

УДК 533.5+533.6

Влияние физико-химических моделей метода прямого статистического моделирования на аэродинамические характеристики спускаемых аппаратов*

А.В. Кашковский¹, П.В. Ващенко¹, А.А. Шевырин¹, А.Н. Крылов²,
А.Ю. Скороваров², М.П. Шувалов²

¹Институт теоретической и прикладной механики
им. С.А. Христиановича СО РАН, Новосибирск

²РКК «Энергия», Королев, Московская область

E-mail: sasa@itam.nsc.ru, vashen@itam.nsc.ru

Проведены расчетные исследования аэродинамических характеристик возвращаемого аппарата «Федерация» на высоте 90 км методом прямого статистического моделирования. Показано количественное влияние ряда физико-химических моделей данного метода на аэродинамические характеристики аппарата.

Ключевые слова: метод прямого статистического моделирования (ПСМ), аэродинамика, возвращаемый аппарат, химические модели.

Введение

Наиболее популярным в настоящее время способом моделирования течений разреженного газа, в частности решения задач гиперзвуковой аэродинамики, является метод прямого статистического моделирования (ПСМ), или DSMC в англоязычной терминологии, предложенный Г. Бердом в 1963 году [1]. В России расчетами методом ПСМ занимаются группы исследователей из ВЦ РАН [2], ЦАГИ [3], ИТ СО РАН [4, 5], МФТИ [6], ЦНИИМАШ [7], ИТПМ СО РАН [8, 9]. В работах этих коллективов, а также иностранных исследователей показано, что решение методом ПСМ эквивалентно решению уравнения Больцмана.

В методе ПСМ течение газа моделируется набором большого числа частиц, которые движутся в пространстве, сталкиваются между собой и с поверхностью исследуемых моделей подобно молекулам реального газа. Процесс моделирования течения осуществляется с шагами по времени Δt , на каждом из которых процесс движения расщепляется на два основных вида: свободномолекулярный перенос и столкновения между частицами. Расчетная область разбивается на ячейки, размеры которых должны быть меньше локальной длины свободного пробега молекул. Свободномолекулярный перенос частиц

* Работа частично выполнена в рамках Программы фундаментальных научных исследований государственных академий наук на 2013–2020 годы (проект АААА-А17-117030610138-7) и гранта РФФИ № 18-38-20113. Расчеты проводились на вычислительных ресурсах Сибирского суперкомпьютерного центра и Новосибирского государственного университета.

осуществляется сдвигом на расстояние, пропорциональное их скоростям. Величина шага Δt выбирается таким образом, чтобы частицы за один шаг не пересекали более одной ячейки. Если в процессе движения частица сталкивается с поверхностью обтекаемого тела, то моделируется ее отражение в соответствии с заданным законом взаимодействия газа с поверхностью. После осуществления переноса проводится этап моделирования столкновений между частицами. Сталкиваться между собой могут только частицы, находящиеся в одной и той же ячейке. Моделирование каждого столкновения осуществляется для случайным образом выбранной пары частиц. Вероятность столкновения зависит от относительной скорости частиц без учета их взаимного расположения. В основном различные реализации метода ПСМ отличаются моделями межмолекулярных столкновений. В настоящее время в существующих вычислительных кодах как правило используются модели no-time-counter [10] (DAC [11], dsmcFoam + [12]) и схема мажорантной частоты [13] (SMILE [8, 14]).

Для метода ПСМ разработаны различные физико-химические модели, позволяющие с разной степенью точности и детализации описывать процессы и явления, происходящие в течении газа и на поверхности аппарата. Физические процессы, существенно влияющие на изменение аэродинамических характеристик (АДХ), требуют более тщательного выбора соответствующей модели. В расчетах реальных конфигураций необходимо понимать, какие модели следует использовать при заданных условиях полета, и как они могут повлиять на результаты вычисления АДХ. Очевидно, что любая модель не может обеспечить полного совпадения с реальными физическими процессами, а предсказывает их с некоторой, как правило, неизвестной, погрешностью. Поэтому при практическом использовании сравниваются результаты применения различных моделей для определения диапазона возможных значений, например, АДХ, в котором находится истинный результат.

В настоящей работе анализируются АДХ возвращаемого аппарата (ВА) «Федерация», полученные методом ПСМ с использованием комбинации нескольких физико-химических моделей. Показано качественное и количественное изменение АДХ для каждой комбинации. Космический аппарат и его тепловая защита проектируются для движения в некотором диапазоне балансировочного угла. Поэтому особенно важно знать влияние различных физико-химических моделей на изменение балансировочного угла и соответствующие ему АДХ.

Физико-химические модели

В рассматриваемом разделе представлены физико-химические модели метода ПСМ и их реализация в данном исследовании.

Модель внутренней энергии молекул

Для реализации обмена внутренней энергией молекул в методе ПСМ обычно используются две модели: с непрерывным спектром [15] и дискретным [16, 17]. Модель с непрерывным спектром наиболее простая, быстрая и легко реализуемая. Модель с дискретным спектром точнее описывает распределение внутренней энергии, но требует большего количества вычислений и объема памяти.

Обмен энергией между вращательной и поступательной энергетическими модами происходит достаточно быстро, и для вращательной моды использование дискретной и непрерывной моделей дает практически одинаковые результаты. В настоящей работе для вращательной энергии используется модель с непрерывным спектром. Обмен колебательной энергией моделируется дискретным спектром. Таким образом, для каждой частицы хранится информация о ее вращательной энергии и номер колебательного уровня.

В работе моделируются обмены между вращательной и поступательной энергиями (RT) и между колебательной и поступательной (кинетической) энергиями (VT). Обмен между вращательной и колебательной энергиями (RV) или модами колебательной энергии (VV) не моделируется, а осуществляется через поступательную энергию (RT+VT). При достаточно репрезентативной статистической выборке столкновений такое двухстадийное моделирование не приводит к искажению процесса обмена энергиями.

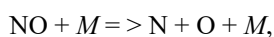
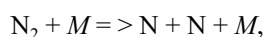
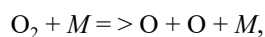
Вероятность RT и VT обменов обратно пропорциональна релаксационным числам вращательного (Z_r) и колебательного (Z_v) обменов, которые в данном исследовании зависят от температуры в ячейке [18, 19]. Температура в ячейке перевычисляется в процессе расчета. Зависимости Z_r и Z_v от температуры предварительно табулируются и хранятся.

Модель химических реакций в потоке

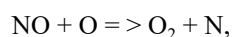
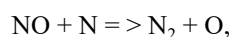
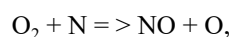
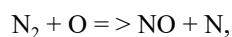
При входе в плотные слои атмосферы с гиперзвуковой скоростью перед ВА формируется головная ударная волна, за которой образуется высокотемпературный вязкий ударный слой, в котором заметны возбуждение колебательных степеней свободы и неравновесные химические процессы.

Особенностью метода ПСМ является невозможность непосредственного использования в расчетах макроскопических моделей химических реакций. В момент столкновения двух частиц одна из них может разделиться на две (реакция диссоциации молекул) или обменяться атомом с другой частицей (реакция обмена). Вероятность осуществления реакции в каждом отдельном столкновении зависит от свойств и состояния сталкивающихся частиц, но в среднем скорость химических реакций должна совпадать с макроскопической моделью.

Существует достаточно много моделей химических реакций, но в подавляющем большинстве практических приложений метода ПСМ применяется модель полной энергии столкновения (Total Collision Energy, TCE [20]). Это связано, прежде всего, с простотой и универсальностью данной модели, что делает возможным ее применение к описанию химических реакций в сложных многокомпонентных смесях. Согласно этой модели, микроскопическая информация о вероятности химической реакции как функции полной энергии сталкивающихся частиц (сумма поступательной, вращательной и колебательной энергий) определяется из макроскопической информации о зависимости константы скорости реакции от температуры в виде модифицированного соотношения Аррениуса. Использование более сложных моделей химических реакций позволяет более правдоподобно описать физику процесса, но вопрос о достоверности полученных АДХ с использованием любой модели все равно остается открытым, в том числе из-за сложностей проведения экспериментальных исследований в условиях разреженного газа. Исходя из этого, в данном исследовании использовалась TCE-модель химических реакций для 5-компонентной воздушной смеси (O, N, O₂, N₂, NO). Рассматривались следующие реакции диссоциации:



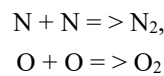
и обмена:



где M — частица произвольного компонента, который приносит в реакцию свою энергию, но сам не изменяется. Поскольку константы реакций свои для каждого M , всего рассматриваются 15 реакций диссоциации [0]. Реакции диссоциации и обмена — эндотермические, что приводит к охлаждению потока и уменьшению теплого воздействия на поверхность ВА.

Модель каталитичности поверхности

На поверхности аппарата отдельные молекулы и атомы также могут реагировать между собой. Существует достаточно много моделей взаимодействия на поверхности (абсорбция, десорбция, рекомбинация и т.д.) [22–25]. Поскольку цель работы — оценка влияния каталитичности на аэродинамические характеристики, то необходимость в подробном рассмотрении всех механизмов каталитических реакций отсутствует. В настоящем исследовании полностью каталитическая поверхность моделировалась реакциями рекомбинации



с вероятностью реакции, равной единице (т.е. как только на одной треугольной панели, которыми аппроксимируется поверхность ВА, оказывались два атома N или O, сразу же моделировалась химическая реакция). Реакции рекомбинации проходят с выделением тепла, что приводит к нагреву поверхности.

Модель аккомодации энергии

В модели аккомодации энергии подразумевается, что часть потока частиц, падающего на поверхность, отражается с температурой стенки, а оставшаяся часть — с такой температурой, при которой энергия отраженных частиц равна энергии падающих частиц.

Диффузное отражение частицы моделируется в соответствии с максвелловской функцией распределения скоростей для температуры отраженных молекул T_r , определяемой через коэффициент аккомодации энергии [26]

$$\sigma_E = \frac{E_i - E_r}{E_i - E_w},$$

где E_i — энергия молекул, падающих на поверхность, E_r — энергия отраженных молекул с температурой T_r , E_w — энергия отраженных молекул с температурой T_w . Соответственно,

$$T_r = \sigma_E T_w + (1 - \sigma_E) \frac{m V_{\text{hit}}^2}{4k},$$

где k — постоянная Больцмана, V_{hit} — скорость ударяющейся о поверхность частицы, m — масса частицы. Условие $\sigma_E = 1$ соответствует диффузному отражению с температурой стенки. На практике часто используют $\sigma_E = 0,8$. Выбор $\sigma_E < 1$ актуален для больших чисел Кнудсена (больших высот). В плотной среде, когда отраженная от поверхности молекула практически сразу же сталкивается с другими подобными молекулами и возвращается на стенку, влияние $\sigma_E < 1$ нивелируется.

Модель равновесной температуры поверхности

Расположенный на орбите космический аппарат находится в условиях свободномолекулярного течения. При этом поток тепла, приносимый на его поверхность молекулами газа, очень мал. Гораздо большее значение имеет тепловой поток от Солнца и охлаждение

космического аппарата (КА) за счет излучения. Температура КА фактически определяется из равновесия этих потоков. Обычно температура внешних поверхностей аппарата на орбите Земли находится в диапазоне от 200 до 400 К, поэтому при моделировании спуска КА с орбиты обычно принимают температуру стенки 300 К. Использование такой температуры поверхности в расчетах кажется ошибочным, так как в реальности при спуске она нагревается и может достигать нескольких тысяч градусов. Однако это делается намеренно. Предположение о низкой температуре поверхности в расчетах приводит к максимальному тепловому потоку независимо от используемых физических моделей. Тепловая защита, выдерживающая максимальный тепловой поток, гарантированно выдержит меньшие тепловые нагрузки при спуске с орбиты. При этом возникает проблема оптимизации массы тепловой защиты. В связи с требованиями удешевления запуска КА на орбиту появляется необходимость снижения массы, а для этого следует более точно рассчитывать тепловые потоки и, соответственно, распределения температуры по поверхности ВА.

Модель равновесной температуры используется для приблизительной оценки температуры, до которой может нагреться поверхность КА при спуске. Температура вычисляется для каждого треугольника, из которых состоит модель КА, из условия

$$Q_{c,+} = Q_{c,-} + Q_{\text{rad}}, \quad (1)$$

где $Q_{c,+}$ — падающий на поверхность конвективный тепловой поток, $Q_{c,-}$ — отраженный конвективный тепловой поток, Q_{rad} — поток тепла за счет излучения. Изменение температуры поверхности приводит к изменению скоростей отраженных частиц. Они взаимодействуют с набегающим потоком и существенно изменяют течение и падающий на поверхность конвективный тепловой поток. В связи с этим периодически должен производиться пересчет температуры, причем за время между пересчетами течение должно установиться. Из-за этого расчеты с моделью равновесной температуры занимают в несколько раз больше времени, чем с постоянной температурой стенки, и поэтому число итераций по пересчету температуры желательно сократить.

Тепловой поток за счет излучения находится из закона Стефана–Больцмана:

$$Q_{\text{rad}} = \varepsilon \sigma T_w^4,$$

где ε — степень черноты поверхности, σ — константа Стефана–Больцмана ($\sigma = 5,670373 \cdot 10^{-8} \text{ Вт}/(\text{м}^2\text{К}^4)$), T_w — температура стенки (К).

Падающий на поверхность конвективный тепловой поток вычисляется из кинетической энергии попавших в поверхностный треугольник частиц. Модель диффузного отражения основана на условии, что отражающиеся от поверхности молекулы имеют распределение по скоростям, соответствующее равновесному распределению Максвелла с температурой стенки T_w . Поток энергии, уносимой с поверхности, должен быть рассчитан как число частиц, попавших на поверхность, умноженное на среднюю энергию, уносимую одной частицей. В оценках по пересечению доля частиц с большими скоростями больше, чем с медленными. Поскольку скоростные частицы дают больший вклад в поток частиц, то средняя энергия, приходящаяся на отраженную частицу, больше средне-

максвелловского значения в единице объема $E = \frac{m\bar{v}^2}{2} = \frac{3}{2}kT$ и, как указано в [27], составляет

$$E = 2kT_w,$$

где k — константа Больцмана. Таким образом, зная число отраженных частиц (а оно совпадает с числом попавших в площадку частиц), можно вычислить величину отраженного теплового потока:

$$Q_{c,-} = 2kT_w \frac{N_{\text{hit}} F_n}{A\Delta t},$$

где N_{hit} — число модельных частиц, попавших в площадку, F_n — отношение числа реальных молекул к числу модельных частиц, A — площадь треугольной площадки, Δt — время, за которое произошло N_{hit} попаданий. С учетом этих формул равенство (1) можно представить в виде уравнения 4-й степени от T_w :

$$C_1 T_w^4 + C_2 T_w + C_3 = 0,$$

где $C_1 = \varepsilon\sigma$, $C_2 = 2k \frac{N_{\text{hit}} F_n}{A\Delta t}$, $C_3 = Q_{c,+}$. Это уравнение достаточно быстро решается итерационно, методом Ньютона.

Коэффициент конвективной теплопередачи вычисляется по формуле:

$$C_h = Q / (\rho / 2 V^3 S_{\text{ref}}),$$

где Q — конвективный тепловой поток на поверхность аппарата, ρ , V — скорость и плотность набегающего потока, S_{ref} — характерная площадь. Из формулы (1) следует $Q = Q_{c,+} - Q_{c,-} = Q_{\text{rad}}$, что позволяет найти температуру стенки по закону Стефана–Больцмана:

$$T_w = \sqrt[4]{\frac{C_h \rho V^3 / 2}{\varepsilon\sigma}}. \quad (2)$$

Однако в рассматриваемой модели равновесная температура вычисляется только на основании кинетической составляющей теплового потока без учета теплопередачи за счет изменения внутренней энергии молекул и химических реакций восстановления на поверхности (каталитичности поверхности). При этом коэффициент теплопередачи C_h , полученный в конце расчета, вычисляется с учетом внутренней энергии. Поэтому рассчитанная температура поверхности несколько отличается от температуры, вычисленной по формуле (2) из итогового коэффициента теплопередачи. Например, в табл. 1 представлены значения коэффициента теплопередачи, полученные в расчетах с учетом химических реакций и каталитичности поверхности для числа Маха $M = 25$, $\alpha = 20^\circ$ в окрестности точки торможения. Для результатов, представленных в табл. 1, T_w , вычисленная с учетом только кинетической составляющей C_h , получается 967,5 К, а при учете суммарного значения C_h равна 1096,4 К. Таким образом, вычисленная из суммарного C_h равновесная температура может оказаться заметно выше (на величину порядка 10 %). Кроме того, в рассматриваемой модели предполагается, что поток тепла внутрь поверхности отсутствует. Если ввести учет стока тепла внутрь тела, то температура поверхности понизится. Из формул видно, что равновесная температура вычисляется для коэффициента аккомодации $\sigma_E = 1$. Эти особенности модели необходимо учитывать при интерпретации результатов.

Таблица 1

C_h вблизи точки торможения

Составляющая энергии	Импульс		
	Суммарный	Приходящий	Отраженный
Кинетическая	0,1908	0,2495	-0,0587
Внутренняя	0,0576	0,0912	-0,0337
Каталитическая	0,0663	0,0663	0
Суммарная	0,3147	0,4070	-0,0923

Исходные данные

Внешний вид ВА представлен на рис. 1. Поскольку ВА имеет вертикальную плоскость симметрии, расчеты проводились для половины ВА. На плоскости симметрии ставились зеркальные граничные условия. Это позволило в два раза уменьшить расчетную область и вычислительные ресурсы. Поверхность модели ВА состоит из примерно 75 000 треугольных панелей. Вычисления проводились для разных высот, но наибольшее число расчетов выполнялось для высоты 90 км при изменении угла атаки от 22° до 40° . Для получения параметров набегающего потока использовалась стандартная нейтральная атмосфера MSIS-2000 [28]. Параметры атмосферы для высоты 90 км приведены в табл. 2.

Для вычислений использовался программный комплекс SMILE_GPU [29–31], являющийся дальнейшим развитием комплекса SMILE [13, 32]. Он предназначен для использования графических процессорных устройств (ГПУ) и обеспечивает большую вычислительную производительность. Благодаря этому удалось провести многопараметрические расчеты. Вычисления проводились на четырех ГПУ Tesla K-40 или на восьми ГПУ GeForce GTX 1080 Ti.

Расчетная область представляет собой параллелепипед с размерами $X = [-4 : 6]$, $Y = [-4 : 6]$, $Z = [0 : 5]$. Плоскость $Z = 0$ является плоскостью симметрии. Расчетная область покрывалась равномерной прямоугольной сеткой первого уровня с числом ячеек $250 \times 250 \times 125$. Начальное число частиц во всей области в большинстве расчетов составляло 120 миллионов (примерно по 15 частиц в ячейке). Для адаптации сетки под поле течения используется сетка второго уровня: любая исходная ячейка сетки может быть разбита вложенной равномерной сеткой. Размерность этой вложенной сетки зависит от количества модельных частиц в ячейке первого уровня. В данных расчетах размер вложенных ячеек выбирался таким образом, чтобы в среднем в них было не менее 5 частиц.

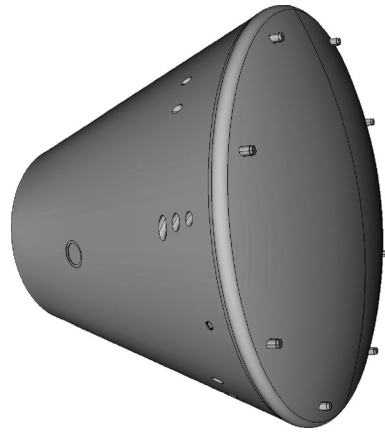


Рис. 1. Внешний вид модели ВА.

Таблица 2

Исходные параметры набегающего потока для высоты 90 км

Плотность, кг/м^3	$3,41 \cdot 10^{-6}$
Температура, К	180,88
Давление, Па	0,1778
Числовая плотность, $1/\text{м}^3$	$7,12 \cdot 10^{19}$
Средняя длина свободного пробега молекул, м	0,017
Число Кнудсена	0,0038
Скорость звука	270,6
Молекулярная масса, а.у.е.	28,8
Показатель адиабаты	1,404
Число Маха	Скорость
M = 25	6765 м/с
M = 30	8144 м/с
M = 35	9501 м/с
M = 40	10858 м/с
Вещество	Молярная концентрация
O ₂	0,192
N ₂	0,795
O	0,013

Адаптация проводится периодически, пока течение не станет стационарным. В каждом расчете выполнялось 30 000 шагов. На первых 20 000 течение устанавливалось, после чего предполагалось, что поле течения не изменяется, и в течение оставшихся 10 000 шагов проводилось накопление статистической информации о характеристиках течения и аэротермодинамических характеристиках КА. Один временной шаг составлял 0,5 мкс.

В расчетах с постоянной температурой стенки температура для всех элементов поверхности задавалась равной 300 К. В расчетах с моделью равновесной температуры температура стенки периодически перевычислялась в соответствии с вышеуказанной процедурой. Для расчетов с моделью равновесной температуры требуется больше частиц и временных шагов для установления. Поэтому число частиц в этих расчетах варьировалось от 360 до 450 миллионов, а число шагов от 50 до 120 тысяч.

Для высоты 90 км было проведено семь серий расчетов для различных комбинаций физических моделей. В дальнейшем в обозначениях на рисунках и в таблицах будут использоваться следующие условные обозначения комбинаций моделей: NoChem — без химических реакций, Chem — с химическими реакциями в потоке, Chem+Cat — предыдущий вариант + каталитические реакции на поверхности, Chem+Cat+Teq — с химическими реакциями в потоке, каталитическими реакциями на поверхности и равновесной температурой стенки; NoChem+Teq — без химических реакций, с равновесной температурой стенки; NoChem+cE0.8 — без химических реакций, $\sigma_E = 0,8$; Chem+cE0.8 — с химическими реакциями в потоке, $\sigma_E = 0,8$.

В основном расчеты проводились для четырех чисел Маха $M = 25, 30, 35, 40$. Углы атаки α варьировались в пределах от 0° до 40° , но набор углов атаки в каждой серии может отличаться. Одной из задач исследования являлось определение балансировочного угла атаки ВА. Поэтому расчетные углы атаки выбирались так, чтобы балансировочный угол оказался в диапазоне расчетных случаев.

Влияние химических реакций на АДХ

Для оценки влияния химических реакций в набегающем потоке на АДХ были проведены расчеты с учетом химических реакций и без них для разных углов атаки. Зависимости основных аэродинамических характеристик показаны на рис. 2–5. Здесь C_{xa} и C_{ya} — коэффициенты сопротивления и подъемной силы в скоростной системе

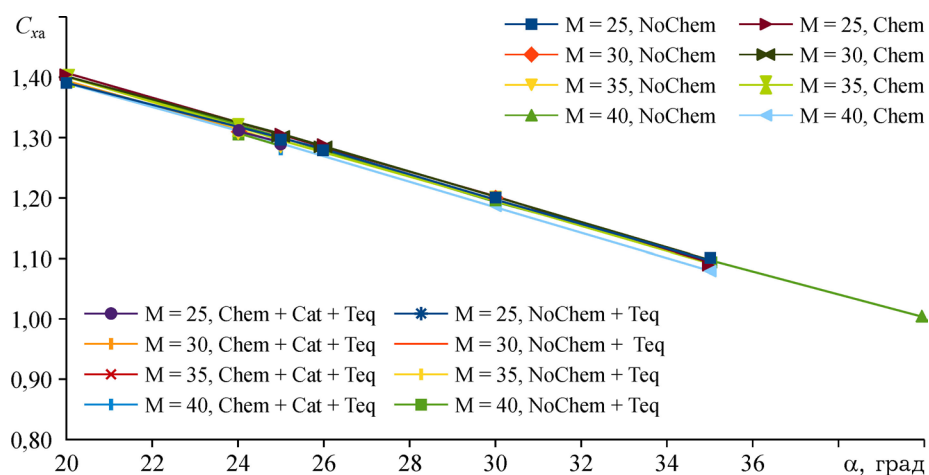


Рис. 2. Зависимость коэффициента сопротивления C_{xa} от угла атаки при различных числах Маха.

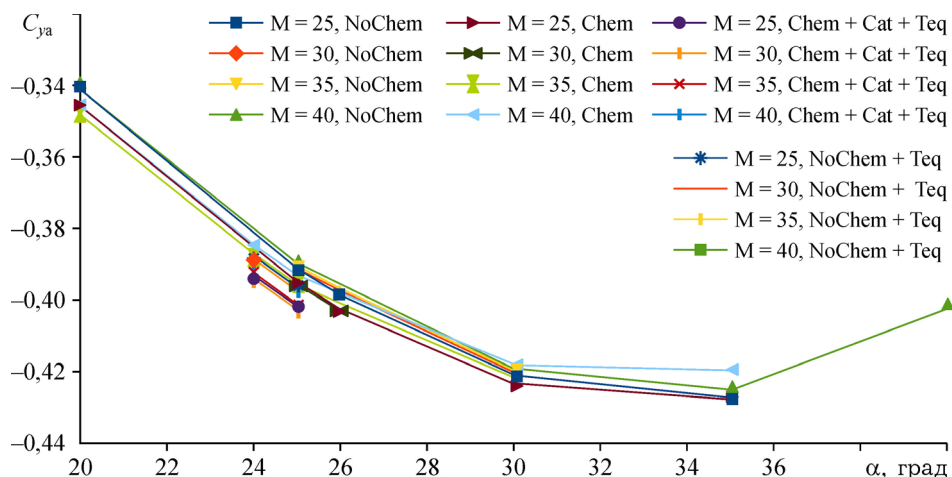


Рис. 3. Зависимость коэффициента подъемной силы C_{ya} от угла атаки при различных числах Маха.

координат, $M_{z.c.g.}$ — коэффициент момента тангажа относительно центра масс, C_h — коэффициент теплопередачи:

$$Q = C_h \rho V^3 S_{ref} / 2,$$

где Q — тепловой поток, приходящий на ВА, ρ и V — плотность и скорость набегающего потока, $S_{ref} = 15,7 \text{ м}^2$ — характерная площадь.

Учет химических реакций практически не влияет на значения сопротивления, подъемной силы и момента тангажа. Сопротивление возросло на величину, не превышающую 0,5 %, подъемная сила уменьшилась менее чем на 1,5 % во всем диапазоне углов атаки и чисел Маха. Как и ожидалось, учет химических реакций сказывается главным образом на коэффициенте теплопередачи: величина C_h изменяется в 1,5–2 раза в зависимости от используемой модели химических реакций.

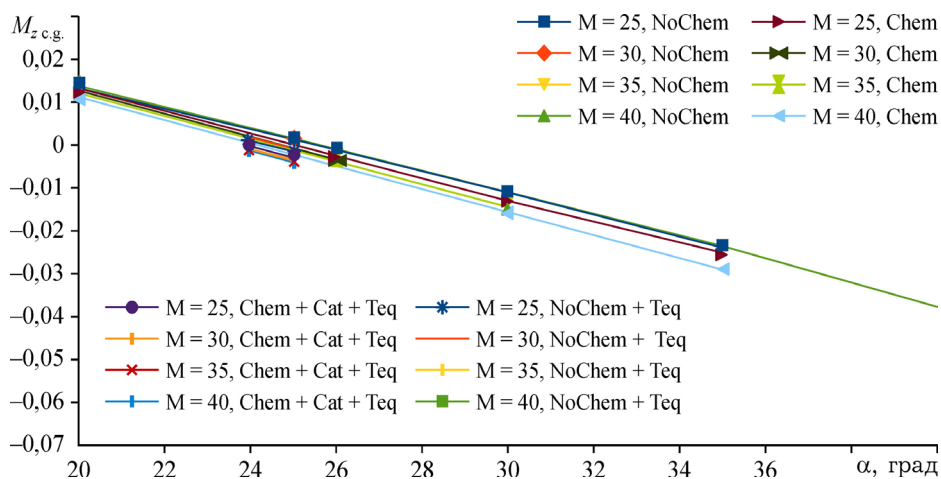


Рис. 4. Зависимость коэффициента момента тангажа $M_{z.c.g.}$ от угла атаки при различных числах Маха.

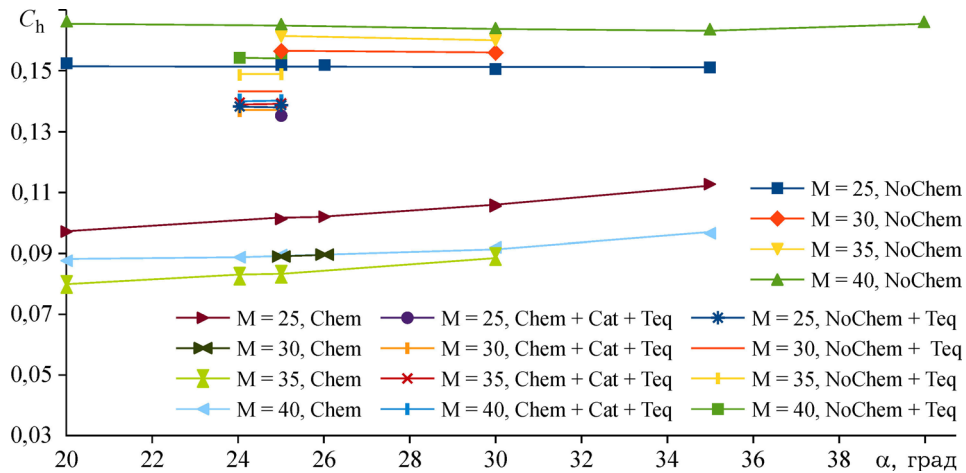


Рис. 5. Зависимость коэффициента теплового потока C_h от угла атаки при различных числах Маха.

На рис. 5 видно, что в расчетах без химических реакций C_h монотонно возрастает с увеличением числа Маха. В расчетах с учетом химических реакций до $M = 35$ величина C_h снижается, а потом возрастает. Для уточнения такой зависимости были проведены расчеты при разных числах Маха для угла атаки 25° . Было получено, что изменение числа Маха практически не влияет на силы и момент тангажа (изменения в пределах 1–1,5 %). Коэффициент теплопередачи изменяется в больших пределах (до 17 %) и имеет ярко выраженный минимум в районе чисел Маха 34–36 (см. рис. 6). Это связано с тем, что на диссоциацию молекул затрачивается энергия, которая не достигает поверхности тела. С увеличением числа Маха степень диссоциации возрастает. На рис. 7 представлена концентрация N_2 вдоль линии, примерно соответствующей линии торможения для разных чисел Маха с химическими реакциями и без них. Правый край графиков соответствует параметрам в набегающем потоке, левый — окрестности стенки. Видно, что при переходе через ударную волну концентрация N_2 уменьшается (происходит его диссоциация). При числе Маха 40 концентрация молекулярного азота стремится к нулю. Диссоциация больше не отнимает энергию из потока газа, и тепловой поток на поверхность увеличивается. При отсутствии химических реакций концентрация N_2 не меняется и не зависит от числа Маха. Это видно по совпадающим пунктирным линиям на рисунке.

Для больших чисел Маха температура за ударной волной достигает десятков тысяч градусов Кельвина. На рис. 8 показано поле температуры в течении с числом Маха 40 и углом атаки 25° без учета химических реакций и с учетом. В расчете с учетом химических реакций температура в потоке ниже, чем в расчете без реакций. Максимальная температура уменьшилась примерно в 1,5 раза (с 60 000 до 40 000). Но даже при таких «низких»

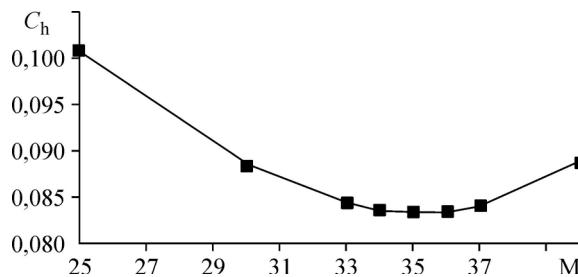


Рис. 6. Зависимость C_h от числа Маха. Расчеты Chem.

Рис. 7. Изменение концентрации N_2 вдоль линии торможения.

При наличии химических реакций:
 $M = 25$ (1), 30 (2), 35 (3), 40 (4);
 без химических реакций:
 $M = 25$ (5), 30 (6), 35 (7), 40 (8).

температурах в реальности дополнительно проявляются процессы ионизации, которые еще больше уменьшают температуру в течении и величину коэффициента теплопередачи [33–36].

Однако в рамках данного исследования расчеты с учетом ионизации не проводились.

Учет химических реакций не приводит к заметному перераспределению давления и трения по поверхности ВА. На рис. 9 приведено сравнение распределения коэффициентов давления (C_p), трения (C_t) и теплопередачи (C_h) по лобовой части ВА для разных чисел Маха и угла атаки 25° . На левой части аппарата показаны результаты, полученные в расчетах без химических реакций, в правой части аппарата — с учетом химических реакций. Видно, что распределение C_p практически идентично. В распределении C_t разница более заметна, особенно при больших числах Маха, но в целом можно отметить, что учет химических реакций не приводит к существенному перераспределению C_t .

Заметная разница наблюдается в распределении коэффициента теплопередачи C_h . Но было обнаружено, что для чисел Маха 25–35 распределение C_h в случае Chem, может быть с достаточной точностью получено из распределения NoChem домножением на отношение суммарных (интегральных) коэффициентов $C_{h\text{Chem}}/C_{h\text{NoChem}}$ для всех исследованных в настоящей работе углов атаки. Для числа Маха 40 такой пересчет не позволяет получить похожее распределение.

Влияние аккомодации энергии на АДХ

Влияние коэффициента аккомодации энергии оценивалось для $M = 25$. Сравнение результатов расчетов для $\sigma_E = 1$ и $\sigma_E = 0,8$ показывает, что C_{xa} различаются менее чем на 0,1 %, а C_{ya} — менее чем на 0,2 % как в случае NoChem так и в случае Chem по всему

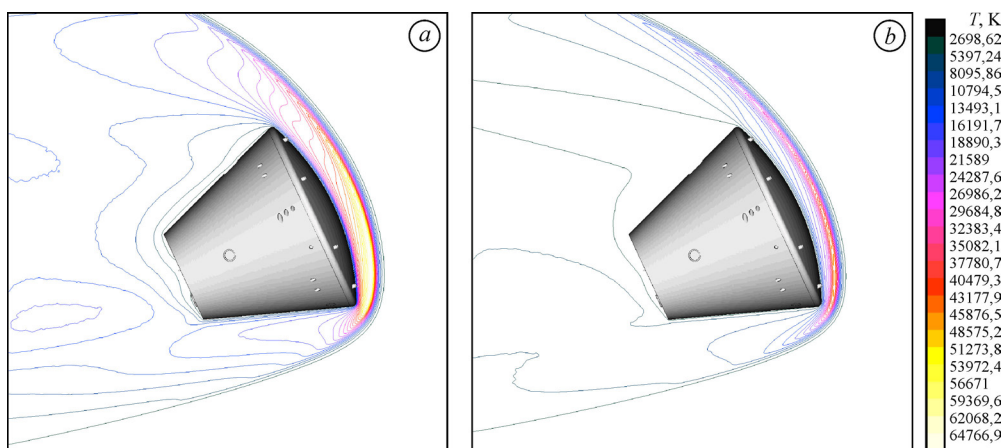
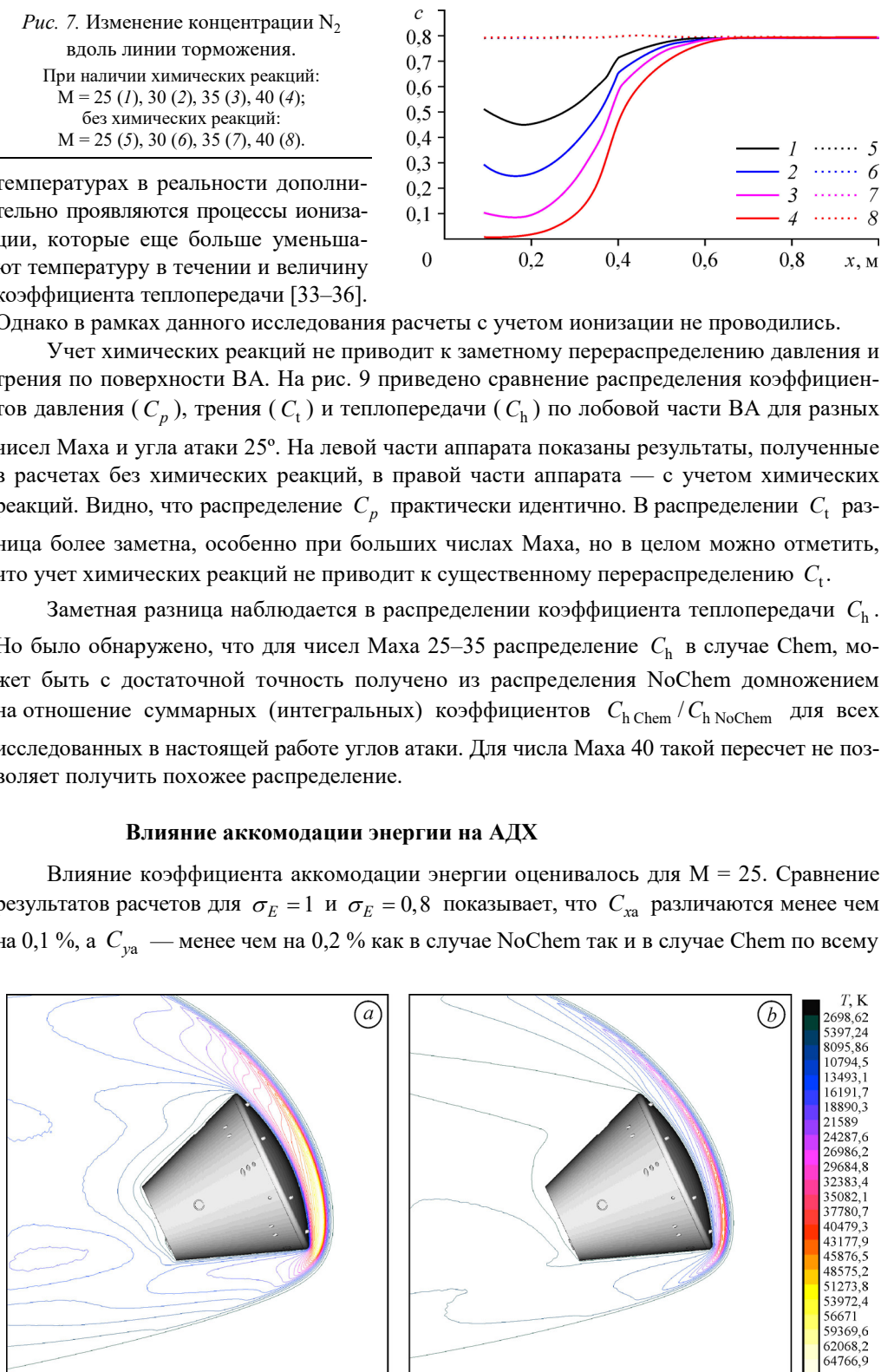


Рис. 8. Поле температуры при $M = 40$, $\alpha = 25^\circ$.

a — NoChem, b — Chem.

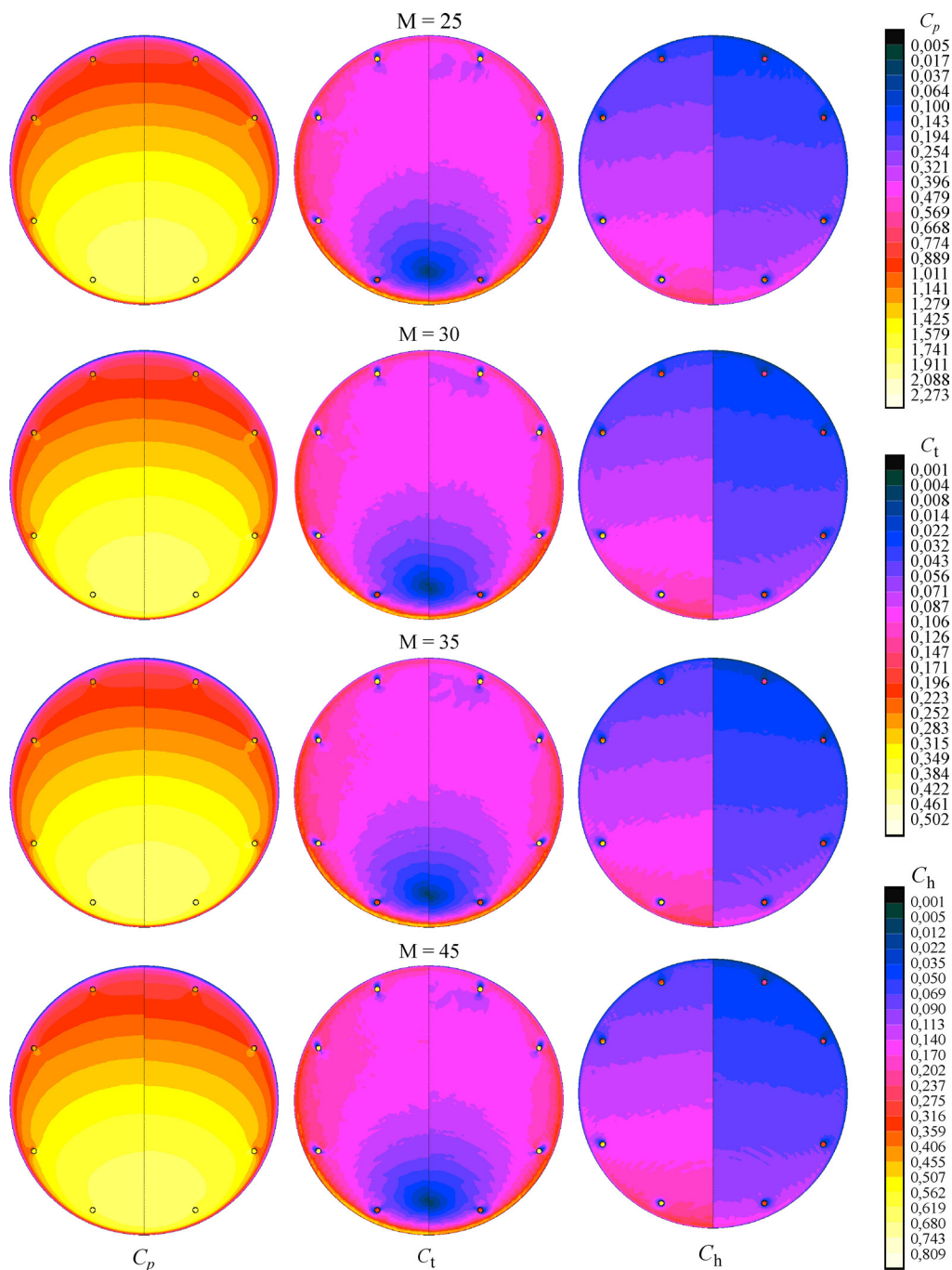


Рис. 9. Влияние химических реакций на коэффициенты C_p , C_t и C_h .
 $\alpha = 25$; левая часть фрагментов — в отсутствие химических реакций,
 правая часть фрагментов — при наличии химических реакций.

диапазону исследованных углов атаки. Значения коэффициента теплопередачи C_h приведены в табл. 3. Разница составляет менее 1,7 % в случае NoChem и менее 2,8 % — в Chem. Таким образом, изменение коэффициента аккомодации энергии приводит к слабому изменению аэротермодинамических характеристик КА в исследованных диапазонах скоростей и высот, и в практических расчетах для оценки максимальной тепловой нагрузки

Таблица 3

Значения C_h при разных коэффициентах аккомодации

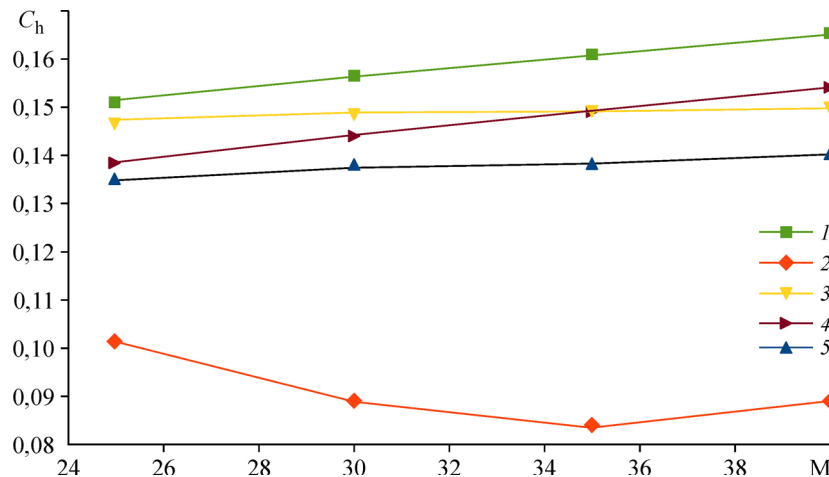
α , град	При наличии химической реакции (Chem)		В отсутствие химической реакции (NoChem)	
	$\sigma_E = 0,8$	$\sigma_E = 1$	$\sigma_E = 0,8$	$\sigma_E = 1$
20	0,0946	0,0971	0,1500	0,1526
25	0,0982	0,1008	0,1493	0,1516
30	0,1031	0,1060	0,1484	0,1510

на поверхность ВА можно использовать значение $\sigma_E = 1$, так как оно дает несколько большее значение коэффициента теплопередачи.

Влияние каталитичности поверхности на АДХ

Происходящие за ударной волной реакции диссоциации и обмена поглощают часть энергии потока и снижают тепловой поток на поверхность. Каталитические реакции рекомбинации на поверхности, наоборот, приводят к выделению тепла и увеличению теплового потока на поверхность. Если бы все диссоциированные молекулы рекомбинировали на поверхности, то влияние этих процессов взаимно уничтожилось бы, и результаты были бы близки к расчетным без химических реакций в потоке. Поэтому результаты, полученные в расчетах с химическими реакциями в потоке и без них, будут являться границами коридора, в котором находятся АДХ, полученные с учетом каталитичности поверхности.

Выше было показано, что химические реакции практически не влияют на интегральные АДХ, а влияют лишь на коэффициент теплопередачи C_h . Аналогично, использование каталитичности сказывается фактически только на тепловом потоке. На рис. 10 показаны значения коэффициента теплопередачи C_h , полученные на угле атаки 25° для разных чисел Маха и используемых химических моделей. Видно, что результаты с учетом каталитичности всегда находятся между результатами с химическими реакциями и без них. Это свойство будет соблюдаться независимо от используемых моделей химических реакций в потоке. Более точные модели только поменяют положение нижней границы. Поэтому для оценки максимально возможного теплового потока с полной рекомбинацией всех молекул можно воспользоваться расчетами без химических реакций в потоке.

Рис. 10. Влияние каталитичности и модели равновесной температуры на C_h при $\alpha = 25^\circ$.

1 — NoChem, 2 — Chem, 3 — Chem+Cat, 4 — NoChem+Teq, 5 — Chem+Cat+Teq.

Влияние равновесной температуры на АДХ

Расчеты с использованием модели равновесной температуры были проведены для двух углов атаки без химических реакций и с химическими реакциями в потоке и каталитичностью. Сравнение АДХ, полученных с использованием других физических моделей, показано на рис. 2–5.

Видно, что данная модель практически не влияет на C_{xa} , оказывает некоторое влияние на C_{ya} и M_z и заметно уменьшает C_h . Это ожидаемо, так как в соответствии с моделью, часть тепла излучается с поверхности. Неожиданным оказалось, что C_h снижается практически на одну и ту же величину для всех рассмотренных чисел Маха (см. рис. 10).

Влияние модели равновесной температуры на распределение температуры и коэффициента теплопередачи на лобовом щите ВА показано на рис. 11. Представлены результаты для угла атаки 25° . Температура поверхности очень сильно меняется в зависимости от числа Маха и использования химических моделей. Распределение C_h во всех случаях выглядит подобным, без существенного перераспределения по поверхности.

Влияние различных моделей метода ПСМ на балансировочный угол

Основной целью исследований являлось определение диапазона возможных значений балансировочного угла (α_t) в зависимости от используемых моделей метода ПСМ и аэродинамических характеристик на этом угле. Это необходимо для оценки точности получаемых результатов, что важно для проведения баллистических вычислений. На балансировочном угле значение момента тангажа равно 0. Поэтому для каждой серии расчетов определялись ближайшие точки по углу атаки, в которых момент имеет разное направление и линейной интерполяцией определялся балансировочный угол. Зависимость балансировочного угла от числа Маха для различных физических моделей метода ПСМ представлена на рис. 12. Для полученных балансировочных углов линейной интерполяцией были получены основные аэродинамические характеристики и суммарный тепловой поток, представленные на рис. 13–15. При анализе результатов, приведенных на этих рисунках, необходимо учитывать, что АДХ зависят не только от набора учитываемых физико-химических параметров, но и от величины балансировочного угла атаки.

В зависимости от используемого набора моделей и числа Маха балансировочный угол находится в пределах от $24,03^\circ$ до $25,65^\circ$ (см. рис. 12). Использование модели химических реакций в потоке, как правило, приводит к уменьшению балансировочного угла примерно на $0,5$ – $1,5$ градуса. Включение модели равновесной температуры еще больше понизило балансировочный угол примерно на $0,5$ градуса. Использование модели каталитичности поверхности повышает балансировочный угол на $0,2$ – $0,5$ градуса относительно расчетов с химическими реакциями. Использование $\sigma_E = 0,8$ вместо $\sigma_E = 1$ уменьшает угол примерно на $0,2$ градуса как в расчетах с учетом химических реакций, так и без них. Границами коридора значений являются расчеты NoChem и Chem + Cat + Teq. Разница в коэффициенте сопротивления (C_{xa}) составляет менее $2,5$ %. Границами коридора значений также являются расчеты NoChem и Chem + Cat + Teq. Разброс величин C_{ya} составляет порядка $2,6$ %. Использование моделей химических реакций увеличивает значение C_{ya} . Использование модели равновесной температуры также

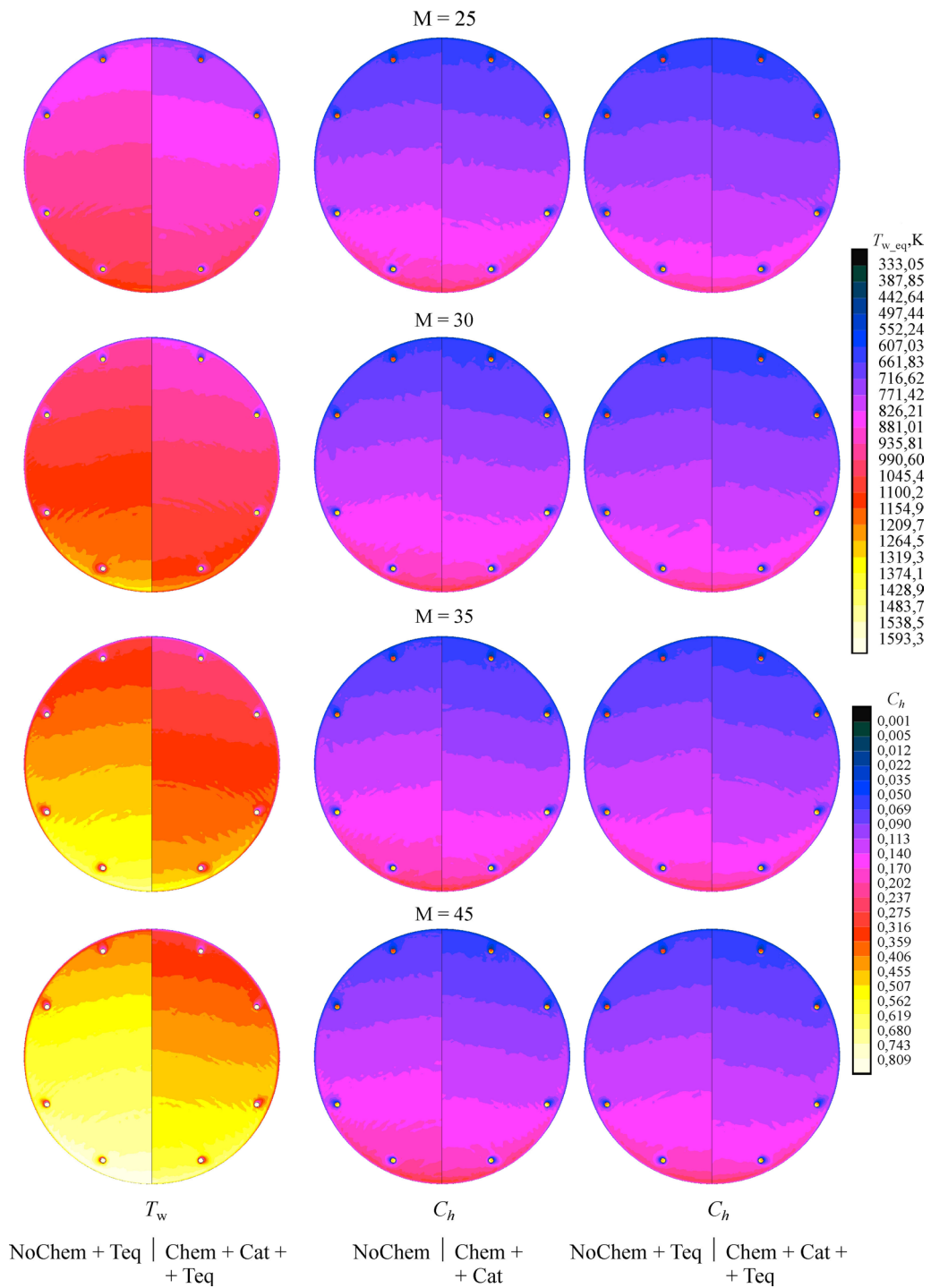


Рис. 11. Модель равновесной температуры при $\alpha = 25^\circ$.

приводит к увеличению C_{ya} . Значения C_h в зависимости от используемых моделей могут отличаться в 2 раза. Границами коридора значений являются расчеты NoChem и Chem.

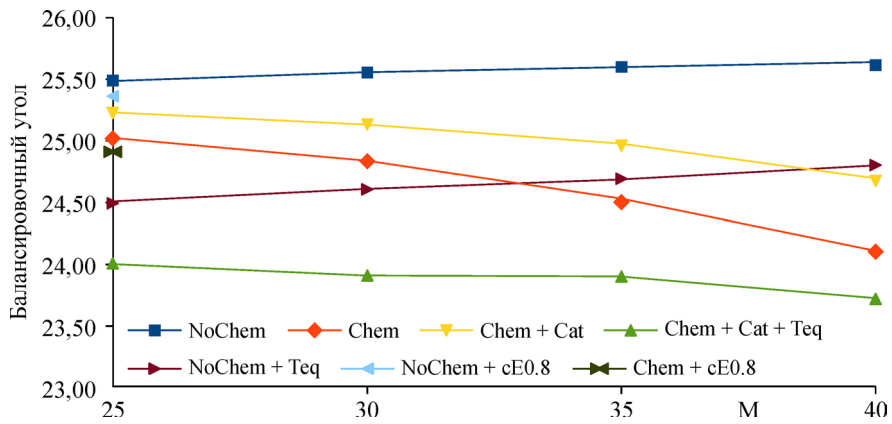


Рис. 12. Зависимость балансировочного угла от числа Маха для различных моделей.

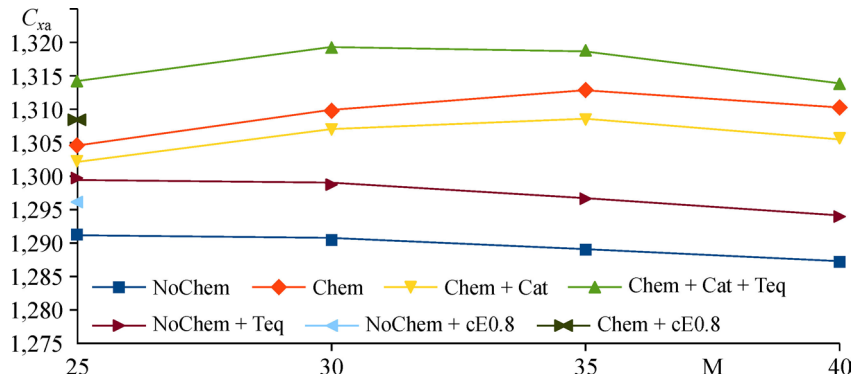


Рис. 13. Значение коэффициента сопротивления C_{xa} на балансировочном угле на высоте 90 км.

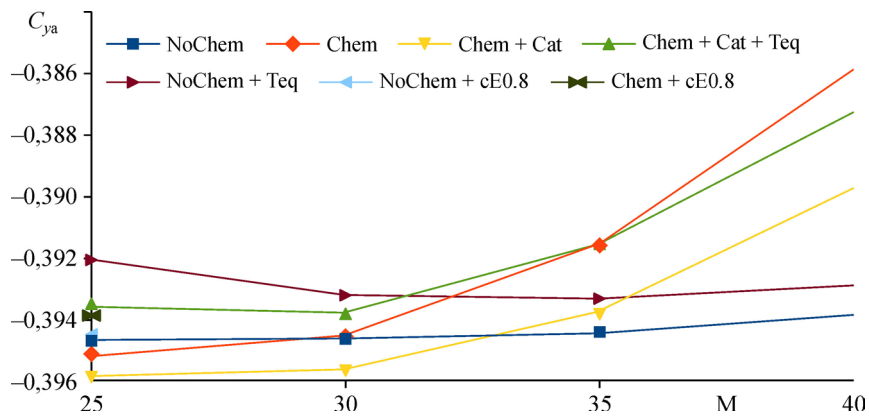


Рис. 14. Значение коэффициента сопротивления C_{ya} на балансировочном угле на высоте 90 км.

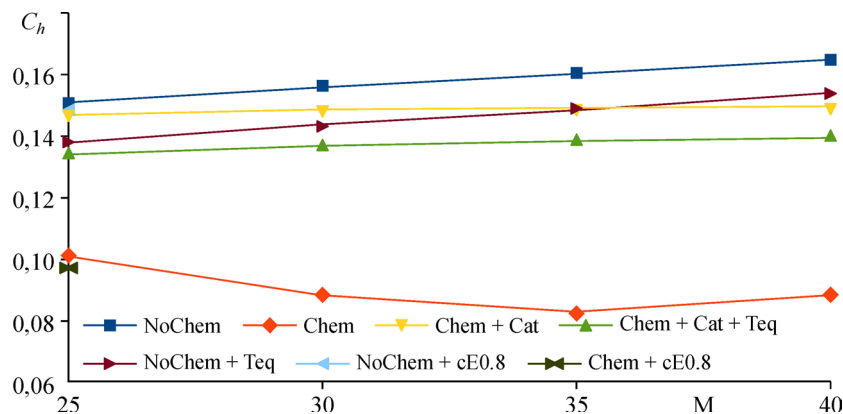


Рис. 15. Коэффициент конвективной теплопередачи C_h на балансировочном угле на высоте 90 км.

Выводы

Для высоты 90 км проведены расчеты АДХ ВА «Федерация» с использованием различных физических моделей метода ПСМ. Показано, что выбор моделей влияет на коэффициенты сопротивления и подъемной силы в пределах 2–3 %, и дает разброс балансировочного угла менее 2°. Самым чувствительным параметром является коэффициент теплопередачи, который, в зависимости от набора используемых моделей, может отличаться в 2 раза. При планировании численных исследований спускаемых аппаратов можно на основании выполненных расчетов рекомендовать проводить вычисления с тремя комбинациями физических моделей: без учета химических реакций с постоянной температурой поверхности 300 К, с химическими реакциями в потоке с постоянной температурой поверхности 300 К и с учетом химических реакций в потоке и на поверхности аппарата с моделью равновесной температуры. Эти расчеты позволят получить максимальный разброс значений АДХ. Реальные значения аэротермодинамических характеристик будут лежать в полученном диапазоне.

Список литературы

1. Bird G.A. Approach to translational equilibrium in a rigid sphere gas // J. Phys. and Fluids. 1963. Vol. 6, No. 10. P. 1518–1519.
2. Белоцерковский О.М., Яницкий В.Е. Статистический метод частиц в ячейках для решения задач динамики разреженного газа. Ч. I. Основы построения метода // Журнал вычисл. математики и матем. физики. 1975. Т. 15, № 5. С. 1195–1208.
3. Горелов С.М., Коган М.Н. Течение разреженного газа между двумя параллельными пластинами // Учен. зап. ЦАГИ. 1970. Т. I, № 6. С. 125–130.
4. Плотников М.Ю., Ребров А.К. Прямое статистическое моделирование поперечного обтекания цилиндра сверхзвуковым потоком бинарной смеси разреженных газов // Прикладная механика и техническая физика. 2005. Т. 46, № 5. С. 53–59.
5. Плотников М.Ю., Ребров А.К. Сверхзвуковое течение разреженного газа сквозь проволочную преграду // Прикладная механика и техническая физика. 2013. Т. 54, № 4. С. 5–12.
6. Voronich I., Nikolskiy Yu., Friedlander O. Gas flows through double-layer membrane of thermomolecular pump // AIP Conference Proceedings. 2014. Vol. 1628. P. 841–848.
7. Кусов А.Л. Численное моделирование обтекания цилиндра со сферическим носком методом прямого статистического моделирования Монте–Карло // Математическое моделирование. 2015. Т. 27, № 12. С. 33–47.
8. Иванов М.С., Кашковский А.В., Гимельштейн С.Ф., Маркелов Г.Н. Статистическое моделирование разреженных гиперзвуковых течений от свободно-молекулярного до околосреднего режима течения // Теплофизика и аэромеханика. 1987. Т. 4, № 3. С. 251–268.
9. Ivanov M.S., Antonov S.G., Gimelshein S.F., Kashkovsky A.V. Computational tools for rarefied aerodynamics // Progress in Astronautics and Aeronautics Series. 1994. Vol. 160. P. 115–126.
10. Bird G.A. Molecular gas dynamics and the direct simulation of gas flows. Oxford: Clarendon Press, 1994. 458 p.

11. **LeBeau G.J., Lumpkin III F.E.** Application highlights of the DSMC Analysis Code (DAC) software for simulating rarefied flows // Computer Methods in Applied Mechanics and Engng. 2001. Vol. 191, No. 6. P. 595–609.
12. **White C., Borg M.K. etc.** dsmcFoam+: An OpenFOAM based direct simulation Monte Carlo solver // Computer Physics Communications. 2018. Vol. 224. P. 22–43.
13. **Ivanov M.S., Rogazinsky S.V.** Analysis of the numerical techniques of the direct simulation Monte Carlo method in the rarefied gas dynamics // Soviet J. Numer. Anal. Math. Modelling. 1988. Vol. 3, No. 6. P. 453–465.
14. **Ivanov M.C., Kashkovsky A., Vashchenkov P., Bondar Y.** Parallel object-oriented software system for DSMC modeling of high-altitude aerothermodynamic problems // 27th Intern. Symposium on Rarefied Gas Dynamics. AIP Conference Proceedings. 2010. Vol. 1333. P. 211–218.
15. **Borgnakke C., Larsen P.S.** Statistical collision model for Monte Carlo simulation of polyatomic gas mixture // J. Comp. Phys. 1975. Vol. 18. P. 405–420.
16. **Boyd I.D.** Relaxation of discrete rotational energy distributions using a Monte Carlo method // Phys. Fluids A. 1993. Vol. 5, No. 9. P. 2278–2286.
17. **Gimelshein S.F., Ivanov M.S., Boyd I.D.** Modeling of internal energy transfer of polyatomic molecules in rarefied plume flows // AIAA Paper. 1999. No. 1999-738
18. **Boyd I.D.** Assessment of chemical nonequilibrium in rarefied hypersonicflow // AIAA Paper. 1990. No. 90-0145.
19. **Parker J.G.** Rotational and vibrational relaxation in diatomic gases // Phys. Fluids. 1959. Vol. 2, No. 4. P. 449–462.
20. **Bird G.A.** Monte-Carlo simulation in an engineering context // Proc. XII Inter. Symp. on Rarefied Gas Dynamics. 1981. Vol. 74, Part. 1. P. 239–255.
21. **Бондарь Е.А., Шевырин А.А., Чен Ё.С., Шумакова А.Н., Кашковский А.В., Иванов М.С.** Прямое статистическое моделирование высокотемпературных химических реакций в воздухе // Теплофизика и аэромеханика. 2013. Т. 20, № 5. С. 561–573.
22. **Shumakova A.N., Bondar Y.A., Kashkovsky A.V., Shevyrin A.A., Ivanov M.S.** Effects of surface chemistry on high-altitude aerothermodynamics of space vehicles. AIAA Paper. 2014. No. 2014-0699.
23. **Molchanova A.N., Kashkovsky A.V., Bondar Y.A.** A detailed DSMC surface chemistry model // 29th Inter. Symp. on Rarefied Gas Dynamics (China, Xian, 13–18 Jul., 2014): AIP Conference Proceedings. 2014. Vol. 1628. P. 131–138.
24. **Molchanova A.N., Kashkovsky A.V., Bondar Ye.A.** Effect of surface catalycity on high-altitude aerothermodynamics of reentry vehicles // 18th Inter. Conf. on the Methods of Aerophysical Research (ICMAR2016) (Russia, Perm, 27 Jun.–3 Jul., 2016). AIP Conference Proceedings. 2016. Vol. 1770. Iss. 1. P. 040010-1–040010-11.
25. **Molchanova A., Kashkovsky A., Bondar Y.** Surface recombination in the direct simulation Monte Carlo method // Physics of Fluids. 2018. Vol. 30. P. 107105-1–107105-17.
26. **Коган М.Н.** Динамика разреженного газа. М.: Наука, 1967. 440 с.
27. **Бурштейн А.И.** Молекулярная физика. Новосибирск: Наука, 1986, 288 с.
28. **Picone J.M., Hedin A.E., Drob D.P., Aikin A.C.** NRLMSISE-00 empirical model of the atmosphere: statistical comparisons and scientific issues // J. Geophys. Research: Space Physics. 2002. Vol. 107, No. A12. P. SIA 15-1–SIA 15-16.
29. **Kashkovsky A.V.** 3D DSMC computations on a heterogeneous CPU-GPU cluster with a large number of GPUs // 29th Inter. Symp. on Rarefied Gas Dynamics (China, Xian, 13–18 Jul. 2014) AIP Conference Proceedings. 2014. Vol. 1628. P. 192–198.
30. **Kashkovsky A.V.** DSMC investigations of reentry vehicle aerothermodynamics on GPU // 29th Inter. Symp. on Rarefied Gas Dynamics (China, Xian, 13–18 Jul. 2014): AIP Conference Proceedings. 2014. Vol. 1628. P. 199–204.
31. **Kashkovsky A.V., Shershnev A.A., Vashchenkov P.V.** Aspects of GPU performance in algorithms with random memory access // Proceedings of the XXV Conf. on High-Energy Processes in Condensed Matter: Dedicated to the 60th anniversary of the Khristianovich Institute of Theoretical and Applied Mechanics SB RAS (Russia, Novosibirsk, 5–9 Jun., 2017): AIP Conference Proceedings. 2017. Vol. 1893, No. 1. P. 03004-1–03004-8.
32. **Ivanov M.S., Markelov G.N., Gimelshein S.F.** Statistical simulation of reactive rarefied flows: numerical approach and applications // AIAA Paper. 1998. No. 98-2669.
33. **Shevyrin A.A., Bondar Y.A., Kalashnikov S.T., Khlybov V.I., Degtyar V.G.** Direct simulation of rarefied high-enthalpy flow around the RAM C-II capsule // High Temperature. 2016. Vol. 54, No. 3. P. 383–389.
34. **Shevyrin A.A., Wu J.-S., Bondar Ye.A.** Investigation of an ionized shock layer in a rarefied gas flow around a reentry vehicle // 18th Inter. Conference on the Methods of Aerophysical Research (ICMAR2016) (Russia, Perm, 27 Jun.–3 Jul., 2016) : AIP Conference Proceedings. 2016. Vol.1770. S. 1. P. 040011-1–040011-7.
35. **Shevyrin A.A., Shkredov T.Y., Shoev G.V., Bondar Ye.A.** Modeling of the plasma environment of re-entry space vehicles // XIX Inter. Conf. on the Methods of Aerophysical Research (Novosibirsk, Russia, 13–19 Aug., 2018): AIP Conference Proceedings. 2018. Vol. 2027, No. 1. S. 1. 030031-1–030031-11.
36. **Oblapenko G.P., Kashkovsky A.V., Bondar Y.A.** State-to-state models of vibrational relaxation in Direct Simulation Monte Carlo (DSMC) // 10th Inter. Conf. on Aerophysics and Physical Mechanics of Classical and Quantum Systems (Russia, Moscow, 5–9 Dec., 2016): J. Physics: Conference Series. 2017. Vol. 815, No. UNSP. P. 012011-1–012011-7.

*Статья поступила в редакцию 14 ноября 2019 г.,
после доработки — 20 января 2020 г.,
принята к публикации 10 февраля 2020 г.*