过程分成了壁面升温 and 壁面消融两个阶段，并基于能量守恒方程对每个阶段分别建立控制方程。在第一阶段，来流刚接触壁面，壁面温度逐渐升高，壁面烧蚀还未开始。由于当前研究的固体模型尺寸较小，面对高焓来流时固体内部传热较快，因而本文假设固体模型能够在每个计算时间步内迅速升温，在每

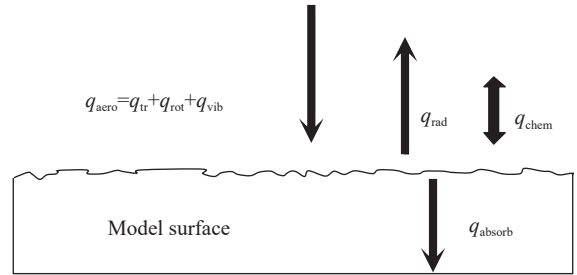


图 9 考虑材料特征的壁面微元的能量传递过程

Fig. 9 Energy transfer process of wall surface considering material characteristics

个计算时间步结束时，固体模型可以均匀升温至其壁面热辐射量和当前时间步的气动加热量相等，从而可以忽视固体内部具体的导热过程。其中传入固体和固体向外辐射的能流为：

$$q_{aero} = q_{tr} + q_{rot} + q_{vib} \quad (3)$$

$$q_{rad} = \varepsilon \sigma T_w^4 \quad (4)$$

公式(3)表达了来流的气动加热能流 q_{aero} ，其包含气体分子的平动能流 q_{tr} 、转动能流 q_{rot} 和振动能流 q_{vib} ，该部分能流由 SPARTA 程序统计二维壁面量得到，单位为 J/m 。公式(4)则表达了壁面热辐射能流 q_{rad} ，该部分能流由斯特藩-玻尔兹曼定律得到，单位为 $J/(m^2)$ ，其中： σ 表示 Stephan-Boltzmann 常数，其数值为 $5.67 \times 10^{-8} w/(m^2 \cdot K^4)$ ； ε 表示壁面的发射率，其数值范围根据壁面材料特性在 0 到 1 之间变化。

由于该阶段不涉及壁面形貌的变化，本文可以将问题简化成空间中一个点的一维传热问题。壁面能流被固体材料吸收的过程将由材料的比热方程来描述。该阶段针对被简化模型建立的控制方程如式(5)所示：

$$Q_{cond} = Q_{net} \quad (5)$$

其中，

$$Q_{cond} = m_w C_w \frac{\Delta T_w}{\Delta t} \quad (6)$$

$$Q_{net} = (q_{aero} - q_{rad} \cdot dz) \cdot L_w \cdot s_{fl} \quad (7)$$

公式(5)的基础是能量守恒方程，这意味着壁面热传导的能量 Q_{cond} 等于传入壁面的净能量 Q_{net} 。在 Q_{cond} 中， m_w 和 C_w 分别表示模型导热部分的质量和所用材料的比热率。当涉及到壁面吸收的净能量 Q_{net} 时，需要将公式(3)和公式(4)中计算的壁面能流转换成能量。为了使适用三维空间的面辐射公式(4)可以使用在二维空间的线边界上，公式(7)中采用了 dz

来统一量纲。在 SPARTA 程序中, 二维问题的 z 方向长度 dz 默认为 1m 。为了将能流转换成壁面吸收的能量, 用 L_w 表示被烧蚀模型与来流接触的总长度。 s_{f1} 表示将二维传热问题转化为一维传热问题时的能量损失系数。在解释了第一阶段控制方程里的各种源项后, 该阶段中的壁温上升速率也可以由下面的方程(8)表示:

$$\frac{\Delta T_w}{\Delta t} = \frac{(q_{aero} - q_{rad} \cdot dz) \cdot L_w \cdot s_{f1}}{m_w C_w} \quad (8)$$

式中, 壁温上升速率结合了气固边界能量传递的各个部分, 充分展示了壁面材料本身的热力学性质。

2.3 阶段二: 壁面烧蚀阶段

在第二阶段, 被烧蚀模型的壁温已经达到临界温度, 壁面单元有足够的能量进行烧蚀反应。此时, 本文的烧蚀反应模型将包括壁面的熔化和升华。壁面温度将保持恒定, 壁面材料可以升华形成气态分子, 熔化形成液态分子, 或者在吸收足够的热量后直接与气态分子发生反应。该阶段的壁面能量传递过程如图9所示, 本文不仅考虑来流的气动加热 q_{aero} 和壁面热辐射 q_{rad} , 还要考虑气固边界处的化学反应 q_{chem} 以及壁面单元的表面粗糙度。该阶段针对具体的壁面单元建立控制方程如式(9)所示:

$$E_{cond,j}^* = \frac{E_{net,j}}{s_{f,grid}} \cdot \mu_j = \frac{(q_{total,j} - \varepsilon \sigma T_w^4 \cdot dz) \cdot s_{f1} \cdot d_{s,j}}{s_{f,grid}} \cdot \mu_j \quad (9)$$

其中,

$$s_{f,grid} = \frac{E_{grid_ab}}{E_{grid_SPARTA}} = \frac{q_{material} \times m_{grid}}{E_{grid_SPARTA}} \quad (10)$$

上述控制方程(9)是基于单个表面单元建立的, 式中 $E_{cond,j}^*$ 代表在 SPARTA 程序表示方法下每个网格吸收的折算热量, 它是由网格实际吸收的热量 $E_{net,j}$ 、壁面单元的形貌特征对来流气动加热的影响 μ_j 和折算系数 $s_{f,grid}$ 组成。其中: $q_{total,j}$ 代表传入壁面单元的总热流, 包括来流的气动加热 $q_{aero,j}$ 和气固边界上发生化学反应时释放的能流 $q_{chem,j}$; $d_{s,j}$ 代表每个壁面单元 j 与来流接触的长度。由于模型假设固体内部温度相同, 每个壁面单元的热辐射能流 $\varepsilon \sigma T_w^4 \cdot dz$ 相同, 但是不同位置处不同烧蚀状态的壁面单元与来流的接触长度 $d_{s,j}$ 不同, 导致其热辐射能量 $\varepsilon \sigma T_w^4 \cdot dz \cdot d_{s,j}$ 不同。 $s_{f,grid}$ 代表 SPARTA 程序赋予的网格节点值, 在实际中代表的材料烧蚀吸收的热量, 由两个主要部分组成: 一部分是壁面单元完全被烧蚀时所吸收的能量 E_{grid_ab} , 其通过壁面单位质量的材料烧蚀时

所吸收的热量 $q_{material}$ 和网格内材料的质量 m_{grid} 计算而来; 另一部分则是 SPARTA 程序的网格节点值 E_{grid_SPARTA} 。该节点值在 SPARTA 原始程序中默认为 255, 主要用来衡量该节点被烧蚀掉所需要的碰撞次数。本文提出的模型通过折算系数 $s_{f,grid}$ 将 SPARTA 程序里的网格节点值和壁面单元实际能够吸收的能量联系起来, 从而可以将原程序中的固定值转换为每个网格真实吸收的折算热量。

2.4 模型验证

为了验证新提出的烧蚀模型的预测准确性, 本文选择高速条件下的二维圆柱绕流算例为验证算例。该算例的来流条件和上述分析流动过程时的算例条件一致, 如表1所示。本文模型额外需要的壁面材料特性则如表3所示。

表3 二维圆柱绕流算例的壁面材料特性参数表^[25]
Table 3 Wall material properties of 2D cylinder case^[25]

参数	参数值
壁面材料的密度($\rho_{material}$)/($\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$)	1800
壁面材料的熔点(T_w)/K	1000
壁面材料的比热容(C_w)/($\text{J} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$)	510
壁面材料的热值($q_{material}$)/($\text{MJ} \cdot \text{kg}^{-1}$)	36.95
发射率(ε)	0.80
转换损失系数(s_{f1})	0.85
热流放大系数(μ)	1

在该验证情况下, 由于不需要验证壁面粗糙度对壁面热通量的影响, 本文将本算例的 μ 设置为 1。根据文献[33], 对于大多数二维烧蚀问题, s_{f1} 可以简单地设置为 0.85。在壁面单元材料的选择方面, 本文选择了典型的碳/碳复合材料, 其材料特性参考文献[33]。在化学动力学建模方面, 本算例采用表2所示的五组分 19 反应模型^[31], 且壁面反应考虑了如表4所示的碳升华和碳氮反应^[33]。

图10展示了在相同流场结构下, SPARTA 原始烧蚀模型^[26](Default)、甘驰等^[25]提出的烧蚀模型、

表4 碳/碳复合材料气固反应设置表^[33]
Table 4 Gas-solid reaction settings for C/C composite materials^[33]

index	Gas-solid Reaction	Equilibrium constant
1	$\text{C}(s) \rightarrow \text{C}(g)$	$K_1 = p_{C_1}$
2	$2\text{C}(s) \rightarrow \text{C}_2(g)$	$K_2 = p_{C_2}$
3	$3\text{C}(s) \rightarrow \text{C}_3(g)$	$K_3 = p_{C_3}$
4	$2\text{C} + \frac{1}{2}\text{N}_2 \rightarrow \text{C}_2\text{N}$	$K_4 = (p_{C_2N}/p_{N_2})^{1/2}$
5	$\text{C} + \frac{1}{2}\text{N}_2 \rightarrow \text{CN}$	$K_5 = (p_{CN}/p_{N_2})^{1/2}$
6	$\text{C} + \text{O} \rightarrow \text{CO}$	$K_6 = p_{CO}/p_{\text{O}}$

(Reference)与本文提出的新烧蚀模型的预测结果(New)比较。就原始烧蚀模型而言,网格节点值 E_{grid_SPARTA} 是和材料无关的固定数值 255,这个数值一般远小于烧蚀过程中网格吸收的热量,并且单个网格烧蚀完全后的剩余热量并不会向临近网格传递。因此,即便是处于背风区的低能分子也能够和迎风区的高能分子在每个烧蚀循环里烧蚀掉同样多的网格^[24]。这导致在仿真结果中圆柱的前缘和后缘之间没有烧蚀形态上的差异,产生了双锥侵蚀形态,这是非常不符合流场结构的。而对于改进模型的仿真结果,奇怪的双锥形态消失了,圆柱模型前缘和后缘之间的烧蚀速率差异也得到了反映,这表明了这些改进模型的突出效果。在甘驰等^[25]提出的模型里,他们选用驻点处的热流作为特征热流使热流归一化,从而使得网格吸收的热量在数量级上和 SPARTA 程序定义的网格节点值一致,且都是无量纲的量。这种改动虽然可以让模型的预测结果体现前后缘烧蚀速率的差异,但是并没有改善 SPARTA 烧蚀程序忽略壁面材料的材料特性以及高速流动中分子热化学非平衡特性的问题。因此,本文基于上述问题对 SPARTA 烧蚀模型做进一步改进,并且通过图 10 中的比较可以看出,本文基于物理过程提出的新烧蚀模型可以达到现有模型所具有的仿真模拟效果。

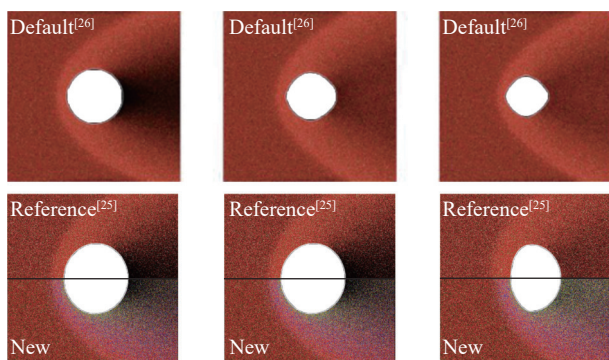


图 10 本文提出的烧蚀模型与 SPARTA 原始烧蚀模型^[26]、文献^[25]结果对比

Fig. 10 Comparison of results based on the proposed ablation model, default SPARTA^[26] and those reported in the reference^[25]

3 结果与讨论

本文提出的新烧蚀模型考虑到了壁面的材料特性与形貌特征。但是,通常情况下壁面材料的形貌特征对来流气动加热的影响并没有在模型中直接确定。因此,在本节中,本文会通过具有数值模拟数据和实验数据的二维球锥算例,检测新烧蚀模型展现壁

面形貌对烧蚀过程的影响的能力。

本文选择了一个涉及表面粗糙度的钝头球锥烧蚀算例^[15],该算例不仅通过甘驰提出的烧蚀模型^[25]进行了数值模拟,而且已经进行了相应的线下实验,为模型的预测结果提供了真实的实验数据。由于甘驰等^[25]提出的模型并没有考虑表面粗糙度而和实验结果有一定偏差,因此该算例不仅可以验证新模型的功能,还可以比较新烧蚀模型和现有烧蚀模型的预测精度。本文新提出的 SPARTA 烧蚀模型在工程应用中的价值也可以通过线上预测结果和线下实验结果的对比来体现。表 5 是该算例的参数设置表。算例选用入口边界处网格尺寸作为特征长度,用来流平均自由程计算得到来流克努森数。

表 5 二维轴对称球锥算例参数设置表^[15]
Table 5 Simulation parameters of 2D blunt sphere case^[15]

参数	参数值
来流速度(V)/($m \cdot s^{-1}$)	5800
来流温度(T)/(K)	219.58
数密度(ρ_{num})/(m^{-3})	1.7e21
来流可努森数(Kn)	1.52
壁面材料的密度($\rho_{material}$)/($kg \cdot m^{-3}$)	1800
壁面材料的熔点(T_w)/(K)	4000
壁面材料的比热容(C_w)/($J \cdot kg^{-1} \cdot K^{-1}$)	510
壁面材料的热值($q_{material}$)/($MJ \cdot kg^{-1}$)	36.95
发射率(ϵ)	0.80
转换损失系数($sf1$)	0.85
热流放大系数(μ)	Various

图 11 为该算例不考虑表面粗糙度时,新烧蚀模型的预测形貌与甘驰等^[25]提出的模型的预测结果和实验数据的对比。

根据图 11 可知,两个改进模型的预测结果相似,甘驰等^[25]提出的模型在驻点处的退缩与实验中烧蚀形貌之间的误差约为 3%。本文的预测结果与实验基本一致,钝锥模型在驻点处的退缩距离为 9.79 mm。同时,两个模型在钝锥肩部的预测结果都与实验结果

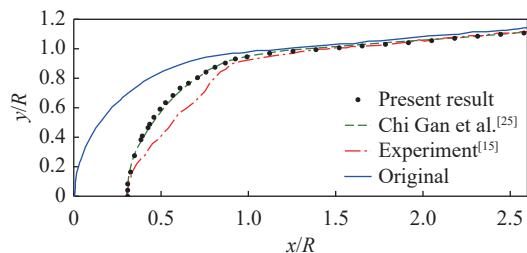


图 11 球锥烧蚀形貌模拟结果与实验结果对比

Fig. 11 Comparison of simulation and experimental results of ball cone ablation morphology

存在显著偏差。在烧蚀实验中,钝锥在烧蚀过程中形成了粗糙的纹路结构,这种粗糙的微观结构也对来流的气动加热起到了放大作用。Grabow 等^[34]通过理论分析得到碳烧蚀的表面粗糙度高度约为 0.1~1 mm,其粗糙度导致气固边界处的传热系数增加 50%~100%。接下来,本文将在这个理论范围内使用新提出的 SPARTA 烧蚀模型的来流气动加热放大系数来测试其功能的有效性。

图 12 和图 13 展示了不同热流放大系数、相同时间步下,各个预测模型的球锥烧蚀形貌模拟结果与实验结果对比。从图中可知,随着来流气动加热放大系数的增加,新提出的烧蚀预测模型的结果逐渐接近实验结果。当来流气动加热放大效果在 30% 到 50% 之间时,预测结果的优化并不显著;当放大效果增大到 60% 之后时,预测结果的优化效果变得明显;当放大效果增大到 80% 时,预测结果与消融结果基本一致。因此,当来流气动加热放大系数在 1.7~1.9 之间时,新提出的烧蚀模型的预测结果与实验结果的相对误差在 5% 以内。

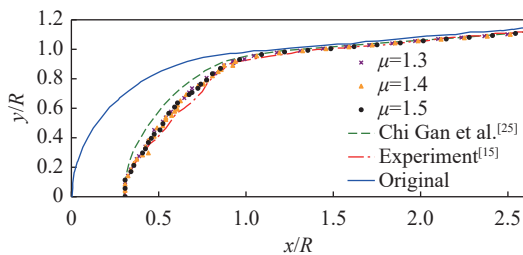


图 12 热流放大系数为 1.3~1.5 时球锥烧蚀形貌模拟结果与实验结果对比

Fig. 12 Comparison of simulation and experimental results of ball cone ablation morphology with heat flux amplification factor of 1.3~1.5

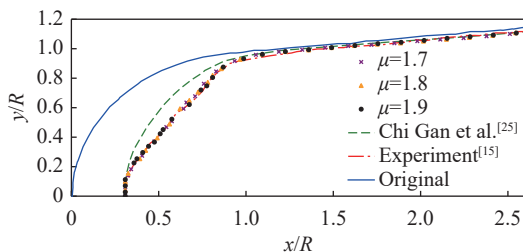


图 13 热流放大系数为 1.7~1.9 时球锥烧蚀形貌模拟结果与实验结果对比

Fig. 13 Comparison of simulation and experimental results of ball cone ablation morphology with heat flux amplification factor of 1.7~1.9

对于新提出的 SPARTA 烧蚀模型,尽管它没有考虑烧蚀纹路的形成,但这个新模型考虑了这些花纹导致的壁面材料表面粗糙度对来流气动加热的影

响。由于 SPARTA 程序给每个网格设置了一个阈值,当网格节点值小于该阈值时,预测结果上该网格即被认为烧蚀完全而不显示,但是程序中该网格中剩余的节点值可以继续用来吸收热量。对于热流放大系数较大的算例(如图 13),前缘壁面处网格的节点值更容易低于阈值,从而使得预测结果相较于系数小的算例(如图 12)烧蚀速率更快,预测结果差距明显。同时,由于阈值的存在,系数相近算例的网格节点值容易同时大于或小于阈值而展现近似的预测结果。理论推导的表面粗糙度对来流气动加热的影响往往并不是一个确定的数值,而这样的处理可以让 SPARTA 程序在理论推导的这个范围内拥有和真实实验结果近似的结果。这种较好的泛化能力也可以支持 SPARTA 程序预测不同材料和不同几何外形的模型,而不仅限于这一个算例。根据图 13,显著优化 SPARTA 模拟预测结果的来流气动加热放大系数正好在 50% 至 100% 的理论范围内。这表明在考虑烧蚀几何模型的表面粗糙度对来流气动加热的影响时,用来流气动加热放大系数代替不同位置和粗糙度的壁面单元微观形貌对热通量的放大效应是合理的。

4 结 论

针对再入飞行器前缘的热化学非平衡流动与气固壁面相互作用问题,本文基于开源 DSMC 程序 SPARTA,提出了一种涵盖变壁温效应的气动烧蚀模型。

首先讨论了 SPARTA 程序模拟高速气流高温化学反应中处理热力学非平衡和化学非平衡耦合效应的能力。从非弹性碰撞对的选择,内能弛豫发生的概率,和化学反应发生后能量的再分配逻辑等方面,详细考察了源代码的处理方式。改进后的 SPARTA 程序对于圆柱绕流的计算结果与文献基本一致。

其次,本文通过建立壁面能量守恒方程,将复杂的烧蚀过程解耦为壁面升温和壁面烧蚀两个阶段,并分析了适用不同壁面材料特性与形貌特征的二维条件下的气动烧蚀机制。新提出的烧蚀模型在验证算例中显示出与气动烧蚀实验一致的烧蚀形貌,并在后续测试中展现了其能够反应壁面材料特性和微结构对烧蚀过程影响的能力。

本文数值模拟结果表明了 SPARTA 程序处理高速热化学非平衡流动问题的能力,并为使用 DSMC 方法模拟复杂烧蚀过程提供了一种思路。然而,本文现在进行比较的工作仅侧重于烧蚀形貌的比较,而没有提供壁面升温速率和材料烧蚀速率等定量的指

标。因此, 如何利用 SPARTA 新烧蚀模型实时预测材料的退缩情况、准确计算壁面热通量分布是下一阶段研究的重点。

参 考 文 献:

- [1] 高振勋, 蒋崇文, 李椿萱. 高超高焓非平衡流动数值模拟方法研究综述[J]. 力学进展, 2023, 53(3): 561–591.
GAO Z X, JIANG C W, LI C X. Review of numerical simulation methods for hypersonic and high-enthalpy non-equilibrium flow[J]. Advances in Mechanics, 2023, 53(3): 561–591(in Chinese).
doi: 10.6052/1000-0992-22-051
- [2] YANG X F, GUI Y W, XIAO G M, et al. Reacting gas-surface interaction and heat transfer characteristics for high-enthalpy and hypersonic dissociated carbon dioxide flow[J]. International Journal of Heat and Mass Transfer, 2020, 146: 118869.
doi: 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2019.118869
- [3] 国义军, 代光月, 桂业伟, 等. 再入飞行器非平衡气动加热工程计算方法研究[J]. 空气动力学学报, 2015, 33(5): 581–587.
GUO Y J, DAI G Y, GUI Y W, et al. Engineering calculation of non-equilibrium effects on thermal environment of reentry vehicles[J]. Acta Aerodynamica Sinica, 2015, 33(5): 581–587(in Chinese).
doi: 10.7638/kqdlxxb-2014.0041
- [4] 徐国武, 杨云军, 周伟江. 返回舱再入过程中烧蚀影响研究[J]. 空气动力学学报, 2017, 35(1): 101–107.
XU G W, YANG Y J, ZHOU W J. Investigation on ablation effect of return capsule during reentry process[J]. Acta Aerodynamica Sinica, 2017, 35(1): 101–107(in Chinese).
doi: 10.7638/kqdlxxb-2015.0019
- [5] 杜耀文, 孙素蓉, 黄河激, 等. 高超声速非平衡流动-辐射特性数值模拟研究[J]. 力学学报, 2023, 55(12): 2807–2817.
DU Y W, SUN S R, HUANG H J, et al. Numerical simulation of non-equilibrium flow-radiation characteristics at hypersonic speeds[J]. Chinese Journal of Theoretical and Applied Mechanics, 2023, 55(12): 2807–2817 (in Chinese).
doi: 10.6052/0459-1879-23-373
- [6] 高铁锁, 江涛, 丁明松, 等. 再入体碳基隔热材料烧蚀流场红外辐射模拟[J]. 红外与激光工程, 2023, 52(5): 231–241.
GAO T S, JIANG T, DING M S, et al. Simulation of flow field infrared radiation over reentry vehicle with ablation of carbon-based thermal protection material[J]. Infrared and Laser Engineering, 2023, 52(5): 231–241. (in Chinese).
doi: 10.3788/IRLA20220606
- [7] 杨俊沅, 李旭东, 曾舒华, 等. 基于非线性耦合本构关系模型的尖化前缘气动加热影响研究[J]. 力学学报, 2023, 55(10): 2321–2330.
YANG J Y, LI X D, ZENG S H, et al. Research on the aero-heating at the sharpened leading edge based on nonlinear coupled constitutive relations[J]. Chinese Journal of Theoretical and Applied Mechanics, 2023, 55(10): 2321–2330(in Chinese).
doi: 10.6052/0459-1879-23-171
- [8] CHEN S, STEMMER C. Modeling of thermochemical nonequilibrium flows using open-source direct simulation Monte Carlo kernel SPARTA[J]. Journal of Spacecraft and Rockets, 2022, 59(5): 1634–1646.
doi: 10.2514/1.a35359
- [9] NIEMAN R, SANDS M, WANG Y Q, et al. Informing air-carbon ablation modeling with theoretical calculations of atomic oxygen and nitrogen interacting with carbon surfaces[J]. Physical Chemistry Chemical Physics, 2023, 25(22): 15479–15489.
doi: 10.1039/D3CP01354E
- [10] 曹盈菲, 叶致凡, 汤巨, 等. SiC 界面热化学反应演化响应机理研究[J]. 空气动力学学报, 2024, 42(4): 96–104.
CAO Y F, YE Z F, TANG J, et al. Evolution and response mechanisms of interfacial thermochemical reactions for silicon carbide materials[J]. Acta Aerodynamica Sinica, 2024, 42(4): 96–104 (in Chinese).
doi: 10.7638/kqdlxxb-2023.0161
- [11] 郑子琦, 史金光, 徐旸, 等. 基于化学反应的高超声速弹丸头部气动热预测[J]. 弹道学报, 2022, 34(3): 35–42.
ZHENG Z Y, SHI J G, XU Y, et al. Aerothermal prediction for nose of hypersonic projectile based on chemical reaction[J]. Journal of Ballistics, 2022, 34(3): 35–42(in Chinese).
doi: 10.12115/j.issn.1004-499X(2022)03-005
- [12] 周印佳, 张志贤, 付新卫, 等. 再入飞行器烧蚀热防护一体化计算方法[J]. 航空学报, 2021, 42(7): 124520.
ZHOU Y J, ZHANG Z X, FU X W, et al. Integrated computing method for ablative thermal protection system of reentry vehicles[J]. Acta Aeronautica et Astronautica Sinica, 2021, 42(7): 124520(in Chinese).
doi: 10.7527/S1000-6893.2020.24520
- [13] 孙学文, 杨海波, 米涛. 基于多场耦合/碳复合材料传热及烧蚀响应[J]. 工程科学学报, 2020, 42(8): 1040–1047.
SUN X W, YANG H B, MI T. Heat transfer and ablation of carbon/carbon composites based on multi-field coupling[J]. Chinese Journal of Engineering, 2020, 42(8): 1040–1047 (in Chinese).
doi: 10.13374/j.issn2095-9389.2019.06.30.002
- [14] 杨凯威, 梁欢, 赵小程, 等. 高速飞行器空气舵前缘三维烧蚀/温度耦合分析研究[J]. 导弹与航天运载技术, 2021(2): 39–44.
YANG K W, LIANG H, ZHAO X C, et al. Three-dimensional ablation/temperature coupling analysis of air rudder leading edge of high speed aircraft[J]. Missiles and Space Vehicles, 2021(2): 39–44(in Chinese).
doi: 10.7654/j.issn.1004-7182.20210209
- [15] 龙雨平, 韩俊, 万田, 等. 再入飞行器端头烧蚀的耦合计算方法[J]. 强度与环境, 2021, 48(2): 8–14.
LONG L P, HAN J, WAN T, et al. Research of coupling computational method about the nose-tip ablation of reentry vehicle[J]. Structure & Environment Engineering, 2021, 48(2): 8–14(in Chinese).
doi: 10.19447/j.cnki.11-1773/v.2021.02.002
- [16] ZUPPARDI G, MONGELLUZZO G. Aerodynamic analysis of an entry capsule at titan in transition regime[J]. Journal of Spacecraft and Rockets, 2023, 60(2): 659–667.
doi: 10.2514/1.a35407
- [17] ZUPPARDI G, VISIONE G, VOTTA R, et al. Analysis of aerodynamic performances of experimental flying test bed in high-altitude flight[J]. Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part G: Journal of Aerospace Engineering, 2011, 225(3): 247–258.
doi: 10.1243/09544100jaero873
- [18] DIETRICH S, BOYD I D. Scalar and parallel optimized implementation of the direct simulation Monte Carlo method[J]. Journal of Computational Physics, 1996, 126(2): 328–342.
doi: 10.1006/jcph.1996.0141
- [19] WHITE C, BORG M K, SCANLON T J, et al. dsmcFoam+: an OpenFOAM based direct simulation Monte Carlo solver[J]. Computer Physics Communications, 2018, 224: 22–43.
doi: 10.1016/j.cpc.2017.09.030
- [20] PLIMPTON S J, MOORE S G, BORNER A, et al. Direct simulation Monte Carlo on petaflop supercomputers and beyond[J]. Physics of Fluids, 2019, 31(8): 086101.

- doi: [10.1063/1.5108534](https://doi.org/10.1063/1.5108534)
- [21] LIANG J, LI Z H, LI X G, et al. Monte Carlo simulation of spacecraft reentry aerothermodynamics and analysis for ablating disintegration[J]. *Communications in Computational Physics*, 2018, 23(4): 1037–1051.
doi: [10.4208/CICP.OA-2016-0213](https://doi.org/10.4208/CICP.OA-2016-0213)
- [22] ACHAMBATH A D, RAMJATAN S, SCHWARTZENTRUBER T E. Surface properties on thermal protection system microstructure during hypersonic ablation[C]//Proc of the AIAA Scitech 2019 Forum, San Diego, California. AIAA, 2019: AIAA2019-1283.
doi: [10.2514/6.2019-1283](https://doi.org/10.2514/6.2019-1283)
- [23] STERN E C, POOVATHINGAL S, NOMPELIS I, et al. Nonequilibrium flow through porous thermal protection materials, Part I: Numerical methods[J]. *Journal of Computational Physics*, 2019, 380: 408–426.
doi: [10.1016/j.jcp.2017.09.011](https://doi.org/10.1016/j.jcp.2017.09.011)
- [24] BOTT L, CHEN S, CHRISTIAN S. DSMC study of hypersonic ablation using SPARTA[C]//2nd International Conference on Flight Vehicles, Aerothermodynamics and Re-entry Missions & Engineering. Heilbronn: 2022.
- [25] 甘驰, 陈松, 张俊. 基于 DSMC 方法的再入飞行器微烧蚀研究[J]. *力学学报*, 2023, 55(9): 1847–1857.
GAN C, CHEN S, ZHANG J. DSMC study of micro-ablation for reentry vehicles[J]. *Chinese Journal of Theoretical and Applied Mechanics*, 2023, 55(9): 1847–1857 (in Chinese).
doi: [10.6052/0459-1879-23-112](https://doi.org/10.6052/0459-1879-23-112)
- [26] SPARTA Direct Simulation Monte Carlo (DSMC) Simulator[CP].
<http://sparta.github.io> (Access date: Sep. 2024)
- [27] BOYD I D, SCHWARTZENTRUBER T E. Nonequilibrium Gas Dynamics and Molecular Simulation[M]. Cambridge: Cambridge University Press, 2017.
- [28] ZHANG C L, SCHWARTZENTRUBER T E. Inelastic collision selection procedures for direct simulation Monte Carlo calculations of gas mixtures[J]. *Physics of Fluids*, 2013, 25(10): 106105.
doi: [10.1063/1.4825340](https://doi.org/10.1063/1.4825340)
- [29] BIRD G A. Molecular gas dynamics and the direct simulation of gas flows[M]. Oxford: Clarendon Press, 1994.
- [30] BORGNAKKE C, LARSEN P S. Statistical collision model for Monte Carlo simulation of polyatomic gas mixture[J]. *Journal of Computational Physics*, 1975, 18(4): 405–420.
doi: [10.1016/0021-9991\(75\)90094-7](https://doi.org/10.1016/0021-9991(75)90094-7)
- [31] SCANLON T J, WHITE C, BORG M K, et al. Open-source direct simulation Monte Carlo chemistry modeling for hypersonic flows[J]. *AIAA Journal*, 2015, 53(6): 1670–1680.
doi: [10.2514/1.j053370](https://doi.org/10.2514/1.j053370)
- [32] BOYD I D. Modeling backward chemical rate processes in the direct simulation Monte Carlo method[J]. *Physics of Fluids*, 2007, 19(12): 126103.
doi: [10.1063/1.2825038](https://doi.org/10.1063/1.2825038)
- [33] 姜贵庆, 刘连元. 高速气流传热与烧蚀热防护[M]. 北京: 国防工业出版社, 2003.
JIANG G Q, LIU L Y. Heat transfer of hypersonic gas and ablation thermal protection[M]. Beijing: National Defense Industry Press, 2003 (in Chinese).
- [34] GRABOW R M, WHITE C O. Surface roughness effects nosetip ablation characteristics[J]. *AIAA Journal*, 1975, 13(5): 605–609.
doi: [10.2514/3.49772](https://doi.org/10.2514/3.49772)

(本文责编: 周奇杰)