03

Радиационная газовая динамика сверхорбитального космического аппарата Fire-II

© С.Т. Суржиков

Институт проблем механики им. А.Ю. Ишлинского РАН, Всероссийский научно-исследовательский институт автоматики им. Н.Л. Духова, 119526 Москва, Россия e-mail: surg@ipmnet.ru

(Поступило в Редакцию 2 июня 2015 г.)

Представлены результаты расчетов конвективного и радиационного нагревов спускаемого аппарата Fire-II. Выполнено сопоставление с экспериментальными летными данными. Вычислительная модель основана на решении полной системы уравнений радиационной газовой динамики вязкого, теплопроводного, физически и химически неравновесного газа и радиационного переноса в двухмерной осесимметричной геометрии. Спектральные оптические свойства высокотемпературных газов вычисляются с использованием *ab-initio* квазиклассических и квантово-механических методов. Расчет переноса селективного теплового излучения в атомных линиях выполнен с использованием *line-by-line* метода на специально генерируемой неоднородной расчетной сетке по длине волны излучения.

Введение

Расчетно-теоретические [1] и экспериментальные [2,3] исследования в области аэротермодинамики спускаемых аппаратов (СА), возвращаемых на Землю после космического полета, выполненные в 60–70-х годах прошлого столетия, показали, что при начальной скорости входа $V_{\infty} > 10$ km/s поверхность СА подвергается интенсивному конвективному и радиационному нагреву.

В летном эксперименте Fire-II [2,3], выполненном при подготовке космических аппаратов серии Арроlo к полету на Луну, были получены летные экспериментальные данные по конвективному и радиационному нагреву СА, входящего в плотные слои атмосферы Земли со скоростью $V_{\infty} = 11.4$ km/s. Интерес к указанным экспериментальным данным резко возрос в последние годы в связи с созданием пилотируемых космических аппаратов нового поколения, предназначенных для полета к Луне, а в перспективе — к Марсу.

Космический аппарат Fire-II являлся уменьшенной копией космического аппарата Арроlo. Лобовой аэродинамический щит состоял из трех неразрушаемых (неаблирующих) бериллиевых теплозащитных щитов. Первые два бериллиевых щита отделялись от космического аппарата в процессе полета по траектории спуска в моменты времени $t_1 \sim 1642.47$ s и $t_2 \sim 1648.18$ s [2], которые разделили весь участок интенсивного нагрева поверхности СА Fire-II на три участка. Параметры траектории указаны в табл. 1. В настоящей работе проводится сравнение с летными данными, полученными с использованием бериллиевого калориметра, который фиксировал конвективный нагрев и поглощенное тепловое излучение. Поглощательная способность бериллия приведена в работе [2].

Выполненный анализ наиболее подробных работ по расчетно-теоретическому анализу летных данных Fire-II [4,5], где, в свою очередь, анализировалось порядка двадцати работ, показал не только значительные различия в расчетных данных, но и принципиальные противоречия между данными, полученными с использованием различных моделей физической и химической кинетики.

Настоящая работа посвящена анализу экспериментальных данных Fire-II с использованием принципиально отличного от упоминавшихся выше [4,5] комплекса авторских компьютерных кодов NERAT(2D)+ +ASTEROID [6–9]. Расчеты радиационно-конвективного теплообмена выполнены с использованием двух кинетических моделей химических превращений в высокотемпературном воздухе и разных моделей физической кинетики. Отличительной особенностью настоящей работы является проведение *line-by-line* расчетов переноса селективного теплового излучения с учетом атомных линий атомов и ионов.

1. Система интегрируемых уравнений

Используемая в настоящей работе вычислительная модель гиперзвукового ламинарного обтекания сегментально-конического СА гиперзвуковым потоком газа включает в себя уравнения неразрывности, Навье—Стокса, сохранения энергии поступательного движения частиц в форме уравнения теплопроводности Фурье—Кирхгоффа, сохранения массы химических компонент и сохранения колебательной энергии в отдельных модах:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \mathbf{V}) = \mathbf{0},\tag{1}$$

$$\frac{\partial \rho u}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho u \mathbf{V}) = -\frac{\partial p}{\partial x} - \frac{2}{3} \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \operatorname{div} \mathbf{V}\right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[r \mu \left(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial r} \right) \right] + 2 \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial x} \right), \quad (2)$$

	1	1				1	1	r	r	
<i>t</i> , s	1634	1636	1637.5	1639	1640.5	1643	1644	1645	1648	1651
H, km	76.42	71.04	67.05	63.11	59.26	53.04	50.67	48.37	42.14	37.19
$ ho_\infty \cdot 10^{+7}$, g/cm 3	0.372	0.857	1.47	2.41	3.86	7.80	10.2	13.2	30.0	60.5
p_{∞} , erg/cm ³	20.8	51.7	96.2	167.4	281.4	617.9	822.6	1079.7	2298.9	4393
T_{∞}, K	195	210	228	242	254	276	281	285	267	253
T_w, \mathbf{K}	615	810	1030	1325	1560	640	1100	1520	1560	106
V_{∞} , km/s	11.36	11.31	11.25	11.14	10.97	10.48	10.19	9.83	8.3	6.19
R_n , cm	93.5			80.5			70.2			

Таблица 1. Траекторные параметры Fire-II

$$\frac{\partial r}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho v \mathbf{V}) = -\frac{\partial r}{\partial r} - \frac{\partial}{\partial 3} \frac{\partial}{\partial r} (\mu \operatorname{div} \mathbf{V}) \\ + \frac{\partial}{\partial x} \left[\mu \left(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial r} \right) \right] + 2 \frac{\partial}{\partial r} \left(\mu \frac{\partial v}{\partial r} \right) + 2 \mu \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{v}{r} \right), \quad (3) \\ \rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} + \rho c_p \mathbf{V} \operatorname{grad} T = \operatorname{div}(\lambda \operatorname{grad} T) + \frac{\partial p}{\partial t} + \mathbf{V} \operatorname{grad} p \\ + \Phi_{\mu} + Q_V - \sum_{i=1}^{N_s} h_i \dot{w}_i + \sum_{i=1}^{N_s} \rho c_{p,i} D_i (\operatorname{grad} Y_i \cdot \operatorname{grad} T), \quad (4)$$

2 2

dn

$$\frac{\partial \rho_i}{\partial t} + \operatorname{div} \rho_i \mathbf{V} = -\operatorname{div} \mathbf{J}_i + \dot{w}_i, \ i = 1, 2, \dots, N_s, \quad (5)$$

$$\frac{\partial \rho_{i(m)} e_{V,m}}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho_{i(m)} e_{V,m} \mathbf{V}) + \operatorname{div}(e_{V,m} \mathbf{J}_{i(m)}) = \dot{e}_{V,m}, \ m = 1, 2, \dots, N_V,$$
(6)

где *t* — время; *x*, *r* — ортогональные цилиндрические координаты; *и*, *v* — проекции вектора скорости V на оси координат x и r; p, ρ — давление и плотность; T температура поступательного движения частиц; μ , λ динамический коэффициент вязкости и коэффициент теплопроводности; Ф_µ — диссипативная функция; с_p удельная теплоемкость смеси при постоянном давлении; $c_p = \sum_{i=1}^{N_s} Y_i c_{p,i}; N_s$ — число химических компонентов смеси газов; c_p, h_i, Y_i — удельная теплоемкость при постоянном давлении, связанная с поступательными и вращательными степенями свободы, энтальпия и массовая доля *i*-го компонента смеси; \dot{w}_i, J_i, D_i — массовая скорость химических превращений, вектор плотности диффузионного потока, эффективный коэффициент диффузии *i*-го компонента смеси; $\mathbf{J}_i = -\rho D_i \operatorname{grad} Y_i$; Q_V — объемная мощность тепловыделения, обусловленная процессами колебательной релаксации в газовой смеси, $Q_V = -\sum_{m=1}^{N_V} \dot{e}_{V,m}; N_V$ — число колебательных мод $(N_V = 3: m = 1 \,$ для колебательной энергии $N_2, m = 2$ для O_2 , m = 3 для NO); $\dot{e}_{V,m}$ — источник колебательной энергии в *т*-й моде; $e_{V,m}$ — удельная энергия колебательного движения в *m*-й колебательной моде *i*-го компонента газовой смеси $e_{V,m} = R_{i(m)}\theta_m / [\exp(\theta_m / T_{V,m}) - 1],$

 $R_{i(m)} = R_0/M_{i(m)}, R_0$ — газовая и универсальная газовая постоянная; $T_{V,m}$ — колебательная температура *m*-й колебательной моды; $\rho_{i(m)}, D_{i(m)}, J_{i(m)}, M_{i(m)}$ — плотность, эффективный коэффициент диффузии в многокомпонентной газовой смеси, вектор плотности диффузионного потока и молекулярный вес *i*-го компонента газовой смеси, обладающего *m*-й модой колебательного движения; θ_m — характеристическая колебательная температура.

Замыкающие соотношения для решаемой системы уравнений включают в себя термическое уравнение состояния идеального газа

$$p = \rho R_0 T / M_{\Sigma}, \ M_{\Sigma}^{-1} = \sum_{i}^{N_s} Y_i / M_i, \ e = \sum_{i}^{N_s} Y_i e_i,$$
$$e_i = \int_{T_0}^T c_{V,i} dT + e_{i,0},$$
(7)

где $e_{i,0}$ — внутренняя энергия при T_0 , $c_{V,i}$ — удельная теплоемкость при постоянном объеме, M_{Σ} — суммарный молекулярный вес газа.

С учетом того, что колебательное возбуждение молекул может отличаться от равновесного, удельная внутренняя энергия записывается в виде

$$e_i = \frac{3}{2}R_iT + R_i\theta_i/[\exp(-\theta_i/T_{V,i}) - 1], \ R_i = R_0/M_i,$$

где предполагается использование межъядерного потенциала вида гармонического осциллятора.

Кроме термического и калорического уравнений состояния важными для решаемой задачи является способ расчета переносных свойств многокомпонентного газа: вязкости, теплопроводности и бинарных коэффициентов диффузии. Для этих целей используются соотношения, получаемые в первом приближении теории Чепмена–Энскога [10,11]:

$$\mu_i = 2.67 \cdot 10^{-5} \sqrt{M_i T} / \sigma_i^2 \Omega_i^{(2,2)*}, \text{ g/(cm \cdot s)},$$

$$\lambda_i = 8330 \sqrt{T/M_i} / \sigma_i^2 \Omega_i^{(2,2)*}, \text{ erg/(cm \cdot K)},$$

Журнал технической физики, 2016, том 86, вып. 3

dou

$$D_{i,j} = 1.858 \cdot 10^{-3} \, rac{\sqrt{T^3 (M_i + M_j)/M_i M_j}}{p \sigma_{i,j}^2 \Omega_{i,j}^{(1,1)*}}, \, \mathrm{cm}^2 / \mathrm{s},$$

где σ_i — эффективный диаметр столкновений, Å; $\Omega_i^{(2,2)*} = f(T_i)$ — интеграл столкновений; $T_i = kT/\varepsilon_i$; ε_i/k — параметр, характеризующий глубину потенциальной энергии взаимодействия частиц *i*-го типа, а также приближенные соотношения Манна, Брокау и Уилки [12], позволяющие рассчитывать необходимые свойства переноса:

$$\mu = 1 / \sum_{i=1}^{N_s} (Y_i / \mu_i), \ \lambda = \frac{1}{2} \Big[\sum_{i=1}^{N_s} x_i \lambda_i + 1 / \sum_{i=1}^{N_s} (x_i / \lambda_i) \Big],$$
$$D_i = (1 - x_i) / \sum_{j \neq 1}^{N_s} (x_j / D_{i,j}).$$

Интегралы столкновений между нейтральными и заряженными частицами рассчитывались по методике [6].

Использовался канонический вид модели химической кинетики:

$$\sum_{j=1}^{N_s} a_{j,n}[X_j] = \sum_{j=1}^{N_s} b_{j,n}[X_j], \ n = 1, 2, \dots, N_r,$$

а скорость образования *i*-й компоненты в *n*-й химической реакции записывалась в виде

$$\left(\frac{dX_i}{dt}\right)_n = (b_{i,n} - a_{i,n}) \left(k_{f,n} \prod_j^{N_s} X_j^{a_{j,n}} - k_{r,n} \prod_j^{N_s} X_j^{b_{j,n}}\right)$$
$$= (b_{j,n} - a_{i,n})(S_{f,n} - S_{r,n}),$$

где $a_{i,n}, b_{i,n}$ — стехиометрические коэффициенты *n*-й химической реакции; X_i — объемно-мольная концентрация *i*-й компоненты; $[X_j]$ — химические символы реагентов и продуктов химических реакций; N_r — число химических реакций; $S_{f,n}, S_{r,n}$ — скорости прямой и обратной реакций; $k_{f,n}, k_{r,n}$ — константы скоростей прямых и обратных реакций. Массовая скорость образования *i*-й компоненты в единице объема определяется следующим образом:

$$\dot{w}_i = M_i \sum_{n=1}^{N_s} (b_{i,n} - a_{i,n}) (S_{f,n} - S_{r,n}), \ g/(cm^3 \cdot s).$$

Константы скоростей прямого и обратного процесса для каждой из N_r реакций аппроксимировались обобщенной аррениусовской зависимостью

$$k_{j(r),n} = A_{f(r),n} T^{n_{f(r),n}} \exp\left(-\frac{E_{f(r),n}}{kT}\right),$$
 (8)

где $A_{f(r),n}, n_{f(r),n}, E_{f(r),n}$ — аппроксимирующие коэффициенты для констант скоростей прямой (f) и обратной (r) химических реакций, k — постоянная Больцмана, n — номер химической реакции в кинетической модели.

Условие квазинейтральности использовалось для нахождения мольных концентраций электронов.

При решении системы уравнений сохранения колебательной энергии для каждой колебательной моды (6) учитывались процессы колебательно-поступательной (VT) релаксации и изменения удельной колебательной энергии за счет химических реакций (VC-процессы):

$$\dot{e}_{V,m} = \dot{e}_{V,m}(VT) + \dot{e}_{V,m}(VC).$$
 (9)

Релаксационное изменение энергии в каждой колебательной моде рассчитывалось по приближенной теории Ландау–Теллера [13,14]:

$$\dot{e}_{V,m}(\mathrm{VT}) = \rho_{i(m)} \, \frac{e_{V,m}^0 - e_{V,m}}{\tau_m},$$
 (10)

 $e_{V,m}^0 = e_{V,m}(T_{V,m} = T)$ — равновесная удельная энергия колебательного движения в *m*-й колебательной моде *i*-го компонента; τ_m — характерное время релаксации *m*-й колебательной моды. Время VT-релаксации τ_m рассчитывалось по рекомендациям Милликена и Вайта [13] с поправкой Парка [15], ограничивающей величину τ_m снизу.

Изменение колебательной энергии за счет протекания химических реакций учитывалось по модели:

$$\dot{e}_{V,m}(\text{VC}) = e_{V,m}(\dot{w}_{i(m)} - |\dot{w}_{i(m)}|)/2,$$
 (11)

где предполагалось, что уменьшение колебательной энергии в *m*-й моде в 1 cm³ за 1 s пропорционально объемной скорости исчезновения молекул, имеющих эту колебательную моду. Диффузионный перенос энергии колебательного возбуждения молекул учитывался за счет их диффузии.

Если в расчетах констант скоростей диссоциации двухатомных молекул и ионизации атомов и молекул использовалась температура поступательного движения T, то это отвечало модели локального термодинамического равновесия (ЛТР), т. е. модели больцмановской термализации внутренних степеней свободы с температурой T.

Используемые в расчетах константы скоростей диссоциации $k_f = k_D$ подвергались также модификации с целью учесть термическую неравновесность молекул. Использовалось следующее представление констант скоростей диссоциации: $k_D(T, T_V) = k_D(T)Z(T, T_V)$, где фактор неравновесности $Z(T, T_V)$ рассчитывался с использованием модели Тринора–Мэрроуна [16].

Модель неравновесной диссоциации Тринора-Мэрроуна совместно с моделью релаксации колебательных степеней свободы (6), (9)-(11) далее определяется по аналогии с [16] как модель CVDV.

2. Граничные условия

В набегающем со скоростью V_{∞} потоке задавались условия невозмущенного газа для заданной высоты полета $(p_{\infty}, \rho_{\infty})$, связанные термическим уравнением

состояния (8) с температурой T_{∞} и молекулярным весом $M_{\Sigma} = 29$ g/mole. Эти граничные условия задавались на всей внешней поверхности расчетной области. Возмущения в поле течения не достигали этой границы. На поверхности СА задавались условия прилипания.

В соответствии с рекомендациями [4] температура поверхности задавалась фиксированной (табл. 1). Поверхность полагалась некаталитической, а для заряженных частиц задавалось условие полной рекомбинации. Считалось, что на обтекаемой поверхности достигается термическое равновесие ($T_V = R_w$).

Граничные условия в выходном сечении $x = x_{max}$ задавались в виде $\frac{\partial \psi}{\partial \xi} = 0$, где $\psi = \{u, v, T, \rho, Y, e_{V,m}\}, \xi$ — координатная линия, подстраиваемая к линиям тока. Кроме пограничного слоя у поверхности, замыкаемого течением в донной области, здесь всегда наблюдалось сверхзвуковое течение.

3. Алгоритм численного моделирования

Система уравнений (1)-(6) интегрировалась численно до установления стационарного решения. Система уравнений неразрывности и Навье-Стокса (1)-(3) интегрировалась с использованием явного метода и конечноразностной схемы AUSM [18] 2-го порядка аппроксимации. Неявный метод 2-го порядка точности аппроксимации по пространству и по времени использовался для интегрирования системы уравнений (4)-(6). Массовые скорости образования компонент \dot{w}_i и факторы неравновесности рассчитывались на этапе решения уравнений сохранения массы компонент смеси газов. После завершения этапа интегрирования систем уравнений проводился расчет свойств переноса, молекулярного веса смеси и поля давления с использованием термического уравнения состояния (7).

Для численного интегрирования уравнений применялся конечно-разностный метод, поэтому с использованием функций преобразования координат вида $\xi = \xi(x, r)$, $\eta = \eta(x, r)$ производилось преобразование всех дифференциальных уравнений. Сами криволинейные расчетные сетки строились с использованием аналитических преобразований.

4. Кинетические модели, использованные при численном анализе летного эксперимента Fire-II

В работе [19] было показано, что выбор кинетической модели для расчета аэрофизики СА в условиях значительной ионизации газа в сжатом слое является одним из определяющих элементов полной аэротермодинамической модели. В настоящей работе были выполнены по двум кинетическим моделям. Константы аппроксимации скоростей прямых реакций заимствовались из [20,21]. Константы скоростей обратных реакций в модели [20] рассчитывалась с использованием констант равновесия [22], аппроксимированных в форме обобщенного закона Аррениуса (8). Такая аппроксимации констант равновесия тестировалась сравнением с данными Парка [20], основанными на данных JANAF [23]. В работе [6] показано хорошее согласие констант равновесия при температурах T > 1000 К. Кинетическая модель [21] применялась без какой-либо модификации.

5. Спектральные оптические свойства и радиационный перенос

При решении задач аэротермодинамики сверхорбитальных СА принципиальное значение имеет включение в расчетную модель процессов переноса селективного теплового излучения. В настоящей работе для этих целей используется компьютерный код ASTEROID, предназначенный для расчета спектральных, групповых и интегральных оптических характеристик высокотемпературных смесей газов.

Важной особенностью компьютерной платформы ASTEROID является использование первичной спектроскопической информации об атомах и молекулах, а также неэмпирических или квазиклассические методов расчета спектральных оптических свойств. Подробно используемые в задачах радиационной газовой динамики компьютерные модели изложены в [9]. Учитывались процессы фотоионизационного поглощения атомов и ионов N, O, N⁺, O⁺, а также молекул N₂, O₂, NO, процессы фотодиссоциации NO, N2, O2, континуальное поглощение N⁻, континуумы поглощения в обратных тормозных процессах электронов в полях остаточных ионов N, O, N⁺, O⁺, свободно-свободные переходы в полях нейтральных частиц N2, O2, N, O, квазинепрерывное поглощение NO₂, колебательные полосы NO. В табл. 2 приведены имена электронных полос и диапазон колебательных квантовых чисел, учтенных в *ab-initio* расчетах коэффициентов Эйнштейна электронно-колебательных переходов двухатомных молекул.

В расчетах переноса излучения в атомных линиях применялась следующая методика. На первом этапе формировалась база данных учитываемых атомных линий. Набор энергий квантовых атомных уровней выбирался в соответствии с [24]. Индивидуально учитывалась тонкая структура термов, что позволяло выполнять расчеты компонентов мультиплетов атомных линий. Расчет коэффициентов Эйнштейна всех возможных (разрешенных) квантовых переходов между выбранными уровнями производился с использованием квантовых правил отбора, а также с применением метода Хартри–Фока [25–27].

Расчет коэффициентов Эйнштейна каждого индивидуального квантового перехода (а также соответствующих сил осцилляторов и сил линий) проводился совместно с вычислением констант квадратичного эффекта Штарка С₄ уширения всех компонент мультиплета электронами. Проводилось суммирование по всем компонентам

Таблица 2	. Электронно-колебат	гельные и колеб	ательные полос	ы двухатомных	молекул, г	принятые в уче	г в модели	радиационной
аэрофизики	CA Fire-II							

№ п.п.	Молекула, эл имя элек	ектронный переход, тронной полосы	Спектральный диапазон, ст ⁻¹	Диапазон колебательных квантовых чисел					
				$V'\equiv V_u$	$V''\equiv V_l$				
Молекула NO									
1	NO, $A^2\Sigma^+ - X^2\Pi$,	у-система	16000-62000	8	22				
2	NO, $B^2\Pi - X^2\Pi$,	β-система	16000-60000	15	22				
3	NO, $B^{\prime 2}\Delta - X^2 \Pi$,	β' -система	35000-68000	7	22				
4	NO, $C^2\Pi - A^2\Sigma^+$		1000 - 20000	4	8				
5	NO, $C^2\Pi - X^2\Pi$,	δ -система	20000-65000	4	22				
6	NO, $D^2\Sigma^+ - A^2\Sigma^+$		3500-15000	4	8				
7	NO, $D^2\Sigma^+ - X^2\Pi$,	<i>є</i> -система	20000-65000	4	22				
8	NO, $X^2\Pi - X^2\Pi$		100-15000	25	25				
Молекула N2									
1	N ₂ , $A^{3}\Sigma_{\mu}^{+} - X^{1}\Sigma_{q}^{+}$,	Вегарда-Каплана	1000-75000	21	21				
2	N ₂ , $b^{1}\Pi_{u} - X^{1}\Sigma_{q}^{+}$,	Берджа-Хопфильда 1	74000-105000	1	12				
3	N ₂ , $B^3\Pi_{\varphi} - A^3\Sigma^+_{\mu}$,	Первая положительная	1000-25000	21	21				
4	N ₂ , $b'^1 \Sigma^+_u - X^1 \Sigma^+_q$,	Берджа-Хопфильда 2	54000-1200000	25	25				
5	$N_2, C^3 \Pi_u - B^3 \Pi_g,$	Вторая положительная	10000 - 40000	4	19				
6	N ₂ , $D^3 \Sigma_u^+ - B^3 \Pi_g$,	Четвертая положительная	28500 - 50000	0	10				
Молекула N2									
1	$N_2^+, A^2\Pi_u - X^2\Sigma_g^+,$	Мейнела авроральная	1000-38000	20	20				
2	$N_{2}^{+}, B^{2}\Sigma_{u}^{+} - X^{2}\Sigma_{g}^{+},$	Первая отрицательная	7000 - 40000	10	20				
3	$\tilde{\mathrm{N}_{2}^{+}}, \ C^{2}\Sigma_{u}^{+}-X^{2}\Sigma_{g}^{+},$	Вторая отрицательная	27000-95000	15	20				
Молекула NO ⁺									
1	NO ⁺ , $A^1\Pi - X^1\Sigma^+$		39000-90000	15	22				
Молекула О ₂ +									
3	$O_{2}^{+}, A^{2}\Pi_{u} - X^{2}\Pi_{g},$	Вторая отрицательная	8000-52700	21	21				
4	$\tilde{\mathrm{O}_2^+}, \ b^4\Sigma_g^ a^4\Pi_u,$	Первая отрицательная	1000-30500	15	20				
Молекула О ₊									
2	$O_2, B^3 \Sigma_u^ X^3 \Sigma_g^-,$	Шумана-Рунге	22000-57000	14	21				

мультиплетного терма, на которые возможен переход с данного уровня. По результатам этих расчетов была сформирована база данных [9], включающая в себя энергии уровней (с учетом расщепления по квантовому числу полного момента J), волновое число перехода, статистический вес нижнего уровня, силу осциллятора перехода в поглощении, константу C₄.

Радиационный переход в сжатом слое у лобовой поверхности рассчитывался с использованием метода полумоментов [28]. В работах [29,30] было показано, что применительно к лобовому аэродинамическому щиту приближение плоского слоя дает близкие результаты к тем, что дает метод дискретных направлений (*Ray-tracing* method), являющийся асимптотически точным в пространственном (трехмерном) случае.

В настоящей работе расчеты переноса селективного теплового излучения выполнялись с использованием *line-by-line* метода на спектральном диапазоне $\Delta \omega = 1000 - 150\ 000\ {\rm cm}^{-1}$, где вводилась неоднородная сетка по волновому числу, сгущение точек которой производилось в окрестности центров атомных линий, имеющих фойгтовский контур. Допплеровские полуширины линий для построения неоднородной частотной шкалы рассчитывались при T = 6000 К. Общее число спектральных точек равно 71 900. Учитывалось 1706 атомных линий атома N, 699 линий атома O, 449 линий иона N⁺ и 866 линий иона O⁺.

Исходными данными для проведения *line-by-line* расчетов являлись: координаты расчетной сетки по нормали к поверхности, в узлах которой задавались значения давления, поступательной, колебательных и электронной температур, значения мольных концентраций всех компонент газовой смеси и электронов.

Для проведения *line-by-line* расчетов в условиях отсутствия термического равновесия по внутренним степеням свободы заселенность электронных состояний атомов и молекул определялась по больцмановскому закону с электронной температурой. Температура вращательных степеней свободы молекул полагалась равной *T*.

Результаты численного моделирования

Расчеты радиационной газовой динамики СА Fire-II проводились для траекторных точек, представленных в табл. 1. Радиационная аэротермодинамика Fire-II моделировалась с использованием многоблочной расчетной точки. В пределах каждого из 4 расчетных блоков, расположенных вблизи лобовой поверхности КА, его подветренной поверхности, заднего аэродинамического щита и следа, использовалась многосеточная технология построения сеток. Решение, полученное на первоначально построенной сетке, использовалось для получения уточненного решения на измельчаемой 2–3 раза сетке.

На рис. 1 показано распределение продольной скорости и поступательной температуры для точки траектории t = 1639 s, которая соответствует завершающей фазе нагрева первого аэродинамического щита. Поступательная температура достигает своего максимума во фронте ударной волны, а затем падает благодаря энергозатратам на диссоциацию и ионизацию. Вблизи верхней границы пограничного слоя температура составляет 12 000 К.



Рис. 1. Поле поступательной температуры (*K*, верхняя часть рисунка) и продольная скорость $V_x = u/V_{\infty}$ (нижняя часть рисунка) при t = 1639 s. Кинетическая модель Парка с учетом неравновесной диссоциации по модели Тринора-Мэрроуна.



Рис. 2. Поле колебательной температуры N_2 (*K*, верхняя часть рисунка) и O_2 (*K*, нижняя часть рисунка) при t = 1639 s. Кинетическая модель Парка с учетом неравновесной диссоциации по модели Тринора-Мэрроуна.

В области течения расширения за боковой кромкой аэродинамического щита и в следе поступательная температура падает. Однако в следе наблюдается возрастание температуры. Набегающий поток со скоростью ~ 11.4 km/s сильно тормозится в сжатом слое и после расширения за кромкой лобового аэродинамического щита образует зону возвратно-вихревого движения.

На рис. 2 показана колебательная температура молекул N_2 и $O_2.$ В следе отсутствует термическое равновесие и заметного повышается колебательная температура N_2 и O_2 , что связано с процессами термализации внутренних степеней свободы и рекомбинацией атомов. Рассматриваемые условия в сжатом слое характеризуются $\sim 10\%$ ионизацией воздуха в сжатом слое, распределение концентраций ионов азота и электронов в котором, а также в области расширения газа за лобовым аэродинамическим щитом показано на рис. 3.

На рис. 4 показаны распределения мольных долей одиннадцати компонент высокотемпературного воздуха вдоль передней критической линии тока. На этом же рисунке хорошо видны детали распределения молекулярных и атомарных компонент в пограничном слое. Заметим, что они находятся в хорошем согласии с данными [5].

На рис. 5 приведены распределения поступательной и колебательных температур вдоль критической линии тока для траекторной точки t = 1639 s. Расчеты выпол-



Рис. 3. Мольные доли N⁺ (верхняя часть рисунка) и e^- (нижняя часть рисунка) при t = 1639 s. Кинетическая модель Парка с учетом неравновесной диссоциации по модели Тринора-Мэрроуна.



Рис. 4. Распределение мольных концентраций компонент вдоль критической линии при *t* = 1639 s. Кинетическая модель Парка в приближении ЛТР без учета РадГД взаимодействия.

нены для двух моделей термализации внутренних степеней свободы без учета радиационно-газодинамического (РадГД) взаимодействия. Использовалась кинетическая модель Парка. Представленные данные хорошо иллю-



Рис. 5. Распределение поступательной и колебательных температур вдоль критической линии тока для двух моделей термализации внутренних степеней свободы при t = 1639 s: 1-4 — модель ЛТР, 5-8 модель CVDV; 1, 5 — поступательная температура, 2, 6 — $T_V(N_2), 3, 7$ — $T_V(O_2), 4, 8$ — $T_V(NO)$. Кинетическая модель Парка.

стрируют процесс термализации в сжатом слое. На более ранних участках траектории ($t < 1637 \, {\rm s}$) колебательная температура N₂ остается отличной от поступательной температуры почти до середины сжатого слоя. В последующие моменты времени размеры зоны релаксации сокращаются, и при $t > 1643 \, {\rm s}$ можно отметить практически полную термализацию вблизи заднего фронта головной ударной волны.

Сравнение результатов, полученных по модели ЛТР и модели неравновесной диссоциации на рис. 5, показывает, что учет неравновесной диссоциации увеличивает отход фронта ударной волны от поверхности. Это связано с тем, что при этом несколько снижается энергия, расходуемая на диссоциацию молекул в релаксационной зоне.

По мере вхождения в плотные слои атмосферы влияние учета неравновесной диссоциации на величину отхода фронта ударной волны становится незначительным. Однако при этом несколько снижается температура сжатого слоя.

На рис. 6 приведены осевые распределения поступательной и колебательных температур, полученные по кинетической модели Парка с учетом и без учета РадГД взаимодействия. Расчеты выполнены с использованием модели CVDV. При учете РадГД взаимодействия наблюдается снижение температуры в сжатом слое примерно на 1000 К и некоторое увеличение температурного градиента в пограничном слое. Такое поведение температуры объясняется высвечиванием теплового излучения из сжатого слоя (учет потерь на излучение приводит к падению температуры) и поглощению теплового излучения в относительно низкотемпературном пограничном



Рис. 6. Распределение поступательной и колебательных температур вдоль критической линии тока для кинетической модели Данна-Канга (1-4) и Парка (5-8) с учетом неравновесной диссоциации по модели Тринора-Мэрроуна без учета РадГД взаимодействия при t = 1639 s; 1, 5 — поступательная температура; 2, 6 — $T_V(N_2)$; 3, 7 — $T_V(O_2)$; 4, 8 — $T_V(NO)$.



Рис. 7. Распределение поступательной и колебательных температур вдоль критической линии тока для кинетических моделей Парка с учетом неравновесной диссоциации без учета и с учетом РадГД взаимодействия при t = 1639 s; l, 5 — поступательная температура; 2, 6 — $T_V(N_2)$; 3, 7 — $T_V(O_2)$; 4, 8 — $T_V(NO)$.

слое (в основном в ультрафиолетовой части спектра). В траекторных точках при *t* > 1463 s РадГД взаимодействие практически не проявляется.

Температурные распределения на рис. 7 иллюстрируют влияние выбранной кинетической модели. Приведенные данные дополняют (и подтверждают) результаты исследований, опубликованных в [19], но на существенно более подробной расчетной сетке. На рис. 7 показаны поступательная и колебателные температуры для кинетических моделей Парка [20] и Данна-Канга [21]. Расчеты выполнены с использованием модели CVDV без учета РадГД взаимодействия. Аналогичные результаты наблюдаются и при учете РадГД взаимодействия.

Рассмотренные выше закономерности формирования температурных распределений для разных моделей физической и химической кинетики, а также для случая учета РадГД взаимодействия позволяют объяснить степень зависимости рассчитываемых радиационных характеристик сжатого слоя от используемых моделей.

На рис. 8 показаны распределения плотностей интегральных по спектру радиационных тепловых потоков $W_{\rm rad}$, направленных к поверхности СА Fire-II, с учетом и без учета атомных линий при t = 1639 s. Использовалась кинетическая модель Парка без учета РадГД взаимодействия. На этом же рисунке приведены плотности интегральных тепловых потоков $W_{\rm rad}^+$, направленных от поверхности в направление фронта ударной волны.

Важный вывод, который можно сделать из рис. 8, состоит в том, что вклад атомных линий в радиационный нагрев поверхности составляет более 100%. В начальных точках траектории радиационный тепловой поток к поверхности возрастает почти монотонно по всей толщине сжатого слоя. В пограничном слое наблюдается частичное ослабление излучения.

В более поздние моменты времени отмечается более интенсивное возрастание радиационных тепловых потоков за фронтом ударной волны. Это связано с увеличением оптической толщины сжатого слоя на меньших высотах.

Представление об определяющих радиационных процессах можно получить из анализа спектрального состава радиационных тепловых потоков на поверхности СА Fire-II. Плотности спектральных радиационных тепловых потоков в критической точке при t = 1639 s на разных участках траектории представлены на рис. 9. На этом рисунке хорошо идентифицируется линейчатая структура спектра атомов и ионов. Очевидно, что вся совокупность атомных линий может быть разделена на две группы. Первая группа расположена в инфракрасной области спектра и частично захватывает видимую область. Эти линии образованы при квантовых переходах между возбужденными состояниями. Из представленных на рис. 9 плотностей спектральных радиационных тепловых потоков на поверхности хорошо видно, что эти линии практически не реабсорбируются.

Вторая группа атомных линий расположена в ультрафиолетовой части спектра. Эти атомные линии образованы при квантовых переходах в основные состояния атомов и молекул. Из рис. 9 видно, что для указанных атомных линий наблюдается реабсорбция излучения, высвечиваемого в атомных линиях в высокотемпературном сжатом слое в относительно низкотемпературном пограничном слое.



Рис. 8. Распределение плотности однонаправленных (1-3) интегральных радиационных тепловых потоков вдоль критической линии тока КА Fire-II при t = 1639 s: 1, 2 — радиационные потоки к поверхности и от поверхности без учета атомных линий, 3 — радиационный поток к поверхности с учетом атомных линий. Полный радиационный поток без учета атомных линий показан штрихпунктирной кривой. Кинетическая модель Парка с учетом радиационно-газодинамического взаимодействия и неравновесной диссоциации.



Рис. 9. Плотность спектральных радиационных тепловых потоков W_{rad} в критической точке КА Fire-II (1, 2) при t = 1639 s и соответствующие кумулятивные функции Q_{rad} (3, 4). Кинетическая модель Парка с учетом радиационно-газодинамического взаимодействия и неравновесной диссоциации. 1, 3 — без учета атомных линий; 2, 4 — с учетом атомных линий.

Заметим, что при *t* > 1645 s в суммарную плотность радиационных тепловых потоков начинают давать видимый вклад электронные полосы двухатомных молекул.

Количественные данные по вкладу отдельных радиационных процессов в суммарный нагрев можно полу-



Рис. 10. Плотность конвективных Q_w (1-3), радиационных W_{rad} (3-7) и полных тепловых потоков в критической точке CA Fire-II при использовании кинетической модели Парка: 1 — расчеты по коду NERAT; 2, 3 — расчетные данные кодов GIANT и LAURA (по [3]); 4-7 — плотность интегральных радиационных тепловых потоков по кодам NERAT+ASTEROID; 4, 5, 8 — приближение ЛТР; 6, 7, 9 — модель CVDV; 5, 7 — с атомными линиями; 4, 6 — без атомных линий; 8, 9 — плотность полного теплового потока по NERAT+ASTEROID с учетом поглощения радиационного теплового потока в бериллиевой оболочке, с учетом атомных линий; 10 — экспериментальные данные; 11, 12 — плотность радиационных тепловых потоков по [4, 5], поглощенных в бериллиевой оболочке.

чить из анализа кумулятивных функций спектральных радиационных потоков в критической точке, которые также приведены на рис. 9. Отметим значительную роль атомных линий в суммарном нагреве поверхности СА Fire-II. Полный интегральный поток к поверхности соответствует максимальной величине кумулятивной функции при $\omega = 125\,000\,{\rm cm^{-1}}$. Радиационный нагрев при использовании модели Парка оказывается ниже примерно на 30%, чем при использовании модели Данна и Канга.

Общие закономерности при учете РадГД взаимодействия состоят в некотором снижении интегральных радиационных потоков к поверхности. Модель неравновесной диссоциации дает относительно большие величины интегральных радиационных потоков (примерно на 10%).

Сводка результатов расчетов плотностей конвективных и интегральных радиационных тепловых потоков вдоль траектории полета СА Fire-II в сравнении с экспериментиальными данными представлена на рис. 10.

Экспериментальные калориметрические данные сравниваются с расчетными данными, полученными с использованием компьютерной модели NERAT+ +ASTEROID и кинетической модели Парка. Заметим, что данные "8" и "9" получены с учетом доли радиационного теплового потока, поглощенной в бериллиевой оболочке.

На этом же рисунке дано сопосталение полученных в настоящей работе плотностей конвективных тепловых потоков с аналогичными данными, полученными по кодам GIANTS и LAURA [4]. Отметим хорошее согласие с данными GIANTS.

Плотности интегральных радиационных тепловых потоков с учетом атомных линий, но без учета поглощения в бериллиевой оболочке показаны кривыми 5 и 7. Данные с учетом неравновесной диссоциации превышают данные, полученные по модели ЛТР (данные 5), примерно на 10%. Плотности интегральных тепловых потоков без учета атомных линий показаны кривыми 4 и 6. На этом же рисунке приведены результаты расчетов радиационных тепловых потоков с учетом поглощения в бериллиевой оболочке, полученные в работах [4,5].

Аналогичные расчеты были выполнены с использованием кинетической модели Данна и Канга. Учет неравновесной диссоциации по модели Тринора—Мэрроуна приводит к уменьшению плотности радиационных тепловых потоков более чем на 30%. Вдоль всей траектории полета кинетическая модель Парка дает несколько лучшее согласие с экспериментальными данными. В квазиравновесной области течения (t > 1648 s) обе кинетические модели приводят к одинаковым результатам.

Полученные в настоящей работе расчетные данные позволяют считать успешным валидацию компьютерной модели NERAT+ASTEROID, что повышает достоверность данных по радиационно-конвективному нагреву перспективного транспортного корабля [30].

Работа выполнена в рамках Программы фундаментальных исследований РАН и гранта РФФИ № 13-01-00537.

Список литературы

- Белоцерковский О.М., Биберман Л.М., Бронин С.Я., Лагарьков А.Н., Фомин В.Н. // ТВТ. 1969. Т. 7. № 3. С. 529– 541.
- [2] Cauchon D.L. Radiative Heating Results from the Fire II Flight Experiment at a Reentry Velocity of 11:4 km/s // NASA TM X-1402, 1967.
- [3] Cornette E.S. Forebody Temperature and Calorimeter Heating Rates Measured During Project Fire-II Reentry at 11:35 km/s // NASA TM X-1305, 1966.
- [4] Olynick D.R., Henline W.D., Chambers L.H., Candler G.V. // AIAA Paper 94-1955, 1994.
- [5] Johnston C.O., Hollis B.R., Sutton K. // AIAA Paper 2007-3908, 2007.
- [6] Суржиков С.Т. Радиационная газовая динамика спускаемых космических аппаратов. Многотемпературные модели. М.: ИПМех РАН, 2013. 706 с.
- [7] Shang J.S., Surzhikov S.T. // J. Spacecraft and Rockets. 2011.
 Vol. 48. N 3. P. 385–396.
- [8] Surzhikov S.T., Shang J.S. // J. Spacecraft and Rockets. 2012.
 Vol. 49. N 5. P. 875–888.

- [9] Суржиков С.Т. Оптические свойства газов и плазмы. М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2004. 575 с.
- [10] Гинзбург И.П. Трение и теплопередача при движении смеси газов. Л.: Изд-во ЛГУ, 1975. 278 с.
- [11] Агафонов В.П., Вертушкин В.К., Гладков А.А., Полянский О.Ю. Неравновесные физико-химические процессы в аэродинамике. М.: Машиностроение, 1972. 344 с.
- [12] Bird R.B., Stewart W.E., Lightfoot E.W. Transport Phenomena. John Wiley & Sons, Inc. Second Edition. 2002. 912 p.
- [13] Millikan R.C., White D.R. // J. Chemical Physics. 1963. Vol. 39. N 12. P. 3209–3212.
- [14] Ступоченко Е.В., Лосев С.А., Осипов А.И. Релаксационные процессы в ударных волнах. М.: Наука, 1965. 484 с.
- [15] Park C. Nonequilibrium Hypersonic Aerothermodynamics. NY: Wiley, 1990.
- [16] Treanor C.E., Marrone P.V. // Phys. of Fluids. 1962. Vol. 5. N 9. P. 1022–1026.
- [17] Залогин Г.Н., Козлов П.Н., Кузнецова Л.А., Лосев С.А., Макаров В.Н., Романенко Ю.В., Суржиков С.Т. // ЖТФ. 2001. Т. 71. Вып. 6. С. 10–16.
- [18] Edwards J.R., Liou M.-S. // AIAA J. 1998. Vol. 36. N 9. 1998.
 P. 1610–1617.
- [19] Суржиков С.Т. // Химическая физика. 2008. Т. 27. № 10.14. С. 63–76.
- [20] Park C. // J. Thermophysics and Heat Transfer. 1993. Vol. 7. N 3. P. 385–398.
- [21] *Dunn M.G., Kang S.W.* Theoretical and Experimental Studies of Reentry Plasmas. NASA CR 2232, April 1973.
- [22] Гурвич Л.В., Вейц И.В., Медведев В.А. и др. Термодинамические свойства индивидуальных веществ. М.: Наука, 1978. 495 с.
- [23] JANAF Thermochemical Tables. Third Edition. M.W. Chase Jr., Davies C.A., Downey J.R. Jr., Fririp D.J., Mc Donald R.A., Syverud A.N. // J. Phys. Chem. Ref. Data. 1985. Vol. 14. Suppl. 1.
- [24] Ralchenko Yu., Jou F.-C., Kelleher D.E., Kramida A.E., Musgrove A., Reader J., Wiese W.L., Olsen K. NIST Atomic Spectra Database, Version 3.1.0 // National Inst. of Standards and Technology (NIST) Physics Lab., http://physics.nist.gov/PhysRefData/ASD/index.
- [25] Собельман И.И. Введение в теорию атомных спектров. М.: ГИФМЛ, 1963. 640 с.
- [26] Хартри Д. Расчеты атомных структур. М.: Изд-во ИЛ., 1960. 271 с.
- [27] Барановский В.И. Квантовая механика и квантовая химия. М.: Издательский центр "Академия", 2008. 382 с.
- [28] Surzhikov S.T. // AIAA Paper № 97-2367. 1997. 11 p.
- [29] Суржиков С.Т. Тепловое излучение газов и плазмы. М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2004. 543 с.
- [30] Djadkin A., Beloshitsky A., Shuvalov M., Surzhikov S. // AIAA 2011–0453. 2011. 29 p.