



Математическое моделирование и численные методы

Димитриенко Ю.И., Коряков М.Н., Юрин Ю.В., Захаров А.А., Сборщиков С.В., Богданов И.О. Сопряженное моделирование высокоскоростной аэротермодинамики и внутреннего тепломассопереноса в композитных аэрокосмических конструкциях. Математическое моделирование и численные методы, 2021, № 3, с. 42–61.

Источник: <https://mmcm.bmstu.ru/articles/256/>

Сопряженное моделирование высокоскоростной аэротермодинамики и внутреннего тепломассопереноса в композитных аэрокосмических конструкциях

© Ю.И. Димитриенко, М.Н. Коряков, Ю.В. Юрин,
А.А. Захаров, С.В. Сборщиков, И.О. Богданов

МГТУ им. Н.Э. Баумана, Москва, 105005, Россия

Рассматривается сопряженная задача высокоскоростной аэротермодинамики и внутреннего тепломассопереноса в теплозащитных конструкциях возвращаемых космических аппаратов из аблирующих полимерных композиционных материалов. Для определения тепловых потоков в ударном слое возвращаемого аппарата учитывается химический состав атмосферы. Сформулирована математическая постановка сопряженной задачи и предложен алгоритм численного решения. Представлен пример численного решения задачи для возвращаемого космического аппарата Stardust. Показано, что учет химических реакций в потоке газа, обтекающем поверхность возвращаемого аппарата, является существенным для корректного определения температуры газа в пограничном слое. Показано также, что разработанная численная методика решения задачи позволяет определять параметры фазовых превращений в теплозащитной конструкции в зависимости от времени нагрева, в частности позволяет рассчитывать поле порового давления газообразных продуктов терморазложения полимерного композита, которое при определенных условиях может привести к разрушению материала.

Ключевые слова: сопряженные задачи, аэротермодинамика, тепломассоперенос, термодеструкция, композиционные материалы, поровое давление, абляция, тепловая защита, численное моделирование

Введение. В процессе входа в атмосферу Земли возвращаемых космических аппаратов (ВКА) возникает ударная волна в окрестности поверхности конструкции, происходит разогрев газового потока в тонком пограничном слое, протекают неравновесные химические реакции в газовой среде и образуются высокие конвективные тепловые потоки, что приводит к аэродинамическому нагреву поверхности самого аппарата, и, как следствие, к необходимости его теплозащиты [1–7]. Наиболее часто применяется пассивный метод защиты, который заключается в использовании абляционных композиционных материалов [1, 4, 8]. Абляционная теплозащита основана на физико-химических процессах, протекающих на поверхности и/или в объеме материала, с существенным поглощением энергии аэродинамического нагрева [8]. К преимуществам пассивного метода теплозащиты относятся: низкая стоимость, простота использования, надёжность, отсутствие ограничений по максимальному тепловому потоку и большой выбор материалов в связи с развитием органической химии.

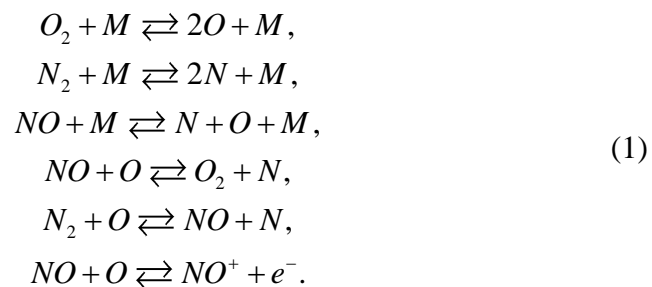
В работах [8–12] была разработана математическая модель процессов внутреннего тепломассопереноса в полимерных теплозащитных материалах при нестационарном нагреве, учитывающая процессы термодеструкции, газообразования и фильтрации газов в порах материала. В работах [13–18] были разработаны численные методы решения сопряженных задач аэротермодинамики и внутреннего тепломассопереноса в конструкциях ВКА, без учета химических реакций во внешнем газовом потоке.

Целью настоящей работы является разработка математической модели сопряженных процессов движения внешнего высокоскоростного химически-реагирующего газового потока и внутренних процессов тепломассопереноса в композитных конструкциях ВКА.

Сопряжённая задача состоит из двух групп уравнений:

- уравнений Навье-Стокса, дополненных уравнениями химической кинетики, описывающих изменение химического состава газа;
- уравнений внутреннего тепломассопереноса в теплозащитной конструкции ВКА.

Математическая формулировка задачи высокоскоростной аэротермодинамики. Воздушный поток, набегающий на конструкцию ВКА, в исходном невозмущенном состоянии, рассмотрим как смесь 23,3 % кислорода O_2 и 76,7 % азота N_2 . Примем, что газ, обтекающий конструкцию, состоит из семи компонентов (O , N , NO , NO^+ , O_2 , N_2 , e^-), а в качестве возможных химических реакций, протекающих в ударном слое при высоких температурах, рассмотрим следующие:



Здесь M означает любой из 6 рассматриваемых компонентов, являющихся катализаторами, e^- — электронная компонента. Будем ассоциировать индекс $i = \overline{1,6}$ с компонентами O , N , NO , NO^+ , O_2 , N_2 соответственно.

Рассмотрим систему уравнений вязкого, химически-реагирующего теплопроводного газа [19–21]

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \rho \mathbf{v} = 0, \\ \frac{\partial \rho \mathbf{v}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} \otimes \mathbf{v} + p \mathbf{E} - \mathbf{T}_v) = \mathbf{0}, \\ \frac{\partial \rho \varepsilon}{\partial t} + \nabla \cdot ((\rho \varepsilon + p) \mathbf{v} - \mathbf{T}_v \cdot \mathbf{v} + \mathbf{q}) = 0, \\ \frac{\partial \rho y_i}{\partial t} + \nabla \cdot \rho y_i \mathbf{v} = \nabla \cdot (\rho D_i \nabla \cdot y_i) + \dot{\omega}_i, \quad i = \overline{1, 4}. \end{array} \right. \quad (2)$$

К этим уравнениям присоединяются определяющие соотношения:

$$\mathbf{T}_v = \mu_1 (\nabla \cdot \mathbf{v}) \mathbf{E} + \mu_2 (\nabla \otimes \mathbf{v} + \nabla \otimes \mathbf{v}^T), \quad (3)$$

$$\mathbf{q} = -\lambda \nabla \theta - \sum_{k=1}^6 \rho D_k \nabla y_k (c_{pk} \theta + e_{vk} + h_k^0), \quad (4)$$

$$p = \rho \frac{R_0}{M_0} \theta, \quad (5)$$

$$\varepsilon = c_v \theta + \frac{\mathbf{v}^2}{2}, \quad (6)$$

$$c_v = \sum_{i=1}^6 y_i c_{vi}, \quad c_p = \sum_{i=1}^6 y_i c_{pi}, \quad (7)$$

$$\frac{1}{M} = \sum_{i=1}^n \frac{y_i}{M_i}, \quad e_{vk} = \frac{R_0 \theta}{2M_k}, \quad y_i = \frac{\rho_i}{\rho}. \quad (8)$$

Здесь обозначены: ρ — плотность газа [кг/м³], \mathbf{v} — вектор скорости, \mathbf{E} — метрический тензор, ε — массовая плотность полной энергии [м²/с²], \mathbf{T}_v — тензор вязких напряжений, \mathbf{q} — вектор теплового потока, c_v , c_p и c_{vi} , c_{pi} — удельные теплоёмкости смеси газового потока и отдельных его химических компонентов при постоянном объёме и давлении [Дж/(кг·К)], θ — температура [К], p — давление смеси [Па], $R_0 = 8,31$ Дж/(моль·К) — универсальная газовая постоянная, μ_1 , μ_2 — коэффициенты вязкости [Па·с], λ — коэффициент теплопроводности [Вт/(м·К)], M и M_i — молярные массы смеси газа и i -ой компоненты газовой смеси [кг/моль], y_i — массовая концентрация i -ой компоненты, D_i — коэффициенты диффузии [м²/с], ω_i — массовые скорости образования химических компонентов [кг/(м³·с)], e_{vk} — колебательная энергия молекул в модели Лайтхилла [Дж/кг], h_k^0 — энтальпия образования компонента [Дж/кг], значения приведены в таблице 1, ∇ — набла-оператор [23], (\cdot) и \otimes — знаки

скалярного и тензорного умножения [23], t — время.

Таблица 1

Энтальпии образования компонентов [19,10]

Компонент	O	N	NO	O_2	N_2	NO^+
h_k^0 , [Дж/кг]	$8,79 \cdot 10^5$	$1,92 \cdot 10^6$	$1,71 \cdot 10^5$	0,0	0,0	$4,1 \cdot 10^6$

В данной работе рассматривается модель линейно-вязкого газа, в которой полагается $\mu_1 = -(2/3)\mu_2$. Коэффициенты вязкости, теплопроводности и диффузии вычисляются согласно молекулярной теории смеси газов.

Для рассмотренных химических реакций предполагаются выполненными условия сохранения атомарного состава и условие квазинейтральности смеси:

$$\begin{aligned}\gamma_4 &= 0,21 - 0,5(\gamma_1 + \gamma_3 + \gamma_6), \\ \gamma_5 &= 0,79 - 0,5(\gamma_2 + \gamma_3 + \gamma_6), \\ \gamma_6 &= \gamma_7,\end{aligned}\tag{9}$$

где $\gamma_i = \frac{y_i}{M_i}$ — размерные концентрации химических компонентов [моль/кг].

Постановка задачи внутреннего тепломассопереноса в композитной конструкции ВКА. Рассмотрим теплозащитную конструкцию ВКА из полимерного композиционного материала. Под действием высоких температур, обычно порядка 2000 °С, в полимерных композиционных материалах происходят внутренние физико-химические превращения — процессы термодеструкции, которые приводят к необратимым изменениям структуры и потере массы материала.

Используем для полимерного термодеструктирующего композита модель, предложенную в [8, 9], согласно которой исходный полимерный композит, до процесса нагрева состоит из двух фаз: наполнителя (волокно или армирующие частицы) и полимерной матрицы, а также начальных пор, заполненных газом. При нагреве до температур начала термодеструкции полимерная матрица разлагается на две новые фазы: твёрдый пиролитический остаток (или кокс) и газ, который находится в порах и фильтруется по ним к поверхности материала. Таким образом, при высокотемпературном нагреве полимерный композит состоит из 4 фаз.

Система уравнений внутреннего тепломассообмена в термодеструктирующем композите состоит из системы уравнений

изменения массы полимерной фазы, уравнения фильтрации газообразных продуктов в порах материала и уравнения теплопроводности

$$\begin{cases} \rho_b \frac{\partial \varphi_b}{\partial t} = -J, \\ \frac{\partial \rho_g \varphi_g}{\partial t} + \nabla \cdot \rho_g \varphi_g \mathbf{v}_g = J\Gamma, \\ \rho c \frac{\partial \theta}{\partial t} = -\nabla \mathbf{q} - c_g \nabla \theta \cdot \rho_g \varphi_g \mathbf{v}_g - J\Delta e^0, \end{cases} \quad (10)$$

здесь введены обозначения: θ — температура композита, \mathbf{v}_g — скорость фильтрации газовой фазы в порах, \mathbf{q} — вектор теплового потока, φ_b , φ_g — объёмные концентрации полимерной и газовой фаз, ρ_b — плотность исходной полимерной матрицы, ρ_g — плотность газовой фазы, ρ и c — плотность и теплоёмкость композита, Δe^0 — удельная теплота термодеструкции матрицы, J — массовая скорость термодеструкции матрицы, Γ — коэффициент газификации матрицы.

Обозначим φ_p — концентрацию пиролизической фазы, для ее определения имеет место следующее алгебраическое выражение:

$$\varphi_p = (\varphi_b^0 - \varphi_b)(1 - \Gamma) \frac{\rho_b}{\rho_p}. \quad (11)$$

К системе (10) присоединяются

$$\mathbf{q} = -\mathbf{\Lambda} \cdot \nabla \theta \quad (12)$$

— закон Фурье;

$$\rho_g \varphi_g \mathbf{v}_g = -\mathbf{K} \cdot \nabla p_g \quad (13)$$

— закон Дарси;

$$J = J_0 \varphi_b \exp\left(-\frac{E_A}{R\theta}\right) \quad (14)$$

— соотношение Аррениуса;

$$p = \rho \frac{R}{M_1} \theta \quad (15)$$

— соотношение Менделеева – Клапейрона; здесь J_0 — предэкспоненциальный множитель, E_A — энергия активации процессов термодеструкции, $\mathbf{\Lambda}$ — тензор теплопроводности, \mathbf{K} — тензор газопроницаемости композита.

Для композита выполняются соотношения смеси для плотности ρ и удельной теплоемкости c , а также имеет место условие нормировки

$$\begin{aligned}\rho c &= \rho_f c_f \varphi_f + \rho_b c_b \varphi_b + \rho_p c_p \varphi_p, \\ \rho &= \rho_f \varphi_f + \rho_b \varphi_b + \rho_p \varphi_p + \rho_g \varphi_g, \\ \varphi_f + \varphi_b + \varphi_p + \varphi_g &= 1,\end{aligned}\tag{16}$$

где индекс f относится к армирующему наполнителю, c_f , c_b , c_p — удельные теплоемкости твердых фаз при постоянной деформации, c_g — удельная теплоемкость газовой фазы при постоянном объеме — все полагаются постоянными, не зависящими от температуры; ρ_f , ρ_b , ρ_p — плотности твердых фаз: волокна, матрицы и кокса (все являются постоянными), ρ_g — плотность газовой фазы.

Граничные условия для сопряженной задачи аэротермодинамики и внутреннего тепломассопереноса. Рассмотрим граничные и начальные условия для сопряженной задачи (2) — (9). Для системы уравнений газовой динамики (2) необходимо добавить граничные условия:

1) на поверхности, где выполняются условия $\mathbf{v} \cdot \mathbf{n} < 0$ и $|\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}| > a$ (сверхзвуковая граница входа), задаются параметры набегающего потока:

$$\rho = \rho_\infty, \quad \mathbf{v} = \mathbf{v}_\infty, \quad p = p_\infty, \quad y = y_{i\infty},\tag{17}$$

где $y_{i\infty}$ — значения концентраций компонент газа в набегающем потоке;

2) на поверхности, где выполняются условия $\mathbf{v} \cdot \mathbf{n} > 0$ и $|\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}| > a$ (сверхзвуковая граница выхода), граничные условия не задаются;

3) на плоскости симметрии задаются следующие условия:

$$\frac{\partial \rho}{\partial \mathbf{n}} = 0, \quad \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} = 0, \quad \frac{\partial v_{\tau_l}}{\partial \mathbf{n}} = 0, \quad \frac{\partial p}{\partial \mathbf{n}} = 0, \quad \frac{\partial y_i}{\partial \mathbf{n}} = 0;\tag{18}$$

4) начальные условия к системе (2) имеют вид:

$$\begin{aligned}\rho(0, \mathbf{x}) &= \rho_0(\mathbf{x}), \quad \mathbf{v}(0, \mathbf{x}) = \mathbf{v}_0(\mathbf{x}), \\ p(0, \mathbf{x}) &= p_0(\mathbf{x}), \quad y(0, \mathbf{x}) = y_{i0}(\mathbf{x}).\end{aligned}\tag{19}$$

К системе уравнений тепломассопереноса (10) необходимо добавить начальные и граничные условия:

1) на внутренней поверхности композита задаём адиабатичности и герметичности газообразных продуктов термодеструкции:

$$\begin{aligned}\mathbf{n} \cdot \nabla \theta &= 0, \\ \mathbf{n} \cdot \nabla p_g &= 0;\end{aligned}\tag{20}$$

2) начальные условия имеют вид:

$$\begin{aligned}\varphi_f(0, \mathbf{x}) &= \varphi_f^0(\mathbf{x}), \quad \varphi_b(0, \mathbf{x}) = \varphi_b^0(\mathbf{x}), \\ \rho_g(0, \mathbf{x}) &= \rho_g^0(\mathbf{x}), \quad \theta(0, \mathbf{x}) = \theta_0(\mathbf{x}).\end{aligned}\tag{21}$$

К перечисленным граничным условиям необходимо добавить соотношения на общей для газа и композита поверхности Σ_w , с помощью которых связываются задачи внешней аэротермодинамики и внутреннего тепломассопереноса в композиционном материале. Эти соотношения имеют вид:

$$\mathbf{v} = \mathbf{0}\tag{22}$$

— условие прилипания для молекул набегающего газового потока;

$$\frac{\partial y_i}{\partial \mathbf{n}} = 0\tag{23}$$

— граничное условие для концентрации компонентов (атомов O и N , молекул NO) на некаталитической поверхности твёрдой стенки;

$$y_6 = 0\tag{24}$$

— в отношении рекомбинации заряженных частиц используются условия идеальной каталитической поверхности;

$$-\mathbf{k} \cdot \nabla \theta \cdot \mathbf{n} = q_c - q_{BL} - q_{RW}.\tag{25}$$

— условие теплового баланса; здесь \mathbf{n} — вектор нормали к поверхности, q_c — плотность конвективного теплового потока к поверхности, q_{BL} — плотность теплового потока, отводимого от поверхности за счет выхода из композита газообразных продуктов пиролиза, q_{RW} — плотность теплового потока, отводимого от поверхности за счет собственного излучения нагретой поверхностью в окружающую среду

$$\begin{aligned}q_c &= \alpha(\theta_e - \theta_w), \\ q_{BL} &= \gamma_{BL} \varphi_g \rho_g \mathbf{v}_g \cdot \mathbf{n} (c_p \theta_e - c_g \theta_w), \\ q_{RW} &= \varepsilon_w \sigma_{SB} \theta_w^4,\end{aligned}\tag{26}$$

где θ_w — температура поверхности композита, θ_e — температура газового потока на внешней границе пограничного слоя, ε_w —

интегральный коэффициент излучения поверхности композита, σ_{SB} — константа Стефана-Больцмана, α — коэффициент теплообмена между поверхностью и внешним набегающим газовым потоком, c_p , c_g — удельные теплоемкости внешнего газового потока и газовой фазы композита соответственно;

$$p_g = p_e \quad (27)$$

— заданное давление p_e на композиционный материал со стороны набегающего газового потока.

Численные методы решения сопряженной задачи. Для решения задачи аэротермодинамики (2) — (9), (17) — (19), (22) — (24) используем конечно-объемный метод второго порядка аппроксимации с TVD реконструкцией [24]. Остановимся подробнее на уравнениях химической кинетики, которые решаются в два этапа.

На первом этапе учитываем конвекцию и диффузию, считая правую часть нулевой. Для вычисления конвективного численного потока применим формулу [24, 25]

$$\tilde{f}_{\xi=0} = \frac{1}{2} [f_L + f_R - \psi(a)(u_R - u_L)], \quad (28)$$

где u_L , u_R — консервативные переменные слева и справа от рассматриваемой грани, f_L , f_R — потоки слева и справа;

$$\psi(z) = \begin{cases} |z|, & \text{если } |z| > \varepsilon, \\ \frac{z^2 + \varepsilon^2}{2\varepsilon}, & \text{если } |z| \leq \varepsilon \end{cases} \quad (29)$$

— функция энтропийной коррекции (ε — параметр диссипации);

$$a = \begin{cases} \frac{f_R - f_L}{u_R - u_L}, & \text{если } u_R - u_L \neq 0; \\ \frac{1}{2}(v_R + v_L), & \text{если } u_R - u_L = 0 \end{cases} \quad (30)$$

— характеристическая скорость распространения возмущений; v_L , v_R — нормальные к грани компоненты скорости газа. Для диффузионного численного потока применяется центральный поток (среднее арифметическое).

На втором этапе учитываем правую часть (конвекции и диффузии нет) и уравнение, учитывающее приток массы i -ого компонента за счет химических превращений, преобразуем к виду:

$$\frac{\partial X_i}{\partial t} = \dot{\omega}_i, \quad (31)$$

где $X_i = \frac{\rho y_i}{M_i}$ — молярные концентрации, $\dot{\omega}_i = \frac{\omega_i}{M_i}$ — скорости образования i -ого компонента, вычисляются с использованием закона действующих масс:

$$\begin{aligned} \dot{\omega}_1 &= \varphi_{11} + \varphi_{13} + \varphi_{14} + \varphi_{15} + \varphi_{111} + \varphi_{112} + \\ &+ \varphi_{113} + \varphi_{114} + \varphi_{115} + \varphi_{116} + \varphi_{117} + \varphi_{118}; \\ \dot{\omega}_2 &= \varphi_{26} + \varphi_{27} + \varphi_{28} + \varphi_{29} + \varphi_{210} + \varphi_{111} + \\ &+ \varphi_{112} + \varphi_{113} + \varphi_{114} + \varphi_{115} - \varphi_{116} - \varphi_{117} + \varphi_{118}; \\ \dot{\omega}_3 &= -\varphi_{111} - \varphi_{112} - \varphi_{113} - \varphi_{114} - \varphi_{115} + \varphi_{116} - \varphi_{117}; \\ \dot{\omega}_6 &= -\varphi_{118}; \\ \varphi_{11} &= 2(k_{f1}X_1X_4 - k_{r1}X_1^3); \\ \varphi_{12} &= 2(k_{f2}X_2X_4 - k_{r2}X_1^2X_2); \\ \varphi_{13} &= 2(k_{f3}X_3X_4 - k_{r3}X_1^2X_3); \\ \varphi_{14} &= 2(k_{f4}X_4^2 - k_{r4}X_1^2X_4); \\ \varphi_{15} &= 2(k_{f5}X_4X_5 - k_{r5}X_1^2X_5); \\ \varphi_{26} &= 2(k_{f6}X_1X_5 - k_{r6}X_1X_2^2); \\ \varphi_{27} &= 2(k_{f7}X_2X_5 - k_{r7}X_2^3); \\ \varphi_{28} &= 2(k_{f8}X_3X_5 - k_{r8}X_2^2X_3); \\ \varphi_{29} &= 2(k_{f9}X_4X_5 - k_{r9}X_2^2X_4); \\ \varphi_{210} &= 2(k_{f10}X_5^2 - k_{r10}X_2^2X_5); \\ \varphi_{111} &= k_{f11}X_1X_3 - k_{r11}X_1^2X_2; \\ \varphi_{112} &= k_{f12}X_2X_3 - k_{r12}X_1X_2^2; \\ \varphi_{113} &= k_{f13}X_3^2 - k_{r13}X_1X_2X_3; \\ \varphi_{114} &= k_{f14}X_3X_4 - k_{r14}X_1X_2X_4; \\ \varphi_{115} &= k_{f15}X_3X_5 - k_{r15}X_1X_2X_5; \\ \varphi_{116} &= -(k_{f16}X_1X_3 - k_{r16}X_2X_4); \\ \varphi_{117} &= -(k_{f17}X_1X_5 - k_{r17}X_2X_3); \\ \varphi_{118} &= -(k_{f18}X_1X_2 - k_{r18}X_6X_7). \end{aligned} \quad (32)$$

Константы k_{fi} , k_{ri} скоростей прямых и обратных реакций приведены в таблицах 2 и 3 (k_{fi} и k_{ri} традиционно называют константами, хотя они зависят от температуры). В зависимости от реакции размерностью этих констант является $[см^3/(\text{моль} \cdot \text{с})]$ или $[см^6/(\text{моль}^2 \cdot \text{с})]$.

Таблица 2

Константы скоростей прямых химических реакций

№ реакции	Катализатор	Константа k_{fi} скорости прямой реакции
1	O	$k_{f1} = \frac{9 \cdot 10^{19}}{\theta} \exp\left[-\frac{59400}{\theta}\right]$
	N, NO	$k_{f2} = k_{f3} = \frac{3,6 \cdot 10^{18}}{\theta} \exp\left[-\frac{59400}{\theta}\right]$
	O_2	$k_{f4} = \frac{3,3 \cdot 10^{19}}{\theta} \exp\left[-\frac{59400}{\theta}\right]$
	N_2	$k_{f5} = \frac{7,2 \cdot 10^{19}}{\theta} \exp\left[-\frac{59400}{\theta}\right]$
2	O, NO, O_2	$k_{f6} = k_{f8} = k_{f9} =$ $= \frac{1,9 \cdot 10^{17}}{\sqrt{\theta}} \exp\left[-\frac{113100}{\theta}\right]$
	N	$k_{f7} = \frac{2,1 \cdot 10^{22}}{\theta \sqrt{\theta}} \exp\left[-\frac{113100}{\theta}\right]$
	N_2	$k_{f10} = \frac{4,8 \cdot 10^{14}}{\sqrt{\theta}} \exp\left[-\frac{113100}{\theta}\right]$
	NO, O, N	$k_{f11} = k_{f12} = k_{f13} =$ $= \frac{7,9 \cdot 10^{21}}{\theta \sqrt{\theta}} \exp\left[-\frac{75600}{\theta}\right]$
	O_2, N_2	$k_{f14} = k_{f15} = \frac{4 \cdot 10^{20}}{\theta \sqrt{\theta}} \exp\left[-\frac{75600}{\theta}\right]$
4		$k_{f16} = 3,2 \cdot 10^9 \cdot \theta \cdot \exp\left[-\frac{19700}{\theta}\right]$
5		$k_{f17} = 6,8 \cdot 10^{13} \cdot \exp\left[-\frac{37500}{\theta}\right]$
6		$k_{f18} = 2,4 \cdot 10^{10} \cdot \sqrt{\theta} \cdot \exp\left[-\frac{32400}{\theta}\right]$

Таблица 3

Константы скоростей обратных химических реакций

№ реакции	Катализатор	Константа k_{ri} скорости прямой реакции
1	O	$k_{r1} = \frac{7,5 \cdot 10^{16}}{\sqrt{\theta}}$
	N, NO	$k_{r2} = k_{r3} = \frac{3 \cdot 10^{15}}{\sqrt{\theta}}$
	O_2	$k_{r4} = \frac{2,7 \cdot 10^{16}}{\sqrt{\theta}}$
	N_2	$k_{r4} = \frac{6 \cdot 10^{15}}{\sqrt{\theta}}$
2	O, NO, O_2	$k_{r6} = k_{r8} = k_{r9} = \frac{1,1 \cdot 10^{16}}{\sqrt{\theta}}$
	N	$k_{r7} = \frac{1,2 \cdot 10^{21}}{\theta \sqrt{\theta}}$
	N_2	$k_{r10} = \frac{2,7 \cdot 10^{16}}{\sqrt{\theta}}$
	NO, O, N	$k_{r11} = k_{r12} = k_{r13} = \frac{2 \cdot 10^{21}}{\theta \sqrt{\theta}}$
	O_2, N_2	$k_{r14} = k_{r15} = \frac{10^{20}}{\theta \sqrt{\theta}}$
4		$k_{r16} = 9,6 \cdot 10^{11} \cdot \sqrt{\theta} \cdot \exp\left[-\frac{3600}{\theta}\right]$
5		$k_{r17} = 1,5 \cdot 10^{13}$
6		$k_{r18} = 4 \cdot 10^{20} \cdot \theta^{-1,2}$

Систему (21) решаем итерационным явно-неявным методом

$$\mathbf{X}^{n+1} = \tilde{\mathbf{X}}^{n+1} + \left[\mathbf{X}^n - \tilde{\mathbf{X}}^{n+1} + \Delta t \left(\alpha \dot{\mathbf{w}}^n + (1 - \alpha) \tilde{\dot{\mathbf{w}}}^{n+1} \right) \right] \times \\ \times \left[\mathbf{I} - (1 - \alpha) \Delta t \left[\frac{\partial \tilde{\dot{\mathbf{w}}}^{n+1}}{\partial \mathbf{X}} \right] \right]^{-1},$$

где $\mathbf{X}=[X_1, X_2, X_3, X_4]^T$, $\tilde{\mathbf{X}}$ — промежуточное значение итерационного процесса, Δt — шаг по времени, α — параметр явно-неявной схемы (обычно полагают $\alpha = 0,4$), \mathbf{I} — единичная матрица.

Для решения задачи внутреннего тепломассопереноса (5) — (9) применен метод конечного элемента в сочетании с итерационным методом линеаризации. Подробности реализации этого алгоритма изложены в работах [17,18].

Учет анизотропии свойств материалов. В качестве теплозащиты ВКА рассмотрим тканевый композиционный материал, который имеет криволинейную анизотропию (ортотропию), главные оси которой Oc_i согласованы с геометрической поверхностью конструкции корпуса ВКА: два вектора локального базиса $\mathbf{c}_1, \mathbf{c}_2$ главных осей анизотропии принадлежат плоскости, параллельной к касательной плоскости к внешней поверхности ВКА, а третий вектор \mathbf{c}_3 локального базиса Oc_i направлен по нормали к этой плоскости. Локальная система координат Oc_i таким образом строится в каждом конечном элементе композитной конструкции (рис. 1).

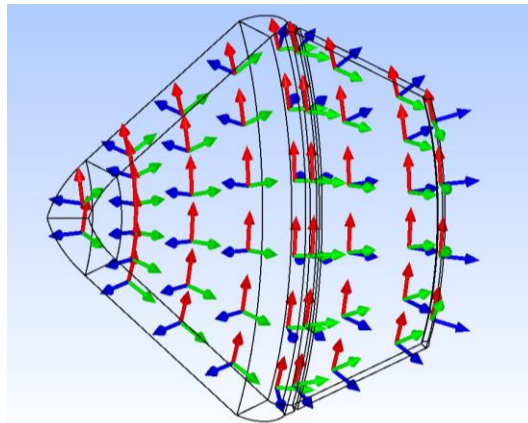


Рис. 1. Визуализация системы векторов локальных базисов криволинейной анизотропии композиционного материала ВКА

Результаты численного моделирования. Численное решение сопряженной задачи было проведено для возвращаемого космического аппарата Sturdust [4, 6]. Результаты получены для высоты 45 км и скорости движения ВКА 4500 м/с.

На рис. 2 и рис. 3 представлены распределения концентрации химических компонент O и N , и распределение температуры θ в ударном слое. Видно, что температура в ударном слое достигает 6120 К. При использовании модели совершенного газа без учета химических реакций соответствующее значение температуры получается примерно в 1,5 – 2,0 раза выше. Поэтому учёт химических

реакций в набегающем высокоскоростном потоке воздуха в таких условиях является необходимым.

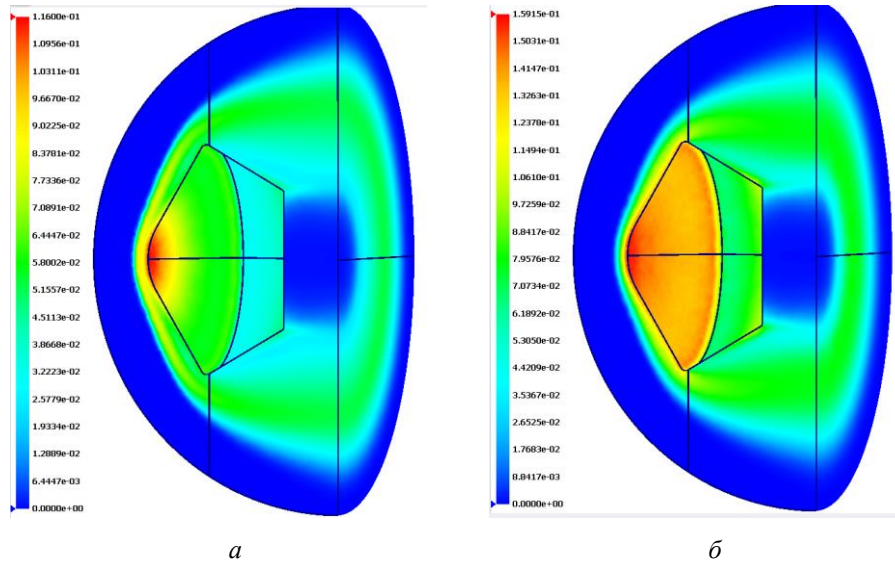


Рис. 2. Распределение концентраций химических компонентов в ударном слое:
 a — атомарный кислород O , y_1 ; b — атомарный азот N , y_2

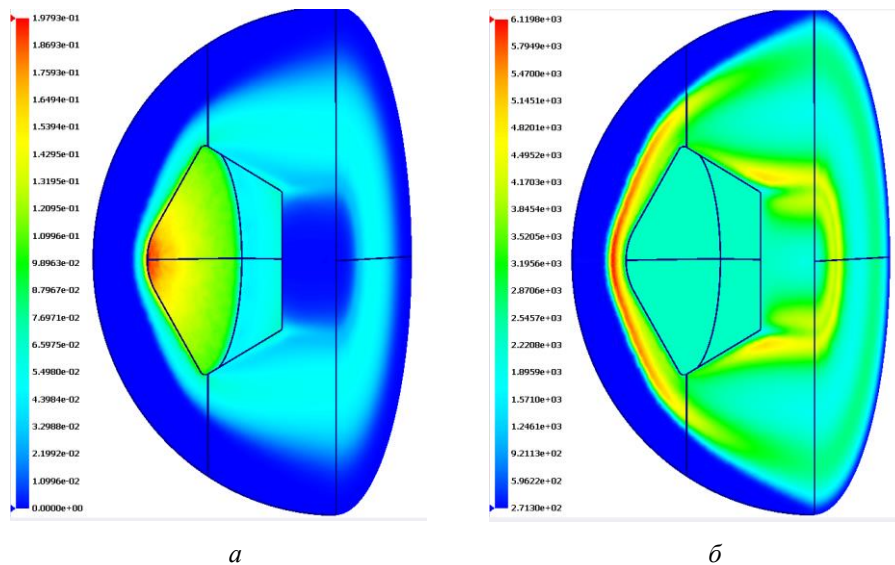


Рис. 3. Распределение концентраций химических компонентов и температуры газового потока в ударном слое:
 a — окись азота NO , y_3 ; b — температура газового потока, θ , К

Конструкция ВКА предполагалась двухслойной. В качестве теплозащитного материала, согласно [6] был выбран фенольный стеклопластик (внешняя область), а в качестве силового слоя —

эпоксидный стеклопластик (внутренняя область). На рис. 4 и рис. 5 показано распределение температуры и объёмной концентрации φ_p кокса в теплозащитном слое для момента прогрева 180 с. Наиболее теплонагруженной областью является критическое затупление, где температура достигла значений 1557 К. Видно, что действием высоких температур фенольная матрица разлагается, при этом эпоксидная матрица остаётся в области низких температур. На рис. 6 показано распределение по толщине порового давления в критической точке, его максимальное значение не превышает 1,4 атм. Это объясняется наличием высокой первичной пористости в фенольной матрице.

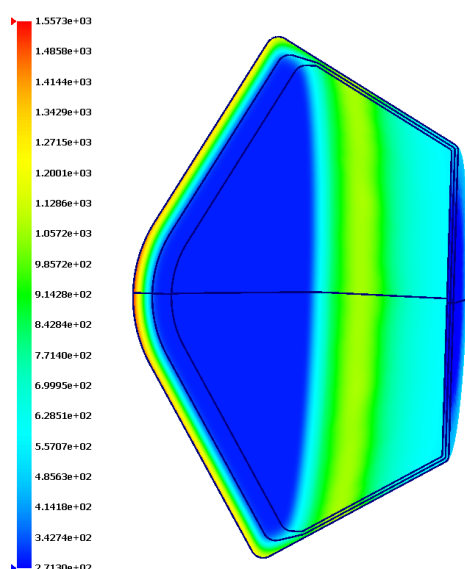


Рис. 4. Распределение температуры в теплозащитном слое ВКА (К) в момент времени $t = 180$ с

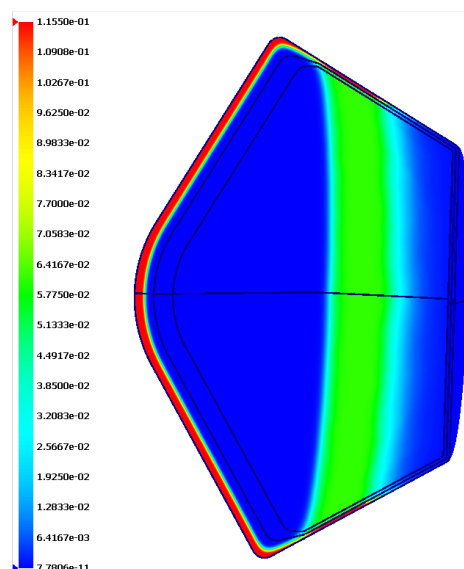


Рис. 5. Распределение объёмной концентрации коксовой фазы в композитной конструкции ВКА в момент $t = 180$ с

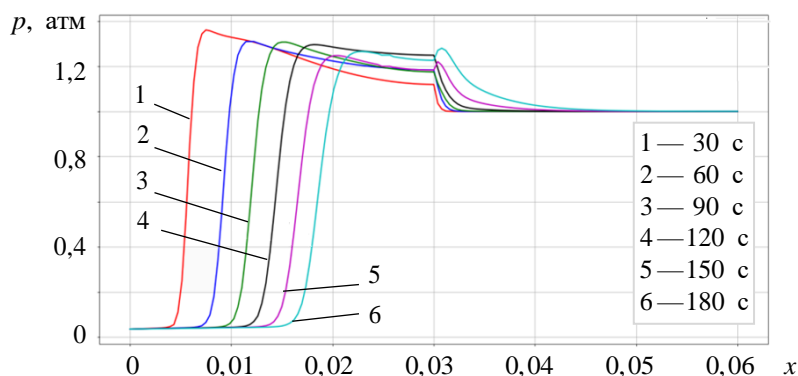


Рис. 6. Распределение порового давления в теплозащитном слое ВКА в различные моменты времени t аэродинамического нагрева

Выводы. Предложена постановка сопряженной задачи высокоскоростной аэротермодинамики химически реагирующего газового потока и внутреннего тепломассопереноса в теплозащитной конструкции ВКА из аблирующих композитов. Разработаны численные конечно-объемные и конечно-элементные методы решения сопряженной задачи. Приведен пример численного моделирования аэротермодинамики газового потока с учетом химических реакций и внутреннего тепломассопереноса для возвращаемого космического аппарата Stardust. Показана важность учёта химического состава атмосферы для определения тепловых воздействий на поверхность конструкции аппарата.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Riccio A., Raimondo F., Sellitto A., Carandente V., Scigliano R., Tescione D. Optimum design of ablative thermal protection systems for atmospheric entry vehicle. *Applied Thermal Engineering*, 2017, no. 119, pp. 541–552.
- [2] Ayasoufi A., Rahmani R.K., Cheng G., Koomullil R., Neroorkar K. Numerical simulation of ablation for reentry vehicles. *Collection of Technical Papers — 9th AIAA/ASME Joint Thermophysics and Heat Transfer Conference Proceedings*, vol. 1, pp. 14–25.
- [3] Carandente V., Savino R., Iacovazzo M., Boffa C. Aerothermal analysis of a sample-return reentry capsule. *Fluid Dynamics and Materials Processing*, 2013, vol. 9, iss. 4, pp. 461–484.
- [4] Beerman A.F., Lewis M.J., Starkey R.P., Cybyk B.Z. Significance of nonequilibrium surface interactions in Stardust return capsule ablation modeling. *Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, 2009, vol. 23, no. 3, pp. 425–432.
- [5] Wang H., Liu L., Zhang W. Fluid-thermal-structure coupled analysis of radome for hypersonic flight vehicle. *Advances in Engineering Research*, 2017, vol. 141, pp. 1272–1277.
- [6] Weng H., Martin A. Numerical investigation on charring ablator geometric effects: study of stardust sample return capsule heat shield. *53rd AIAA Aerospace Sciences Meeting*, 2015, art. no. AIAA 2015-0211. DOI: 10.2514/6.2015-0211
- [7] Алифанов О.М., Иванков А.А., Нетелев А.В., Финченко В.С. Исследование характеристик теплозащитного покрытия аэроупругих тормозных устройств спускаемых в атмосфере планет аппаратов. *Труды МАИ*, 2013, № 71, с. 18.
- [8] Димитриенко Ю.И. *Механика композитных конструкций при высоких температурах*. Москва, Физматлит, 2018, 448 с.
- [9] Dimitrienko Yu.I. Internal heat-mass transfer and stresses in thin-walled structures of ablating materials. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 1997, vol. 40, no. 7, pp. 1701–1711.
- [10] Dimitrienko Y.I., Dimitrienko I.D. Effect of thermomechanical erosion on heterogeneous combustion of composite materials in high-speed flows. *Combustion and Flame*, 2000, vol. 122, iss. 3, pp. 211–226.
- [11] Dimitrienko Yu.I. A structural thermo-mechanical model of textile composite materials at high temperatures. *Composites Science and Technology*, 1999, vol. 59, iss. 7, pp. 1041–1053.
- [12] Dimitrienko Yu.I. Thermomechanical behaviour of composite materials and structures under high temperatures: 2. Structures. *Composites Part A: Applied Science and Manufacturing*, 1997, vol. 28, iss. 5, pp. 463–471.

- [13] 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.
- [14] Димитриенко Ю.И., Коряков М.Н., Захаров А.А. Применение метода RKDG для численного решения трехмерных уравнений газовой динамики на неструктурированных сетках. *Математическое моделирование и численные методы*, 2015, № 4, с. 75–91.
- [15] Димитриенко Ю.И., Коряков М.Н., Захаров А.А. Разработка технологий численного моделирования сопряженных задач газовой динамики и термодинамики композитных конструкций перспективных высокоскоростных летательных аппаратов. *Известия Самарского научного центра Российской академии наук*, 2016, т. 18, № 2–3, с. 891–895.
- [16] Dimitrienko Y.I., Zakharov A.A., Koryakov M.N. Coupled problems of high-speed aerodynamics and thermomechanics of heat-shielding structures. *Journal of Physics: Conference Series*, 2018, vol. 1141, art. no. 012094. DOI: 10.1088/1742-6596/1141/1/012094
- [17] Димитриенко Ю.И., Коряков М.Н., Юрин Ю.В., Захаров А.А. Конечно-элементное моделирование термонапряжений в композитных термодеструктурирующих конструкциях при аэродинамическом нагреве. *Математическое моделирование и численные методы*, 2019, № 2, с. 15–34.
- [18] Dimitrienko Y.I., Zakharov A.A., Koryakov M.N. Computational modeling of the conjugated thermomechanical and aerogas dynamics processes for composite structures of high speed vehicles. *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering*, 2019, vol. 683, art. no. 012007. DOI: 10.1088/1757-899X/683/1/012007
- [19] Anderson J.D. *Hypersonic and high-temperature gas dynamics. 2nd edition.* American Institute of Aeronautics and Astronautics, Reston, Virginia, 2006, 232 p.
- [20] Краснов Н.Ф. *Аэродинамика. Т.1. Основы теории. Аэродинамика профиля и крыла.* Москва, Высшая школа, 1980, 496 с.
- [21] Краснов Н.Ф. *Аэродинамика. Т.2. Методы аэродинамического расчета.* Москва, Высшая школа, 1980, 416 с.
- [22] Димитриенко Ю.И., Котенев В.П., Захаров А.А. *Метод ленточных адаптивных сеток для численного моделирования в газовой динамике.* Москва, Физматлит, 2011, 280 с.
- [23] Димитриенко Ю.И. *Механика сплошной среды. Т. 1. Тензорный анализ.* Москва, Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2011, 367 с.
- [24] Гильманов А.Н. *Методы адаптивных сеток в задачах газовой динамики.* Москва, Физматлит, 2000, 248 с.
- [25] Куликовский А.Г., Погорелов Н.В., Семёнов А.Ю. *Математические вопросы численного решения гиперболических систем уравнений.* Москва, Физматлит, 2012, 656 с.

Статья поступила в редакцию 19.06.2021

Ссылку на эту статью просим оформлять следующим образом:

Димитриенко Ю.И., Коряков М.Н., Юрин Ю.В., Захаров А.А., Сборщиков С.В., Богданов И.О. Сопряженное моделирование высокоскоростной аэротермодинамики и внутреннего теплопереноса в композитных аэрокосмических конструкциях. *Математическое моделирование и численные методы*, 2021, № 3, с. 42–61.

Димитриенко Юрий Иванович — д-р физ.-мат. наук, заведующий кафедрой «Вычислительная математика и математическая физика» МГТУ им. Н.Э. Баумана, директор Научно-образовательного центра «Суперкомпьютерное инженерное моделирование и разработка программных комплексов» МГТУ им. Н.Э. Баумана. e-mail: dimit.bmstu@gmail.com

Коряков Михаил Николаевич — младший научный сотрудник Научно-образовательного центра «Суперкомпьютерное инженерное моделирование и разработка программных комплексов» МГТУ им. Н.Э. Баумана. e-mail: mkoryakov@bmstu.ru

Юрин Юрий Викторович — канд. физ.-мат. наук, доцент кафедры «Вычислительная математика и математическая физика» МГТУ им. Н.Э. Баумана, старший научный сотрудник Научно-образовательного центра «Суперкомпьютерное инженерное моделирование и разработка программных комплексов» МГТУ им. Н.Э. Баумана. e-mail: yvurin@yandex.ru

Захаров Андрей Алексеевич — канд. физ.-мат. наук, доцент кафедры «Вычислительная математика и математическая физика» МГТУ им. Н.Э. Баумана, старший научный сотрудник Научно-образовательного центра «Суперкомпьютерное инженерное моделирование и разработка программных комплексов» МГТУ им. Н.Э. Баумана. e-mail: azaharov@bmstu.ru

Сборщиков Сергей Васильевич — научный сотрудник Научно-образовательного центра «Суперкомпьютерное инженерное моделирование и разработка программных комплексов» МГТУ им. Н.Э. Баумана. e-mail: servasbor@gmail.com

Богданов Илья Олегович — канд. физ.-мат. наук, доцент кафедры «Вычислительная математика и математическая физика» МГТУ им. Н.Э. Баумана, старший научный сотрудник Научно-образовательного центра «Суперкомпьютерное инженерное моделирование и разработка программных комплексов» МГТУ им. Н.Э. Баумана. e-mail: biofamily_7394@mail.ru

Coupled modeling of high-speed aerothermodynamics and internal heat and mass transfer in composite aerospace structures

© Yu.I. Dimitrienko, M.N. Koryakov, Yu.V. Yurin,
A.A. Zakharov, S.V. Sborschikov, I.O. Bogdanov

Bauman Moscow State Technical University, Moscow, 105005, Russia

A coupled problem of high-speed aerothermodynamics and internal heat and mass transfer in heat-shielding structures of reentry spacecraft made of ablative polymer composite materials is considered. To determine the heat fluxes in the shock layer of the reentry vehicle, the chemical composition of the atmosphere is taken into account. The mathematical formulation of the conjugate problem is formulated and an algorithm for the numerical solution is proposed. An example of the numerical solution of the problem for the reentry spacecraft Stardust is presented. It is shown that taking into account chemical reactions in the gas flow around the surface of the reentry vehicle is essential for the correct determination of the gas temperature in the boundary layer. It is also shown that the developed numerical method for solving the problem makes it possible

to determine the parameters of phase transformations in a heat-shielding structure depending on the heating time, in particular, it allows calculating the pore pressure field of gaseous products of thermal decomposition of a polymer composite, which, under certain conditions, can lead to material destruction.

Keywords: coupled problems, aerothermodynamics, heat and mass transfer, thermal destruction, composite materials, pore pressure, ablation, thermal protection, numerical modeling

REFERENCES

- [1] Riccio A., Raimondo F., Sellitto A., Carandente V., Scigliano R., Tescione D. Optimum design of ablative thermal protection systems for atmospheric entry vehicle. *Applied Thermal Engineering*, 2017, no. 119, pp. 541–552.
- [2] Ayasoufi A., Rahmani R.K., Cheng G., Koomullil R., Neroorkar K. Numerical simulation of ablation for reentry vehicles. *Collection of Technical Papers — 9th AIAA/ASME Joint Thermophysics and Heat Transfer Conference Proceedings*, vol. 1, pp. 14–25.
- [3] Carandente V., Savino R., Iacovazzo M., Boffa C. Aerothermal analysis of a sample-return reentry capsule. *Fluid Dynamics and Materials Processing*, 2013, vol. 9, iss. 4, pp. 461–484.
- [4] Beerman A.F., Lewis M.J., Starkey R.P., Cybyk B.Z. Significance of nonequilibrium surface interactions in Stardust return capsule ablation modeling. *Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, 2009, vol. 23, no. 3, pp. 425–432.
- [5] Wang H., Liu L., Zhang W. Fluid-thermal-structure coupled analysis of radome for hypersonic flight vehicle. *Advances in Engineering Research*, 2017, vol. 141, pp. 1272–1277.
- [6] Weng H., Martin A. Numerical investigation on charring ablator geometric effects: study of stardust sample return capsule heat shield. *53rd AIAA Aerospace Sciences Meeting*, 2015, art. no. AIAA 2015-0211. DOI: 10.2514/6.2015-0211
- [7] Alifanov O.M., Ivankov A.A., Netelev A.V., Finchenko V.S. Study on thermal shields characteristics of aeroelastic braking devices of reentry vehicles descent into the planets atmosphere. *Trudy MAI*, 2013, no. 71, p. 18.
- [8] Dimitrienko Yu.I. *Thermomechanics of composites structures under high temperatures*. Springer, 2015, 367 p.
- [9] Dimitrienko Yu.I. Internal heat-mass transfer and stresses in thin-walled structures of ablating materials. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 1997, vol. 40, no. 7, pp. 1701–1711.
- [10] Dimitrienko Y.I., Dimitrienko I.D. Effect of thermomechanical erosion on heterogeneous combustion of composite materials in high-speed flows. *Combustion and Flame*, 2000, vol. 122, iss. 3, pp. 211–226.
- [11] Dimitrienko Yu.I. A structural thermo-mechanical model of textile composite materials at high temperatures. *Composites Science and Technology*, 1999, vol. 59, iss. 7, pp. 1041–1053.
- [12] Dimitrienko Yu.I. Thermomechanical behaviour of composite materials and structures under high temperatures: 2. Structures. *Composites Part A: Applied Science and Manufacturing*, 1997, vol. 28, iss. 5, pp. 463–471.
- [13] Dimitrienko Y.I., Koryakov M.N., Zakharov A.A., Stroganov A.S. Computational modeling of conjugated gasdynamic and thermomechanical processes in composite structures of high speed aircraft. *Mathematical Modeling and Computational Methods*, 2014, no. 3, pp. 3–24.

- [14] Dimitrienko Y.I., Koryakov M.N., Zakharov A.A. Application of RKDG method for computational solution of three-dimensional gasdynamic equations with non-structured grids. *Mathematical Modeling and Computational Methods*, 2015, no. 4, pp. 75–91.
- [15] Dimitrienko Y.I., Koryakov M.N., Zakharov A.A. Development of computational methods for numerical simulation of conjugated problems of gas dynamics and thermomechanics in composite structures of promising high-speed aircrafts. *Izvestia of Samara Scientific Center of the Russian Academy of Sciences*, 2016, vol. 18, no. 2–3, pp. 891–895.
- [16] Dimitrienko Y.I., Zakharov A.A., Koryakov M.N. Coupled problems of high-speed aerodynamics and thermomechanics of heat-shielding structures. *Journal of Physics: Conference Series*, 2018, vol. 1141, art. no. 012094. DOI: 10.1088/1742-6596/1141/1/012094
- [17] Dimitrienko Yu.I., Koryakov M.N., Yurin Yu.V., Zakharov A.A. Finite-element modeling of thermal stresses in composite structures with thermal decomposition under aerodynamic heating. *Mathematical Modeling and Computational Methods*, 2019, no. 2, pp. 15–34.
- [18] Dimitrienko Y.I., Zakharov A.A., Koryakov M.N. Computational modeling of the conjugated thermomechanical and aerogasdynamics processes for composite structures of high speed vehicles. *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering*, 2019, vol. 683, art. no. 012007. DOI: 10.1088/1757-899X/683/1/012007
- [19] Anderson J.D. *Hypersonic and high-temperature gas dynamics*. 2nd edition. American Institute of Aeronautics and Astronautics, Reston, Virginia, 2006, 232 p.
- [20] Krasnov N.F. *Aerodinamika. T.1. Osnovy teorii. Aerodinamika profilya i kryla* [Aerodynamics. Vol. 1. Fundamentals of theory. Airfoil and wing aerodynamics]. Moscow, Vysshaya shkola Publ., 1980, 496 p.
- [21] Krasnov N.F. *Aerodinamika. T.2. Metody aerodinamicheskogo rascheta* [Aerodynamics. Vol. Methods of aerodynamic calculation]. Moscow, Vysshaya shkola Publ., 1980, 416 p.
- [22] Dimitrienko Yu.I., Kotenev V.P., Zakharov A.A. *Metod lentochnykh adaptivnykh setok dlya chislennogo modelirovaniya v gazovoy dinamike* [Adaptive tape grid method for computational simulation in gas dynamics]. Moscow, Fizmatlit Publ., 2011, 280 p.
- [23] Dimitrienko Yu.I. *Mekhanika sploshnoj sredy. T. 1. Tenzornyj analiz* [Continuum Mechanics. Vol. 1. Tensor analysis]. Moscow, BMSTU Publ., 2011, 367 p.
- [24] Gilmanov A.N. *Metody adaptivnykh setok v zadachah gazovoy dinamiki* [Methods of adaptive grids in problems of gas dynamics]. Moscow, Fizmatlit Publ., 2000, 248 p.
- [25] Kulikovskiy A.G., Pogorelov N.V., Semenov A.Yu. *Matematicheskie vo-prosy chislennogo resheniya giperbolicheskikh sistem uravnenij* [Mathematical problems of numerical solution of hyperbolic systems of equations]. Moscow, Fizmatlit Publ., 2012, 656 p.

Dimitrienko Yu. I., Dr. Sci. (Phys. — Math.), Professor, Head of Department of Computational Mathematics and Mathematical Physics, Bauman Moscow State Technical University, Director of Research and Education Center Scientific and Educational Centre of Supercomputer Engineering Modeling and Software Packages (Simplex), Bauman Moscow State Technical University. e-mail: dimit.bmtstu@gmail.com

Koryakov M.N., junior researcher of Research and Education Center Scientific and Educational Centre of Supercomputer Engineering Modeling and Software Packages (Simplex), Bauman Moscow State Technical University. e-mail: mkoryakov@bmstu.ru

Yurin Yu.V., Cand. Sc. (Phys. — Math.), Assoc. Professor, Department of Computational Mathematics and Mathematical Physics, Bauman Moscow State Technical University, Senior researcher of Research and Education Center Scientific and Educational Centre of Supercomputer Engineering Modeling and Software Packages (Simplex), Bauman Moscow State Technical University. e-mail: yvyurin@yandex.ru

Zakharov A.A., Cand. Sc. (Phys. — Math.), Assoc. Professor, Department of Computational Mathematics and Mathematical Physics, Bauman Moscow State Technical University, Senior researcher of Research and Education Center Scientific and Educational Centre of Supercomputer Engineering Modeling and Software Packages (Simplex), Bauman Moscow State Technical University. e-mail: azaharov@bmstu.ru

Sborschikov S.V., researcher of Research and Education Center Scientific and Educational Centre of Supercomputer Engineering Modeling and Software Packages (Simplex), Bauman Moscow State Technical University. e-mail: servasbor@gmail.com

Bogdanov I.O., Cand. Sc. (Phys. — Math.), Assoc. Professor, Department of Computational Mathematics and Mathematical Physics, Bauman Moscow State Technical University, Senior researcher of Research and Education Center Scientific and Educational Centre of Supercomputer Engineering Modeling and Software Packages (Simplex), Bauman Moscow State Technical University. e-mail: biofamily_7394@mail.ru