

ПЕРСПЕКТИВЫ МНОГОУРОВНЕВОГО ПОДХОДА К ЗАДАЧАМ КОМПЬЮТЕРНОЙ АЭРОФИЗИКИ

С.Т. Суржиков

*Институт проблем механики Российской академии наук, Москва,
119526, проспект Вернадского, д.101-1*

Аннотация

Обсуждаются перспективы и проблемы многоуровневого подхода к решению задач компьютерной аэрофизики. Дано определение физической механики, многоуровневого подхода и интегрированных моделей аэрофизики. Приводятся примеры реализации многоуровневого подхода и интегрированных моделей к решению задач компьютерной аэрофизики спускаемых космических аппаратов.

В качестве примера реализации интегрированных моделей физической механики представлены результаты расчетов аэротермодинамики космического аппарата MSRO (Mars Sample Return Orbiter) с использованием компьютерной программы NERAT (Non-Equilibrium Radiation Aero Thermodynamics). В качестве тестовых точек, допускающих последующее сравнение с расчетными данными других авторов, использованы размеры КА и траекторные параметры, установленные рабочей группой Европейского космического агентства по излучению высокотемпературных газов (тестовая задача TC3).

PROSPECTS OF THE MULTI-SCALE APPROACH TO THE COMPUTER AEROPHYSICS PROBLEMS

Prospects and problems of multi-scale approach for solution of problems of computational aerophysics are presented. Definitions of the physical mechanics, the multi-scale approach, and the integral models of the physical mechanics are presented. Examples of multi-scale approach and integral models for problems of aerothermodynamics of space vehicles are discussed.

As an example, these models are illustrated for aerothermodynamic prediction of space vehicle MSRO (Mars Sample Return Orbiter) with using computer code NERAT (Non-Equilibrium Radiation Aero Thermodynamics). Test case TC3 suggested by the European Space Agency is discussed.

1. ВВЕДЕНИЕ

Развитие методов компьютерной физической механики приводит к необходимости формулировки принципиально новых подходов и методов решения задач фундаментальной физической механики и реализации моделей и программных кодов прикладной физической механики. Одним из общепринятых определений физической механики является следующее: **физическая механика** – это область механики, основной целью которой является предсказание макросвойств, постулируемых феноменологической механикой, а также теоретическое описание поведения плазмы, газов, жидкостей и твердых тел в условиях их взаимодействия, равновесия и динамики на основе микроанализа структуры веществ. В особенности это относится к материалам, применяемым в повседневной практике. В этом смысле физическая механика может рассматриваться как техническая наука, которая служит инженерной практике.

Опыт инженерных подходов прошедших столетий показывает, что для решения вопросов, связанных с решением инженерных проблем, широко использовались прежде всего экспериментальные методы. Этому было много причин, но две основных представляются очевидными:

- определение свойств материалов экспериментальным путем оказалось более доступным и простым;
- отсутствие теорий, объясняющих микроструктуру веществ делали невозможным теоретическое описание макросвойств веществ.

Однако, в настоящее время перед наукой и, в частности, перед механикой все чаще встают проблемы описания и объяснения поведения веществ в условиях, когда постановка экспериментов оказывается чрезвычайно дорогой или даже невозможной. Попытки решения таких задач показали, что объединение в единый комплекс таких сформировавшихся наук, как феноменологическая механика, статистическая механика и статистическая физика, квантовая и физическая химия, физическая и химическая кинетика позволяют объяснить многие явления и эффекты, ранее остававшиеся вне области понимания. Мощным толчком к формированию физической механики послужило интенсивное развитие вычислительной техники. Развитые методы вычислений, методы проведения вычислительных экспериментов, а также компьютерные технологии реализации физических моделей на современных персональных и многопроцессорных комплексах завершили формирование облика физической механики как науки, обосновывающей возможность использования достижений в описании микромира при описании макросвойств вещества.

Такое определение физической механики делает указанную науку *a priori* незамкнутой. Неясны границы применимости указанных выше наук для целей физической механики. К тому же, совокупность наук не может рассматриваться как линейная комбинация наборов знаний. Взаимопроникновение наук всегда рождает качественно новое знание.

Многие годы традиционной областью «высоких технологий» физической механики была физико-химическая и радиационная газовая динамика космических

аппаратов, предназначенных для исследования планет солнечной системы и, в особенности, возвращаемых на Землю. В последнее десятилетие стало вполне привычным определять физическую механику как **многоуровневый подход** к созданию замкнутых моделей феноменологической механики с использованием иерархии моделей физики и химии. Другими словами, **многоуровневый подход** – это использование различной степени подробности описания элементарных и коллективных процессов теоретическими моделями с целью создания замкнутой модели изучаемого явления. Составными элементами такого подхода стали:

- феноменологическая механика сплошной среды и термодинамика;
- молекулярно-кинетическая теория и статистическая физика;
- химическая и физическая кинетика;
- квазиклассическая физика;
- квантовая механика и квантовая физика.

Лишь несколько примеров многоуровневого подхода иллюстрируют его плодотворность:

- определение свойств переноса (вязкости, теплопроводности, коэффициентов диффузии) газов и жидкостей с использованием метода Энского (и др. методов) на основе молекулярно-кинетической теории Больцмана;
- решение задач радиационной газовой динамики с использованием спектральных коэффициентов поглощения и излучения, рассчитанных на основе квантовой теории (квантовой механики и квантовой электродинамики);
- магнитная газовая динамика;
- турбулентность;
- прямое моделирование разреженных потоков методом Монте-Карло (DSMC).

Как уже отмечалось, принципиальную роль в развитии физической механики играет совершенствование вычислительной техники. Современные компьютерные алгоритмы позволяют не только моделировать поведение микросистем на атомном и молекулярном уровне, но и включать ряд моделей микроуровня в модели макроуровня. Появился и реализуется новый тип моделей физической механики: интегрированные модели. **Интегрированная модель** – это модель физического явления, объединяющая в себе одновременную реализацию многоуровневых моделей. Примерами реализации интегрированных моделей может служить решение следующих задач:

- расчет процессов переноса массы, импульса и энергии в неравновесных смесях газов и плазмы с использованием «модового» и «поуровневого» (state-by-state) подхода;
- радиационная газовая динамика неравновесных газов и плазмы.

В данной работе приводится пример интегрированной модели физической механики, построенной для решения задач радиационной аэрофизики спускаемых космических аппаратов. Основными элементами данной модели, свидетельствующими о многоуровневом подходе и интеграции моделей, являются следующие:

- объединение в единый расчетный комплекс задач феноменологической механики (уравнения Навье –

Стокса и сохранения энергии химически неравновесного газа), физической и химической кинетики, теории межмолекулярных взаимодействий, моделей квантовой механики (для предсказания спектральных оптических свойств высокотемпературных газов) и моделей переноса селективного теплового излучения (см. раздел 2);

- использование моделей классической теоретической механики и квазиклассической квантовой физики для расчета потенциалов межъядерного взаимодействия [1];
- использования результатов молекулярно-динамического моделирования для расчета констант скоростей химических реакций и времен колебательной релаксации двухатомных молекул [2];
- использование моделей квантовой механики для расчета вероятностей элементарных радиационных процессов [3].

Очевидно, что представленная ниже модель интегрирована весьма неоднородно. Часть моделей многоуровневого подхода используются отдельно от модели аэрофизики космических аппаратов, в которой используются лишь некоторые результаты указанных моделей (константы скоростей химических реакций, времена релаксации и т.п.). Другая часть моделей интегрирована в единый расчетный комплекс (расчет спектральных оптических свойств и переноса селективного теплового излучения). Подчеркнем, что процесс создания интегрированных моделей не следует трактовать как примитивное объединение всевозможных моделей разного уровня в некоторую большую компьютерную систему. Здесь требуется взвешенный анализ возможностей *on-line* расчета и использования разного рода аппроксимаций и электронных баз данных.

В данной работе исследуется аэрофизика модельного космического аппарата MSRO (Mars Sample Return Orbiter), геометрия которого была разработана в Европейском космическом агентстве [4] и была рекомендована для проведения численных исследований рабочей группой Европейского космического агентства по излучению высокотемпературных газов [4] (рис.1).

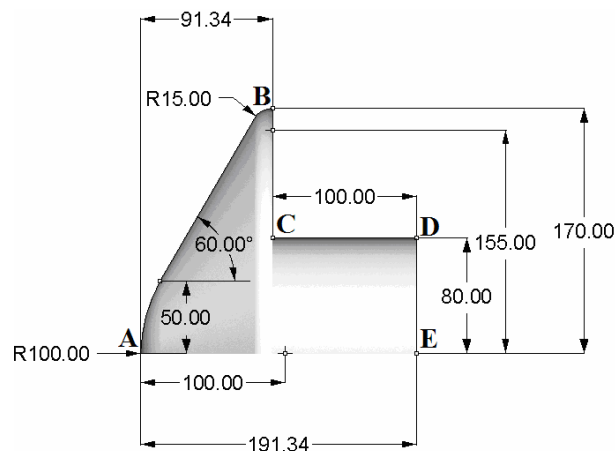


Рис. 1. Геометрия модели космического аппарата Mars Sampler Return Orbiter (MSRO) [4]

Были также определены контрольные точки траектории входа космического аппарата в атмосферу Марса (см. Табл.1). Предполагается, что фиксация геомет-

рии и точек траектории позволит провести сравнение результатов расчетов конвективного и радиационного нагрева поверхности космического аппарата, получаемого разными исследовательскими группами Мира.

Таблица 1 Параметры траектории

№	Время, с	ρ_{∞} , г/см ³	P_{∞} , эрг/см ³	V_{∞} , м/с	T_{∞} , К
1	70	3.14×10^{-8}	8.4	5687	140
2	115	2.93×10^{-7}	78.7	5223	140
3	175	3.07×10^{-7}	82.3	3998	140
4	270	2.82×10^{-8}	7.6	3536	140

2. ВЫЧИСЛИТЕЛЬНАЯ МОДЕЛЬ

Вычислительный код NERAT реализует численное интегрирование уравнений движения вязкого теплопроводного химически реагирующего излучающего газа методом установления в двумерной осесимметричной постановке. На каждом временном слое интегрируются уравнения Навье–Стокса и уравнение неразрывности, уравнение, выражающее закон сохранения энергии, и система уравнений диффузии химических компонентов смеси, уравнение переноса излучения и система уравнений колебательной кинетики:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div}(\rho \mathbf{V}) = 0, \quad (1)$$

$$\frac{\partial \rho u}{\partial t} + \text{div}(\rho u \mathbf{V}) = -\frac{\partial p}{\partial x} + S_{\mu,x}, \quad (2)$$

$$\frac{\partial \rho v}{\partial t} + \text{div}(\rho v \mathbf{V}) = -\frac{\partial p}{\partial r} + S_{\mu,r}, \quad (3)$$

$$\frac{\partial \rho_i}{\partial t} + \text{div} \rho_i \mathbf{V} = -\text{div} \mathbf{J}_i + \dot{w}_i, \quad i=1,2,\dots,N_s, \quad (4)$$

$$\begin{aligned} \rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} + \rho c_p \mathbf{V} \text{grad} T = \text{div}(\lambda \text{grad} T) + \\ + \frac{\partial p}{\partial t} + \mathbf{V} \text{grad} p + \Phi_{\mu} + Q_{vib} - \\ - \text{div} \mathbf{q}_R - \sum_{i=1}^{N_s} h_i \dot{w}_i + \sum_{i=1}^{N_s} \rho c_{p,i} D_i (\text{grad} Y_i \cdot \text{grad} T), \quad (5) \end{aligned}$$

$$\frac{\partial \rho e_{v,m}}{\partial t} + \text{div}(\rho \mathbf{V} e_{v,m}) = \dot{e}_{v,m}, \quad m=1,2,\dots,N_V, \quad (6)$$

где

$$S_{\mu,x} = -\frac{2}{3} \frac{\partial}{\partial x} (\mu \text{div} \mathbf{V}) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[r \mu \left(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial r} \right) \right] + 2 \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial x} \right),$$

$$\begin{aligned} S_{\mu,r} = -\frac{2}{3} \frac{\partial}{\partial r} (\mu \text{div} \mathbf{V}) + \frac{\partial}{\partial x} \left[\mu \left(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial r} \right) \right] + \\ + 2 \frac{\partial}{\partial r} \left(\mu \frac{\partial v}{\partial r} \right) + 2 \mu \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{v}{r} \right) \end{aligned}$$

компоненты сил вязкого трения,

$$\begin{aligned} \Phi_{\mu} = \mu \left\{ 2 \left(\frac{v}{r} \right)^2 + 2 \left(\frac{\partial v}{\partial r} \right)^2 + 2 \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 + \right. \\ \left. + \left(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial r} \right)^2 - \frac{2}{3} \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial r} + \frac{v}{r} \right)^2 \right\} \quad (7) \end{aligned}$$

диссипативная функция; t время; x, r – ортогональные цилиндрические координаты; u, v – проекции скорости \mathbf{V} на оси координат x и r ; p, ρ – давление и плотность; T – температура поступательного движения частиц; μ, λ – динамический коэффициент вязкости и коэффициент теплопроводности; c_p – удельная теплоемкость смеси при постоянном давлении;

$$c_p = \sum_i^{N_s} Y_i c_{p,i}; \quad Y_i - \text{массовая доля } i\text{-го компонента смеси};$$

$c_{p,i}, h_i$ – удельная теплоемкость при постоянном давлении, энтальпия и плотность i -го компонента смеси; \dot{w}_i – массовая скорость химических превращений для i -го компонента смеси (массовая скорость образования i -й компоненты смеси); D_i – эффективный коэффициент диффузии i -го компонента смеси; \mathbf{J}_i – плотность диффузионного потока i -го компонента; $\mathbf{J}_i = -D_i \text{grad} Y_i$; N_s – число химических компонентов смеси газов; Q_{vib} – объемная мощность тепловыделения, обусловленная процессами колебательной релаксации в газовой смеси; N_V число колебательных мод (в рассматриваемом случае $N_V=6$: $m=1$ для колебательной энергии N_2 , $m=2$ для колебательной энергии O_2 , $m=3,4,5$ для колебательной энергии CO_2 (симметричная, деформационная и несимметричная колебательные моды), $m=6$ для колебательной энергии CO);

$$\dot{e}_{v,m} = \rho_{i(m)} \frac{e_{v,m}^0 - e_{v,m}}{\tau_m} - e_{v,m} \dot{w}_{i(m)}, \quad (8)$$

$$e_{v,m} = \frac{R_0 \theta_m \rho_{i(m)}}{M_{i(m)} [\exp(\theta_m/T_{V,m}) - 1]}, \quad (9)$$

$e_{v,m}$ – удельная энергия колебательного движения в m -й колебательной моде i -го компонента газовой смеси; $\rho_{i(m)}$ – плотность i -го компонента газовой смеси, обладающего m -й модой колебательного движения; $e_{v,m}^0 = e_{v,m}(T_V = T)$ – равновесная удельная энергия колебательного движения в m -й колебательной моде i -го компонента; $R_0 = 8.314 \times 10^7$ эрг/(К·моль) – универсальная газовая постоянная; $T_{V,m}$ – колебательная температура, соответствующая m -й колебательной моде i -го компонента.

Уравнение переноса селективного теплового излучения формулируется в общем виде:

$$\mathbf{\Omega} \frac{\partial J_{\omega}(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega})}{\partial \mathbf{r}} + \kappa_{\omega}(\mathbf{r}) J_{\omega}(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}) = j_{\omega}(\mathbf{r}) \quad (10)$$

где $J_{\omega}(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega})$ – спектральная интенсивность излучения; $\kappa_{\omega}(\mathbf{r})$ – спектральный коэффициент поглощения; $j_{\omega}(\mathbf{r})$ – спектральный коэффициент испускания, который вычисляется с использованием закона Кирхгоффа (в приближении локального термодинамического равновесия):

$$j_{\omega}(\mathbf{r}) = \kappa_{\omega}(\mathbf{r}) J_{b,\omega}(\mathbf{r}) \quad (11)$$

$J_{b,\omega}(\mathbf{r})$ – интенсивность излучения абсолютно черного тела (функция Планка); \mathbf{r} – радиус-вектор рассматриваемой точки пространства; $\mathbf{\Omega}$ – единичный вектор

направления распространения излучения. Интегрирование интенсивности излучения по направлениям (с весом Ω) и по волновому числу излучения позволяет определить вектор плотности потока излучения:

$$\mathbf{q}_R = \mathbf{q}_R(\mathbf{r}) = \int_{4\pi} d\Omega \int_{\Delta\omega_{tot}} \Omega \mathbf{J}_\omega(\mathbf{r}, \Omega) d\omega \quad (12)$$

Для того чтобы определить способ расчета массовой скорости химических превращений \dot{w}_i для i -го компонента смеси, воспользуемся базовыми понятиями химической кинетики. Используя символическую формулу для n -ой химической реакции

$$\sum_{j=1}^{N_s} a_{j,n} [X_j] = \sum_{j=1}^{N_s} b_{j,n} [X_j], \quad n=1, 2, \dots, N_r, \quad (13)$$

скорость образования j -й компоненты в n -й химической реакции записывается в виде

$$\left(\frac{dX_j}{dt}\right)_n = k_{f,n} (b_{j,n} - a_{j,n}) \prod_{i=1}^{N_s} X_i^{a_{i,n}} - k_{r,n} (b_{j,n} - a_{j,n}) \prod_{i=1}^{N_s} X_i^{b_{i,n}} = (b_{j,n} - a_{j,n}) (S_f^n - S_r^n) \quad (14)$$

где $a_{j,n}, b_{j,n}$ – стехиометрические коэффициенты n -й химической реакции; X_j – объемно-мольная концентрация j -й компоненты; $[X_j]$ – химические символы реагентов и продуктов химических реакций; N_r – число химических реакций; $k_{f,n}, k_{r,n}$ – константы скоростей прямых и обратных реакций; S_f^n, S_r^n – скорости прямой и обратной реакции.

Тогда, скорость образования числа молей j -й компоненты в единице объема определяется следующим образом:

$$W_j = \sum_{n=1}^{N_r} (b_{j,n} - a_{j,n}) (S_f^n - S_r^n). \quad (15)$$

Скорость образования W_j имеет размерность моль/(см³·с), поэтому массовая скорость образования j -й компоненты может быть рассчитана следующим образом:

$$\dot{w}_j = M_j W_j, \quad (16)$$

где M_j – молекулярный вес j -й компоненты.

Из (14)–(16) следует, что для вычисления массовой скорости образования j -й компоненты необходимо определить константы скоростей прямой и обратной реакций для каждой из N_r реакций, которые аппроксимируются обобщенной аррениусовской зависимостью

$$k_{f(r),n} = A_{f(r),n} T^{n_{f(r),n}} \exp\left(-\frac{E_{f(r),n}}{kT}\right), \quad (17)$$

где $A_{f(r),n}, n_{f(r),n}, E_{f(r),n}$ – аппроксимирующие коэффициенты для констант скоростей прямой (f) и обратной (r) химической реакции.

Константа равновесия для n -й химической реакции определяется следующим образом [5]

$$K_n = k_{f,n} / k_{r,n}. \quad (18)$$

Константа равновесия K_n и термодинамические свойства индивидуальных химических компонентов аппроксимируются следующим полиномом [2]

$$G_n = \varphi_{1,n} + \varphi_{2,n} \ln x + \varphi_{3,n} x^{-2} + \varphi_{4,n} x^{-1} + \varphi_{5,n} x + \varphi_{6,n} x^2 + \varphi_{7,n} x^3 \quad (19)$$

$$\left(\frac{dG}{dx}\right)_n = \varphi_{2,n} - 2\varphi_{3,n} x^{-2} - \varphi_{4,n} x^{-1} + \varphi_{5,n} x + 2\varphi_{6,n} x^2 + 3\varphi_{7,n} x^3 \quad (20)$$

$$\left(\frac{d^2G}{dx^2}\right)_n = -\varphi_{2,n} + 6\varphi_{3,n} x^{-2} + 2\varphi_{4,n} x^{-1} + 2\varphi_{6,n} x^2 + 6\varphi_{7,n} x^3, \quad (21)$$

$$h_n = xT \left(\frac{dG}{dT}\right)_n + \varphi_{8,n} \times 10^3, \text{ J/mol}, \quad (22)$$

$$c_{p,n} = 2x \left(\frac{dG}{dT}\right)_n + x^2 \left(\frac{d^2G}{dT^2}\right)_n, \text{ J/mol}\cdot\text{K}, \quad (23)$$

$$\ln K_n \left(\frac{p}{p_0}\right) = -TG_n + \varphi_{8,n} \times 10^3, \quad (24)$$

где $p_0 = 101325$ Па, $x = T \times 10^{-4}$. Константы аппроксимации в температурном диапазоне 298 ÷ 20000 К представлены в [5].

Коэффициенты вязкости и теплопроводности вычисляются по следующим аппроксимирующим соотношениям [6–8]

$$\mu = 1 / \sum_{i=1}^{N_c} \left(\frac{Y_i}{\mu_i}\right), \quad \lambda = \frac{1}{2} \left[\sum_{i=1}^{N_c} x_i \lambda_i + 1 / \sum_{i=1}^{N_c} \left(\frac{x_i}{\lambda_i}\right) \right]; \quad (25)$$

$$\mu_i = 2.67 \times 10^{-5} \frac{\sqrt{M_i T}}{\sigma_i^2 \Omega_i^{(2,2)*}}, \text{ г/см}\cdot\text{с}, \quad (26)$$

$$\lambda_i = 8330 \sqrt{\frac{T}{M_i}} \frac{1}{\sigma_i^2 \Omega_i^{(2,2)*}}, \text{ эрг/см}\cdot\text{К}, \quad (27)$$

где σ_i – эффективный диаметр столкновений, А; $\Omega_i^{(2,2)*} = f(T_i)$ – интеграл столкновений; $T_i = kT/\varepsilon_i$; ε_i/k – параметр, характеризующий глубину потенциальной энергии взаимодействия частиц i -го типа.

Эффективный коэффициент диффузии i -го компонента вычисляется по формуле Уилки [6]

$$D_i = \frac{1 - x_i}{\sum_{j \neq i}^{N_c} (x_j / D_{ij})}, \text{ см}^2/\text{с}, \quad (28)$$

$$D_{i,j} = 1.858 \times 10^{-3} \sqrt{\frac{T^3}{M_i M_j}} \frac{1}{p \sigma_{i,j}^2 \Omega_{i,j}^{(1,1)*}}. \quad (29)$$

Интегралы столкновений вычисляются по аппроксимациям, предложенным Н.А.Анфимовым [8]

$$\Omega_i^{(2,2)*} = 1.157 T_i^{-0.1472}, \quad (30)$$

$$\Omega_{i,j}^{(1,1)*} = 1.074 T_{i,j}^{-0.1604},$$

где функции, определяющие столкновения двух частиц определяются по так называемым комбинаторным формулам [9]:

$$T_{i,j} = \frac{kT}{\varepsilon_{i,j}}, \quad \varepsilon_{i,j} = \sqrt{\varepsilon_i \varepsilon_j}, \quad \sigma_{i,j} = \frac{1}{2}(\sigma_i + \sigma_j).$$

3. ЧИСЛЕННЫЙ МЕТОД

Система сформулированных уравнений интегрировалась до сходимости сеточных функций проекций скорости, температуры, давления, плотности и концентраций химических компонентов с точностью 10^{-4} . Погрешность расчетов оценивалась по относительной ошибке расчета каждой функции по всему полю течения. Уравнения газовой динамики (уравнение неразрывности и два уравнения Навье–Стокса) интегрировались с применением AUSM конечно-разностной схем первого и второго порядка точности без использования дополнительных численных ограничителей решения и искусственной вязкости [10]. Уравнение, выражающее закон сохранения энергии, интегрировалось с использованием неявной конечно-разностной схемы второго порядка точности по пространству и времени. Уравнения диффузии химических компонентов (уравнения сохранения массы химических компонентов) интегрировалась также с использованием неявной схемы второго порядка точности.

Расчет поля течения выполнялось с использованием многосеточной технологии на трех блоках конечно-разностной сетки "С"-типа. В каждом блоке сеток последовательно использовалось три типа конечно-разностных сеток: начальная, промежуточная и конечная сетки. Каждая последующая сетка рассчитывалась удвоением узлов предыдущей сетки. Примеры использования такой сеточной технологии показаны на рис.2.

Расчет теплообмена излучением проводился с использованием двух методов. Для вычисления объемной плотности спектральной и интегральной энергии теплового излучения внутри расчетной области применялось P_1 -приближение метода сферических гармоник. Дивергенция вектора плотности интегрального теплового потока излучения, рассчитанная таким образом, использовалась в правой части уравнения сохранения энергии (5). Плотность потока теплового излучения к поверхности космического аппарата рассчитывалась методом дискретных направлений (т.н. «Ray-tracing» метод) [11]. В работе [12] выполнен сравнительный анализ результатов расчетов по двум методам: методом дискретных ординат (МДО) и методом дискретных направлений. Указанное исследование позволило найти оптимальные параметры численного моделирования методом дискретных направлений.

Для того чтобы учесть реальные свойства газов при высоких температурах, разработанный вычислительный код был сопряжен с пятью локальными базами данных (в данном случае понятие локальной базы данных используется для того чтобы подчеркнуть, что они были сформированы из других более общих баз данных в виде опубликованных таблиц или электронных баз данных):

1) *База данных термодинамических свойств индивидуальных веществ.* Эта база данных включает таблицу аппроксимационных коэффициентов полного термодинамического потенциала ($\varphi_{i,n}$, $i = 1, 2, \dots, 8$) для расчета термодинамических свойств каждого n -го компонента (19)–(24). Эта локальная база данных основана на табличных данных [5], и использовалась для

расчета энтальпии, удельной теплоемкости при постоянном давлении и констант химического равновесия.

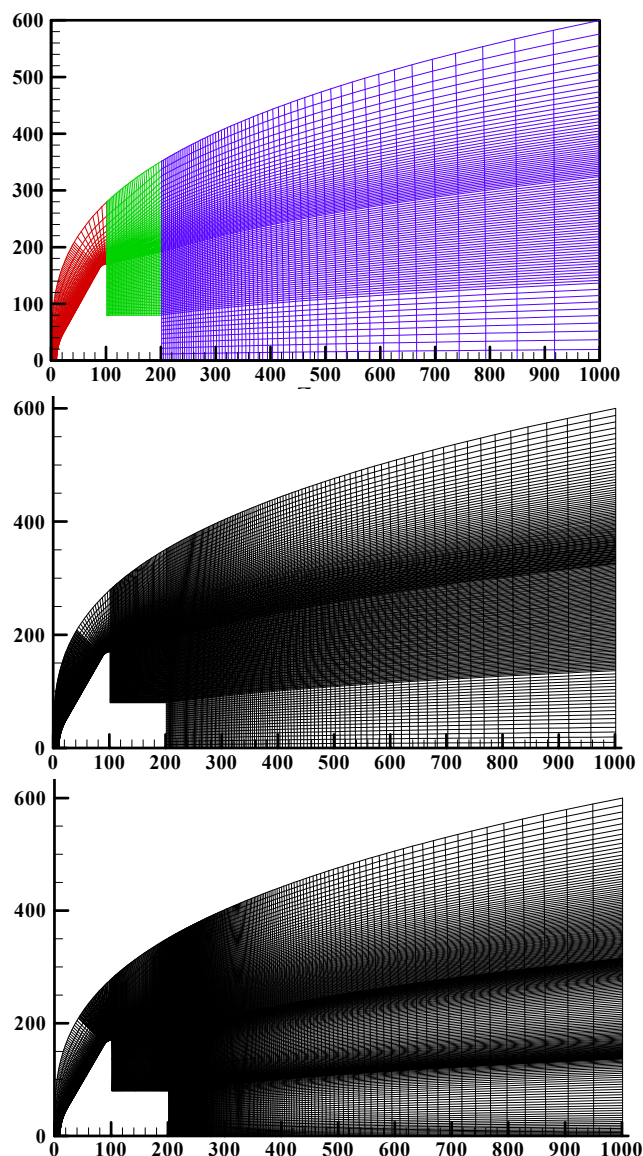


Рис.2 Последовательность расчетных сеток

2) *База данных химической кинетики.* Эта база данных содержит аппроксимирующие коэффициенты констант скоростей прямых и обратных химических реакций, заимствованных из различных литературных источников [13–15].

3) *База данных параметров потенциалов межмолекулярного взаимодействия.* Эта база данных используется для расчета свойств переноса многокомпонентных высокотемпературных смесей газов. В нее включены параметры потенциалов межмолекулярных взаимодействий ε_i/k и σ_i , которые заимствовались из работы [9].

4) *База данных физической кинетики.* Эта база данных содержит аппроксимационные коэффициенты для описания времен колебательной релаксации в форме, предложенной в работе [16], а также времен жизни возбужденных электронных состояний молекул.

5) *База данных спектральных оптических свойств.* Эта база данных формируется с использованием компьютерного кода ASTEROID [3], составные части которого, предназначенные для радиационно-газодинамических расчетов, включены в расчетный код NERAT.

В данной работе выполнено исследование влияния различных кинетических моделей газозафазных реакций на конвективный и радиационный нагрев поверхности космического аппарата при его входе в атмосферу Марса. Исследовались четыре кинетических модели:

1. Сокращенная кинетическая модель Ч.Парка [13], рекомендованная как стандартная для тестового случая ТС3.

2. Кинетическая модель Ч.Парка [13] с пересчитанными скоростями констант обратных химических реакций по константам равновесия [5].

3. Кинетическая модель Ч.Парка [13], с добавленными реакциями из работы [15] и пересчетом скоростей обратных химических реакций по константам равновесия [5].

4. Кинетическая модель МакКензи [14]. Заметим, что первые десять реакций в кинетической модели МакКензи были заменены первыми десятью реакциями кинетической модели Ч.Парка, поскольку соответствующие данные неадекватно отражают скорости прямых кинетических реакций.

Первая кинетическая модель использовалась для анализа поля течения в чистой двуокиси углерода, поэтому в расчет были приняты только следующие компоненты: C, O, C₂, O₂, CO, CO₂. Остальные кинетические модели применялись в расчетах смеси газов (97%CO₂ и 3% N₂), которая в большей степени приближена к атмосфере Марса. В учет принимались следующие компоненты: C, N, O, C₂, N₂, O₂, CN, CO, NO, CO₂.

Были рассмотрены две кинетических модели гетерогенных химических реакций на поверхности космического аппарата: некаталитическая и псевдо-каталитическая поверхность. В последнем случае концентрации химических компонентов на поверхности полагались равными концентрациям в набегающем потоке.

4. РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ

Результаты расчетов полей скоростей, температуры и массовых концентраций при входе модельного космического аппарата MSRO Европейского космического агентства в плотные слои атмосферы Марса в четырех точках траектории (см. Табл.1) показаны на рис. 3–6. В каждой серии первый рисунок показывает поле продольной скорости (*u*), второй – температуру поступательного движения частиц, а третий - массовую концентрацию CO₂. Расчеты выполнены с использованием первой кинетической модели (см. выше). Поверхность космического аппарата считалась некаталитической.

Представленные данные позволяют получить представление о структуре поля течения. Перед передним аэродинамическим тормозным щитом наблюдается относительно тонкий сжатый слой (толщиной ~ 4–6 см). Максимальная температура сжатом слое достигается сразу за фронтом ударной волны. На больших высотах (разреженный газ, большие скорости) указанная температура достигает ~ 10000 К. По мере спуска по траектории наибольшая температура падает до 5000 К (последняя из рассчитанных траекторных точек). Сзади за передним аэродинамическим тормозным щитом наблюдается отрывное течение с локальными зонами присоединения и многовихревой структурой потока.

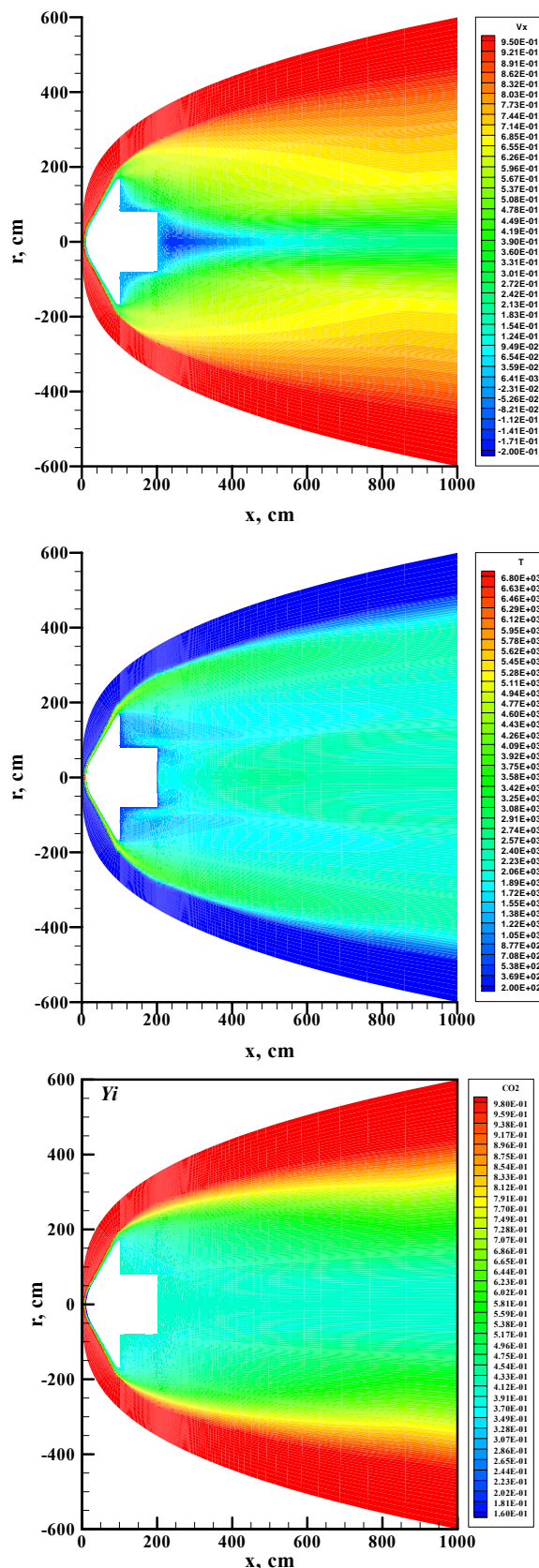


Рис. 3. Первая расчетная точка, некаталитическая поверхность

Высокотемпературный след за космическим аппаратом простирается до нескольких десятков метров. Температура двуокиси углерода в ближней области следа оказывается весьма высокой (~ 2000 К), поэтому столь высокотемпературный след является источни-

ком тепловой радиации, часть которой падает на заднюю поверхность КА.

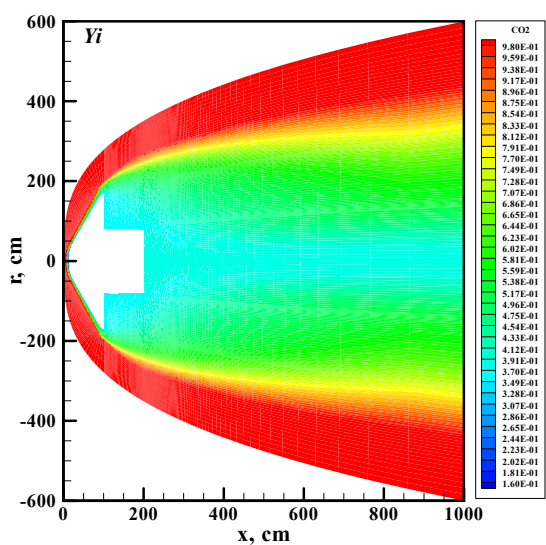
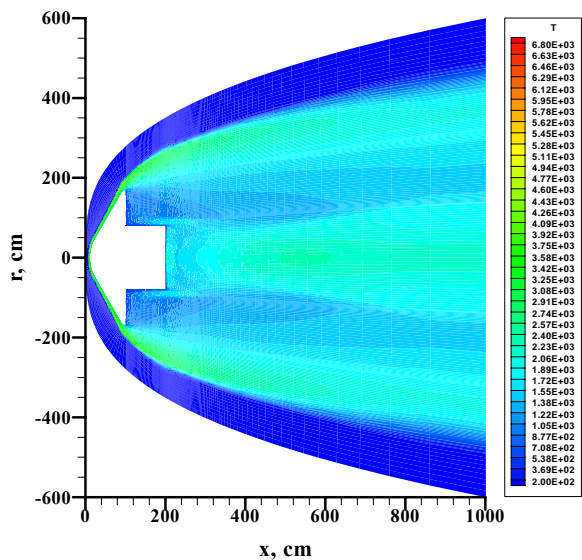
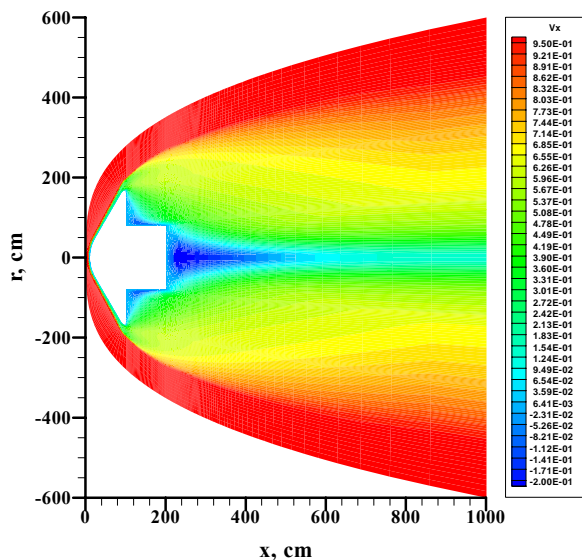


Рис. 4. Вторая расчетная точка, некаталитическая поверхность

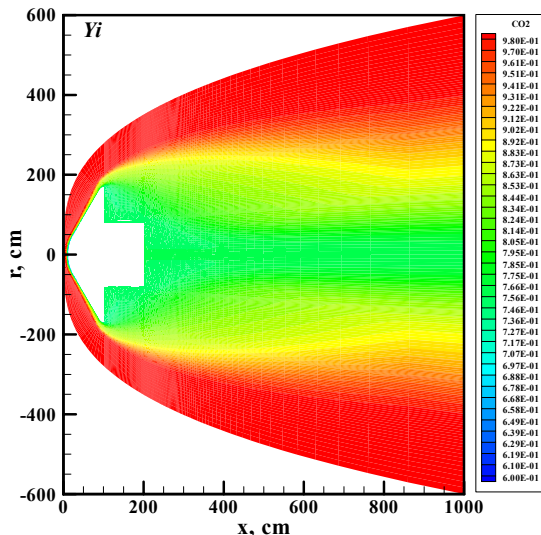
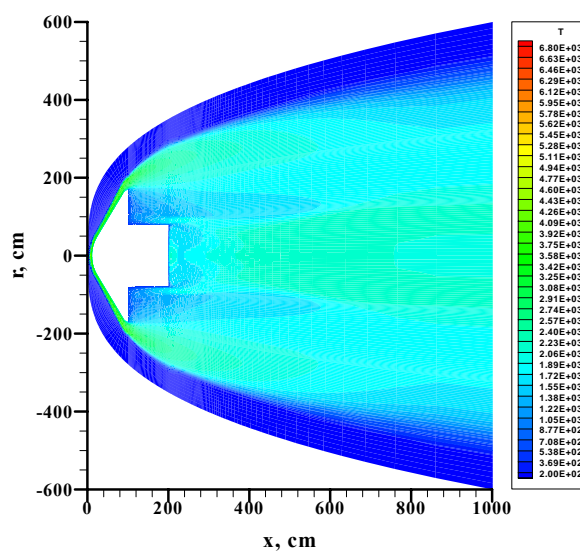
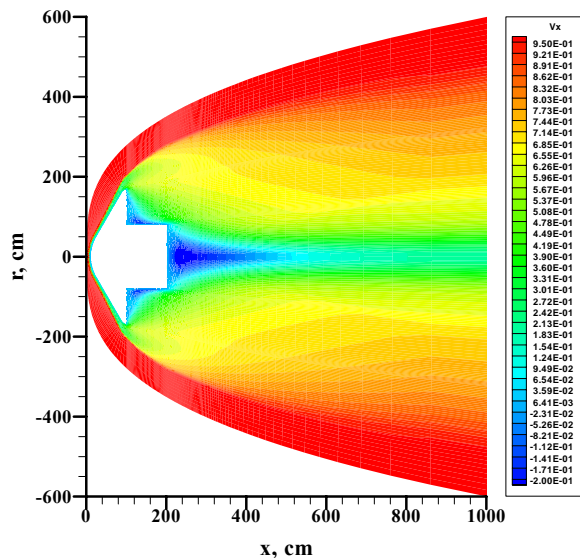


Рис. 5. Третья расчетная точка, некаталитическая поверхность

Распределение плотностей конвективных тепловых потоков по поверхности космического аппарата показано на рис. 7, а распределение плотностей интегральных радиационных потоков показано на рис. 8. Видно, что на подветренной поверхности космического

аппарата радиационный нагрев соизмерим с конвективным нагревом.

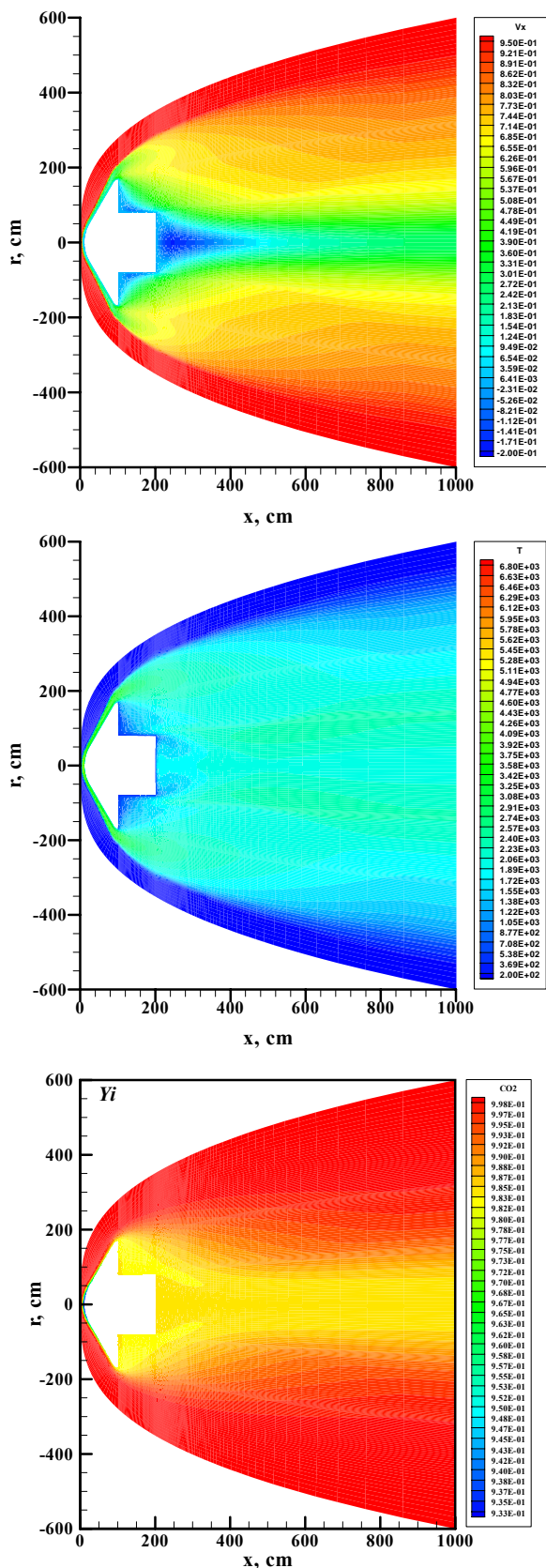


Рис. 6. Четвертая расчетная точка, некаталитическая поверхность

Отметим еще одну особенность распределения плотностей интегральных радиационных потоков по наветренной поверхности космического аппарата:

плотность радиационных тепловых потоков возрастает к периферии тормозного щита. Это связано с заметным утолщением сжатого слоя по мере отхода от передней критической линии тока.

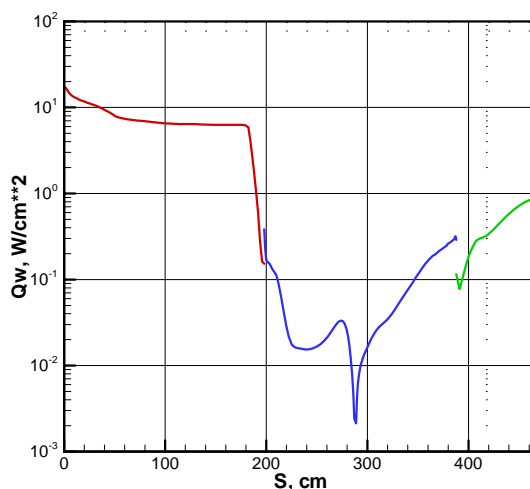


Рис. 7. Конвективные тепловые потоки к поверхности космического аппарата MSRO

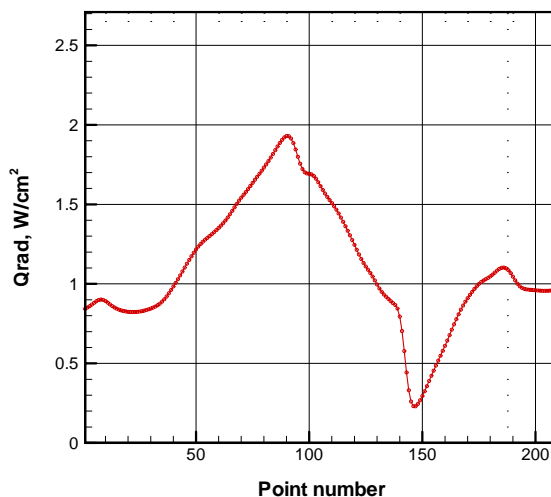


Рис. 8. Интегральные радиационные тепловые потоки к поверхности космического аппарата MSRO

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Дана формулировка многоуровневого подхода к решению задач компьютерной аэрофизики.

Представлен пример применения интегрированной модели к расчету аэрофизики космического аппарата.

Представлены результаты расчетов одного из тестовых примеров аэрофизики космических аппаратов Европейского космического агентства [17–28].

Работа выполнена при финансовой поддержке Программы фундаментальных исследований РАН (кинетические модели) и гранта РФФИ № 07-01-00133 (вычислительная аэротермодинамика).

СПИСОК ОБОЗНАЧЕНИЙ

- c_p – удельная теплоемкость при постоянном давлении, эрг/(г·К)
- p – давление, эрг/см³
- T – температура, К
- T_∞ – температура набегающего потока, К
- t – время, с

V_∞ – скорость набегающего потока, см/с
 u, v – составляющие скорости по осям x, y соответственно, см/с
 \mathbf{V} – вектор скорости, см/с
 x, y – текущие координаты, см
 λ – коэффициент теплопроводности, эрг/(см·К)
 μ – коэффициент динамической вязкости, г/(см·с)
 ρ – плотность, г/см³

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Алехин Д.С., Климов Д.М., Суржиков С.Т. Потенциалы межядерного взаимодействия двухатомных молекул в атмосфере планет. Теплофизика высоких температур. 2006. Т.44. №3. С.378-392.
2. Surzhikov S.T. "Computing System for Solving Radiative Gasdynamic Problems of Entry and Re-Entry Space Vehicles," *Proceedings of the 1st International Workshop on Radiation of High Temperature Gases in Atmospheric Entry; 8-10 October 2003, Lisbon, Portugal. ESA- 533, December 2003*, pp.111-117.
3. Котов Д.В., Суржиков С.Т. Моделирование химических и энергообменных реакций методом молекулярной динамики. М.: ИПМех РАН. Препринт №837. 27 с. Котов Д.В., Суржиков С.Т. Моделирование химических и энергообменных реакций методом молекулярной динамики с учетом квантовых уровней молекул. М.: ИПМех РАН. Препринт №838. 20 с.
4. Charbonnier J.-M., Omalý P. "TC3: Update of the axially symmetric testcase for high temperature gas radiation prediction in Mars atmosphere entry," *DCT/TV/PR NT-2004-564, 2004*.
5. Gurvich, L.V., Veitc, I.V., Medvedev, V.A. et al. Thermodynamic Properties of Individual Substances,» Hand Book, Vols.1-4, Moscow: «Nauka», 1978.
6. Берд П., Стюарт В., Лайтфут Е. Явления переноса. М.: Изд-во «Химия». 1974. 687 с.
7. Гардинер У. „мл. (ред.) Химия горения. М.: Мир. 1988. 461 с.
8. Гинзбург И.П. Трение и теплопередача при движении смеси газов. Л.: Изд-во ЛГУ. 1975. 277 с.
9. Svehla R.A. "Estimated Viscosities and Thermal Conductivities of Gases at High Temperatures". *NASA TR-R-132, 1962, 26 P.*
10. Edwards, J.R., Liou, M.-S. "Low-Diffusion Flux-Splitting Methods for Flows at All Speeds," *AIAA Journal*, Vol.36, No.9, pp.1610-1617, 1998.
11. Surzhikov S.T. "2D CFD/RGD Model of Space Vehicles," *Proceedings of the 1st International Workshop on Radiation of High Temperature Gases in Atmospheric Entry; 8-10 October 2003, Lisbon, Portugal. ESA- 533, December 2003*, pp.95-102.
12. Филиппский М.В., Суржиков С.Т. Расчет радиационных потоков к поверхности космического аппарата с помощью метода дискретных ординат. ИФЖ. 2007. Т.80. №1.
13. Park, C. , Howe, J.T., Jaffe R.L. and Candler, G.V. "Review of Chemical-Kinetic Problems of Future NASA Missions, II: Mars Entries," *J. of Thermophysics and Heat Transfer*, 1994, V.8, No.1, pp.9-23, 1994.
14. Marrone P.V., Treanor C.E. "Chemical Relaxation with Preferential Dissociation from Excited Vibrational Levels," *The Physics of Fluids*, Vol. 6, No. 9. pp. 1215-1221, 1963.
15. McKenzie, R.L. "An Estimate of the Chemical Kinetics Behind Normal Shock Wave in Mixtures of Carbon Dioxide and Nitrogen for Candidates Typical of Mars Entry", NASA TN D-3287, Jan. 1966
16. Ibragimova, L.B. "The Recommended Values of Gas-Phase Chemical Reactions Rate Constants in the Atomic System N-C-O. Part I and II", Preprint No. 29-97 and 30-97, Institute of Mechanics in Moscow State University, 1997.
17. Charbonnier J.M. "Analysis of the Results for TC3 Presented at the 1st International Workshop on Radiation of High Temperature Gas in Planetary Atmosphere Entry," *Proceedings of the 1st International Workshop on Radiation of High Temperature Gases in Atmospheric Entry; 8-10 October 2003, Lisbon, Portugal. ESA- 533, December 2003*, pp.145-159.
18. Dieudonne W., Spel M., Charbonnier J.M. "Modeling Sensitivity Analysis for TC3," *Proceedings of the 1st International Workshop on Radiation of High Temperature Gases in Atmospheric Entry; 8-10 October 2003, Lisbon, Portugal. ESA- 533, December 2003*, pp.161-170.
19. Rini P., Magin T., Degrez G., Fletcher D. "Numerical Simulation Of Non Equilibrium Hypersonic CO2 Flows For Mars Entry Applications," *Proceedings of the 1st International Workshop on Radiation of High Temperature Gases in Atmospheric Entry; 8-10 October 2003, Lisbon, Portugal. ESA- 533, December 2003*, pp.171-180.
20. Rouzaud O., Hylkema J., Verant J.-L., Tesse L. "Development of the PARAON Platform And ONERA Numerical Solvers For Gas Radiation," *Proceedings of the 1st International Workshop on Radiation of High Temperature Gases in Atmospheric Entry; 8-10 October 2003, Lisbon, Portugal. ESA- 533, December 2003*, pp.181-188.
21. Riviere P., Soufiani A., Perrin M.-Y. "Line By Line Statistical Narrow-Band Calculations Of Radiative Transfer In Some Atmosphere Entry Problems," *Proceedings of the 1st International Workshop on Radiation of High Temperature Gases in Atmospheric Entry; 8-10 October 2003, Lisbon, Portugal. ESA- 533, December 2003*, pp.189-196.
22. Surzhikov S.T. "TC3: Convective and Radiative Heating Of MSRO For Simplest Kinetic Models," *Proceedings of the International Workshop on Radiation of High Temperature Gases in Atmospheric Entry. Part II.30 Sept.-1 Oct., 2005. Porquerolles. France.(ESA SP-583, May 2005, pp.55-62)*
23. Rouzaud O., Soubre T., Tesse L., et al. "ONERA Activity On Testcase TC3," *Proceedings of the International Workshop on Radiation of High Temperature Gases in Atmospheric Entry. Part II.30 Sept.-1 Oct., 2005. Porquerolles. France.(ESA SP-583, May 2005, pp.75-80)*
24. Omalý P., Dieudonne W., Spel M. "Synthesis And Analysis For Test Case 3 Second International Workshop On Radiation Of High Temperature Gas In Planetary Atmosphere Entry," *Proceedings of the International Workshop on Radiation of High Temperature Gases in Atmospheric Entry. Part II.30 Sept.-1 Oct., 2005. Porquerolles. France.(ESA SP-583, May 2005, pp.81-89)*.
25. Babou Y., Ph. Riviere, Perrin M.-Y., Soufiani A. "Prediction of Radiative Flux Distribution Over The Front Shield Of A Vehicle Entering Martian Atmosphere. – Contribution To Test Case 3," *Proceedings of the Second International Workshop on Radiation of High Temperature Gases in Atmospheric Entry. 6-8 Sept., 2006. Rome. Italy.(ESA SP-629, November 2006, on CD)*.
26. Rouzaud O., Omalý P. ONERA-CNES Activities On TC3 Test Case III," *Proceedings of the Second International Workshop on Radiation of High Temperature Gases in Atmospheric Entry. 6-8 Sept., 2006. Rome. Italy.(ESA SP-629, November 2006, on CD)*.
27. Surzhikov S.T. "TC3: Convective and Radiative Heating Of MSRO, Predicted by Different Kinetic Models" *Proceedings of the Second International Workshop on Radiation of High Temperature Gases in Atmospheric Entry. 6-8 Sept., 2006. Rome. Italy.(ESA SP-629, November 2006, on CD)*.
28. Omalý P., Rouzaud O., Surzhikov S.T. Radiation Heat Transfer Models for Re-Entry Aerothermodynamics. 25th Int. Symp. On Rarefied Gas Dynamics. 2006. pp.909-914.