

УДК 519.6: 533.6.011

ИССЛЕДОВАНИЕ НЕРАВНОВЕСНЫХ ХИМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ В УДАРНОМ СЛОЕ ОКОЛО СПУСКАЕМОГО АППАРАТА ПРИ ТОРМОЖЕНИИ В АТМОСФЕРЕ ЗЕМЛИ

Голомазов М.М.

(Институт автоматизации проектирования РАН, г.Москва)

mmg@icad.org.ru

Аннотация

Рассматривается стационарное течение химически реагирующего газа в области между отошедшей ударной волной и затупленным телом, движущегося с гиперзвуковой скоростью в воздушной атмосфере. Исследуется влияние химических реакций на газодинамические и термодинамические функции и концентрации компонентов газа в ударном слое. Определен оптимальный список реакций, позволяющий адекватно описывать аэротермодинамику космических аппаратов при различных режимах полета.

INVESTIGATION OF NONEQUILIBRIUM CHEMICAL REACTIONS IN THE SHOCK LAYER AROUND THE LANDING VEHICLE UNDER AEROBRAKING IN THE EARTH ATMOSPHERE

Stationary flow of chemical reactions gas is considered in vicinity from attached shock wave up to the blunted body what moves with hypersonic velocity in the Earth atmosphere. Influence of chemical reactions on gas dynamics and thermodynamics functions and species concentrations of gas in the shock layer is investigated. Optimal list of reactions is defined that allowed to describe adequately aerothermodynamics of space vehicles under different conditions of flight.

Система уравнений газовой динамики и химической кинетики

Течение в ударном слое между отошедшей ударной волной и поверхностью тела описывается системой уравнений газовой динамики и химической кинетики:

$$(\rho \mathbf{V}, \nabla) \mathbf{V} + \nabla p = 0, \quad (1)$$

$$\nabla (\rho \mathbf{V}) = 0,$$

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

К этим уравнениям следует добавить уравнение состояния $p = \rho RT / \mu$ и уравнение энергии $\mathbf{V}^2/2 + H(T, y_i) = V_\infty^2/2 + H_\infty$. Здесь \mathbf{V} - вектор скорости, ρ - плотность, p - давление, H - энтальпия, R - универсальная газовая постоянная, T - температура, y_i - концентрации компонентов, μ - молекулярный вес смеси газов, w_i - скорость изменения концентрации i -го компонента.

В результате анализа возможного состава реагирующего газа в условиях движения аппаратов в атмосфере Земли с первой космической скоростью выбран оптимальный набор из 5 компонентов, участвующих в химических реакциях: N_2 , O_2 , NO , N , O . Предполагается, что реакции ионизации дают незначительный вклад в полную энергию газа в ударном слое.

Система исходных уравнений состоит из двух подсистем: газодинамической (1) и системы уравнений химической кинетики (2). Из пяти уравнений системы (2) только три уравнения являются линейно независимыми, в качестве которых обычно принимаются

уравнения для концентраций молекул N_2 , O_2 , NO . Для определения концентраций атомов азота и кислорода используются законы сохранения количества вещества.

Для атмосферы Земли основные стехиометрические уравнения реакций диссоциации и обменных реакций представлены в таблице 1.

Таблица 1

Перечень реакций в воздушной атмосфере

Номер реакции	Реакция	Номер реакции	Реакция
1	$N_2 + O_2 \Rightarrow N + N + O_2$	10	$O_2 + N \Rightarrow O + O + N$
2	$N_2 + NO \Rightarrow N + N + NO$	11	$NO + O_2 \Rightarrow N + O + O_2$
3	$N_2 + N_2 \Rightarrow N + N + N_2$	12	$NO + NO \Rightarrow N + O + NO$
4	$N_2 + O \Rightarrow N + N + O$	13	$NO + N_2 \Rightarrow N + O + N_2$
5	$N_2 + N \Rightarrow N + N + N$	14	$NO + O \Rightarrow N + O + O$
6	$O_2 + O_2 \Rightarrow O + O + O_2$	15	$NO + N \Rightarrow N + O + N$
7	$O_2 + NO \Rightarrow O + O + NO$	16	$N_2 + O \Rightarrow NO + N$
8	$O_2 + N_2 \Rightarrow O + O + N_2$	17	$NO + O \Rightarrow O_2 + N$
9	$O_2 + O \Rightarrow O + O + O$		

Скорость изменения концентрации i -го компонента состоит из суммы скоростей реакций, в которых участвует данный компонент:

$$w_i = \sum_j^{n_i} \pm v_{ij} \left(-k_{fj} \prod_{n1} (y^v)_{n1} + k_{bj} \prod_{n2} (y^v)_{n2} \right)_j,$$

где v – стехиометрические коэффициенты компонентов, участвующих в данной реакции; $n1$ – индекс исходных веществ реакции, $n2$ – индекс продуктов реакции, верхний знак + берется в случае, если i -тый компонент является исходным веществом j -той реакции.

Аппроксимация термодинамических функций

Моделирование кинетики высокотемпературных химических реакций в воздушной атмосфере обеспечивается использованием констант скорости этих реакций $k(T)$, как функций температуры газа T . Значения констант скорости прямых и обратных реакций, использованные в расчетах, рекомендованы С.А. Лосевым и получаются с применением обобщенной формулы Аррениуса [1]:

$$k(T) = AT^n \exp(-E/T).$$

Величины коэффициентов A , n , E для прямых (f) и обратных (b) реакций взяты из [2] и представлены в табл.2. Единицы измерения коэффициентов: A [$см^3/моль \cdot с$], n [безразмерный], E [градусы К].

Значения констант равновесия $K_{pj}(T)$ в j -ой химической реакции вычисляются на основе формулы [3]:

$$\lg K_j(T) = A_{eq,j} + B_{eq,j} \cdot \frac{1000}{T}.$$

Значения коэффициентов A_{eq} и B_{eq} были рассчитаны для реакций в состоянии химического равновесия по данным [4] и указаны в табл.3.

Таблица 2

Коэффициенты в обобщенной формуле Аррениуса для констант скорости реакций в воздушной атмосфере

Номер реакции	A_f	n_f	E_f	A_b	n_b	E_b
1	0.70000E+22	-0.16000E+01	0.11320E+06	0.58487E+17	-0.60000E+00	-0.63549E+03
2	0.70000E+22	-0.16000E+01	0.11320E+06	0.58487E+17	-0.60000E+00	-0.63549E+03
3	0.70000E+22	-0.16000E+01	0.11320E+06	0.58487E+17	-0.60000E+00	-0.63549E+03
4	0.30000E+23	-0.16000E+01	0.11320E+06	0.25066E+18	-0.60000E+00	-0.63549E+03
5	0.30000E+23	-0.16000E+01	0.11320E+06	0.25066E+18	-0.60000E+00	-0.63549E+03
6	0.20000E+22	-0.15000E+01	0.59500E+05	0.21683E+17	-0.50000E+00	-0.46701E+03
7	0.20000E+22	-0.15000E+01	0.59500E+05	0.21683E+17	-0.50000E+00	-0.46701E+03
8	0.20000E+22	-0.15000E+01	0.59500E+05	0.21683E+17	-0.50000E+00	-0.46701E+03
9	0.10000E+23	-0.15000E+01	0.59500E+05	0.10841E+18	-0.50000E+00	-0.46701E+03
10	0.10000E+23	-0.15000E+01	0.59500E+05	0.10841E+18	-0.50000E+00	-0.46701E+03
11	0.50000E+16	0.00000E+00	0.75500E+05	0.20688E+12	0.10000E+01	-0.43815E+03
12	0.11000E+18	0.00000E+00	0.75500E+05	0.45514E+13	0.10000E+01	-0.43815E+03
13	0.50000E+16	0.00000E+00	0.75500E+05	0.20688E+12	0.10000E+01	-0.43815E+03
14	0.11000E+18	0.00000E+00	0.75500E+05	0.45514E+13	0.10000E+01	-0.43815E+03
15	0.11000E+18	0.00000E+00	0.75500E+05	0.45514E+13	0.10000E+01	-0.43815E+03
16	0.64000E+18	-0.10000E+01	0.38400E+05	0.12924E+18	-0.10000E+01	0.50266E+03
17	0.84000E+13	0.00000E+00	0.19400E+05	0.32059E+14	0.00000E+00	0.34289E+04

Таблица 3

Коэффициенты для констант равновесия

Реакции	A_{eq}	B_{eq}
$N_2 = N + N$	6.99785	-49.42922
$O_2 = O + O$	6.88473	-26.03865
$NO = N + O$	6.30306	-32.97358

Таблица 4

Аппроксимационные формулы констант скорости реакций

№	Реакция	M	Константа скорости реакции
1	$N_2 + M = 2N + M$	N_2, O_2	$k_{f1} = 4.8 \cdot 10^{17} T^{-0.5} \exp(-113200 \cdot T^{-1})$
		N, O	$k_{f2} = 14.4 \cdot 10^{17} T^{0.5} \exp(-113200 \cdot T^{-1})$
		NO	$k_{f3} = 1.9 \cdot 10^{17} T^{-0.5} \exp(-113200 \cdot T^{-1})$
2	$N_2 + O = NO + N$	—	$k_{f4} = 7 \cdot 10^{13} T^{-0.5} \exp(-38000 \cdot T^{-1})$
3	$O_2 = 2O + M$ $D = 118$ ккал/моль	O_2, N_2, N, NO	$k_{f5} = 5.2 \cdot 10^{10} T^{0.5} (D/RT)^3 \exp(-D/RT)$
		O	$k_{f5} = 2.4 \cdot 10^{11} T^{0.5} (D/RT)^{2.5} \exp(-D/RT)$
4	$NO + M = N + O + M$	O_2, N_2, O, NO, N	$k_{f6} = 2.9 \cdot 10^{19} T^{-1} \exp(-75510 \cdot T^{-1})$

Для моделирования кинетики химических реакций в воздухе были также использованы аппроксимирующие формулы для констант скорости реакций $k(T)$ и констант равновесия $K_p(T)$, предложенные Л.Б. Ибрагимовой и представленные в таблицах 4 и 5.

Таблица 5

Аппроксимирующие формулы для констант равновесия

№	Реакция	Константа равновесия
1	$N_2=2N$	$K_{p1}=10^{-15}T^2\exp(32.0921-107180\cdot T^{-1})$
3	$O_2=2O$	$K_{p3}=\exp(16.2826-62006\cdot T^{-1})$
4	$NO=N+O$	$K_{p4}=10^{-10}T\exp(28.5983-74435\cdot T^{-1})$

На рис. 1 приведены для сравнения константы скоростей прямых реакций k_f , представленные в табл. 2 и 4. При температуре $T < 11000$ K величины коэффициентов k_f для каждой отдельной реакции имеют небольшие отличия. Константы скорости обратных реакций $k_b(T)$ пересчитывались через константу скорости прямых реакций $k_f(T)$ с использованием констант равновесия $K_c(T)$ с применением соотношения $k_b(T) = k_f(T)/K_c(T)$.

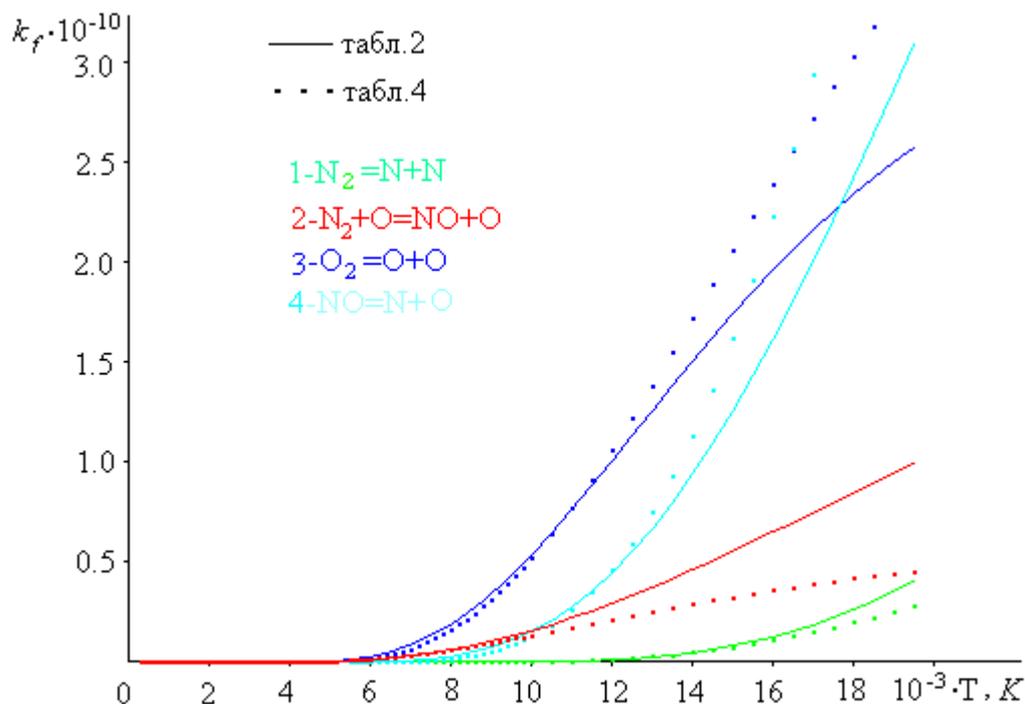


Рис. 1. Сравнение констант скоростей прямых реакций по данным С.А.Лосева (табл. 2) и аппроксимирующим выражениям Л.Б.Ибрагимовой (табл. 4)

На рис.2 сравнение величин констант равновесия, представленных в работе [4] и табл. 5, показывает, что эти величины совпадают во всем диапазоне температур от 1000 K до 20000 K.

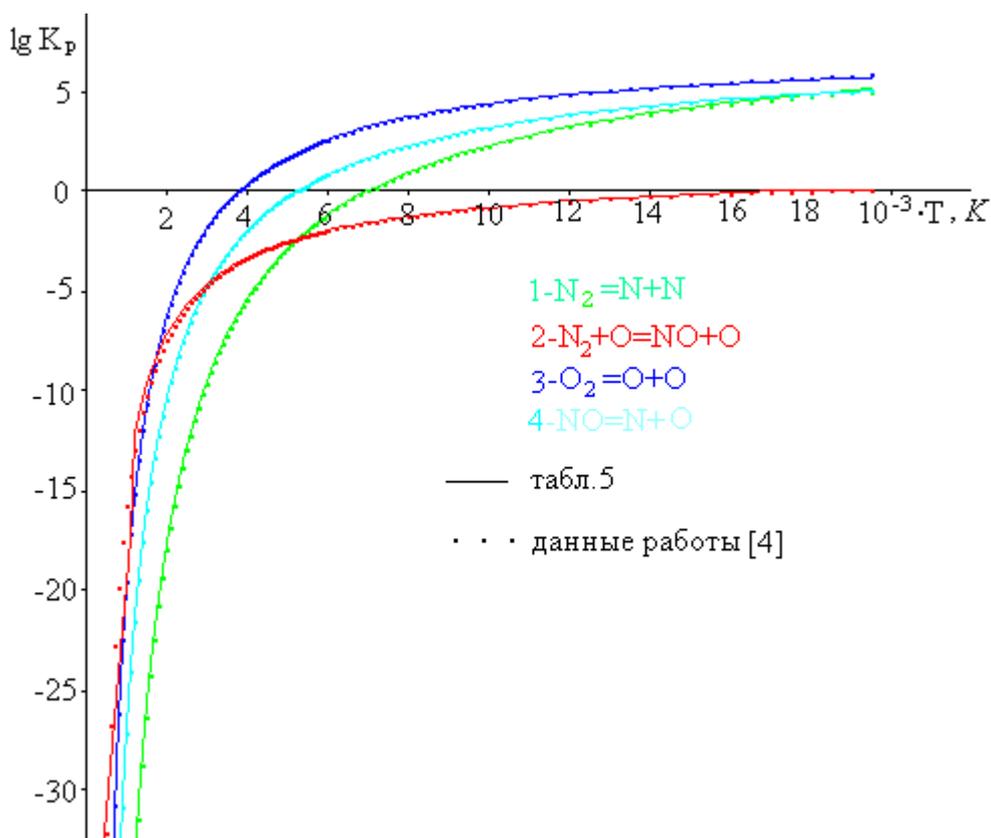


Рис. 2. Сравнение констант равновесия по данным работы [4] и аппроксимирующим выражениям Л.Б.Ибрагимовой (табл. 5)

При расчете термодинамических функций воздуха: энтальпии и ее производной по температуре использовались аппроксимирующие выражения для энтальпий чистых компонентов, предложенные Л.Б. Ибрагимовой (табл. 6), и табличные данные работы [4]. В интервале температур $T=200-10000$ К отличие в значениях энтальпий чистых компонентов не превышает 1%, а при температурах $T > 10000$ К данные имеют существенные различия для энтальпий молекул NO (при $T > 10000$ К), O_2 (при $T > 14000$ К) и N_2 (при $T > 12000$ К). Энтальпия атома азота аппроксимируется с высокой точностью выражением табл. 6 для температур $T < 16000$ К, а энтальпия атомарного кислорода – во всем диапазоне температур от 200 К до 20000 К (смотри рис.3).

Таблица 6

Аппроксимационные формулы энтальпий

№	Компонент	H_i [кал/моль]
1	O_2	$7.198 \cdot T + 3.341[(T-500)^2 + 3.355 \cdot 10^6]^{1/2} - 0.239[(T-1400)^2 + 10^4]^{1/2} - 5964$
2	N_2	$8.497 \cdot T + 1.07[(T-800)^2 + 4.47 \cdot 10^6]^{1/2} + 0.433[(T-10^3)^2 + 6 \cdot 10^4]^{1/2} + 0.85[(T-9 \cdot 10^3)^2 + 10^6]^{1/2} - 10545$
3	NO	$9.3 \cdot T + 18100$
4	O	$5.3 \cdot T + [(T-6 \cdot 10^3)^2 + 7.9 \cdot 10^5]^{1/2} + 57600$
5	N	$6.4 \cdot T + [(T-7 \cdot 10^3)^2 + 3 \cdot 10^6]^{1/2} + 1.035 \cdot 10^5$

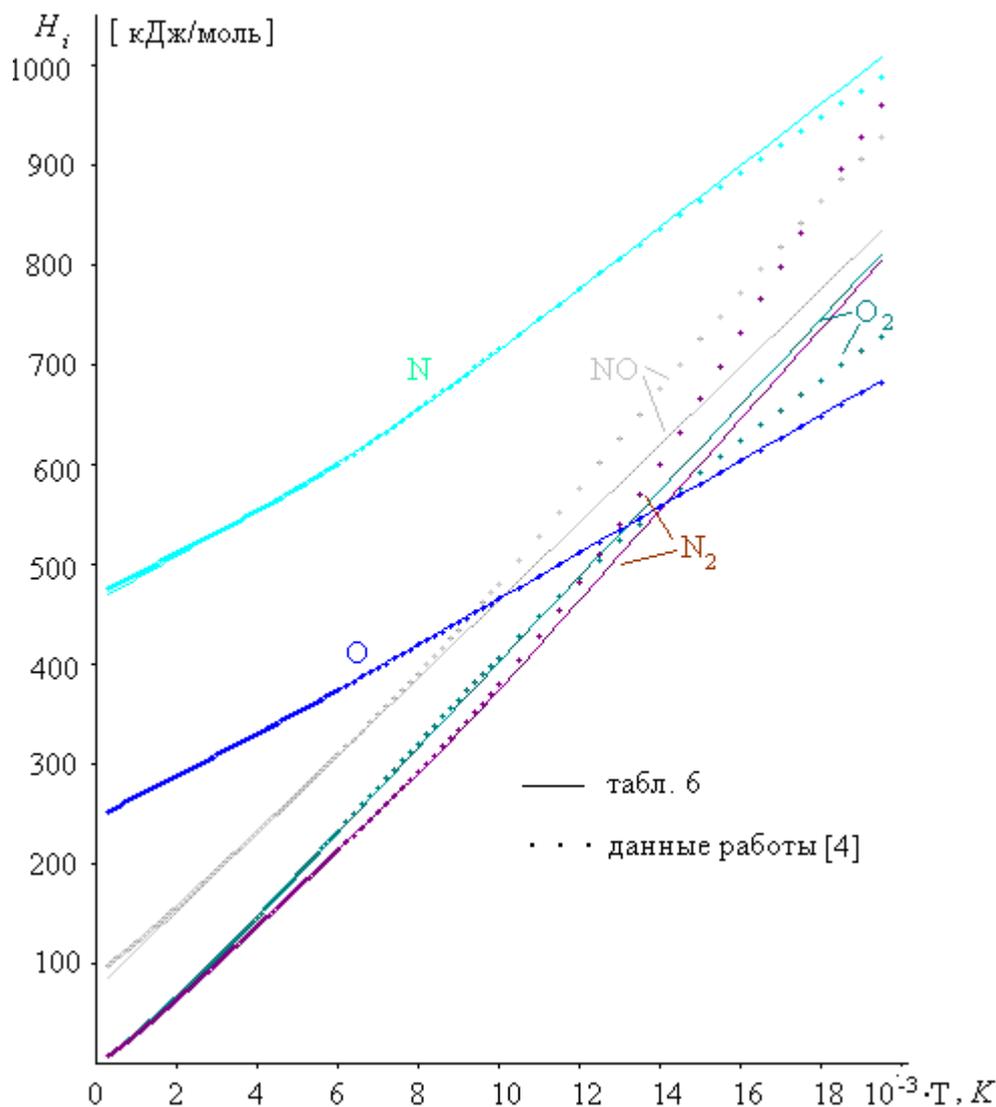


Рис. 3. Сравнение энтальпий чистых компонентов по данным работы [4] и аппроксимирующим выражениям Л.Б.Ибрагимовой (табл. 6)

Численный метод

Для получения численной схемы исходная система уравнений в частных производных сводится к аппроксимирующей системе обыкновенных дифференциальных уравнений путем подстановки интерполяционных выражений для всех функций по выбранным координатным направлениям. Для сегментальных тел наиболее удобной для расчетов является сферическая система координат, и координата R , как независимая переменная в аппроксимирующей системе дифференциальных уравнений. При расчетах обтекания осесимметричных тел использовались тригонометрические многочлены для аппроксимации функций по координате θ , причем наличие плоскости симметрии течения позволяет аппроксимировать функции на вдвое меньшем числе узлов с тем же порядком, если учитывать их четность или нечетность по θ .

Для четных функций p, u, v, y_i :

$$f(R, \varphi, \theta) = \sum a_j(R, \varphi) \cos^j(\theta),$$

где u – проекция скорости V на ось R , v – проекция скорости на ось φ , a_j – коэффициенты, зависящие от узловых значений функций $f(R, \varphi, \theta_j)$, $j=0, \dots, J$.

Для нечетной функции w , проекции скорости на ось θ :

$$w(R, \varphi, \theta) = \sum a_j(R, \varphi) \sin^j(\theta).$$

В каждой полуплоскости θ_j на всех лучах φ_i , кроме граничного, давление p , составляющая скорости u , концентрации компонент аппроксимировались по φ многочленами третьего порядка на трехточечном шаблоне, вводя в аппроксимирующее выражение значение производной функции, вычисленной на предыдущем отрезке:

$$f'_i = f'_{i-1} + \frac{2h_1 - h_0}{h_1} \left(\frac{f_i - f_{i-1}}{h_0} - f'_{i-1} \right) + \frac{h_0}{h_1} \frac{h_0}{h_0 + h_1} \left(\frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{h_0 + h_1} - f'_{i-1} \right),$$

где f – четная по φ функция, $h_0 = \varphi_i - \varphi_{i-1}$ и $h_1 = \varphi_{i+1} - \varphi_i$.

Ударная волна $R = R_S(\varphi, \theta)$ аппроксимируется по задаваемым значениям $R_S(\varphi_l, \theta_j)$. Тогда, задав приближенно ударную волну и получив значения газодинамических функций за ней в узлах сетки, с помощью полученной аппроксимирующей системы обыкновенных дифференциальных уравнений последовательно выстраиваем решение в ударном слое от ударной волны до тела. Условия непротекания на теле $u_n(\varphi_l, \theta_j) = 0$ служат условиями для подбора узловых значений формы ударной волны. Для решения задачи нахождения точных узловых значений формы ударной волны $R_{S,ij} = R_S(\varphi_l, \theta_j)$ используется итерационный метод Ньютона, в котором на каждом итерационном шаге необходимо определить матрицу

$\left(\frac{\partial u_{n,ij}}{\partial R_{ij}} \right)$, каждая строка которой вычисляется интегрированием аппроксимирующей системы обыкновенных дифференциальных уравнений.

Таким образом, чтобы получить значения всех элементов матрицы необходимо выполнить интегрирование аппроксимирующей системы обыкновенных дифференциальных уравнений $2N+2$ раза, где $2N+1$ – число узлов сетки. Время расчета одной строки матрицы не зависит от номера узла сетки, что позволяет применить алгоритм распараллеливания, связанный с вычислением матрицы итерационного процесса в методе Ньютона. Так как число узлов сетки обычно не велико ($2N+2 < 40$) и объем информации для обмена между головным и подчиненными процессами порядка 1 Кб, то алгоритм распараллеливания позволяет выполнить один итерационный шаг теоретически в $2N+2$ раза быстрее по сравнению с обычным алгоритмом на однопроцессорной вычислительной машине.

Система уравнений химической кинетики также аппроксимируется интерполяционными многочленами по выбранным координатным направлениям и приводится к системе обыкновенных дифференциальных уравнений, которая интегрируется по направлению от ударной волны к поверхности тела.

Значения концентраций компонент за ударной волной определяются условием замороженности состава при переходе через скачок уплотнения.

При больших температурах влияние химических реакций настолько велико, что поле газодинамических параметров может резко изменяться. Поэтому газодинамическую и химическую подсистемы необходимо интегрировать совместно с использованием одного метода интегрирования и шага. Решение краевой задачи проводится на основе описанного для газодинамической подсистемы метода распараллеливания алгоритма.

Были выполнены расчеты обтекания аппарата сегментальной формы на многопроцессорном вычислительном комплексе “PARAM-10000” для узлов сетки $2N+2=26$ на 2 и 13 процессорах. В результате, на двух процессорах время счета составило 72 с, а на тринадцати процессорах – 17 с, т.е. быстродействие изменилось в 4,2 раза. Результаты расчетов подтвердили высокую эффективность распараллеливания. Учитывая высокое быстродействие современных персональных компьютеров, описанный метод позволяет проводить расчеты аэродинамики аппаратов по траектории в реальном времени.

Результаты расчетов

Расчеты проведены для аппарата с лобовой частью в форме сегмента с относительным радиусом $R_c/D=1$ по траектории спуска в атмосфере Земли. Расчеты выполнены как в предположении равновесности химических реакций, так и неравновесном случае. Величина скорости аппарата на высоте 100 км составляла 8 км/с, угол входа $\theta_0=-20^\circ$, диаметр аппарата $D=1$ м, угол атаки $\alpha=0$.

На рис.4 приводится изменение коэффициента сопротивления c_x , толщины ударного слоя Δ , конвективного потока тепла q_L и концентраций компонентов молекул O_2 и N_2 в точке торможения в зависимости от времени спуска для равновесных (1) и неравновесных (2) химических реакций. В начале траектории видно заметное различие в коэффициенте сопротивления ($\sim 7\%$) и толщине ударного слоя ($\sim 40\%$), которое исчезает только при $t > 25$ с, когда прекращаются химические реакции в ударном слое. Конвективные потоки, вычисленные по формуле Фея и Ридделла [5], отличаются незначительно, т.к. рассчитываются по траекторным параметрам в набегающем потоке, которые слабо зависят от характера протекания химических реакций в ударном слое. Концентрация молекул азота в точке торможения заметно отличаются по всей траектории вплоть до $t = 23$ с, когда реакция диссоциации азота прекращается.

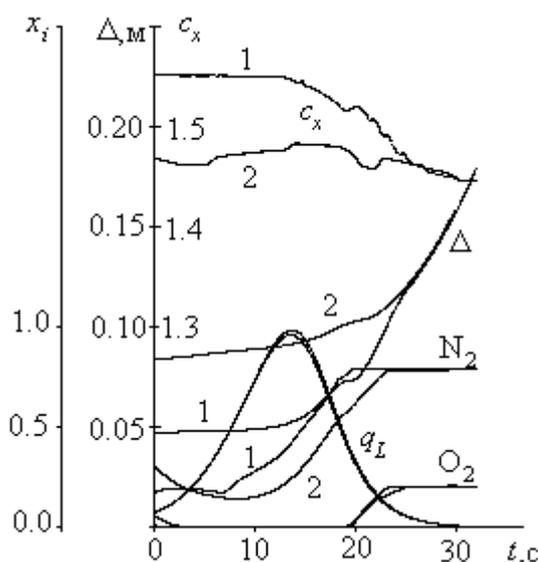


Рис. 4. Изменение по траектории величин коэффициента сопротивления c_x , толщины ударного слоя Δ и конвективного потока q_L , концентраций N_2 и O_2 в точке торможения для равновесных (1) и неравновесных (2) химических реакций в ударном слое

На рис. 5 дано распределение температуры и концентраций компонентов O_2 , O , N_2 , NO , N поперек ударного слоя в начальной точке траектории. Сразу за ударной волной и до поверхности аппарата интенсивно протекают реакции диссоциации молекул азота и кислорода, в результате чего существенно повышается концентрация атомов этих компонентов. Концентрация молекул NO не значительна во всем ударном слое. Температура газа в ударном слое изменяется от 22000 К на ударной волне до 15000 К около поверхности аппарата и в несколько раз превышает максимальную температуру $T_{max}=5300$ К для равновесного случая, поэтому расчет конвективного потока по формуле Фея и Ридделла в неравновесном случае является ошибочным. При таких высоких температурах в смеси газов

протекают процессы ионизации атомов и молекул, что может повлиять на значения термодинамических функций в ударном слое.

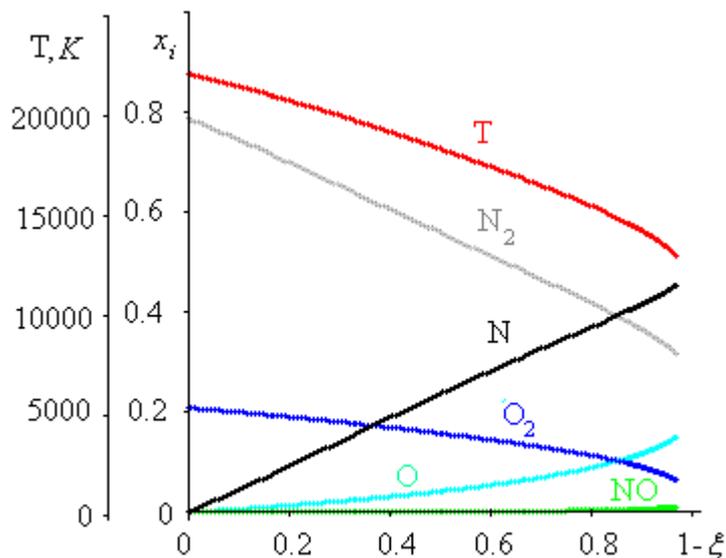


Рис. 5. Изменение температуры и концентраций компонент от ударной волны до тела вдоль оси симметрии аппарата

Из-за малой плотности газа на высоте 100 км скорость аппарата вначале слегка увеличивается и затем медленно снижается от 8 км/с до 7.75 км/с на 10 секунде полета, где на высоте $H=72.8$ км давление в набегающем потоке возрастает до 3.7 Па. При дальнейшем торможении скорость в момент времени $t=15$ с уменьшается до 6.46 км/с, а давление в набегающем потоке на высоте $H=60.4$ км возрастает до 22.4 Па.

На рис. 6 представлено распределение температуры и концентраций компонентов O_2 , O , N_2 , NO , N поперек ударного слоя в точке траектории при $t=10$ с для равновесного (1) и неравновесного (2) случаев протекания химических реакций. В равновесном случае температура и концентрации практически постоянны вдоль луча $\varphi=0$. Для неравновесных химических реакций температура резко падает от 22000 К на ударной волне до 10000 К в узком слое меньше 0.1 толщины ударного слоя, и далее медленно снижается, приближаясь к равновесному значению. Концентрации компонентов ведут себя аналогичным образом. Концентрация окиси азота присутствует в незначительном количестве только в этом узком слое.

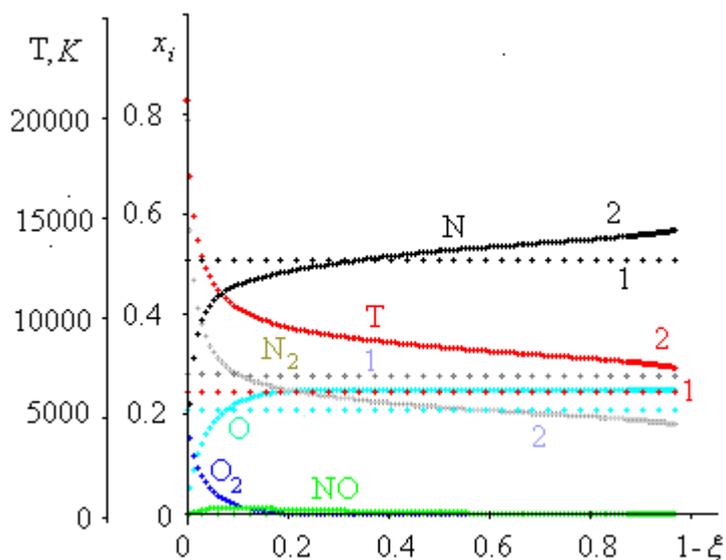


Рис. 6. Сравнение распределения концентраций компонент вдоль оси симметрии течения для равновесного (1) и неравновесного (2) случаев в точке траектории при $t=10$ с

На рис.7 приведены для сравнения распределение температуры и концентраций компонентов O_2 , O , N_2 , NO , N поперек ударного слоя в начальной точке траектории для двух линейных размеров аппарата $D_{мид}=1$ и 2 м. Увеличение линейного размера приводит к интенсификации химических реакций в ударном слое. В следствие этого температура T и концентрации O_2 , O , N_2 , NO , N быстрее приближаются к равновесным значениям.

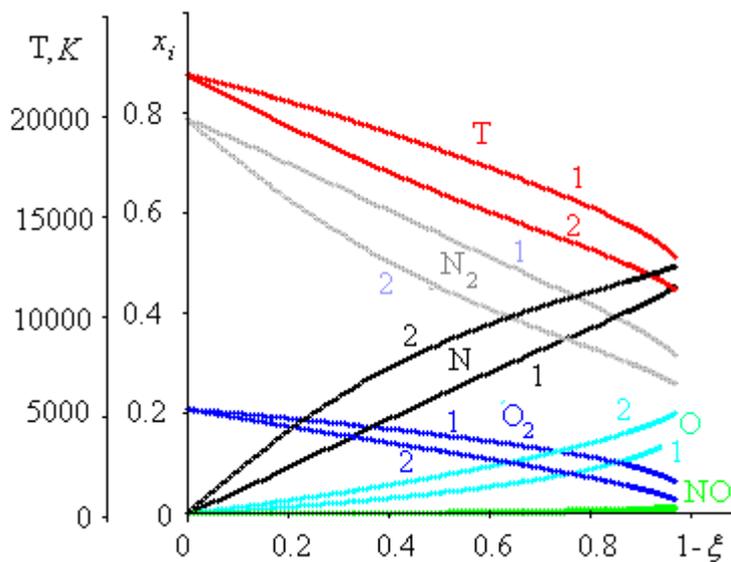


Рис. 7. Влияние размера аппарата на распределение температуры и концентраций в ударном слое (1 - $D_{мид}=1$ м, 2 - $D_{мид}=2$ м)

Заключение

Представлен численный метод расчета трехмерного обтекания затупленных тел стационарным сверхзвуковым потоком газа с учетом равновесных и неравновесных химических реакций в ударном слое. Проведено исследование влияния химических реакций на газодинамические и термодинамические функции в высокотемпературном слое между отошедшей ударной волной и поверхностью тела. Выполнены расчеты аэротермодинамики космического аппарата по траектории спуска в воздушной атмосфере.

Расчеты показали, что при скорости входа 8 км/с неравновесные процессы в ударном слое протекают на начальном участке траектории и в узком слое за ударной волной, и температура и концентрации компонентов близки к равновесным значениям в большей части ударного слоя.

Увеличение линейного размера приводит к интенсификации химических реакций в ударном слое, и температура и концентрации молекул быстрее приближаются к равновесным значениям.

Литература

1. Физико-химические процессы в газовой динамике. Том первый. Динамика физико-химических процессов в газе и плазме. М.: Изд-во Мос. ун-та, 1995.
2. Проблемы аэротермобаллистики, радиационной газодинамики и тепломассообмена в экспедициях возвращения с планетными образцами. Итоговый научно-технический отчет по проекту МНТЦ № 1549-00, 2003.
3. Физико-химические процессы в газовой динамике. Том второй. Физико-химическая кинетика и термодинамика. М.: Научн. изд. центр механики, 2002.
4. Гурвич Л.В., Вейц И.В., Медведев В.А. и др. Термодинамические свойства индивидуальных веществ. Справочное издание в 4-х томах М.: Наука, 1978 – 1982.
5. Фей Дж., Ридделл Ф. Теоретический анализ теплообмена в лобовой точке, омываемой диссоциированным воздухом. Проблемы движения головной части ракет дальнего действия. М.: ИЛ, 1959, 217-256.

Статья поступила в редакцию 2 октября 2008 г.