

Influence of Surface Chemical Reactions on High-Altitude Aerothermodynamics of a Model Capsule

A. S. Litvintsev, A. N. Molchanova, P. V. Vashchenkov, A. V. Kashkovsky, Ye. A. Bondar

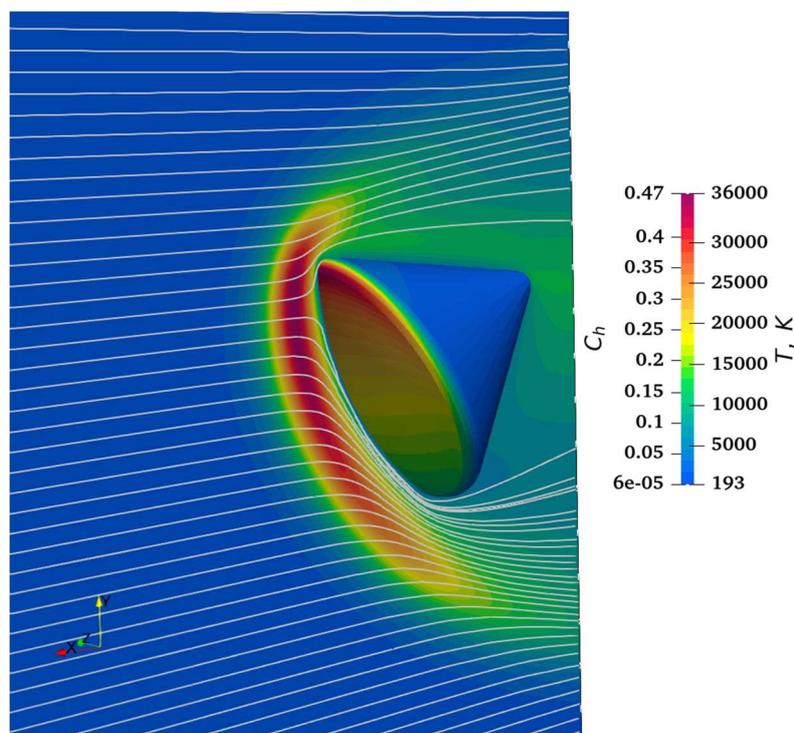
*Khristianovich Institute of Theoretical and Applied Mechanics SB RAS (ITAM SB RAS),
Novosibirsk, 630090, Russia*

litvintsev@itam.nsc.ru

Abstract

A numerical study of a 3D flow about a generic spacecraft capsule was carried out for conditions corresponding to a flight at an altitude of 100 km. The SMILE++ code based on the Direct Simulation Monte Carlo method was employed in the computations. For the first time in 3D molecular kinetic simulations of high-altitude aerothermodynamics, heterogeneous processes on the surface of the thermal protection system of the capsule are modeled with a detailed multi-stage kinetics. It was demonstrated that even at high flight altitudes, surface recombination not only leads to a significant increase in the heat flux to the surface of the descent vehicle and its temperature, but can also have a noticeable effect on its aerodynamic characteristics, such as pitching moment.

Keywords: direct simulation Monte Carlo method, surface catalytic reactions, high-altitude aerothermodynamics.



Translational temperature flowfield and surface distribution of heat transfer coefficient C_h

УДК 533

Влияние поверхностных химических реакций на высотную аэротермодинамику модельной капсулы

А. С. Литвинцев, А. Н. Молчанова, П. В. Ващенко, А. В. Кашковский,
Е. А. Бондарь

*Институт теоретической и прикладной механики им. С.А. Христиановича
Сибирского отделения Российской академии наук (ИТПМ СО РАН),
Россия, г. Новосибирск, 630090, ул. Институтская, 4/1*

litvintsev@itam.nsc.ru

Аннотация

Проведено численное исследование трехмерного течения около модельной капсулы космического аппарата для условий, соответствующих полету на высоте 100 км. В вычислениях использован пакет прикладных программ SMILE++, основанный на методе прямого статистического моделирования. Впервые в трехмерных молекулярно-кинетических расчетах высотной аэротермодинамики гетерогенные процессы на поверхности теплозащиты капсулы моделируются на основе детальной многостадийной кинетики. Показано, что даже на больших высотах полета поверхностная рекомбинация не только приводит к существенному увеличению теплового потока к поверхности спускаемого аппарата и её температуры, но и может оказывать заметное влияние на его аэродинамические характеристики, такие как момент тангажа.

Ключевые слова: прямое статистическое моделирование, поверхностные каталитические реакции, высотная аэротермодинамика.

1. Введение

Гетерогенные химические реакции, протекающие на поверхности теплозащиты спускаемого аппарата при входе в атмосферу Земли, существенно влияют на величину теплового потока к поверхности. Поскольку эти реакции являются экзотермическими, то отсутствие модели учета таких реакций при расчете течения около аппарата может привести к существенному занижению значения теплового потока [1-3].

Современные программные пакеты для расчета аэротермодинамики спускаемых аппаратов на высотах менее 80 км основаны на решении уравнений Навье – Стокса для вязкого теплопроводного химически реагирующего газа [4-8]. При моделировании аэротермодинамики спускаемых аппаратов на высотах более 80 км нельзя опираться на сплошноредные модели течения. Основным инструментом численного расчета таких течений является метод прямого статистического моделирования (ПСМ) [9]. Для моделирования поверхностных процессов в рамках метода ПСМ требуется информация о вероятностях и частотах процессов для конкретных молекул. В [10-12] был предложен подход для получения такой микроскопической информации на основе детальных многостадийных макроскопических кинетических механизмов поверхностных процессов и на основе некоторых известных механизмов [13-15] были получены модели, позволяющие проводить расчеты методом ПСМ с учетом гетерогенных химических реакций на поверхности теплозащиты аппарата.

Отметим, что моделирование аэротермодинамики реальных спускаемых аппаратов в трехмерной постановке возможно только на многопроцессорных компьютерах. Параллели-

зация алгоритма метода ПСМ с учетом многостадийных поверхностных процессов представляет существенные трудности. В [16] был предложен подход, позволяющий реализовать эффективный и точный алгоритм описания сложных поверхностных процессов при параллельных расчетах методом ПСМ. Алгоритм был реализован в программном пакете SMILE++ [17, 18]. Реализация алгоритма была верифицирована сравнением результатов скалярных и параллельных тестовых расчетов.

В настоящей работе с использованием разработанного численного инструментария впервые проводится численное исследование гетерогенных химических реакций на аэротермодинамику модельной капсулы при полете на большой высоте (100 км) в трехмерной постановке. В расчётах использованы различные модели для описания поверхностных физико-химических процессов. Изучено влияние гетерогенного катализа в переходном по числу Кнудсена режиме обтекания как на тепловой поток к поверхности теплозащиты, так и на температуру поверхности и момент тангажа капсулы.

2. Постановка задачи

Численное исследование аэротермодинамики капсулы в условиях входа в атмосферу на высоте 100 км проводилось методом ПСМ с использованием программного пакета SMILE++. В качестве модельной капсулы был выбран командный модуль космического аппарата "Аполлон" [19]. Геометрия капсулы показана на рис. 1, а её параметры указаны в табл. 1. Капсула представляет собой осесимметричное тело конической формы: угол раствора конуса 33° , диаметр передней части 3.9116 м, длина капсулы 3.4306 м, передняя и задняя поверхности закруглены по сферам радиусом $R_n = 4.6939$ и $R_a = 0.2311$ соответственно, а соединение передней и боковой частей капсулы скруглено по тору с малым радиусом $R_s = 0.1956$ м.

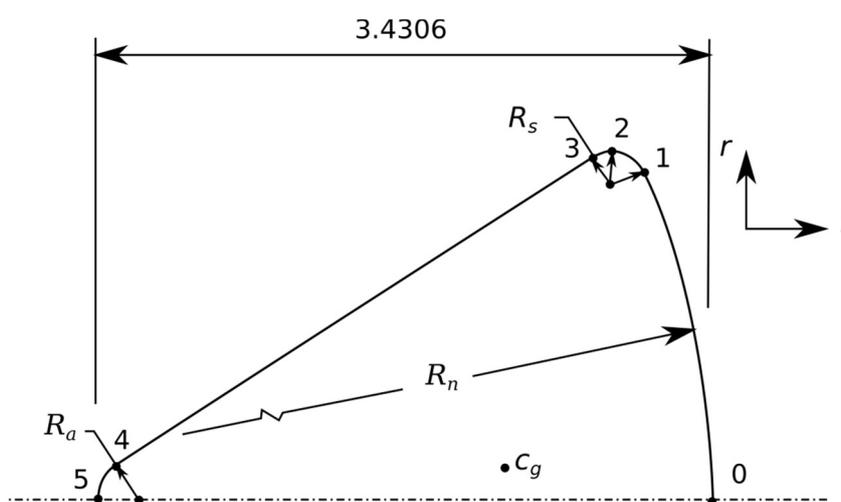


Рис. 1. Геометрическая модель капсулы. Схема

Таблица 1

Геометрическая модель капсулы. Параметры

Точка	l , м	r , м	
0	0	0	$R_n = 4.6939$
1	-0.3743	1.8368	$R_a = 0.2311$
2	-0.5543	1.9558	$R_s = 0.1956$
3	-0.6608	1.9242	
4	-3.3254	0.1938	
5	-3.4306	0	
c_g	-1.1455	0.16	

В табл. 2 представлены параметры течения (см. [19]). Число Кнудсена рассчитано по диаметру капсулы. Рассматривалась расчетная область размера $11 \text{ м} \times 20 \text{ м} \times 10 \text{ м}$ ($[-4.7] \times [-11.9] \times [0.10]$). Капсула расположена к течению под углом атаки -25° . Направление потока — вдоль оси x . Начало координат расположено в центре передней части капсулы, $z = 0$ — плоскость симметрии. Конфигурация расчета и система координат показаны на рис. 2. Все расчеты выполнены на вычислительном кластере центра коллективного пользования ИТПМ СО РАН на 190 процессорах. В вычислениях было использовано порядка 135 миллионов модельных частиц. При таком числе частиц виртуальный объем с линейным размером, равным локальной длине свободного пробега, содержит более одной модельной частицы в любой ячейке расчетной области. Выполнение этого условия необходимо для достижения высокой точности вычислений методом ПСМ (см. [20]). Прямоугольная однородная сетка для вычисления газодинамических макропараметров содержала $640 \times 260 \times 130$ ячеек. Для моделирования столкновений использовалась двухуровневая прямоугольная адаптивная сетка. Сетка первого уровня совпадала с сеткой для вычисления макропараметров. Каждая из ячеек первого уровня автоматически дробилась на прямоугольные ячейки второго уровня для разрешения масштабов длины порядка локальной длины свободного пробега молекул. Поверхностная сетка половины капсулы (в расчете использовалась плоскость симметрии $z = 0$) содержала 1801 узел и 3242 треугольных поверхностных элемента (панелей). Поверхностная сетка представлена на рис. 2.

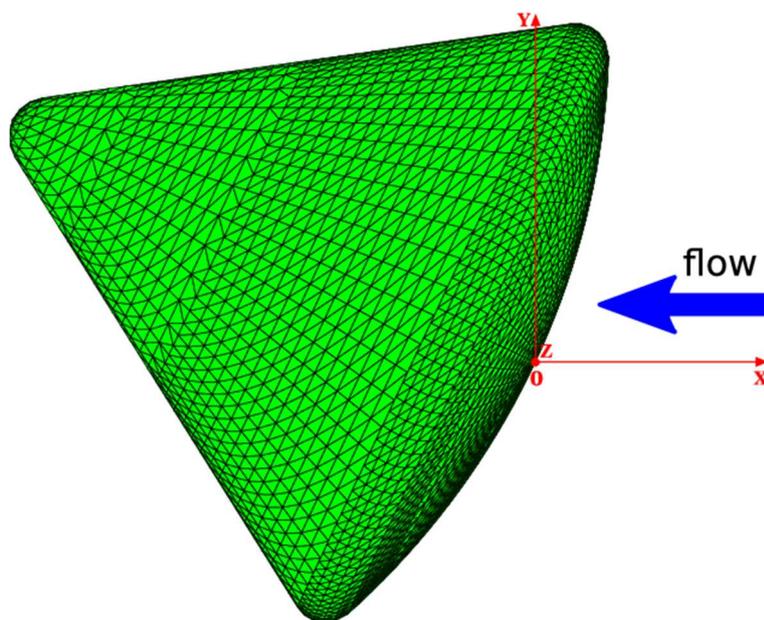


Рис. 2. Система координат и поверхностная сетка, использованная в расчетах течения около капсулы

Таблица 2

Параметры течения

Высота над уровнем моря, км	100
Температура, К	194
Плотность, кг/м^3	5.58×10^{-7}
Скорость, м/с	9600
Число Маха	33.87
Число Кнудсена	0.026
Мольная доля N_2	0.784
Мольная доля O_2	0.177
Мольная доля O	0.029

3. Физико-химические модели

Моделирование столкновений в системе SMILE++ основано на схеме мажорантной частоты метода ПСМ [21]. Для моделирования упругих столкновений применялась модель переменных твердых сфер (VHS, [9]). Для поступательно-вращательного и поступательно-колебательного энергообмена использовалась модель Ларсена – Боргнакке [22] для дискретной внутренней энергии с зависящими от температуры релаксационными числами [23] с поправкой колебательного столкновительного числа [24].

Была рассмотрена пяти-компонентная смесь: N, O, N₂, NO, O₂. В газовой фазе моделировались 15 реакций диссоциации и 4 реакции обмена, приведенные в табл. 3, где M – любой из пяти компонентов газа. Учёт химических реакций в газовой фазе проводился с использованием модели полной столкновительной энергии (TCE — total collision energy, [9, 25]).

Таблица 3

Химические реакции в газовой фазе

Реакции диссоциации	Реакции обмена
$N_2 + M \rightarrow N + N + M$	$N_2 + O \leftrightarrow NO + N$
$O_2 + M \rightarrow O + O + M$	$NO + O \leftrightarrow O_2 + N$
$NO + M \rightarrow N + O + M$	

Было проведено 2 серии расчетов:

- первая серия с условиями изотермической поверхности, $T_w = 1000$ К ;
- вторая серия с условиями равновесно излучающей поверхности (эти граничные условия, при которых локальная температура поверхности T_w определяется на основе предположения о том, что конвективный тепловой поток из газа на поверхность и тепловыделение за счет поверхностных химических реакций уравниваются лучистым тепловым потоком с поверхности во внешнее пространство, хорошо описывают взаимодействие высокоэнтальпийного потока с теплозащитной поверхностью и не требуют задания её температуры, которая не известна априори).

В каждой серии расчетов для учёта каталитических процессов на поверхности использовались следующие модели поверхностных химических реакций для метода ПСМ:

- детальная модель поверхностных процессов на материале RCG [10] на основе набора поверхностных процессов Варнатца и др. [13]. Список реакций и параметры констант скоростей представлены в табл. 4, где S_0 – коэффициент прилипания, а A и E_a – параметры константы скорости реакции, заданной в форме Аррениуса

$$K(T) = AT^b \exp\left(-\frac{E_a}{kT}\right) \quad (1)$$

Для данной модели коэффициент $b = 0$ для всех реакций.

- Детальная модель поверхностных процессов на материале SiO₂ [12] на основе набора поверхностных реакций Куротаки [14], которая учитывает образование оксида азота NO на поверхности. Список реакций и параметры их констант скоростей представлены в табл. 5, где A, b и E_a – параметры констант скоростей, заданных в форме Аррениуса.
- Модель полностью каталитической поверхности, на которой все приходящие атомы N и O рекомбинируют в молекулы N₂ и O₂ соответственно. Используется модель с постоянной вероятностью рекомбинации γ [26, 27], в которой не различаются механизмы рекомбинации Или – Ридела и Ленгмюра – Хиншельвуда и не моделируются отдельно процессы адсорбции и десорбции (процесс адсорбции неотделим от процесса рекомбинации). Рассмотренные реакции приведены в табл. 6.

Также для оценки влияния каталитических процессов в каждой серии расчетов была рассмотрена некаталитическая поверхность, на которой реакции рекомбинации не протекают. При всех рассмотренных вариантах моделирования поверхностных процессов параметры молекул, покидающих поверхность, моделируются в соответствии с законом диффузного отражения с полной аккомодацией поступательной, вращательной и колебательной энергии. Для всех поверхностных химических процессов предполагается полная аккомодация химической энергии.

Таблица 4

Параметры реакций на поверхности RCG для макроскопического набора поверхностных реакций из [13]

Реакция	S_0	A	E_a
Адсорбция $N + S \rightarrow N_S$ $O + S \rightarrow O_S$	0.1 0.1		
Десорбция $N_S \rightarrow N + S$ $O_S \rightarrow O + S$ $N_{2S} \rightarrow N_2 + S$ $O_{2S} \rightarrow O_2 + S$		[1/с] 7.3×10^{11} 5×10^{11} 1×10^{12} 1×10^{12}	[Дж] 3.6×10^{-19} 3.3×10^{-19} 0.17×10^{-19} 0.17×10^{-19}
Рекомбинация Или – Ридела $N + N_S \rightarrow N_2 + S$ $O + O_S \rightarrow O_2 + S$		[m^3/c] 0.4×10^{-16} 1×10^{-16}	[Дж] 0.66×10^{-19} 1×10^{-19}
Рекомбинация Ленгмюра – Хиншельвуда $N_S + N_S \rightarrow N_{2S} + S$ $O_S + O_S \rightarrow O_{2S} + S$		[m^2/c] 1.16×10^{-10} 33×10^{-19}	[Дж] 2.16×10^{-19} 2.66×10^{-19}

Таблица 5

Параметры реакций на поверхности SiO₂ для макроскопического набора поверхностных реакций из [14], учитывающих производство NO.

 Плотность узлов адсорбции $C_a = 4.5 \times 10^{18}$

Реакция	A	b	E_a
Адсорбция $N + S \rightarrow N_S$ $O + S \rightarrow O_S$	0.08 0.1	0 0	[Дж] 0 0
Десорбция $N_S \rightarrow N + S$ $O_S \rightarrow O + S$	2.08×10^{-19} 2.08×10^{-19}	1 1	[Дж] 4.98×10^{-19} 4.98×10^{-19}
Рекомбинация Или – Ридела $N + N_S \rightarrow N_2 + S$ $O + O_S \rightarrow O_2 + S$ $N + O_S \rightarrow NO + S$ $O + N_S \rightarrow NO + S$	6.0×10^{-4} 1.0×10^{-3} 1.0×10^{-3} 6.0×10^{-4}	0 0 0 0	[Дж] 5.81×10^{-21} 9.8×10^{-21} 9.8×10^{-21} 5.81×10^{-21}
Рекомбинация Ленгмюра – Хиншельвуда $N_S + N_S \rightarrow N_2 + 2S$ $O_S + O_S \rightarrow O_2 + 2S$ $N_S + O_{SM} \rightarrow NO + 2S$ $O_S + N_{SM} \rightarrow NO + 2S$	[m^2/c] 6.79×10^{-15} 3.18×10^{-15} 6.35×10^{-15} 3.39×10^{-15}	0.5 0.5 0.5 0.5	[Дж] 8.63×10^{-20} 6.97×10^{-20} 6.97×10^{-20} 8.63×10^{-20}

Таблица 6

Химические реакции в модели полностью каталитической поверхности

Реакции	γ
$N + N \rightarrow N_2$	1
$O + O \rightarrow O_2$	1

4. Результаты

На рис. 3 представлено поле поступательной температуры, линии тока, а также поверхностное распределение коэффициента теплопередачи C_h для случая некаталитической изотермической поверхности. Хорошо видна отошедшая ударная волна, температура в которой достигает 36000 К. При таких условиях молекулы газа интенсивно диссоциируют, а значит к поверхности капсулы за фронтом ударной волны приходит много атомарных компонентов, которые являются потенциальными участниками в процессах поверхностного катализа. Также видно, что максимальная тепловая нагрузка приходится на верхнюю точку ребра передней части капсулы.

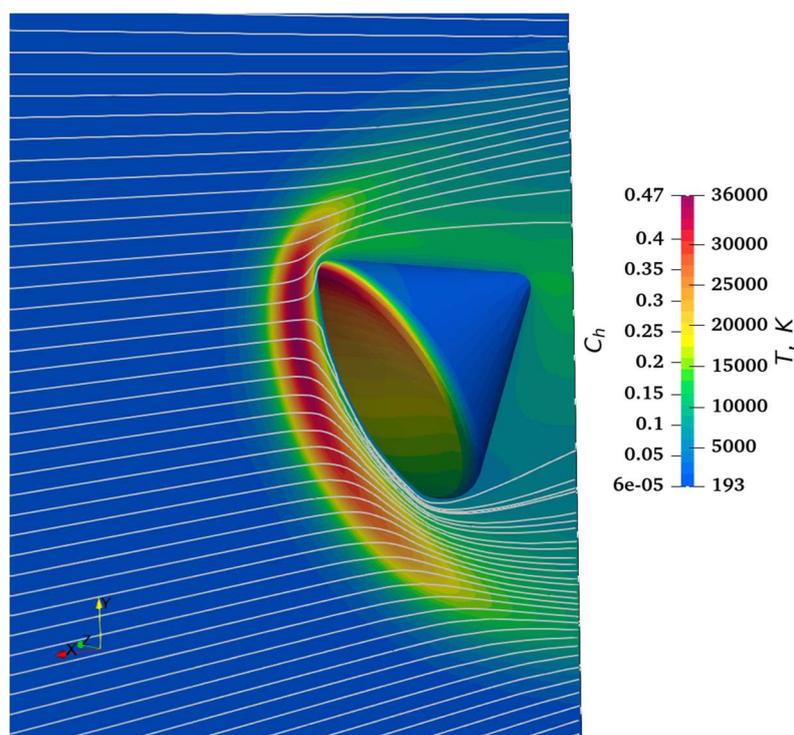


Рис. 3. Поле поступательной температуры (некаталитичный случай, изотермическая поверхность) и поверхностное распределение коэффициента теплопередачи C_h

Массовые доли компонентов вдоль линии торможения для случая изотермической поверхности представлены на рис. 4. Точка торможения находится на передней части капсулы на расстоянии $r_{st.p.} = 1.46$ от оси симметрии капсулы, ее ордината в системе координат, связанной с течением, $y_{st.p.} = 1.42$. Линия торможения почти во всей области параллельна оси x и заканчивается в точке торможения. На графиках на рис. 4 точке торможения соответствует $x' = 0$. Полностью каталитическая и некаталитическая поверхности изображены на рисунке красной и синей линиями соответственно, данные для детальных моделей поверхностных процессов на материалах RCG (модель Варнатца и др.) и SiO_2 (модель Куротаки) – черной и зеленой линиями соответственно.

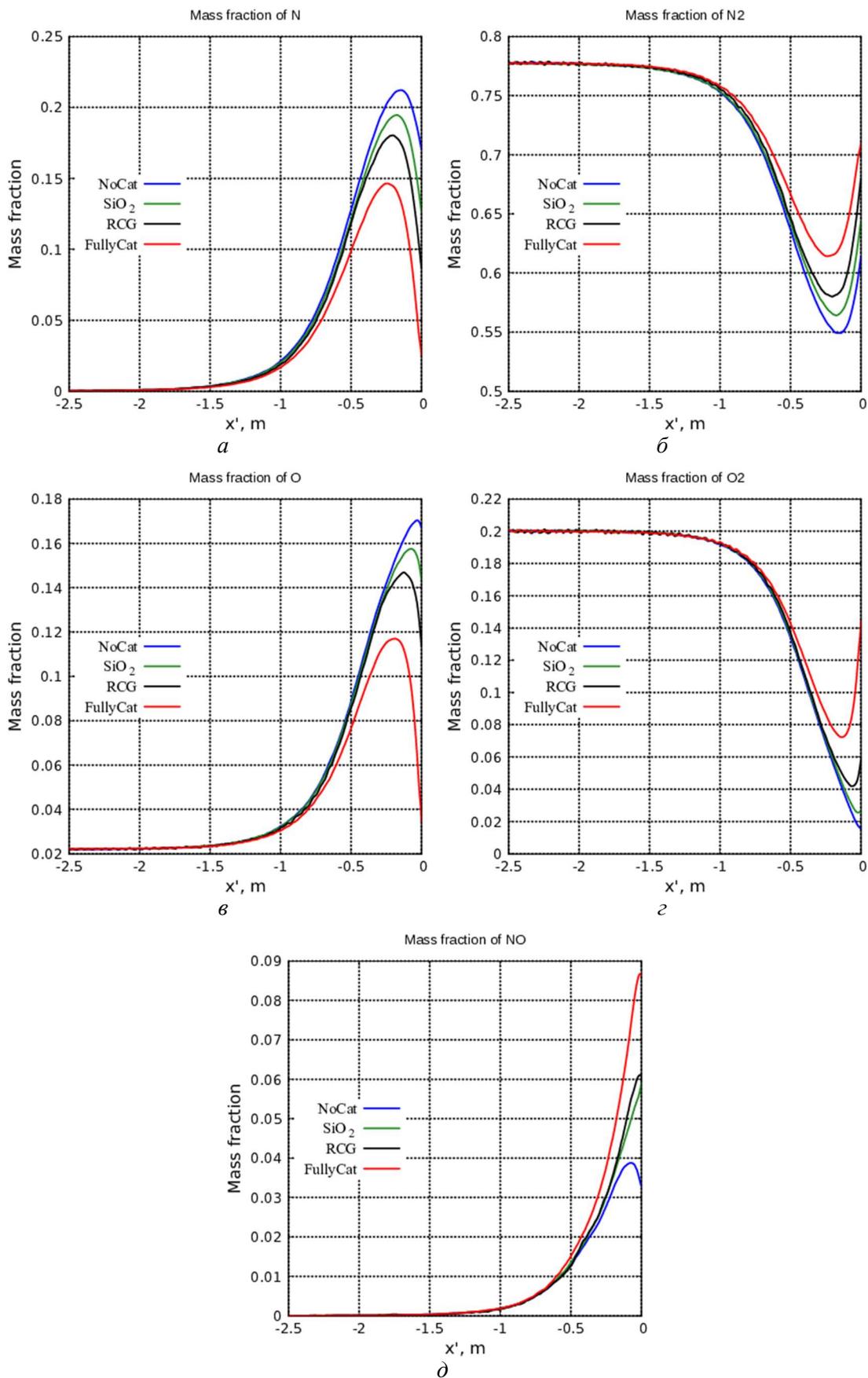


Рис. 4. Массовые доли компонентов вдоль линии торможения для различных моделей поверхностной химии (изотермическая поверхность): a – N; b – N_2 ; c – O; d – O_2 ; e – NO

На графиках видно, что при приближении к поверхности массовые доли молекулярных компонентов N_2 и O_2 (рис. 4, б, в) сначала падают вследствие активной диссоциации молекул в газовой фазе за фронтом ударной волны. Затем, при дальнейшем приближении к поверхности, начинают играть роль реакции поверхностной рекомбинации, за счет которых массовые доли молекул начинают расти. Для атомарных компонентов N и O (рис. 4, а, в) поведение графиков имеет обратный характер: при приближении к поверхности наблюдается рост массовых долей атомарных компонентов как продуктов в реакциях диссоциации в газовой фазе, а непосредственно в окрестности точки торможения – их падение за счет участия в реакциях рекомбинации на поверхности. Графики для материалов RCG и SiO_2 расположены между графиками для некаталитического и полностью каталитического случаев, при этом графики для RCG находится примерно посередине между ними, а графики для материала расположены ближе к некаталитическому случаю. На рис. 4, д изображены массовые доли для компонента NO. Заметим, что образование NO в каталитических реакциях на поверхности учитывается только в модели Куротаки (материал SiO_2 , зеленая линия на графике), однако рост массовой доли NO в окрестности поверхности наблюдается на всех графиках. Это происходит из-за обменных реакций в газовой фазе (табл. 3, второй столбец): атомы N и O, возникшие в результате диссоциации молекул за фронтом ударной волны, реагируют с молекулами N_2 и O_2 , в результате чего в окрестности поверхности образуется большое количество молекул NO.

На рис. 5 представлено поверхностное распределение коэффициента теплопередачи C_h для двух рассмотренных детальных моделей поверхностной химии (модели Варнатца и др. и Куротаки) и полностью каталитической поверхности на правой половине рисунков в сравнении с некаталитическим случаем на левой половине для случая изотермической поверхности. А на рис. 6, а показаны срезы представленного поверхностного распределения C_h в плоскости симметрии: синим цветом указана некаталитическая поверхность, зеленым и черным цветом – материалы SiO_2 (модель Куротаки) и RCG (модель Варнатца и др.) соответственно, а красным – полностью каталитическая поверхность. Как уже было указано ранее, максимум теплового потока приходится на верхнюю точку ребра лобовой поверхности капсулы. Эта точка находится выше точки торможения: $y_{C_{h_{\max}}} = 1.82$, расстояние до оси симметрии капсулы, как указано в табл. 1, $r_{C_{h_{\max}}} = 1.8368$ (координата точки торможения в системе координат, связанной с течением, $y_{st.p.} = 1.42$, а в системе координат, связанной с капсулой, $r_{st.p.} = 1.46$). Это хорошо видно на графиках на рис. 6, а: все три графика имеют в точке $y_{C_{h_{\max}}}$ максимум и монотонно убывают в обе стороны. Также на графиках срезов можно заметить, что максимальное приращение теплового потока относительно некаталитического случая достигается не в точке его максимума, а ближе к центру лобовой части капсулы, чуть ниже точки торможения. Это продемонстрировано на рис. 6, б, где изображена разница представленных срезов коэффициентов теплопередачи $C_h - C_h^{NC}$ между каталитическим и некаталитическим случаями (индекс NC означает некаталитический случай). Максимальное приращение теплового потока вследствие каталитических реакций достигается в точке $y_{\max.cat.p.} \approx 0.84$ (расстояние до оси симметрии капсулы $r_{\max.cat.p.} = 0.89$): для материала RCG оно примерно в 2.5 раза больше, чем для SiO_2 и составляет порядка 55 % от максимально возможного в случае полностью каталитической поверхности.

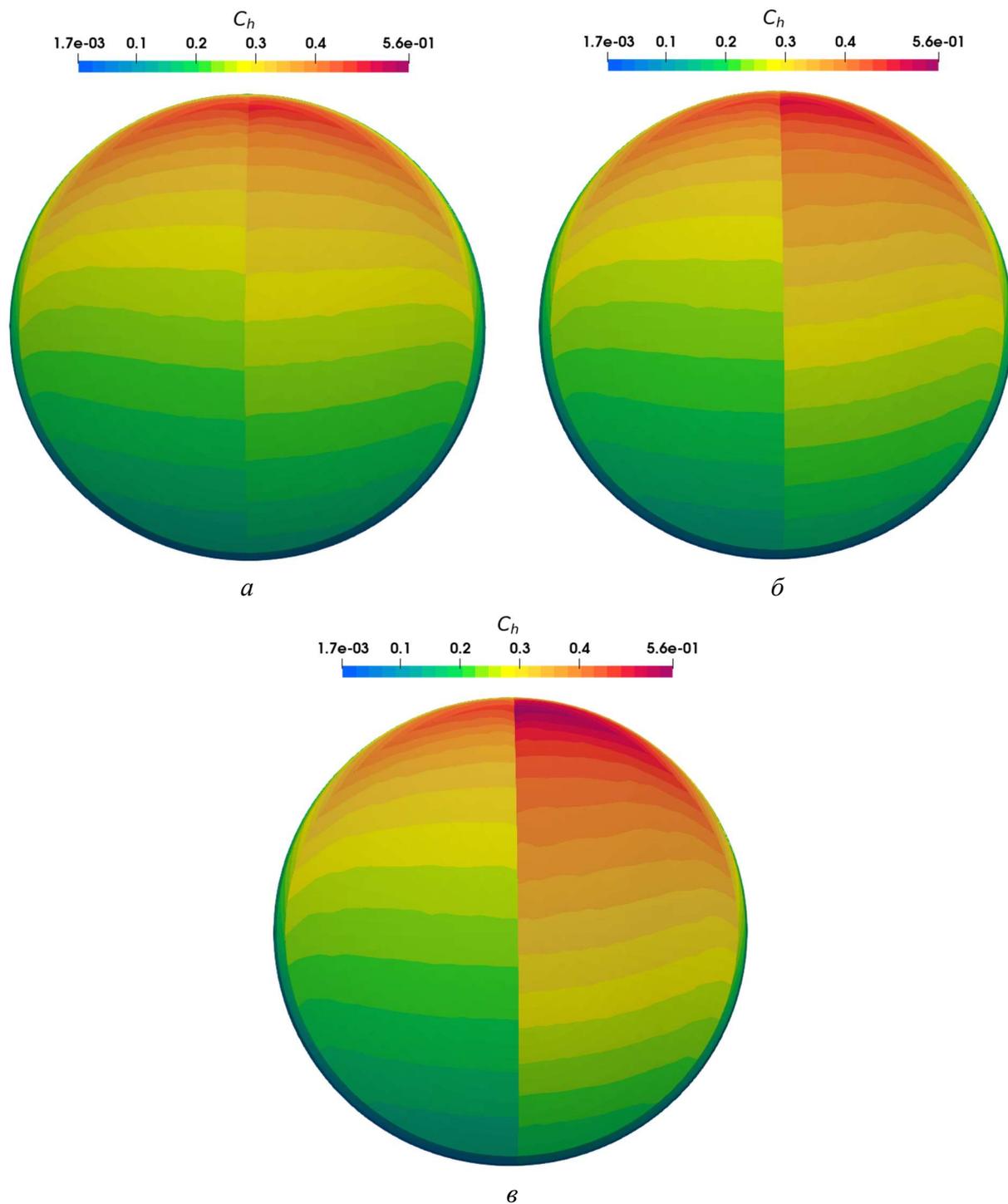


Рис. 5. Поверхностное распределение коэффициента теплопередачи C_h в изотермическом случае. Левая половина — некаталитическая поверхность, правая половина: *a* — поверхность SiO_2 с набором поверхностных реакций Куротаки [14]; *б* — поверхность RCG с набором поверхностных реакций Варнатца и др. [13]; *в* — полностью каталитическая поверхность

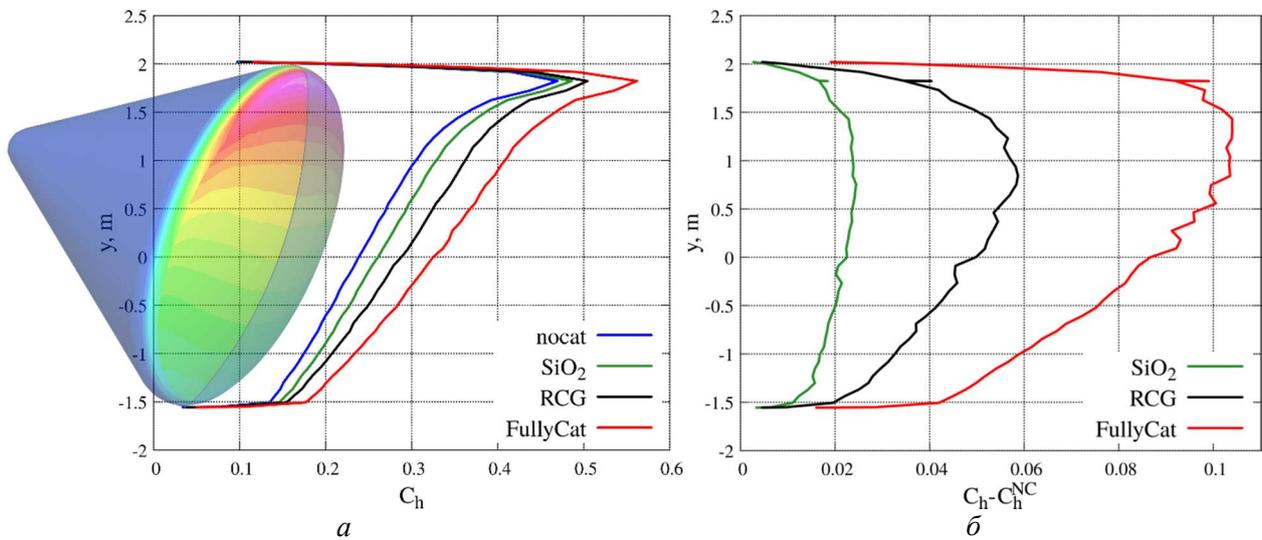


Рис. 6. Коэффициент теплопередачи C_h в плоскости симметрии (изотермический случай): a – коэффициент теплопередачи C_h ; b – разница коэффициентов теплопередачи $C_h - C_h^{NC}$ между каталитическим и некаталитическим случаями

В табл. 7 для рассмотренных типов поверхности приведены полный тепловой поток к поверхности \dot{Q} , рассчитанный для всей капсулы целиком, и значения распределенных по поверхности коэффициентов теплопередачи C_h в некоторых точках: максимальное значение $C_{h_{max}}$ в точке $y_{C_{h_{max}}} = 1.82$, $C_{h_{st.p.}}$ в точке торможения $y_{st.p.} = 1.42$ и $C_{h_{max.cat.p.}}$ в точке максимального влияния каталитичности $y_{max.cat.p.} = 0.84$. Также в столбцах “relative” приведены процентные значения представленных данных относительно некаталитического случая: $\frac{\dot{Q} - \dot{Q}^{NC}}{\dot{Q}^{NC}}$ для полного теплового потока к поверхности и $\frac{C_{h*} - C_{h*}^{NC}}{C_{h*}^{NC}}$ для коэффициентов теплопередачи в соответствующих точках (нижний индекс * означает max.st.p. или max.cat.p.).

Таблица 7

Коэффициент теплопередачи C_h и тепловой поток \dot{Q} для различных материалов поверхности (изотермический случай). В столбцах “relative” значения приведены в процентах

Тип поверхности	\dot{Q} , [кВт]	relative	$C_{h_{max}}$	relative	$C_{h_{st.p.}}$	relative	$C_{h_{max.cat.p.}}$	relative
Некаталитическая	832	0	0.469	0	0.3514	0	0.2927	0
SiO ₂	891	7.1	0.486	3.5	0.3742	6.5	0.3164	8.1
RCG	956	15	0.504	7.4	0.4042	15	0.3514	20
Полностью каталитическая	1083	30	0.562	19.6	0.4554	29.6	0.3962	35

Интересно отметить, что разница значений полного теплового потока к поверхности \dot{Q} с некаталитическим случаем (первый столбец, “relative”) коррелирует с аналогичной разницей для коэффициентов теплопередачи в точке торможения $C_{h_{st.p.}}$ (третий столбец, “relative”): процентные значения в столбцах “relative” очень близки, тогда как для других точек значения отличаются. В точке максимального значения $y_{C_{h_{max}}}$ значения для относительной разницы $C_{h_{max}}$ с некаталитическим случаем меньше, чем в точке торможения $y_{st.p.}$,

а в точке максимального влияния каталитичности $y_{\max.cat.p.}$ – больше. Поверхностные процессы при рассмотренных условиях обтекания максимально могут давать вклад в интегральный тепловой поток к капсуле порядка 30 %, однако в таблице видно, что в некоторых точках могут получаться большие значения – до 35 %, как например в точке максимального влияния каталитичности $y_{\max.cat.p.}$ для полностью каталитической поверхности.

В табл. 8 представлены полученные в расчетах вероятности рекомбинации Или – Ридела γ_{ER} и Ленгмюра – Хиншелвуда γ_{LH} для двух рассмотренных детальных моделей поверхностной рекомбинации. Как видно из полученных значений, в моделях Варнатца и др. (RCG) и Куротаки (SiO₂) рекомбинация идёт в основном по механизму Ленгмюра – Хиншелвуда – примерно на порядок больше, чем по механизму Или – Ридела. Причем в модели Куротаки, которая учитывает перекрестные реакции, большая доля реакций – это рекомбинация с производством NO. Также стоит отметить, что вероятности рекомбинации, которые предсказывает модель Варнатца и др., примерно на порядок выше, чем по модели Куротаки. O₂

Таблица 8
Вероятность рекомбинации Или – Ридела γ_{ER}
и Ленгмюра – Хиншелвуда γ_{LH} для различных
материалов поверхности

		γ_{ER}	γ_{LH}
RCG	N ₂	7.51×10^{-3}	4.46×10^{-2}
	O ₂	2.51×10^{-3}	4.45×10^{-2}
SiO ₂	N ₂	1.55×10^{-4}	6.35×10^{-3}
	O ₂	1.62×10^{-4}	9.78×10^{-3}
	NO	1.57×10^{-4}	1.09×10^{-2}

Во второй серии расчетов использовались граничные условия равновесно излучающей поверхности. Это означает, что температура поверхности T_w не была постоянной и определялась из условий равновесия всех тепловых потоков на поверхности: конвективного, за счет поверхностных химических реакций и излучения поверхности. Температура T_w вычислялась из следующего соотношения:

$$q_i - q_r + q_{surf.recomb.} = \varepsilon \sigma T_w^4, \quad (2)$$

где q_i [J/m²s] – плотность теплового потока частиц, приходящих на поверхность; q_r [J/m²s] – плотность теплового потока отраженных частиц; $q_{surf.recomb.}$ [J/m²s] – плотность теплового потока за счет энергии, выделяющейся в реакциях рекомбинации на поверхности; ε – степень черноты; σ – постоянная Стефана – Больцмана. В расчетах степень черноты полагалась равной $\varepsilon = 0.8$. Для вычисления q_i, q_r и $q_{surf.recomb.}$ на каждом элементе поверхности заводятся счетчики энергии Q_i, Q_r и Q_{cat} соответственно. В процессе расчета во время каждого столкновения частицы с поверхностью ее энергия добавляется в счетчик энергии приходящих частиц Q_i , который используется для вычисления q_i . Когда какая-либо частица покидает поверхность (либо отражается, либо десорбируется, либо превращается в иную частицу в следствие рекомбинации на поверхности), ее скорость моделируется так же как и для случая изотермической стенки по закону диффузного отражения с полной accommodation энергии. Энергия ушедшей частицы добавляется в счетчик энергии отраженных от поверхности частиц Q_r , который используется для вычисления q_r . При каждом акте рекомбинации частиц на поверхности выделившаяся в реакции энергия добавляется в счетчик энергии поверхностной рекомбинации Q_{cat} , из которого вычисляется $q_{surf.recomb.}$.

Плотность теплового потока из соответствующего счетчика вычисляется по формуле

$$q_* = \frac{Q_*}{S_e \cdot t},$$

где S_e – площадь элемента поверхности; t – время, в течение которого шло накопление счетчиков энергии.

Температура T_w вычисляется для каждой панели поверхности отдельно и пересчитывается по формуле (2) только на этапе установления течения до начала выборки с периодичностью раз в несколько шагов при условии накопления за прошедший период достаточного количества столкновений частиц с панелью. Если столкновений с панелью произошло недостаточно – то для этой панели этап пересчета температуры поверхности пропускается, а счетчики энергии входящих и отраженных частиц, а так же энергии поверхностной рекомбинации для этой панели продолжают накопление до следующего этапа пересчета температуры поверхности. Если пересчет температуры панели произошел – эти счетчики обнуляются. Таким образом для корректной работы алгоритма необходимо достаточное число столкновений частиц с поверхностью. Если столкновений недостаточно, например если речь идет о тыльной стороне модели, то температура поверхности в этой части может не успеть выйти на равновесное значение. Эту проблему можно преодолеть более длительным периодом установления течения, то есть более поздним началом выборки.

На рис. 7 для случая равновесно излучающей поверхности представлены распределения поверхностной температуры T_w для каталитических поверхностей на правой половине рисунка в сравнении с некаталитической поверхностью на левой половине: на рис. 7, а представлена поверхность SiO_2 , смоделированная с набором поверхностных реакций Куротаки, на рис. 7, б – RCG-поверхность, смоделированная с набором поверхностных реакций Варнатца и др., а на рис. 7, в – полностью каталитическая поверхность. Срезы представленного распределения поверхностной температуры T_w в плоскости симметрии показаны на рис. 8. Видно, что максимальное значение температуры, как и в случае коэффициента теплопередачи, достигается в верхней точке ребра лобовой поверхности капсулы ($y_{T_{w\max}} = y_{C_{h\max}} = 1.82$), и по обе стороны от пикового значения температура T_w , как и коэффициент теплопередачи C_h , монотонно убывает. Так же из графиков на рис. 8, б видно, что как и в случае коэффициента теплопередачи C_h область максимального влияния каталитичности на температуру T_w расположена ниже точки $y_{T_{w\max}}$. Ее границы немного размыты, однако же максимальное влияние каталитичности тем не менее все равно достигается примерно в той же точке, что и в случае коэффициента теплопередачи: $y_{\max.cat.p.} \approx 0.84$. В табл. 9 приведены значения температуры поверхности T_w в точке максимума ($y_{T_{w\max}} = 1.82$), точке торможения $y_{st.p.} = 1.42$ и точке максимального влияния каталитичности $y_{\max.cat.p.} = 0.84$; а также в соседних столбцах “relative” приведены их процентные значения относительно некаталитического случая $\frac{T_{w*} - T_{w*}^{NC}}{T_{w*}^{NC}}$ (нижний индекс * означает $\max.st.p.$ или $\max.cat.p.$). Здесь, аналогично коэффициенту теплопередачи, значения для относительной разницы температуры поверхности с некаталитическим случаем в точке максимального значения $y_{T_{w\max}}$ меньше, чем в точке торможения $y_{st.p.}$, а в точке максимального влияния каталитичности $y_{\max.cat.p.}$ – больше. При этом в точке максимального значения $y_{T_{w\max}}$ различие между детальными моделями поверхностной рекомбинации составляет не более 2%, а в точке максимального влияния каталитичности различие достигает 5%. Также на рис. 8, б представлена рассмотренная

разница между распределениями поверхностной температуры для материалов SiO₂ (зеленая линия), RCG (черная линия) и полностью каталитической поверхности (красная линия) с некаталитическим случаем в плоскости симметрии, и видно, что в модели для материала RCG она примерно в 2 раза больше, чем в модели для материала SiO₂, а в случае полностью каталитической поверхности – больше примерно в 3 раза.

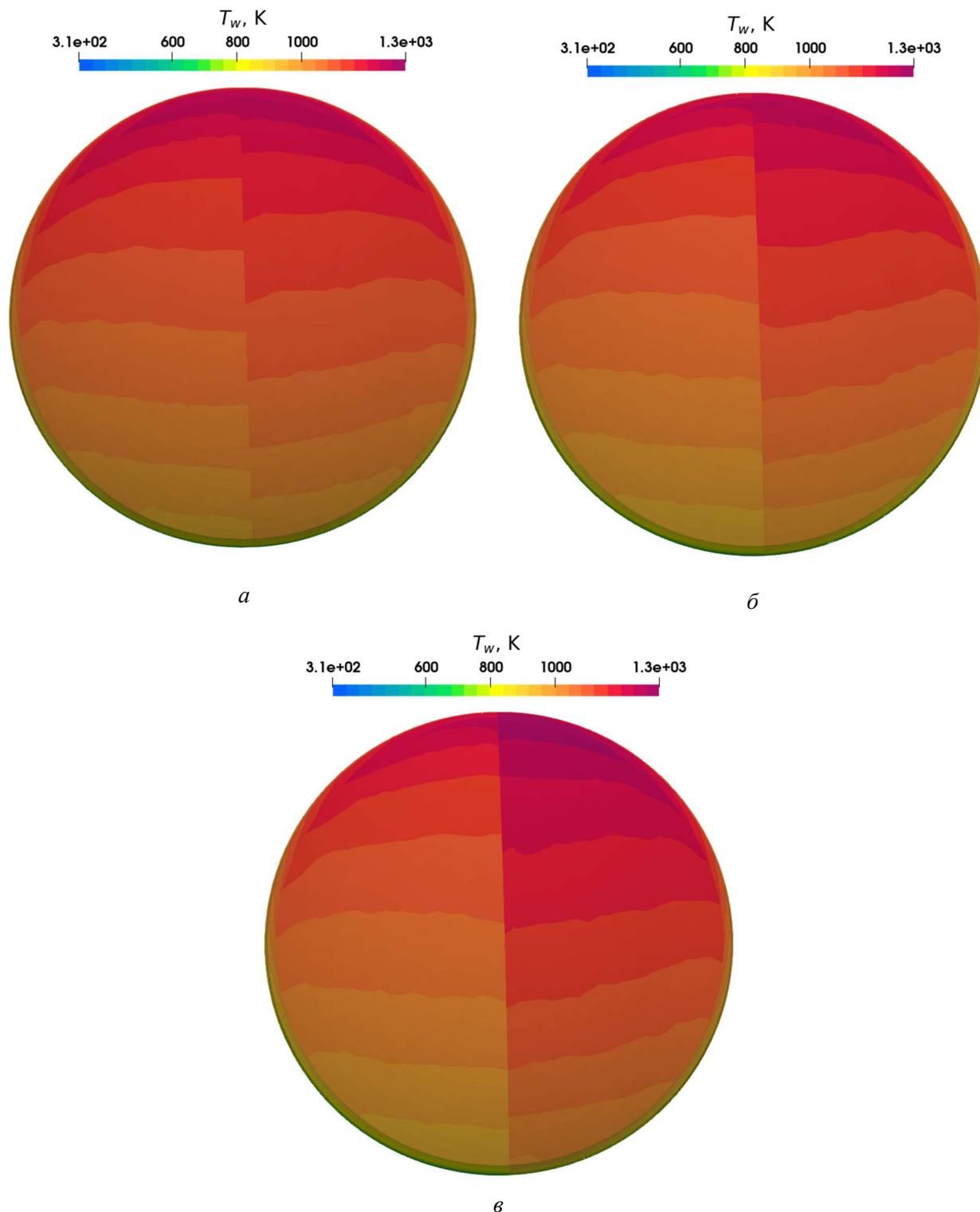


Рис. 7. Распределение температуры поверхности в случае равномерно излучающей стенки. Левая половина – некаталитическая поверхность, правая половина: *а* – поверхность SiO₂ с набором поверхностных реакций Куротаки [14]; *б* – поверхность RCG с набором поверхностных реакций Варнатца и др. [13]; *в* – полностью каталитическая поверхность

Таблица 9

Температура поверхности T_w для различных материалов поверхности (равновесно излучающая поверхность)

Тип поверхности	T_{wmax}	relative, %	$T_{wst.p.}$	relative, %	$T_{wmax.cat.p.}$	relative, %
Некаталитическая	1256.87	0	1171.34	0	1118.62	0
SiO ₂	1268.56	0.93	1189.25	1.53	1145.45	2.4
RCG	1282.88	2.07	1218.7	4.04	1178.49	5.35
Полностью каталитическая	1316.42	4.74	1251.21	6.82	1209.77	8.15

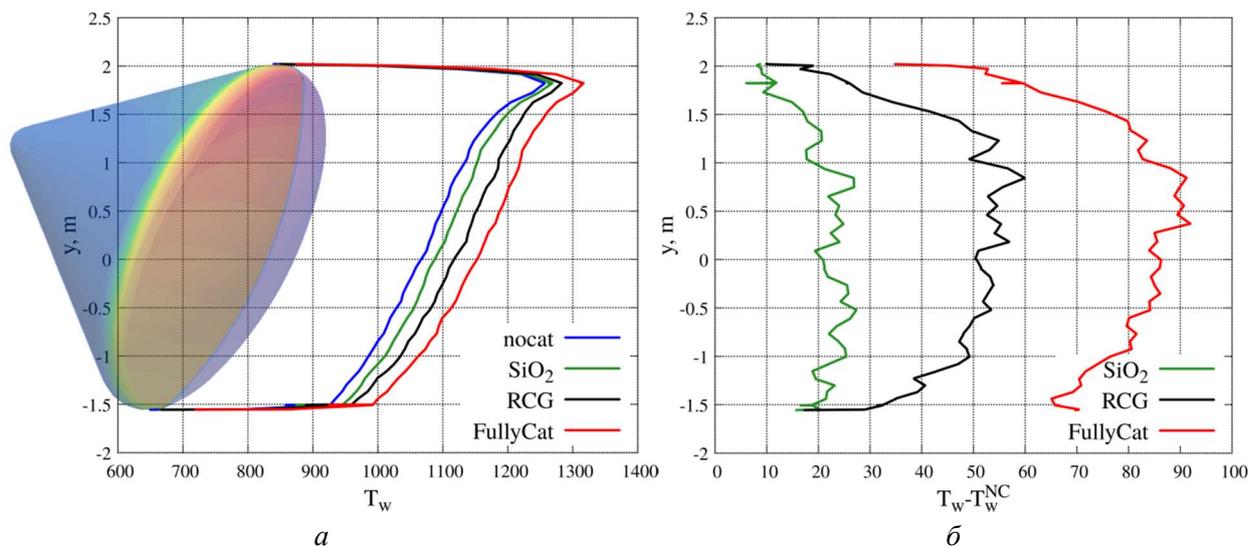


Рис. 8. Температура поверхности T_w в плоскости симметрии (равновесно излучающая поверхность): а – температура поверхности T_w ; б – разница температур поверхности $T_w - T_w^{NC}$ между каталитическим и некаталитическим случаями

В табл. 10 приведен коэффициент момента тангажа c_m относительно центра тяжести капсулы c_g . Точка c_g показана на рис. 1, ее координаты в системе координат капсулы $(l_{c_g}, r_{c_g}) = (-1.1455, 0.16)$ (см. табл. 1), а в системе координат, связанной с течением $(x_{c_g}, y_{c_g}) = (-0.971, 0.629)$. В таблице приведены значения c_m для некаталитической, полностью каталитической поверхности и для механизмов Куротаки (материал SiO₂) и для Варнатца и др. (материал RCG) для обоих типов поверхности: изотермической и равновесно излучающей. Из таблицы видно, что различия между случаями изотермической и равновесно излучающей поверхностями для соответствующих моделей гетерогенной рекомбинации незначительны. Однако, для разных моделей каталитичности, то есть разных материалов поверхности, на капсулу действует разный момент тангажа

$$c_m^{FC} < c_m^{RCG} < c_m^{SiO_2} < c_m^{NC} < 0, \quad (3)$$

при этом отличие от некаталитического случая для материала SiO₂ порядка $1.5 \div 2\%$, для материала RCG – порядка 5% , а для полностью каталитического случая – больше 7% . Следовательно и ожидаемый балансировочный угол капсулы α_{trim} , как и расположение точки максимального нагрева ее поверхности, при рассмотренных условиях обтекания для разных моделей поверхностной каталитичности будут разными, что является важным для проектирования теплозащиты и расчетов траектории движения.

Таблица 10

Коэффициент момента тангажа

	Изотермическая стенка ($T_w = 1000$ К)		Равновесно излучающая поверхность	
	c_m	$\frac{c_m - c_m^{NC}}{c_m^{NC}}, \%$	c_m	$\frac{c_m - c_m^{NC}}{c_m^{NC}}, \%$
Некаталитическая	-0.0316	0	-0.0317	0
SiO ₂	-0.0322	1.9	-0.0322	1.58
RCG	-0.0331	4.75	-0.0333	5.05
Полностью каталитическая	-0.0339	7.28	-0.034	7.26

5. Заключение

Проведено численное исследование влияния поверхностных химических процессов на аэротермодинамику модельной капсулы при входе в атмосферу на высоте 100 км с использованием метода прямого статистического моделирования. В расчетах использованы различные детальные модели процессов на поверхности теплозащитных материалов, включающие различные элементарные стадии гетерогенной рекомбинации. Было показано, что даже на такой большой высоте полета поверхностная рекомбинация существенно влияет на концентрацию компонентов смеси около поверхности аппарата, на тепловые потоки к поверхности, температуру поверхности, а также на момент тангажа капсулы. Детальное моделирование поверхностных химических процессов в методе прямого статистического моделирования является необходимым условием корректного предсказания высотной аэротермодинамики перспективных спускаемых аппаратов.

Благодарности и ссылки на гранты

Работа выполнена в рамках проекта Российского научного фонда (проект № 22-19-00750) с использованием вычислительного кластера ЦКП "Механика" (ИТПМ СО РАН).

Литература

1. Kovalev V. L., Kolesnikov A. F. Experimental and theoretical simulation of heterogeneous catalysis in aerothermochemistry // *Fluid Dynamics*. 2005. Vol. 40, no. 5. Pp. 669–693. <https://doi.org/10.1007/s10697-005-0106-4>
2. Власов В. И., Залогин Г. Н., Лунев В. В. О каталитичности материалов в высокотемпературных многокомпонентных газах // *Физико-химическая кинетика в газовой динамике*. 2008. Т. 7. <http://chemphys.edu.ru/issues/2008-7/articles/437/>
3. Васильевский С. А., Гордеев А. Н., Колесников А. Ф., Сахаров В. И., Чаплыгин А. В. Экспериментальное и численное исследование теплового эффекта катализа на поверхностях металлов и кварца в недорасширенных струях диссоциированного воздуха // *Физико-химическая кинетика в газовой динамике*. 2018. Т. 19, вып. 4. <http://chemphys.edu.ru/issues/2018-19-4/articles/779/>. <http://doi.org/10.33257/PhChGD.19.4.779>
4. Candler G. V., Johnson H. B., Nompelis I., Subbareddy P. K., Drayna T. W., Gidzak V., Barnhardt M. D. Development of the US3D Code for Advanced Compressible and Reacting Flow Simulations // *53rd Aerospace Sciences Meeting, AIAA Paper 2015-1893*. <https://doi.org/10.2514/6.2015-1893>
5. Martin A., Scalabrin L. C., Boyd I. D. High Performance Modeling of Atmospheric Re-Entry Vehicles. // *Journal of Physics: Conference Series*. 2012. Vol. 341:012002.

6. Суржиков С. Т. Расчетный анализ данных летного эксперимента по ионизации сжатого слоя при скорости полета 5.34 км/с в разреженной атмосфере // Физико-химическая кинетика в газовой динамике. 2015. Т. 16, вып. 4. <http://chemphys.edu.ru/issues/2015-16-4/articles/595/>
7. Железнякова А. Л., Кузенов В. В., Петрусев А. С., Суржиков С. Т. Расчет аэротермодинамики двух типов моделей спускаемых космических аппаратов // Физико-химическая кинетика в газовой динамике. 2010. Т. 9. <http://chemphys.edu.ru/issues/2010-9/articles/144/>
8. Макеич Г. С., Харченко Н. А., Крюков И. А. Расчет аэродинамики и динамики полета спускаемого летательного аппарата EXPERT // Физико-химическая кинетика в газовой динамике. 2017. Т. 18, вып. 2. <http://chemphys.edu.ru/issues/2017-18-2/articles/738/>
9. Bird G. A. *Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows*. Clarendon Press, Oxford, 1994.
10. Molchanova A. N., Kashkovsky A. V., Bondar Ye. A. Surface recombination in the direct simulation Monte Carlo method // *Physics of Fluids*. 2018. Vol. 30, no. 10. P. 107105(18).
11. Litvintsev A. S., Molchanova A. N., Bondar Ye. A. NO production on the reentry spacecraft thermal protection system surface in the direct simulation Monte Carlo method // *Journal of Physics: Conference Series: XVI All-Russian Seminar with international participation Dynamics of Multiphase Media*. 2019. Vol. 1404. P. 012118(6).
12. Litvintsev A. S., Molchanova A. N., Bondar Ye. A. Effects of heterogeneous NO production on the aerothermodynamics of high-altitude re-entry // *AIP Conference Proceedings: XXVII Conference on High-Energy Processes in Condensed Matter*. 2020. Vol. 2288. P. 030090(6).
13. Deutschmann O., Riedel U., Warnatz J. Modeling of nitrogen and oxygen recombination on partial catalytic surfaces // *Heat Transfer*. 1995. Vol. 117, no. 2. Pp. 495–501.
14. Kurotaki T., Ito T., Matsuzaki T., et al. CFD Evaluation of Catalytic Model on SiO₂-Based TPS in Arc-Heated Wind Tunnel // 41st Aerospace Sciences Meeting and Exhibit, AIAA Paper 2003-155. <https://doi.org/10.2514/6.2003-155>
15. Бучаченко А. А., Ковалёв В. Л., Крупнов А. А. Коэффициенты скоростей элементарных стадий высокотемпературной рекомбинации атомарного кислорода на поверхности Al₂O₃ // Физико-химическая кинетика в газовой динамике. 2013. Т. 14, вып. 2. <http://chemphys.edu.ru/issues/2013-14-2/articles/382/>
16. Литвинцев А. С., Молчанова А. Н., Кашковский А. В., Бондарь Е. А. Параллельная реализация детальных поверхностных химических механизмов в методе прямого статистического моделирования // *Теплофизика и физическая гидродинамика: VI Всерос. науч. конф. с элементами шк. молодых учёных*. 2021. Т. 8. С. 189.
17. Kashkovsky A. V., Bondar Ye. A., Zhukova G. A., et al. Object-Oriented Software Design of Real Gas Effects for the DSMC Method // 24th Int. Symp. on RGD. 2005. DOI:10.1063/1.1941599
18. Ivanov M. S., Kashkovsky A. V., Vashchenkov P. V., Bondar Ye. A. Parallel Object-Oriented Software System for DSMC Modeling of High-Altitude Aerothermodynamic Problems // 27th Int. Symp. on RGD: AIP Conf. Proceedings 1333, 2011. <https://doi.org/10.1063/1.3562650>
19. Moss J. N., Glass C. E., Greene F. A., DSMC Simulations of Apollo Capsule Aerodynamics for Hypersonic Rarefied Conditions // 9th AIAA/ASME Joint Thermophysics and Heat Transfer Conference, AIAA Paper 2006-3577. <https://doi.org/10.2514/6.2006-3577>
20. Shevyrin A. A., Bondar Y. A., Ivanov M. S. Analysis of Repeated Collisions in the DSMC Method. // *AIP Conference Proceedings*. 2005. Vol. 762. <https://doi.org/10.1063/1.1941596>
21. Ivanov M. S., Rogasinsky S. V. Analysis of the Numerical Techniques of the Direct Simulation Monte Carlo Method in the Rarefied Gas Dynamics // *Soviet Journal of Numerical and Analytical Mathematical Modeling*. 1988. Vol. 3, no. 6. Pp. 453–465.
22. Borgnakke C., Larsen S.P. Statistical collision model for Monte Carlo simulation of polyatomic gas mixture // *Journal of Computational Physics*. 1975. Vol. 18. Pp. 405–420.

23. Gimelshein S., Wysong I., Bondar Ye. A., Ivanov M. S. Accuracy analysis of DSMC chemistry models applied to a normal shock wave // 28th Int. Symp. on RGD. AIP Conference Proceedings, 2012. Vol. 1501, no. 1, pp. 637–644. DOI:10.1063/1.4769602
24. Gimelshein N. E., Gimelshein S. F., Levin D. A. Vibrational relaxation rates in the direct simulation Monte Carlo method // *Physics of Fluids*. 2002. Vol. 14, no. 12. P. 445(5).
25. Bird G. A. Monte-Carlo simulation in an engineering context // 12th Int. Symp. on RGD. 1981. Pp. 239–255.
26. Shumakova A., Shevyrin A., Bondar Ye. A., et al. Effects of surface chemistry on high-altitude aerothermodynamics of space vehicles // 52nd Aerospace Sciences Meeting, AIAA Paper 2014-0699. <https://doi.org/10.2514/6.2014-0699>
27. Молчанова А. Н., Бондарь Е. А., Кашковский А. В., Иванов М. С. Прямое статистическое моделирование высокоскоростного течения около затупленного тела в смеси CO₂/N₂ с учетом поверхностной рекомбинации // *Вычислительные технологии*. 2014. Т. 19, вып. 5. С. 67–84.

References

1. Kovalev V. L., Kolesnikov A. F., Experimental and theoretical simulation of heterogeneous catalysis in aerothermochemistry, *Fluid Dynamics*, 2005, vol. 40, no. 5, pp. 669–693. <https://doi.org/10.1007/s10697-005-0106-4>
2. Vlasov V. I., Zalugin G. N., Lunev V. V. About material catalyticity in high temperature multicomponent gases, *Physical-Chemical Kinetics in Gas Dynamics*, 2008, vol. 7. [in Russian]. <http://chemphys.edu.ru/issues/2008-7/articles/437/>
3. Chaplygin A. V., Gordeev A. N., Kolesnikov A. F., Sakharov V. I., Vasil'evskii S. A. Experimental and numerical study of thermal effect of catalysis on the surfaces of metals and quartz in underexpanded jets of dissociated air, *Physical-Chemical Kinetics in Gas Dynamics*, 2018, vol. 19, no. 4. [in Russian]. <http://chemphys.edu.ru/issues/2018-19-4/articles/779/>. <http://doi.org/10.33257/PhChGD.19.4.779>
4. Candler G. V., Johnson H. B., Nompelis I., Subbareddy P. K., Drayna T. W., Gidzak V., Barnhardt M. D. Development of the US3D Code for Advanced Compressible and Reacting Flow Simulations, AIAA Paper 2015-1893. <https://doi.org/10.2514/6.2015-1893>
5. Martin A., Scalabrin L. C., Boyd I. D. High Performance Modeling of Atmospheric Re-Entry Vehicles., *Journal of Physics: Conference Series*, 2012, vol. 341:012002.
6. Surzhikov S. T., Numerical investigation of experimental flight data on shock layer ionization at velocity 5.34 km/s in rarefied, *Physical-Chemical Kinetics in Gas Dynamics*, 2015, vol. 16, no. 4. [in Russian]. <http://chemphys.edu.ru/issues/2015-16-4/articles/595/>
7. Zheleznyakova A. L., Kuzenov V. V., Petrusev A. S., Surzhikov S. T., The modelling of hydrodynamics for two different models of space vehicle, *Physical-Chemical Kinetics in Gas Dynamics*, 2010, vol. 9. [in Russian]. <http://chemphys.edu.ru/issues/2010-9/articles/144/>
8. Makeich G. S., Kharchenko N. A., Kryukov I. A., Aerodynamics and flight dynamics simulation of expert re-entry vehicle, *Physical-Chemical Kinetics in Gas Dynamics*, 2017, vol. 18, no. 2. [in Russian]. <http://chemphys.edu.ru/issues/2017-18-2/articles/738/>
9. Bird G. A., *Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows*, Clarendon Press, Oxford, 1994.
10. Molchanova A. N., Kashkovsky A. V., Bondar Ye. A., Surface recombination in the direct simulation Monte Carlo method, *Physics of Fluids*, 2018, vol. 30, no. 10, pp. 107105(18).
11. Litvintsev A. S., Molchanova A. N., Bondar Ye. A., NO production on the reentry spacecraft thermal protection system surface in the direct simulation Monte Carlo method, *Journal of Physics: Conference Series: XVI All-Russian Seminar with international participation Dynamics of Multiphase Media*. 2019, vol. 1404, pp. 012118(6).

12. Litvintsev A. S., Molchanova A. N., Bondar Ye. A., Effects of heterogeneous NO production on the aerothermodynamics of high-altitude re-entry, *AIP Conference Proceedings: XXVII Conference on High-Energy Processes in Condensed Matter*, 2020, vol. 2288, pp. 030090(6).
13. Deutschmann O., Riedel U., Warnatz J., Modeling of nitrogen and oxygen recombination on partial catalytic surfaces, *Heat Transfer*, 1995, vol. 117, no. 2, pp. 495–501.
14. Kurotaki T., Ito T., Matsuzaki T., et al., CFD Evaluation of Catalytic Model on SiO₂-Based TPS in Arc-Heated Wind Tunnel, *AIAA Paper 2003-155*. <https://doi.org/10.2514/6.2003-155>
15. Buchachenko A. A., Kovalev V. L., Kroupnov A. A., Elementary rate coefficients for high-temperature atomic oxygen recombination on the Al₂O₃ surface, *Physical-Chemical Kinetics in Gas Dynamics*, 2013, vol. 14, no. 2. [in Russian]. <http://chemphys.edu.ru/issues/2013-14-2/articles/382/>
16. Litvintsev A. S., Molchanova A. N., Kashkovsky A. V., Bondar Ye. A. *Teplofizika i fizicheskaja gidrodinamika: VI Vserossijskaja nauchnaja konferencija s jelementami shkola molodyh uchjonyh*, 2021, vol. 8, P. 189.
17. Kashkovsky A. V., Bondar Ye. A., Zhukova G. A., et al. Object-Oriented Software Design of Real Gas Effects for the DSMC Method, *AIP Conference Proceedings*, 2005, vol. 762. <https://doi.org/10.1063/1.1941599>
18. Ivanov M. S., Kashkovsky A. V., Vashchenkov P. V., Bondar Ye. A., Parallel Object-Oriented Software System for DSMC Modeling of High-Altitude Aerothermodynamic Problems, *AIP Conf. Proceedings*, 2011, vol. 1333. <https://doi.org/10.1063/1.3562650>
19. Moss J. N., Glass C. E., Greene F. A., DSMC Simulations of Apollo Capsule Aerodynamics for Hypersonic Rarefied Conditions, *AIAA Paper 2006-3577*. <https://doi.org/10.2514/6.2006-3577>
20. Shevyrin A. A., Bondar Y. A., Ivanov M. S., Analysis of Repeated Collisions in the DSMC Method., *AIP Conference Proceedings*, 2005, vol. 762. <https://doi.org/10.1063/1.1941596>
21. Ivanov M. S., Rogasinsky S. V., Analysis of the Numerical Techniques of the Direct Simulation Monte Carlo Method in the Rarefied Gas Dynamics, *Soviet Journal of Numerical and Analytical Mathematical Modeling*, 1988, vol. 3, no. 6, pp. 453–465.
22. Borgnakke C., Larsen S. P., Statistical collision model for Monte Carlo simulation of polyatomic gas mixture, *Journal of Computational Physics*, 1975, vol. 18, pp. 405–420.
23. Gimelshein S., Wysong I., Bondar Ye. A., Ivanov M. S. Accuracy analysis of DSMC chemistry models applied to a normal shock wave, *AIP Conference Proceedings*, 2012, vol. 1501, no. 1, pp. 637–644. DOI:10.1063/1.4769602
24. Gimelshein N. E., Gimelshein S. F., Levin D. A., Vibrational relaxation rates in the direct simulation Monte Carlo method, *Physics of Fluids*, 2002, vol. 14. <https://doi.org/10.1063/1.1517297>
25. Bird G. A., Monte-Carlo simulation in an engineering context, *Progress in Astronautics and Aeronautics, AIAA*, 1981, vol. 74, no. 1, pp. 239–255.
26. Shumakova A., Shevyrin A., Bondar Ye. A., et al., Effects of surface chemistry on high-altitude aerothermodynamics of space vehicles, *AIAA Paper 2014-0699*. <https://doi.org/10.2514/6.2014-0699>
27. Molchanova A. N., Bondar Ye. A., Kashkovsky A. V., Ivanov M. S., DSMC modeling of a high-enthalpy CO₂/N₂ flow about a blunt body with surface recombination, *Journal of computational technologies*, 2014, vol. 19, no. 5, pp. 67–84. [in Russian].

Статья поступила в редакцию 21 января 2023 г.