

УДК 519.6: 533.6.01

## ЧИСЛЕННАЯ СХЕМА ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ ВЛИЯНИЯ ХИМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ ПРИ ГИПЕРЗВУКОВОМ ОБТЕКАНИИ ЗАТУПЛЕННЫХ ТЕЛ

Голомазов М.М.

(Институт автоматизации проектирования РАН, г.Москва)

[mmg@icad.org.ru](mailto:mmg@icad.org.ru)

### Аннотация

Создано прикладное математическое обеспечение на параллельных вычислительных системах для исследования гиперзвукового обтекания затупленных тел невязким газом с учетом физико-химических процессов. На его основе выполнены расчеты трехмерных течений газа в трансзвуковой области между ударной волной и обтекаемым телом равновесного и неравновесного диссоциированного газа, что позволило определить адекватные модели химических реакций и оптимальные методы расчета аэродинамики космических аппаратов в атмосфере Марса. Проведено исследование влияния равновесных и неравновесных химических реакций на аэродинамические характеристики спускаемого космического аппарата сегментальной формы по траектории торможения в атмосфере Марса.

### THE NUMERICAL SCHEME FOR INVESTIGATION CHEMICAL PROCESSES INFLUENCE FOR HYPERSONIC FLOW AROUND BLUNT BODIES

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

### Обозначения:

$\mathbf{V}$  - вектор скорости

$\rho$  - плотность

$p$  - давление

$H$  - энтальпия

$T$  - температура

$y_i$  - мольно-объемные концентрации компонентов

$\xi_i$  - молярные концентрации компонентов

$\alpha_i$  - массовые концентрации компонентов

$\mu$  - молекулярный вес смеси газов

$w_i$  - скорость изменения концентрации  $i$ -той компоненты

$n$  - число компонентов

$p_i$  - парциальное давление  $i$ -той компоненты

$\nu_{ij}$  - стехиометрический коэффициент  $i$ -той компоненты в  $j$ -той реакции

$K_{pj}$  - константа равновесия для  $j$ -той реакции

$m$  - число реакций диссоциации

$\mathbf{n}$  - единичный вектор нормали

$\mathbf{t}$  – единичный вектор касательной  
 $R = R_b(\varphi, \theta)$  – уравнение поверхности тела  
 $\varphi = \varphi_g(\xi, \mathcal{A})$  – уравнение граничной поверхности  
 $R_c$  – радиус сегмента  
 $c_x$  – коэффициент сопротивления  
 $c_y$  – коэффициент подъемной силы  
 $m_z$  – коэффициент момента  
 $\alpha$  – угол атаки  
 $H_b$  – высота полета космического аппарата  
 $\theta_b$  – угол входа космического аппарата

### Система уравнений газовой динамики и химической кинетики

Стационарное течение невязкого газа в ударном слое между отошедшей ударной волной и поверхностью тела описывается системой уравнений газовой динамики и химической кинетики:

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

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

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

$p = \rho R T / \tilde{\mu}$  уравнение состояния,  $V^2/2 + H(T, y_i) = (V^2/2 + H)_\infty$  – уравнение энергии, где  $\mathbf{V}$  – вектор скорости,  $\rho$  – плотность,  $p$  – давление,  $H$  – энтальпия,  $T$  – температура,  $y_i$  – мольно-объемные концентрации компонентов,  $\tilde{\mu}$  – молекулярный вес смеси газов,  $w_i$  – скорость изменения концентрации  $i$ -той компоненты,  $n$  – число компонентов. Количество уравнений в системе (2) необходимо дополнить уравнениями сохранения химических элементов.

В случае равновесных химических реакций уравнение энергии и состояния остаются без изменения, а вместо уравнений химической кинетики рассматриваются уравнения Гульдберга-Вааге для соответствующих реакций:

$$\prod_{i=1}^n p_i^{\nu_{ij}} = K_{pj}(T), \quad j=1, \dots, m; \quad (3)$$

где  $p_i$  – парциальное давление  $i$ -той компоненты,  $\nu_{ij}$  – стехиометрический коэффициент  $i$ -той компоненты в  $j$ -той реакции,  $K_{pj}$  – константа равновесия для  $j$ -той реакции,  $m$  – число реакций диссоциации. В зависимости от условий в набегающем потоке химические реакции в ударном слое принимаются равновесными или неравновесными.

Граничные условия задаются на ударной волне:

$$(\rho \mathbf{V} \mathbf{n})_s = (\rho \mathbf{V} \mathbf{n})_\infty, \quad (\mathbf{V} \mathbf{t})_s = (\mathbf{V} \mathbf{t})_\infty,$$

$$(p + \rho (\mathbf{V} \mathbf{n})^2)_s = (p + \rho (\mathbf{V} \mathbf{n})^2)_\infty, \quad (H + \mathbf{V} \mathbf{V} / 2)_s = (H + \mathbf{V} \mathbf{V} / 2)_\infty,$$

где  $\mathbf{n}$  и  $\mathbf{t}$  – единичные векторы нормали и касательной к ударной волне, индекс  $\infty$  относится к величинам до ударной волны, а индекс  $s$  – к величинам за ударной волной, вектор  $\mathbf{t}$  лежит в одной плоскости с векторами  $\mathbf{V}$  и  $\mathbf{n}$ . В неравновесном случае для концентраций компонентов ставится условие постоянства состава

На поверхности тела – условие непротекания  $\mathbf{V} \mathbf{n} = 0$ , здесь  $\mathbf{n}$  – вектор нормали к поверхности тела. На замыкающей поверхности ставится условие непрерывности производных всех газодинамических функций. В качестве замыкающей поверхности выбирается предельная характеристическая поверхность или близкая к ней коническая, и на ней выполняется условие непрерывности газодинамических функций и их производных.

При выводе аппроксимирующей системы используется сферические координаты  $(R, \varphi, \theta)$ , которые позволяют строить удобные сетки в ударном слое и автоматически учитывать осевую симметрию течения в двумерном случае. Производится замена

переменных таким образом, чтобы область ударного слоя, в которой ищется решение, трансформировалась в цилиндрическую:

$$\xi = \frac{R - R_b(\varphi, \theta)}{R_s(\varphi, \theta) - R_b(\varphi, \theta)}; \eta = \frac{\varphi}{\varphi_g(\xi, \vartheta)}; \vartheta = \theta; (0 \leq \xi \leq 1; 0 \leq \eta \leq 1; 0 \leq \vartheta \leq 2\pi),$$

где  $R = R_b(\varphi, \theta)$  - уравнение поверхности тела,  $\varphi = \varphi_g(\xi, \vartheta)$  - уравнение граничной поверхности.

Тогда в переменных  $(\xi, \eta, \vartheta)$  исходная система уравнений запишется в следующем виде:

$$\begin{aligned} G \frac{\partial u}{\partial \xi} + H \frac{\partial u}{\partial \eta} + \frac{\varepsilon w}{R \sin \varphi} \frac{\partial u}{\partial \vartheta} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial \xi} - \eta \varphi'_{g\xi} \frac{1}{\varphi_g \rho} \frac{\partial p}{\partial \eta} &= \varepsilon \frac{v^2 + w^2}{R}, \\ G \frac{\partial v}{\partial \xi} + H \frac{\partial v}{\partial \eta} + \frac{\varepsilon w}{R \sin \varphi} \frac{\partial v}{\partial \vartheta} - R'_\varphi \frac{1}{R \rho} \frac{\partial p}{\partial \xi} + (\varepsilon + \eta R'_\varphi \varphi'_{g\xi}) \frac{1}{R \varphi_g \rho} \frac{\partial p}{\partial \eta} &= \varepsilon \frac{w^2 \operatorname{ctg} \varphi - uv}{R}, \\ G \frac{\partial w}{\partial \xi} + H \frac{\partial w}{\partial \eta} + \frac{\varepsilon w}{R \sin \varphi} \frac{\partial w}{\partial \vartheta} - R'_\theta \frac{1}{\rho R \sin \varphi} \frac{\partial p}{\partial \xi} + \frac{\varepsilon}{\rho R \sin \varphi} \frac{\partial p}{\partial \vartheta} + \\ + (R'_\theta \varphi'_{g\xi} - \varepsilon \varphi'_{g\vartheta}) \frac{\eta}{\varphi_g \rho R \sin \varphi} \frac{\partial p}{\partial \eta} &= -\varepsilon w \frac{v \operatorname{ctg} \varphi + u}{R}, \end{aligned} \tag{4}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial \xi} - \eta \varphi'_{g\xi} \frac{1}{\varphi_g} \frac{\partial u}{\partial \eta} + \frac{1}{R \varphi_g} (\varepsilon + R'_\varphi \eta \varphi'_{g\xi}) \frac{\partial v}{\partial \xi} - R'_\varphi \frac{1}{R} \frac{\partial v}{\partial \eta} + \frac{\varepsilon}{R \sin \varphi} \frac{\partial w}{\partial \vartheta} - R'_\theta \frac{1}{R \sin \varphi} \frac{\partial w}{\partial \xi} + \\ + \frac{\eta}{\varphi_g R \sin \varphi} (R'_\theta \varphi'_{g\xi} - \varepsilon \varphi'_{g\vartheta}) \frac{\partial w}{\partial \eta} + \frac{G}{\rho c^2} \frac{\partial p}{\partial \xi} + \frac{H}{\rho c^2} \frac{\partial p}{\partial \eta} + \frac{\varepsilon w}{\rho c^2 R \sin \varphi} \frac{\partial p}{\partial \vartheta} &= -\varepsilon \left( \frac{v \operatorname{ctg} \varphi + 2u}{R} - D_\rho \right), \end{aligned}$$

$$G = u - \frac{R'_\varphi}{R} v - \frac{R'_\theta}{R \sin \varphi} w, \quad H = \frac{1}{\varphi_g} (-\eta \varphi'_{g\xi} G + \frac{\varepsilon v}{R} - \frac{\eta \varphi'_{g\vartheta}}{R \sin \varphi} \varepsilon w), \quad \varepsilon = R_s - R_b,$$

$$u \frac{\partial \alpha_i}{\partial R} + \frac{v}{R} \frac{\partial \alpha_i}{\partial \varphi} + \frac{w}{R \sin \varphi} \frac{\partial \alpha_i}{\partial \theta} = \frac{d\alpha_i}{dt}$$

где  $R'_\varphi = (1 - \xi)R'_{b\varphi} + \xi R'_{s\varphi}$ ,  $R'_\theta = (1 - \xi)R'_{b\theta} + \xi R'_{s\theta}$ ,  $c^2$  – квадрат скорости звука.

Для неравновесных химических реакций уравнение неразрывности преобразуется к виду:

$$\rho \nabla \mathbf{V} + \mathbf{V} \nabla \rho / c^2 = \rho \left\{ \mu \sum \frac{1}{\mu_i} \frac{d\alpha_i}{dt} + [\sum (H_i - H) \frac{1}{\mu_i} \frac{d\alpha_i}{dt}] / (T \sum H_{iT} \alpha_i / \mu_i) \right\},$$

где  $\alpha_i$  – весовая концентрация,  $H_i$  – энтальпия,  $\mu_i$  – молекулярный вес  $i$ -того компонента, и в сферической системе координат это уравнение будет иметь следующий вид:

$$\frac{\partial u}{\partial R} + \frac{1}{R} \frac{\partial v}{\partial \varphi} + \frac{1}{R \sin \varphi} \frac{\partial w}{\partial \theta} + \frac{1}{\rho c^2} \left( u \frac{\partial p}{\partial R} + \frac{v}{R} \frac{\partial p}{\partial \varphi} + \frac{w}{R \sin \varphi} \frac{\partial p}{\partial \theta} \right) = -\frac{2u + v \operatorname{ctg} \varphi}{R} + D_\rho,$$

$$D_\rho = \mu \sum_i \frac{1}{\mu_i} \frac{d\alpha_i}{dt} + \frac{\sum_i (H_i - H) \frac{1}{\mu_i} \frac{d\alpha_i}{dt}}{T \sum_i H_{iT} \frac{\alpha_i}{\mu_i}}, \quad c^{-2} = \frac{\rho}{p} - \frac{1}{\mu T \sum_i H_{iT} \frac{\alpha_i}{\mu_i}}$$

Производные  $\frac{d\alpha_i}{dt}$  вычисляется с использованием правых частей системы (2) и дифференциала уравнения связи весовой и мольно-объемной концентраций:  $\alpha_i = y_i \mu_i / \rho$ .

Величина  $G(\xi, \eta, \vartheta)$  есть проекция вектора скорости на направление  $\xi$  и на поверхности тела совпадает с нормальной составляющей скорости. Тогда условие непротекания на теле запишется следующим образом:

$$G(0, \eta, \vartheta) = 0.$$

### Численная схема

Для получения аппроксимирующей системы система уравнений (3) разрешается относительно производных по  $\xi$  от газодинамических функций, и система уравнений принимает следующий вид:

$$\begin{aligned} \frac{\partial p}{\partial \xi} &= \frac{\rho}{D} \left( F_u - \frac{R'_\varphi}{R} F_v - \frac{R'_\theta}{R \sin \varphi} F_w - G F_p \right), \\ \frac{\partial u}{\partial \xi} &= \frac{1}{G} \left( F_u - \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial \xi} \right), \\ \frac{\partial v}{\partial \xi} &= \frac{1}{G} \left( F_v + \frac{R'_\varphi}{R} \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial \xi} \right), \\ \frac{\partial w}{\partial \xi} &= \frac{1}{G} \left( F_w + \frac{R'_\theta}{R \sin \varphi} \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial \xi} \right). \\ D &= 1 + \left( \frac{R'_\varphi}{R} \right)^2 + \left( \frac{R'_\theta}{R \sin \varphi} \right)^2 - \frac{G^2}{c^2}, \end{aligned} \quad (5)$$

$$\begin{aligned} F_u &= \frac{\varepsilon}{R} (v^2 + w^2) - H \frac{\partial u}{\partial \eta} - \frac{\varepsilon}{R \sin \varphi} w \frac{\partial u}{\partial \vartheta} + \frac{\eta \varphi'_{g\xi}}{\varphi_g} \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial \eta} \\ F_v &= \frac{\varepsilon}{R} (w^2 \operatorname{ctg} \varphi - uv) - H \frac{\partial v}{\partial \eta} - \frac{\varepsilon w}{R \sin \varphi} \frac{\partial v}{\partial \vartheta} - \frac{1}{\varphi_g} \left( \frac{\varepsilon}{R} + \eta \varphi'_{g\xi} \frac{R'_\varphi}{R} \right) \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial \eta}, \\ F_w &= -w \frac{\varepsilon}{R} (u + v \operatorname{ctg} \varphi) - H \frac{\partial w}{\partial \eta} - \frac{\varepsilon w}{R \sin \varphi} \frac{\partial w}{\partial \vartheta} - \left( \frac{\eta \varphi'_{g\xi}}{\varphi_g} \frac{R'_\theta}{R \sin \varphi} - \frac{\eta \varphi'_{g\vartheta}}{\varphi_g} \frac{\varepsilon}{R \sin \varphi} \right) \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial \eta} - \frac{\varepsilon}{R \sin \varphi} \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial \vartheta}, \\ F_p &= -\varepsilon \left( \frac{(2u + v \operatorname{ctg} \varphi)}{R} + D \rho \right) + \eta \frac{\varphi'_{g\xi}}{\varphi_g} \left( \frac{\partial u}{\partial \eta} - \frac{R'_\varphi}{R} \frac{\partial v}{\partial \eta} - \frac{R'_\theta}{R \sin \varphi} \frac{\partial w}{\partial \eta} \right) - \frac{\varepsilon}{R \varphi_g} \frac{\partial v}{\partial \eta} + \frac{\eta \varphi'_{g\vartheta}}{\varphi_g} \frac{\varepsilon}{R \sin \varphi} \frac{\partial w}{\partial \eta} - \\ &\quad - \frac{H}{\rho c^2} \frac{\partial p}{\partial \eta} - \frac{\varepsilon}{R \sin \varphi} \left( \frac{\partial w}{\partial \vartheta} + \frac{w}{\rho c^2} \frac{\partial p}{\partial \vartheta} \right). \end{aligned}$$

Для неравновесных химических процессов добавляются уравнения:

$$\frac{d\alpha_i}{d\xi} = \frac{1}{G} \left[ \frac{d\alpha_i}{dt} - H \frac{\partial \alpha_i}{\partial \xi} - \frac{\varepsilon w}{R \sin \varphi} \frac{\partial \alpha_i}{\partial \vartheta} \right], \quad (i = 1, \dots, n-2)$$

$$\frac{dT}{d\xi} = - \left[ \frac{1}{2} \frac{dV^2}{d\xi} + \mu \Sigma (H_i - H) \frac{1}{\mu_i} \frac{d\alpha_i}{d\xi} \right] / H_T.$$

Построение численной схемы заключается в сведении исходной системы уравнений в частных производных к аппроксимирующей системе обыкновенных дифференциальных уравнений путем подстановки интерполяционных выражений по выбранным координатным направлениям  $\eta$  и  $\vartheta$  в систему уравнений (5).

При расчетах обтекания осесимметричных тел для аппроксимации функций по  $\vartheta$  наиболее точными оказываются тригонометрические многочлены, которые позволяют аппроксимировать функции на вдвое меньшем числе узлов с тем же порядком. К тому же

автоматически выполняется условие периодичности функций по  $\vartheta$ . Опыт расчета показал, что в этом случае высокая точность решения обеспечивается при четырех-пяти полуплоскостях  $\mathcal{G}_j = \text{const}$  для тел различной формы и углов атаки до 25 градусов [1].

По координате  $\eta$  функции аппроксимировались в каждой полуплоскости  $\mathcal{G}_j = \text{const}$  многочленами 2-й или 3-ей степени в зависимости от структуры течения и вида функции.

На оси  $\varphi=0$ , где вырождается уравнение неразрывности, необходимо вводить равномерную сетку. В области, примыкающей к замыкающей граничной поверхности, для тел с разрывом кривизны производится сгущение сетки. На всех лучах, кроме граничного, давление  $p$  и составляющая скорости  $u$  аппроксимировались по  $\eta$  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 функция,  $h_0$  и  $h_1$  - шаги по  $\varphi$ .

Эта аппроксимация учитывает гладкое поведение функции в расчетной области. Для нечетных функций  $v$  и  $w$  производные по  $\eta$  аппроксимируются на трехточечном неравномерном шаблоне на всех лучах:

$$f'_i = -f_{i-1} \frac{h_1}{h_0(h_0 + h_1)} + f_i \frac{h_1 - h_0}{h_0 h_1} + f_{i+1} \frac{h_0}{h_1(h_0 + h_1)}.$$

Подставляя аппроксимирующие выражения для производных по  $\eta$  и  $\vartheta$  в исходные уравнения, получаем аппроксимирующую систему обыкновенных дифференциальных уравнений, которая интегрируется от ударной волны до поверхности тела методом Рунге-Кутты второго порядка точности.

Тогда, задав ударную волну и получив значения газодинамических функций на ней в узлах сетки с помощью условий на скачке, аппроксимирующая системы обыкновенных дифференциальных уравнений позволяет последовательно построить решение в ударном слое от ударной волны до тела.

Условия непротекания на теле служат условиями для подбора узловых значений формы ударной волны  $R=R_S(\varphi, \theta)$ .

Для нахождения точных узловых значений формы ударной волны  $R_{S,i,j} = R_S(\varphi_i, \theta_j)$  используется итерационный метод Ньютона. 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, и время расчета одной строки матрицы не зависит от номера узла сетки, что приводит к идее алгоритма распараллеливания, связанного с вычислением матрицы итерационного процесса в методе Ньютона. Так как число узлов сетки обычно невелико ( $N < 40$ ) и объем информации для обмена между головным и подчиненными процессами порядка 2 Кб, то алгоритм распараллеливания позволяет выполнить один итерационный шаг теоретически в  $N$  раз быстрее по сравнению с обычным алгоритмом на однопроцессорной вычислительной машине.

## Исследование кинетики химических реакций в углекислом газе

Далее предполагается, что атмосфера Марса состоит из 100%  $\text{CO}_2$ . Для выбора адекватного состава смеси газов и системы уравнений химической кинетики было проведено исследование диапазонов протекания реакций в равновесно диссоциирующем углекислом газе.

На рис. 1-5 представлены графики зависимостей молярных долей  $\xi_i$  в смеси, образованной при диссоциации углекислого газа, от температуры в диапазоне 1000-12000 K для давлений  $p = 0.01, 0.1, 1, 10$  и  $100 \text{ атм}$  [1] для равновесных физико-химических процессов.

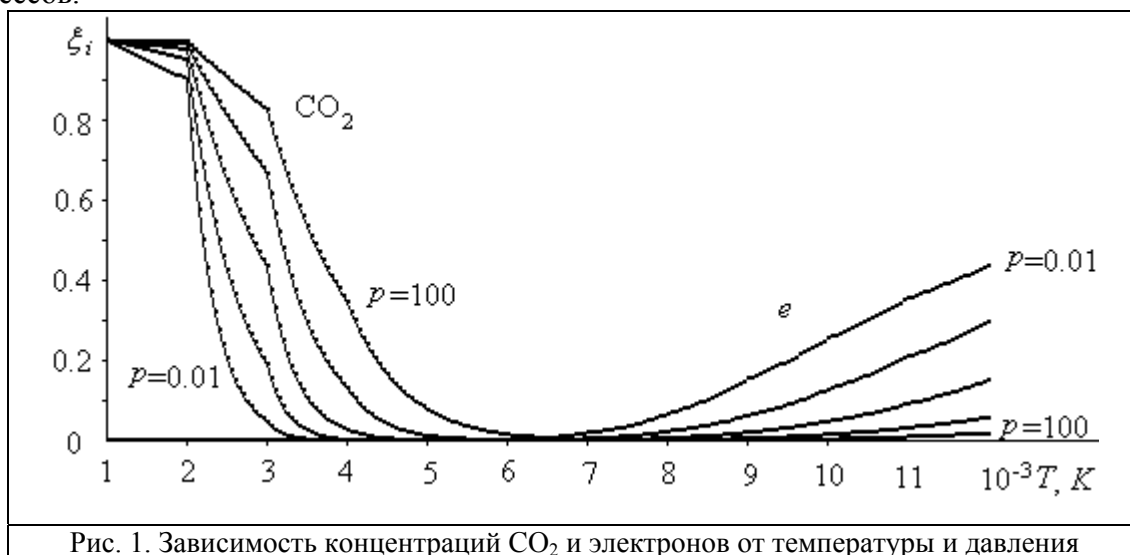


Рис. 1. Зависимость концентраций  $\text{CO}_2$  и электронов от температуры и давления

На рис.1, где представлены графики зависимости концентрации углекислого газа  $\text{CO}_2$  и электронной концентрации  $e$ , видно, что процессы ионизации начинаются при температуре  $T = 6500 \text{ K}$ , когда произошла полная диссоциация молекул углекислого газа, при всех значениях давления. Причем пороговая температура полной диссоциации молекул  $\text{CO}_2$  в значительной степени зависит от величины давления, изменяясь от  $3000 \text{ K}$  для  $p=0.01 \text{ атм}$  до  $6500 \text{ K}$  для  $p=100 \text{ атм}$ . Увеличение давления приводит к замедлению реакций диссоциации и ионизации. Время релаксации уменьшается с ростом давления, и неравновесные химические реакции могут протекать в смеси газов при определенных значениях параметров в набегающем потоке и температуры и давления за ударной волной.

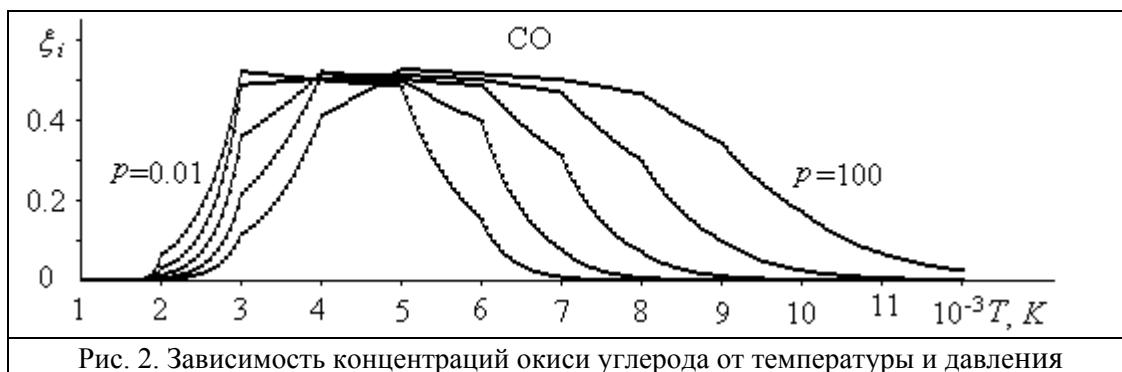


Рис. 2. Зависимость концентраций окиси углерода от температуры и давления

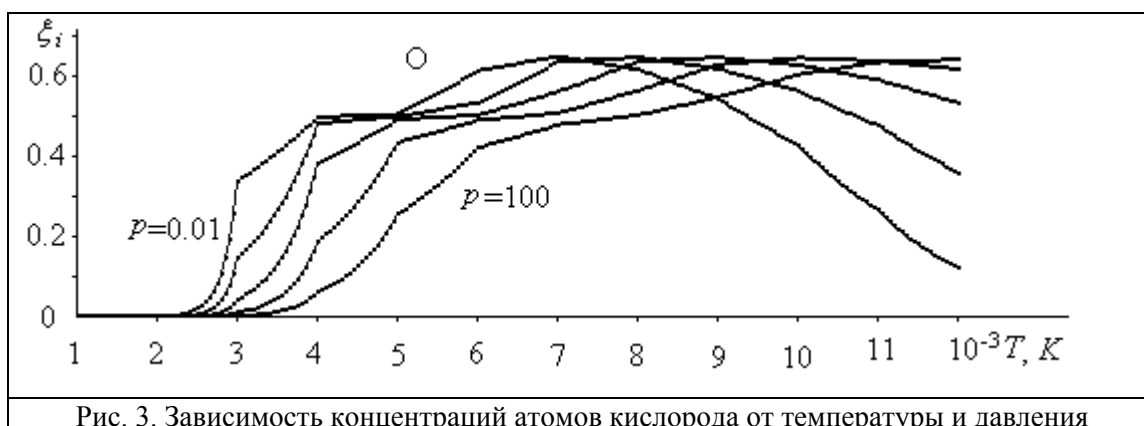


Рис. 3. Зависимость концентраций атомов кислорода от температуры и давления

Реакция диссоциации углекислого газа  $\text{CO}_2 + \text{M} = \text{CO} + \text{O} + \text{M}$  приводит к образованию молекулы окиси углерода  $\text{CO}$  и атома кислорода  $\text{O}$  ( $\text{M}$  – третья частица, участвующая в столкновении и инициирующая процесс диссоциации). Эти частицы вместе с  $\text{CO}_2$  образуют в основном газовую смесь при температурах до  $11000 \text{ K}$  (рис.2 и 3).

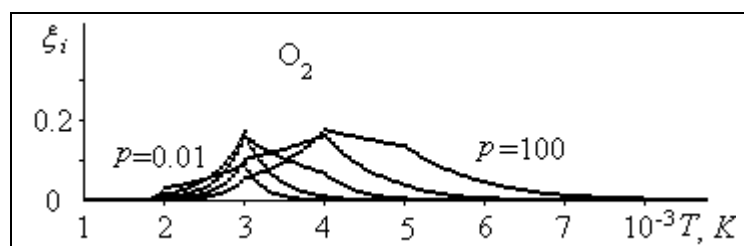


Рис. 4. Зависимость концентраций молекул кислорода от температуры и давления

В диапазоне температур от  $2500 \text{ K}$  до  $7000 \text{ K}$  в результате реакции рекомбинации атомов кислорода образуется молекулярный кислород, мольная концентрация которого не превышает  $0.2$  (рис. 4).

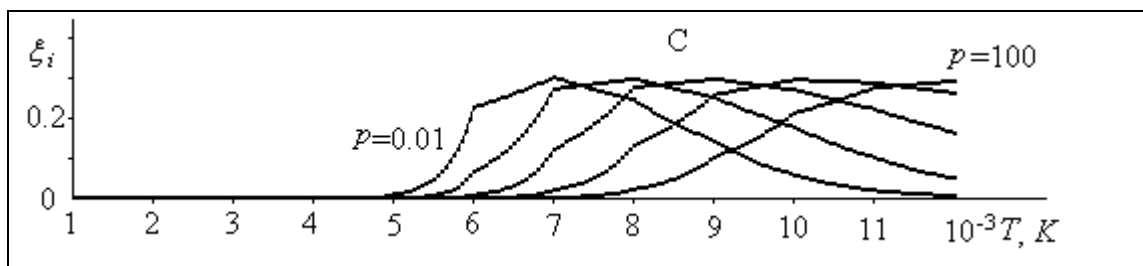


Рис.5. Зависимость концентраций атомов углерода от температуры и давления

В результате реакции диссоциации  $\text{CO} + \text{M} = \text{C} + \text{O} + \text{M}$  в смеси газов при  $T > 5000 \text{ K}$  появляются атомы углерода (рис. 5), а при  $T > 6500 \text{ K}$ , когда начинаются процессы ионизации, в смеси образуются электроны и положительно заряженные ионы  $\text{O}^+$  и  $\text{C}^+$ . Концентрация ионов  $\text{CO}^+$  весьма незначительна, также как и концентрации молекул  $\text{C}_2$  и других ионов, и не оказывает влияния на значения термодинамических функций.

Таким образом, при температурах  $1000 \text{ K} < T < 6500 \text{ K}$  можно рассматривать реакции диссоциации  $\text{CO}_2 + \text{M} = \text{CO} + \text{O} + \text{M}$ ,  $\text{CO} + \text{M} = \text{C} + \text{O} + \text{M}$  и  $\text{O}_2 + \text{M} = 2\text{O} + \text{M}$  и смесь газов, состоящую из компонентов  $\text{CO}_2$ ,  $\text{CO}$ ,  $\text{O}$ ,  $\text{O}_2$  и  $\text{C}$ . При  $T > 6500 \text{ K}$  в смеси газов протекают реакция диссоциации  $\text{CO} + \text{M} = \text{C} + \text{O} + \text{M}$  и реакции ионизации.

При равновесном процессе ионизации концентрация ионов  $\text{CO}^+$  и  $\text{O}_2^+$  на несколько порядков меньше концентраций ионов  $\text{O}^+$  и  $\text{C}^+$  [1].

Для неравновесных химических реакций на ударной волне ставится условие замороженности состава газа, что приводит к значительному увеличению температуры за ударной волной.

Были проведены расчеты траектории спуска в атмосфере Марса (100%  $\text{CO}_2$ ) космического аппарата сегментальной формы с относительным радиусом  $R_c/D=1$ . Расчеты выполнены как в предположении равновесности физико-химических процессов, так и для неравновесных химических реакций в ударном слое.

На рис.6 приводятся равновесное (1) и неравновесное (2) распределение температуры, давления и массовой концентрации окиси углерода  $\text{CO}$  внутри ударного слоя вдоль линии симметрии тела в точке траектории с параметрами  $V_\infty=6047 \text{ м/с}$ ,  $p_\infty=0.2787 \text{ Па}$ ,  $T_\infty=141.7 \text{ K}$ . Если давление в обоих случаях практически совпадало, то неравновесная температура за ударной волной в два с лишним раза больше равновесной. Но затем неравновесная

температура резко падает, приближаясь к равновесной величине. Также значительно отличается распределение концентрации окиси углерода CO. Равновесная концентрация имеет постоянную величину от ударной волны до тела, а неравновесное значение увеличивается от нуля до величины, превышающей равновесную концентрацию.

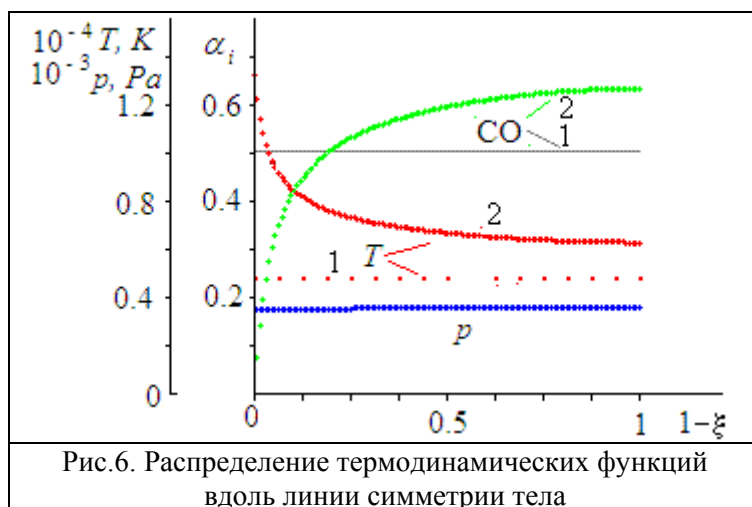


Рис.6. Распределение термодинамических функций вдоль линии симметрии тела

Таблица 1

**Перечень реакций в марсианской атмосфере**

Номер реакции	Реакция	Номер реакции	Реакция
1	$C_2 + C = C + C + C$	18	$CO + CO_2 = C + O + CO_2$
2	$C_2 + O = C + C + O$	19	$CO_2 + C = CO + O + C$
3	$C_2 + C_2 = C + C + C_2$	20	$CO_2 + O = CO + O + O$
4	$C_2 + O_2 = C + C + O_2$	21	$CO_2 + C_2 = CO + O + C_2$
5	$C_2 + CO = C + C + CO$	22	$CO_2 + O_2 = CO + O + O_2$
6	$C_2 + CO_2 = C + C + CO_2$	23	$CO_2 + CO = CO + O + CO$
7	$O_2 + C = O + O + C$	24	$CO_2 + CO_2 = CO + O + CO_2$
8	$O_2 + O = O + O + O$	25	$CO + O = O_2 + C$
9	$O_2 + C_2 = O + O + C_2$	26	$CO + C = C_2 + O$
10	$O_2 + O_2 = O + O + O_2$	27	$CO_2 + O = CO + O_2$
11	$O_2 + CO = O + O + CO$	28	$CO + CO = CO_2 + C$
12	$O_2 + CO_2 = O + O + CO_2$	29	$O_2 + C^+ = O_2^+ + C$
13	$CO + C = C + O + C$	30	$CO + C^+ = CO^+ + C$
14	$CO + O = C + O + O$	31	$O_2^+ + O = O_2 + O^+$
15	$CO + C_2 = C + O + C_2$	32	$CO + O_2^+ = CO^+ + O_2$
16	$CO + O_2 = C + O + O_2$	33	$O + O = O_2^+ + e$
17	$CO + CO = C + O + CO$	34	$C + O = CO^+ + e$



При расчете аппроксимирующей системы уравнений с учетом неравновесных химических реакций молярные энтальпии чистых компонентов  $H_i(T)$  для углекислого газа вычислялись по табличным значениям, которые приведены в [3] в диапазоне температур до 12000 К. В приведенном примере неравновесная температура выходит за пределы диапазона. Для определения энтальпий компонентов в этом случае использовались приближенные формулы, предложенные Л.Б. Ибрагимовой (табл. 2).

Таблица 2

Аппроксимационные формулы энтальпий		
№	Компонент	$H_i$ [кал/моль]
1	CO <sub>2</sub>	$8.57 \cdot T + 6.37[(T-273)^2 + 6.22 \cdot 10^5]^{1/2} + 0.1681[(T-273)^2 + 3.84 \cdot 10^4]^{1/2} - [(T-773)^2 + 3.84 \cdot 10^4]^{1/2} - 5191$
2	O <sub>2</sub>	$7.198 \cdot T + 3.341[(T-500)^2 + 3.355 \cdot 10^6]^{1/2} - 0.239[(T-1400)^2 + 10^4]^{1/2} - 5964$
3	CO	$11.3 \cdot T - 2.3[(T-10^5)^2 + 2.51 \cdot 10^6]^{1/2} + 40800$
4	O	$5.3 \cdot T + [(T-6 \cdot 10^3)^2 + 7.9 \cdot 10^5]^{1/2} + 57600$
5	C	$10.9 \cdot T + 5.25[(T-1.2 \cdot 10^4)^2 + 6.4 \cdot 10^5]^{1/2} + 197900$

### Влияние химических реакций на обтекание космических аппаратов

Были проведены расчеты траекторий спуска в атмосфере Марса космического аппарата сегментальной формы с относительным радиусом  $R_c/D_M=1$ , где  $D_M$  – диаметр миделевого сечения, который равнялся 1м. Расчеты выполнены как в предположении равновесности физико-химических процессов, так и для неравновесных химических реакций в ударном слое.

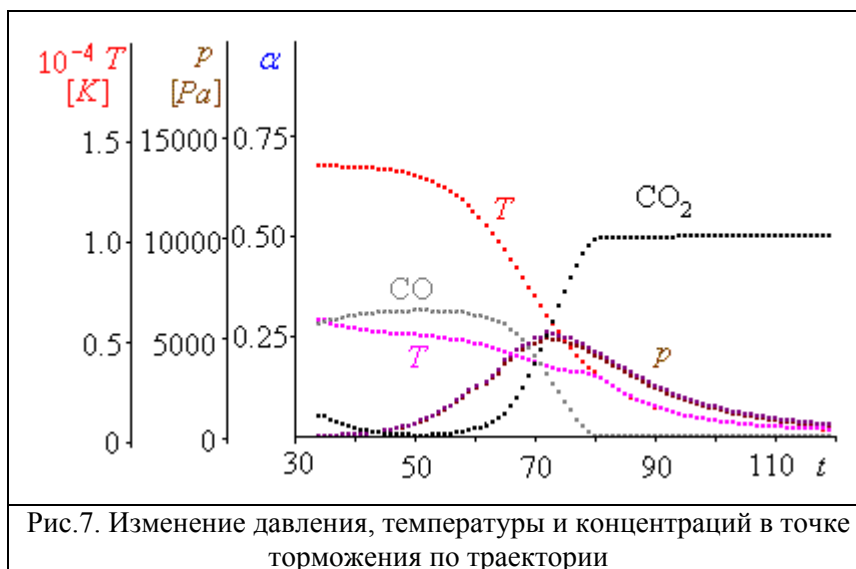
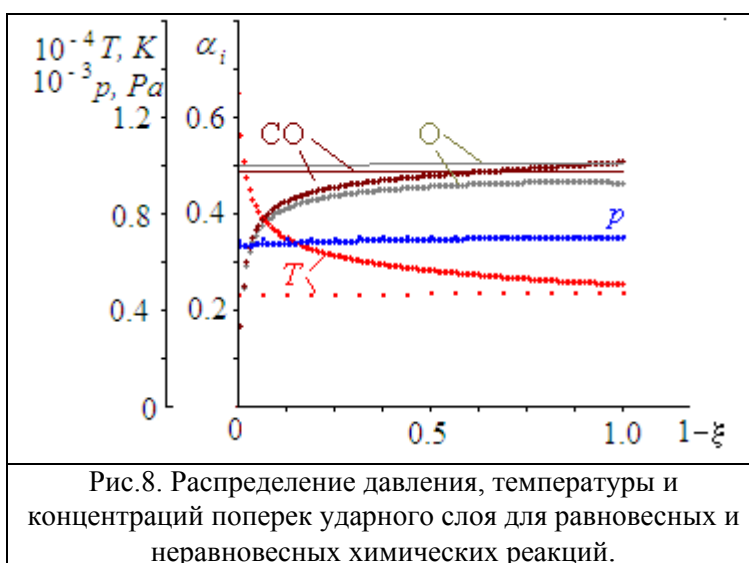


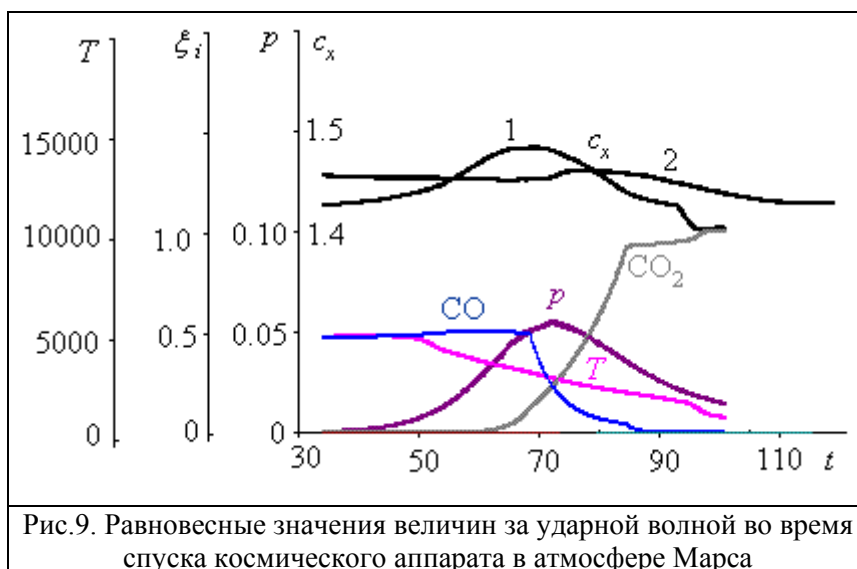
Рис.7. Изменение давления, температуры и концентраций в точке торможения по траектории

На рис.7 показано изменение давления  $p$ , температуры  $T$  и концентраций CO<sub>2</sub> и CO в точке торможения на теле по траектории спуска в атмосфере Марса космического аппарата с момента  $t = 34.4$  с (время отсчитывается от границы атмосферы  $H_b=120$  км, где скорость входа 6 км/с, угол входа:  $-30^\circ$ ). Давление достигает максимума  $p = 50$  Па при  $t = 72$  с, а максимальное значение температуры в точке торможения  $T = 5000$  К при  $t = 34.4$  с. Здесь же приведены величины давления  $p$  и температуры  $T$  за прямым скачком. Если давление мало отличается в обоих случаях по всей траектории, то температура за скачком в 2.6 раза

превышает температуру торможения в начальной точке  $t = 34.4$  с и сближается с ней при  $t = 81$  с.



На рис.8 приведено распределение давления  $p$ , температуры  $T$  и концентраций  $CO$  и  $O$  поперек ударного слоя от ударной волны ( $\xi=1$ ) до тела ( $\xi=0$ ) для равновесных и неравновесных химических реакций в точке траектории  $t = 50$  с. Равновесные значения всех величин, а также неравновесное давление, практически не изменяются, а неравновесная температура и концентрации, значительно отличаясь от равновесных значений за ударной волной, приближаются к ним при подходе к телу. Резкое изменение температуры и концентраций происходит в узком слое около ударной волны.



На рис.9 даны траекторные значения коэффициента сопротивления  $c_x$  (1), давления  $p$ , температуры  $T$  и молярных концентраций  $CO_2$  и  $CO$  для равновесного случая. Для сравнения приведен коэффициент сопротивления  $c_x$  для неравновесного случая (2), и видно, что различие в величинах  $c_x$  находится в пределах 2%. Неравновесные концентрации и температура значительно отличаются от равновесных значений только в узком слое около ударной волны.

На рис.10 приводится изменение коэффициентов сопротивления  $c_x$ , подъемной силы  $c_y$  и момента  $m_z$  в связанной с телом системе координат в зависимости от угла атаки в точке траектории  $t=55$  с для равновесного и неравновесного случаев. Величины коэффициентов  $c_y$

и  $m_z$  совпадают для обоих вариантов для углов атаки  $\alpha = 0 - 12^\circ$ , а коэффициенты сопротивления  $c_x$  отличаются на 2%.

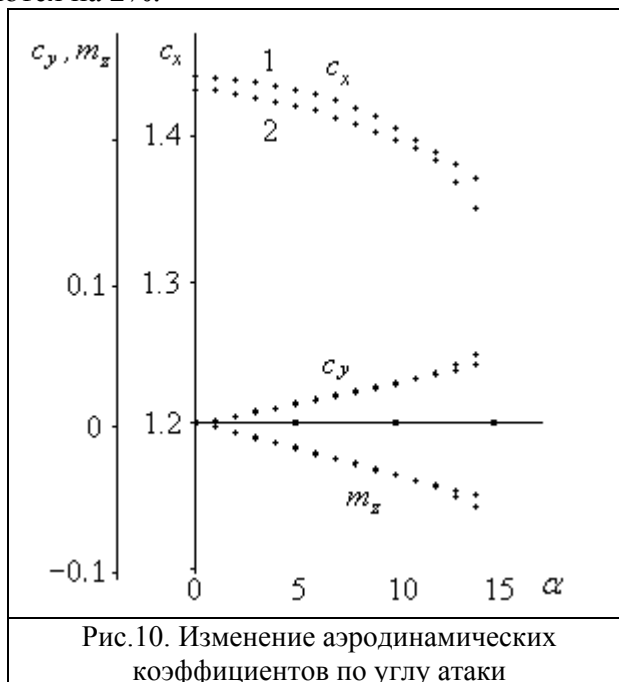


Рис.10. Изменение аэродинамических коэффициентов по углу атаки

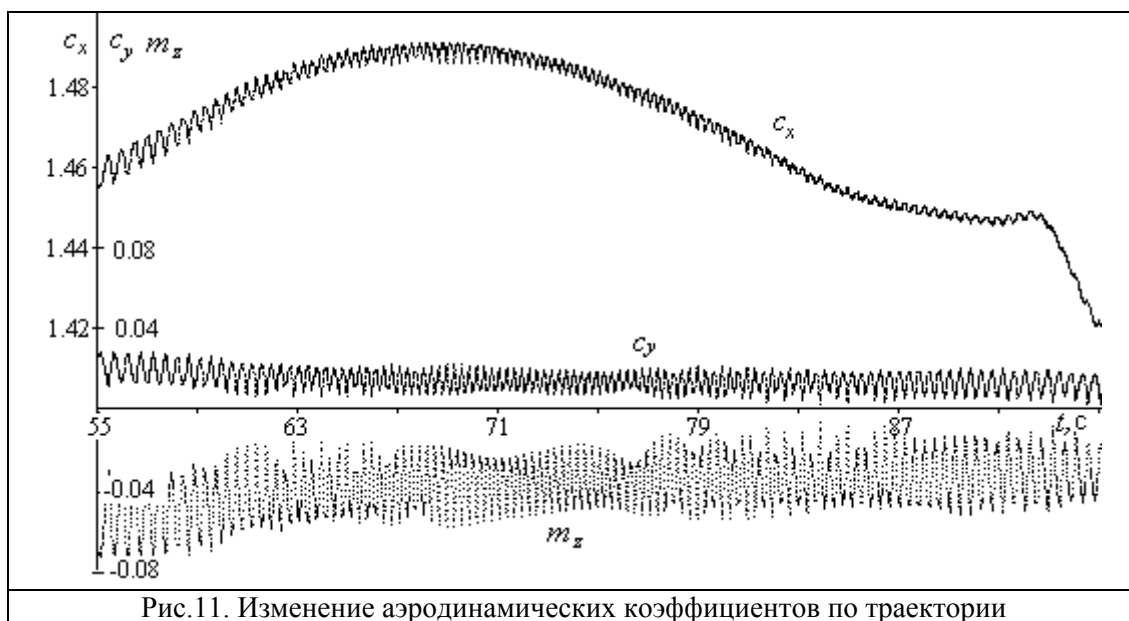


Рис.11. Изменение аэродинамических коэффициентов по траектории

На рис. 11 показано изменение коэффициентов сопротивления  $c_x$ , подъемной силы  $c_y$  и момента  $m_z$  в связанной системе координат по траектории спуска в атмосфере Марса аппарата с учетом колебаний относительно центра масс. Расчеты динамики аппарата были выполнены для постоянной зависимости аэродинамических коэффициентов от угла атаки по всей гиперзвуковой части траектории с шагом по времени 0.01с. По этим данным с шагом по времени 0.01с проведен расчет аэродинамических характеристик. Представленные результаты показывают, что изменение величины коэффициента сопротивления  $c_x$  при колебаниях значительно меньше изменений, обусловленных физико-химическими процессами. Заметно влияние этих процессов и на величины  $c_y$  и  $m_z$ .

Для более точного расчета торможения аппарата необходимо решать систему уравнений динамики совместно с аэродинамической задачей.

## Заключение

Разработаны численные методы и программы трехмерного стационарного обтекания затупленных тел невязким сверхзвуковым потоком газа с учетом равновесных и неравновесных химических реакций. Предложена новая схема распараллеливания вычислительного процесса и реализован оптимальный вариант на параллельном комплексе PARAM-10000, что позволило осуществить расчеты траекторий с шагом по времени 0.01с с учетом реальных физико-химических процессов в высокотемпературной смеси газов в поле течения за ударной волной. Были выполнены расчеты траекторий входа космического аппарата в атмосферу Марса, и результаты расчетов подтвердили высокую эффективность предложенного метода.

Исследование показало, что при скоростях входа в атмосферу  $V \approx 6$  км/с и углах входа  $\theta_b \geq 10$  градусов в ударном слое перед затупленным телом физико-химические процессы протекают равновесным образом. И только на небольшом участке торможения в верхних слоях атмосферы, когда давление в набегающем потоке  $p_\infty < 1$  Па, необходимо учитывать неравновесные химические реакции. Следует учитывать, что при меньших углах входа участок траектории с неравновесными химическими реакциями за ударной волной становится значительно протяженнее. Учет неравновесности химических реакций приводит к значительному возрастанию температуры в ударном слое, но слабо влияет на распределение давления и, следовательно, на аэродинамические характеристики аппарата. Таким образом, расчеты траектории спуска аппарата при больших углах входа можно проводить в предположении равновесности физико-химических процессов в ударном слое. Разработанное прикладное математическое обеспечение на параллельных вычислительных системах для исследования гиперзвукового обтекания затупленных тел с учетом физико-химических процессов позволяет проводить широкомасштабные расчеты аэродинамики космических аппаратов при малых затратах времени на персональном компьютере порядка 2-3 минут для равновесного режима и 10-20 минут для неравновесного газа.

## Литература

1. Плешанов А.С. Состав, термодинамические и газодинамические свойства углекислого газа для температур от 1000 до 12000 К и давления от  $10^{-2}$  до  $10^3$  атм. // Физическая газодинамика, теплообмен и термодинамика газов высоких температур/под ред. А.С. Предводителя. М.: Изд-во АН СССР. 1962. С. 15-35.
2. Физико-химические процессы в газовой динамике. В двух томах. Динамика физико-химических процессов в газе и плазме. М.: Изд-во Мос. ун-та, 1995.
3. 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.