

УДК 532.526.2:541.12

© 1997 г. В.И. САХАРОВ, О.Н. СУСЛОВ, Е.И. ФАТЕЕВА

## ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕЧЕНИЙ ОКОЛО ЗАТУПЛЕННЫХ ТЕЛ В УСЛОВИЯХ ЧАСТИЧНОГО ХИМИЧЕСКОГО РАВНОВЕСИЯ В РАМКАХ УРАВНЕНИЙ ЛАМИНАРНОГО ПОГРАНИЧНОГО СЛОЯ

На основании проведенных численных исследований решений уравнений ламинарного пограничного слоя на критической линии затупленных тел сделан вывод, что модель частичного химического равновесия применима для описания гиперзвукового обтекания в широком диапазоне размеров, высот и скоростей входа в атмосферу Земли. Для рассмотренных условий обтекания установлено, что модель частичного химического равновесия и полная постановка, в которой учитывается неравновесный характер протекания всех гомогенных химических реакций, дают близкие результаты в отличие от равновесной модели протекания химических реакций.

Рассматриваются такие режимы обтекания затупленных тел гиперзвуковым потоком вязкого теплопроводного газа, когда около их поверхности образуется многокомпонентный частично ионизованный ламинарный пограничный слой [1–4].

Диффузионно-тепловую часть системы уравнений пограничного слоя для многокомпонентной частично ионизованной смеси газов вместе с замыкающими ее соотношениями переноса обычно записывают в виде системы уравнений в частных производных первого порядка относительно следующих неизвестных: массовых концентраций и диффузионных потоков продуктов реакций и химических элементов, энтальпии и полного потока тепла [1, 2, 5].

При численном и асимптотическом исследовании уравнений движения многокомпонентной смеси газов важную роль играет предварительный анализ безразмерных скоростей протекания всех химических реакций в смеси. Он позволяет в условиях частичного химического равновесия (т.е. когда химические реакции в газовой фазе идут с существенно различными скоростями) рациональным образом ввести наряду со старыми переменными новые неизвестные функции: линейные комбинации концентраций химических компонентов и линейные комбинации их диффузионных потоков.

Введение таких переменных значительно упрощает постановку задачи: часть уравнений диффузии заменяется алгебраическими уравнениями детального химического равновесия, а в правых частях уравнений диффузии для введенных линейных комбинаций продуктов реакций стоят источники только медленных стадий [6, 7].

В [6–8] получены уравнения диффузии и соотношения Стефана–Максвелла с эффективными коэффициентами переноса для этих неизвестных функций. Там же показано, что в широком диапазоне температур и давлений для описания течений химически реагирующего воздуха достаточно использовать одну линейную комбинацию концентраций и одну линейную комбинацию диффузионных потоков. В настоящей работе на критической линии затупленных тел проведено численное исследование задачи вязкого обтекания частично ионизованным и диссоциированным воздухом в рамках модели ламинарного пограничного слоя в условиях частичного химического равновесия.

**1. Постановка задачи.** Уравнения движения многокомпонентной частично ионизованной и диссоциированной смеси химически реагирующих газов в рамках уравнений ламинарного химически неравновесного пограничного слоя приведены в [1–4].

Аналогично [7, 8] вводятся:  $N, N_c, R$  – число компонентов, химических элементов и общее число химических реакций, одновременно протекающих в смеси. Считается, что в смеси реакции протекают с существенно различными скоростями:  $R_f$  – число всех быстрых (больше числа Дамкелера),  $R_s$  – число всех медленных реакций,  $R_f + R_s = R$ . Выберем систему из  $r = N - N_c$  (по числу продуктов реакций) независимых в стехиометрическом отношении реакций таким образом, чтобы число быстрых независимых реакций ( $r_f$ ) было максимальным.

Выпишем диффузионно-тепловую часть системы уравнений многокомпонентного химически неравновесного однотемпературного ламинарного пограничного слоя и замыкающие ее соотношения Стефана–Максвелла, когда неизвестными функциями являются линейные комбинации концентраций и линейные комбинации диффузионных потоков  $u_k, \mathbf{I}_k$ , концентрации и диффузионные потоки химических элементов  $c_k^*, \mathbf{J}_k^*$ , энтальпия смеси и поток тепла  $h, \mathbf{J}_q$  [6–8] (верхний индекс  $t$  – знак транспонирования)

$$\operatorname{div} \mathbf{I} + \rho \mathbf{v} \nabla \mathbf{u} = \mathbf{W}, \quad \nabla \mathbf{u} = \pi \mathbf{I} \quad (1.1)$$

$$\mathbf{I} = (\mathbf{I}_1, \dots, \mathbf{I}_k, \mathbf{J}_1^*, \dots, \mathbf{J}_m^*, \mathbf{J}_q)^T, \quad \mathbf{u} = (u_1, \dots, u_r, c_1^*, \dots, c_m^*, h)^T$$

$$\mathbf{W} = (w_1, \dots, w_r, 0, \dots, 0, w_q)^T$$

$$u_l = - \sum_{j=1}^{r_f} \alpha_{lj} \frac{c_j}{m_j} + \frac{c_l}{m_l}, \quad \mathbf{I}_l = - \sum_{j=1}^{r_f} \alpha_{lj} \frac{\mathbf{J}_j}{m_j} + \frac{\mathbf{J}_l}{m_l}$$

$$r_s = r - r_f, \quad m = N_c - 2, \quad l = 1, \dots, r_s, \quad i = l + r_f$$

$$\sum_{k=1}^{N_c} c_k^* = 1, \quad \sum_{k=1}^{N_c} \mathbf{J}_k^* = 0, \quad c_E^* = 0, \quad \mathbf{J}_E^* = 0, \quad p = \rho R_A T / m \quad (1.2)$$

Система уравнений первого порядка (1.1), (1.2) включает  $r_s$  уравнений диффузии для линейных комбинаций концентраций,  $N_c - 2$  уравнений диффузии химических элементов, уравнение притока тепла, соотношения Стефана–Максвелла для линейных комбинаций концентраций и химических элементов и уравнение переноса тепла. Три последних соотношения в (1.2) есть условия квазинейтральности, отсутствия тока [1, 5] и уравнение состояния ( $E$  – номер химического элемента электрона). Здесь  $\rho, \mathbf{v}, p, T, m, R_A$  – плотность, средняя массовая скорость, давление, температура, средняя молекулярная масса смеси, универсальная газовая постоянная;  $c_j, \mathbf{J}_j, m_j$  – массовая концентрация, диффузионный поток и масса в г/моль  $j$ -го компонента,  $\alpha_{lj}$  – матрица стехиометрических коэффициентов, приведенная в [6–8].

Для определения частично равновесного состава в каждой точке среды как функции от  $u_r, c_i^*, T, p$  необходимо добавить к системе (1.1), (1.2) алгебраическую систему уравнений

$$\sum_{j=1}^N (\mu'_{jk} - \mu''_{jk}) \ln x_j + (\mu'_k - \mu''_k) \ln p + \ln K_{pk} = 0, \quad k = 1, \dots, r_f \quad (1.3)$$

$$u_l = - \sum_{j=1}^{r_f} \alpha_{lj} \frac{c_j}{m_j} + \frac{c_m}{m_m}, \quad c_i^* = c_{i+r} + \sum_{j=1}^r \nu_{ji} \frac{m_{i+r}}{m_j} c_j, \quad \sum_{j=1}^N c_j = 1$$

$$x_j = \frac{m c_j}{m_j}, \quad \mu'_j = \sum_{k=1}^N \mu'_{kj}, \quad \mu''_j = \sum_{k=1}^N \mu''_{kj}$$

$$l = 1, \dots, r_s, \quad i = 1, \dots, N_c - 2, \quad m = l + r_f$$

Здесь уравнения (1.3) – это соотношения детального химического равновесия.  $\mu'_{kj}$ ,  $\mu''_{kj}$  – стехиометрические коэффициенты;  $K_{pj}$  – константа равновесия  $j$ -й реакции;  $x_j$  – молярная концентрация  $j$ -го компонента;  $\nu_{ki}$  – стехиометрические коэффициенты в  $r$  независимых реакциях образования  $k$ -го продукта реакции из химических компонентов, принятых за базисные.

Граничные условия для системы (1.1) на внешней границе пограничного слоя состоят в задании  $h_e$ ,  $c_{ie}^*$  и  $u_{le}$ , а на непроницаемой и неразрушающейся стенке с возможными гетерогенными каталитическими реакциями граничные условия будут

$$I_{ln} = - \sum_{j=1}^{r_f} \alpha_{lj} \frac{\dot{s}_j}{m_j} + \frac{\dot{s}_m}{m_m}, \quad l=1, \dots, r_s, \quad m=l+r_f$$

$$J_{in}^* = 0, \quad i=1, \dots, N_e - 2, \quad J_{qn} = -\lambda \frac{\partial T}{\partial n} + q_{Rn} - \epsilon \sigma_b T^4$$

где  $\lambda \partial T / \partial n$  – поток тепла в тело,  $\lambda$  – теплопроводность,  $q_R$  – удельный радиационный поток,  $\epsilon \sigma_b T^4$  – удельный радиационный поток, отраженный поверхностью,  $\epsilon$  – степень черноты,  $\sigma_b$  – постоянная Стефана–Больцмана. Нижний индекс  $n$  обозначает нормальную составляющую векторов,  $\dot{s}_i$  ( $i=1, \dots, r$ ) – поверхностная скорость образования  $i$ -й компоненты за счет гетерогенных химических реакций.

Выражения для элементов матрицы  $\pi$ , являющихся функциями многочисленных коэффициентов переноса, приведены в [6–8]. Вектор  $\mathbf{W}$  имеет следующие элементы:

$$w_i = \frac{\rho}{\tau m} \sum_{j=1}^{R_s} \left[ \Gamma_{mj} - \sum_{l=1}^{r_f} \alpha_{lj} \Gamma_{lj} \right] \frac{v_j}{\epsilon_{gj}}, \quad i=1, \dots, r_s, \quad m=i+r_f$$

$$v_j = K_{pj} p^{\mu'_j - \mu''_j} \prod_{k=1}^N x_k^{\mu'_{kj}} - \prod_{k=1}^N x_k^{\mu''_{kj}}$$

$$\Gamma_{ij} = \mu''_{ij} - \mu'_{ij}, \quad \frac{1}{\epsilon_{vj}} = \frac{\tau}{\tau_{vj}} = \tau k_j^- \left( \frac{p}{kT} \right)^{\mu''_{ij} - 1}$$

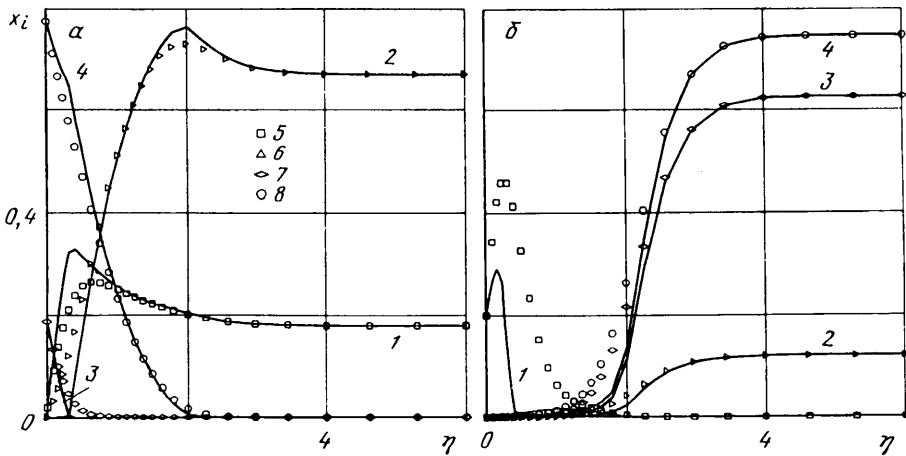
$$w_q = u \frac{dp}{dx} + \tau : \mathbf{e} - \text{div } \mathbf{q}_R$$

где  $\tau$ ,  $\mathbf{e}$ ,  $u$  – тензоры вязких напряжений и скоростей деформации, продольная составляющая скорости;  $k$  – постоянная Больцмана;  $w_i$  – массовая скорость образования  $i$ -го продукта во всех гомогенных химических реакциях;  $\tau_{vj}$  – "химическое" время обратной реакции;  $\tau$  – характерное газодинамическое время;  $\epsilon_{gj}$  – параметр, обратно пропорциональный числу Дамкелера;  $v_j$  – отклонение от равновесия  $j$ -й реакции;  $k_j^-$  – константа скорости обратной реакции; знак : обозначает свертку тензоров.

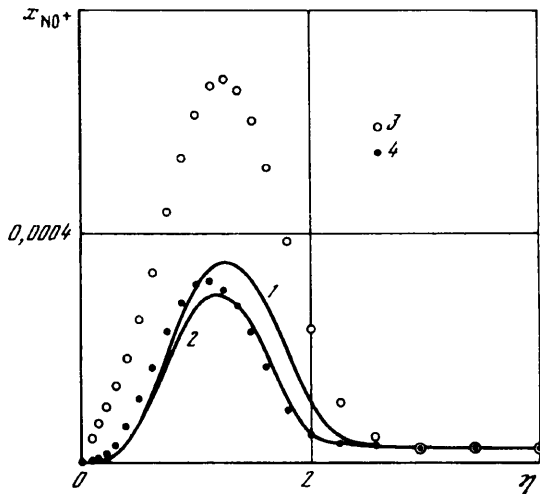
**2. Анализ полученных результатов.** Рассмотрена 11-компонентная модель диссоциированного и частично ионизованного воздуха

$$\begin{aligned} 1 - \text{O}, 2 - \text{N}, 3 - \text{NO}, 4 - \text{NO}^+, 5 - \text{O}_2^+, 6 - \text{N}_2^+ \\ 7 - \text{O}^+, 8 - \text{N}^+, 9 - \text{O}_2, 10 - \text{N}_2, 11 - e \end{aligned} \quad (2.1)$$

Компоненты  $\text{O}_2$ ,  $\text{N}_2$ ,  $e$  приняты за базисные, а остальные – за продукты реакций. Рассматривалась схема из 49 реакций, приведенная в [7, 8]. Анализ чисел Дамкелера при  $T = 1000\text{--}20000$  К для давлений  $p \geq 0,05$  атм показал, что для выбранной системы



Фиг. 1. Распределение молярных концентраций компонентов:  $a - 1, 5 - O_2$ ;  $2, 6 - N$ ;  $3, 7 - O_2$ ;  $4, 8 - N_2$ ;  $b - 1, 5 - NO$ ,  $2, 6 - O^+$ ,  $3, 7 - N^+$ ,  $4, 8 - c$ . Кривые 1-4 соответствуют модели частичного химического равновесия, 5-8 - "точному" расчету



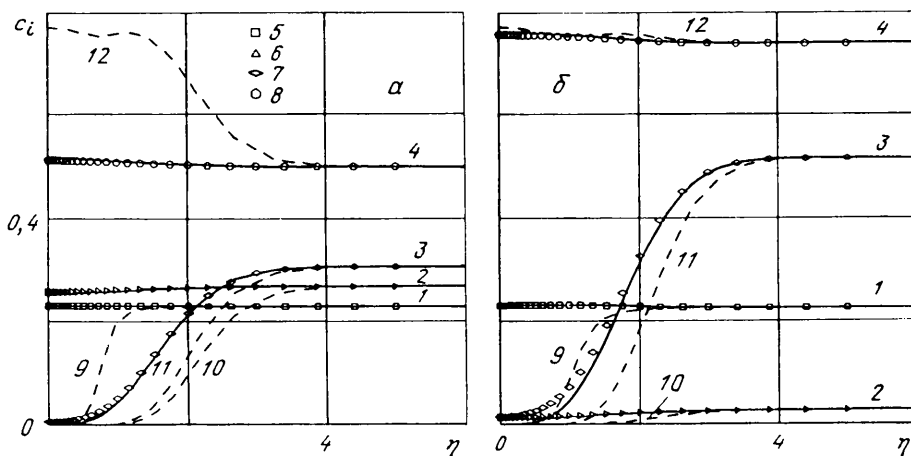
Фиг. 2. Распределение  $x_{NO^+}$  для двух радиусов затупления (кривые 1, 3 - радиус 0,1 м, 2, 4 - 10 м). Кривые 1, 2 соответствуют модели частичного химического равновесия, 3, 4 - "точному" расчету

химических реакций можно выделить одну линейную комбинацию концентраций продуктов реакций и одну линейную комбинацию их диффузионных потоков [7, 8]

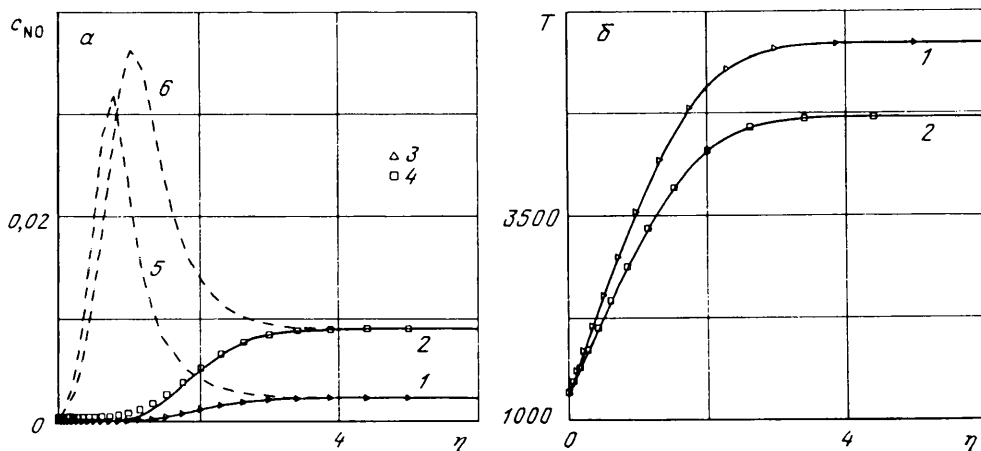
$$u^s = \frac{1}{3} \left( \frac{c_1}{m_1} + \frac{c_2}{m_2} \right) + \frac{2}{3} \left( \frac{c_4}{m_4} + \frac{c_5}{m_5} + \frac{c_6}{m_6} \right) + \frac{c_7}{m_7} + \frac{c_8}{m_8}$$

$$I^s = \frac{1}{3} \left( \frac{J_1}{m_1} + \frac{J_2}{m_2} \right) + \frac{2}{3} \left( \frac{J_4}{m_4} + \frac{J_5}{m_5} + \frac{J_6}{m_6} \right) + \frac{J_7}{m_7} + \frac{J_8}{m_8}$$

Для апробации метода частичного химического равновесия для расчета течений в пограничном слое и проверки его точности и эффективности было проведено следую-



Фиг. 3. Распределение массовых концентраций компонентов: 1, 5, 9 – O; 2, 6, 10 – N; 3, 7, 11 – NO<sup>+</sup>; 4, 8, 12 – N<sub>2</sub> для двух точек траектории (а – первая точка и б – вторая). Концентрация NO<sup>+</sup> увеличена в 10<sup>3</sup> раз (а), в 10<sup>4</sup> раз (б). Кривые 1–4 соответствуют модели частичного химического равновесия. 5–8 – “точному” расчету, 9–12 – равновесные значения концентраций компонентов при температуре, полученной из “точного” расчета



Фиг. 4. Распределение  $c_{NO}$  (а) и температуры (б) для двух точек траектории (кривые 1, 3, 5 – первая точка, 2, 4, 6 – вторая). Кривые 1, 2 соответствуют модели частичного химического равновесия, 3, 4 – “точному” расчету, 5, 6 – равновесные значения  $c_{NO}$  при температуре, полученной из “точного” расчета

щее исследование. Вначале была рассчитана полная система уравнений многокомпонентного частично ионизованного пограничного слоя на критической линии около затупленного тела. Температура стенки задавалась  $T_w = 2500$  К, на внешней границе пограничного слоя  $T_e = 10^4$  К. Давление поперек пограничного слоя  $p_{w,e} = 0,1$  атм. Рассматривались гладкие тела с различными радиусами затупления в критической точке. Поверхность в этом расчете предполагалась идеально каталитической. Затем при тех же параметрах задачи проводился расчет по модели частичного химического равновесия. Все профили концентраций химических компонентов и температуры на всех фигурах приведены в зависимости от погранслошной координаты  $\eta$  (переменная Лиза–Дородницына) поперек пограничного слоя на критической линии затупленного тела. Анализируя профили концентраций химических компонентов, можно заключить,

что хорошее совпадение результатов расчетов, полученных по этим двум методикам, наблюдается начиная с радиуса 0,1 м и выше. Сравнение результатов для радиуса 0,1 м представлено на фиг. 1 *а, б*. С увеличением радиуса затупления соответствующие профили всех компонентов и температуры для этих двух методик еще более сближаются. Для примера на фиг. 2 представлены малые концентрации  $\text{NO}^+$  для двух тел с радиусами 0,1 и 10 м.

Из анализа результатов, полученных при радиусах затупления от 0,1 до 10 м, можно сделать вывод о том, что даже при малых размерах обтекаемых тел (числа Дамкелера невелики) расчеты по полной модели и по модели частичного химического равновесия дают близкие результаты.

Аналогичное сравнение значений мольных концентраций компонентов, полученных по полной модели и по модели частичного химического равновесия, для различных радиусов было сделано для некаталитической стенки. Выводы, сделанные ранее, остаются справедливы и в этом случае.

Следующая серия расчетов проводилась для гладких тел с радиусом кривизны 1 м в критической точке, имитирующих движение по планирующей траектории спуска корабля многоразового использования [9] (5-й полет). Рассматривалось также течение на критической линии в рамках модели пограничного слоя. Поверхность тела считалась некаталитической. Были выбраны две характерные точки траектории с параметрами

$$1) H = 61 \text{ км}, \quad \rho_{\infty} = 0,998 \cdot 10^{-4} \text{ кг/м}^3, \quad v_{\infty} = 6,19 \text{ км/с}$$

$$2) H = 54 \text{ км}, \quad \rho_{\infty} = 0,411 \cdot 10^{-3} \text{ кг/м}^3, \quad v_{\infty} = 4,56 \text{ км/с}$$

Проводился анализ данных, полученных в полной постановке, по модели частичного химического равновесия и по равновесной модели (т.е. все химические реакции в смеси считались равновесными). На фиг. 3 сравниваются распределения массовых концентраций  $\text{N}_2$ ,  $\text{O}$ ,  $\text{N}$  и  $\text{NO}^+$  в первой и второй точках траектории, а на фиг. 4 продемонстрировано поведение  $c_{\text{NO}}$  и  $T$ . Из анализа сравнений можно заключить, что "точная" постановка и модель частичного химического равновесия дают идентичные результаты, в то время как использование равновесной модели протекания химических реакций дает существенное отличие результатов от "точных" значений.

**Заключение.** Расчеты проводились для различных моделей протекания гомогенных химических реакций в пограничном слое – равновесной, полностью неравновесной, а также для модели частичного химического равновесия. Рассмотренные в работе условия обтекания позволили ввести в рамках частично равновесной модели всего одну линейную комбинацию концентраций и одну линейную комбинацию диффузионных потоков. Введение таких переменных значительно упростило постановку задачи: все, кроме одного, уравнения диффузии заменяются алгебраическими соотношениями детального химического равновесия, а в правой части оставшегося дифференциального уравнения для линейной комбинации концентраций стоят источники только медленных стадий.

Для движения тела с радиусом затупления  $\approx 1$  м по планирующей траектории "точная" постановка и модель частичного химического равновесия дают идентичные результаты, в то время как равновесная модель дает существенное отличие результатов от "точных" значений.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (код проекта 95-01-01261).

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Сулов О.Н., Тирский Г.А., Шенников В.В. Описание химически равновесных течений многокомпонентных ионизованных смесей в рамках уравнений Навье–Стокса и Прандтля // ПМТФ. 1971. № 1. С. 73–89.

2. *Суслов О.Н.* Решение уравнений химически неравновесного многокомпонентного пограничного слоя разностным методом с повышенной точностью аппроксимации // Отчет Ин-та механ. МГУ. 1978. № 2098. 41 с.
3. Неравновесные физико-химические процессы в аэродинамике // Под ред. Г.И. Майкапара. М.: Машиностроение, 1972. 344 с.
4. *Дорренс У.Х.* Гиперзвуковые течения вязкого газа. М.: Мир, 1966. 439 с.
5. *Пилюгин Н.Н., Тирский Г.А.* Динамика ионизованного излучающего газа. М.: Изд-во МГУ, 1989. 309 с.
6. *Суслов О.Н., Фатеева Е.И.* Применение методов частичного равновесия и квазистационарных концентраций для описания многокомпонентной диффузии в движущихся вязких теплопроводных смесях // Отчет Ин-та механ. МГУ. 1993. № 4325. 59 с.
7. *Суслов О.Н., Фатеева Е.И.* Исследование течений многокомпонентных газовых смесей в условиях частичного химического равновесия // Изв. РАН. МЖГ. 1996. № 1. С. 114–124.
8. *Суслов О.Н., Фатеева Е.И.* Метод частичного равновесия для описания течений вязких теплопроводных многокомпонентных смесей // Отчет Ин-та механ. МГУ. 1994. № 4346. 42 с.
9. *Scott C.D.* Effect of nonequilibrium and wall catalysis on shuttle heat transfer // J. Spacecraft and Rockets. 1985. V. 22. № 5. P. 489–499.

Москва

Поступила в редакцию  
18.I.1996