

Modelling Chemical Processes for Hypersonic Flow around Blunt Bodies

M.M. Golomazov

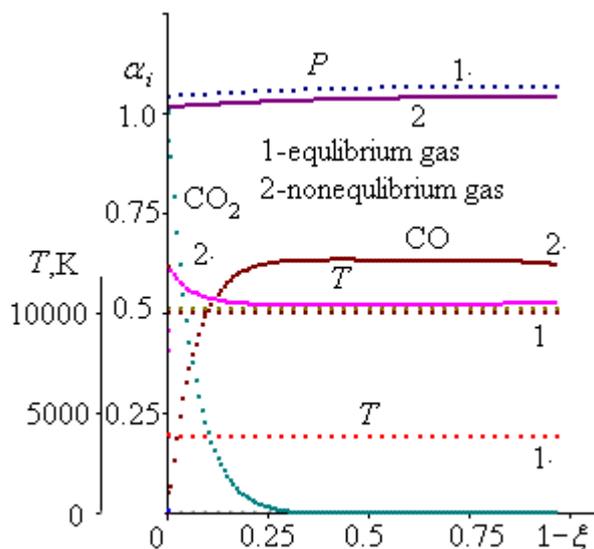
ACAD RAS, Moscow, 123056, RF

mmg@icad.org.ru

Abstract

Applied mathematic model and numerical method were devised for investigation of fundamental problem of three-dimensional compressible flow with consideration of chemical reactions. Validity of problem with detached shock wave is discussed. Investigation of problem singularity for equilibrium and non equilibrium gas is carried out. A calculations of aerodynamic characteristics, pressure, temperature and species in shock layer is adduced for trajectory decent vehicle "EXOMars-2018". Analyze of equilibrium and non equilibrium conditions in gas is accomplished.

Key words: mathematical model; equilibrium and non-equilibrium physical-chemical processes; descent vehicle; descent trajectory.



Influence of initial conditions on thermodynamic functions in shock layer

УДК 519.6: 533.6.01

Математическая модель стационарного обтекания затупленных тел

Голомазов М.М.

*Институт автоматизации проектирования РАН,
123056 г.Москва, ул. 2-я Брестская, д.19/18
mmg@icad.org.ru*

Аннотация

Описываются математическая модель и численный метод для исследования фундаментальных проблем пространственного движения сжимаемого газа с учетом физико-химических процессов. Приводится обоснование постановки краевой задачи с выделением отошедшей ударной волны для равновесно и неравновесно диссоциирующего газа. Проведено исследование условий существования и единственности решения выбранной математической модели с учетом химических реакций в газовом потоке около затупленных тел. В докладе представлены расчеты аэродинамических характеристик и величин давления, температуры и концентраций химических элементов в ударном слое по всей траектории спуска десантного модуля “ЭкзоМарс–2018”. Анализируются условия протекания равновесных и неравновесных химических реакций.

Ключевые слова: математическая модель; равновесные и неравновесные физико-химические процессы; спускаемый аппарат; траектория спуска.

1. Введение

Термин “затупленное тело” охватывает широкий класс космических тел таких, как посадочные модули космических аппаратов, метеороиды и космические устройства, которые отработали на орбите свой ресурс и под действием притяжения входят в плотные слои атмосферы. Затупленные тела входят в атмосферу планеты с различными баллистическими параметрами и движутся в атмосфере по разнообразным траекториям, что определяет воздействие газа атмосферы на эти тела. Основной проблемой торможения в атмосфере является тепловое и силовое воздействие потока газа на затупленное тело.

Затупленные тела: посадочные модули и метеороиды – в большинстве случаев являются геометрическими фигурами малого удлинения, т.е. линейные размеры от центра до границы тела в любом направлении одного порядка. При входе в плотные слои лобовая часть тела находится под силовым и тепловым воздействием, а боковая поверхность и донная часть обтекаются газом, где давление и температура близки к значениям в набегающем потоке. Главной задачей газодинамических расчетов является определение аэродинамических характеристик и тепловых потоков, и математические модели должны наиболее адекватно описывать течение газа и учитывать особенности протекания физико-химических процессов в высокотемпературном ударном слое перед аппаратом.

2. Физическая и математическая постановка задачи

На начальном участке спуска сила тяготения превосходит силу торможения, и только, начиная с некоторой высоты, из-за возрастания плотности атмосферы скорость тела начинает уменьшаться. Для воздушной атмосферы это происходит на высоте около 80 км. С этого момента начинают существенно возрастать температура газа за ударной волной и давление

на поверхности тела, что и вызывает увеличение аэродинамической силы сопротивления и величины потока тепла к поверхности тела. С этого момента и до достижения малых сверхзвуковых скоростей практически осуществляется максимальное силовое и тепловое воздействие на тело.

Математическая модель на основе системы стационарных невязких уравнений, уравнений Эйлера, является системой уравнений смешанного типа, и для этих уравнений в соответствии с теоремой Трикоми[1] можно поставить краевую задачу, обеспечивающую существование и единственность решения.

Область ударного слоя, в которой ищется решение, ограничено ударной волной, поверхностью тела и замыкающей предельной характеристической поверхностью, и течение в этой области описывается уравнениями в частных производных смешанного типа:

$$\begin{aligned}(\rho \mathbf{V}, \nabla) \mathbf{V} + \nabla p &= 0, \\ \nabla (\rho \mathbf{V}) &= 0,\end{aligned}\tag{1}$$

где \mathbf{V} – вектор скорости; ρ – плотность; p – давление.

К этим уравнениям следует добавить уравнение состояния $p = \rho RT / \mu$ и уравнение энергии $\mathbf{V}^2/2 + H(T, y_i) = \mathbf{V}_\infty^2/2 + H_\infty$; H – энтальпия; R – универсальная газовая постоянная; T – температура; μ – молекулярный вес смеси газов.

Для определения химического состава используется система уравнений химической кинетики:

$$\mathbf{V} \nabla y_i = w_i(p, T, y_i), \quad (i = 1, \dots, 5),\tag{2}$$

где y_i – концентрации компонентов; w_i – скорость изменения концентрации i -го компонента.

Термодинамические функции компонентов и константы равновесия реакций при температурах $T < 20000\text{K}$ вычисляются с помощью таблиц [2]. Константы скоростей прямых и обратных реакций приведены в работе [3]. В плотных слоях атмосферы реакции протекают равновесным образом, и состав смеси газа и их термодинамические функции определялись по таблицам работ [4,5].

Полный набор граничных условий для системы (1) состоит из условия на поверхности тела:

$$\mathbf{V} \mathbf{n} = 0,\tag{3}$$

где \mathbf{n} – вектор нормали к поверхности тела, и условий на ударной волне:

$$\begin{aligned}(\rho \mathbf{V} \mathbf{n})_s &= (\rho \mathbf{V} \mathbf{n})_\infty, \\ (\mathbf{V} \mathbf{t})_s &= (\mathbf{V} \mathbf{t})_\infty, \\ (p + \rho (\mathbf{V} \mathbf{n})^2)_s &= (p + \rho (\mathbf{V} \mathbf{n})^2)_\infty, \\ (H + \mathbf{V} \mathbf{V} / 2)_s &= (H + \mathbf{V} \mathbf{V} / 2)_\infty,\end{aligned}\tag{4}$$

где \mathbf{n} и \mathbf{t} – единичные векторы нормали и касательной к ударной волне, индекс ∞ относится к величинам перед ударной волной, индекс s – к величинам за ударной волной.

На предельной характеристической поверхности ставится условие непрерывности газодинамических функций их производных в соответствии с теоремой Трикоми о существовании и единственности решения для линейного уравнения в частных производных второго порядка смешанного типа.

3. Система уравнений химической кинетики

Для системы уравнений (2) обычно ставятся на ударной волне начальные условия сохранения молярной доли компонентов (количество молей вещества i к количеству молей в

1 м³ смеси) – $x_i = n_i / n$. Эти условия справедливы для таких параметров в набегающем потоке, когда характерное газодинамическое время много меньше времени релаксации каждой химической реакции. Однако скорость изменения концентрации i -го компонента зависит от констант скоростей реакций, которые могут отличаться на порядки при одних и тех же величинах температуры и давления в газе. Для равновесных химических реакций концентрации на ударной волне вычислялись с помощью системы уравнений Гульдберга-Вааге для соответствующих реакций:

$$\prod_{i=1}^N p_i^{v_{ij}} = K_{pj}(T), \quad j=1, \dots, m;$$

где p_i – парциальное давление i -той компоненты; v_{ij} – стехиометрический коэффициент i -той компоненты в j -той реакции; K_{pj} – константа равновесия для j -той реакции; N – количество компонентов в смеси газов; m – число реакций, протекающих в смеси газов при данной температуре и давлении.

Скорость простой обратимой реакции для мольно-объемной концентрации:

$$w = \frac{1}{v_j^+} \frac{dy_j}{dt} = \left[-k_f \prod_{i=1}^N y_i^{v_i^+} + k_r \prod_{i=1}^N y_i^{v_i^-} \right], \quad (5)$$

где y_i – мольно-объемные концентрации компонентов; y_j – концентрация j -той компоненты; N – число компонентов; k_f – константа скорости прямой реакции; k_r – константа скорости обратной реакции; v_i^+ – стехиометрические коэффициенты исходных веществ реакции, v_i^- – стехиометрические коэффициенты продуктов реакции [2].

Принцип детального равновесия для обратимой реакции:

$$\frac{k_f}{k_r} = K_c(T) = (RT)^{\Delta v} K_p(T), \quad (6)$$

где K_c и K_p – константы равновесия; $\Delta v = \sum(v_i^+ - v_i^-)$.

Полная скорость изменения концентрации является суммой скоростей всех реакций, в которых участвует данный компонент:

$$\frac{dy_j}{dt} = \frac{\partial y_j}{\partial t} + \mathbf{v} \nabla y_j = \sum v_{jk} w_k, \quad (j = 1, \dots, N). \quad (7)$$

Скорость простой обратимой реакции (1), используя принцип детального равновесия, можно записать в следующем виде:

$$w = k_f \left[- \prod_{i=1}^N y_i^{v_i^+} + \frac{1}{K_c} \prod_{i=1}^N y_i^{v_i^-} \right]$$

Значения констант скорости прямых и обратных реакций получаются с применением обобщенной формулы Аррениуса [2]: $k_f(T) = AT^n \exp(-E/RT)$, и для реакции $\text{CO}_2 = \text{CO} + \text{O}$ величина $A = 0.14\text{E}+23$; $n = -1.5$; $E = 63275$ и $k_f(1500) = 166723455 \text{ см}^3/\text{моль} \cdot \text{с}$. Второй сомножитель в квадратных скобках в случае равновесного состава обращается в ноль, что следует из уравнения Гульдберга-Вааге для этой реакции диссоциации, т.е. при малых отклонениях химического состава от равновесных значений уравнение (3) является уравнением с малым параметром $1/k_f$ при старшей производной, что требует особых вычислительных приемов.

Для определения химического состава необходимо задать начальные условия для концентраций на ударной волне. В равновесном случае величины концентраций вычисляются с помощью системы уравнений Гульдберга-Вааге, для неравновесного газа обычно используется условие постоянства состава при переходе через ударную волну. Это два предельных условия для концентраций.

На рис.1 приводятся результаты расчета траектории сегментального аппарата с $R_c = D$, $r_0 = 0.05D$; $D = 1\text{ м}$ при торможении в атмосфере земли с начальной скоростью $V_\infty = 8\text{ км/с}$ на высоте $H = 100\text{ км}$ с углом входа к плоскости горизонта $\theta_{\text{вх}} = -20^\circ$. Представлены графики

распределения температуры T и мольных долей компонентов O_2 , N_2 , NO , O и N на оси симметрии на 10 секунде полета, где скорость аппарата $V_\infty = 7.4 \text{ км/с}$ и высота $H = 73 \text{ км}$. Расчеты выполнены для равновесных (пунктир) и неравновесных (сплошная линия) химических реакций в ударном слое.

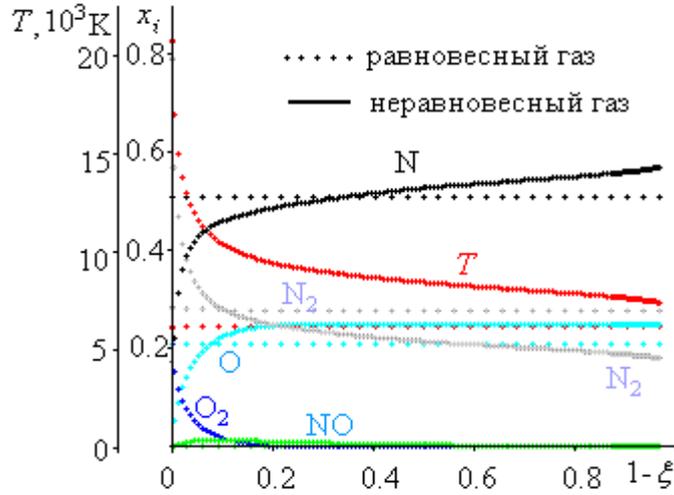


Рис.1. Распределение температуры и концентраций вдоль нулевой линии тока для равновесного и неравновесного течения в ударном слое

Концентрации компонентов для этих двух случаев значительно отличаются сразу за ударной волной ($\xi = 1$). Концентрация O_2 равна нулю для равновесного газа, а в неравновесном случае $x_{O_2} = 0.21$ как в набегающем потоке. Для равновесного режима за ударной волной $x_{N_2} = 0.28$ и $x_N = 0.51$, а для неравновесного газа $x_{N_2} = 0.79$ и $x_N = 0$.

Таким образом, величины концентраций на ударной волне могут лежать в диапазоне от условий перед ударной волной до равновесных значений. При этом равновесная температура за ударной волной $T_{eq} = 6181 \text{ К}$, а неравновесная $T_{ne} = 20723 \text{ К}$. Неравновесная температура резко снижается от $T_{ne} = 20723 \text{ К}$ до $T_{ne} = 14942 \text{ К}$ на первых двух шагах, что составляет 0.015 толщины ударного слоя ε . Так же резко изменяются и значения концентраций компонентов. Затем неравновесные величины приближаются к равновесным значениям. Равновесные величины практически постоянны поперек ударного слоя.

Таким образом, граничные условия определены для систем уравнений (1) и (2).

4. Численный метод

Для численного решения задачи в смешанной области исходная система уравнений газовой динамики (1) и химической кинетики (2) записываются в координатах, которые позволяют наиболее удобным образом описать границы расчетной области. В пространственном случае использовалась сферическая система координат (R, φ, θ) , т.к. наибольшее применение в космической технике получили формы аппаратов тел вращения (рис. 2).

В сферической системе координат (R, φ, θ) система уравнений (1), в которой уравнение неразрывности преобразовано к виду: $\rho \nabla \mathbf{V} + (\mathbf{V}/c^2) \nabla p = 0$ (c^2 – квадрат скорости звука), будет иметь следующий вид:

$$\begin{aligned}
 u \frac{\partial u}{\partial R} + \frac{v}{R} \frac{\partial u}{\partial \phi} + \frac{w}{R \sin \phi} \frac{\partial u}{\partial \theta} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial R} &= \frac{v^2 + w^2}{R}, \\
 u \frac{\partial v}{\partial R} + \frac{v}{R} \frac{\partial v}{\partial \phi} + \frac{w}{R \sin \phi} \frac{\partial v}{\partial \theta} + \frac{1}{R} \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial \phi} &= \frac{w^2 \operatorname{ctg} \phi - uv}{R}, \\
 u \frac{\partial w}{\partial R} + \frac{v}{R} \frac{\partial w}{\partial \phi} + \frac{w}{R \sin \phi} \frac{\partial w}{\partial \theta} + \frac{1}{R \sin \phi} \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial \theta} &= -\frac{w}{R} (u + v \operatorname{ctg} \phi), \\
 \frac{\partial u}{\partial R} + \frac{1}{R} \frac{\partial v}{\partial \phi} + \frac{1}{R \sin \phi} \frac{\partial w}{\partial \theta} + \frac{1}{\rho c^2} \left(u \frac{\partial p}{\partial R} + \frac{v}{R} \frac{\partial p}{\partial \phi} + \frac{w}{R \sin \phi} \frac{\partial p}{\partial \theta} \right) &= -\frac{2u + v \operatorname{ctg} \phi}{R},
 \end{aligned} \tag{8}$$

где u, v, w – проекции вектора скорости \mathbf{V} на координаты R, ϕ, θ соответственно.

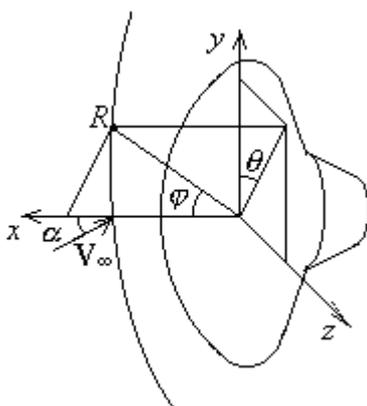


Рис.2. Система координат

Построение численной схемы сводится к замене частных производных конечными разностями. В методе интегральных соотношений система уравнений в частных производных сводится к системе обыкновенных дифференциальных уравнений, причем функции в частных производных заменяются аппроксимирующими полиномами по выбранным направлениям. Хорошо известно, что при решении дифференциальных уравнений в частных производных конечноразностные формулы, обеспечивающие высокий порядок точности, обычно весьма неудобны на практике. Противоположная картина имеет место для обыкновенных дифференциальных уравнений, для которых такие методы, как метод Рунге–Кутты, часто обеспечивают высокий порядок точности при малой затрате труда. Необходимо только выбрать направление (координату), по которой интегрируется система обыкновенных дифференциальных уравнений. Выбор направления определяется поведением функций в ударном слое. В схеме I метода интегральных соотношений переменной интегрирования является координата ϕ , а в схеме II – координата R .

Не вдаваясь в подробности, необходимо отметить, что в схеме I метода интегральных соотношений условие непрерывности на замыкающей характеристической поверхности используется в явном виде, когда направление R является касательной к характеристике. В этом случае направление ϕ совпадает с нормалью к характеристической поверхности, и производная от проекции скорости на нормаль по ϕ имеет вид:

$$\frac{dv}{d\phi} = \frac{E}{v^2 - c^2},$$

где E – функция от узловых значений газодинамических функций (индексы опущены). Для непрерывности производной необходимо, чтобы $E=0$ в этой точке. Это равенство служит граничным условием для определения положения и формы ударной волны, которая зависит от распределения проекции скорости u на оси $\phi = 0$.

В схеме II метода интегральных соотношений для определения положения и формы ударной волны используется условие на поверхности тела (3).

Определенные трудности в реализации схемы II связаны с вырождением уравнений газовой динамики в точках, где выполняются условия (3). Метод интегрирования обыкновенных дифференциальных уравнений выбирается таким образом, чтобы исключить вычисление производных в этих точках. Так в схеме II метода интегральных соотношений использовался метод Рунге-Кутты второго порядка точности с промежуточным шагом.

При выводе аппроксимирующей системы уравнений используется преобразование сферической системы координат следующего вида:

$$\xi = \frac{R - R_b(\varphi, \theta)}{R_s(\varphi, \theta) - R_b(\varphi, \theta)}; \eta = \frac{\varphi}{\varphi_g(\xi, \vartheta)}; \vartheta = \theta; (0 \leq \xi \leq 1; 0 \leq \eta \leq 1; 0 \leq \vartheta \leq 2\pi),$$

где $R = R_s(\varphi, \theta)$ – уравнение ударной волны; $R = R_b(\varphi, \theta)$ – уравнение поверхности тела; $\varphi = \varphi_g(\xi, \vartheta)$ – замыкающая граничная поверхность.

Аппроксимирующие выражения по φ и η :

$$f'_1 = f'_0 + \frac{2h_1 - h_0}{h_1} \left(\frac{f_1 - f_0}{h_0} - f'_0 \right) + \frac{h_0}{h_1} \frac{h_0}{h_0 + h_1} \left(\frac{f_2 - f_0}{h_0 + h_1} - f'_0 \right), \quad f = R_s, u, p.$$

Для функций v и w – квадратичный многочлен.

Аппроксимирующие выражения по θ : $(\theta_j = j\pi/3, j = 0, 1, 2, 3)$

$$f = a_0 + a_1 \cos \theta + a_2 \cos 2\theta + a_3 \cos 3\theta, \quad f = u, v, p, R_s.$$

$$w = b_1 \sin \theta + b_2 \sin 2\theta.$$

Аппроксимирующие выражения подставляются в преобразованную систему уравнений. В результате получается система обыкновенных дифференциальных уравнений относительно узловых значений функций.

Для получения аппроксимирующей системы уравнений разрешается относительно производных от узловых значений газодинамических функций по ξ , и система уравнений принимает следующий вид:

$$\frac{dp}{d\xi} = \frac{\rho}{D} \left(F_u - \frac{R'_\phi}{R} F_v - \frac{R'_\theta}{R \sin \phi} F_w - GF_p \right),$$

$$\frac{du}{d\xi} = \frac{1}{G} \left(F_u - \frac{1}{\rho} \frac{dp}{d\xi} \right),$$

$$\frac{dv}{d\xi} = \frac{1}{G} \left(F_v + \frac{R'_\phi}{R} \frac{1}{\rho} \frac{dp}{d\xi} \right),$$

$$\frac{dw}{d\xi} = \frac{1}{G} \left(F_w + \frac{R'_\theta}{R \sin \phi} \frac{1}{\rho} \frac{dp}{d\xi} \right),$$

$$D = 1 + \left(\frac{R'_\phi}{R} \right)^2 + \left(\frac{R'_\theta}{R \sin \phi} \right)^2 - \frac{G^2}{c^2}, \quad (9)$$

$$F_u = \frac{\varepsilon}{R} (v^2 + w^2) - H \frac{\partial u}{\partial \eta} - \frac{\varepsilon w}{R \sin \phi} \frac{\partial u}{\partial \vartheta} + \frac{\eta \phi'_{g\xi}}{\phi_g} \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial \eta},$$

$$F_v = \frac{\varepsilon}{R} (w^2 \text{ctg} \phi - uv) - H \frac{\partial v}{\partial \eta} - \frac{\varepsilon w}{R \sin \phi} \frac{\partial v}{\partial \vartheta} - \frac{1}{\phi_g} \left(\frac{\varepsilon}{R} + \eta \phi'_{g\xi} \frac{R'_\phi}{R} \right) \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial \eta},$$

$$F_w = -w \frac{\varepsilon}{R} (u + v \text{ctg} \phi) - H \frac{\partial w}{\partial \eta} - \frac{\varepsilon w}{R \sin \phi} \frac{\partial w}{\partial \vartheta} - \left(\frac{\eta \phi'_{g\xi}}{\phi_\xi} \frac{R'_g}{R \sin \phi} - \frac{\eta \phi'_{g\vartheta}}{\phi_\xi} \frac{\varepsilon}{R \sin \phi} \right) \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial \eta} - \frac{\varepsilon}{R \sin \phi} \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial \vartheta}$$

$$F_p = -\varepsilon \left(\frac{(2u + v \text{ctg} \phi)}{R} + D\rho \right) + \eta \frac{\phi'_{g\xi}}{\phi_g} \left(\frac{\partial u}{\partial \eta} - \frac{R'_\phi}{R} \frac{\partial v}{\partial \eta} - \frac{R'_\theta}{R \sin \phi} \frac{\partial w}{\partial \eta} \right) - \frac{\varepsilon}{R \phi_g} \frac{\partial v}{\partial \eta} + \frac{\eta \phi'_{g\vartheta}}{\phi_g} \frac{\varepsilon}{R \sin \phi} \frac{\partial w}{\partial \eta} - \frac{H}{\rho c^2} \frac{\partial p}{\partial \eta} - \frac{\varepsilon}{R \sin \phi} \left(\frac{\partial w}{\partial \vartheta} + \frac{w}{\rho c^2} \frac{\partial p}{\partial \vartheta} \right).$$

$$G = u - \frac{R'_\phi}{R} v - \frac{R'_\theta}{R \sin \phi} w, H = \frac{1}{\phi_g} \left(-\eta \phi'_{g\xi} G + \frac{\varepsilon v}{R} - \frac{\eta \phi'_{g\vartheta}}{R \sin \phi} \varepsilon w \right), \varepsilon = R_s - R_b,$$

Для неравновесных химических процессов добавляются уравнения:

$$\frac{d\alpha_i}{d\xi} = \frac{1}{G} \left(\frac{d\alpha_i}{dt} - H \frac{\partial \alpha_i}{\partial \xi} - \frac{\varepsilon w}{R \sin \phi} \frac{\partial \alpha_i}{\partial \vartheta} \right), (i = 1, \dots, n-2)$$

$$\frac{dT}{d\xi} = -\frac{1}{H_T} \left[\frac{1}{2} \frac{dV^2}{d\xi} + \mu \sum_i (H - H_i) \frac{1}{\mu_i} \frac{d\alpha_i}{d\xi} \right], H_T = \sum H_{iT} \frac{\alpha_i}{\mu_i},$$

$$c^{-2} = \frac{\rho}{p} - \frac{1}{T \sum H_{iT} \frac{\alpha_i}{\mu_i}},$$

α_i – массовые концентрации компонентов смеси газов

Индексы при узловых значениях функций опущены.

Значения газодинамических функций в узлах сетки на ударной волне находятся, задавая приближенное значение формы ударной волны $R = R_s(\varphi, \theta)$.

Условия непротекания на теле $G_{ij} = 0$ служат условиями для подбора узловых значений формы ударной волны R_{sij} ($i = 1, \dots, I; j = 1, \dots, J$). Эти условия приводят к вырождению системы (9).

Аппроксимирующая система обыкновенных дифференциальных уравнений (9) интегрируется от ударной волны ($\xi = 1$) до поверхности тела ($\xi = 0$) методом Рунге-Кутты второго порядка точности с промежуточным шагом, что позволяет избежать вырождения.

Для нахождения точных узловых значений формы ударной волны $R_{s,ij} = R_s(\varphi_i, \theta_j)$ используется итерационный метод Ньютона. На каждом итерационном шаге необходимо определить квадратную матрицу $\mathbf{M} = (\partial G_{ij}^0 / \partial R_{sij})_k$ ($k = I \cdot J + 1$), каждая строка которой вычисляется интегрированием аппроксимирующей системы обыкновенных дифференциальных уравнений.

$$|\Delta R_{sij}| = -\mathbf{M}^{-1} |G_{ij}^0|.$$

5. Исследование химических процессов в ударном слое

На рис. 3 представлены графики изменения концентраций компонентов смеси газов и температуры T в точке торможения сегментального тела с $R_c = D$, радиусом закругления кромки $r_0 = 0.125D$ по траектории спуска в атмосфере Марса для двух предельных условий для концентраций на ударной волне. Скорость входа 4586 м/с, угол входа -9.49° ; $D = 1.06$ м, масса 22.17 кг. Анализ результатов показывает, что изменение условий практически не влияет на давление газа в ударном слое, что подтверждается сравнительно малым расхождением

в величинах коэффициента аэродинамического сопротивления c_x и высоты полета H . Состав и температура газа значительно отличаются на участке траектории $50 < t < 170$ с, где протекают химические реакции и газ является сплошной средой, и максимальная разность в температуре достигает 5500 К. Такая большая разница в величинах температуры вызывает необходимость определения четких границ равновесного и неравновесного режимов протекания химических реакций по траектории торможения.

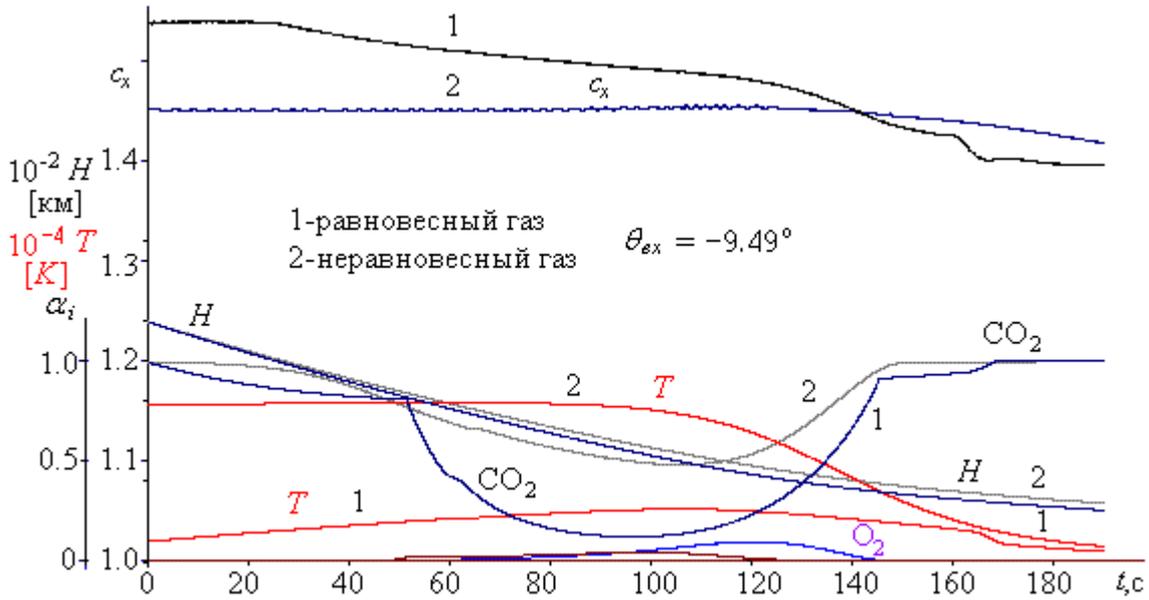


Рис.3. Сравнение траекторий для двух предельных условий для концентраций на ударной волне

На рис. 4 сравниваются величины давления p , температуры T и концентраций CO и CO_2 вдоль нулевой линии тока для равновесных и неравновесных химических реакций в точках траектории десантного модуля “ЕхоMars–2018”. В точке $t = 40$ с скорость аппарата достигает максимального значения $V = 5.8175$ км/с, и эту точку можно считать начальной точкой траектории торможения в плотных слоях атмосферы Марса ($H = 66410$ м). Давление за ударной волной отличается незначительно. Наибольшее отличие наблюдается в концентрации компонентов CO и CO_2 на ударной волне ($\xi = 1$), что вызывает рост температуры за ударной волной вплоть до точки торможения для неравновесного случая. Очевидно, что начальные условия для концентраций при высоких температурах и малых давлениях, т.е. на начальном участке траектории, являются неприемлемыми в обоих случаях. В неравновесном случае концентрация CO_2 на ударной волне равна единице, и скорость изменения концентраций и температуры газа в ударном слое слишком велика. В равновесном случае концентрация CO_2 на ударной волне равна нулю. Малая величина давления в набегающем потоке $p_\infty = 0.162$ Па значительно меньше пороговой величины, при которой химические реакции протекают равновесным образом. В точке траектории $t = 97.8$ с давление для равновесного и неравновесного случаев практически совпадают, а величины температуры и концентраций отличаются в значительной степени. Концентрация CO_2 и CO плавно изменяются от ударной волны до поверхности тела. Давление в набегающем потоке $p_\infty = 44.08$ Па. Из этого анализа данных следует, что на начальном участке траектории необходимо находить другие условия для концентраций на ударной волне.

Было проведено исследование влияния начальных условий для концентраций на поле течения в ударном слое, причем наибольшее значение имело изменение температуры и концентраций вдоль лучей аппроксимации.

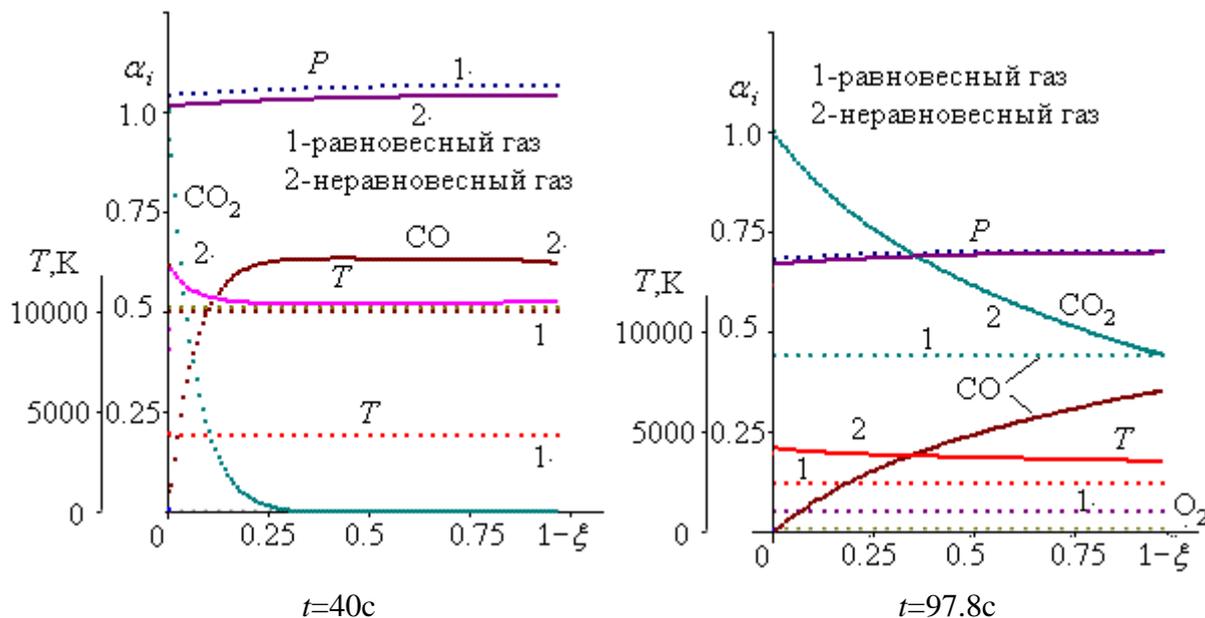


Рис.4. Распределение газодинамических функций вдоль нулевой линии тока в двух точках траектории десантного модуля “ЕхоMars–2018”

На рис. 5 сравниваются величины температуры и концентраций для равновесных химических реакций и неравновесного случая с начальными значениями концентрации $\alpha_{CO_2} = 0.5$: а) вдоль оси симметрии и б) на замыкающем граничном луче. На оси симметрии величина температуры за ударной волной по сравнению с $\alpha_{CO_2} = 1$ уменьшается на 4000 К и медленно изменяется вплоть до поверхности тела. Таким же образом ведут себя концентрации α_{CO_2} и α_{CO} , достигая на поверхности тела равновесных значений. На граничном луче температура и концентрации так же плавно изменяются и различие в величинах с равновесными значениями не велики. Эти данные показывают, что величины и поведение газодинамических и термодинамических функций в ударном слое определяются заданием начальных условий для концентраций при переходе через ударную волну. Чтобы устранить градиентный слой, необходимо задать степень диссоциации CO_2 при переходе через ударную волну, т.е. задать другие граничные условия для концентраций на ударной волне. Эти условия нужно подобрать таким образом, чтобы за ударной волной температура не имела большого градиента и не превосходила равновесную температуру на большую величину.

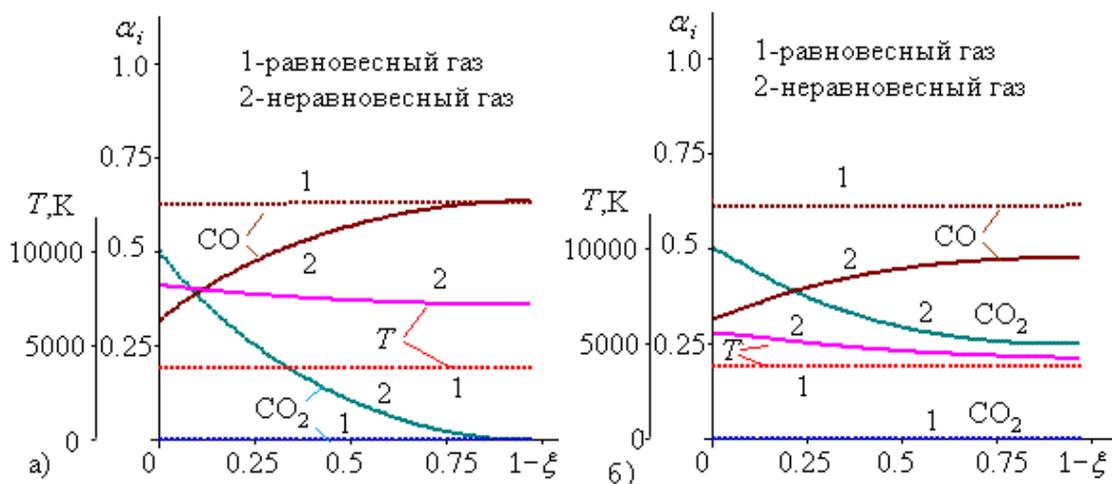


Рис.5. Влияние начальных условий для концентраций на термодинамические функции в ударном слое

Для практических приложений необходимо задать степень диссоциации молекул CO_2 , которую можно определить, исследуя поля течения в ударном слое по траектории СА в атмосфере Марса.

Расчеты для значений концентрации CO_2 на ударной волне $\alpha_{\text{CO}_2}=0.75$ и $\alpha_{\text{CO}_2}=0.5$ показали, что при $\alpha_{\text{CO}_2}=0.75$ за ударной волной образовывался градиентный слой, при $\alpha_{\text{CO}_2}=0.5$ градиентный слой отсутствовал [6]. Проведенный анализ результатов показывает, что начальное условие постоянства состава на ударной волне приводит к определенным противоречиям в физико-химическом процессе за ударной волной. Поэтому необходимо определить область траектории, где происходит переход от неравновесных химических процессов к равновесным течениям газа в ударном слое. Как правило, проводят сравнение характерного времени протекания химической реакции с характерным аэродинамическим временем. Но температура и давление значительно меняются в поле течения в ударном слое, следовательно, изменяется характерное время каждой химической реакции, тогда как характерное аэродинамическое время одно и то же в рассматриваемой точке траектории. К тому же, как показано выше, в определенных областях температур и давлений отдельные реакции не протекают из-за отсутствия реагирующих компонентов.

На рис. 6 сравниваются результаты расчетов траектории СА EXOMars в предположении равновесных (кривые 1) и неравновесных (кривые 2) химических реакций в смеси газов в ударном слое. Расчеты выполнены для участка траектории $40 \text{ с} < t < 160 \text{ с}$ для номинального варианта атмосферы Марса, когда набегающий сверхзвуковой поток газа (100% CO_2) является сплошным и не вязким. Расчет обтекания СА проводился во всех точках траектории с шагом $\delta t=0.1 \text{ с}$. На начальном участке для неравновесного случая степень диссоциации $\alpha_{\text{CO}_2}=0.5$. Разрывы в данных для неравновесного случая с $t=73 \text{ с}$ до $t=98 \text{ с}$ связаны с неустойчивым счетом уравнений химической кинетики, так как константы скорости химических реакций велики при данных температурах ($T \sim 5000 \text{ К}$), а смесь газов в ударном слое стремится к равновесному составу. В равновесном случае определенные трудности в расчете обтекания СА возникали в окрестности точки траектории $t=92 \text{ с}$, когда звуковая точка на теле переходит с конической части на поверхность тора. При $t > 92 \text{ с}$ происходит уменьшение коэффициента сопротивления c_x , причем значения c_x и температуры торможения T для равновесного и неравновесного случая сближаются, а после $t=110 \text{ с}$ они практически совпадают. Наибольшие различия в величинах c_x и температуры торможения T наблюдаются на участке $40 \text{ с} < t < 73 \text{ с}$, достигая для c_x максимального значения 0.08 и для T двукратного значения при $t=40 \text{ с}$. Здесь же представлен график производной по углу атаки от статического момента тангажа при балансировочном угле атаки $\alpha=0$ $m_{z\alpha}$, которая определяет статическую устойчивость аппарата. На начальном участке полета до $t=70 \text{ с}$ $m_{z\alpha} < 0$, и СА статически устойчив. При $70 \text{ с} < t < 100 \text{ с}$ расчет обтекания СА под углом атаки затруднен из-за перемещения звуковой точки по конической поверхности и перехода химических процессов от неравновесного к равновесному режиму, а при $100 \text{ с} < t < 110 \text{ с}$ $m_{z\alpha}$ становится положительным. Таким образом, СА является статически неустойчивым на балансировочном угле атаки $\alpha=0$ на достаточно протяженном участке траектории.

Для объяснения причины неустойчивого счета и решения на рис.7 приводятся физические картины обтекания СА в двух точках траектории $t=89 \text{ с}$ и $t=95.2 \text{ с}$, на которых видно резкое изменение области смешанного течения. Значительно изменились положение и форма ударной волны и, следовательно, граничные условия. К тому же изменились положение и форма звуковой линии, являющейся линией смены типа или линией вырождения в области решения.

Еще более существенные изменения в решении были обнаружены при расчетах обтекания потоком воздуха затупленного конуса с геометрическими параметрами: $R_c=0.294117647D$; $\theta_k=120^\circ$; $r_0=0.044117647D$ (MSRO) [7].

На рис. 8 нанесены графики коэффициента сопротивления $c_x(V_\infty)$ и координаты замыкающей поверхности на теле $y_{гр}(V_\infty)$ при увеличении скорости V_∞ от 0,8 до 7 км/с (кривые 1) и уменьшении скорости V_∞ от 7 до 0,8 км/с (кривые 2) для этого конуса.

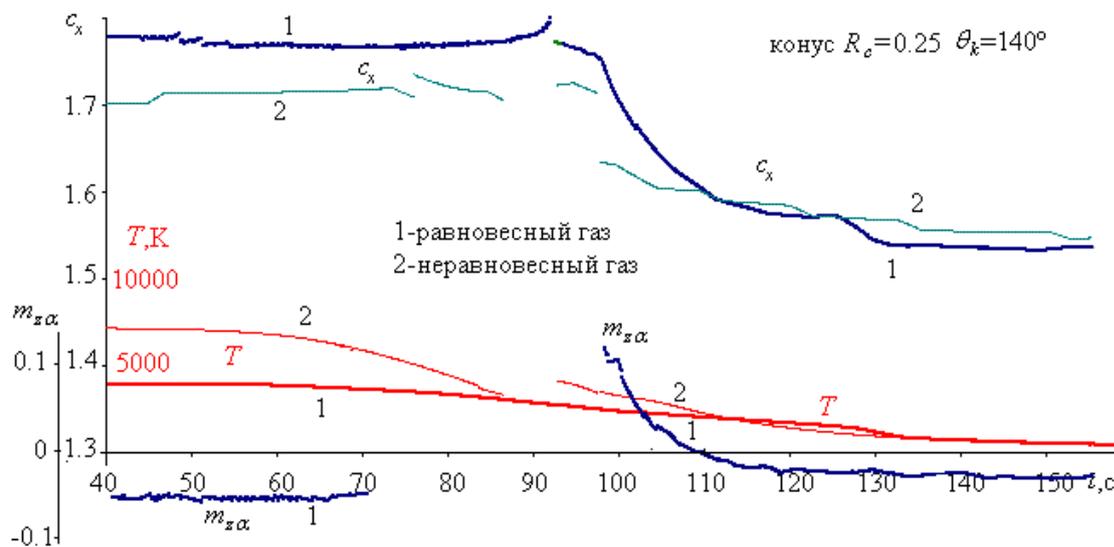


Рис.6. Изменение по траектории СА EXOMars коэффициента сопротивления и температуры в точке торможения при равновесном и неравновесном течении газа в ударном слое

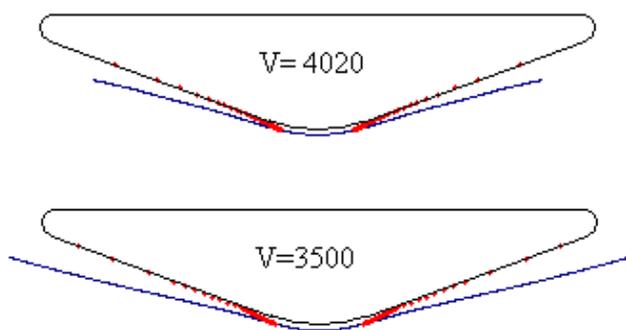


Рис.7. Физическая картина обтекания СА “ExoMars”

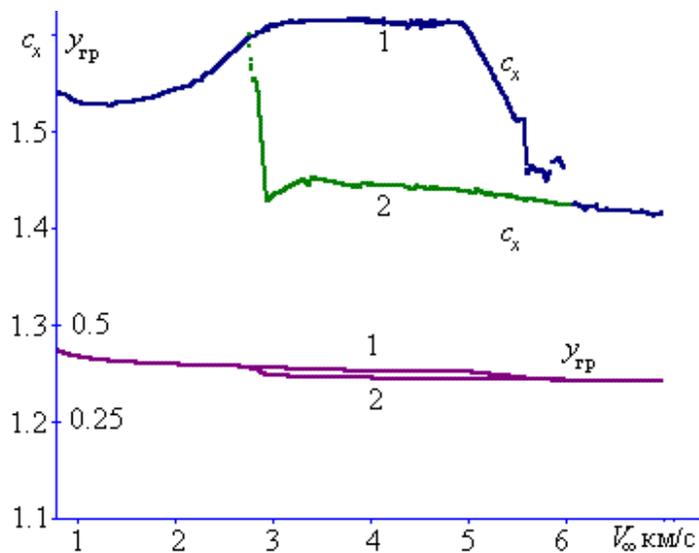


Рис.8. Физическая картина обтекания СА MSRO

Для скорости потока $2,7 < V_\infty < 6$ км/с величины c_x и $y_{гр}$ принимают разные значения в зависимости от направления изменения скорости, т.е. имеется два устойчивых независимых решения. Две ветви решения появляются в диапазоне скоростей $2,7 < V_\infty < 6$ км/с, когда в ударном слое протекают химические реакции диссоциации кислорода O_2 и азота N_2 .

Заключение

На основе разработанного численного метода выполнены расчеты аэродинамики СА на траекториях торможения в марсианской атмосфере с учетом равновесно и неравновесно диссоциирующего газа на сверхзвуковом участке полета. Неравновесные химические процессы протекают на начальном участке траектории, где температура за скачком достигает максимальных значений, и реакция диссоциации $CO_2 = CO + O$ протекает наиболее интенсивно. В результате, в смеси газа в ударном слое преобладают компоненты CO и O . Анализ результатов показывает, что начальное условие постоянства состава на ударной волне приводит к определенным противоречиям в физико-химическом процессе за ударной волной. Для адекватного определения состава газа необходимо задавать степень диссоциации CO_2 на ударной волне. Критерием правильного выбора степени диссоциации может служить отсутствие узкого градиентного слоя за ударной волной.

Анализ химических процессов в диапазоне температур и давлений, соответствующих траекторным параметрам в номинальной атмосфере Марса (100% CO_2), показал, что при начальной скорости СА EXOMars 5,8 км/с на высоте 110 км химические реакции в ударном слое при $t > 40$ протекают в неравновесном режиме, в то время как весь сверхзвуковой участок траектории длится 170 с. Неравновесность химических реакций проявляется в узком градиентном слое за ударной волной из-за начальных условий постоянства состава газа на ударной волне [8]. Большие размеры аппарата приводят к интенсификации химических реакций, и для СА EXOMars и MSRO химический состав в ударном слое в основном соответствует равновесным физико-химическим процессам.

Литература

1. Трикоми Ф. 1947. О линейных уравнениях смешанного типа// ОГИЗ, ГОСТЕХИЗДАТ, 192 с.
2. Гурвич Л.В., Вейц И.В., Медведев В.А. и др. Термодинамические свойства индивидуальных веществ. Справочное издание в 4-х томах М.: Наука, 1982.
3. Физико-химические процессы в газовой динамике. В 2-х томах. Динамика физико-химических процессов в газе и плазме. М.: Изд-во Мос. ун-та, 1995.
4. Плешанов А.С. Состав, термодинамические и газодинамические свойства углекислого газа для температур от 1000 до 12000 К и давления от 10^{-2} до 10^3 атм. // Физическая газодинамика, теплообмен и термодинамика газов высоких температур/под ред. А.С. Предводителева. М.: Изд-во АН СССР. 1962. С. 15–35.
5. Кузнецов Н.М. Термодинамические функции и ударные адиабаты воздуха при высоких температурах. М.: Машиностроение, 1965. 375 с.
6. Голомазов М.М., Иванков А.А. О постановке граничных условий на ударной волне при обтекании затупленных тел гиперзвуковым потоком газа. Вестник ФГУП НПО им. С.А. Лавочкина, 2012. №1 С. 38–45.
7. Голомазов М.М. Особенности численного моделирования обтекания затупленных тел гиперзвуковым потоком газа//Физико-химическая кинетика в газовой динамике. 2011. Том 12. 11с. <http://chemphys.edu.ru/issues/2011-12/articles/351/>
8. Голомазов М.М. Исследование химических процессов при гиперзвуковом обтекании затупленных тел углекислым газом// Физико-химическая кинетика в газовой динамике. 2012. Том 13, вып. 2. 13с. <http://chemphys.edu.ru/issues/2012-13-2/articles/308/>

Статья поступила в редакцию журнала 5 ноября 2015 г.