

ИНДЕКС УДК 533.6.011

ВЛИЯНИЕ РАЗЛИЧНЫХ МОДЕЛЕЙ ХИМИЧЕСКИХ КИНЕТИКИ НА СВЕРХЗВУКОВОЕ ОБТЕКАНИЕ ЗАТУПЛЕННЫХ ТЕЛ ПОТОКОМ УГЛЕКИСЛОГО ГАЗА

Шевелев Ю.Д., Сызранова Н.Г.

Институт автоматизации проектирования РАН, г. Москва

shevelev@icad.org.ru

Аннотация

Проведен численный анализ сверхзвукового неравновесного обтекания затупленных тел в потоке углекислого газа с использованием различных моделей химической кинетики. Приводятся результаты расчетов, иллюстрирующие влияние этих моделей на параметры течения и теплопередачу к поверхности космических аппаратов, движущихся в атмосфере Марса.

THE INFLUENCE OF CHEMICAL KINETICS MODELS ON SUPERSONIC FLOW OF BLUNT BODIES BY CARBON DIOXIDE

We investigate numerically non-equilibrium flow of blunt bodies by carbon dioxide using different models of chemical kinetics. We adduce the numerical results illustrating the influence of these models on the flow parameters and heat transfer to the surface of a vehicle moving in the Martian atmosphere.

Введение

Одним из наиболее важных вопросов в задаче сверхзвукового обтекания тел потоком углекислого газа является учет реальных физико-химических превращений, происходящих в ударном слое. Этому вопросу посвящено много расчетно-теоретических работ, в которых разные авторы используют модели химических реакций, существенно отличающиеся между собой константами скоростей реакций. В данной работе проводится сравнение основных моделей, применяемых для представления констант скоростей реакций в высокотемпературном потоке углекислого газа, и анализируется влияние этих моделей на характер обтекания и теплообмен затупленных тел. При этом газовая смесь рассматривается в однотемпературном приближении в предположении отсутствия заряженных частиц и излучения. Течение в ударном слое рассчитывается с использованием системы уравнений, содержащей все члены полной системы уравнений Навье-Стокса вплоть до членов порядка $O(Re^{-1/2})$.

В качестве примера рассматривается сверхзвуковое обтекание космических аппаратов на участке аэродинамического торможения в атмосфере Марса. Приводятся результаты расчетов, иллюстрирующие влияние химических процессов на течение в ударном слое и теплопередачу к поверхности с различными каталитическими свойствами.

1 Основные уравнения и метод расчета

Вывод гидродинамических уравнений для многокомпонентных газовых смесей, граничные условия подробно обсуждаются в ряде монографий, например, [1–3].

Система уравнений, описывающая течение многокомпонентной реагирующей смеси совершенных газов, включает уравнения баланса массы, импульса и энергии смеси, уравнения неразрывности (баланса массы) компонент и уравнение состояния. В диффе-

ренциальной форме в предположении отсутствия заряженных частиц и излучения уравнения баланса массы, импульса и энергии для N компонент газа имеют следующий вид:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla(\rho \mathbf{V}) = 0 \quad (1.1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho c_i) + \nabla(\rho \mathbf{V} c_i + \mathbf{J}_i) = \dot{w}_i \quad i=1, \dots, N \quad (1.2)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \mathbf{V}) + \nabla(\rho \mathbf{V} \mathbf{V} - \mathbf{T}) + \nabla p = 0 \quad (1.3)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho E) + \nabla[(\rho E + p)\mathbf{V} - \mathbf{T} \mathbf{V} + \mathbf{q}] = 0 \quad (1.4)$$

Уравнение состояние газовой смеси записывается в виде

$$p = \frac{\rho R T}{m}, m = \left(\sum_{i=1}^N \frac{c_i}{m_i} \right)^{-1} \quad (1.5)$$

В уравнениях (1.1) – (1.5) использованы следующие обозначения: $E=e+V^2/2$ – полная удельная энергия смеси; e – удельная внутренняя энергия; ρ – плотность смеси; $c_i=\rho_i/\rho$ – относительная массовая концентрация i -й компоненты смеси; \dot{w}_i – массовая скорость образования i -й компоненты в химических реакциях; \mathbf{V} – среднемассовая скорость смеси; $\mathbf{J}_i=\rho_i \mathbf{V}_i$ – вектор плотности диффузионного потока массы i -й компоненты; \mathbf{V}_i – скорость диффузии i -й компоненты; R – универсальная газовая постоянная; m, m_i – молярные массы смеси и i -й компоненты.

Тензор вязких напряжений \mathbf{T} определяется выражением:

$$\mathbf{T} = 2\mu \mathbf{S} + \zeta \nabla \mathbf{V} \mathbf{I} \quad (1.6)$$

Здесь \mathbf{S} – тензор скоростей деформаций, \mathbf{I} – тензорная единица, μ – коэффициент динамической вязкости, ζ – коэффициент объемной вязкости. В более строгой постановке [4] тензор вязких напряжений включает дополнительный член $p_{rel} \mathbf{I}$, где p_{rel} – релаксационное давление, характеризующее влияние химических реакций на диагональные элементы тензора вязких напряжений. Оценки [4] показывают, что во многих случаях величина p_{rel} мала по сравнению с p , поэтому в настоящей работе этой поправкой пренебрегается.

Коэффициент объемной вязкости вычисляется согласно теории [4]. Для определения динамической вязкости компонент используются корреляции Блотнера [5], а для вязкости смеси μ – закон Армалли-Сатона [6]. Коэффициент теплопроводности λ для газовой смеси при этом находится из условия постоянства числа Прандтля во всей расчетной области: $P_r = \mu c_p / \lambda = 0.66$. При определении массовой диффузии полагается, что во всем поле течения число Льюиса $Le = \rho D c_p / \lambda = 1$, где D – эффективный коэффициент диффузии компонент.

Вектор теплового потока в многокомпонентной смеси реагирующих газов записывается следующим образом:

$$\mathbf{q} = -\lambda \nabla T + \sum_{i=1}^N h_i \mathbf{J}_i \quad (1.7)$$

где T – температура смеси, h_i – удельные энтальпии компонент с учетом энергии образования. Формула (1.7) написана без учета диффузионного термоэффекта, вклад которого в перенос энергии при сверхзвуковом обтекании тел, как правило, незначителен.

2 Модели химической кинетики

При исследовании физико-химических реакций газ в ударном слое рассматривается как пятикомпонентная смесь ($\text{CO}_2 - 1$, $\text{CO} - 2$, $\text{O}_2 - 3$, $\text{C} - 4$, $\text{O} - 5$), в которой происходят следующие реакции:

1 тип – $\text{CO}_2 + \text{M} \leftrightarrow \text{CO} + \text{O} + \text{M}$

- 1.1 $\text{CO}_2 + \text{CO}_2 \leftrightarrow \text{CO} + \text{O} + \text{CO}_2$
 1.2 $\text{CO}_2 + \text{CO} \leftrightarrow \text{CO} + \text{O} + \text{CO}$
 1.3 $\text{CO}_2 + \text{O}_2 \leftrightarrow \text{CO} + \text{O} + \text{O}_2$
 1.4 $\text{CO}_2 + \text{C} \leftrightarrow \text{CO} + \text{O} + \text{C}$
 1.5 $\text{CO}_2 + \text{O} \leftrightarrow \text{CO} + \text{O} + \text{O}$

2 тип – $\text{CO} + \text{M} \leftrightarrow \text{C} + \text{O} + \text{M}$

- 2.1 $\text{CO} + \text{CO}_2 \leftrightarrow \text{C} + \text{O} + \text{CO}_2$
 2.2 $\text{CO} + \text{CO} \leftrightarrow \text{C} + \text{O} + \text{CO}$
 2.3 $\text{CO} + \text{O}_2 \leftrightarrow \text{C} + \text{O} + \text{O}_2$
 2.4 $\text{CO} + \text{C} \leftrightarrow \text{C} + \text{O} + \text{C}$
 2.5 $\text{CO} + \text{O} \leftrightarrow \text{C} + \text{O} + \text{O}$

3 тип – $\text{O}_2 + \text{M} \leftrightarrow \text{O} + \text{O} + \text{M}$

- 3.1 $\text{O}_2 + \text{CO}_2 \leftrightarrow \text{O} + \text{O} + \text{CO}_2$
 3.2 $\text{O}_2 + \text{CO} \leftrightarrow \text{O} + \text{O} + \text{CO}$
 3.3 $\text{O}_2 + \text{O}_2 \leftrightarrow \text{O} + \text{O} + \text{O}_2$
 3.4 $\text{O}_2 + \text{C} \leftrightarrow \text{O} + \text{O} + \text{C}$
 3.5 $\text{O}_2 + \text{O} \leftrightarrow \text{O} + \text{O} + \text{O}$

4 тип – $\text{CO}_2 + \text{O} \leftrightarrow \text{CO} + \text{O}_2$

- 5 тип – $\text{CO} + \text{CO} \leftrightarrow \text{CO}_2 + \text{C}$
 6 тип – $\text{CO} + \text{O} \leftrightarrow \text{O}_2 + \text{C}$

Здесь представлены 18 реакций, из которых реакции 1–3-го типа являются реакциями диссоциации – рекомбинации, а 4–6-го типа – реакциями обмена.

Массовая скорость образования компонент смеси \dot{w}_i определяется выражением

$$\dot{w}_i = m_i \sum_{(s)} (v_{is}'' - v_{is}') \left[k_{fs} \prod_{j=1}^5 \left(\frac{\rho}{m_j} c_j \right)^{v_{js}'} - k_{rs} \prod_{j=1}^5 \left(\frac{\rho}{m_j} c_j \right)^{v_{js}''} \right]$$

где v_i'' , v_i' – стехиометрические коэффициенты реагентов и продуктов реакций; k_f , k_r – коэффициенты скоростей прямой и обратной реакций. Суммирование проводится по всем s реакциям, в которых участвует i -я компонента смеси.

В соответствии с представленной системой реакций выражения для источников членов уравнений неразрывности для компонент будут иметь вид:

$$\dot{w}_1 = m_1(-R_1 - R_4 + R_5) \quad \text{– для молекул } \text{CO}_2$$

$$\dot{w}_2 = m_2(-R_2 + R_1 + R_4 - R_5 - R_6) \quad \text{– для молекул } \text{CO}$$

$$\dot{w}_3 = m_3(-R_3 + R_4 + R_6) \quad \text{– для молекул } \text{O}_2$$

Выражения $R_1 - R_6$ – характеризуют скорости реакций 1 – 6 типов:

$$R_1 = \rho^2 \left(k_{f1} \frac{c_1}{m_1} - \rho k_{r1} \frac{c_2}{m_2} \frac{c_5}{m_5} \right), \quad k_{f1} = \sum_{i=1}^5 k_{f1,i} \frac{c_i}{m_i}, \quad k_{r1} = \sum_{i=1}^5 k_{r1,i} \frac{c_i}{m_i}$$

$$R_2 = \rho^2 \left(k_{f2} \frac{c_2}{m_2} - \rho k_{r2} \frac{c_4}{m_4} \frac{c_5}{m_5} \right), \quad k_{f2} = \sum_{i=1}^5 k_{f2,i} \frac{c_i}{m_i}, \quad k_{r2} = \sum_{i=1}^5 k_{r2,i} \frac{c_i}{m_i}$$

$$R_3 = \rho^2 \left[k_{f3} \frac{c_3}{m_3} - \rho k_{r3} \left(\frac{c_5}{m_5} \right)^2 \right], \quad k_{f3} = \sum_{i=1}^5 k_{f3,i} \frac{c_i}{m_i}, \quad k_{r3} = \sum_{i=1}^5 k_{r3,i} \frac{c_i}{m_i}$$

$$R_4 = \rho^2 \left(k_{f4} \frac{c_1}{m_1} \frac{c_5}{m_5} - k_{r4} \frac{c_2}{m_2} \frac{c_3}{m_3} \right), \quad R_5 = \rho^2 \left[k_{f5} \left(\frac{c_2}{m_2} \right)^2 - k_{r5} \frac{c_1}{m_1} \frac{c_4}{m_4} \right]$$

$$R_6 = \rho^2 \left(k_{f6} \frac{c_2 c_5}{m_2 m_5} - k_{r6} \frac{c_3 c_4}{m_3 m_4} \right)$$

Здесь $k_{fi,j}$ и $k_{ri,j}$ – константы прямых и обратных реакций соответственно. Числовые индексы обозначают тип (i) и номер реакции (j).

В данной работе рассматриваются три наиболее часто используемые модели для определения констант скоростей реакций в реагирующей смеси углекислого газа. При описании среды с помощью первой модели – модели Парка [7] – для этих констант в случае прямых и обратных реакций используются эмпирические формулы

$$k_f(T) = A_f T^{b_f} \exp(-E_f/T), \quad k_r(T) = A_r T^{b_r} \exp(-E_r/T)$$

Значения параметров, входящих в эти формулы, представлены в таблице 1, при этом размерность для констант скоростей реакций – $\text{м}^3 \text{моль}^{-1} \text{с}^{-1}$ или $\text{м}^6 \text{моль}^{-2} \text{с}^{-1}$ (для k_{r1} , k_{r2} , k_{r3}).

Таблица 1.

Параметры для констант скоростей реакций в модели [7].

Номер реакции	A_f	b_f	E_f	A_r	b_r	E_r
1.1	6.9×10^{15}	-1.5	63275	1.14×10^5	0.75	535
1.2	6.9×10^{15}	-1.5	63275	1.14×10^5	-0.75	535
1.3	6.9×10^{15}	-1.5	63275	1.14×10^5	-0.75	535
1.4	1.38×10^{16}	-1.5	63275	2.28×10^5	-0.75	535
1.5	1.38×10^{16}	-1.5	63275	2.28×10^5	-0.75	535
2.1	2.3×10^{14}	-1	129000	5.13×10^6	-1	0
2.2	2.3×10^{14}	-1	129000	5.13×10^6	-1	0
2.3	2.3×10^{14}	-1	129000	5.13×10^6	-1	0
2.4	3.4×10^{14}	-1	129000	7.59×10^6	-1	0
2.5	3.4×10^{14}	-1	129000	7.59×10^6	-1	0
3.1	2.0×10^{15}	-1.5	59500	2.0×10^6	-1	0
3.2	2.0×10^{15}	-1.5	59500	2.0×10^6	-1	0
3.3	2.0×10^{15}	-1.5	59500	2.0×10^6	-1	0
3.4	1.0×10^{16}	-1.5	59500	1.0×10^7	-1	0
3.5	1.0×10^{16}	-1.5	59500	1.0×10^7	-1	0
4	2.1×10^7	0	27800	4.11×10^4	0.5	23800
5	2.33×10^3	0.5	65710	4.6×10^6	-0.25	0
6	3.9×10^7	-0.18	69200	4.6×10^6	-0.43	0

Во второй модели применяются выражения, предложенные в работе Кензи и Арнольда [8]. Они представлены в таблице 2.

Таблица 2.
Константы скоростей реакций для модели [8].

Номер реакции	Константа скорости прямой k_f (см ³ /моль с) или обратной реакции k_r (см ⁶ /моль ² с)
1.1	$k_f = 7.2 \times 10^{11} T^{1/2} \exp(-36850/T)$
1.2	$k_f = 1.2 \times 10^{11} T^{1/2} \exp(-36850/T)$
1.3	$k_f = 1.2 \times 10^{11} T^{1/2} \exp(-36850/T)$
1.4	$k_f = 1.2 \times 10^{11} T^{1/2} \exp(-36850/T)$
1.5	$k_f = 1.2 \times 10^{11} T^{1/2} \exp(-36850/T)$
2.1	$k_f = 3.5 \times 10^{12} T^{1/2} \exp(-92800/T)$
2.2	$k_r = 2.5 \times 10^{28} T^{-7/2}$
2.3	$k_f = 3.5 \times 10^{12} T^{1/2} \exp(-92800/T)$
2.4	$k_r = 2.5 \times 10^{28} T^{-7/2}$
2.5	$k_r = 2.5 \times 10^{28} T^{-7/2}$
3.1	$k_f = 0.77 \times 10^{17} T^{-1/2} \exp(-59400/T)$
3.2	$k_f = 0.36 \times 10^{17} T^{-1/2} \exp(-59400/T)$
3.3	$k_f = 1.1 \times 10^{25} T^{5/2} \exp(-59400/T)$
3.4	$k_f = 0.92 \times 10^{20} T^1 \exp(-59400/T)$
3.5	$k_f = 0.92 \times 10^{20} T^1 \exp(-59400/T)$
4	$k_f = 0.61 \times 10^{12} \exp(-17600/T)$

Константы скоростей прямой и обратной реакций связаны друг с другом через константу равновесия k_p . Константы равновесия независимых реакций k_{pi} (атм) вычисляются с помощью аппроксимаций В.В. Михайлова [9]:

$$k_{p1} = T^{-1/2} \exp(22.44 - 65201/T)$$

$$k_{p2} = T^{1/2} \exp(12.856 - 131374/T)$$

$$k_{p3} = \exp(16.283 - 62006/T)$$

В третьей модели, разработанной в НИИ механики МГУ [10–12], константы скоростей для реакций диссоциации 1–3 типа определяются следующим образом

$$k_f(T) = A_f T^{b_f} \exp(-E_f/T) [1 - \exp(-\theta/T)]$$

а для реакций 4–6 типа –

$$k_f(T) = A_f T^{b_f} \exp(-E_f/T)$$

Значения соответствующих параметров для констант 1–6 типа приводятся в таблице 3.

Таблица 3.
Параметры для констант скоростей реакций в модели [10–12].

Номер реакции	A_f	b_f	E_f	θ
1.1	2.5×10^{25}	-2.4	65930	3380
1.2	7.6×10^{24}	-2.4	65930	3380
1.3	7.6×10^{24}	-2.4	65930	3380
1.4	3.8×10^{25}	-2.4	65930	3380
1.5	3.8×10^{25}	-2.4	65930	3380
2.1	2.1×10^{21}	-1.15	129000	3080
2.2	6.2×10^{20}	-1.15	129000	3080
2.3	4.6×10^{20}	-1.15	129000	3080
2.4	3.1×10^{21}	-1.15	129000	3080
2.5	4.6×10^{21}	-1.15	129000	3080
3.1	6.0×10^{15}	0	59380	2238
3.2	2.0×10^{15}	0.3	59380	2238
3.3	2.0×10^{15}	0.3	59380	2238
3.4	7.1×10^{15}	0.3	59380	2238
3.5	7.1×10^{15}	0.3	59380	2238
4	1.6×10^{14}	0	32360	
5	2.3×10^9	0.5	65710	
6	7.7×10^{14}	0	73720	

Проводилось сравнение констант скоростей реакций, рассчитанных при различных температурах с помощью представленных моделей химической кинетики. Некоторые результаты сравнения приводятся на рис.1–3. Видно, что соответствующие константы скоростей реакций диссоциации в рассматриваемом диапазоне температур могут отличаться до двух порядков при вариации моделей. Для реакции диссоциации 1-го типа (рис.1–2) лучше всего согласуются между собой значения констант, полученные с помощью моделей Кензи-Арнольда [8] и НИИ механики МГУ [10–12], а модель Парка [7] дает существенно более высокие значения этих величин, чем две другие модели.

Для некоторых реакций диссоциации 3 – типа (рис.3) большая скорость реакций диссоциации получается при использовании модели [10–12], меньшая – при использовании модели [8]. Аналогичные тенденции наблюдаются и для скоростей реакций рекомбинации.

Несмотря на расхождение скоростей реакций диссоциации и рекомбинации, соответствующие величины констант химического равновесия достаточно хорошо совпадают в рассматриваемом диапазоне температур для всех трех моделей.

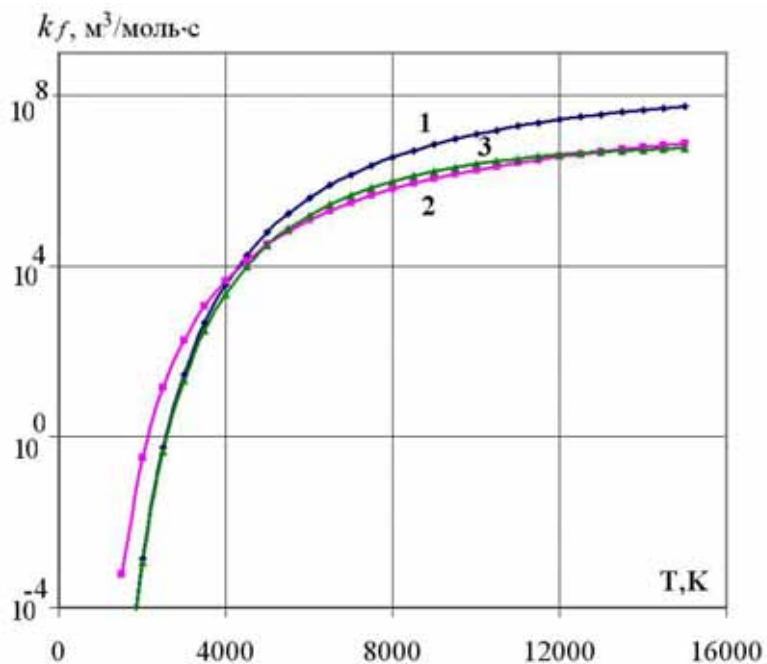


Рис. 1. Константы скоростей реакции диссоциации $\text{CO}_2 + \text{CO}_2 = \text{CO} + \text{O} + \text{CO}_2$ в зависимости от температуры. 1 – модель [7], 2 – модель [8], 3 – модель [10–12]

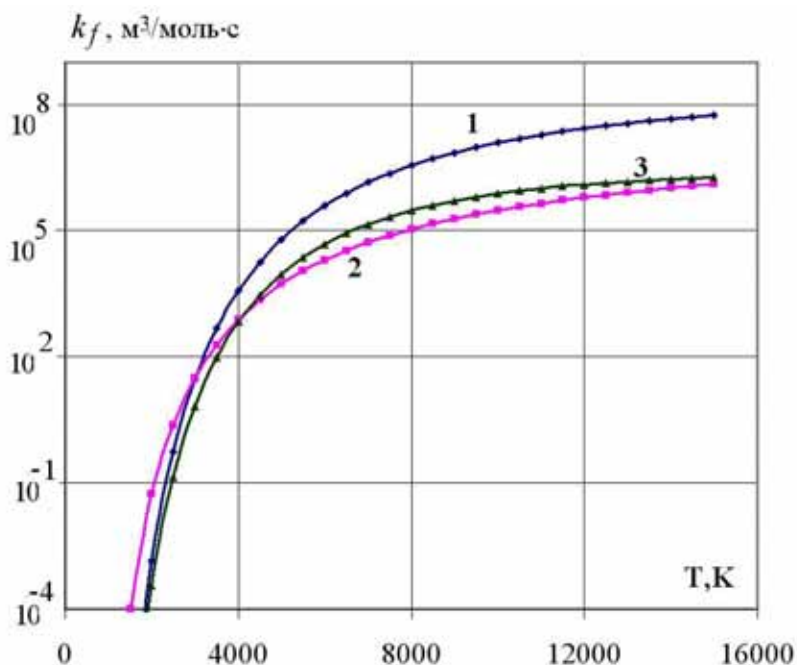


Рис.2. Константы скоростей реакций диссоциации $\text{CO}_2 + \text{M} = \text{CO} + \text{O} + \text{M}$ ($\text{M} - \text{CO}, \text{O}_2$) в зависимости от температуры. 1 – модель [7], 2 – модель [8], 3 – модель [10–12]

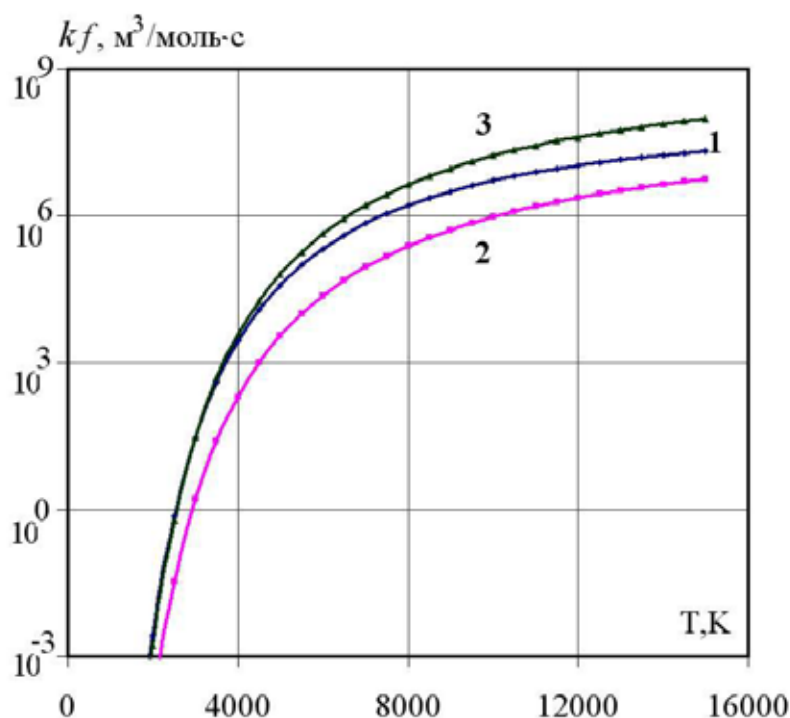


Рис.3. Константы скоростей реакций диссоциации $\text{O}_2 + \text{M} = \text{O} + \text{O} + \text{M}$ ($\text{M} - \text{CO}, \text{O}_2$) в зависимости от температуры. 1 – модель [7], 2 – модель [8], 3 – модель [10–12]

3 Результаты численных расчетов

Течение в ударном слое рассчитывается в приближении вязкого ударного слоя, то есть в представленной системе уравнений Навье-Стокса отбрасываются члены, порядка меньшего, чем $O(1/\text{Re}^{0.5})$. Используется ортогональная система координат (s, n) , в которой координата s отсчитывается от передней критической точки вдоль контура обтекаемой поверхности, а координата n – по нормали к ней. На ударной волне используются обобщенные граничные условия Ренкина-Гюгонио [13], полученные путем интегрирования одномерных уравнений Навье-Стокса поперек ударной волны без учета продольных градиентов вдоль волны. Численное решение системы уравнений в рассматриваемом приближении находится методом установления с помощью неявной конечно-разностной схемы постоянного направления [3].

В работе проведено численное исследование неравновесного обтекания тел, моделирующего форму Марсианских аппаратов MARS EXPRESS и MRSRO, которые представляют собой 120-градусный сферо-конус с радиусом затупления 0.38 м и 1 м соответственно. Полагается, что невозмущенная атмосфера Марса состоит из 100% CO_2 . Рассмотренные условия полета соответствуют высотам 30 – 60 км и скоростям – 3.5 – 6.0 км/с. Поверхность аппарата считается либо идеально каталитической (максимальная скорость гетерогенной рекомбинации компонент диссоциированного углекислого газа), либо некаталитической (скорость гетерогенной рекомбинации компонент равна нулю).

Для двух точек траектории аппарата MARS EXPRESS (высоты полета $H=43$ км и $H=32$ км) на рис.4 – 5 представлены распределения температуры, массовой концентрации компоненты CO_2 , рассчитанные с помощью трех рассматриваемых моделей. Данные приводятся поперек ударного слоя вдоль критической линии. Поверхность аппарата полагается непроницаемой, идеально-каталитической с заданной постоянной температурой.

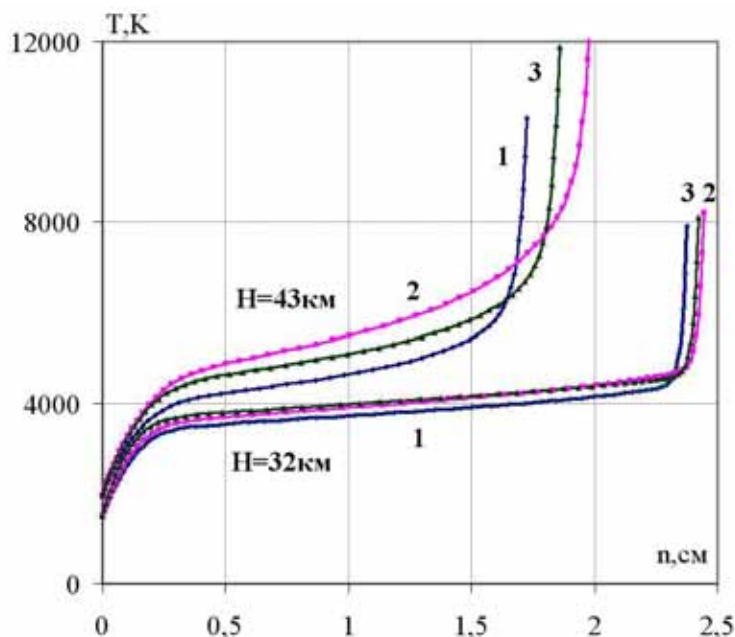


Рис.4. Распределение температуры вдоль критической линии для двух точек траектории аппарата MARS EXPRESS. 1 – модель [7], 2 – модель [8], 3 – модель [10–12]

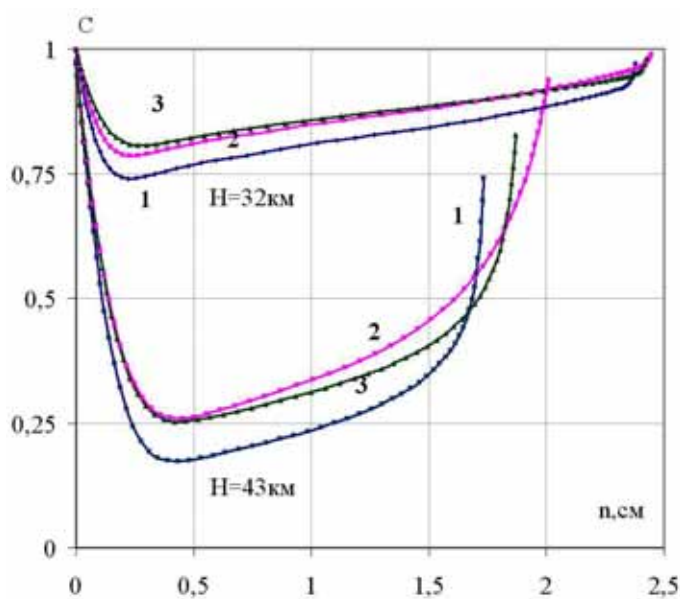


Рис.5. Распределение массовой концентрации CO_2 вдоль критической линии для двух точек траектории аппарата MARS EXPRESS. 1 – модель [7], 2 – модель [8], 3 – модель [10–12]

Из рис.4 – 5 видно, что для высоты полета $H=43\text{км}$ ($V_\infty=5292\text{м/с}$, $\rho_\infty=2.5\times 10^{-4}\text{кг/м}^3$) наблюдается значительное расхождение величин температуры, массовой концентрации углекислого газа и отхода ударной волны от поверхности, рассчитанных с помощью разных моделей. Для $H=32\text{км}$ ($V_\infty=3433\text{м/с}$, $\rho_\infty=8.45\times 10^{-4}\text{кг/м}^3$) соответствующие величины практически совпадают. Этот факт объясняется тем, что на высоте $H=43\text{км}$ режим течения в ударном слое далек от химически равновесного. Параметры течения в этом случае зависят от констант скоростей прямых и обратных реакций, а они для разных моделей при этих условиях обтекания отличаются существенно. Поэтому в случае использования,

например, модели Парка реакция диссоциации CO_2 в возмущенной области идет с гораздо большей скоростью, чем при использовании других двух моделей, что сказывается на распределениях температуры и концентраций компонент в ударном слое, а также на величине отхода ударной волны от поверхности тела.

Со снижением высоты полета, то есть с увеличением плотности набегающего потока, течение в ударном слое приближается к равновесному. В этом случае параметры течения и состав газовой смеси определяются условиями химического равновесия, то есть зависят от констант равновесия реакций, которые согласуются между собой для всех используемых моделей. В связи с этим соответствующие профили температуры и концентраций, а также величина отхода ударной волны от поверхности тела, полученные для разных моделей при условиях обтекания на высоте $H=32\text{км}$, достаточно хорошо совпадают.

Распределение теплового потока вдоль лобовой поверхности зонда MARS EXPRESS (идеально каталитическая поверхность) с использованием трех моделей химической кинетики приводится на рис.6. Несмотря на различные скорости реакций в ударном слое, наблюдается хорошее совпадение результатов расчета теплопередачи к поверхности для рассматриваемых моделей. Действительно, в случае идеально каталитической поверхности последняя играет роль катализатора, то есть способствует реакциям рекомбинации, в результате которых химическая энергия, затраченная на диссоциацию, выделяется и передается поверхности и этот процесс определяется главным образом условиями равновесия реакций.

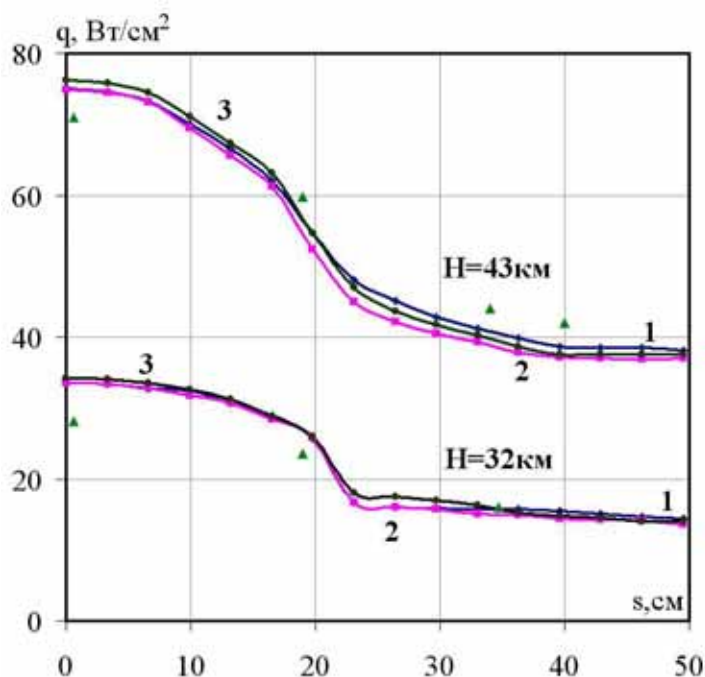


Рис.6. Тепловой поток к лобовой поверхности аппарата MARS EXPRESS.
1 – модель [7], 2 – модель [8], 3 – модель [10–12], ▲ – данные [14].

На рис. 6 для сравнения (треугольным маркером) представлены также данные работы [14], в которой уравнения Навье-Стокса решались методом конечного объема, и использовалась модель химических реакций [10–12]. Для некоторых условий обтекания наблюдается расхождение (до 20%) рассчитанных значений тепловых потоков с соответствующими данными [14], что может объясняться разными граничными условиями: в [14] – на поверхности ставится условие сохранения баланса тепла, а в нашем случае – условие постоянства температуры поверхности.

Влияние химических моделей на параметры течения и теплообмен определено в широком диапазоне параметров обтекания марсианского аппарата MRSRO в случаях идеально каталитической и некаталитической поверхности объекта. На рис.7–8 представлены массовые концентрации компонент CO_2 и CO вдоль критической линии для разных моделей и типов поверхностей. Данные приводятся для условий обтекания $V_\infty=5687\text{м/с}$, $\rho_\infty=3.14\times 10^{-5}\text{кг/м}^3$, что соответствует примерно высоте полета $H\approx 60\text{км}$; температура поверхности полагается равной $T_w=1500\text{К}$.

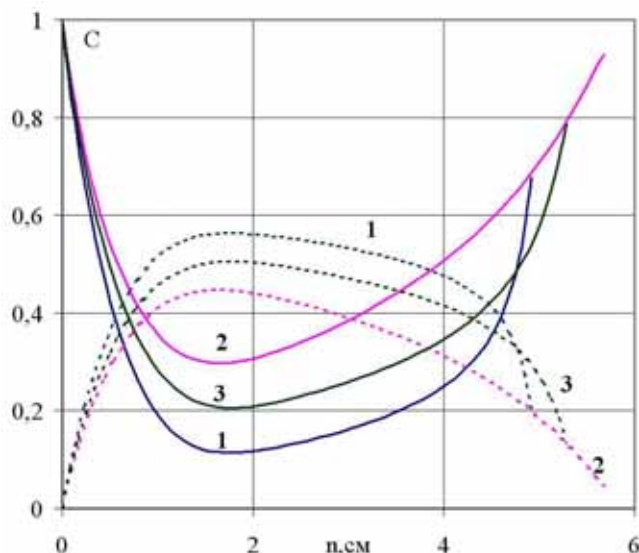


Рис.7. Распределение массовых концентраций CO_2 (—) и CO (- - -) вдоль критической линии для аппарата MRSRO, идеально каталитическая поверхность, 1 – модель [7], 2 – модель [8], 3 – модель [10–12]

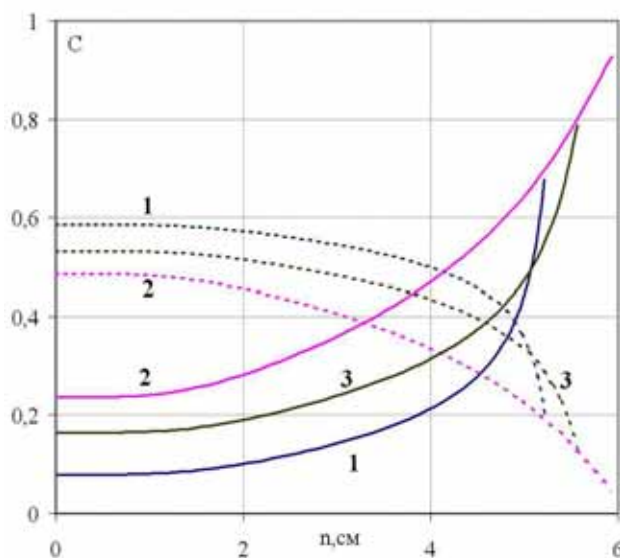


Рис.8. Распределение массовых концентраций CO_2 (—) и CO (- - -) вдоль критической линии для аппарата MRSRO, некаталитическая поверхность, 1 – модель [7], 2 – модель [8], 3 – модель [10–12]

Сравнивая рис.7 и рис.8, можно заметить, что влияние каталитических свойств поверхности сказывается на профилях концентраций в основном вблизи стенки.

На рис.7– 8 наблюдается значительное расхождение в распределениях концентраций компонент, рассчитанных с помощью разных моделей. Видно, что в большей степени диссоциирует CO_2 в ударном слое при использовании модели Парка [7], в меньшей – при использовании модели Кензи-Арнольда [8], модель НИИ механики МГУ [10–12] дает промежуточный результат.

На рис.9 приводится тепловой поток к идеально каталитической и некаталитической поверхности аппарата для условий обтекания $V_\infty=5687\text{м/с}$, $\rho_\infty=3.14\times 10^{-5}\text{кг/м}^3$ и $T_w=1500\text{К}$.

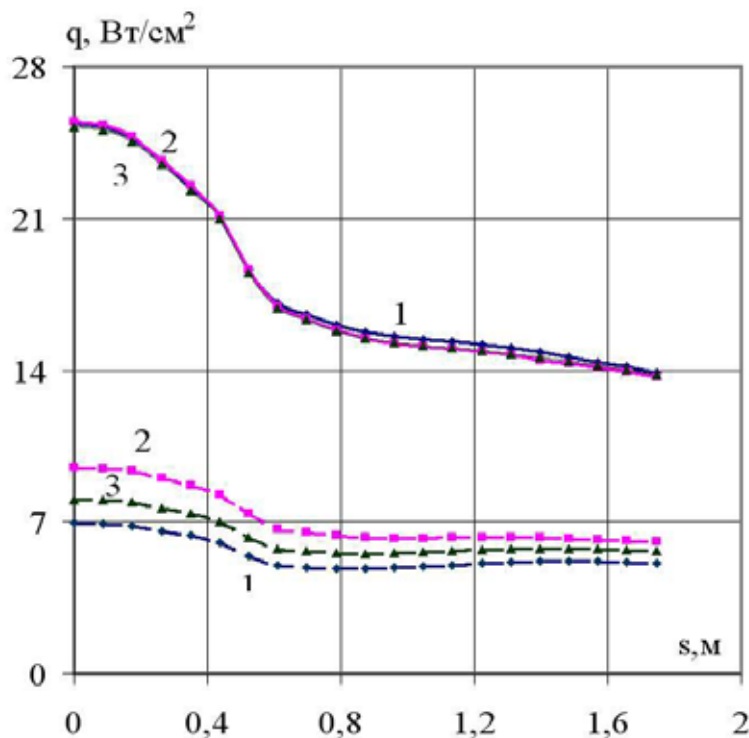


Рис.9. Тепловой поток к поверхности аппарата MRSRO.

— идеально каталитическая поверхность, - - - некаталитическая поверхность,
 $V_\infty=5687\text{м/с}$, $\rho_\infty=3.14\times 10^{-5}\text{кг/м}^3$
 1 – модель [7], 2 – модель [8], 3 – модель [10–12].

Как уже отмечалось, тепловой поток к идеально каталитической поверхности не зависит от используемой модели химических реакций, что демонстрируют верхние кривые рис.9. Для некаталитической стенки теплопередача к поверхности при использовании модели Кензи и Арнольда [8] примерно на 30% превышает теплопередачу, рассчитанную с учетом модели Парка [7]. Это объясняется тем, что у некаталитической поверхности аппарата не происходит рекомбинации компонент, и в этом случае реакции идут только в одном направлении, причем с отличающейся скоростью для разных моделей. В результате для рассматриваемых моделей получается разный химический состав газовой смеси вблизи поверхности (рис.8) и наблюдаются расхождения в величине теплового потока. Кроме того, из-за отсутствия реакций рекомбинаций на поверхности дополнительного нагрева тела не происходит, поэтому величина потока для некаталитической стенки в 3 – 3.5 раза меньше соответствующих значений для идеально каталитической поверхности (рис.9).

На рис.10 приводится тепловой поток к некаталитической поверхности аппарата, рассчитанный для разных моделей и условий обтекания $V_\infty=3998\text{м/с}$, $\rho_\infty=3.0\times 10^{-4}\text{кг/м}^3$. Расхождение соответствующих кривых рис.10 до 15%. В этом случае режим течения в

ударном слое характеризуется меньшими температурами (меньше скорость в набегающем потоке), чем режим, которому соответствуют кривые рис.9, поэтому отмечается меньшее расхождение в величинах констант реакций (рис.1–3) и, как следствие, величин теплового потока для разных моделей.

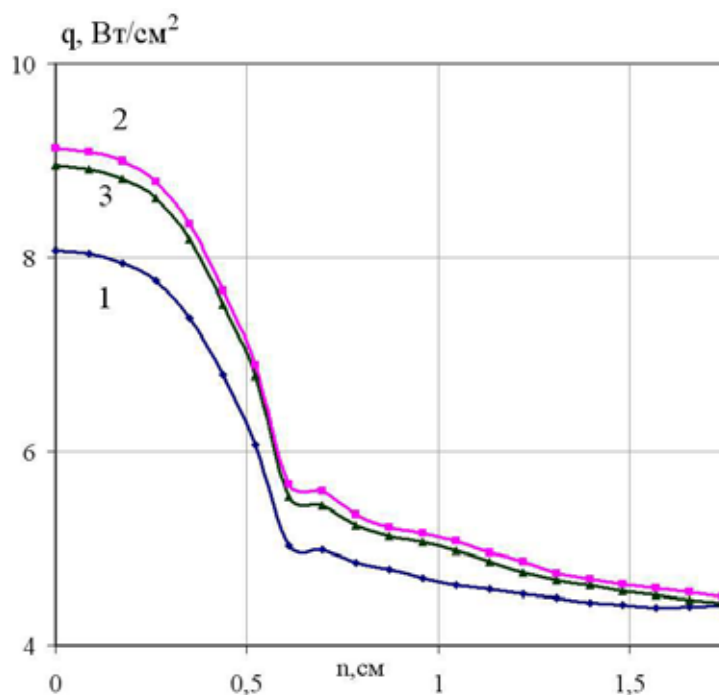


Рис.10. Тепловой поток к поверхности аппарата MRSRO, некаталитическая поверхность, $V_{\infty}=3998\text{м/с}$, $\rho_{\infty}=3.0\times 10^{-4}\text{кг/м}^3$
1 – модель [7], 2 – модель [8], 3 – модель [10–12].

Таким образом, рассмотрены основные модели химических реакций с существенно различающимися между собой константами скоростей реакций в высокотемпературном потоке углекислого газа. С использованием этих моделей проанализировано химически неравновесное обтекание космических аппаратов в атмосфере Марса и установлено их влияние на параметры течения и теплообмен. Получено значительное расхождение в распределениях температуры, концентраций компонент газовой смеси в ударном слое при вариации модели химической кинетики. Установлено, что изменение скоростей реакций практически не влияет на величину теплового потока к идеально каталитической поверхности аппарата. В случае некаталитической поверхности отличие в величине теплового потока, полученное для разных моделей, может быть существенным, до 30%.

Литература

1. Шевелев Ю. Д. Пространственные задачи вычислительной аэрогидродинамики. М.: Наука, 1986. 367с.
2. Пилюгин Н.Н., Тирский Г.А. Динамика ионизованного излучающего газа. М.: Изд-во МГУ, 1989. 312с.
3. Головачев Ю. П. Численное моделирование течений вязкого газа в ударном слое. М: Наука, 1996. 376с.
4. Kustova E., Nagnibeda E. On a correct description of a multi-temperature dissociating CO₂ flow // Chem. Phys. 2006. Vol. 321. P.293–310.
5. Blottner F.G., Curties C.F., Bird R.B. Chemically reacting viscous flow program for multicomponent gas mixtures // Report No. SC-RR-70-751, Sandia Laboratories, Albuquerque, New Mexico. Dec. 1971.

6. Armaly B., Sutton K. Thermal conductivity of partially ionized gas mixtures // AIAA Paper. 1982. No. 469. 6p.
7. Park C., Howe J., Jaffe R. Review of Chemical-Kinetic Problems of future NASA Mission, II: Mars entries // J. Thermophys. Heat Transfer. 1994. Vol. 8. No. 1. P.9–23.
8. Mc. Kenzie R.L., Arnold J.O. Experimental and theoretical investigation of the chemical kinetics and non-equilibrium CN radiation behind shock waves in CO₂-N₂-mixtures //AIAA paper. 1967. No. 322.
9. Михайлов В.В. Аппроксимация энтальпии и уравнения состояния углекислого газа. Инженерный журнал, т.2, вып.2, 1962. С. 239–245.
10. Ковач Э.А., Лосев С.А., Сергиевская А.Л. Модели двухтемпературной химической кинетики для описания диссоциации в сильных ударных волнах. //Химическая физика, 1995, т.14, №9. С.1353–1387.
11. Ибрагимова Л.Б., Смахов Г.Д., Шаталов О.П. Константы скорости диссоциации двухатомных молекул в термически равновесных условиях. Изв.РАН, МЖГ, 1999. №1.С.181–186.
12. Ибрагимова Л.Б. Константы скорости химических реакций в высокотемпературном газе CO₂. Математическое моделирование, 2000. Т.12, №4. С.3–19.
13. Davis R.T. Numerical Solution of the Hypersonic Viscous Shock-Layer Equations // AIAA Journal. 1970. Vol. 8. No. 5. P. 843–851.
14. Н.Е.Афони́на, В.Г. Громов. Численное моделирование обтекания Марсианского спускаемого аппарата. НИИ механики МГУ. //Аэромеханика и газовая динамика. Москва. 2001. №2. С.35–47.