03 Моделирование характеристик системы сверхзвуковых струй в атмосфере углекислого газа

© Ю.Н. Дерюгин¹, Д.К. Зеленский¹, Р.Н. Жучков¹, Я.В. Емельянова¹, Г.А. Павлов², А.Л. Смирнов^{2,¶}

¹ Российский федеральный ядерный центр — Всероссийский научно-исследовательский институт экспериментальной физики, Саров, Россия

² Институт проблем химической физики РАН, Черноголовка, Московская обл., Россия

[¶] E-mail: asm@icp.ac.ru

Поступило в Редакцию 2 августа 2018 г.

Выполнено моделирование структуры и процессов тепломассообмена в системе выхлопных струй тормозных двигателей космических аппаратов при спуске в атмосфере Марса. Учтено, что система струй представляет собой химически реагирующую газовую среду, образованную выхлопными газами и атмосферой планеты, находится при достаточно высоких температурах и характеризуется развитой турбулентностью. Для реалистичных условий получены расчетные поля полного набора параметров среды, образованной системой взаимодействующих сверхзвуковых выхлопных струй тормозных двигателей спускаемого космического аппарата в атмосфере планеты.

DOI: 10.21883/PJTF.2018.24.47031.17489

Моделирование структуры и процессов тепломассообмена в системе выхлопных струй тормозных двигателей космических аппаратов при движении в атмосфере Марса весьма актуально в связи с планами по исследованию этой планеты, в частности с проектом "ЭкзоМарс". Основная проблема при этом связана с необходимостью учета многих определяющих факторов, поскольку при разлете взаимодействующих сверхзвуковых струй многокомпонентная химически реагирующая газовая среда, образованная выхлопными газами и атмосферой планеты, может находиться при достаточно высоких температурах (> 1000 K) и характеризоваться развитой турбулентностью.

59

В настоящей работе выполнено трехмерное моделирование структуры четырех взаимодействующих выхлопных струй, исходящих из сопел тормозных двигателей. Параметры струй на срезе сопла и параметры окружающего газа считаются заданными (см. далее). Моделирование структуры и процессов тепломассообмена в системе струй основано на модели среды, состоящей из 19 компонентов, между которыми протекает 21 химическая реакция (константы реакций в форме Аррениуса взяты из [1]). Поскольку в поле течения реализуются невысокие давления (доли атмосферы), "ламинарные" переносные и термодинамические характеристики многокомпонентной "идеальной" газовой среды определены по [2,3]. Большая часть поля течения системы струй характеризуется развитой турбулентностью. При моделировании турбулентности используется несколько подходов, среди которых выделяются три основных: прямое численное моделирование (direct numerical simulation, DNS), моделирование крупных вихрей (large eddy simulation, LES) и решение осредненных по Рейнольдсу уравнений Навье-Стокса (Reynolds-averaged Navier-Stokes, RANS). В настоящее время чаще используются полуэмпирические RANS-модели турбулентности, что объясняется их быстрой сходимостью, устойчивостью к заданию краевых условий и вполне приемлемыми результатами сравнения с имеющейся экспериментальной информацией [4]. Далее для определения турбулентных характеристик (например, вязкости) используются однопараметрическая дифференциальная модель Спаларта-Алмареса (SA-модель) [5] и двухпараметрическая дифференциальная модель Ментера (SST-модель) [6].

Система уравнений, описывающая поле течения струй, взаимодействующих между собой и с атмосферой, состоит из уравнений сохранения массы, импульса и энергии, сформулированных с учетом развитой турбулентности и химической неравновесности. Система дополнена уравнением для турбулентной вязкости, SA- и SST-моделями турбулентности, граничными условиями и схемой неравновесных химических реакций. Исходная система уравнений в векторной форме имеет вид

$$\frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial t} + \nabla (\mathbf{F} - \mathbf{G}) = \mathbf{H},\tag{1}$$

где Q — вектор консервативных переменных, F — вектор конвективных потоков, G — вектор вязких потоков, H — вектор источников. В качестве граничных условий заданы расположения и параметры струй на начальных участках, а также параметры среды CO_2 на бесконечности.

Приведем схему реакций в поле течения струй, определяющих вектор источников Н:

61

1.
$$\operatorname{CO}_{2} + M_{1} \xleftarrow{K_{1}}{K_{-1}} \operatorname{CO} + \operatorname{O} + M_{1}$$
, 2. $\operatorname{CO} + M_{2} \xleftarrow{K_{2}}{K_{-2}} \operatorname{C} + \operatorname{O} + M_{2}$,
3. $\operatorname{N}_{2} + M_{3} \xleftarrow{K_{3}}{K_{-3}} 2\operatorname{N} + M_{3}$, 4. $\operatorname{O}_{2} + M_{4} \xleftarrow{K_{4}}{K_{-4}} 2\operatorname{O} + M_{4}$,
5. $\operatorname{NO} + M_{5} \xleftarrow{K_{5}}{K_{-5}} \operatorname{N} + \operatorname{O} + M_{5}$, 6. $\operatorname{CO} + \operatorname{N} \xleftarrow{K_{6}}{K_{-6}} \operatorname{NO} + \operatorname{C}$,
7. $\operatorname{CO} + \operatorname{CO} \xleftarrow{K_{7}}{K_{-7}} \operatorname{CO}_{2} + \operatorname{C}$, 8. $\operatorname{CO} + \operatorname{O} \xleftarrow{K_{8}}{K_{-8}} \operatorname{O}_{2} + \operatorname{C}$,
9. $\operatorname{N}_{2} + \operatorname{O} \xleftarrow{K_{9}}{K_{-9}} \operatorname{NO} + \operatorname{O}$, 10. $\operatorname{NO} + \operatorname{CO} \xleftarrow{K_{10}}{K_{-10}} \operatorname{CO}_{2} + \operatorname{N}$,
11. $\operatorname{NO} + \operatorname{O} \xleftarrow{K_{11}}{K_{-11}} \operatorname{O}_{2} + \operatorname{N}$, 12. $\operatorname{CO}_{2} + \operatorname{O} \xleftarrow{K_{12}}{K_{-12}} \operatorname{O}_{2} + \operatorname{CO}$,
13. $\operatorname{H}_{2} + M \xleftarrow{K_{13}}{K_{-13}} 2\operatorname{H} + M$, 14. $\operatorname{H} + \operatorname{OH} + M \xleftarrow{K_{14}}{K_{-14}} \operatorname{H}_{2}\operatorname{O} + M$,
15. $\operatorname{O}_{2} + \operatorname{H} \xleftarrow{K_{15}}{K_{-15}} \operatorname{OH} + \operatorname{O}$, 16. $\operatorname{CO} + \operatorname{OH} \xleftarrow{K_{16}}{K_{-16}} \operatorname{H} + \operatorname{CO}_{2}$,
17. $\operatorname{N} + \operatorname{O} \xleftarrow{K_{17}}{K_{-17}} \operatorname{NO}^{+} + e$, 18. $\operatorname{O} + \operatorname{O} \xleftarrow{K_{18}}{K_{-18}} \operatorname{O}_{2}^{+} + e$,
19. $\operatorname{C} + \operatorname{O} \xleftarrow{K_{19}}{K_{-19}} \operatorname{CO}^{+} + e$, 20. $\operatorname{O} + e \xleftarrow{K_{20}}{K_{-20}} \operatorname{O}^{+} + 2e$,
21. $\operatorname{C} + e \xleftarrow{K_{21}}{K_{-21}} \operatorname{C}^{+} + 2e$.

Вычислительные алгоритмы расчета параметров поля течения основаны на методе расщепления по физическим процессам, конечнообъемном методе на неструктурированных сетках и неявном методе интегрирования. Счетный шаг расщепляется на три этапа. На первом этапе решаются уравнения Навье-Стокса в предположении замороженных турбулентности и кинетики химических реакций. Уравнения Навье-Стокса аппроксимированы с помощью метода конечного объема на неструктурированной сетке. Полученная система нелинейных разностных уравнений решается итерационным методом Ньютона относительно приращения решения. В разностной схеме явная аппроксимация конвективных потоков основана на подходе Годунова [7] второго порядка точности и приближенном методе Роу [8] для решения задачи Римана о распаде разрыва. Чтобы повысить порядок аппроксимации до второго, проводится реконструкция решения, заключающаяся в определении параметров слева и справа от грани расчетной ячейки. Реконструкция проводится для примитивных параметров $\varphi = \{\rho, u, v, w, p\}$. Значение градиента поля $(\operatorname{grad} \varphi)_p$, используемое при реконструкции, опреде-



Поле значений температуры на срезе в системе выхлопных струй тормозных двигателей. Встроены таблицы значений параметров поля течения в расчетных точках A, B и C: a — в придонной области космического аппарата (точка A), b — в начале зоны смешения выхлопных струй (точка B), c — в середине зоны смешения выхлопных струй (точка B), c — в середине зоны смешения выхлопных струй (точка C). Значения параметров (плотность R, давление P, температура T) даны в системе СИ, концентрации компонентов — в массовых долях, координаты по осям — в метрах.

ляется методом наименьших квадратов [9] с использованием ограничителя потока в соответствии с [10]. Неявная аппроксимация невязкого потока в левой части уравнения для приращения консервативных переменных *Q* связана с расщеплением потоков в зависимости от собственных чисел матрицы Якоби. Конвективные потоки на внешних гранях определяются в зависимости от поставленных граничных усло-



вий. Недостающие граничные условия на внешних границах расчетной области дополняются соотношениями для характеристик, приходящих на границу из расчетной области [11]. Для явного и неявного определения диффузионных потоков используется центрально-разностная аппроксимация. Смешанные производные в центре грани определяются интерполяцией от компонент градиентов, определенных в центрах ячеек. При решении уравнений Навье–Стокса для течений среды, состоящей из N компонентов, коэффициентами разностных уравнений являются квадратные матрицы размерности $((5 + N) \times (5 + N))$. Для решения системы линейных алгебраических уравнений используется алгебраический многосеточный параллельный решатель AMG [12].



На втором этапе решаются уравнения химической кинетики [13,14]. Численный метод решения уравнений химической кинетики основан на разностной схеме Розенброка [15]. При расчете химических реакций в турбулентном потоке производится оценка времени турбулентного смешения по турбулентным параметрам потока с помощью STT-модели турбулентности. В качестве скорости реакции выбирается минимальная скорость между скоростью турбулентного смешения и скоростью самой реакции.

На заключительном (третьем) этапе определяется изменение турбулентных параметров потока за счет генерации и диссипации турбулентности. В общем случае каждое из уравнений модели турбулентности

сводится к решению обыкновенных дифференциальных уравнений. Входящие в определение генерационного и диссипативного членов уравнения значения градиента от параметров потока вычисляются в центре ячейки по формуле Грина—Гаусса. Уравнение аппроксимируется явно-неявной разностной схемой, которая обеспечивает положительность решения. Данная методика реализована в рамках пакета программ ЛОГОС [16].

В работе выполнено трехмерное моделирование структуры четырех взаимодействующих выхлопных струй, исходящих из сопел тормозных двигателей. Для модельного расчета выбраны следующие довольно реалистичные условия: диаметр сопел на срезе 0.2 m, сопла равномерно расположены на окружности диаметром 1.2 m, струи на срезе сопел состоят из смеси газов при давлении 4450 Ра, температуре 337 К, массовой скорости 2275 m/s, числе Маха 4.5, мольной доле H₂ — 0.364, $N_2 - 0.272$, $NH_3 - 0.364$. Установившееся течение около летательного аппарата определялось в результате решения нестационарных уравнений с неизменными граничными параметрами набегающего потока при стремлении $t \to \infty$. Расчеты проводились в обращенной постановке, когда обтекаемое тело считается неподвижным. Скорость набегающего потока соответствует скорости полета аппарата, которая принималась равной 45 m/s. Параметры атмосферы (набегающего потока) следующие: давление 1000 Ра, температура 288 К. Выполнены расчеты с учетом химических реакций [1]. Результаты расчетов показаны на рисунке, где приведены расчетные поля параметров системы взаимодействующих сверхзвуковых выхлопных струй тормозных двигателей спускаемого космического аппарата в атмосфере Марса. Информация о полях параметров, в частности, является ключевой для анализа характеристик взаимодействия СВЧ-излучения с системой факелов выхлопных струй тормозных двигателей спускаемого аппарата.

Список литературы

- Troschiev Yu.V., Pavlov G.A. // Int. J. Heat Mass Transfer. 2016. V. 99.
 P. 234–242; Equist K.T., Hilles B.R., Jonston C.D., Bose D., White T.R., Mahzari M. // J. Spacecraft Rockets. 2014. V. 54. N 4. P. 1106–1124; Суржиков С.Т. // Физ.-хим. кинетика в газовой динамике. 2015. Т. 16. В. 2. С. 1–74.
- [2] Гиршфельдер Дж., Кертисс Ч., Берд Р. Молекулярная теория газов и жидкостей. М.: ИЛ, 1961. 929 с.

- [3] Алексеев Б.В. Математическая кинетика реагирующих газов. М.: Наука, 1982. 422 с.
- [4] Волков К.Н., Емельянов В.Н. Моделирование крупных вихрей в расчетах турбулентных течений. М.: Физматлит, 2008. 364 с.
- [5] Spalart P.R., Allmaras S.R. A one-equation turbulence model for aerodynamic flows // Proc. 30th Aerospace Sciences Meeting and Exhibition. Reno, Nevada, USA, 1992. Paper N AIAA 92-0439.
- [6] Menter F.R. Zonal two equation k-ω turbulence models for aerodynamic flows // Proc. 24th Fluid Dynamics Conf. Orlando, Florida, USA, 1993. Paper N AIAA 93-2906.
- [7] Годунов С.К. // Мат. сб. 1959. Т. 47(89). № 3. С. 271-306.
- [8] Roe P.L. // J. Comput. Phys. 1983. V. 49. N 6. P. 357–393.
- [9] Мелешкин Н.В., Дерюгин Ю.Н., Зеленский Д.К. Пакет программ ЛОГОС. Численное исследование точности аппроксимации дифференциальных операторов на различных сетках // Тр. XIV Междунар. конф. "Супервычисления и математическое моделирование". Саров, 2013. С. 408–415.
- [10] Venkatakrishnan V. On the accuracy of limiters and convergence to steady state solutions // Technical Report. American Institute of Aeronautics and Astronautics, 1993. Paper N AIAA-93-0880.
- [11] Giles M.B. // AIAA Journal. 1990. V. 28. N 12. P. 2050-2058.
- [12] Волков К.Н., Дерюгин Ю.Н., Емельянов В.Н., Карпенко А.Г., Козелков А.С., Тетерина И.В. Методы ускорения газодинамических расчетов на неструктурированных сетках. М.: Физматлит, 2013. 536 с.
- [13] Spalding D.B. Mixing and chemical reaction in steady confined turbulent flame // Proc. 13th Int. Symp. on Combustion. Pittsburgh, USA, 1971. P. 649– 657; Иевлев В.М. Турбулентное движение высокотемпературных сплошных сред. М.: Наука, 1975. 256 с.
- [14] Magnussen B.F. On the structure of turbulence and a generalized eddy dissipation concept for chemical reaction in turbulent flow // 19th American Institute of Aeronautics and Astronautics Aerospace Science Meeting. St. Louis, USA, 1981. DOI: 10.2514/6.1981-42
- [15] Хайрер Э., Ваннер Г. Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Жесткие и дифференциально-алгебраические задачи. М.: Мир, 1999. 685 с.
- [16] Козелков А.С., Дерюгин Ю.Н., Зеленский Д.К., Глазунов В.А., Голубев А.А., Денисова О.В., Лашкин С.В., Жучков Р.Н., Тарасова Н.В., Сизова М.А. Многофункциональный пакет программ ЛОГОС для расчета задач гидродинамики и тепломассопереноса на многопроцессорных ЭВМ: базовые технологии и алгоритмы // Тр. XII Междунар. семинара "Супервычисления и математическое моделирование". Саров, 2010. С. 215–230.