

Numerical Modeling of Non-equilibrium Subsonic Flow of Dissociated Air Past a Cylindrical Body

A. I. Bryzgalov, S. E. Yakush, S. A. Vasilevskiy, A. F. Kolesnikov

Ishlinsky Institute for Problems in Mechanics RAS,

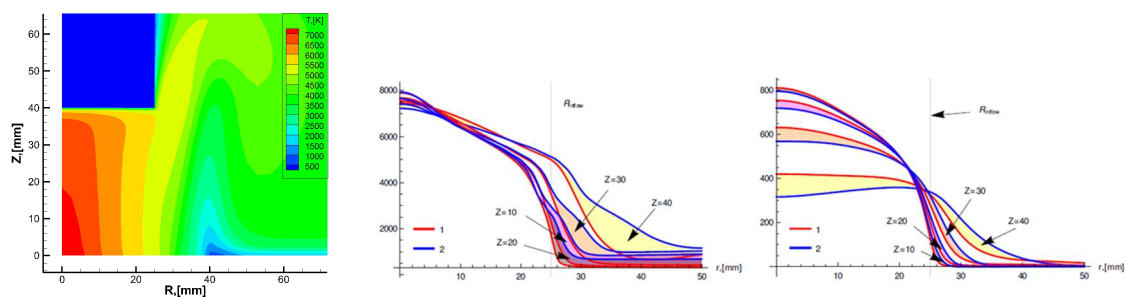
Moscow, 119526, Russia

bryzgalov@ipmnet.ru

Abstract

Results of verification simulations of chemically non-equilibrium dissociated air flow past a body with cooled catalytic surface are presented. The computational model includes a two-dimensional gas dynamics module implemented on the basis of a numerical scheme suitable for subsonic as well as supersonic flows, together with a module for chemical kinetics calculations taking into account the vibrational non-equilibrium. Simulations are performed for flows past a cylindrical body with a flat edge at the dissociated air jet parameters corresponding to the conditions in the IGP-4 plasmatron available in IPMech RAS. The results are compared with those obtained for subsonic flows by the model of chemically equilibrium dissociated air. The effects of non-equilibrium chemistry are demonstrated.

Keywords: plasmatron, catalytic surface, numerical modeling, dissociated air, chemical non-equilibrium.



Temperature field in an the dissociated air jet flow past a cylindrical body with cooled surface (left), comparison of radial temperature profiles at different elevations obtained in the non-equilibrium and equilibrium simulations (right): 1 – non-equilibrium model, 2 – equilibrium model

УДК 533.722

Численное моделирование неравновесных дозвуковых течений диссоциированного воздуха около цилиндрического тела

А. И. Брызгалов, С. Е. Якуш, С. А. Васильевский, А. Ф. Колесников

*Институт проблем механики им. А.Ю. Ишлинского РАН,
Россия, Москва, 119526, просп. Вернадского, 101-1
bryzgalov@ipmnet.ru*

Аннотация

Представлены результаты верификационных расчетов течений химически неравновесного диссоциированного воздуха около тела с охлаждаемой каталитической поверхностью. Вычислительная модель включает двумерный газодинамический модуль, реализованный на базе численной схемы, позволяющей рассчитывать, как дозвуковые, так и сверхзвуковые течения, а также модуль расчета химической кинетики с учетом эффектов колебательной неравновесности. Проведено моделирование обтекания цилиндрического тела с плоским торцом при параметрах струи диссоциированного воздуха, соответствующих условиям в плазматроне ВГУ-4 ИПМех РАН. Результаты сопоставлены с расчетом дозвукового обтекания на основе модели равновесного диссоциированного воздуха. Определены области течения, в которых проявляются эффекты неравновесности.

Ключевые слова: ВЧ-плазматрон, каталитическая поверхность, численное моделирование, диссоциированный воздух, химическая неравновесность.

1. Введение

Испытание материалов при аэродинамическом нагреве в потоке плазмы является одним из основных методов определения их эксплуатационных качеств, включая термическую стойкость, каталитические свойства, прочностные характеристики. В особенности такие испытания важны при разработке перспективных теплозащитных покрытий для аэрокосмической техники.

Для создания высокоэнтальпийных потоков, моделирующих условия обтекания тела на определенных участках траектории, применяются плазматроны различного типа. В лаборатории взаимодействия плазмы и излучения с материалами ИПМех РАН экспериментальные исследования термохимической стойкости образцов материалов потоками плазмы осуществляются на индукционных ВЧ-плазматронах типа ВГУ-3 (мощностью 1000 кВт) и ВГУ-4 (100 кВт), зарегистрированных в качестве уникальных научных установок РФ (УНУ). Данные установки позволяют создавать потоки плазмы (как воздушной, так и других составов) с температурой в разрядном канале, достигающей 10^4 и 8×10^3 К, соответственно [1].

Экспериментальные исследования поведения материалов в потоках плазмы с необходимостью должны сопровождаться численными расчетами, позволяющими определить характеристики процесса, которые не поддаются прямому измерению, или точность восстановления которых недостаточно высока (температура, химический состав плазмы, степень каталитичности). Поэтому численное моделирование занимает все более значительное место в научных исследованиях взаимодействия плазмы с материалами и при решении прикладных задач, включая испытания материалов на термостойкость [2–6].

Диапазон параметров, для которых необходимо проводить численные расчеты, достаточно широк – от дозвуковых течений при высоких давлениях, когда с успехом может применяться модель равновесной плазмы, до существенно неравновесных дозвуковых и сверхзвуковых режимов. Кроме того, учет химической неравновесности существенен для адекватного учета каталитичности поверхности обдуваемого тела. В [5] расчеты с учетом неравновесности проведены вдоль линии тока в окрестности передней критической точки, однако для получения данных о нагреве всей поверхности тела необходимо пространственное моделирование [6].

В лаборатории термогазодинамики и горения ИПМех РАН создана программа расчета двумерных течений неравновесной плазмы (в том числе с учетом однократной ионизации), одним из основных приложений которой является вычислительное сопровождение экспериментов на плазматронах ВГУ-3 и ВГУ-4 для режимов обтекания, в которых существенную роль играют эффекты температурной и химической неравновесности. Вычислительный модуль данной программы, ответственный за решение уравнений химической кинетики в двухтемпературном приближении, был верифицирован ранее на задаче о релаксационной зоне за фронтом сильной ударной волны [7]. В настоящей работе представлены результаты верификационных расчетов обтекания диссоциированным воздухом цилиндрического образца с плоским торцом, в которых модуль химической кинетики [7] сопряжен с газодинамическим модулем, позволяющим проводить расчеты как дозвуковых, так и сверхзвуковых течений за счет применения специальной численной схемы с масштабированием искусственной вязкости по числу Маха.

Ниже представлено описание математической постановки задачи, вычислительной схемы и ее численной реализации, а также приведены результаты расчетов и их сравнение с аналогичными расчетами, выполненными согласно равновесной модели.

2. Математическая модель

2.1. Определяющие уравнения

В общем случае диссоциированный воздух рассматривается как вязкий теплопроводный газ, содержащий N химических компонент с учетом однократной ионизации и наличием электронов. Законы сохранения, записанные для осесимметричного случая в цилиндрической системе координат (r, z) , имеют следующий вид:

$$\frac{\partial Q}{\partial t} + \frac{\partial F}{\partial r} + \frac{\partial G}{\partial z} + \frac{S}{r} + \frac{\partial F^D}{\partial r} + \frac{\partial G^D}{\partial z} + \frac{S^D}{r} = R, \quad (1)$$

где t – время; Q – вектор консервативных переменных; F и G – вектора радиального и осевого «невязких» потоков; F^D и G^D – соответствующие вектора потоков, обусловленных диссипативными процессами; S и S^D – члены, возникающие в криволинейной системе координат; R – источниковый член, описывающий протекание химических реакций

$$Q = \begin{pmatrix} \rho y_1 \\ \dots \\ \rho y_N \\ \rho u \\ \rho v \\ \rho E \end{pmatrix}, \quad F = \begin{pmatrix} \rho u y_1 \\ \dots \\ \rho u y_N \\ \rho u^2 + p \\ \rho u v \\ \rho u H \end{pmatrix}, \quad G = \begin{pmatrix} \rho v y_1 \\ \dots \\ \rho v y_N \\ \rho v u \\ \rho v^2 + p \\ \rho v H \end{pmatrix}, \quad S = \begin{pmatrix} \rho u y_1 \\ \dots \\ \rho u y_N \\ \rho u^2 \\ \rho u v \\ \rho u H \end{pmatrix}, \quad (2)$$

$$F^D = \begin{pmatrix} J_1^r \\ \dots \\ J_N^r \\ -\tau_{rr} \\ -\tau_{zr} \\ -\lambda \frac{\partial T}{\partial r} + \sum_{i=1}^N J_i^r h_i \end{pmatrix}, G^D = \begin{pmatrix} J_1^z \\ \dots \\ J_N^z \\ -\tau_{zr} \\ -\tau_{zz} \\ -\lambda \frac{\partial T}{\partial z} + \sum_{i=1}^N J_i^z h_i \end{pmatrix}, S^D = \begin{pmatrix} J_1^r \\ \dots \\ J_N^r \\ -(\tau_{rr} - \tau_{\theta\theta}) \\ -\tau_{zr} \\ -\lambda \frac{\partial T}{\partial r} + \sum_{i=1}^N J_i^r h_i \end{pmatrix}, R = \begin{pmatrix} \dot{\omega}_1 \\ \dots \\ \dot{\omega}_N \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (3)$$

Здесь ρ – плотность; (u, v) – радиальная и осевая компоненты скорости; y_i – массовые доли компонент в смеси ($i = 1 \dots N$); p – давление; τ – тензор вязких напряжений; E и H – удельные внутренняя энергия и энтальпия, соответственно

$$E = e_{\text{int}}(T) + \frac{u^2 + v^2}{2}, \quad H = h(T) + \frac{u^2 + v^2}{2} = E + \frac{p}{\rho} \quad (4)$$

Удельная энтальпия многокомпонентной смеси

$$h(T) = \sum_{i=1}^N y_i h_i(T),$$

где удельные энтальпии индивидуальных компонент описываются табличными данными [8], удельная внутренняя энергия смеси $e_{\text{int}} = h - p/\rho$. Отметим, что удельные энтальпии компонент включают в себя энтальпию образования, поэтому источниковый член в R для уравнения энергии равен нулю.

Для многокомпонентной смеси используется уравнение состояния идеального газа

$$p = \frac{\rho R^0 T}{\mu},$$

где $\mu = \sum_{i=1}^N x_i \mu_i$ – средняя молярная масса смеси; x_i и μ_i – мольные (объемные) доли компонент и их молярные массы.

Коэффициенты вязкости η и теплопроводности λ многокомпонентной газовой смеси рассчитываются по полуэмпирическим формулам, выведенным путем минимизации функционала квадратов отклонений приближенных значений от коэффициентов переноса, вычисляемых по формулам молекулярно-кинетической теории Чепмена – Энскога во втором приближении для вязкости и в третьем – для теплопроводности [9]. Данный метод является более точным по сравнению с формулами Уилке – Васильевой [10], поскольку в нем учитываются перекрестные интегралы столкновений.

Коэффициент вязкости определяется соотношением

$$\eta = C_1(T) \sum_{i=1}^N \frac{x_i \sqrt{\mu_i}}{x_i \bar{\Omega}_{ii}^{(2,2)} F_{ii}^{(1)} + \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq i}}^N x_k \bar{\Omega}_{ik}^{(2,2)} F_{ik}^{(1)} \sqrt{\frac{2\mu_k}{\mu_i + \mu_k}}}, \quad C_1(T) = 8.387 \times 10^{-6} \sqrt{T}, \quad (5)$$

а коэффициент теплопроводности – соотношением

$$\lambda = C_2(T) \sum_{i=1}^N \frac{x_i / \sqrt{\mu_i}}{x_i \bar{\Omega}_{ii}^{(2,2)} F_{ii}^{(2)} + \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq i}}^N x_k \bar{\Omega}_{ik}^{(2,2)} F_{ik}^{(2)} \sqrt{\frac{2\mu_k}{\mu_i + \mu_k}} C_{ik}},$$

$$C_2(T) = 0.2615\sqrt{T}, \quad C_{ik} = \frac{3.75\mu_i^2 + 5\mu_i\mu_k + 1.25\mu_k^2}{(\mu_i + \mu_k)^2} \quad (6)$$

Здесь $F_{ij}^{(1)}, F_{ij}^{(2)}$ матрица $N \times N$ постоянных коэффициентов порядка единицы [9], $\bar{\Omega}_{ij}^{(2,2)}$ – приведенные интегралы столкновений [11].

Диффузионные потоки в радиальном и осевом направлениях $J_i^{r,z} = \rho y_i V_i^{r,z}$ (где $V_i^{r,z}$ – соответствующие диффузионные скорости) описываются соотношениями Стефана – Максвелла без учета термо- и бародиффузии. Для определения диффузионных потоков J_i по каждому направлению решается система линейных алгебраических уравнений [12]

$$\begin{aligned} \nabla y_i &= -\frac{\Delta_i}{m} J_i + y_i \sum_{k=1}^N \frac{\Delta_{ik}^{(c)}}{m_k} J_k, \\ \Delta_{ik} &= \frac{1}{nD_{ik}}, \quad \Delta_i = \sum_{k=1}^N x_k \Delta_{ik}, \\ \Delta_{ik}^{(c)} &= \Delta_{ik} + \sum_{s=1}^N x_s \left(\frac{m_k}{m} - \frac{m_s}{m} \right) \Delta_{sk}, \end{aligned} \quad (7)$$

где $m_i = \mu/N_A$ – масса i -й молекулы; N_A – число Авогадро; $m = \sum m_i x_i$ – средняя масса молекулы по смеси. Система уравнений (7) решается совместно с уравнением, выражающим закон сохранения массы

$$\sum_{i=1}^N J_i = 0 \quad (8)$$

2.2. Кинетическая схема

Источниковые члены в уравнениях для концентрации, входящие в R (см. (3)) и описывающие скорость изменения химического состава за счет протекания реакций, имеют вид

$$\dot{\omega}_i = \mu_i \sum_{r=1}^{N_r} \nu_i^r \left(k_r^f \prod_{j \in \text{reag}} c_j^{\nu_j^r} - k_r^r \prod_{j \in \text{prod}} c_j^{\nu_j^r} \right), \quad (9)$$

где $c_i = \rho y_i / \mu_i$ – абсолютные мольные концентрации компонент (моль/м³); ν_i^r – стехиометрический коэффициент i -й компоненты в r -й реакции; N_r – общее число реакций; k_r^f и k_r^r – константы скорости прямой и обратной реакций, соответственно, произведения концентраций в (9) берутся по исходным реагентам (*reag*) для прямой реакции, и по продуктам (*prod*) для обратной реакции, соответственно.

Химический состав диссоциированного воздуха представлен следующим набором компонент: N, O, NO, N₂, O₂. Ионизация в данной работе не учитывалась, поскольку для рассматриваемых параметров потока она была несущественной. Кинетическая схема, описывающая протекающие реакции, заимствована из работы [13], она насчитывает 32 элементарные реакции из которых в настоящей работе использованы первые 17, не связанные с ионизацией. Кинетические коэффициенты для констант скорости прямой реакции $k_f = AT^b \exp(-\theta/T)$ приведены в Табл. 1, причем предэкспоненциальный множитель A приведен для мольных концентраций, выраженных в моль/см³. Константы скорости обратных реакций находились через константу равновесия.

Таблица 1

Кинетическая схема реакций в диссоциированном воздухе [13]

№		A	b	θ
1	$O_2 + N = 2O + N$	3.60×10^{18}	-1	59500
2	$O_2 + NO = 2O + NO$	3.60×10^{18}	-1	59500
3	$O_2 + O = 2O + O$	9.00×10^{19}	-1	59500
4	$O_2 + O_2 = 2O + O_2$	3.24×10^{19}	-1	59500
5	$O_2 + N_2 = 2O + N_2$	7.20×10^{18}	-1	59500
6	$N_2 + O = 2N + O$	1.90×10^{17}	-0.5	113000
7	$N_2 + NO = 2N + NO$	1.90×10^{17}	-0.5	113000
8	$N_2 + O_2 = 2N + O_2$	1.90×10^{17}	-0.5	113000
9	$N_2 + N = 2N + N$	4.085×10^{22}	-1.5	113000
10	$N_2 + N_2 = 2N + N_2$	$4.70 \cdot 10^{17}$	-0.5	113000
11	$NO + O_2 = N + O + O_2$	3.90×10^{20}	-1.5	75500
12	$NO + N_2 = N + O + N_2$	3.90×10^{20}	-1.5	75500
13	$NO + O = N + O + O$	7.80×10^{21}	-1.5	75500
14	$NO + N = N + O + N$	7.80×10^{21}	-1.5	75500
15	$NO + NO = N + O + NO$	7.80×10^{21}	-1.5	75500
16	$NO + O = O_2 + N$	3.20×10^9	1	19700
17	$O_2 + N = 2O + N$	7.00×10^{13}	0	59500

2.3. Граничные условия и учет каталитичности поверхности

На твердых границах ставятся условия прилипания для скорости. Постановка граничных условий для температуры и концентраций зависит от типа рассматриваемой поверхности. В расчетах на внешних твердых границах расчетной области (стенки барокамеры) ставились граничные условия Неймана, что соответствует адиабатической химически нейтральной поверхности. Граничные условия на выходной границе задавались методом характеристик, обеспечивая свободный выход потока с постоянным давлением на бесконечности, при этом скоростью вычислялась из соотношения Римана. На входной границе задавалась скорость, направленная по нормали к границе, а давление рассчитывалось методом характеристик.

На твердых поверхностях обтекаемого тела в расчетах задавалась фиксированная температура, что соответствует используемым в экспериментах водоохлаждаемым моделям. Другим предельным случаем может служить задание адиабатических стенок модели, или же определение температуры поверхности из условий равновесия падающего теплового потока и радиационного теплового потока, излучаемого поверхностью при заданной степени черноты.

Для химически нейтральных (некаталитических) поверхностей граничные условия на поверхности имеют вид нулевого диффузионного потока по нормали к поверхности (например, на торце модели, закрепленной вдоль оси симметрии, это условие имеет вид $J_i^z = 0$. В пренебрежении эффектов термодиффузии это эквивалентно условиям Неймана для всех концентраций, $\partial y_i / \partial z|_{z=z_0} = 0$ (где z_0 – координата торца модели).

Для каталитических поверхностей постановка граничных условий является более сложной, поскольку для участвующих в реакциях рекомбинации атомов и молекул необходимо задавать стехиометрическое соотношение между молярными потоками на стенке, так чтобы суммарный поток элемента оказался равным нулю. В этом случае для атомов, рекомбинирующих на стенке с образованием молекул (рассматривались реакции $O + O \rightarrow O_2$ и $N + N \rightarrow N_2$), задается скорость V_i^w , определяющая массовый диффузионный поток атомов на стенке $J_i^w = \rho_w y_i^w V_i^w$ (где ρ_w – плотность газа на стенке; y_i^w – массовая доля на стенке).

Эта скорость определяется эффективным коэффициентом рекомбинации γ , который принимался одинаковым для атомов кислорода и азота

$$V_i^w = -\frac{2\gamma}{2-\gamma} \sqrt{\frac{R^0 T_w}{2\pi\mu_i}} \quad (10)$$

(знак минус означает, что скорость направлена к поверхности, T_w – температура стенки). Одновременно находится и диффузионная скорость молекул, покидающих стенку: для приведенных выше бимолекулярных реакций $x_{O_2}^w V_{O_2}^w = -\frac{1}{2} x_O^w V_O^w$, $x_{N_2}^w V_{N_2}^w = -\frac{1}{2} x_N^w V_N^w$. Для всех компонент, не участвующих в реакциях рекомбинации, диффузионная скорость на стенке равна нулю $V_i^w = 0$.

Химический состав на поверхности находится посредством решения уравнений Стефана – Максвелла, в которые подставляются известные диффузионные скорости V_i^w , а мольные доли x_i^w находятся путем решения нелинейной (квадратичной) системы уравнений

$$\nabla x_i^w = \sum_{j=1}^N \frac{x_i^w V_j^w - x_j^w V_i^w}{D_{ij}} \quad (11)$$

После вычисления x_i^w (а, следовательно, y_i^w и ρ_w), можно определить массовые диффузионные потоки $J_i^w = \rho_w y_i^w V_i^w$ и вычислить полный тепловой поток на стенке

$$q_T = -\lambda \left. \frac{\partial T}{\partial n} \right|_w + \sum_{i=1}^N J_i^w h_i(T_w) \quad (12)$$

3. Численная реализация

Аппроксимация дифференциальных уравнений в частных производных (1)–(3) осуществляется по явной одношаговой схеме Эйлера по времени, в сочетании с расщеплением по времени – выделением в отдельный подшаг решения системы обыкновенных дифференциальных уравнений химической кинетики (9).

На этапе учета химических реакций решение осуществляется при помощи известного метода VODE [14], относящегося к семейству многошаговых неявных методов с переменными коэффициентами. Он позволяет с успехом интегрировать жесткие системы уравнений с сильно различающимися собственными значениями, что характерно для уравнений химической кинетики. Кроме того, в программной реализации VODE есть возможность использовать вычисление якобиана путем численного дифференцирования, что значительно упрощает использование соответствующих процедур (необходимо реализовать только подпрограмму, вычисляющую правую часть системы ОДУ).

Для вычисления «невязких» (конвективных) потоков F и G в (2) используется схема HR-SLAU2 [15], относящаяся к широкому семейству схем AUSM [16]. В ней используется масштабирование искусственной (вводимой для стабилизации решения) вязкости по числу Маха, поэтому данная схема относится к категории схем, пригодных для любых скоростей потока (“all-speed”). Это позволяет преодолеть известную проблему многих газодинамических схем, которые с успехом позволяют рассчитывать сверхзвуковые течения, но сильно искажают решение при переходе к малым числам Маха вследствие того, что искусственная вязкость пропорциональна скорости звука, становясь чрезмерно большой при малых скоростях. Достоинством схемы HR-SLAU2 [15] является отсутствие каких-либо параметров типа минимального числа Маха, выбор которых может быть неочевиден.

Аппроксимация членов диффузионного типа (потоков F^D и G^D в (3)) осуществляется по явной схеме с центральными разностями. Расчет диффузионных потоков производится

также по явной схеме путем решения системы уравнений Стефана – Максвелла с прямым обращением возникающей матрицы.

Отметим, что при численной реализации пространственные члены всех уравнений (2), (3), кроме уравнения для радиальной компоненты импульса, были приведены к дивергентному виду в цилиндрической системе координат, что обеспечило хорошие консервативные свойства полученной схемы. Радиальная компонента импульса была аппроксимирована в не-дивергентном виде для совместимости с записью потоков в схеме HR-SLAU2. Программа реализована на языке FORTRAN95.

4. Результаты

4.1. Геометрия и параметры расчета

Расчеты проводились в области размером 400×1200 мм, изображенной на рис. 1. Левая граница рисунка соответствует оси симметрии, правая – внешней границе барокамеры плазмотрона. Испытываемая модель представляла собой цилиндр диаметром 50 мм с плоским торцом, закрепленный соосно с камерой на расстоянии 50 мм от входного отверстия.

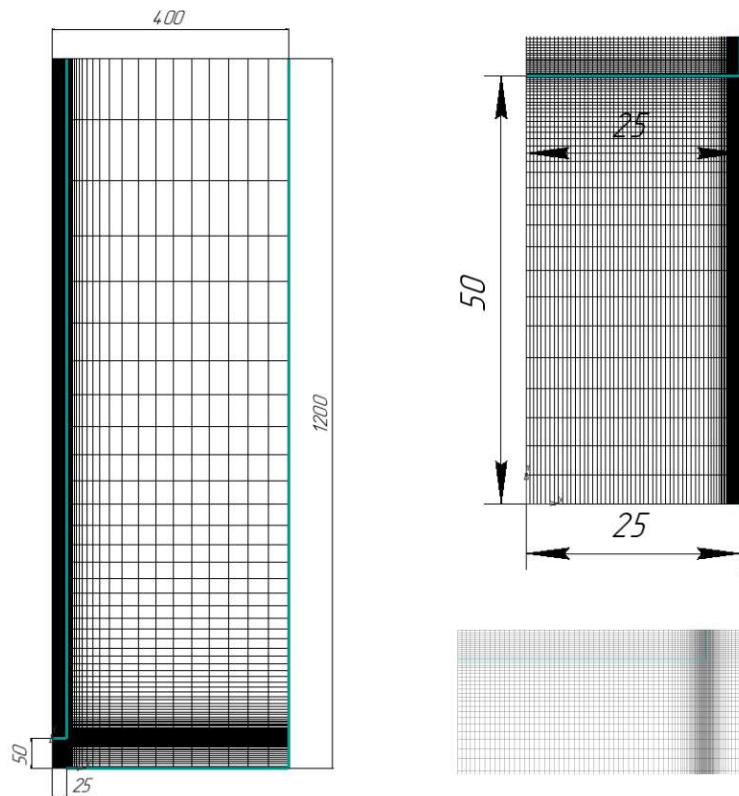


Рис. 1. Расчетная область барокамеры плазмотрона. Зона от входа до поверхности показана в увеличенном масштабе

В расчетной области вводилась прямоугольная неравномерная сетка размером 132×111 со сгущением по оси к поверхности образца и по радиусу в слое смещения (см. рис. 1). Минимальный размер ячейки у торца цилиндрической модели составлял 0.2 мм.

4.2. Обтекание цилиндрического образца

На рис. 2 показаны рассчитанные поля температуры (слева) и вертикальной компоненты скорости (справа), соответствующие стационарному обтеканию цилиндрической модели диаметром 50 мм, помещенной на расстоянии 40 мм от входного сечения. Температура

газа на оси составляла 7600 К, скорость потока 315 м/с, диссоциированный воздух имел равновесный состав при давлении 4930 Па, диаметр входного сопла 80 мм. Приведенные распределения демонстрируют торможение газа перед торцом модели, его растекание вдоль торца и дальнейшее течение вдоль цилиндрической образующей. Видно образование тонкого температурного пограничного слоя на торце модели, в котором на расстоянии порядка 1 мм температура падает от 5000 К до 300 К. Именно в этом пограничном слое можно ожидать наиболее сильного проявления эффектов неравновесности химического состава диссоциированного воздуха.

Приведенные на рис. 2 поля являются типичными для всех проведенных в настоящей работе расчетов, в том числе для верификационных расчетов, представленных в следующем разделе, где модель помещалась несколько выше по потоку – на расстоянии 50 мм.

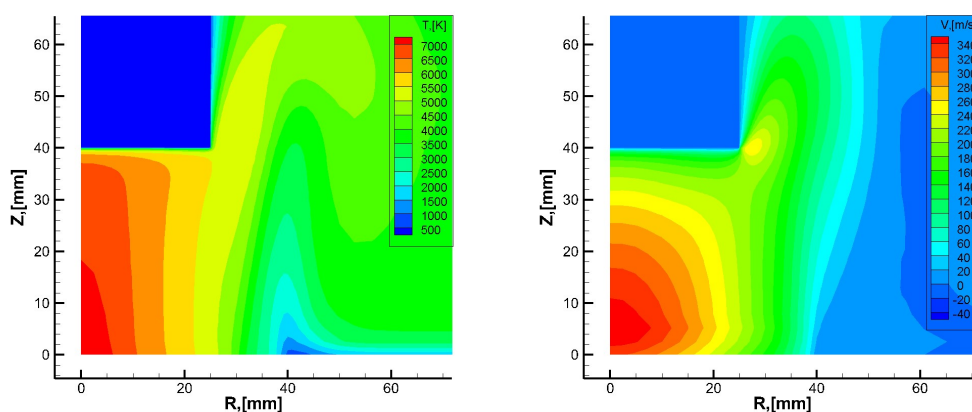


Рис. 2. Поля температуры (слева) и осевой компоненты скорости при обтекании цилиндрического образца дозвуковым потоком диссоциированного воздуха

4.3. Сравнение с расчетами по равновесной модели

Для верификации разработанного кода и выявления степени влияния неравновесности диссоциированного воздуха на характеристики обтекания были проведены сравнительные расчеты задачи на основе неравновесной и равновесной моделей химического состава. Расчеты обтекания равновесным диссоциированным воздухом осуществлялись на основе программы Beta [17], разработанной в лаборатории взаимодействия плазмы и излучения с материалами ИПМех РАН и позволяющей осуществлять расчетное сопровождение экспериментов на дозвуковых режимах течения.

В расчетах параметры потока на входной границе задавались исходя из результатов моделирования индукционного канала плазмотрона ВГУ-4. Максимальная температура на входе составляла $T_{\max} = 8200$ К, скорость на оси $V_z = 640$ м/с, давление в барокамере $P = 4620$ Па, диаметр входного сечения 50 мм. Более подробно входные граничные условия представлены на рис. 3 и 4, где приведены радиальные профили вдоль среза канала для скорости, температуры, химического состава и локального числа Маха. Из рис. 4 видно, что по мере приближения к краю входного отверстия барокамеры химический состав стремится к недиссоциированному воздуху с $x_{N_2} = 0.79$ и $x_{O_2} = 0.21$. Отметим, что, несмотря на высокую скорость потока на входе, течение является дозвуковым, число Маха, оцененное для полностью диссоциированного воздуха, на оси струи составляет 0.23.

В данных сравнительных расчетах рассматривалась цилиндрическая модель радиусом 25 мм с водоохлаждаемой каталитической поверхностью, имеющей постоянную температуру $T_w = 300$ К, коэффициент рекомбинации принимался равным $\gamma = 1$. Модель помещалась на расстоянии 50 мм от входного сечения.

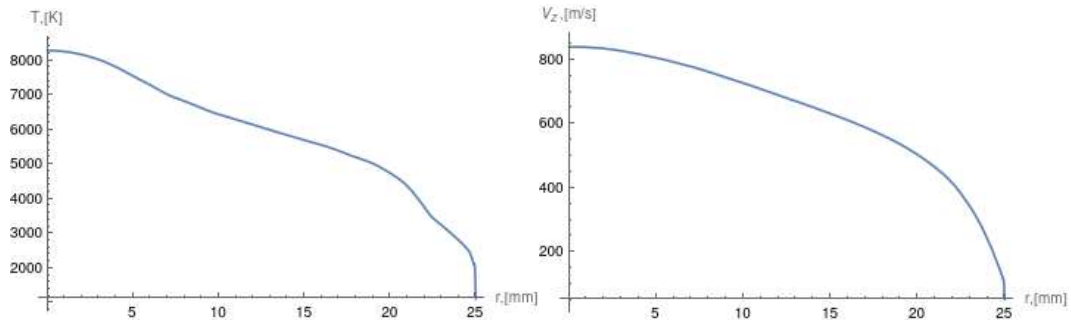


Рис. 3. Распределение температуры (слева) и осевой компоненты скорости вдоль радиуса на входе в барокамеру (справа)

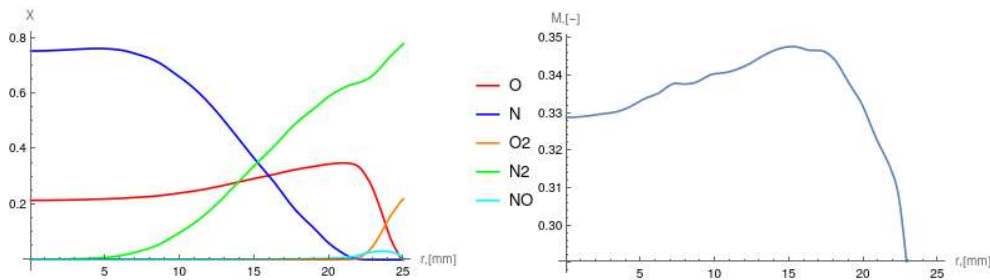


Рис. 4. Распределение мольных долей компонент диссоциированного воздуха (слева) и локальное число Маха во входящем потоке (справа)

Расчеты показали, что в целом обе программы дают схожую качественную картину обтекания, аналогичную представленной на рис. 2. Для количественного сравнения результатов расчетов анализировались распределения различных параметров вдоль оси симметрии ($r = 0$) на участке от входного сечения до передней критической точки модели, находящейся на расстоянии 50 мм. Кроме того, сопоставлялись радиальные профили параметров течения и концентраций компонент в радиальных сечениях $z = 10, 20, 30$ и 40 мм.

На рис. 5 показаны осевые распределения мольных долей атомов N и O, температуры и осевой компоненты скорости, полученные в расчетах указанными программами. Видно, что вдали от тела (во входящем потоке, до расстояния порядка 45 мм) наблюдается хорошее (в пределах 5%) совпадение профилей температуры и мольных долей атомарного кислорода и азота, в то время как для осевой скорости наблюдаются более существенные отличия. По мере приближения к поверхности различия в профилях нарастают, в особенности это проявляется в пограничном слое, в непосредственной близости от передней критической точки. Расчет с учетом химической неравновесности дает более высокий градиент температуры у поверхности, а концентрации радикалов O и N по мере проникновения в погранслои меняются медленнее. Это свидетельствует о влиянии неравновесности химического состава, обусловленной конечной скоростью химических реакций.

При учете конечности скоростей реакции понижение температуры приводит к уменьшению скоростей химических реакций, т.е. «замораживанию» химического состава. Из рис. 5 видно, что температура при приближении к модели меняется медленнее, чем в равновесном случае, и только у самой поверхности она стремится к температуре стенки $T_w = 300$ К. Мольные доли атомов азота качественно имеют такое же поведение – за счет конечности скорости реакций атомы не успевают рекомбинировать и достигают практически самой поверхности. Мольные доли атомов кислорода имеют небольшой рост при приближении к поверхности, но все равно ведут себя более «инерционно», чем при наличии химического равновесия.

Осевая скорость начинает заметно меняться практически с самого начала, что может быть вызвано отличиями в распределениях давления. Однако важный верификационный результат состоит в том, что на участках, где влияние холодной поверхности слабо и температуры являются высокими, полученные в расчетах по обеим моделям профили температуры и

концентраций практически совпадают как при конечных, так и бесконечных (предполагаемых в равновесной модели) скоростях реакций.

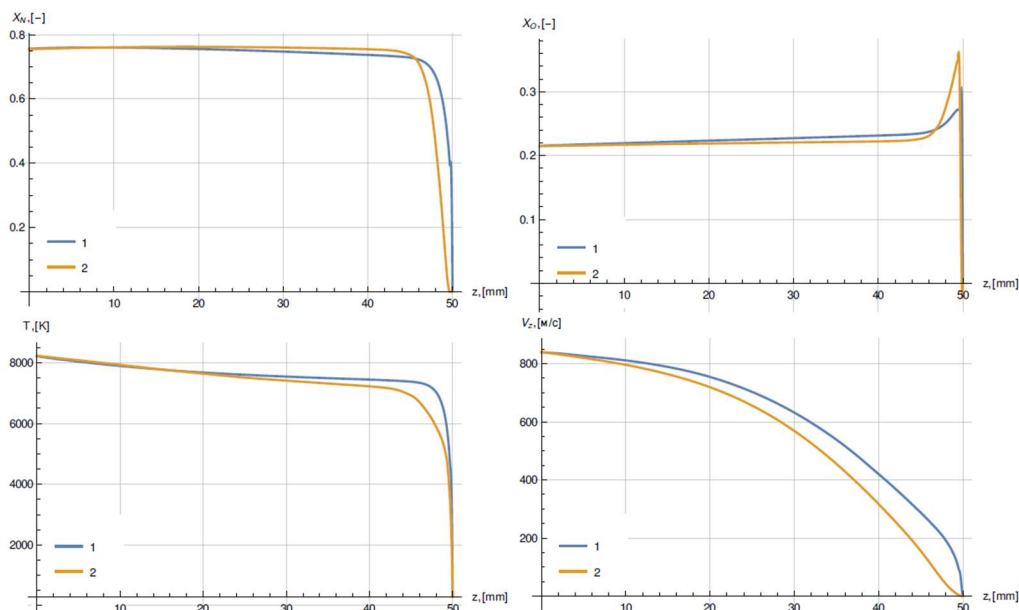


Рис. 5. Мольные доли x_O , x_N , температура T и осевая скорость V_z на оси потока: 1 – текущий расчет, 2 – химически равновесный расчет

На рис. 6 представлены радиальные распределения температуры и осевой компоненты скорости, полученные в расчетах по обеим моделям, в четырех равноотстоящих радиальных сечениях между входом и передним торцом цилиндрической модели. Кривые, соответствующие определенной модели, выделены цветом и нумерацией, а закрашенная область между соответствующими кривыми демонстрирует различие между ними.

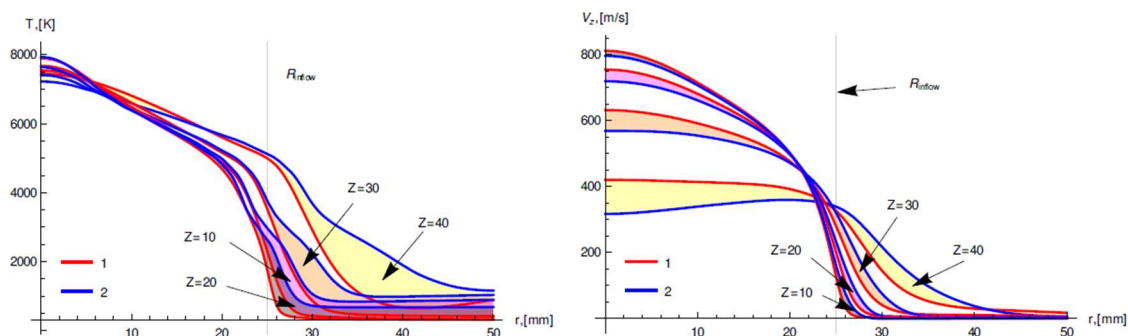


Рис. 6. Температура T и осевая скорость V_z вдоль радиуса в сечениях $z = 10, 20, 30$ и 40 мм: 1 – текущий расчет, 2 – химически равновесный расчет, R_{inflow} – радиальный размер источника струи диссоциированного воздуха на входной границе

Из результатов сравнения температуры на рис. 6 можно сделать вывод о влиянии химической неравновесности на течение в ядре струи и в слое смешения на ее границе. В ядре струи профили температуры, рассчитанные по равновесной и неравновесной моделям, достаточно хорошо совпадают. Различия в профилях температуры в слое смешения нарастают по мере удаления от входного сечения и приближения к торцу модели. При этом видно, что температура в равновесном расчете спадает с радиальной координатой более плавно, что в первую очередь связано с дополнительным выделением энергии при рекомбинации атомов. В неравновесном же расчете падение температуры при смешении с внешним, более холодным газом приводит к «замораживанию» состава и существенному замедлению рекомбинации атомов.

На рис. 7 представлены радиальные распределения мольных долей атомарного и молекулярного кислорода и азота, демонстрирующие указанные различия. В особенности сильно они проявляются для атомарного кислорода – см. соответствующие графики для x_O и x_{O_2} . Для атомарного же азота различия оказываются не столь значительными, что свидетельствует о практически равновесном характере его рекомбинации в потоке.

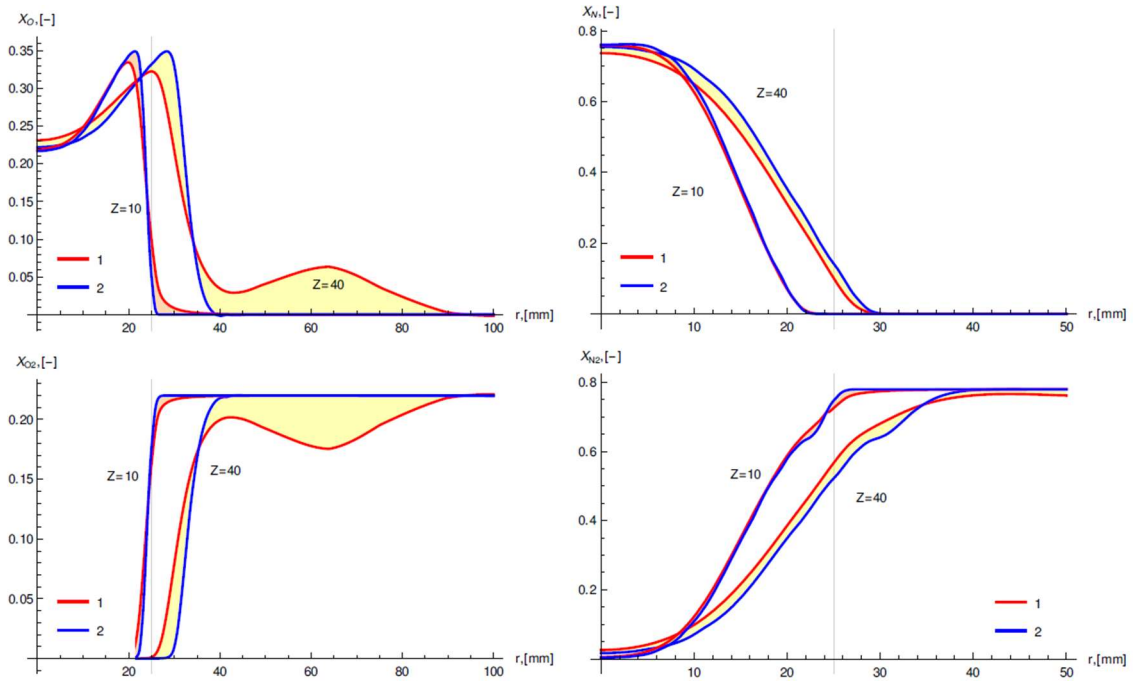


Рис. 7. Мольные доли $x_O, x_N, x_{O_2}, x_{N_2}$ вдоль радиуса на расстоянии $z = 10$ и 40 мм: 1 – текущий расчет, 2 – химически равновесный расчет

Из рис. 6 и 7 видно, что эффекты неравновесности усиливаются по мере продвижения вниз по течению и приближению к холодной поверхности модели. При этом становится ощутимым радиальное отклонение потока, обтекающего тело, что также приводит к росту толщины слоя смешения, одновременно возрастает и зона отличия температур.

5. Заключение

Представленные в работе расчетные результаты по моделированию обтекания цилиндрического тела потоком химически неравновесного диссоциированного воздуха и их сравнение с результатами аналогичного моделирования на основе равновесной модели показывают, что влияние конечной скорости протекания химических реакций наиболее сильно проявляется в областях потока, связанных с резким изменением температуры – вблизи поверхности обтекаемого тела, а также в слое смешения на границе горячей струи и более холодного газа.

Полученное хорошее совпадение результатов по равновесной и неравновесной моделям в горячем диссоциированном воздухе свидетельствует о правильности работы созданного программного обеспечения в части расчетов газодинамики дозвуковых реагирующих течений. Дальнейшее использование вычислительной модели и созданного программного обеспечения будет направлено на исследования обтекания плазмой тел с различной степенью каталитичности поверхности применительно к условиям плазмотрона ВГУ-3 ИПМех РАН. В частности, при исследовании сверхзвуковых течений внимание будет уделяться недорасширенным струям, создаваемым коническими сходящимися соплами, используемыми в ВГУ-3 при испытаниях образцов.

Благодарности и ссылки на гранты

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ №19-31-90114.

Литература

1. Гордеев А.Н., Колесников А.Ф. Высокочастотные индукционные плазмотроны серии ВГУ. Актуальные проблемы механики. Физико-химическая механика жидкостей и газов. 2010. С. 151–177.
2. Сахаров В.И. Численное моделирование течений в индукционном плазмотроне и теплообмена в недорасширенных струях воздуха для условий экспериментов на установке ВГУ-4 (ИПМех РАН)//Физико-химическая кинетика в газовой динамике. 2007. Т. 5. <http://chemphys.edu.ru/issues/2007-5/articles/38/>
3. Гордеев А.Н., Колесников А.Ф., Сахаров В.И. Экспериментальное и численное исследование теплообмена высокочастотных недорасширенных струй воздуха с цилиндрическими моделями // Изв. РАН. МЖГ. 2018. №5. С. 125–133.
4. Колесников А.Ф., Гордеев А.Н., Васильевский С.А. Эффекты каталитической рекомбинации на поверхности металлов и кварца для условий входа в марсианскую атмосферу // Теплофизика высоких температур. 2016. Т. 54. №1. С. 32–40.
5. Degrez G., Vanden Abeele D., Barbante P., Bottin B. Numerical simulation of inductively coupled plasma flows under chemical non equilibrium // International Journal of Numerical Methods in Heat and Fluid Flow. 2004. V. 14(4). Pp. 538–558.
6. Rini, P., Garcia, A., Magin, T., Degrez, G. Numerical simulation of CO₂ non-equilibrium flows with catalyzed surface reactions // Journal of Thermophysics and Heat Transfer. 2004. V. 18. Pp. 114–121.
7. Брызгалов А.И. Численное моделирование течения термически и химически неравновесного воздуха за фронтом ударной волны // Вестник МГТУ им. Баумана. 2021. №3(96). С. 94–111.
8. Под ред. Глушко В.П. Термодинамические свойства индивидуальных веществ. Справочное издание в 4-х томах. М.: Наука, 1979.
9. Андриатис А.В., Жлуктов С.А., Соколова И.А. Транспортные коэффициенты смеси воздуха химически неравновесного состава // Математическое моделирование. 1992. №1(4). С. 44–64.
10. Wilke C.R. A viscosity equation for gas mixtures // Journal of Chemical Physics. 1950. V. 18(4). Pp. 517–519.
11. Laricchiuta A., Bruno D., Capitelli M. High temperature Mars atmosphere. Part I: transport cross sections // The European Physical Journal D. 2009. V. 54. Pp. 607–612.
12. Колесников А.Ф., Тирский Г.А. Уравнения гидродинамики для частично ионизованных многокомпонентных смесей газов с коэффициентами переноса в высших приближениях. В кн.: Молекулярная газодинамика. М.: Наука, 1982. С. 20–44.
13. Dunn M.G., Kang S.W. Theoretical and Experimental Studies of Reentry Plasmas // NASA CR-2232, 1983.
14. Brown, P.N., Byrne, G.D., Hindmarsh, A.C. VODE: A Variable-Coefficient ODE Solver // SIAM J. Sci. Stat. Comput. 1989. V. 10. Pp. 1038–1051.
15. Kitamura, K., Hashimoto, A. Reduced dissipation AUSM-family fluxes: HR-SLAU2 and HR-AUSM+ for high resolution unsteady flow simulations // Comput. Fluids. 2016. V. 126. Pp. 41–57.
16. Liou, M.S. The evolution of AUSM schemes // Def. Sci. J. 2010. V. 60. Pp. 606–613.
17. Соколова И.А., Васильевский С.А., Андриатис А.В. Описание пакета программ SoVa, предназначенного для расчета равновесного состава и коэффициентов переноса низкотемпературной плазмы в высших приближениях метода Чепмена – Энскога//Физико-химическая кинетика в газовой динамике. 2005. Т. 3. <http://chemphys.edu.ru/issues/2005-3/articles/81/>

References

1. Gordeev, A. N., Kolesnikov, A. F., “Vysokochastotnye indukcionnye plazmotrony serii VGU. Aktual'nye problemy mehaniki,” *Fiziko-himicheskaja mehanika zhidkostej i gazov*, 2010, pp. 151–177.
2. Sakharov, V. I., “CFD flows modelling in inductive plasmatron and heat transfer in under-expanded air jets under IPG-4 (IPM RAS) facility test conditions,” *Physical-Chemical Kinetics in Gas Dynamics*, Vol. 5, 2007. <http://chemphys.edu.ru/issues/2007-5/articles/38/>
3. Gordeev, A. N., Kolesnikov, A. F., Saharov, V. I., “Jeksperimental'noe i chislennoe issledovanie teploobmena vysokoventil'nyh nedorasshirenyh struj vozduha s cilindricheskimi modeljami,” *Izv. RAN. MZhG*, Vol. 5, 2018, pp. 125–133.
4. Kolesnikov, A. F., Gordeev, A. N., Vasil'evskij, S. A., “Jeffekty kataliticheskoj rekombinacii na poverhnosti metallov i kvarca dlja uslovij vhoda v marsianskuju atmosferu,” *Teplofizika vysokih temperature*, Vol. 54, No. 1, 2016, pp. 32–40.
5. Degrez, G., Vanden Abeele, D., Barbante, P., Bottin, B., “Numerical simulation of inductively coupled plasma flows under chemical non equilibrium,” *International Journal of Numerical Methods in Heat and Fluid Flow*, V. 14, No. 4, 2004, pp. 538–558.
6. Rini, P., Garcia, A., Magin, T., Degrez, G., “Numerical simulation of CO₂ non-equilibrium flows with catalyzed surface reactions,” *Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, Vol. 18, 2004, pp. 114–121.
7. Bryzgalov, A. I., “Chislennoe modelirovanie techenija termicheski i himicheski neravnovesnogo vozduha za frontom udarnoj volny,” *Vestnik MGTU im. Bauman*, Vol. 3, No. 96, 2021, pp. 94–111.
8. Pod red. Glushko, V. P. *Termodinamicheskie svojstva individual'nyh veshhestv. Spravochnoe izdanie v 4-h tomah*, M.: Nauka, 1979.
9. Andriatis, A. V., Zhluktov, S. A., Sokolova, I. A., “Transportnye koeficienty smesi vozduha himicheskogo neravnovesnogo sostava,” *Matematicheskoe modelirovanie*, Vol. 1, No. 4, 1992, pp. 44–64.
10. Wilke, C. R., “A viscosity equation for gas mixtures,” *Journal of Chemical Physics*, Vol. 18, No. 4, 1950, pp. 517–519.
11. Laricchiuta, A., Bruno, D., Capitelli, M., “High temperature Mars atmosphere. Part I: transport cross sections,” *The European Physical Journal D*, Vol. 54, 2009, pp. 607–612.
12. Kolesnikov, A. F., Tirskij, G. A., *Uravnjenja gidrodinamiki dlja chastichno ionizovannyh mnogokomponentnyh smesej gazov s koeficientami perenosa v vysshih priblizhenijah*, V kn.: Molekuljarnaja gazodinamika. M.: Nauka, 1982, pp. 20–44.
13. Dunn, M. G., Kang, S. W., “Theoretical and Experimental Studies of Reentry Plasmas,” NASA CR-2232, 1983.
14. Brown, P. N., Byrne, G. D., Hindmarsh, A. C., “VODE: A Variable-Coefficient ODE Solver,” *SIAM J. Sci. Stat. Comput.*, Vol. 10, 1989, pp. 1038–1051.
15. Kitamura, K., Hashimoto, A., “Reduced dissipation AUSM-family fluxes: HR-SLAU2 and HR-AUSM+-up for high resolution unsteady flow simulations,” *Comput. Fluids*, Vol. 126, 2016, pp. 41–57.
16. Liou, M. S., “The evolution of AUSM schemes,” *Def. Sci. J.*, Vol. 60, 2010, pp. 606–613.
17. Sokolova, I. A., Vasil'evskij, S. A., Andriatis, A. V., “Opisanie paketa programm SoVa, prednaznachennogo dlja rascheta ravnovesnogo sostava i koeficientov perenosa nizektemperaturnoj plazmy v vysshih priblizhenijah metoda Chepmana–Jenskoga,” *Physical-Chemical Kinetics in Gas Dynamics*, Vol. 3, 2005. <http://chemphys.edu.ru/issues/2005-3/articles/81/>

Статья поступила в редакцию 12 сентября 2021 г.