

Отчет: численное моделирование высокоскоростных течений с неравновесной колебательной релаксацией и двухтемпературной диссоциацией

Шоев Георгий Валерьевич

7 октября 2020 г.

Аннотация

Выполнена программная реализация модели, описывающей неравновесное возбуждение колебательных мод двухатомных молекул и двухтемпературную диссоциацию для уравнений Навье–Стокса. С использованием реализованной модели, в программном комплексе ANSYS Fluent выполнено численное моделирование течения бинарной смеси азота (N_2/N) около двойного клина, конуса и истечение газа из сопла на конус. Проведенное сравнение рассчитанного теплового потока на поверхность двойного клина с экспериментальными измерениями показало расхождение. Численные результаты по отходу головной ударной волны от конуса находятся в рамках экспериментальной погрешности.

Состав коллектива

Шоев Георгий Валерьевич^{1,2}

¹ с.н.с., к.ф.-м.н., Институт теоретической и прикладной механики им. С.А. Христиановича СО РАН

² н.с., к.ф.-м.н., Новосибирский государственный университет

Информация о гранте

Название: Развитие методов компьютерного моделирования течений газа в приложении к решению задач внешней и внутренней аэродинамики

Номер: 18-38-20113

Руководитель: Шоев Георгий Валерьевич

Срок действия: 1 октября 2018 – 1 октября 2020.

Научное содержание работы

Постановка задачи

Точное предсказание параметров высокоскоростного течения газа в условиях термического и химического неравновесия необходимо для решения задач аэрокосмической отрасли. Одним из наиболее известных примеров таких течений является течение около космического аппарата (КА), входящего в атмосферу планеты. Точная информация о структуре течения и его параметрах около КА позволяет оптимальным образом сконструировать системы теплозащиты. Экспериментальные и летные испытания являются дорогостоящими и сложными с инженерной точки зрения. Поэтому численное (компьютерное) моделирование представляется дешевым и простым решением. Однако в настоящий момент актуальной задачей является валидация (проверка) классических и современных математических моделей, описывающих процессы происходящие в таких течениях. К таким процессам относятся возбуждение колебательных мод молекул и их диссоциация в условиях термического неравновесия (поступательная и колебательная моды находятся в неравновесном состоянии). Работы, выполняемые в вычислительном центре, посвящены этим вопросам.

Современное состояние проблемы

В настоящее время большое внимание уделяется валидации математических моделей, описывающих процессы неравновесного возбуждения колебательных мод молекул и двухтемпературной диссоциации в условиях, когда поступательная температура отличается от колебательной температуры распадающейся молекулы. Как правило, эти модели не являются полностью согласованными, а используют полу-эмпирические выражения для различных скоростей процессов. Насколько известно автору, все модели учитывают три основных процесса:

- 1) диссоциацию (и другие химические реакции), влияющие на состав смеси;
- 2) энергообмен между различными модами (поступательно-колебательный, колебательно-колебательный и тд);
- 3) влияние химических реакций на колебательную релаксацию.

Все вариации этих моделей не учитывают влияния колебательной релаксации на химические реакции [1], которое записывается как симметричный источниковый член в уравнениях Навье–Стокса к 3). В модели, рассматриваемой в настоящей работе, этот эффект учитывался, хотя он оказался мал. В классических моделях, как правило, не учитывается еще один эффект – влияние дивергенции скорости потока на скорость диссоциации [2]. Этот эффект будет рассмотрен позже.

Подробное описание работы, включая используемые алгоритмы

Выполнена программная реализация согласованной модели [2] неравновесной колебательной релаксации и двухтемпературной диссоциации, возникающие в высокоскоростных течениях. Реализация модели представлена в виде разделяемой библиотеки (shared object, *.so). Эта библиотека подключается к программному комплексу ANSYS Fluent, который установлен на вычислительном комплексе Новосибирского государственного университета. Данный программный комплекс численно решает уравнения Навье–Стокса с использованием конечно-объемного метода. Для валидации реализованной модели проведена серия расчетов течения бинарной смеси азота N_2/N с последующим сравнением с экспериментальными данными [3, 4].

Полученные результаты. Иллюстрации, визуализация результатов.

Течение около двоиного клина

Для аккуратного моделирования всех стадий экспериментов необходимо детальное описание как условий, так и результатов, включая промежуточные стадии. Однако, настолько подробного описания для экспериментов по обтеканию двойного клина [4] не было найдено. Поэтому для численного моделирования использовались параметры набегающего потока из [4], которые также показаны в Таблице 1.

Таблица 1: параметры набегающего потока на двойной клин

Run	v_∞ , m/s	T_∞ , K	$T_{v,\infty}$	ρ_∞ , kg/m ³	$Y_{N,\infty}$	α , deg	h_0 , MJ/kg	$Re_{\infty,20mm}$
1049	6110	1888	3856	0.0078	0.129	0	26.1	$1.54 \cdot 10^4$
1043	6059	1841	3851	0.0076	0.125	12.0	25.7	$1.52 \cdot 10^4$
1038	6068	1710	3758	0.0065	0.128	10.0	27.3	$1.37 \cdot 10^4$

Расчетная область (Рис. 1a) разбивалась на несколько блоков, в каждом из которых строилась сетка из четырехугольников. Затем после достижения стационарного состояния, в области за ударными волнами каждая ячейка разбивалась на четыре (по две в каждом направлении). Дополнительное разбиение сетки проводилось на вычислительном комплексе. В отдельных случаях требовалось более 64 Гб оперативной памяти, которые часто недоступны на обычных компьютерах. Пример сетки после двух итераций разбиения показан на Рис. 1b.

Результаты расчетов показали поле течения с пересекающимися скачками, которые также видны на поле поступательно-вращательной температуры (Рис. 1b). Сравнение рассчитанного теплового потока на поверхность клина с экспериментальными измерениями показано на Рис. 2. Необходимо отметить, что сходимость численного решения на последовательности измельчающихся сеток была достигнута только для случая 1049 при нулевом угле атаки α . На основе информации о сетке для которой достигнута сходимость, и на основе анализа зависимости теплового потока от пространственного разрешения для остальных случаев можно сделать

вывод, что при дальнейшем измельчении расчетной сетки численные результаты будут уходить дальше от экспериментальных измерений. Подробное объяснение причин расхождения результатов расчета и эксперимента выходит далеко за рамки настоящего отчета, поэтому здесь они обсуждаться не будут.

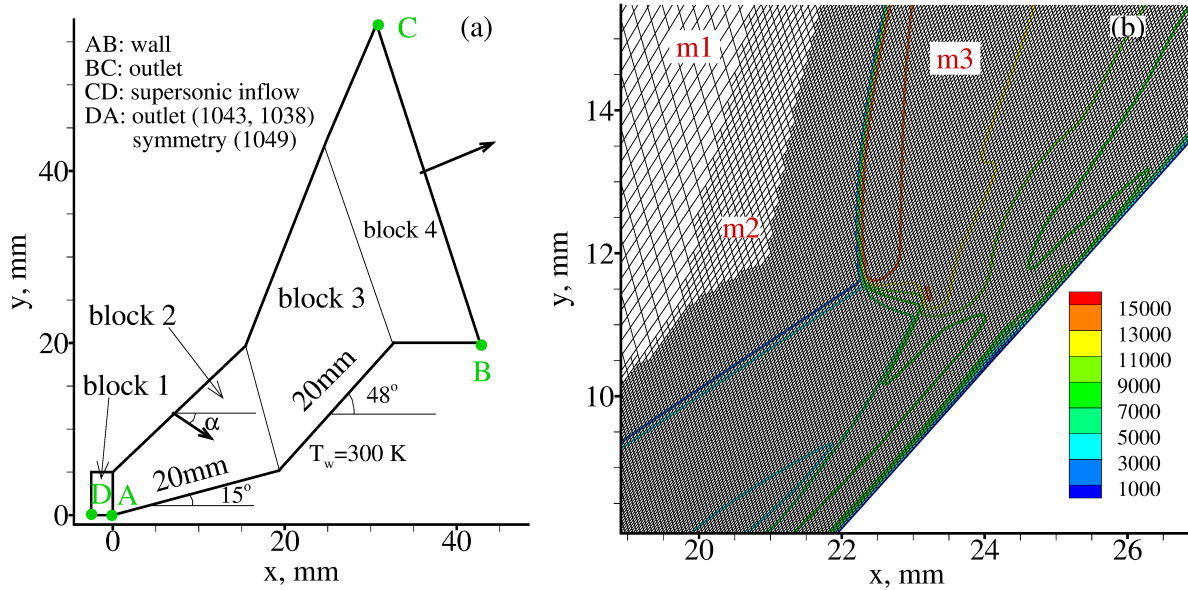


Рис. 1: Расчетная область около двойного клина (a) и пример расчетной сетки m3 (b)

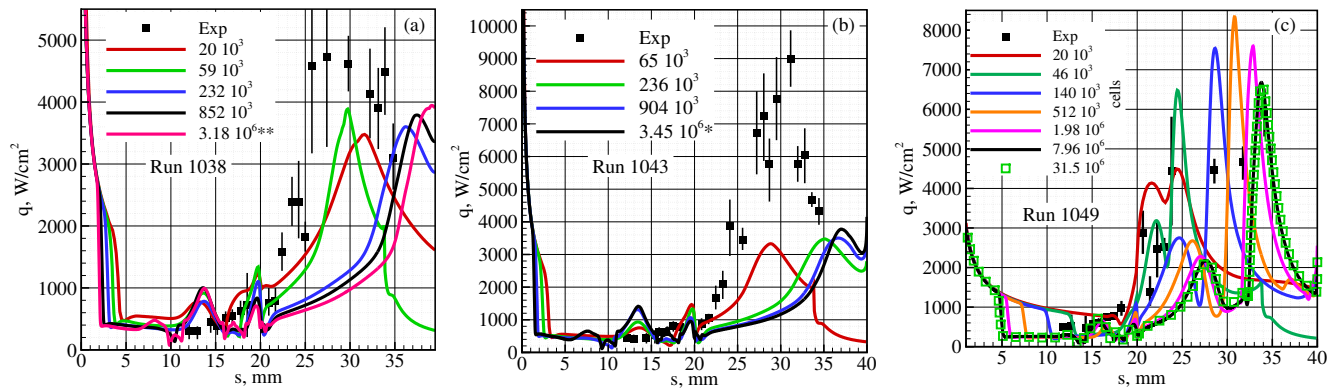


Рис. 2: Тепловой поток на поверхность двойного клина

Течение около конуса

В [3] представлено более подробное описание эксперимента, что позволяет численно воспроизвести практически все стадии эксперимента с минимальными произвольными допущениями. Однако, попытки полностью рассчитать эксперимент к настоящему моменту не привели к положительному результату. Необходимо отдельно отметить, что для одного расчета требовалось более 20 суток и 80 ядер вычислительного комплекса. Такое длительное ожидание не позволило в точности воспроизвести эксперимент к настоящему моменту. Поэтому было выполнено численное моделирование отдельных этапов эксперимента, что потребовало значительно меньших вычислительных ресурсов. Течение около конуса было выполнено в двух постановках. В первой постановке предполагалось, что набегающий на конус поток является равномерным. Во второй постановке набегающий на конус поток являлся результатом моделированием течения в сопле и части ударной трубы T5 (использовалась в [3] для экспериментальных исследований).

Рассмотрим первую постановку задачи (Рис. 3). Расчетная область показана на Рис. 3а. Параметры на входной границе АВ (Табл. 2) предполагались равномерными и были рассчитаны в [3]. На выходной границе

ВА задавалось условие сноса потока. CD – некаталитическая изотермическая ($T_w = 300$ K) стенка конуса с прилипанием. DA – ось симметрии. Головная ударная волна формируется перед конусом на расстоянии Δ , которое зависит от диаметра d и угла полураствора δ конуса. В расчетах использовалась стека, состоящая из четырехугольных ячеек (Рис. 3б). Для повышения точности определения величины отхода головной ударной волны расчетная сетка сгущалась на ней.

Таблица 2: параметры набегающего на конус потока (для расчетов без сопла).

Условие	p_∞ , kPa	T_∞ , K	$T_{v,\infty}$, K	u_∞ , m/s	Y_N
C1	26.6	2200	3340	5270	0.025
C3	8.91	1700	3500	4970	0.036
C4	8.94	868	2780	3900	0.002

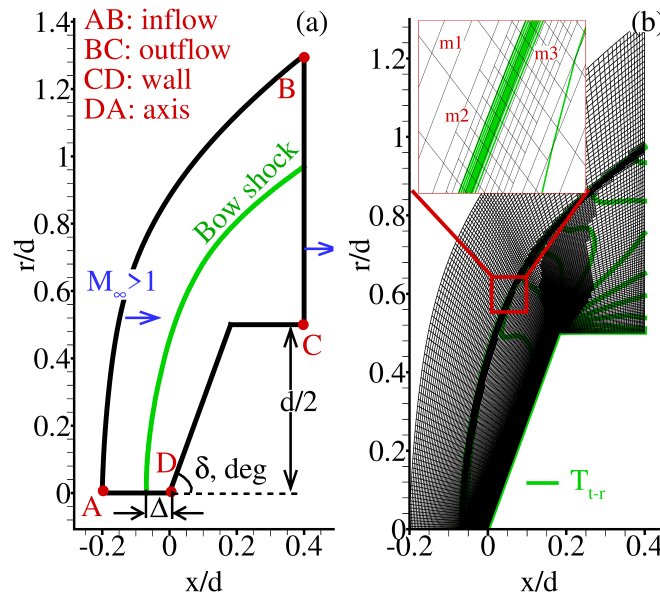


Рис. 3: Пример расчетной области для моделирования течения N_2/N около конуса (а) и расчетная сетка (б). Равномерный набегающий поток.

Рассмотрим вторую постановку задачи (Рис. 4). Расчетная область показана на Рис. 4а. На входной границе АВ задавались полное давление и температура (Табл. 3), которые даны в [3]. Границы ВС и DE являются изотермическими стенками. CD – выходная граница. EA – ось симметрии. В расчете использовалась сетка, состоящая из нескольких болков, границы которых также показаны на рисунке. Пример изолиний радиальной скорости показан на Рис. 4б, течение вблизи конуса на Рис. 4с.

Таблица 3: Условия для моделирования течения с соплом.

Condition	Shot	P_0 , MPa	T_0 , K	Y_N	d , cm	δ , deg	d_{epi} , cm
C1	1660	53.9	9264	0.178	2	75	14.3
C1	1659	54.9	9316	0.182	2	70	14.4
C3	1646	21.2	8409	0.146	2	75	14.1
C3	1639	18.7	8222	0.132	2	70	13.7
C4	1530	28.0	6786	0.023	2	75	14.1
C4	1531	29.0	6852	0.024	2	70	13.8

Результаты расчетов в обоих постановках показали небольшую разницу в распределениях макропараметров около конуса. Результаты расчетов в сравнении с экспериментальными измерениями показаны в Таблице 4.

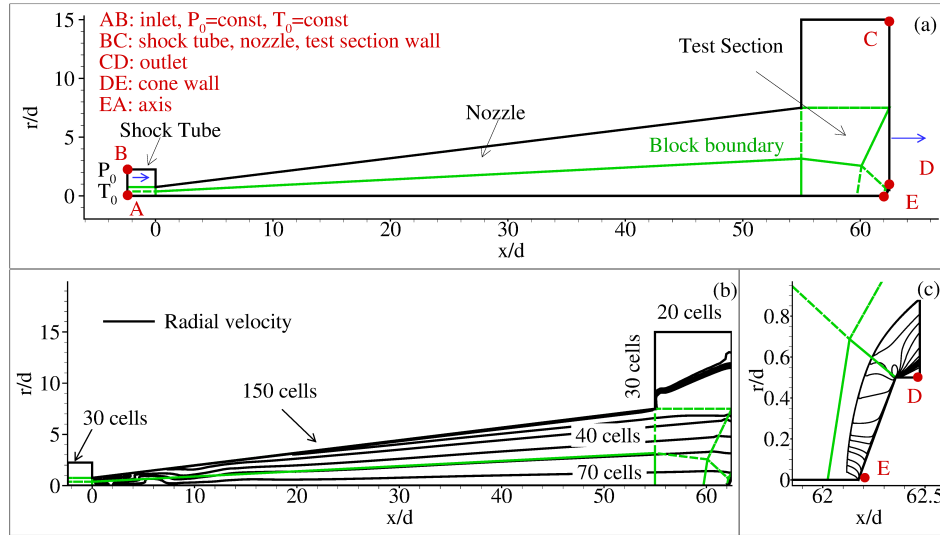


Рис. 4: Пример расчетной области для моделирования течения N_2/N , проходящего через сопло к конусу (a), изолинии радиальной скорости (b), изолинии вблизи конуса (c).

Здесь $(\frac{\Delta}{d})_{nzl}^*$ – отход ударной волны, рассчитанный в постановке с соплом, $(\frac{\Delta}{d})_{cone}^{**}$ – отход ударной волны, рассчитанный в предположении равномерного набегающего потока. В дополнении к экспериментальным значениям $\frac{\Delta}{d}$ [3] представлены оценки погрешности $(\frac{\Delta}{d})_{min}$ [3] и $(\frac{\Delta}{d})_{max}$ [3], связанные с неопределенностью в обработке экспериментальных интерферограмм. На наш взгляд это наибольшая погрешность в эксперименте.

Таблица 4: сравнение расчетной величины отхода головной ударной волны и экспериментально измеренной.

Condition	shot	δ , deg	d , cm	$(\frac{\Delta}{d})_{nzl}^*$	$(\frac{\Delta}{d})_{cone}^{**}$	$\frac{\Delta}{d}$ [3]	$(\frac{\Delta}{d})_{min}$ [3]	$(\frac{\Delta}{d})_{max}$ [3]
C1	1660	75	2	0.0965	0.103	0.0886	0.0386	0.1386
C1	1659	70	2	0.058	0.0625	0.0505	0.0005	0.1005
C3	1646	75	2	0.1055	0.109	0.09	0.04	0.14
C3	1639	70	2	0.0655	0.067	0.055	0.005	0.105
C4	1530	75	2	0.106	0.1125	0.119	0.069	0.169
C4	1531	70	2	0.0655	0.071	0.0674	0.0174	0.1174

Эффект от использования кластера в достижении целей работы

Использование кластера помогло достигнуть поставленных целей по проведению расчетов течения бинарной смеси азота в экспериментальной установке Т5 с целью валидации новой согласованной модели, описывающей неравновесную колебательную релаксацию и двухтемпературную диссоциацию. Эффект от использования кластера в достижении целей работы значительный. Отметим, что проведение подобных расчетов невозможно на персональных (обычных) компьютерах, поскольку требует значительного объема оперативной памяти и большого количества ядер.

Перечень публикаций по проекту со ссылкой на использование кластера

1. Georgy V. Shoev, Maksim Yu. Timokhin, Yevgeniy A. Bondar. On the total enthalpy behavior inside a shock wave // Physics of Fluids, Vol. 32, Is. 4, 2020 doi:10.1063/5.0005741, IF (2019): 3.514
2. G. Shoev, H. Ogawa. Numerical study of viscous effects on centreline shock reflection in axisymmetric flow // Physics of Fluids, Vol. 31, P. 026105 (2019); https://doi.org/10.1063/1.5085267, IF(2019): 3.514

Список литературы

- [1] Yuriy E. Gorbachev. Renormalized reaction and relaxation rates. In AIP Conference Proceedings, volume 1738. AIP Publishing, 2016. Paper 090002.
- [2] Evgeniy G. Kolesnichenko and Yuriy E. Gorbachev. Gas-dynamic equations for spatially inhomogeneous gas mixtures with internal degrees of freedom. II. General representation for one-temperature reaction rates. Applied Mathematical Modelling, 37(7):5304–5314, 2013.
- [3] I. A. Leyva. Shock detachment processes on cones in hypervelocity flows. Ph.D. thesis, California Institute of Technology, 1999.
- [4] J. Olejniczak, G. Candler, M. Wright, I. Leyva, and H. Hornung. Experimental and computational study of high enthalpy double-wedge flows. Journal of Thermophysics and Heat Transfer, 13(4):431–440, 1999.