

УДК 519.6: 533.6.01

ИССЛЕДОВАНИЕ ХИМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ ПРИ ГИПЕРЗВУКОВОМ ОБТЕКАНИИ ЗАТУПЛЕННЫХ ТЕЛ УГЛЕКИСЛЫМ ГАЗОМ

Голомазов М.М.

(Институт автоматизации проектирования РАН, г.Москва)

mmg@icad.org.ru

Аннотация

Создано прикладное математическое обеспечение для исследования гиперзвукового обтекания затупленных тел невязким газом с учетом физико-химических процессов. На его основе выполнены расчеты трехмерных течений газа в транзвуковой области между ударной волной и обтекаемым телом равновесно и неравновесно диссоциирующего газа для условий в набегающем потоке, соответствующих марсианской атмосфере. Это позволило определить адекватные модели химических реакций и оптимальные методы расчета аэродинамики космических аппаратов в атмосфере Марса. Проведено исследование влияния равновесных и неравновесных химических реакций на аэродинамические характеристики спускаемого космического аппарата сегментальной и конической формы по траектории торможения в атмосфере Марса.

INVESTIGATION CHEMICAL PROCESSES FOR HYPERSONIC FLOW OF CARBON DIOXIDE AROUND BLUNT BODIES

Applied mathematic programs on parallel digital cluster were devised for investigation of hypersonic unviscous flow around blunt bodies with consideration of chemical reactions. Calculations of three-dimensional flow were conducted in transonic region between shock wave and body surface for equilibrium and non equilibrium carbon dioxide gas with dissociation processes. It allowed defining adequate set of chemical reactions and optimal method of aerodynamic calculation of landing vehicles in Martian atmosphere. The investigations of aerodynamic coefficients of landing vehicle were accomplished for segmental body shape on braking trajectory in Martian atmosphere.

Введение

При создании спускаемых аппаратов (СА) для исследования Марса значительное внимание уделяется выбору его формы, определению аэродинамических характеристик, конструкционных параметров тепловой защиты, обеспечивающих безопасный спуск СА, а также прогноз района его посадки. Для этого используются как экспериментальные, так и теоретические методы исследований. Теоретические методы определения аэродинамических характеристик СА и тепловой нагрузки на его поверхность играют решающую роль на тех участках траектории движения СА, где затруднительно или невозможно в рамках наземного эксперимента воспроизвести или смоделировать реальные условия обтекания СА.

При проектировании СА на поверхность Марса для обоснования выбора оптимальной формы СА необходимо использовать расчетно-теоретические методы

исследования аэродинамических характеристик аппарата, учитывающие реальные физико-химические процессы, которые не удается воспроизвести или смоделировать на установках существующей экспериментальной базы. В этом случае приоритет отдается расчетным методам, описывающих в тех или иных предположениях процессы, происходящие в области газового потока перед лобовой поверхностью СА. Так как главной задачей газодинамических расчетов является определение аэродинамических характеристик и тепловых потоков, необходимо использовать математические модели, наиболее адекватно описывающие течение газа и учитывающие особенности протекания физико-химических процессов в высокотемпературном ударном слое перед аппаратом.

Кинетика химических реакций в углекислом газе.

Для определения адекватного состава смеси газов и системы уравнений химической кинетики было проведено исследование диапазонов протекания реакций в равновесно диссоциирующем углекислом газе. Концентрации компонентов в смеси газов вычислялись с помощью системы уравнения Гильдберга-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, T – температура смеси газов, N – количество компонентов в смеси газов, m – число реакций, протекающих в смеси газов при данной температуре и давлении.

На рис. 1 представлены графики зависимостей молярных долей ξ_i в смеси, образованной при диссоциации углекислого газа, от температуры в диапазоне 300-7000 K для давлений $p = 0.0001-0.1$ атм. для равновесных физико-химических процессов. Расчеты выполнены для уравнений химического равновесия реакций диссоциации и ионизации в CO_2 по табличным данным констант равновесия работы [1].

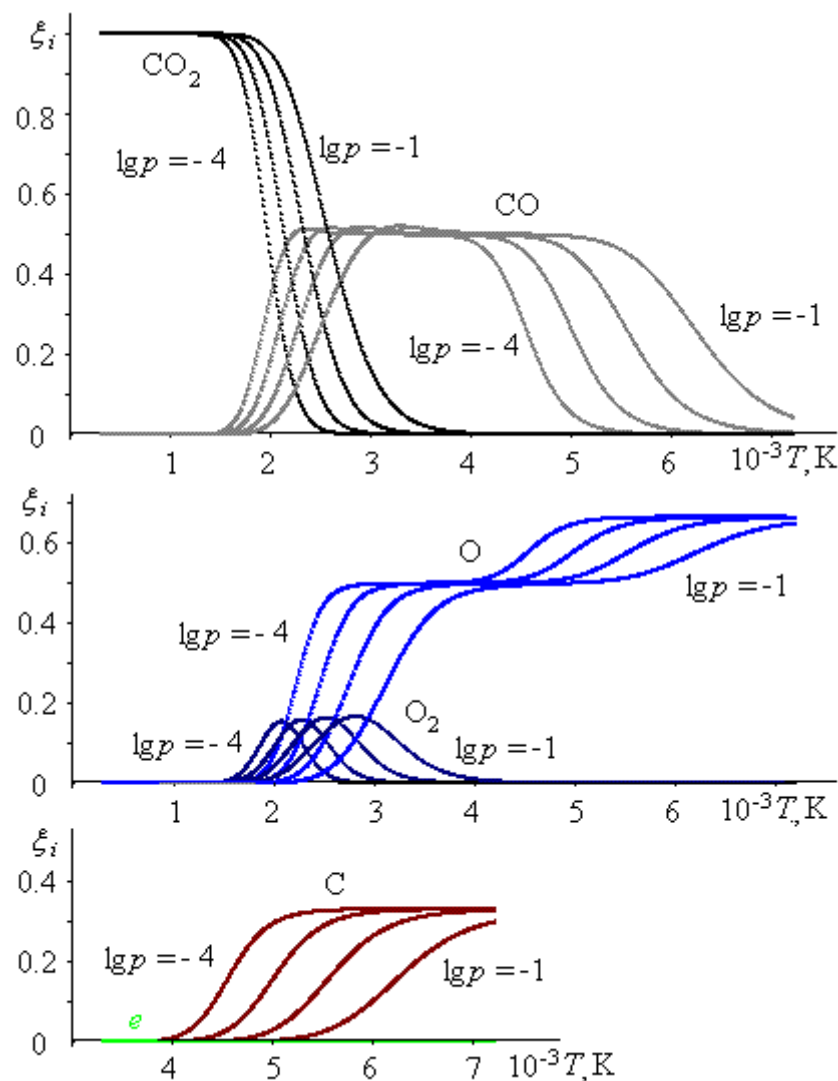


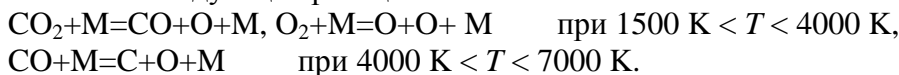
Рис. 1. Зависимость концентраций от температуры и давления

Видно, что процессы диссоциации CO_2 начинаются при температуре $T = 1500$ К при всех значениях давления. Причем пороговая температура полной диссоциации молекул CO_2 в значительной степени зависит от величины давления, изменяясь от 3000 К для $p=0.0001$ атм. до 4000 К для $p=0.1$ атм. Увеличение давления приводит к замедлению реакций диссоциации и сдвигу кривых концентраций компонентов в область высоких температур. Время релаксации уменьшается с ростом давления, и неравновесные химические реакции могут протекать в смеси газов только при определенных значениях параметров в набегающем потоке и температуры и давления за ударной волной. Концентрация электронов e в смеси газов практически равна нулю, и реакции ионизации в этом диапазоне температур и давлений можно не рассматривать.

Реакция диссоциации углекислого газа $\text{CO}_2 + \text{M} = \text{CO} + \text{O} + \text{M}$ приводит к образованию молекулы окиси углерода CO и атома кислорода O (M – третья частица, участвующая в столкновении и инициирующая процесс диссоциации). Эти частицы вместе с CO_2 образуют в основном газовую смесь при температурах до 7000 К.

Молекулярный кислород образуется в результате реакции рекомбинации атомов кислорода в диапазоне температур от 1500 К до 4000 К. Мольная концентрация O_2 достигает максимальной величины 0.2 и исчезает при $T > 4000$ К. Отсюда можно сделать вывод, что при $T > 4000$ К реакцию $\text{O}_2 + \text{M} = \text{O} + \text{O} + \text{M}$ можно не рассматривать.

Таким образом, в диапазоне давлений $p=0.0001-0.1\text{атм.}$ в смеси газов протекают в основном следующие реакции:



Рассмотренная область давлений и температур включает значения термодинамических величин в большей части ударного слоя по всей траектории торможения СА в атмосфере Марса, где газ можно рассматривать сплошной средой. Исключение составляет узкая область за ударной волной для неравновесных химических процессов вследствие начальных условий на ударной волне для уравнений химической кинетики, когда температура может превышать 7000 К.

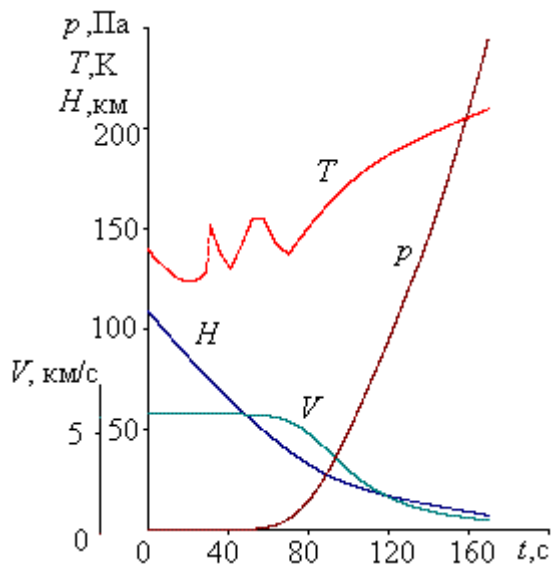


Рис.2. Траектория СА EXOMars

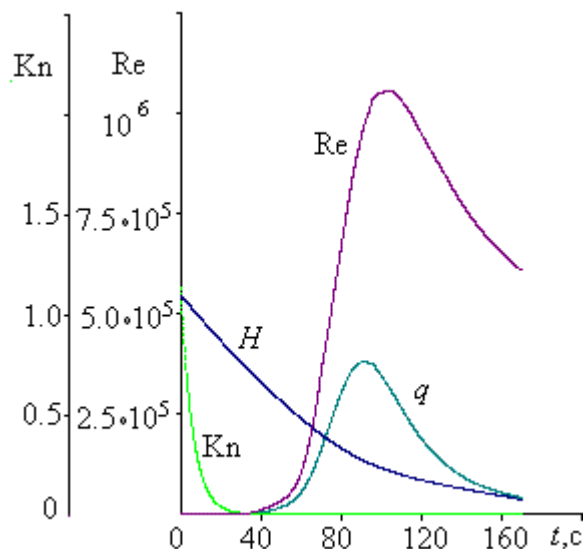


Рис.3. Изменение Re и Kn по траектории

На рис.2 приведены траекторные параметры спускаемого аппарата EXOMars массой 1600 кг и диаметром миделевого сечения 3.9 м при входе в атмосферу Марса со скоростью 5.8 км/с под углом к горизонту $\theta = -12^\circ$. Начальная высота $H = 110 \text{ км/с}$ ($t=0$). Приведены изменение высоты H и скорости полета V на гиперзвуковом участке траектории и давление p и температура T в набегающем потоке. Скорость аппарата начинает снижаться при $t > 40 \text{ с}$.

На рис.3 представлены значения чисел Re и Kn. При $t > 40 \text{ с}$ течение газа в ударном слое является не вязким и континуальным ($\text{Re} > 47000$ и $\text{Kn} < 0.002$). Скоростной напор q принимает достаточные значения для начала торможения СА. Скорость СА при $t=40 \text{ с}$ слегка подрастает до 5809 м/с (число Маха $M=30$) и при $t=170 \text{ с}$ снижается до 530 м/с ($M=2.2$). На этом участке траектории необходимо учитывать физико-химические процессы.

Система уравнений химической кинетики

Скорость простой обратимой реакции для мольно-объемной концентрации:

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

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, ν_i^+ – стехиометрические коэффициенты исходных веществ реакции, ν_i^- – стехиометрические коэффициенты продуктов реакции [2].

Принцип детального равновесия для обратимой реакции:

$$\frac{k_f}{k_r} = K_c(T) = (RT)^{\Delta\nu} K_p(T), \tag{2}$$

где K_c и K_p – константы равновесия, $\Delta\nu = \sum(\nu_i^+ - \nu_i^-)$.

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

$$\frac{dy_j}{dt} = \frac{\partial y_j}{\partial t} + \mathbf{V}\nabla y_j = \sum \nu_{jk} w_k, \quad (j = 1, \dots, N). \tag{3}$$

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

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

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 $A = 0.14E+23$, $n = -1.5$, $E = 63275$ и $k_f(1500) = 166723455 \text{ см}^3/\text{моль}\cdot\text{с}$. Второй множитель 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.

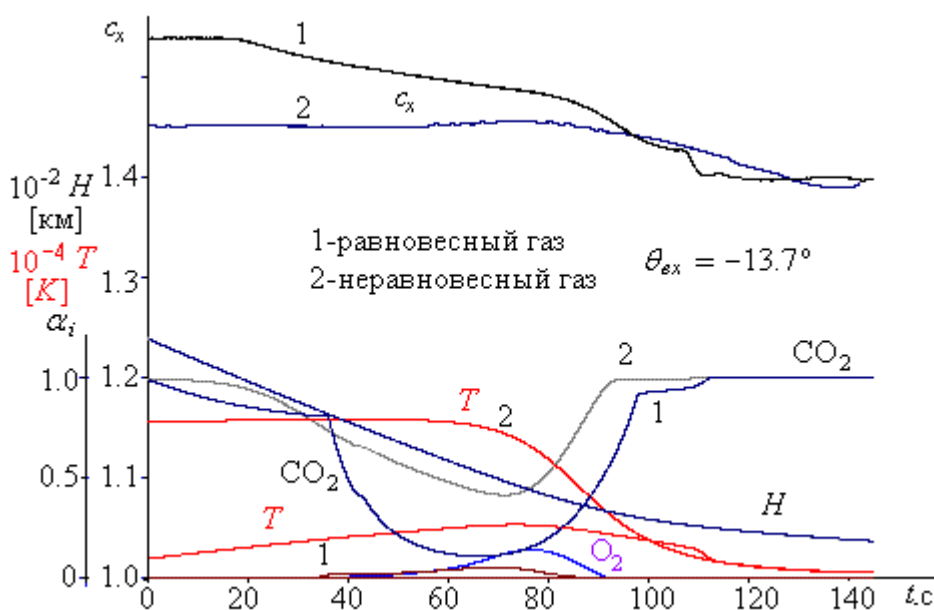


Рис.4. Сравнение траекторий для двух предельных начальных условий для концентраций на ударной волне

На рис. 4 представлены графики изменения концентраций компонентов смеси газов и температуры T в точке торможения по траектории спуска СА (сегментальное тело с $R_c=D$, радиусом закругления кромки $r_0=0.125D$) в атмосфере Марса для двух предельных условий для концентраций на ударной волне. Скорость входа 4586 м/с, угол входа -13.7° , $D=1.06$ м, масса 22.17кг. Анализ результатов показывает, что изменение начальных 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 $50 < t < 110$ с, где протекают химические реакции и газ является сплошной средой, и максимальная разность в температуре достигает 5500К. Такая большая разница в величинах температуры вызывает необходимость определения четких границ равновесного и неравновесного режимов протекания химических реакций по траектории торможения.

В таблице 1 для неравновесного случая представлены скорости обратимых реакций диссоциации $\text{CO}_2 = \text{CO} + \text{O}$, $\text{O}_2 = \text{O} + \text{O}$, $\text{CO} = \text{C} + \text{O}$ и реакции обмена $\text{CO}_2 + \text{O} = \text{CO} + \text{O}_2$, а также температуры и давления за ударной волной ($\xi=1$), на теле ($\xi=1$) и в средней точке ($\xi=0.5$) нулевой линии тока в точках траектории от $t=50$ с до $t=110$ с. Константы скоростей реакций предоставлены С.А. Лосевым [2], и список реакций подробно описан в работе [3].

Таблица 1

Изменение скоростей реакций, температуры и давления по траектории СА

t с	ξ	w: $\text{O}_2 = \text{O} + \text{O}$	$\text{CO}_2 = \text{CO} + \text{O}$	w: $\text{CO} = \text{C} + \text{O}$	$\text{CO}_2 + \text{O} = \text{CO} + \text{O}_2$	T К	p атм.
50.0	1	0.000000	-0.3838E-02	0.0000E+00	0.000000	7945	0.6939E-03
	0.5	-0.4118E-05	-0.7916E-03	-0.1337E-08	-0.5221E-04	6201	0.7191E-03
	0	-0.3714E-05	-0.1174E-03	-0.3091E-10	-0.2861E-04	5025	0.7239E-03
55.0	1	0.000000	-0.1376E-01	0.000000	0.000000	7914	0.1325E-02
	0.5	-0.1604E-04	-0.1420E-02	-0.1218E-08	-0.1590E-03	5692	0.1374E-02
	0	-0.8736E-05	-0.1817E-03	-0.1938E-10	-0.7242E-04	4647	0.1384E-02
60.0	1	0.000000	-0.4990E-01	0.000000	0.000000	7838	0.2580E-02
	0.5	-0.4857E-04	-0.2426E-02	-0.8910E-09	-0.4561E-03	5219	0.2679E-02
	0	-0.8308E-05	-0.2836E-03	-0.1031E-10	-0.1819E-03	4325	0.2697E-02
65.0	1	0.000000	-0.1735E+00	0.000000	0.000000	7678	0.5048E-02
	0.5	-0.8140E-04	-0.4076E-02	-0.5750E-09	-0.1249E-02	4810	0.5248E-02
	0	0.8013E-04	-0.4603E-03	0.4055E-11	-0.4546E-03	4095	0.5284E-02
70.0	1	0.000000	-0.4739E+00	0.000000	0.000000	7375	0.9208E-02
	0.5	0.1967E-03	-0.6544E-02	-0.3461E-09	-0.2993E-02	4500	0.9586E-02
	0	0.4218E-03	-0.7838E-03	0.3063E-10	-0.1007E-02	3992	0.9652E-02
75.0	1	0.000000	-0.9625E+00	0.000000	0.000000	6842	0.1607E-01
	0.5	0.1851E-02	-0.1043E-01	-0.1887E-09	-0.6530E-02	4261	0.1674E-01
	0	0.8920E-03	-0.1363E-02	0.3742E-10	-0.1826E-02	3927	0.1686E-01
80.0	1	0.000000	-0.1006E+01	0.000000	0.000000	6009	0.2486E-01
	0.5	0.4416E-02	-0.1525E-01	-0.1089E-09	-0.1094E-01	4074	0.2589E-01
	0	0.1183E-02	-0.2035E-02	0.3992E-11	-0.2636E-02	3804	0.2607E-01
85.0	1	0.000000	-0.3380E+00	0.000000	0.000000	4913	0.3278E-01
	0.5	0.3725E-02	-0.1842E-01	-0.3209E-10	-0.1130E-01	3877	0.3408E-01
	0	0.1261E-02	-0.2731E-02	-0.3411E-11	-0.3239E-02	3607	0.3434E-01
90.0	1	0.000000	-0.1974E-01	0.000000	0.000000	3744	0.3678E-01
	0.5	0.3417E-03	-0.1036E-01	-0.5519E-12	-0.2715E-02	3568	0.3819E-01
	0	0.7304E-03	-0.2768E-02	-0.1607E-12	-0.2196E-02	3348	0.3850E-01
95.0	1	0.000000	-0.9887E-04	0.000000	0.000000	2729	0.3466E-01

	0.5	0.5171E-07	-0.1174E-03	-0.1569E-18	-0.3420E-05	2742	0.3604E-01
	0	0.1064E-05	-0.1168E-03	-0.8413E-18	-0.1543E-04	2740	0.3635E-01
100.0	1	0.000000	-0.2756E-07	0.000000	0.000000	1963	0.2999E-01
	0.5	0.1030E-13	-0.3546E-07	0.7678E-23	-0.2892E-10	1974	0.3128E-01
	0	0.2554E-12	-0.3750E-07	0.1747E-22	-0.1474E-09	1977	0.3158E-01
105.0	1	0.000000	-0.2933E-12	0.000000	0.000000	1425	0.2438E-01
	0.5	0.2897E-23	-0.4232E-12	0.1888E-27	-0.2282E-17	1435	0.2555E-01
	0	0.7666E-22	-0.4605E-12	0.1292E-26	-0.1216E-16	1437	0.2583E-01
110.0	1	0.000000	-0.1123E-18	0.000000	0.000000	1059	0.1929E-01
	0.5	0.1100E-35	-0.1950E-18	0.1839E-36	0.1629E-26	1068	0.2033E-01
	0	0.3287E-34	-0.2227E-18	0.5499E-35	0.9425E-26	1070	0.2059E-01

Скорости реакции $\text{CO}=\text{C}+\text{O}$ пренебрежимо малы во всех точках траектории, что подтверждает ранее сделанный вывод. Сразу за ударной волной только скорость реакции $\text{CO}_2=\text{CO}+\text{O}$ отлична от нуля, т.к. концентрации компонентов CO , O_2 , O и C равны нулю. Абсолютная величина этой скорости возрастает от значения $|w|=0.003838$ в момент $t=50\text{c}$ до $|w|=1.006$ в момент $t=80\text{c}$.

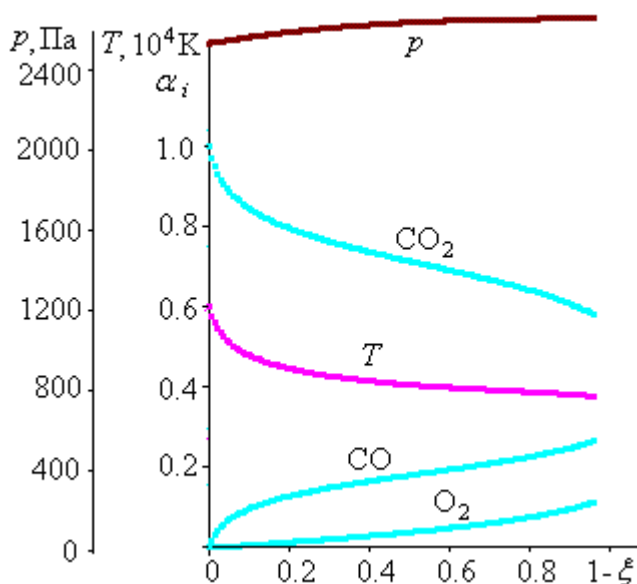


Рис.5. Распределение термодинамических функций вдоль нулевой линии тока при $t=80\text{c}$

На рис.5 показано изменение температуры T , давления p и концентрации компонентов смеси газа от ударной волны до тела вдоль нулевой линии тока в точке траектории $t=80\text{c}$. Если давление плавно повышается от ударной волны вплоть до точки торможения, то кривые температуры и концентраций молекул CO_2 и CO изменяются достаточно резко сразу за ударной волной, т.к. абсолютная величина скорости реакции $\text{CO}_2=\text{CO}+\text{O}$ велика: $|w|=1.006$ на ударной волне и $|w|=0.7356$ на следующем шаге. Видно, что скорость реакции также резко изменяется сразу за ударной волной. Для сравнения можно привести скорость реакции $\text{O}_2=\text{O}+\text{O}$ на следующем шаге: $w=-0.5058\text{E}-04$. Тем не менее, концентрация молекулярного кислорода плавно растет от ударной волны к телу за счет обменной реакции $\text{CO}_2+\text{O}=\text{CO}+\text{O}_2$. Ее скорость равномерно растет по абсолютной величине от $w=0$ при $\xi=1$ до максимального значения $|w|=0.02416$ при $\xi=0.9375$ и затем уменьшается до величины $|w|=0.002636$ на теле.

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. В связи с этим была предложена иная методика расчета химического состава смеси, подробно описанная для воздушной смеси в работе [4]. На основании этой методики химический состав газа определяется с помощью уравнений химической кинетики (3), для которых начальные условия для компонентов газа ставятся на ударной волне с учетом равновесного состава газа. Дополнительным критерием является значение порогового давления в набегающем потоке, при котором химические реакции в газе протекают равновесным образом.

Исследование химических процессов в ударном слое

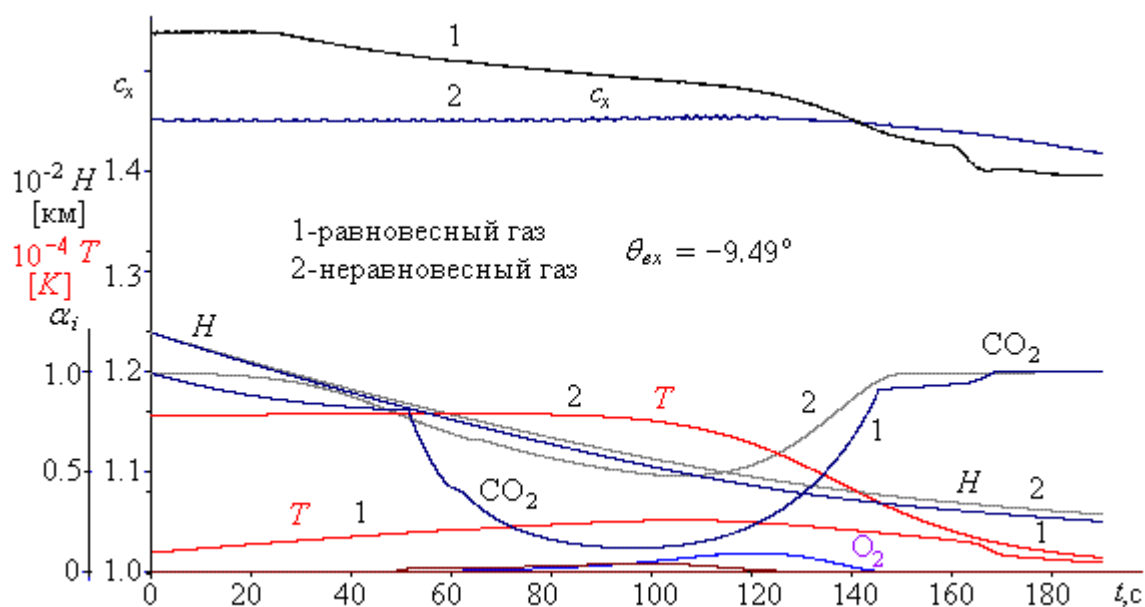


Рис. 6. Сравнение траекторий для двух предельных условий для концентраций на ударной волне

На рис. 6 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.

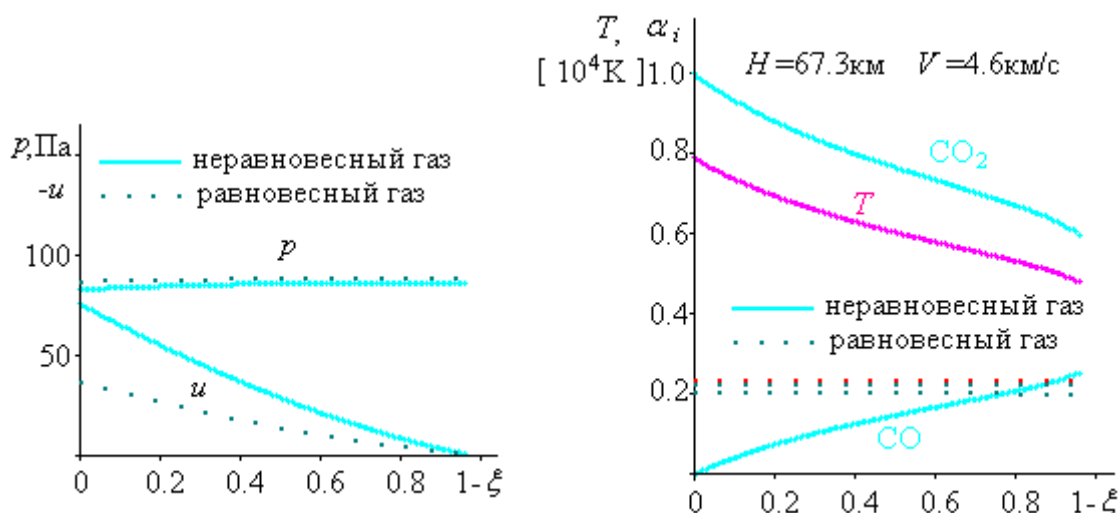


Рис.7. Распределение газодинамических функций вдоль нулевой линии тока

На рисунке 7 сравниваются величины давления p , скорости u , температуры T и концентраций CO и CO_2 вдоль нулевой линии тока для равновесных и неравновесных химических реакций. Если давления отличаются мало, то другие функции значительно отличаются для этих предельных случаев. Наибольшее отличие наблюдается в концентрации компонентов CO и CO_2 на ударной волне ($\xi=1$), что вызывает рост температуры и абсолютной величины скорости 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 не приемлемыми в обоих случаях. В неравновесном случае скорость изменения концентраций и температуры газа в ударном слое слишком велика. Малая величина давления в набегающем потоке $p_\infty=0.112\text{Па}$ значительно меньше пороговой величины, при которой химические реакции протекают равновесным образом.

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

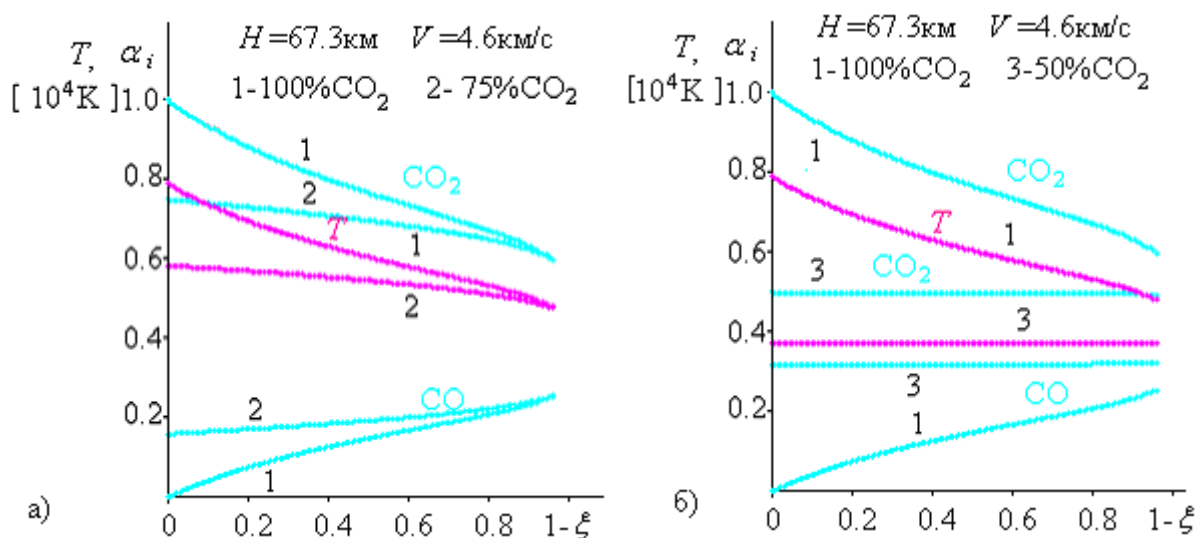


Рис.8. Влияние начальных условий для концентраций на термодинамические функции в ударном слое

На рисунке 8 сравниваются величины температуры и концентраций для разных начальных значений концентрации CO_2 : а) 100% и 75% CO_2 и б) 100% и 50% CO_2 . В случае а) величина температуры за ударной волной уменьшается на 2000К при $\alpha_{\text{CO}_2}=0.75$ и медленно изменяется вплоть до поверхности тела, где совпадает с величиной температуры в точке торможения при $\alpha_{\text{CO}_2}=1$. Таким же образом ведут себя концентрации α_{CO_2} и α_{CO} . В случае б) температура и концентрации имеют еще большее различие для $\alpha_{\text{CO}_2}=1$ и $\alpha_{\text{CO}_2}=0.5$, причем функции для $\alpha_{\text{CO}_2}=0.5$ постоянны от ударной волны до тела и их величины приближаются к равновесным значениям. Эти данные показывают, что значения газодинамических и термодинамических функций в ударном слое определяются заданием начальных условий для концентраций при переходе через ударную волну. Выбор начальных условий может быть определен решением уравнений Больцмана для определения структуры ударной волны с учетом химических реакций. 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.

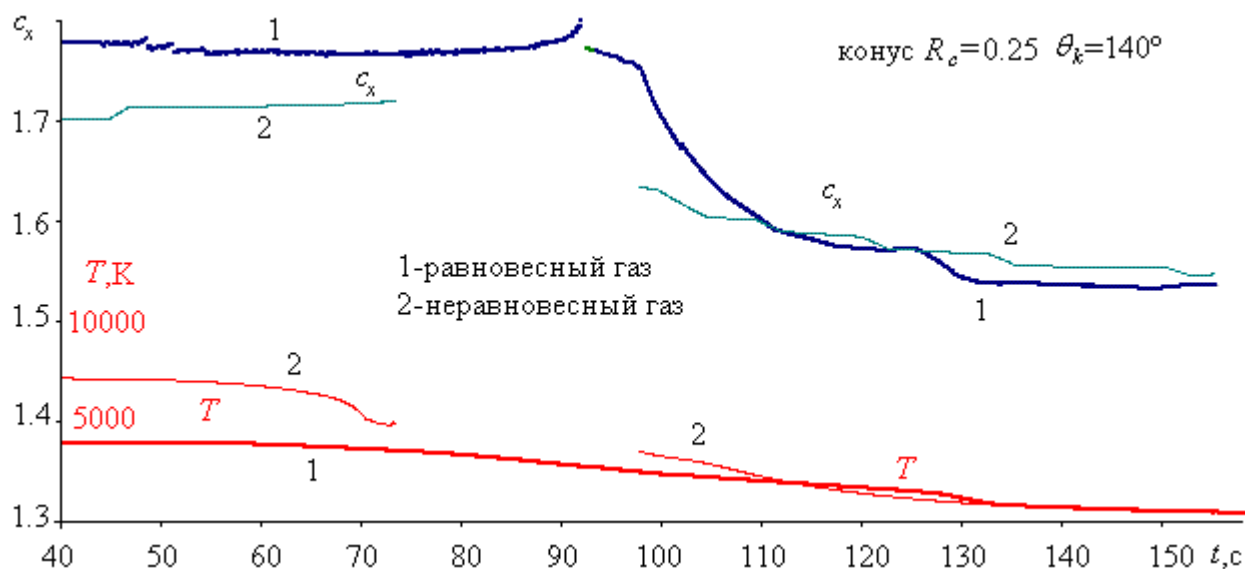


Рис.9. Изменение по траектории СА EXOMars коэффициента сопротивления и температуры в точке торможения при равновесном и неравновесном течении газа в ударном слое

На рис. 9 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 $34\text{c} < t < 160\text{c}$ 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 $\delta t=0.1\text{c}$. Разрыв в данных для неравновесного случая с $t=73\text{c}$ до $t=98\text{c}$ связан с неустойчивым счетом уравнений химической кинетики, так как константы скорости химических реакций велики при данных температурах ($T\sim 5000\text{K}$), а смесь газов в ударном слое стремится к равновесному составу. В равновесном случае определенные трудности в расчете обтекания СА возникали в окрестности точки траектории $t=92\text{c}$, когда звуковая точка на теле переходит с конической части на поверхность тора. При $t>92\text{c}$ происходит уменьшение коэффициента сопротивления c_x , причем значения c_x и температуры торможения T для равновесного и неравновесного случая сближаются, а после $t=110\text{c}$ они практически совпадают. Наибольшие различия в величинах c_x и температуры торможения T наблюдаются на участке $34\text{c} < t < 73\text{c}$, достигая для c_x максимального значения 0.08 и для T двукратного значения при $t=34\text{c}$. Поэтому

представляет интерес распределение термодинамических и газодинамических функций внутри ударного слоя в данной точке траектории.

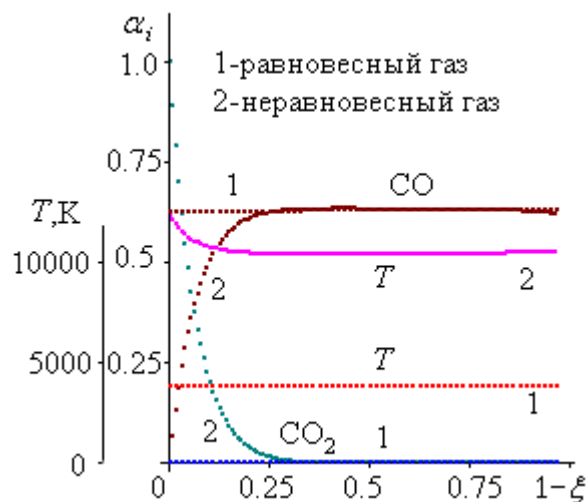


Рис.10. Распределение температуры и концентраций вдоль нулевой линии тока

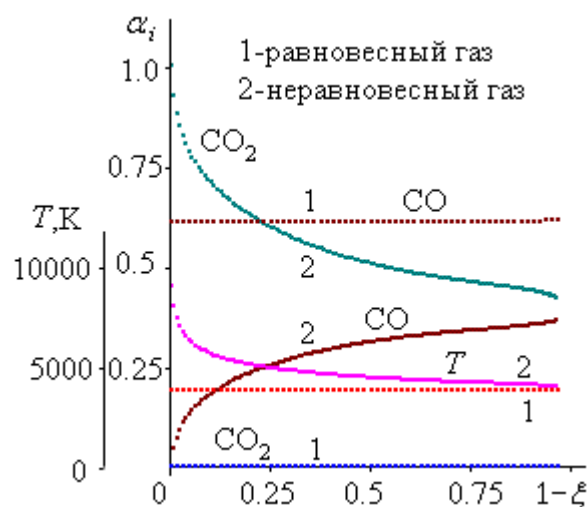


Рис.11. Распределение температуры и концентраций на граничном луче

На рис.10 дано распределение температуры и концентраций CO_2 и CO вдоль нулевой линии тока для равновесного и неравновесного случаев. Неравновесные концентрации компонентов отличаются от равновесных в узком слое около ударной волны. В равновесном случае газ состоит из CO и O . Такой же состав смеси и в неравновесном случае при $0 < \xi < 0.75$. Равновесная температура изменяется незначительно вдоль нулевой линии тока и равна 3935К. Неравновесная температура резко снижается от 12355К до 10450К в узком слое около ударной волны и затем повышается до 10580К в точке торможения, т.е. задание граничного условия сохранения концентрации CO_2 на ударной волне приводит к образованию тонкого слоя с большими градиентами концентраций и температуры и значительному отличию неравновесной температуры от равновесной.

На рис. 11 сравниваются концентрации и температура для равновесного и неравновесного случаев на замыкающем граничном луче, лежащем в сверхзвуковой области. Узкий градиентный слой за ударной волной не определяет полное изменение температуры и концентраций в ударном слое. Температура в градиентном слое понижается от $T=9096\text{K}$ до $T=4960\text{K}$, а затем плавно приближается к равновесному значению $T=3400\text{K}$. Концентрация CO_2 также изменяется на всем замыкающем луче, но не достигает равновесного значения. Величина концентрации CO_2 на теле $\alpha_{\text{CO}_2}=0.43$, т.е. химические реакции в окрестности замыкающей границы протекают неравновесным образом.

Эти примеры показывают, что характер химических реакций в значительной степени может изменяться внутри ударного слоя, но в любом случае условие постоянства состава приводит к возникновению градиентного слоя за ударной волной. 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 температура за ударной волной не превосходила равновесную температуру на большую величину. Были проведены расчеты для значений концентрации CO_2 на ударной волне $\alpha_{\text{CO}_2}=0.75$ и $\alpha_{\text{CO}_2}=0.5$. При $\alpha_{\text{CO}_2}=0.75$ за ударной волной образовывался градиентный слой, при $\alpha_{\text{CO}_2}=0.5$ градиентный слой отсутствовал.

На рис. 12 и 13 приведены распределение температуры и концентраций при $\alpha_{CO_2}=0.5$ вдоль нулевой линии тока и на граничном луче соответственно. Нанесены результаты расчета для равновесного газа. Температура за прямым скачком снизилась до $T=8260K$, а в точке торможения до $7200K$, и значительно превышает равновесную температуру. Концентрации CO_2 и CO от заданных значений на ударной волне достигают равновесных значений при равновесной температуре на теле. На замыкающем луче неравновесная температура за скачком понизилась до $T=5500K$ и сравнительно мало отличается от равновесного значения $T=3400K$ во всем ударном слое. Концентрации CO_2 и CO заметно отличаются от равновесных значений и не достигают их на теле.

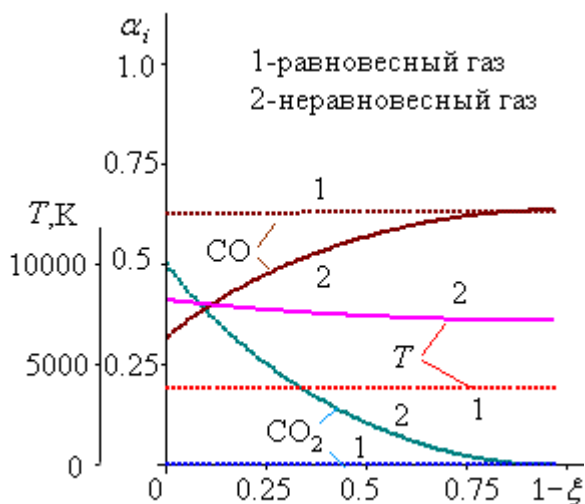


Рис.12. Распределение температуры и концентраций вдоль нулевой линии тока, $\alpha_{CO_2}=0.5$

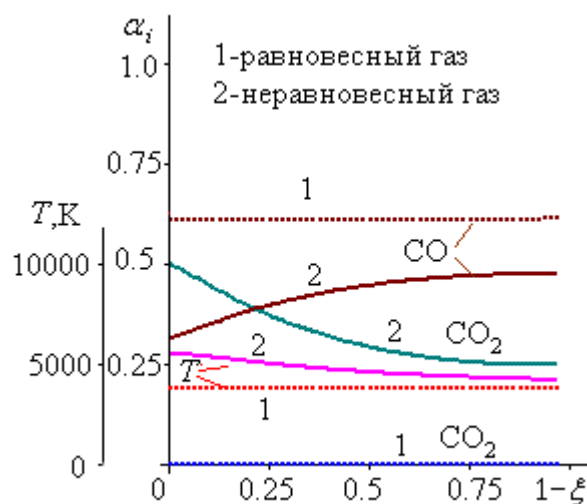


Рис.13. Распределение температуры и концентраций на граничном луче, $\alpha_{CO_2}=0.5$

Таким образом, задание адекватных начальных условий для концентраций устраняет градиентный слой за ударной волной, понижает неравновесную температуру газа в ударном слое и существенно облегчает численный расчет по траектории.

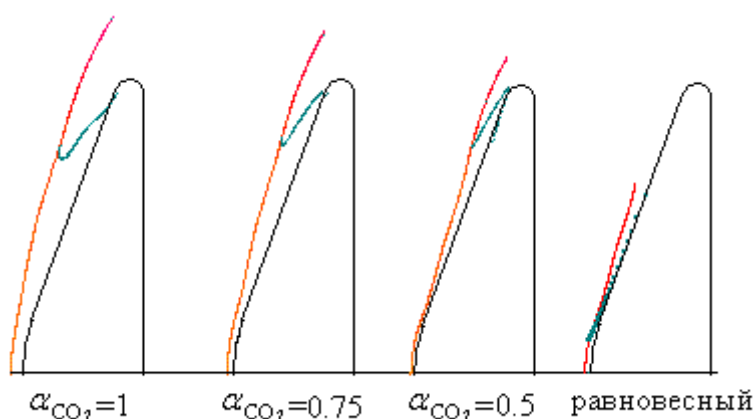


Рис.14. Физическая картина обтекания СА EXOMars для начальных условий $\alpha_{CO_2}=1., 0.75, 0.5$ и равновесного газа

На рис. 14 представлены физические картины обтекания СА EXOMars в точке траектории $t=34c$ для различных начальных условий для концентрации $\alpha_{CO_2}=1, 0.75, 0.5$ и равновесного газа. Нанесены ударные волны (красный цвет) и звуковые линии (синий

цвет). Обращает внимание то, что звуковые точки на теле в неравновесных расчетах лежат выше точки сопряжения конуса с тором, а в равновесном случае – на конической поверхности. Минимальная область смешанного течения для неравновесного газа существенно превосходит равновесную. Это различие в размере минимальной области и положении звуковой точки на теле сохраняется на всем участке траектории от $t=34$ с до $t=92$ с. При $t>92$ с звуковая точка на теле в равновесном случае переходит на тороидальное закругление кромки. При $t=34$ с в неравновесном случае наличие градиентного слоя за ударной волной для $\alpha_{\text{CO}_2}=1$ и 0.75 приводит к не монотонности звуковой линии, тогда как для $\alpha_{\text{CO}_2}=0.5$ и равновесного газа звуковая линия монотонно возрастает от ударной волны к телу. Отход ударной волны уменьшается от 10.21см при $\alpha_{\text{CO}_2}=1$ до 3.966см при $\alpha_{\text{CO}_2}=0.5$, и в равновесном случае равен 3.627 см.

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 $\text{CO}_2=\text{CO}+\text{O}$ протекает наиболее интенсивно. В результате, в смеси газа в ударном слое преобладают компоненты СО и О. 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. Проведенный 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 5.8км/с на высоте 110км химические реакции в ударном слое при $t>34$ с протекают в равновесном режиме, в то время как весь сверхзвуковой участок траектории длится 170с. Неравновесность химических реакций проявляется в узком градиентном слое за ударной волной из-за начальных условий постоянства состава газа на ударной волне. Увеличение размера аппарата приводит к интенсификации химических реакций, и для СА EXOMars и MSL (Mars Science Laboratory) химический состав в ударном слое в основном соответствует равновесным физико-химическим процессам.

Работа выполнена при финансовой поддержке программы фундаментальных исследований Президиума РАН №17 “Параллельные вычисления и многопроцессорные вычислительные системы”.

Литература

1. Гурвич Л.В., Вейц И.В., Медведев В.А. и др. Термодинамические свойства индивидуальных веществ. Справочное издание в 4-х томах М.: Наука, 1978 – 1982.
2. 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.
3. Голомазов М.М. Численная схема для исследования влияния химических процессов при гиперзвуковом обтекании затупленных тел. // Физико-химическая кинетика в газовой динамике. 2010. <http://www.chemphys.edu.ru/pdf/2010-04-22-001.pdf>
4. 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(12). С. 38-45.

Статья поступила в редакцию 21 августа 2012 г.