

На правах рукописи

КОТОВ Дмитрий Владимирович

**ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ МОДЕЛИ
ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКОЙ КИНЕТИКИ
ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНЫХ ГАЗОВЫХ ПОТОКОВ**

01.02.05 – механика жидкости, газа и плазмы

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Москва 2010

Работа выполнена в Учреждении Российской академии наук
Институте проблем механики им. А. Ю. Ишлинского РАН (ИПМех РАН)

Научный руководитель: член-корреспондент РАН, профессор
Суржиков Сергей Тимофеевич

Официальные оппоненты: доктор физико-математических наук, профессор
Райзер Юрий Петрович

кандидат физико-математических наук
Будник Александр Петрович

Ведущая организация: **Центральный Аэрогидродинамический институт им.
профессора Н. Е. Жуковского**

Защита состоится 30 сентября 2010 года в 15⁰⁰ часов на заседании
диссертационного совета Д 002.240.01 при Институте проблем механики
им. А. Ю. Ишлинского РАН по адресу: 119526, Москва, проспект Вернадского,
д. 101, корп. 1, ауд. 237.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ИПМех РАН.

Автореферат разослан «___» августа 2010 года.

Ученый секретарь диссертационного совета Д 002.240.01
при ИПМех РАН

кандидат физико-математических наук

Сысоева Е.Я.

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность работы. Экспериментальные и теоретические исследования физико-химических процессов, протекающих при гиперзвуковом полете летательных аппаратов, приобретают все большую актуальность с развитием аэрокосмической техники. Однако, физические эксперименты в этой области отличаются высокой стоимостью и сопровождаются множеством технологических сложностей. Поэтому большую роль играет численное моделирование условий гиперзвукового полета [1, 2, 3]¹.

Полет летательного аппарата на гиперзвуковой скорости ($M \geq 6$) сопровождается множеством процессов, не характерных для движения при более низких числах Маха. В качестве примера этих процессов можно особо отметить наличие химических реакций (прежде всего диссоциация), излучение нагретого газа, турбулентное смешение и горение. Наличие такого множества физико-химических процессов приводит к необходимости комплексного развития соответствующих вычислительных моделей физической механики.

Важной составной частью современных задач физической и химической механики является задача расчета констант скоростей кинетических процессов и времен их релаксации. Современные компьютерные алгоритмы позволяют не только моделировать поведение микросистем на атомном и молекулярном уровне, но и включать ряд моделей микроуровня в модели макроуровня. Появился и в настоящее время активно развивается новый тип моделей физической механики - интегрированные модели, то есть модели физических явлений, объединяющие в себе одновременную реализацию многоуровневых моделей. Разработка таких моделей и соответствующих численных методов является весьма актуальной в настоящее время [4].

Цель работы заключается в построении интегрированной модели ряда физико-химических процессов, протекающих при гиперзвуковом полете летательного аппарата и разработка вычислительных методов и компьютерных кодов для проведения численных экспериментов в рамках построенной модели.

Научная новизна работы:

1. С использованием подходов, предложенных в литературе, создан генератор расчетных сеток, основанный на решении уравнений параболического типа. Генератор позволяет строить структурированные сетки в автоматическом режиме во многих практически важных случаях.
2. Разработан принципиально новый расчетно-теоретический подход и создан компьютерный код *ab-initio* расчета констант скоростей диссоциации в высокотемпературных газовых смесях и времен колебательной релаксации двухатомных молекул, основанный на методе молекулярной динамики.

¹ нумерация соответствует списку цитируемой литературы

3. Разработан новый имитационный алгоритм метода Монте-Карло, который реализован в компьютерном коде и использован для расчета спектральной излучательной способности объектов ракетно-космической техники.
4. Создана серия компьютерных кодов, предназначенных для численного моделирования двумерной аэродинамики гиперзвуковых летательных аппаратов на основе уравнений Навье-Стокса.
5. На основе построенной модели проведен расчет параметров газодинамики в канале модельного гиперзвукового прямоточного воздушно-реактивного двигателя (ГПВРД). Получены и проанализированы плотности тепловых и радиационных потоков к стенкам двигателя.

Основными защищаемыми положениями и результатами являются:

1. Вариант метода конечного объема с применением схемы AUSM и алгоритм численного решения двумерных уравнений Навье-Стокса для химически неравновесного газа.
2. Метод расчета констант скоростей диссоциации в высокотемпературных газовых смесях и времен колебательной релаксации двухатомных молекул, основанный на методе молекулярной динамики.
3. Алгоритм локальной выборки Монте-Карло для расчета спектральной излучательной способности объектов ракетно-космической техники.
4. Результаты численного исследования:
 - константы скоростей диссоциации и времен колебательной релаксации молекул кислорода и азота;
 - плотности тепловых и радиационных потоков к стенкам модельного ГПВРД.

Научная и практическая значимость. Построенная в работе модель и разработанные методы расчета могут быть использованы для численного моделирования гиперзвукового полета и, в частности, для расчета тепловых и радиационных потоков к стенкам ГПВРД и к поверхности летательного аппарата произвольной формы. Созданный при выполнении работы программный комплекс, ориентированный на неструктурированные сетки, позволяет решать целый ряд прикладных задач в автоматическом или полуавтоматическом режиме. Результаты исследования могут также использоваться при тестировании процедур численного счета в соответствующих задачах.

Научные исследования, проведенные в диссертационной работе, осуществлялись в рамках проектов РФФИ №№ 07-01-00133, 09-08-92422, 10-01-00544, программы фундаментальных исследований Президиума РАН «Фундаментальные проблемы механики взаимодействий в технических и природных системах, материалах и средах», программ фундаментальных исследований Отделения энергетики, машиностроения, механики и процессов управления РАН «Физико-химическая механика неравновесных систем» и «Фундаментальные проблемы горения и детонации в энергоустановках».

Достоверность результатов диссертации подтверждается физической обоснованностью постановок задач и строгим аналитическим характером их рассмотрения с применением современных теоретических концепций и математических средств физической и химической механики, а также достаточно хорошим качественным и количественным соответствием полученных результатов известным экспериментальным данным и численным решениям, полученным с помощью других программных комплексов.

Апробация работы. Основные результаты работы докладывались и обсуждались на всероссийских и международных профильных научных конференциях и семинарах:

1. Всероссийская научно-техническую конференцию молодых ученых и специалистов «Проблемы создания перспективных авиационных двигателей», Москва, Центральный Институт Авиационного Моторостроения, 2005 г.;
2. Международный симпозиум по радиационной плазмодинамике, Москва, Московский государственный технический университет имени Н.Э. Баумана, 2006, 2009 гг.;
3. 4-ая курчатовская молодежная научная школа, Москва, Российский научный центр. Курчатовский институт, 2006 г.;
4. Школа-семинар «Аэрофизика и физическая механика классических и квантовых систем», Москва, Институт проблем механики РАН, 2007, 2008 гг.;
5. XVII школа-семинар молодых ученых и специалистов под руководством академика РАН А.И.Леонтьева, Жуковский, Центральный аэрогидродинамический институт, 2009 г.;
6. Научная конференция МФТИ, Москва-Долгопрудный, Московский Физико-Технический Институт, 2004–2009 гг.;
7. XVII European Conference on Dynamics of Molecular Systems, St. Petersburg, Russia, 2008;
8. 3rd International Workshop on Radiation of High Temperature Gases in Atmospheric Entry, Heraklion, Greece, 2009;
9. 38th AIAA Thermophysics Conference, Toronto, 6 - 9 June, 2005;
10. 46th AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit, Reno, 7-10 January, 2008.

Публикации. По теме диссертации опубликована 21 печатная работа, в том числе 4 статьи в журналах из перечня Высшей аттестационной комиссии РФ. Список работ приведен в конце автореферата.

Структура и объем работы. Диссертация состоит из введения, 7 глав, заключения и списка литературы. Общий объем работы составляет 148 страниц, включая 80 рисунков и 4 таблицы. Список литературы содержит 95 наименований.

СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во **введении** обоснована актуальность рассматриваемых в работе проблем, сформулирована цель и задачи диссертационной работы, перечислены представленные в диссертации новые результаты, их практическая ценность и положения, выносимые на защиту, кратко изложена структура диссертации.

В первой главе приводится обзор существующих вычислительных моделей и последних достижений в области гиперзвукового полета. Также рассматриваются вопросы, связанные с комплексным подходом к поставленным задачам, обсуждается формулировка задач создания интегрированных моделей физико-химической механики.

В первой части главы рассматриваются отечественные и зарубежные публикации, посвященные численному исследованию гиперзвукового обтекания различных профилей и газодинамике трактов ГПВРД, достижениям в области построения численных схем для газодинамических расчетов (включая схемы AUSM, TVD, ENO, $k-\epsilon$ и $k-\omega$ модели турбулентности), генерированию структурированных и неструктурированных расчетных сеток и работе с ними.

Вторая часть главы посвящена концепции построения интегрированных моделей физических явлений. В связи с тем, что полет летательного аппарата на гиперзвуковой скорости сопровождается множеством процессов, не характерных для полета при более низких числах Маха, подчеркивается сложность и многоплановость исследований в области гиперзвукового полета. Обсуждается новый тип моделей физической механики, активно развивающийся в настоящее время – интегрированные модели, то есть модели физических явлений, объединяющие в себе одновременную реализацию несколько моделей микроуровня, интегрированных в модели макроуровня.

Интегрированная компьютерная модель, представленная в работе, предназначена для численного описания процессов, протекающих при гиперзвуковом движении летательного аппарата в атмосфере. Развиваемый подход объединяет в себе следующие расчетно-теоретические модели: *ab-initio* модель для расчета параметров модели химической и физической кинетики, модель газовой динамики (для многокомпонентного химически реагирующего газа), модель химической кинетики, модель переноса излучения и модель спектральной излучательной способности струй продуктов сгорания.

Развитие такого комплексного подхода позволяет надеяться на получение более точного качественного и количественного описания процессов, протекающих при гиперзвуковом полете.

Во второй главе рассматриваются проблемы построения структурированных и неструктурированных расчетных сеток. Приводятся примеры сеток разных топологий, построенных реализованным в ходе данной работы параболическим генератором.

В настоящее время остается актуальным развитие аналитических и полуаналитических методов построения расчетных сеток [5]. За основу разработанного программного кода был взят классический алгоритм работы параболического генератора [6]. Сетка строится по слоям, начиная от контура летательного аппарата. Сначала алгебраический предиктор приближенно определяет координаты узлов $\vec{r}_{k,j}^p$ текущего слоя j и следующего слоя $j+1$. При этом используется соотношение вида:

$$\begin{cases} \vec{r}_{k,j}^p = \vec{r}_{k,j-1} + (1 - \psi(j))\varphi(j)\Delta R_k \vec{n}_k + \psi(j)\varphi(j)\overline{\Delta R}_k, \\ \vec{r}_{k,j+1}^p = \vec{r}_{k,j-1} + (1 - \psi(j+1))\varphi(j+1)\Delta R_k \vec{n}_k + \psi(j+1)\varphi(j+1)\overline{\Delta R}_k, \end{cases} \quad (1)$$

где $\overline{\Delta R}_k = \vec{r}_{k,j_{\max}}^p - \vec{r}_{k,j}^p$; $\Delta R_k = |\overline{\Delta R}_k|$; \vec{n}_k – вектор нормали к слою $j-1$; $\psi(j)$ и $\varphi(j)$ – монотонно возрастающие от 0 до 1 функции, позволяющие управлять процессом генерации сетки. Далее координаты узлов слоя j уточняются при помощи параболического корректора. Для этого относительно $\vec{r}_{k,j}^p$ решается уравнение Лапласа в криволинейных координатах:

$$a_1 \frac{\partial^2 \vec{r}}{\partial \xi^2} + a_2 \frac{\partial^2 \vec{r}}{\partial \xi \partial \eta} + a_3 \frac{\partial^2 \vec{r}}{\partial \eta^2} = 0, \quad (2)$$

где $\vec{r}^T = (x, y)$ – декартовы координаты, (ξ, η) – криволинейные координаты точек расчетной области.

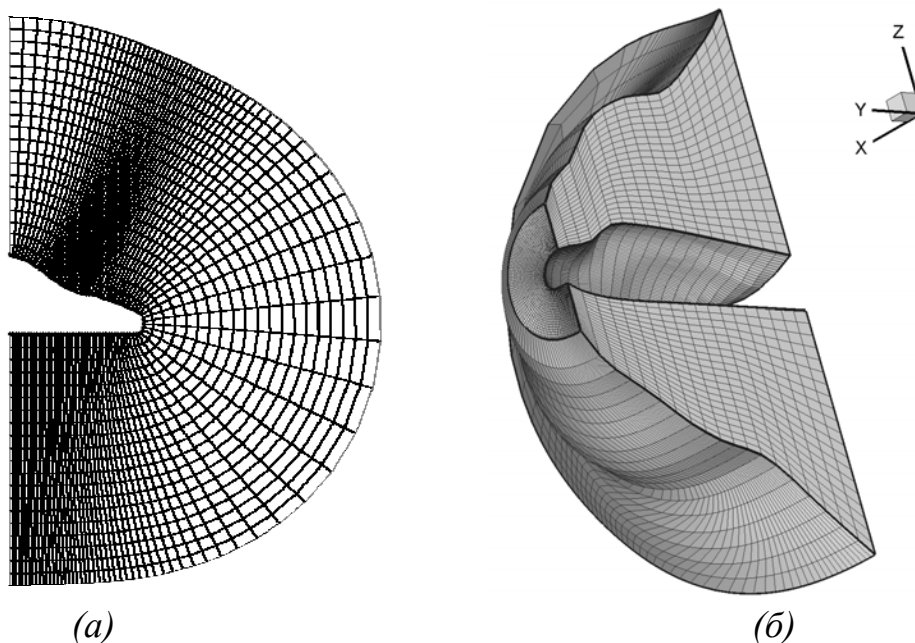


Рис. 1. Примеры расчетных сеток, построенных с использованием параболического генератора

Производные, входящие в коэффициенты a_1, a_2, a_3 , вычисляются по координатам, найденным на этапе алгебраического предиктора. После этого полученная система линейных уравнений решается методом прогонки. Пример работы генератора показан на рис. 1.а.

В конце главы рассматривается автоматизация процесса построения трехмерных моноблочных сеток для широкого класса поверхностей летательных аппаратов. На первом этапе этого процесса генератор создает набор двумерных контуров модели путем сечения трехмерной модели серией плоскостей, перпендикулярных характерному продольному направлению, выбранному на теле. На втором этапе происходит генерация двумерных сеток для полученных сечений модели. Наконец, на третьем этапе полученные двумерные сетки объединяются в трехмерную структурированную сетку. Пример построенной таким алгоритмом трехмерной сетки показан на рис. 1.б. Результаты, полученные во второй главе используются при решении задач, описанных в главах 3 – 5.

Третья глава посвящена решению газодинамической части задачи. В ней рассматривается метод контрольного объема для решения двумерных уравнений Навье-Стокса применительно к течению однокомпонентного совершенного газа. Расчеты проводятся на неструктурированных треугольных сетках. Метод базируется на идеях работы [6].

Для столбца консервативных переменных $w = (\rho, \rho u, \rho v, E)^T$ уравнения Навье-Стокса можно записать в виде:

$$\frac{\partial w}{\partial t} + \frac{\partial f(w)}{\partial x} + \frac{\partial g(w)}{\partial y} = 0. \quad (3)$$

Здесь f и g – проекции потоков массы, импульса и энергии. Проинтегрировав систему уравнений (3) по i -му треугольнику ABC, получим:

$$\frac{\partial \bar{w}_i(t)}{\partial t} = -\frac{1}{S_i} [q_{AB}(t) + q_{BC}(t) + q_{CA}(t)], \quad (4)$$

где S_i – площадь треугольника ABC, \bar{w}_i – осредненное по треугольнику значение w , q – поток через грань треугольника, определяемый по формуле:

$$q_{AB}(t) = \int_{AB} (f dy - g dx) \approx f(w_{ab}) \Delta y_{AB} - g(w_{ab}) \Delta x_{AB}.$$

Таким образом, чтобы определить приращения переменных w , нужно рассчитать потоки массы, импульса и энергии через грани ячеек. Для этого в работе применяется схема AUSM [8]. Детальному рассмотрению схемы AUSM и ее варианта с повышенным порядком точности посвящен отдельный параграф. В конце параграфа проводится сравнение результатов применения этих схем с результатами, полученными с использованием «точного» решения автотельной задачи о распаде разрыва, основанного на итерационной процедуре С.К. Годунова [6] (рис. 2). Результаты сравнения позволяют сделать

выбор в пользу применения схемы AUSM, которая дает решение с хорошей точностью и не требует итераций, требующих более высоких вычислительных затрат.

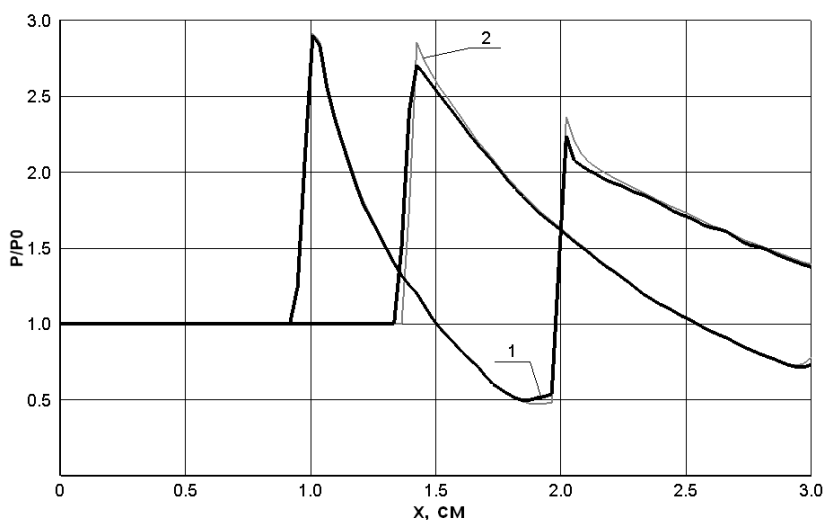


Рис. 2. Давление на стенках канала: (1) – AUSM, (2) – алгоритм Годунова

Для расчета диссипативных слагаемых уравнения Навье-Стокса в работе предложен алгоритм определения градиента некоторой величины F , основанный на проведении плоскости в пространстве (x, y, F) :

$$P = a + b(x - x_q) + c(y - y_q),$$

где (x_q, y_q) – координаты исходной точки, a , b и c – параметры плоскости, определяемые из системы уравнений:

$$\begin{cases} a \sum \xi_i + b \sum x_i \xi_i + c \sum y_i \xi_i = \sum F_i \xi_i, \\ a \sum x_i \xi_i + b \sum x_i^2 \xi_i + c \sum x_i y_i \xi_i = \sum x_i F_i \xi_i, \\ a \sum y_i \xi_i + b \sum x_i y_i \xi_i + c \sum y_i^2 \xi_i = \sum y_i F_i \xi_i. \end{cases} \quad (5)$$

Здесь x_i и y_i – координаты центра i -ой ячейки относительно исходной точки, а коэффициент ξ_i учитывает вклад ячейки в зависимости от координат ее центра. Данная схема обладает тем преимуществом, что при работе с граничными ячейками не требует введения фиктивных ячеек, для которых в отдельных случаях необходима весьма трудоемкая реализация.

Также в работе проведено сравнение результатов расчетов с первым и со вторым порядком пространственной аппроксимации. Второй порядок аппроксимации достигается за счет специальной процедуры «восстановления», состоящей из двух этапов. На первом этапе определяются параметры линейного распределения величины f в ячейке с центром (x_0, y_0) :

$$f = f_0 + a(x - x_0) + b(y - y_0).$$

На втором этапе после введения специального ограничителя наклона a полученной плоскости определяется значение величины f_c в центре ячейке:

$$f_c = f_0 + \alpha[a(x - x_0) + b(y - y_0)].$$

Сравнение методов с разным порядком точности проводилось на примере решения задачи течения в канале с сегментарным утолщением (рис. 3). Как видно из рисунка, особенность решения, связанная с отражением ударной волны от пограничного слоя на верхней стенке (в районе $x = 6$ см) могут быть не разрешены при недостаточной пространственной аппроксимации.

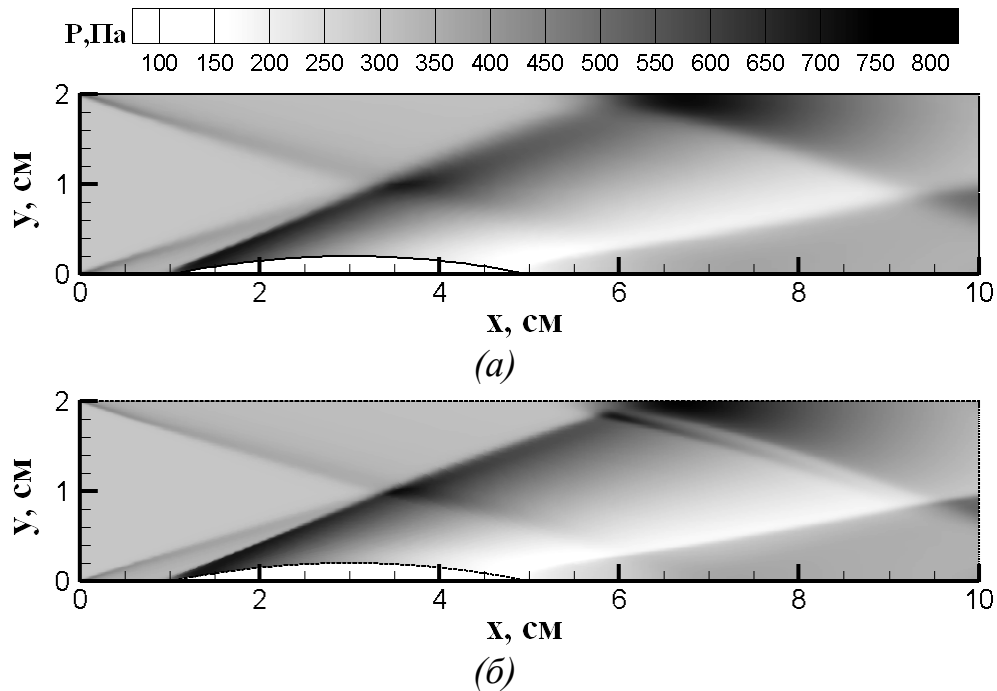


Рис. 3. Поле давления. Расчет по уравнениям Навье-Стокса: (а) – сетка из 23000 ячеек, первый порядок аппроксимации, (б) – сетка из 95200 ячеек, второй порядок аппроксимации

Четвертая глава посвящена совмещению модели химической кинетики с газодинамической моделью, описанной в третьей главе. Проводится решение задачи о течении химически реагирующей газовой смеси в канале, моделирующем участок ГПВРД (рис. 4).

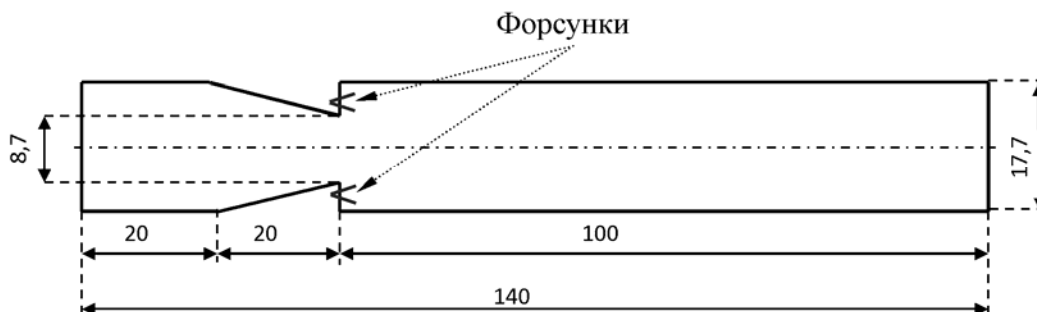


Рис. 4. Геометрия ГПВРД. Размеры в см

Параметры расчета, описанного в данной главе, соответствуют реальным параметрам модельного гиперзвукового летательного аппарата [9]. Используется модель химической кинетики, приведенная в работе [10].

Вследствие прохождения химических реакций, температура в расчетной ячейке может сильно измениться за один шаг по времени. Поэтому при интегрировании системы кинетических уравнений учитывается соответствующее изменение температуры. Таким образом, для расчета реакций в смеси, состоящей из N частиц, на каждом шаге по времени для каждой ячейки интегрируется система из $N+1$ уравнений:

$$\frac{\partial \rho Y_k}{\partial t} = W_k(\rho Y_k, E) + F_k, \quad \frac{\partial E}{\partial t} = - \sum_{k=1}^{N_{sp}} H_k W_k(\rho Y_k, E) + F_e \quad (6)$$

Здесь ρ – плотность газовой смеси, E – полная энергия в единице объема, Y_k – массовая доля k -ого компонента, W_k – скорость его образования, F_k – правая часть, обусловленная уравнением переноса и содержащая конвективные и диффузионные слагаемые из (3), H_k – энтальпия образования k -ого компонента. Интегрирование происходит по времени $t=0..\tau$, где τ – временной шаг интегрирования уравнений Навье-Стокса. При этом за счет интегрирования уравнения для полной энергии E учитывается изменение температуры и соответствующее изменение констант скорости реакций.

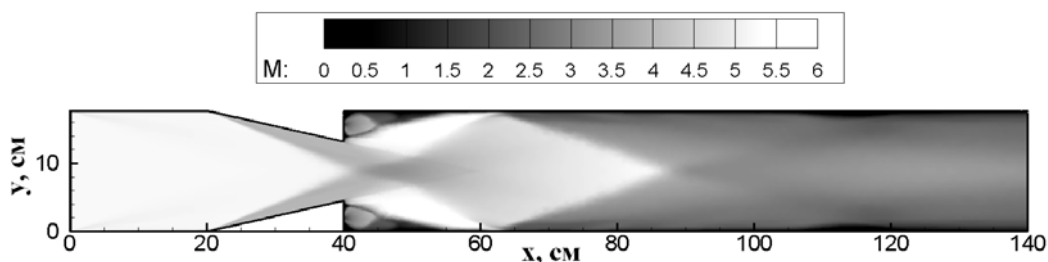


Рис. 5. Распределение числа Маха в ГПВРД

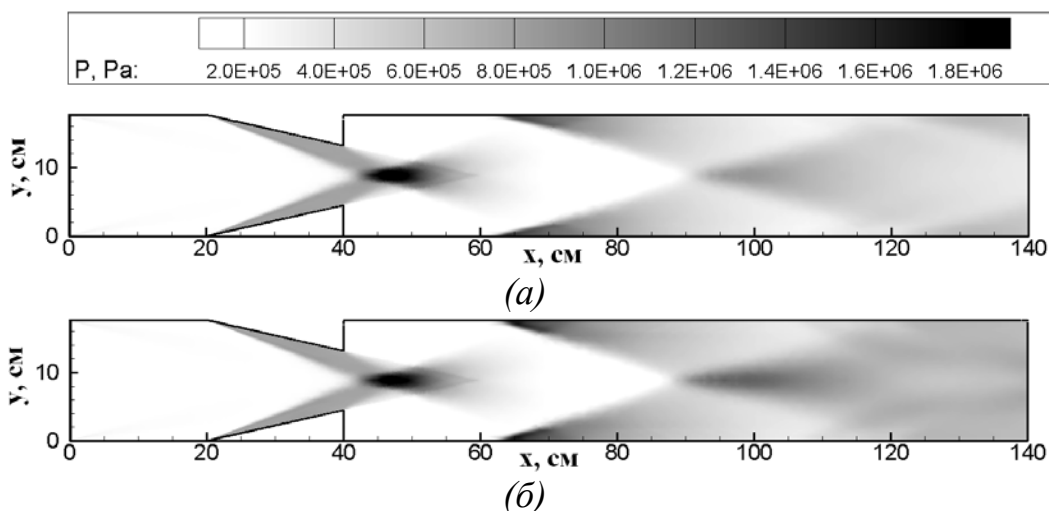


Рис. 6. Распределение давления в ГПВРД: а – без химических реакций, б – с учетом химических реакций

На рис. 5 представлена картина течения в ГПВРД. При $X = 63$ см ударные волны отражаются от стенок, приводя к активному перемешиванию с топливом. Далее эти ударные волны, потеряв значительную часть своей интенсивности, отражаются от стенок при $X = 110$ см. На рисунке хорошо заметно их взаимодействие с пограничным слоем.

На рис. 6 хорошо видно влияние химических реакций на параметры течения газовой смеси. Заметно существенное повышение давления на выходе из камеры сгорания – в среднем на 2 атм по сравнению с вариантом без химических реакций.

В пятой главе рассматривается расчет переноса излучения в ГПВРД. Исходными данными в этом расчете служат поля концентраций, давления и температуры, полученные в четвертой главе. Расчет радиационного потока на стенку камеры проводился путем решения двумерной задачи переноса излучения в диффузионном приближении. Для тестирования полученных результатов решалась одномерная задача переноса излучения в приближении плоского слоя [11].

Спектральный поток излучения на стенку в приближении плоского слоя записывается в виде:

$$W = 2\pi \int_0^H J_b(T(y)) E_2(|\tau(y) - \tau_0|) \kappa(y) dy, \quad J_b = 2hc^2 \int_{\frac{hc}{\omega_0}}^{\omega_1} \frac{\omega^3}{e^{kT} - 1} d\omega,$$

$$E_2(y) = \int_0^1 \exp(-y/\mu) d\mu, \quad \tau(y) = \int_0^y \kappa(s) ds, \quad \tau_0 = \int_0^H \kappa(s) ds,$$

Здесь J_b – функция излучения черного тела в Вт/(см²·см⁻¹·ср), E_2 – интегроэкспоненциальная функция, τ – спектральная оптическая толщина вдоль среза сопла, $\kappa(s)$ – коэффициент поглощения в см⁻¹, H – высота сопла.

Спектральная оптическая толщина на выходе из сопла показана на рис. 7. Оптические свойства газа рассчитывались при помощи пакета ASTERIOD [12]. Результат расчета в приближении плоского слоя представлен на рис. 8. Там же для сравнения приведен расчет, выполненный при аналогичных условиях в работе [9].

В диффузионном приближении задача решалась на неструктурированной сетке в двумерной постановке:

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \frac{1}{3\kappa} \frac{\partial U}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} \frac{1}{3\kappa} \frac{\partial U}{\partial y} = \kappa(U - U_b).$$

Здесь индекс спектральной зависимости для краткости опущен, κ – коэффициент поглощения в см⁻¹, U – спектральная плотность энергии излучения в Вт/(см²·см⁻¹), $U_b = 4\pi J_b$ – функция излучения черного тела.

Спектральный поток излучения на стенку в данном приближении записывается в виде [13]:

$$W = -c / (3\kappa) \text{grad} U.$$

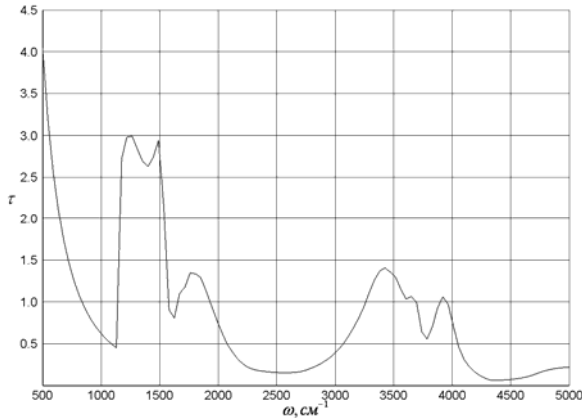


Рис. 7. Оптическая плотность вдоль среза сопла ($x = 140$ см)

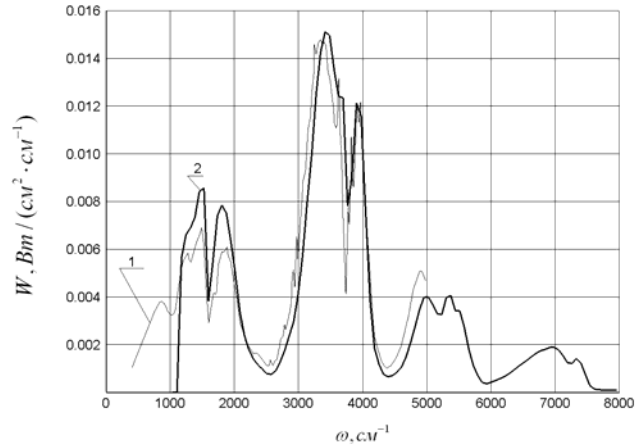


Рис. 8. Спектральный поток излучения на стенке ($x = 64$ см): (1) – данные из [9], (2) – расчет в приближении плоского слоя

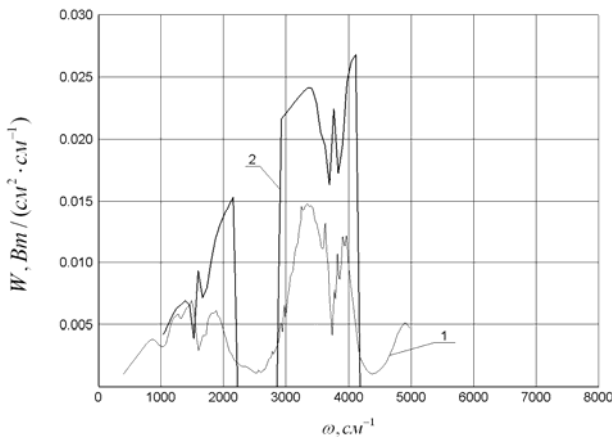


Рис. 9. Спектральный поток излучения на стенке ($x = 64$ см): (1) – данные из [9], (2) – расчет в диффузионном приближении

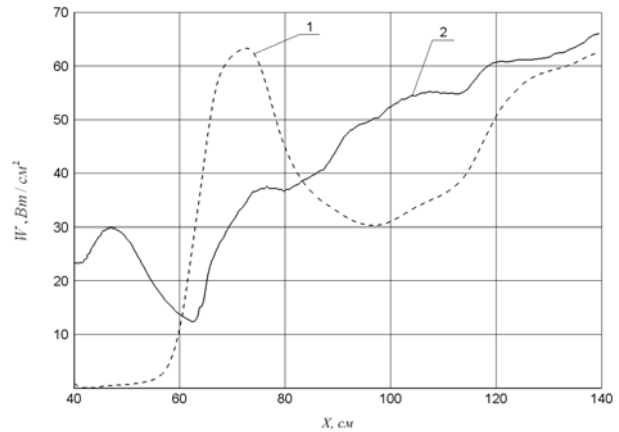


Рис. 10. Интегральный поток излучения вдоль стенки: (1) – диффузионное приближение, (2) – приближение плоского слоя

Результат расчета в диффузионном приближении плоского слоя представлен на рис. 9. При расчете учитывались только оптически плотные линии ($\tau > 0,25$), так как в оптически тонкой среде это приближение дает слишком большую ошибку, а с другой стороны, вклад оптически тонких линий в интегральный поток достаточно мал. Поэтому в среднем полученный интегральный поток не сильно отличается от рассчитанного в приближении плоского слоя (рис. 10).

Тем не менее, при заданных условиях газовая среда в двигателе является недостаточно оптически плотной для получения хороших результатов в диффузионном приближении. С другой стороны, пространственная неоднородность параметров среды не позволяет провести расчет с достаточной точностью в приближении плоского слоя. Поэтому для более точного расчета

следует воспользоваться другими моделями. Разработке одной из таких моделей посвящена следующая глава.

В шестой главе описывается универсальный статистический метод, пригодный для описания процесса переноса излучения в случаях, когда более простые и быстрые алгоритмы расчета оказываются неприменимыми. Также этот метод используется для спектральной диагностики струй продуктов сгорания.

Суть традиционного алгоритма имитационного моделирования переноса теплового излучения в светорассеивающей среде состоит в следующем. Для текущего фотона случайным образом разыгрывается длина свободного пробега λ . Исходя из закона Бугера, розыгрыш происходит по формуле

$$\lambda = -\frac{1}{\beta} \ln \gamma,$$

где $\gamma \in (0;1)$ – случайное число, а β – сумма коэффициентов поглощения и рассеяния. Затем, учитывая вероятность рассеяния, разыгрывается тип столкновения и, в случае рассеяния, определяется новое направление движения фотона. Далее вся процедура повторяется сначала, пока фотон не вылетит за пределы расчетной области. После расчетного прослеживания достаточно большого числа траекторий фотонов N_{ph} и набора данных для достоверной статистической оценки средних определяется интенсивность излучения в заданных участках расчетной области (рис. 11).

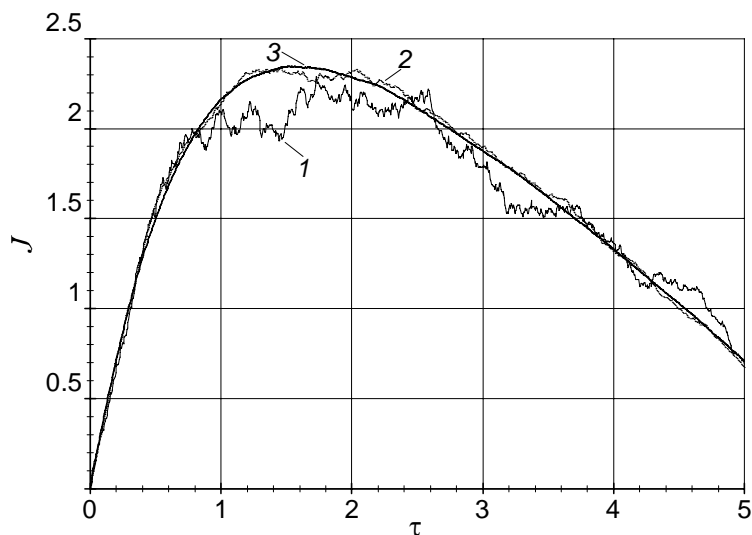


Рис. 11. Влияние числа моделируемых фотонов на результаты расчета интенсивности прошедшего излучения при $\alpha = 60^\circ$: (1) – $N_{ph} = 10^4$, (2) –

$$N_{ph} = 10^5, \quad (3) - N_{ph} = 5 \cdot 10^6$$

В работе предложен новый метод локальной оценки спектральной направленной излучательной способности для случая, когда нужно знать

интенсивность излучения только в некотором фиксированном направлении. Идея построения алгоритма основывается на оценке вероятности излучения и отслеживании траекторий только тех фотонов, которые вылетят из расчетной области в заданном направлении. Предложенный алгоритм существенно повышает точность расчета, что хорошо видно из сравнения решений трехмерной задачи излучения нагретого цилиндра, представленных на рис. 12.

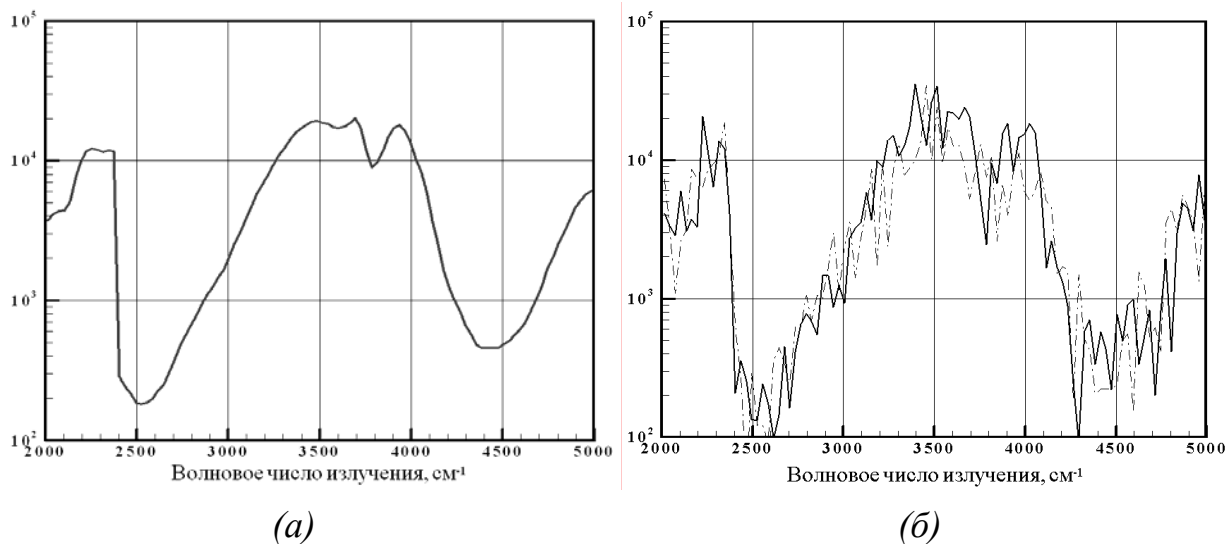


Рис. 12. Спектральные сигнатуры объема, полученные двумя разными методами Монте-Карло при отсутствии рассеяния; сплошная кривая – направление наблюдения 90° по отношению к оси струи, штриховая кривая – 66° : (а) – метод, предложенный в настоящей работе; (б) – традиционный имитационный алгоритм метода Монте-Карло

Седьмая глава посвящена описанию модели для расчета параметров высокотемпературных химических превращений и релаксационных процессов. В ней методом молекулярной динамики определяются константы скоростей химических реакций и времена колебательных релаксаций молекул, присутствующих в атмосфере Земли. Данные, полученные в этой главе, могут служить для корректировки модели химической кинетики, применяемой в пятой главе, а, следовательно, и результатов, полученных в шестой главе.

Разработанная модель базируется на работах [14 - 16]. Путем постепенного интегрирования уравнений движения рассчитывается точная эволюция системы из N молекул. Рассматривается газовая смесь незаряженных одно- и двухатомных частиц, которые могут вступать в химические реакции. Учитываются только парные взаимодействия – как взаимодействие атомов внутри одной молекулы, так и взаимодействие атомов, принадлежащих разным молекулам. Считается, что внутримолекулярное взаимодействие описывается потенциалом Морзе, а межмолекулярное взаимодействие – потенциалом Леннарда-Джонса. Траектория каждого атома моделируется при помощи алгоритма Верле.

Химические реакции учитываются следующим образом. Если атомы связаны, но потенциал их взаимодействия больше некоторого порога – молекула разваливается (взаимодействие переключается на потенциал Леннарда-Джонса). Наоборот, если атомы не связаны, но расстояние между ними меньше некоторого критического, то они образуют молекулу.

На основе моделирования траекторий частиц в работе определяются константы диссоциации и времена колебательной релаксации молекул азота и кислорода.

Кроме того, в работе предложен метод, позволяющая учесть квантовую структуру уровней энергии молекул. Благодаря этому удалось с достаточной точностью описать температурную зависимость константы скорости релаксации молекул кислорода (рис. 13) в широком температурном диапазоне. Еще одно преимущество разработанного метода состоит в том, что он дает возможность после каждого столкновения проводить оценку вероятности квантового перехода и корректировать конечное состояние продуктов реакции.

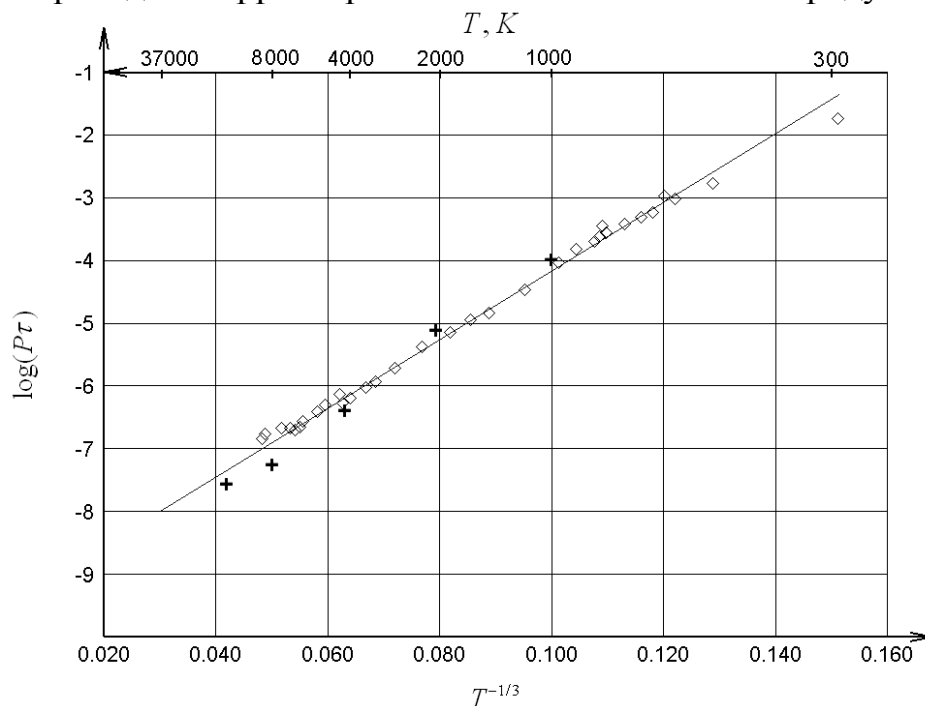


Рис. 13. Зависимость времени колебательной релаксации O_2 от температуры: ромбики – экспериментальные данные [17], сплошная линия – их аппроксимация, крестики – расчеты методом молекулярной динамики

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

1. Разработан новый расчетно-теоретический подход и создан компьютерный код *ab-initio* расчета констант скоростей диссоциации в высокотемпературных газовых смесях и времен колебательной релаксации двухатомных молекул, основанный на методе молекулярной динамики. На

основе разработанного подхода проведено моделирование колебательной релаксации и диссоциации молекул кислорода и азота в широком диапазоне температур, причем некоторые значения получены за пределами температурного диапазона, в котором существуют экспериментальные данные.

2. Реализован параболический генератор расчетных сеток, позволяющий строить структурированные сетки в автоматическом режиме во многих практически важных случаях. В частности, генератор позволяет создавать моноблочные трехмерные структурированные сетки вокруг широкого класса поверхностей летательных аппаратов.
3. Создана серия компьютерных кодов, предназначенных для численного моделирования на неструктурированных сетках двумерной многокомпонентной газодинамики гиперзвуковых летательных аппаратов и трактов ГПВРД на основе уравнений Навье-Стокса, а также уравнений переноса излучения.
4. На основе построенной модели проведен расчет газодинамических и радиационных параметров в канале, моделирующем участок ГПВРД. Получены и проанализированы плотности тепловых и радиационных потоков к стенкам двигателя.
5. Разработан новый имитационный алгоритм метода Монте-Карло, который реализован в компьютерном коде и использован для расчета спектральной излучательной способности объектов ракетно-космической техники. Новый метод показал высокую эффективность при решении задач расчета направленной излучательной способности по сравнению с традиционным алгоритмом Монте-Карло.

СПИСОК ЦИТИРУЕМОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Копченев В.И. и др.* Применение методов вычислительной аэродинамики для исследования рабочего процесса в ГПВРД и при его проектировании // В кн.: Научный вклад в создание авиационных двигателей. Книга 1. Разд: Исследования гиперзвуковых и ракетных двигателей. – М., Машиностроение, 2000, с. 251-272.
2. *Суржиков С.Т.* Двумерная радиационно-газодинамическая модель аэрофизики спускаемых космических аппаратов // В кн.: Актуальные проблемы механики. – М., Наука, 2008, с. 20 – 59.
3. *Черный Г. Г.* Течения газа с большой сверхзвуковой скоростью. – М., 1959.
4. *Климов Д.М., Котов Д.В., Суржиков С.Т.* Многоуровневое описание процессов физической механики // В кн.: Актуальные проблемы механики, М., Наука, 2008, с.6 – 19.
5. *Суржиков С.Т.* Аналитические методы построения конечно-разностных сеток для расчета аэротермодинамики спускаемых космических аппаратов

- // Вестник МГТУ им. Н.Э.Баумана. Сер. Машиностроение, 2004, 2(55), с. 24-50.
6. *Крылов А.А., Михалин В.А., Савельев А.Д.* Опыт применения параболического генератора сеток в задачах вычислительной газовой динамики // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 2003. Т. 43. № 7. С. 1096–1106.
 7. *Годунов С.К.* Разностный метод численного расчета разрывных решений гидродинамики // Матем. сб., 47(89):3, 1959, 271–306.
 8. *Liou M.-S., Steffen C. A.* New Flux Splitting Scheme // J. Comput. Phys., Vol. 107, 23-39, 1993.
 9. *Nelson H.F.* Radiative Heating in Scramjet Combustors // J. of Thermophysics and Heat Transfer, Vol. 11, No 1, p. 59, 1997.
 10. *Evans, J.S.; Schexnayder, C.J.* Influence of Chemical Kinetics and Unmixedness on Burning in Supersonic Hydrogen Flames // AIAA Journal, vol. 18, issue 2, pp. 188-193, 1980.
 11. *Milne E.A.* Radiative equilibrium in the Outer Layers of a Star // Monthly Notices Roy. Astron. Soc. London . 1921. V. 81. P. 361.
 12. *Суржиков С.Т.* Оптические свойства газов и плазмы. – М., изд. МГТУ им. Н.Э.Баумана, 2004.
 13. *Суржиков С.Т.* Тепловое излучение газов и плазмы. – М., изд. МГТУ им. Н.Э.Баумана, 2004.
 14. *Зельдович Я.Б., Райзер Ю.П.* Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений. – М.: Наука, 1966.
 15. *Rapaport D. C.* The art of Molecular dynamics simulation // Cambridge Univ. Press, Cambridge, England, U.K., 1995, 350 pp.
 16. *Норман Г.Э., Стегайлов В.В.* Стохастические свойства молекулярно-динамической ленард-джонсонской системы в равновесном и неравновесном состоянии // ЖЭТФ. 2001. Т.119. Вып 5. С.1011-1020.
 17. *Millican R.C., White D.R.* Systems of vibrational Relaxation // Journal of Chemical Physics, 1963, V. 39, No. 12, P. 3209.

СПИСОК РАБОТ, ОПУБЛИКОВАННЫХ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

1. ***Котов Д.В., Суржиков С.Т.* Локальная оценка направленной излучательной способности светорассеивающих объемов методом Монте-Карло // ТВТ, 2007, Т.45, №6, с. 885.**
2. ***Котов Д.В., Суржиков С.Т.* Моделирование скорости диссоциации и времени колебательной релаксации двухатомных молекул методом молекулярной динамики // ТВТ, 2008, Т.46, №5, с. 664-673.**
3. ***Котов Д.В., Суржиков С.Т.* Моделирование неравновесных процессов в молекулярном газе методом молекулярной динамики. Физико-**

химическая кинетика в газовой динамике // 2008. Том 7.
<http://www.chemphys.edu.ru/pdf/2008-09-01-021.pdf>.

4. *Котов Д.В., Суржиков С.Т.* Двумерный расчет течений вязкого газа на неструктурированных сетках // Физико-химическая кинетика в газовой динамике. 2010. Том 9. <http://www.chemphys.edu.ru/pdf/2010-01-12-026.pdf>.
5. *Kotov D.V., Surzhikov S.T.* Benchmark Solutions for the Monte-Carlo Simulation Prediction of Spectral Signatures // AIAA Paper No.2005-4947, Toronto, 2005, 11 p.
6. *Kotov D.V., Surzhikov S.T.* Molecular dynamics simulation of dissociation and relaxation rates of diatomic molecules // AIAA Paper No.2008-1268, Reno, 2008, 8 p.
7. *Kotov D.V., Surzhikov S.T., Sharikov I.V.* Spectral signatures of three-dimensional rocket exhausts: Proceedings of the European Conference for Aerospace Sciences – Moscow: July 4-7, 2005.
8. *Климов Д.М., Котов Д.В., Суржиков С.Т.* Многоуровневое описание процессов физической механики // В кн.: Актуальные проблемы механики, М., Наука, 2008, с.6 – 19.
9. *Котов Д.В., Шариков И.В.* Визуализация и графический анализ массивов данных в процессе выполнения численных расчетов: Труды XLVII научной конференции МФТИ. – Москва-Долгопрудный: 2004, ч. IV, с. 24.
10. *Котов Д.В.* Моделирование неравновесных процессов в молекулярном газе методом молекулярной динамики с учетом колебательных степеней свободы: Труды XLVIII научной конференции МФТИ. – Москва-Долгопрудный: 2005, ч. IV, с. 23.
11. *Котов Д.В.* О модификациях параболического генератора сеток при решении различных задач обтекания тел: Труды 50-й научной конференции МФТИ. – Москва-Долгопрудный: 2007, ч. IV, с. 33-36.
12. *Котов Д.В.* Расчет вязкого течения химически реагирующей смеси в ГПВРД на неструктурированной сетке: Труды 52-й научной конференции МФТИ. – Москва-Долгопрудный: 2009, ч. IV, т. 2, с. 170-171.
13. *Котов Д.В., Суржиков С.Т.* Расчет излучения трехмерных струй продуктов сгорания методом Монте-Карло: Тез. докл. Проблемы создания перспективных авиационных двигателей. – М.: ЦИАМ, 2005. – с. 160-162.
14. *Котов Д.В.* Моделирование химических реакций методом молекулярной динамики: VII Международный симпозиум по радиационной плазмодинамике. Сб. науч. тр. – М.: НИЦ «Инженер», 2006. – с. 175-176.

15. *D.V. Kotov*. Molecular Dynamics Simulation of Chemical Reactions // MOLEC-2008 XVII European Conference on Dynamics of Molecular Systems. St. Petersburg, Russia, August 23-28, 2008.
16. *Котов Д.В.* Моделирование двумерных течений вязкого идеального газа на неструктурированных сетках: Труды XVII школы-семинара молодых ученых и специалистов под руководством академика РАН А.И.Леонтьева. – Жуковский: 2009, с. 72-75.
17. *Котов Д.В.* О расчете течений вязкого газа на неструктурированных сетках: VIII Международный симпозиум по радиационной плазмодинамике. Сб. науч. тр. – М.: НИЦ «Инженер», 2009, с. 244 – 248.
18. *Котов Д.В., Суржиков С.Т.* Моделирование химических и энергообменных реакций методом молекулярной динамики: Препринт – 837. ИПМех РАН, 2007. – 30 с.
19. *Котов Д.В., Суржиков С.Т.* Моделирование химических и энергообменных реакций методом молекулярной динамики с учетом квантовых уровней молекул. Препринт - 838. ИПМех РАН, 2007. – 23 с.
20. *Котов Д.В., Суржиков С.Т.* Расчет течений вязкого газа на неструктурированных сетках. Препринт - 939. ИПМех РАН, 2010. – 52 с.
21. *Котов Д.В., Суржиков С.Т.* Расчет гиперзвукового течения и излучения вязкого химически реагирующего газа в канале, моделирующем участок ГПВРД. Препринт - 940. ИПМех РАН, 2010. – 33 с.

Автор выражает благодарность научному руководителю, заведующему кафедрой физической и химической механики Московского Физико-Технического Института проф. С.Т. Суржикову за постоянное внимание, ценные советы и большую помощь в работе, а также благодарит В.В. Кузенова, И.А. Крюкова и весь коллектив лаборатории радиационной газовой динамики Института проблем механики им. А.Ю. Ишлинского РАН за плодотворные обсуждения и полезные замечания.

ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ МОДЕЛИ
ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКОЙ КИНЕТИКИ
ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНЫХ ГАЗОВЫХ ПОТОКОВ

Котов Дмитрий Владимирович

Автореферат диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Подписано к печати 12 июля 2010 г. Заказ № 28-2010. Тираж 90 экз.

Отпечатано на ризографе Учреждения Российской академии наук
Институт проблем механики им. А.Ю. Ишлинского РАН
119526, Москва, проспект Вернадского д.101, корп.1