

# Математическое моделирование и численные методы

Горский В.В., Адаменко Р.А. Моделирование химического состава газа в неравновесном воздушном пограничном слое на стенке, обладающей конечной ка-талитической активностью. Математическое моделирование и численные методы, 2018, № 4, с. 93-106.

Источник: <https://mmcm.bmstu.ru/articles/183/>

**Моделирование химического состава газа  
в неравновесном воздушном пограничном слое  
на стенке, обладающей конечной  
катализитической активностью**

© В.В. Горский<sup>1,2</sup>, Р.А. Адаменко<sup>1</sup>

<sup>1</sup>АО «ВПК «НПО машиностроения», г. Реутов, Московская обл., 143966, Россия

<sup>2</sup>МГТУ им. Н.Э. Баумана, Москва, 105005, Россия

*Исследованию аэротермической деструкции карбида кремния постоянно уделяется повышенное внимание. В первую очередь это обусловлено его широким использованием в качестве защиты от окисления углеродных материалов. Скорость аэротермохимической деструкции материалов в значительной степени зависит от удельного теплового потока и от степени рекомбинации атомов кислорода на стенке. В данной работе рассмотрена методика решения комплексной задачи обтекания высокотемпературным неравновесным потоком воздуха материала, покрытого пленкой карбида кремния, в условиях конечной катализитичности поверхности этой пленки.*

**Ключевые слова:** карбид кремния, абляция, углерод, окисление, кинетические константы

**Введение.** Влияние гетерогенных химических реакций, протекающих с конечными скоростями на поверхности летательного аппарата, обтекаемой диссоциированным потоком воздуха, подробно освещено в литературе (например, [1, 2]). Внимание к указанной проблеме в первую очередь было обусловлено проектированием многоразовых летательных аппаратов, для которых требовалась информация только о суммарном снижении удельного теплового потока за счет неполной рекомбинации атомов кислорода и азота на стенке.

Однако для изучения процесса аэротермохимической деструкции карбида кремния столь же важным является вопрос о том, за счет какой гетерогенной химической реакции на стенке происходит снижение теплового потока, который к ней подводится. Это связано с тем обстоятельством, что от степени рекомбинации атомов кислорода в определенной степени зависит скорость деструкции этого вещества.

Массовая скорость газификации карбида кремния, обусловленная протеканием в нем совокупности физико-химических процессов, крайне невелика по сравнению с коэффициентом теплообмена в пограничном слое. Это позволяет выделить из комплексной проблемы нагрева и деструкции карбида кремния задачи, связанные с решением уравнений пограничного слоя, в предположении, что стенка непроницаема.

Решение данной задачи должно базироваться на расчетно-теоретическом исследовании результатов систематических экспериментов, выполненных в струях аэродинамических установок. Проведению указанного исследования должен предшествовать анализ уравнений, описывающих скорость протекания гетерогенных химических реакций на стенке.

**Методика решения автомодельных уравнений неравновесного ламинарного пограничного слоя на стенке с конечной катализической активностью.** Рассматриваемая частная задача относится к области знаний, относящейся к изучению взаимодействия газовых потоков с обтекаемыми ими телами. Изучению этой проблемы посвящена обширная библиография, из которой сошлемся только на ряд статей [3–6], опубликованных в последнее время на страницах данного журнала, а также на ряд зарубежных публикаций [7–10].

Рамки данной методики ограничены рассмотрением осесимметричного воздушного шестикомпонентного пограничного слоя в окрестности критической точки тела, химический состав газовой смеси в котором представлен следующими веществами:



Система дифференциальных уравнений, описывающая течение газа в пограничном слое на непроницаемой стенке, в рассматриваемом случае имеет вид [11]:

$$\left( \text{Ru } f_{\eta\eta} \right)_{\eta} + ff_{\eta\eta} - \Omega \left( f_{\eta}^2 - \frac{\rho_e}{\rho} \right) = 0; \quad (2)$$

$$\left( \frac{\text{Ru}}{\text{Pr}} h_{\eta} \right)_{\eta} + fh_{\eta} - \Psi \left( \sum_{i=1}^n h_i J_{d,i} \right)_{\eta} - \left( \frac{\text{Ru}}{\text{Pr}} \sum_{i=1}^n h_i J_{d,i} \right)_{\eta} = 0; \quad (3)$$

$$-\Psi J_{d,i,\eta} + fC_{i,\eta} + K\Omega_i = 0, \quad i = \overline{1,6}; \quad (4)$$

$$f = \frac{\Phi}{\sqrt{2\xi}}, \quad f_{\eta} = u/u_e; \quad \text{Pr} = \frac{c_{p,fr}\mu}{\lambda}, \quad \text{Ru} = \frac{\rho\mu}{\rho_{e,0}\mu_{e,0}};$$

$$\Omega = \frac{2\xi}{\xi_s} \frac{u_{e,s}}{u_e} = 0,5; \quad \Psi = r \frac{\sqrt{2\xi}}{\xi_s} = \frac{1}{\sqrt{2\rho_{e,0}\mu_{e,0}u_{e,s,0}}}; \quad K = 2 \frac{\xi}{\rho u_e \xi_s} = \frac{1}{2\rho u_{e,s,0}}.$$

Здесь  $f$  — безразмерная функция тока;  $h$ ,  $u$ ,  $\rho$ ,  $\mu$ ,  $c_{p,fr}$ ,  $\text{Pr}$ ,  $\text{Ru}$  — соответственно энталпия, тангенциальная проекция вектора скорости, плотность, коэффициент динамической вязкости, изобарная удельная теплоемкость, число Прандтля и параметр Рубезина в газовой смеси;

$\xi, \eta$  — переменные Лиза — Дородницына;  $\Phi$  — размерная функция тока, тождественно удовлетворяющая уравнению неразрывности;  $C_i, J_i, \omega_i$  — соответственно массовая концентрация, проекция вектора диффузионного потока массы на внешнюю нормаль к стенке и скорость образования в единице объема  $i$ -го вещества из списка (1); индексы  $e, 0, \eta, s$  относятся к внешней границе пограничного слоя, к критической точке тела и к производным по соответствующим координатам.

Для уравнений (2) и (3) форма записи граничных условий имеет стандартный вид:

$$f(0) = f_\eta(0) = 0; \quad f_\eta(\eta_e) = 1; \quad h(0) = \sum_{i=1}^6 C_i h_i; \quad h = h_{00}, \quad (5)$$

где  $h_i$  — энталпия  $i$ -го вещества;  $h_{00}$  — энталпия торможения набегающего газового потока.

Для уравнения (4) стандартная форма записи граничных условий сохраняется только на внешней границе пограничного слоя, где

$$C_i(\eta_e) = C_{i,e,0}, \quad i = \overline{1, 6}. \quad (6)$$

В литературных источниках на стенке для уравнения (4) используются граничные условия вида [1, 2]:

$$\begin{aligned} -J_{d,O}(0) &= K_{w,O} \rho C_O; \quad C_O + C_{O_2} + C_{NO} M_O / M_{NO} = \Theta_O; \\ -J_{d,N}(0) &= K_{w,N} \rho C_N; \quad C_N + C_{N_2} + C_{NO} M_N / M_{NO} = \Theta_N; \end{aligned} \quad (7)$$

$$C_{NO}(0) = C_{NO,w},$$

здесь  $M_i$  — молекулярная масса  $i$ -го вещества;  $K_{w,O}, K_{w,N}$  — константы скоростей химических реакций, приводящих к убыли на стенке атомарного кислорода и атомарного азота;  $C_{NO,w}$  — заданное фиксированное значение массовой концентрации оксида азота на стенке; использование этого значения упрощает поиск решения задачи, не сказываясь существенно на полученных результатах ввиду малого содержания этого вещества в пограничном слое.

Константы протекания реакций рекомбинации определяются на базе обеспечения удовлетворительного соответствия между расчетными и экспериментальными данными по удельному тепловому потоку, подводимому к стенке. В этой связи необходимо отметить, что результаты проведенных исследований будут жестко привязаны к данной форме записи граничных условий (7).

Возможность получения качественной информации о процессах тепломассопереноса и трения, протекающих в газовом ламинарном пограничном слое, путем решения тех или иных гидродинамических уравнений основана на применении методов теории статистической физики для расчета переносных свойств многокомпонентных газовых смесей.

Так как переносные свойства многокомпонентной газовой смеси зависят от ее химического состава и переносных свойств индивидуальных веществ, входящих в состав смеси, решение рассматриваемой проблемы должно базироваться на использовании:

- методики определения переносных свойств газовой смеси заданного химического состава;
- методики определения переносных свойств индивидуальных веществ этой газовой смеси.

К числу наиболее качественных подходов к решению первой из указанных задач относятся методы, основанные на применении теории Чепмена — Энскога [12]. При этом для исследования свойств газовых смесей сложного химического состава обычно используется второе приближение данной теории [13–15]. Систему соответствующих расчетных соотношений называют методом Гиршфельдера. В то же время для газовых смесей (в первую очередь, для воздуха), наиболее часто используемых на практике и характеризующихся фиксированным элементарным химическим составом, известны решения рассматриваемой задачи, полученные в четвертом приближении теории Чепмена — Энскога [16, 17].

В настоящей работе применяется предложенный ранее [18] подход к расчету переносных свойств многокомпонентных неионизированных газовых смесей, образованных из кислорода, азота и углерода. Подход основан на модификации метода Гиршфельдера и базируется на сопоставлении данных по коэффициенту динамической вязкости воздуха, полученных во втором и в четвертом приближениях теории Чепмена — Энскога.

Для расчета диффузионного массопереноса в пограничном слое могут использоваться разные подходы.

Известно, что применение закона бинарной диффузии оказывается весьма эффективным при рассмотрении газовых смесей простого химического состава:

- компоненты могут быть разбиты на две группы, внутри которых различие в молекулярных массах и в параметрах межмолекулярного взаимодействия относительно невелико;
- на границах рассматриваемой области, в которой исследуются процессы диффузионного тепломассопереноса, расположено наибольшее число частиц, принадлежащих разным группам из числа указанных.

Для газовых смесей, к числу которых относится диссоциированный воздух, закон бинарной диффузии, называемый законом Фика [13], оперирующий единственным коэффициентом бинарной диффузии  $D_{1,2}$  веществ первой группы в вещества второй группы, обладает достаточно высокой точностью [19, 20].

Для газовых же смесей более сложного химического состава использование закона Фика зачастую приводит к недопустимо большим ошибкам в определении интенсивности процессов тепломассопереноса, если в исследуемых процессах использовать единый подход к разбиению компонент смеси на группы [20, 21].

Поскольку в данной работе объектом исследования является диссоциированный воздух, расчет диффузионного массопереноса в пограничном слое проводится в приближении бинарной диффузии, в рамках которого диффузионный поток массы  $i$ -го вещества записывается в виде

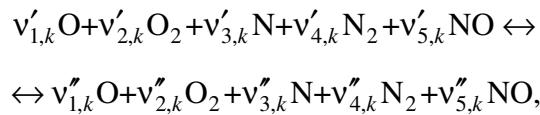
$$J_{d,i} = -\frac{R}{Pr} \frac{Le}{\Psi} C_{i,\eta}, \quad (8)$$

где  $Le = \rho D_{1,2} c_{p,fr} / \lambda$  — число Льюиса ( $D_{1,2}$  — коэффициент бинарной диффузии).

Для расчета скоростей образования веществ в пограничном слое вследствие прохождения гомогенных химических реакций с конечными скоростями используют стандартный алгоритм [2]:

$$\omega_i = 10^3 M_i \sum_{k=1}^{17} (v''_{i,k} - v'_{i,k}) \left[ k_{f,k} \prod_{j=1}^5 (\rho z_j)^{v'_{j,k}} - k_{r,k} \prod (\rho z_j)^{v''_{j,k}} \right], \quad (9)$$

здесь  $k_{f,k}$  и  $k_{r,k}$  — константы скоростей прямой и обратной химических реакций с номером  $k$ , имеющих следующий обобщенный вид:



где  $v'_{j,k}$  и  $v''_{j,k}$  — стехиометрические коэффициенты;  $z_j = C_j / M_j$ .

Перечень учитываемых химических реакций, общее число которых равно 17, и соответствующих им стехиометрических коэффициентов приведен в табл. 1.

Константы скоростей реакций рассматриваются в однотемпературной постановке, в рамках которой не учитывается отличие колебательной температуры  $T_v$  от ее поступательного аналога  $T$ . При

в этом константы прямых и обратных реакций записывают в аррениусовском виде следующим образом:

$$k_{f,k}(T) = A_{f,k} T^{n_{f,k}} \exp(-T_{f,k} / T),$$

$$k_{r,k}(T) = A_{r,k} T^{n_{r,k}} \exp(-T_{r,k} / T). \quad (10)$$

Значения констант для всех учитываемых реакций, входящих в уравнения (10), которые рекомендованы к использованию в работе [2] на основе экспериментальных данных [22, 23], приведены в табл. 2.

Таблица 1

**Перечень учитываемых химических реакций  
и стехиометрических коэффициентов**

<i>k</i>	Реакция	$v'_{1,k}$	$v'_{2,k}$	$v'_{3,k}$	$v'_{4,k}$	$v'_{5,k}$	$v''_{1,k}$	$v''_{2,k}$	$v''_{3,k}$	$v''_{4,k}$	$v''_{5,k}$
1	$\text{N}_2 + \text{O} \leftrightarrow 2\text{N} + \text{O}$	1	0	0	1	1	1	0	2	0	0
2	$\text{N}_2 + \text{O}_2 \leftrightarrow 2\text{N} + \text{O}_2$	0	1	0	1	0	0	1	2	0	0
3	$\text{N}_2 + \text{N} \leftrightarrow 2\text{N} + \text{N}$	0	0	1	1	0	0	0	3	0	0
4	$\text{N}_2 + \text{N}_2 \leftrightarrow 2\text{N} + \text{N}_2$	0	0	0	2	0	0	0	2	1	0
5	$\text{N}_2 + \text{NO} \leftrightarrow 2\text{N} + \text{NO}$	0	0	0	1	1	0	0	2	0	1
6	$\text{O}_2 + \text{O} \leftrightarrow 2\text{O} + \text{O}$	1	1	0	0	0	3	0	0	0	0
7	$\text{O}_2 + \text{O}_2 \leftrightarrow 2\text{O} + \text{O}_2$	0	2	0	0	0	2	1	0	0	0
8	$\text{O}_2 + \text{N} \leftrightarrow 2\text{O} + \text{N}$	0	1	1	0	0	2	0	1	0	0
9	$\text{O}_2 + \text{N}_2 \leftrightarrow 2\text{O} + \text{N}_2$	0	1	0	1	0	2	0	0	1	0
10	$\text{O}_2 + \text{NO} \leftrightarrow 2\text{O} + \text{NO}$	0	1	0	0	1	2	0	0	0	1
11	$\text{NO} + \text{O} \leftrightarrow \text{N} + \text{O} + \text{O}$	1	0	0	0	1	2	0	1	0	0
12	$\text{NO} + \text{O}_2 \leftrightarrow \text{N} + \text{O} + \text{O}_2$	0	1	0	0	1	1	1	1	0	0
13	$\text{NO} + \text{N} \leftrightarrow \text{N} + \text{O} + \text{N}$	0	0	1	0	1	1	0	2	1	0
14	$\text{NO} + \text{N}_2 \leftrightarrow \text{N} + \text{O} + \text{N}_2$	0	0	0	1	1	1	0	1	1	0
15	$\text{NO} + \text{NO} \leftrightarrow \text{N} + \text{O} + \text{NO}$	0	0	0	0	2	1	0	1	0	1
16	$\text{N}_2 + \text{O} \leftrightarrow \text{NO} + \text{N}$	1	0	0	1	0	0	0	1	0	1
17	$\text{NO} + \text{O} \leftrightarrow \text{O}_2 + \text{N}$	1	0	0	0	1	0	1	1	0	0

Таблица 2

Значения констант для разных реакций

$k$	Реакция	$A_{f,k}$ , см <sup>3</sup> /(моль · с)	$n_{f,k}$	$T_{f,k}$ , К	$A_{r,k}$ , см <sup>6</sup> /( моль <sup>2</sup> · с)	$n_{r,k}$	$T_{r,k}$ , К
1	$\text{N}_2 + \text{O} \leftrightarrow 2\text{N} + \text{O}$	$5,8 \cdot 10^{17} \cdot 0,5$	-0,5	113 200	$3,08 \cdot 10^{16} \cdot 0,5$	-0,5	0
2	$\text{N}_2 + \text{O}_2 \leftrightarrow 2\text{N} + \text{O}_2$	$5,8 \cdot 10^{17} \cdot 0,5$	-0,5	113 200	$3,08 \cdot 10^{16} \cdot 0,5$	-0,5	0
3	$\text{N}_2 + \text{N} \leftrightarrow 2\text{N} + \text{N}$	$5,8 \cdot 10^{17} \cdot 4,0$	-0,5	113 200	$3,08 \cdot 10^{16} \cdot 4,0$	-0,5	0
4	$\text{N}_2 + \text{N}_2 \leftrightarrow 2\text{N} + \text{N}_2$	$5,8 \cdot 10^{17} \cdot 1,0$	-0,5	113 200	$3,08 \cdot 10^{16} \cdot 1,0$	-0,5	0
5	$\text{N}_2 + \text{NO} \leftrightarrow 2\text{N} + \text{NO}$	$5,8 \cdot 10^{17} \cdot 0,5$	-0,5	113 200	$3,08 \cdot 10^{16} \cdot 0,5$	-0,5	0
6	$\text{O}_2 + \text{O} \leftrightarrow 2\text{O} + \text{O}$	$3,6 \cdot 10^{19} \cdot 2,5$	-1,0	59 400	$3,12 \cdot 10^{16} \cdot 2,5$	-0,5	0
7	$\text{O}_2 + \text{O}_2 \leftrightarrow 2\text{O} + \text{O}_2$	$3,6 \cdot 10^{19} \cdot 1,0$	-1,0	59 400	$3,12 \cdot 10^{16} \cdot 1,0$	-0,5	0
8	$\text{O}_2 + \text{N} \leftrightarrow 2\text{O} + \text{N}$	$3,6 \cdot 10^{19} \cdot 0,25$	-1,0	59 400	$3,12 \cdot 10^{16} \cdot 0,25$	-0,5	0
9	$\text{O}_2 + \text{N}_2 \leftrightarrow 2\text{O} + \text{N}_2$	$3,6 \cdot 10^{19} \cdot 0,25$	-1,0	59 400	$3,12 \cdot 10^{16} \cdot 0,25$	-0,5	0
10	$\text{O}_2 + \text{NO} \leftrightarrow 2\text{O} + \text{NO}$	$3,6 \cdot 10^{19} \cdot 0,25$	-1,0	59 400	$3,12 \cdot 10^{16} \cdot 0,25$	-0,5	0
11	$\text{NO} + \text{O} \leftrightarrow \text{N} + \text{O} + \text{O}$	$1,2 \cdot 10^{19} \cdot 20,0$	-1,0	755 000	$2,9 \cdot 10^{19} \cdot 20,0$	-1,0	0
12	$\text{NO} + \text{O}_2 \leftrightarrow \text{N} + \text{O} + \text{O}_2$	$1,2 \cdot 10^{19} \cdot 1,0$	-1,0	75 500	$2,9 \cdot 10^{19} \cdot 20,0$	-1,0	0
13	$\text{NO} + \text{N} \leftrightarrow \text{N} + \text{O} + \text{N}$	$1,2 \cdot 10^{19} \cdot 20,0$	-1,0	75 500	$2,9 \cdot 10^{19} \cdot 1,0$	-1,0	0
14	$\text{NO} + \text{N}_2 \leftrightarrow \text{N} + \text{O} + \text{N}_2$	$1,2 \cdot 10^{19} \cdot 1,0$	-1,0	75 500	$2,9 \cdot 10^{19} \cdot 1,0$	-1,0	0
15	$\text{NO} + \text{NO} \leftrightarrow \text{N} + \text{O} + \text{NO}$	$1,2 \cdot 10^{19} \cdot 20,0$	-1,0	75 500	$2,9 \cdot 10^{19} \cdot 20,0$	-1,0	0
16*	$\text{N}_2 + \text{O} \leftrightarrow \text{NO} + \text{N}$	$2,0 \cdot 10^{12}$	0,5	38 000	$4,4 \cdot 10^{11}$	0,5	0
17*	$\text{NO} + \text{O} \leftrightarrow \text{O}_2 + \text{N}$	$2,8 \cdot 10^9$	1,0	20 000	$1,1 \cdot 10^{10}$	1,0	4000

\*В данных уравнениях размерность  $A_r$  совпадает с  $A_f$ .

**Методика определения скоростей гетерогенных химических реакций, протекающих на непроницаемой поверхности материала.** Для каждого из экспериментов, подлежащих анализу, решение данной задачи в численном интегрировании системы автомодельных уравнений ламинарного пограничного слоя, в которой вместо использования граничных условий в выражении (7) задаются массовые концентрации атомарных компонент на стенке. Такой подход обладает целым рядом преимуществ по сравнению с использованием записи скоростей гетерогенных реакций рекомбинации атомарных компонент на стенке.

Во-первых, в его рамках качественно упрощается процедура решения задачи диффузионной части, так как отпадает необходимость итерационного определения концентраций атомарных компонент на стенке с учетом удовлетворения граничных условий типа (7).

Во-вторых, найденные при этом оптимальные концентрации атомарных веществ не зависят от формы записи граничных условий (7), что дает возможность применять полученное решение задачи к разным формам записи граничных условий.

В рамках данной методики расчета решение системы уравнений (2)–(4), (8), (9) осуществляется по следующему алгоритму.

1. В качестве начального приближения для функций  $f$  и  $h$  используется решение для термохимически равновесного воздушного пограничного слоя, а для скоростей образования химических веществ в результате протекания гомогенных химических реакций задаются нулевые значения, что соответствует замороженному пограничному слою.

2. Методом итераций находят численное решение уравнений замороженного пограничного слоя.

3. Для обеспечения соответствия между расчетными и экспериментальными данными по тепловому потоку, подводимому к стенке, организуют внешний итерационный процесс по концентрациям атомарных веществ на стенке. Внутри процесса создается внутренний цикл по решению уравнений пограничного слоя.

Решение задачи, найденное в рамках описанного двухконтурного алгоритма, не является однозначным, оно позволяет только установить оптимальную зависимость вида  $C_{O,w} = \phi(C_{N,w})$ .

Выполняя цикл описанных расчетных исследований для всей серии рассматриваемых экспериментов, обозначаем набор таких функций общим числом  $N_{Exp}$ .

**Пример применения изложенного алгоритма.** Объектом настоящих исследований являются результаты одного эксперимента по нагреву карбида кремния [24], в котором наблюдалась максимальная скорость деструкции этого вещества.

Для этого эксперимента были характерны следующие параметры:

- давление в пограничном слое 1790 Па;
- энтальпия торможения в набегающем потоке 23,9 МДж/кг;
- градиент скорости на внешней границе пограничного слоя 24 000 м/с;
- удельный тепловой поток, направляемый к стенке с высокой каталитической активностью, 1,25 МВт/м<sup>2</sup>;
- температура поверхности карбида кремния 1773 К;
- удельный тепловой поток, направляемый к поверхности карбида кремния, около 0,8 МВт/м<sup>2</sup>.

Соответствующая этим условиям зависимость  $C_{O,w} = \varphi(C_{N,w})$  приведена на рис. 1.

Профили энталпии в пограничном слое, изображенные в долях от ее значения на внешней его границе, показаны на рис. 2. Цифрами 1, 2 и 3 обозначены соответственно термохимически равновесный, замороженный и неравновесный пограничные слои; сплошная линия соответствуют абсолютно каталитической стенке, а пунктирная — стенке с конечной каталитичностью.

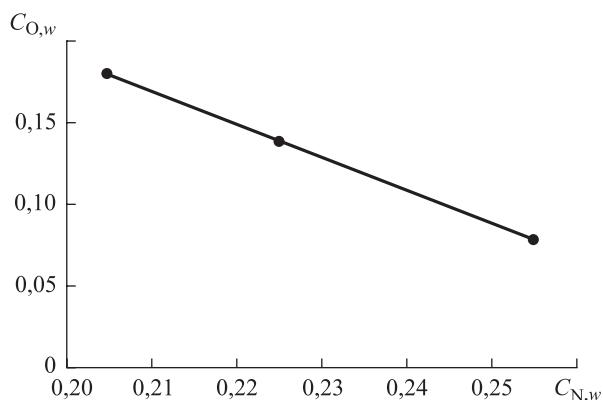


Рис. 1. Оптимальная зависимость на стенке массовой концентрации атомарного кислорода от массовой концентрации атомарного азота

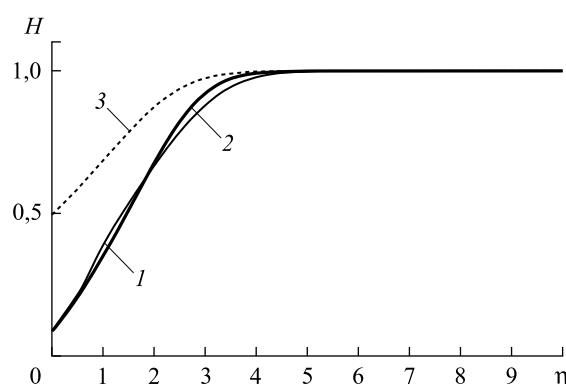
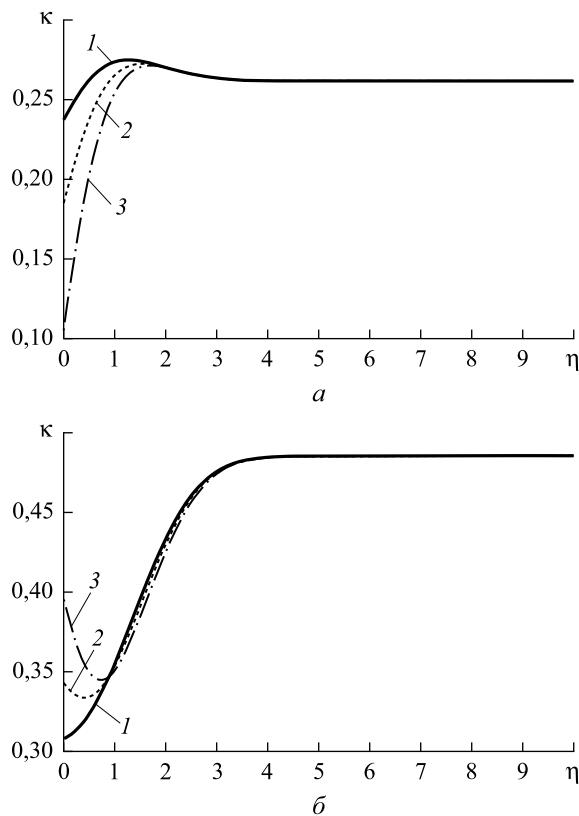


Рис. 2. Профили энталпии в пограничном слое

Профили мольных концентраций к атомарным компонентам в пограничном слое, соответствующие оптимальным концентрациям атомарного азота на стенке, приведены на рис. 3.

В заключение отметим, что, пренебрегая снижением удельного теплового потока при исследовании аэротермохимической деструкции карбида кремния [25], можно получить результаты проведенных исследований со значительными ошибками.



**Рис. 3.** Профили мольных концентраций атомарных веществ в неравновесном пограничном слое на стенке, обладающей конечной катализитичностью:

$a$  — кислород;  $\delta$  — азот; 1 — 0,2047; 2 — 0,2249; 3 — 0,2549

**Выводы.** 1. Сформулирована методика численного решения уравнений неравновесного пограничного слоя на стенке, характеризующейся конечной катализитической активностью.

2. Применение предложенной методики проиллюстрировано на примере литературных данных по экспериментальному исследованию обтекания карбида кремния диссоциированным потоком воздуха.

#### ЛИТЕРАТУРА

- [1] Ковалев В.Г. *Гетерогенные катализитические процессы в аэромеханике*. Москва, Физматлит, 2002, 224 с.
- [2] Землянский Б.А., ред. *Конвективный теплообмен летательных аппаратов*. Москва, Физматлит, 2014, 380 с.
- [3] Димитриенко Ю.И., Коряков М.Н., Захаров А.А., Строганов А.С. Численное моделирование сопряженных аэрогазодинамических и термомеханических процессов в композитных конструкциях высокоскоростных летательных аппаратов. *Математическое моделирование и численные методы*, 2014, № 3, с. 3–24.

- [4] Тимофеев В.Н. Особенности вихревой схемы при моделировании дозвукового обтекания с полубесконечным эквивалентным телом. *Математическое моделирование и численные методы*, 2017, № 4, с. 73–91.
- [5] Горский В.В., Ковальский М.Н. Методика численного моделирования обтекания осесимметричного затупленного тела в недорасширенной струе продуктов сгорания жидкостного ракетного двигателя. *Математическое моделирование и численные методы*, 2017, № 2, с. 65–80.
- [6] Горский В.В., Ковальский М.Н. Методика численного расчета ламинарно-турбулентного теплообмена на осесимметричном затупленном теле в струе продуктов сгорания ЖРД. *Математическое моделирование и численные методы*. 2018, № 2, с. 96–108.
- [7] Baiocco P., Guedron S., Plotard P., Moulin J. The pre-X atmospheric re-entry experimental lifting body: Program status and system synthesis. *AIAA 57th International Astronautical Congress, IAC*, 2006, pp. 8234–8245.
- [8] García A., Chazot O., Fletcher D. Investigations in Plasmatron Facilities on Catalicity Determination. *European Space Agency, ESA SP-487*, 2002, p. 489.
- [9] Vanden Abeele D., Degrez G. Efficient computational model for inductive plasma flows. *AIAA Journal*, vol. 38, no. 2, pp. 234–242.
- [10] Barbato M., Reggiani S., Bruno C., Muylaert J. Model for Heterogeneous Catalysis on Metal Surfaces with Applications to Hypersonic Flows. *Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, 2002, no. 14 (3), pp. 412–420.
- [11] Горский В.В. *Теоретические основы расчета аблационной тепловой защиты*. Москва, Научный мир, 2015, 688 с.
- [12] Чепмен С., Каулинг Т. *Математическая теория неоднородных газов*. Москва, Изд-во иностранной литературы, 1960, 510 с.
- [13] Гиршфельдер Дж., Кертич Ч., Берд Р. *Молекулярная теория газов и жидкостей*. Москва, Изд-во иностранной литературы, 1961, 929 с.
- [14] Скала С.М., Гильберт Л.М. Унос массы графита при гиперзвуковых скоростях. *Ракетная техника и космонавтика*, 1965, т. 3, № 9, с. 87–100.
- [15] Анфимов Н.А. Горение графита в потоке воздуха при высоких температурах. *Известия АН СССР, ОТН, Механика и машиностроение*, 1964, № 5, с. 3–11.
- [16] Соколова И.А. Коэффициенты переноса и интегралы столкновений воздуха и его компонент. В кн.: *Физическая кинетика, Аэрофизические исследования*. Новосибирск, Институт теоретической и прикладной механики СО АН СССР, сб. тр. № 4, 1974, с. 39–104.
- [17] Capitelli M., Colonna G., Gorse C., D'Angola A. Transport properties of high temperature air in local thermodynamic equilibrium. *The European Physical Journal*, 2000, no. 11, pp. 279–289.
- [18] Горский В.В., Федоров С.Н. Об одном подходе к расчету вязкости диссоциированных газовых смесей, образованных из кислорода, азота и углерода. *Инженерно-физический журнал*, 2007, т. 80, № 5, с. 97–101.
- [19] Анфимов Н.А. О представлении диссоциированного воздуха в качестве бинарной смеси газов при решении задач пограничного слоя. *ПМТФ*, 1964, № 1, с. 47–52.
- [20] Gorsky V.V., Olenicheva A.A. Validity of the binary diffusion law in calculating heat and mass transfer in gas mixtures with complex chemical composition. *High Temperature*, 2011, vol. 49, iss. 1, pp. 68–71.

- [21] Кривоносова О.Э., Лосев С.А., Наливайко В.П., Шаталов О.П. Рекомендуемые данные по кинетике химических реакций в системе атомов О-Н. В кн.: *Физико-химическая кинетика в газовой динамике*. Москва, МГУ, 1986, с. 5–26.
- [22] Park C. Two-Temperature Interpretation of dissociation Rate Data for N<sub>2</sub> and O<sub>2</sub>. *AIAA Paper 88-0458*, 1988.
- [23] Yakushin M., Gordeev A., Venneman D., Novelli A. Mass loss of Sic Sample surfaces under different flow conditions. *AIAA Paper 98-2605*, 1998.
- [24] Gorskiii V.V., Gordeev A.N., Dudkina T.I. Aerothermochemical destruction of silicon carbide washed by a high-temperature flow of air. *High Temperature*, 2012, vol. 50, iss. 5, pp. 646–652.
- [25] Горский В.В., Гордеев А.Н., Васильевский С.А., Дудкина Т.И., Сысенко В.А. Апробация расчетно-теоретической модели аэротермохимической деструкции карбида кремния, омываемого высокотемпературным потоком воздуха. *Инженерный журнал: наука и инновации*, 2016, вып. 11. <http://dx.doi.org/10.18698/2308-6033-2016-11-1550>

Статья поступила в редакцию 12.08.2018

Ссылку на эту статью просим оформлять следующим образом:

Горский В.В., Адаменко Р.А. Моделирование химического состава газа в неравновесном воздушном пограничном слое на стенке, обладающей конечной катализической активностью. *Математическое моделирование и численные методы*, 2018, № 4, с. 93–106.

**Горский Валерий Владимирович** — д-р техн. наук, главный научный сотрудник отделения аэродинамики и баллистики АО «ВПК «НПО машиностроения», профессор кафедры «Вычислительная математика и математическая физика» МГТУ им. Н.Э. Баумана. SPIN-код: 5981-1694, ORCID: 0000-0002-2182-1997, Researcher ID: G-1150-2019. e-mail: gorsknnat@yandex.ru

**Адаменко Роман Александрович** — аспирант, инженер-конструктор АО «ВПК «НПО машиностроения». Область научных интересов: газовая динамика, высокотемпературный тепломассообмен, экспериментальная аэродинамика. e-mail: stubbornroma@rambler.ru

## Modeling the chemical composition of a gas in a nonequilibrium air boundary layer on a wall with a finite catalytic activity

© V.V. Gorskiii<sup>1,2</sup>, R.A. Adamenko<sup>1</sup>

<sup>1</sup>JSC “MIC “NPO Mashinostroyenia”, Moscow Region,  
Reutov, 143966, Russia

<sup>2</sup>Bauman Moscow State Technical University, Moscow, 105005, Russia

*The study of aerothermal destruction of silicon carbide is constantly given increased attention. This is primarily due to its widespread use as a protection against oxidation of carbon materials. The rate of aerothermochemical destruction of materials largely depends on the specific heat flux and on the degree of recombination of oxygen atoms on*

the wall. In this paper, we consider a method for solving the complex problem of high-temperature non-equilibrium air stream flowing of a material coated with a silicon carbide film under conditions of finite catalyticicity of the surface of this film.

**Keywords:** silicon carbide, ablation, carbon, oxidation, kinetic constants

## REFERENCES

- [1] Kovalev V.G. *Geterogennye kataliticheskie processy v aehrotermodinamike* [Heterogeneous catalytic processes in aerothermodynamics]. Moscow, Fizmatlit Publ., 2002, 224 p.
- [2] Zemlyanskiy B.A., ed. *Konvektivnyy teploobmen letatelnykh apparatov* [Convective heat transfer of aircraft]. Moscow, Fizmatlit Publ., 2014, 380 p.
- [3] Dimitrienko Yu.I., Koryakov M.N., Zakharov A.A., Stroganov A.S. *Matematicheskoe modelirovanie i chislennye metody — Mathematical Modeling and Computational Methods*, 2014, no. 3, pp. 3–24.
- [4] Timofeev V.N. *Matematicheskoe modelirovanie i chislennye metody — Mathematical Modeling and Computational Methods*, 2017, no. 4, pp. 79–91.
- [5] Gorskii V.V., Kovalskiy M.N. *Matematicheskoe modelirovanie i chislennye metody — Mathematical Modeling and Computational Methods*, 2017, no. 2, pp. 65–80.
- [6] Gorskii V.V., Kovalskiy M.N. *Matematicheskoe modelirovanie i chislennye metody — Mathematical Modeling and Computational Methods*, 2018, no. 2, pp. 96–108.
- [7] Baiocco P., Guedron S., Plotard P., Moulin J. The pre-X atmospheric re-entry experimental lifting body: Program status and system synthesis. *AIAA 57th International Astronautical Congress, IAC*, 2006, pp. 8234–8245.
- [8] García A., Chazot O., Fletcher D. Investigations in Plasmatron Facilities on Catalicity Determination. *European Space Agency, ESA SP-487*, 2002, p. 489.
- [9] Vanden Abeele D., Degrez G. Efficient computational model for inductive plasma flows. *AIAA Journal*, vol. 38, no. 2, pp. 234–242.
- [10] Barbato M., Reggiani S., Bruno C., Muylaert J. Model for Heterogeneous Catalysis on Metal Surfaces with Applications to Hypersonic Flows. *Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, 2002, no. 14, pp. 412–420.
- [11] Gorskii V.V. *Teoreticheskie osnovy rascheta ablyatsionnoy teplovoy zashchity* [Theoretical bases of calculation of ablative thermal protection]. Moscow, Nauchnyy mir Publ., 2015, 688 p.
- [12] Chapmen S., Cowling T.G. *The Mathematical Theory of Non-uniform Gases: An Account Of The Kinetic Theory Of Viscosity, Thermal Conduction And Diffusion In Gases*. Ser. *Cambridge Mathematical Library*. Cambridge University Press, 3 ed., 1991, 446 p. [In Russ.: Chapmen S., Cowling T. G. *Matematicheskaya teoriya neodnorodnykh gazov*. Moscow, Izd. in. lit. Publ., 1960, 510 p.].
- [13] Hirschfelder J., Curtiss Ch., Bird R. *The Molecular Theory of Gases and Liquids*. Wiley-Interscience, rev. ed., 1280 p. [In Russ.: Hirschfelder J., Curtiss Ch., Bird R. *Molekulyarnaya teoriya gazov i zhidkostey*. Moscow, Izd. in. lit. Publ., 1961, 929 p.].
- [14] Skala S.M., Gilbert L.M. *Raketnaya tekhnika i kosmonavтика (Rocket technology and cosmonautics)*, 1965, vol. 3, no. 9, pp. 87–100.
- [15] Anfimov N.A. *Izvestiya Akademii nauk SSSR. Otdelenie tekhnicheskikh nauk. Mekhanika i mashinostroenie (Bulletin of the Academy of Sciences of the USSR. Mechanics and Machine Construction)*, 1965, no. 9, pp. 105–112.

- Division of Engineering Sciences. Mechanics and Mechanical Engineering),* 1964, no. 5, pp. 3–11.
- [16] Sokolova I.A. Koeffitsiety perenosa i integraly stolknoveniy vozdukha i ego component [Transfer coefficients and collision integrals of air and its components]. In: *Fizicheskaya kinetika. Aerofizicheskie issledovaniya* [Physical kinetics. Aerophysical research]. Novosibirsk, Proceedings of the Institute of Theoretical and Applied Mechanics SO AS USSR, no. 4, 1974, pp. 39–104.
  - [17] Capitelli M., Colonna G., Gorse C., D'Angola A. Transport properties of high temperature air in local thermodynamic equilibrium. *The European Physical Journal*, 2000, no. 11, pp. 279–289.
  - [18] Gorskiii V.V., Fedorov S.N. *Inzhenerno-fizicheskiy zhurnal — Journal of Engineering Physics and Thermophysics*, 2007, vol. 80, no. 5. pp. 97–101.
  - [19] Anfimov N.A. *Prikladnaya mehanika i tekhnicheskaya fizika — Journal of Applied Mechanics and Technical Physics*, 1964, no. 1, pp. 47–52
  - [20] [20] Gorskiii V.V., Olenicheva A.A. Validity of the binary diffusion law in calculating heat and mass transfer in gas mixtures with complex chemical composition. *High Temperature*, 2011, vol. 49, no. 1, pp. 68–71.
  - [21] Krivonosova O.E., Losev S.A., Nalivayko V.P., Shatalov O.P. Rekomenduemye dannye po kinetike khimicheskikh reaktsiy v sisteme atomov O-N [Recommended data on the kinetics of chemical reactions in the O-N atom system]. In: *Fiziko-khimicheskaya kinetika v gazovoy dinamike* [Physico-chemical kinetics in gas dynamics]. Moscow, MSU Publ., 1986, pp. 5–26.
  - [22] Park C. Two-Temperature Interpretation of dissociation Rate Data for N<sub>2</sub> and O<sub>2</sub>. *AIAA Paper 88-458*, 1988.
  - [23] Yakushin M., Gordeev A., Venneman D., Novelli A. Mass loss of Sic Sample surfaces under different flow conditions. *AIAA Paper 98-2605*, 1998.
  - [24] Gorskiii V.V., Gordeev A.N., Dudkina T.I. Aerothermochemical destruction of silicon carbide washed by a high-temperature flow of air. *High Temperature*, 2012, vol. 50, iss. 5, pp. 646–652.
  - [25] Gorskiii V.V., Gordeev A.N., Vasilevskiy S.A., Dudkina T.I., Sysenko V.A. *Inzhernyy zhurnal: nauka i innovacii – Engineering Journal: Science and Innovation*, 2016, no. 11. Available at: <http://dx.doi.org/10.18698/2308-6033-2016-11-1550>

**Gorskiii V.V.**, Dr. Sc. (Eng.), Chief Research Fellow, Department of Aerodynamics and Ballistics, JSC “MIC “NPO Mashinostroyenia”, Professor, Department of Computational Mathematics and Mathematical Physics, Bauman Moscow State Technical University. *SPIN-code*: 5981-1694, *ORCID*: 0000-0002-2182-1997, *Researcher ID*: G-1150-2019.  
e-mail: gorsknnat@yandex.ru

**Adamenko R.A.**, post-graduate student, Design Engineer, JSC “MIC “NPO Mashinostroyenia”. Research interests: gas dynamics, high temperature heat-mass transfer, experimental aerodynamics. e-mail: stubbornroma@rambler.ru