УДК 535.15, 533.6.011, 535.233

Расчет газодинамики и инфракрасного излучения 3D-струй с учетом колебательной неравновесности

А.М. Молчанов, Д.В. Маслова

Московский авиационный институт (национальный исследовательский университет), Москва, 125993, Россия e-mail: alexmol 2000@mail.ru

Поступила в редакцию 20.02.2018 После доработки 30.08.2018 Принята к публикации 28.12.2018

> Разработана методика расчета газодинамики и ИК-излучения колебательно неравновесных газовых и многофазных потоков в трехмерной постановке. Модель излучения основана на методе *k*-распределения для колебательно неравновесного газа, в котором используются специальные формулы для средних по полосе пропускательной способности и эффективной функции Планка. Сопоставление расчетов тестовых задач с результатами других авторов показало удовлетворительное согласование. Показан существенный рост интенсивности теплового излучения при увеличении угла атаки набегающего потока. При расчете струй на высотах больше 100 км большую роль играет учет реального химического состава атмосферы.

> Ключевые слова: колебательная неравновесность, многофазные потоки, тепловое излучение, *k*-распределение.

Введение

Исследование переноса излучения в газовых смесях, характеризующихся неравновесным возбуждением колебательных степеней свободы молекул, является важной научной и прикладной проблемой. Течения в газодинамических лазерах, течения за ударной волной, реагирующие газовые смеси при низких давлениях, сверхзвуковые струи с большой степенью нерасчетности характеризуются ярко выраженным отклонением от равновесия между колебательными и поступательно-вращательными степенями свободы.

Радиационные процессы в таких системах имеют существенное влияние на энергетичес-кий баланс.

Газовые и гетерогенные струи, взаимодействующие со сверхзвуковым внешним потоком, натекающим на них под большим углом атаки, применяются во многих областях авиационнокосмической техники, например, в системах двигателей ориентации, в реактивной системе управления, в системах аварийного спасения, в ГПВРД при боковом впрыске топлива. Излучение таких струй может оказывать тепловое воздействие на элементы конструкции, а также служить для дистанционного мониторинга летательного аппарата. Спектр испускаемой радиации состоит из большого количества дискретных линий. Такой характер линий спектра высокотемпературных газов делает расчет излучения молекул крайне сложной и трудоемкой задачей.

При увеличении угла атаки растет температура за присоединенным скачком уплотнения, что приводит к локальному возрастанию интенсивности излучения, испускаемого струей.

При математическом моделировании таких течений необходимо учитывать их волновую структуру и трехмерный характер. В гетерогенных струях появляются дополнительные проблемы, связанные с фазовыми переходами частиц (1-го и 2-го рода), а также с тем, что на больших высотах частицы (особенно тяжелые) слабо взаимодействуют с газом и летят практически по прямолинейным траекториям. Таким образом, получаются как бы две струи: частиц, летящих параллельно оси сопла двигателя, и струи газа, поворачивающиеся в сторону направления внешнего потока.

На высотах полета от 70–80 км начинает проявляться колебательная неравновесность: возникает ярко выраженное отклонение от равновесия между колебательными и поступательно-вращательными степенями свободы молекул. На высотах больше 100 км этот эффект играет определяющую роль в расчете теплового излучения.

К сожалению, в отечественной и зарубежной литературе очень мало научных работ, посвященных исследованию трехмерных гетерогенных течений с неравновесными физико-химическими процессами. В основном, рассматривались двумерные течения (например, работы Пластинина Ю.А. и др. [1–3], Завелевича Ф.С. и др. [4, 5], Берта и Бойда [6]).

В работах [7, 8] разработана методика расчета теплового излучения колебательно неравновесного газа на основе метода *k*-распределения, показано, что этот метод позволяет с высокой эффективностью проводить расчеты узкополосного излучения горячих газов с ярко выраженным линейчатым характером спектра.

Целью данной работы является разработка методики расчета и численное исследование газовой и гетерогенной струи, истекающей во внешний поток, при различных углах между осью сопла и направлением потока в условиях больших перепадов давления (10⁶–10⁸). Используемая здесь методика основана на построении математической модели течения газовой фазы, модели течения жидкой/твердой фазы и модели расчета оптических характеристик с учетом колебательной неравновесности. Основная ее часть подробно описана в работах [7–10]. В данной работе указанная методика дополнена уравнениями, описывающими движение, фазовые переходы и излучение твердых частиц.

1. Система уравнений, описывающих течение термически и химически неравновесного газа

Основная система дифференциальных уравнений в частных производных включает: общее уравнение неразрывности, уравнение количества движения, уравнения неразрывности для компонентов газовой смеси, уравнение полной энергии и уравнения переноса колебательных энергий для всех колебательных энергетических мод. Они подробно описаны в работах [4, 8, 15] и поэтому здесь не приводятся.

Полная энергия включает внутреннюю е и кинетическую составляющие:

$$E_t = \rho \left(e + \frac{{u_k}^2}{2} \right).$$

Внутренняя энергия складывается из энергий химических компонентов, состоящих из поступательной $e_{T,s}$, вращательной $e_{R,s}$, колебательной $e_{V,m}$ и химической h_s^{0} составляющих:

$$e = \sum_{s=1}^{N_c} C_s e_{T,s} + \sum_{s=1}^{N_c} C_s e_{R,s} + \sum_{m=1}^{N_M} C_{s(m)} e_{V,m} + \sum_{s=1}^{N_c} C_s h_s^0.$$

Для колебательной энергии используется подход, основанный на моделировании колебательного движения молекул моделью гармонического осциллятора:

$$e_{V,m} = \frac{R_U \theta_m}{M_{s(m)}} \frac{r_m}{\exp(\theta_m / T_{V,m}) - 1}$$

Здесь ρ – плотность газовой смеси; u_j – компонента скорости в *j*-ом направлении; C_s – массовая доля компонента *s*; θ_m – характеристическая колебательная температура *m*-ой колебательной моды; $T_{V,m}$ – соответствующая колебательная температура; r_m – кратность вырождения *m*-ой моды молекулы; $M_{s(m)}$ – молярная масса компонента *s*, к которому относится *m*-ая колебательная потельная мода; R_U – универсальная газовая постоянная.

При расчете турбулентных течений используется трехпараметрическая K- ε - V_n модель, подробно описанная в [9, 10].

В уравнении переноса колебательной энергии появляется источник, обусловленный следующими энергетическими переходами: колебательно-поступательными (V-T) процессами, колебательно-колебательными (межмолекулярными V-V' и внутримолекулярными V-V) процессами, а также спонтанной излучательной дезактивацией колебательных мод. Для колебательных мод молекул, включающих атомы H, C, O, N, эти процессы подробно рассмотрены в [8].

В данной работе в систему добавлены уравнения, описывающие межмолекулярные *V-V'* процессы с участием HCl, термическое состояние которого важно для ряда научных и практических

Таблица 1. V-V процессы с участием HCI [11] 36. HCl(1) + CO(0) = HCl(0) + CO(1)37. $HCl(1) + N_2(0) = HCl(0) + N_2(1)$ 38. $HCl(1) + CO_2(00^00) = HCl(0) + CO_2(00^01)$ 39. $HCl(1) + H_2(0) = HCl(0) + H_2(1)$

задач (см. таблицу.1). Нумерация приведена с учетом процессов, описанных в работе [8].

2. Основные уравнения для частиц

Полидисперсная смесь частиц представляется в виде набора L групп частиц, каждая из которых характеризуется значениями радиуса r_α, плотности $\rho_{\alpha} = n_{\alpha} \cdot m_{\alpha}$, компонент скорости $u_{\alpha,i}$ и температуры Т_α. Предполагается, что частицы имеют сферическую форму, химически инертны по отношению к газовой фазе и не взаимодействуют между собой.

Для каждой группы частиц ($\alpha = 1, 2, ..., L$) уравнения, описывающие движение частиц Al₂O₃, включают в себя [2, 4]:

1) уравнение неразрывности

$$\frac{\partial \rho_{\alpha}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_{j}} \left(\rho_{\alpha} u_{\alpha,j} \right) = 0;$$

уравнение сохранения количества движения

$$\rho_{\alpha} \frac{du_{\alpha,i}}{dt} = f_{\alpha,i};$$

3) уравнение сохранения энергии

$$\rho_{\alpha}C_{S}\frac{dT_{\alpha}}{dt} = q_{phase,\alpha} - q_{conv,\alpha} - q_{rad,\alpha}$$

Здесь $\frac{d}{dt}$ – полная производная по времени (берется вдоль траектории частицы); $f_{\alpha,i}$ – сила воздействия газа на частицу; $q_{phase,\alpha}$ – тепло фазового перехода; $q_{conv,\alpha}$ – тепловой поток, сбрасываемый частицей за счет конвекции; $q_{rad,\alpha}$ – лучистый тепловой поток, сбрасываемый частицей; C_S – теплоемкость частиц. Используются следующие формулы:

$$f_{\alpha,i} = \rho_{\alpha}C_{f}\left(u_{i} - u_{\alpha,i}\right) =$$
$$= \frac{3}{8} \frac{C_{D,\alpha}\rho\left(u_{i} - u_{\alpha,i}\right)\left|\vec{V} - \vec{V}_{\alpha}\right|\rho_{\alpha}}{r_{\alpha}\rho_{\text{Al}_{2}\text{O}_{3}}};$$

40.
$$HCl(1) + NO(0) = HCl(0) + NO(1)$$

41. $HCl(1) + O_2(0) = HCl(0) + O_2(1)$
42. $HCl(1) + H_2O(000) = HCl(0) + H_2O(001)$
43. $HCl(1) + H_2O(000) = HCl(0) + H_2O(100)$

$$\begin{aligned} q_{conv,\alpha} &= \rho_{\alpha} C_q \left(T_{\alpha} - T \right), \\ C_q &= \frac{3}{2} \frac{\mathrm{Nu} \cdot \lambda}{r_{\alpha}^2 \rho_{\mathrm{Al_2O_3}}}, \\ q_{rad,\alpha} &= \rho_{\alpha} \exp(C_{rad}), \\ C_{rad} &= \begin{cases} 1.25 \cdot 10^{-2} T_{\alpha} - 0.5, & T_{\alpha} < 1000, \\ 10 + 2 \cdot 10^{-3} T_{\alpha}, & 1000 < T_{\alpha} < 2000, \\ 7.143 \cdot 10^{-3} T_{\alpha} - 0.286, & T_{\alpha} > 2000; \end{cases} \end{aligned}$$

$$\frac{q_{phase,\alpha}}{\rho_{\alpha}} = 3q_{cr}\frac{r_{cr,\alpha}^2}{r_{\alpha}^3}a(T_M - T_{\alpha})^{1.8},$$

где $ho_{Al_2O_3}$ – плотность материала частиц; q_{cr} – удельная теплота фазового перехода; $T_M = 2300$ К температура начала равновесной кристаллизации; *r*_{cr,а} – радиус фронта кристаллизации; $a = 0.64 \cdot 10^{-6}$ – константа в формуле для скорости распространения фронта кристаллизации. Предполагается, что начало неравновесной кристаллизации соответствует температуре $T = 0.82T_M$, согласно работе [12].

Для определения положения фронта кристаллизации во времени используется условие:

$$\frac{dr_{\kappa p,\alpha}}{dt} = -a \left(T_M - T_\alpha\right)^{1.8}$$

Предполагается, что сначала жидкая фаза Al₂O₃ кристаллизуется в метастабильную твердую ү-фазу, которая затем переходит в стабильную а-фазу. Доля а-фазы от общей твердой фазы определяется по формуле [2]:

$$\frac{dC_{\alpha}}{dt} = A \exp\left(-B / T_{\alpha}\right), \quad 0 < C_{\alpha} < 1,$$

где $A = 1.5 \cdot 10^{12} \text{ c}^{-1}$, B = 58368 K.

Для коэффициента сопротивления используется формула Хендерсона [13], а для критерия Нуссельта – формула Кавано [14], в которой учтено отличие от течения сплошной среды:

$$Nu = \frac{Nu_0}{1 + (3.42Nu_0 M / (RePr))}$$

 $Nu_0 = 2 + 0.459 \,\mathrm{Re}^{0.55} \,\mathrm{Pr}^{0.33}$ где формула Дрейка для сплошной среды.

1

Динамическое и тепловое воздействие частиц на газовую фазу учитывается введением в уравнения количества движения и энергии дополнительных членов, определяемым по формулам:

$$F_{u,i} = -\sum_{\alpha=1}^{L} f_{\alpha,i},$$

$$F_{h} = \sum_{\alpha=1}^{L} (q_{conv,\alpha} - f_{\alpha,i}u_{\alpha,i}).$$

Физико-математическая модель оптических характеристик газовых потоков с учетом колебательной неравновесности подробно описана в [7, 8].

Для расчета теплового излучения частиц Al₂O₃ использовалась методика, описанная в [1, 3]. В этих работах показана важность учета агрегатного состояния частиц Al₂O₃, так как от этого существенно зависят оптические характеристики частиц.

3. Результаты расчетов

3.1. Апробация модели

Для апробации модели проведены расчеты различных вариантов течения газовых и многофазных струй, проведено сопоставление расчетов с результатами других авторов.

Вариант 1. Расчет проводится с параметрами из работы Родионова и др. [2]. Рассматриваются три группы частиц с размерами 1.5, 3 и 6 мкм. Параметры на срезе сопла представлены в табл. 2. Предполагается, что частицы и газ имеют одинаковую температуру на срезе сопла.

На рис. 1 представлено изменение температур газа и частиц вдоль оси струи. Результаты расчетов удовлетворительно согласуются с расчетом Родионова и др. [2]. Здесь *Ra* – радиус среза сопла. Наблюдается ярко выраженное повышение температуры частиц вследствие кристаллизации. Считается, что во всех случаях частицы не успевают кристаллизоваться в сопле.

Вариант 2. Струя типичной твердотопливной ракеты тягой 12 т на высоте 31 км [4].

Результаты расчета осевой температуры (рис. 2) хорошо согласуются с данными Завеле-

Та, К Число Маха P_a , атм *U*_a, м/с Плотность Al₂O₃ для каждой группы, г/см³ 0.4 2500 2895 2.35 9.07.10-6 Мольный состав газовых компонентов на срезе сопла CO CO_2 Cl Η H_2 H₂O HCl 0 OH N_2 0.2862 0.01073 1.23.10-3 5.109.10-3 0.414 7.409.10-2 0.1319 7.67.10-2 1.628.10-7 6.408.10-5

Таблица 2. Параметры на срезе сопла модельного двигателя [2]



Рис. 1. Распределение температуры газа и частиц вдоль оси струи: а – расчет Родионова и др. [2]; б – расчет данной работы

вича и др. [4]. Здесь виден очень важный для практики результат: частицы «поджигают» газ и интенсифицируют догорание на этой высоте. Без учета данного эффекта догорание отсутствует.



Рис. 2. Осевое распределение температуры газа в струе типичного твердотопливного двигателя на высоте 31 км: *1* – расчет без учета влияния частиц на газовую фазу; *2* – расчет с учетом влияния частиц на газовую фазу; *a* – данные работы Завелевича и др. [4]; *б* – расчет данной работы

3.2. Численное исследование модельных газовых и многофазных струй

После успешной апробации модели были проведены численные эксперименты по расчету те-

чения струй (чисто газовой и гетерогенной) на высотах полета от 80 до 115 км в диапазоне углов атаки от 0° до 68°.

Вариант 1. Струя модельного жидкостного двигателя с параметрами из работы [16].

Параметры на срезе сопла представлены в табл. 3. Химический состав задан в мольных долях. Рассматривалось три высоты: 80 км (скорость внешнего потока 2600 м/с), 100 км (2800 м/с), 115 км (3000 м/с).

На рис. 3 показана зависимость спектральной интенсивности излучения на высоте



Таблица 3. Параметры на срезе сопла модельного ЖРД

Рис. 3. Спектральная интенсивность излучения на высоте 80 км при различных углах атаки набегающего потока: $a - 0^\circ$; $\delta - 20^\circ$; $e - 40^\circ$; $e - 60^\circ$



Рис. 4. Зависимость температур в середине слоя смешения с наветренной стороны струи от координаты X, направленной вдоль оси сопла, при различных углах атаки набегающего потока на высоте 100 км: $a - 0^\circ$; $\delta - 60^\circ$

Таблица 4. Параметры на срезе сопла модельного твердотопливного двигателя

T_a, \mathbf{K}	<i>U</i> _{<i>a</i>} , м/с	<i>Ra</i> , м	P_a , атм	H ₂	H ₂ O	СО	CO ₂	N ₂	HCl	Al ₂ O ₃
1780	3000	0.5	0.3	0.042	0.12e-4	0.57	0.8e-5	0.378	0.01	0.4

80 км от угла атаки набегающего потока. При изменении угла от 0° до 60° наблюдается существенный рост спектральной интенсивности излучения, причем основные линии излучения (CO₂, H₂O и CO) возрастают примерно пропорционально друг другу.

На такой высоте термическая неравновесность проявляется еще слабо, колебательные температуры мало отличаются от поступательной и с увеличением угла атаки растут аналогично последней, чем и объясняется примерно пропорциональное увеличение основных спектральных линий.

На высоте 100 км также наблюдается существенный рост интенсивности излучения с увеличением угла атаки набегающего потока. Однако, в отличие от 80 км, спектральный рост излучения носит несколько иной характер.

Излучение H_2O в диапазоне 2.7 мкм с увеличением угла атаки возрастает сильнее, чем излучение CO_2 (4.3 мкм) и CO (4.7 мкм). Это обусловлено тем, что колебательные температуры $T_{CO2}(v3)$ и T_{CO} оказываются существенно ниже поступательной температуры, в отличие от $T_{H2O}(v3)$, которая почти совпадает с поступательной температурой (рис. 4).

Указанный эффект имеет место также на высоте 115 км. Здесь колебательная неравновесность проявляется еще сильнее. В районе 2.7 мкм излучение связано как с $T_{\rm H2O}(v3)$, так и с переходами с верхних уровней $2v_2 + v_3$, $v_1 + v_3$ CO₂. По этой причине предоминирующий рост излучения в этом диапазоне несколько сглаживает сильная колебательная неравновесность CO₂.

Очень важно отметить, что интегральная интенсивность излучения в диапазоне 1–9 мкм на высотах 100 и 115 км практически совпадает как для нулевого, так и для бо́льших углов атаки.

Вариант 2. Струя модельного твердотопливного двигателя.

Параметры на срезе сопла представлены в табл. 4. Химический состав задан в массовых долях (для газа – без учета частиц Al₂O₃). Частицы разбиты на 10 групп размером от 0.5 до 7 мкм.

Рассматривались те же высоты и скорости внешнего потока, что и в предыдущем варианте.

На рис. 5 показана зависимость интегральной интенсивности излучения в диапазоне 1–9 мкм от угла атаки набегающего потока на



Рис. 5. Зависимость интегральной интенсивности излучения (диапазон 1-9 мкм) от угла атаки набегающего потока на высотах от 60 до 115 км при направлении наблюдения вдоль оси *Y*

четырех высотах: 60, 80, 100 и 115 км. Очевидно, что высота полета очень слабо влияет на эту величину практически для всех рассмотренных углов атаки.

Поведение спектральной интенсивности на высоте 80 км, представленное на рис. 6, носит достаточно сложный характер.

При углах атаки до ~20° основную роль в излучении играют частицы; при этом имеется два максимума: при ~1.5 мкм (обусловлен горячей, но небольшой по размеру, областью вблизи среза сопла) и при ~7 мкм (обусловлен дальней областью струи – более холодной, но очень большой по размеру). Некоторый пик излучения наблюдается на линии СО (4.7 мкм). Линии H_2O и CO_2 незаметны. Это связано с тем, что в продуктах сгорания на срезе сопла эти вещества практически отсутствуют (см. табл. 4).

При бо́льших углах атаки резко усиливаются линии H₂O (2.7 мкм, в меньшей степени 6.5 мкм) и CO₂ (4.3 мкм и 2.7 мкм), а вклад частиц в излучение снижается. Вызвано это тем, что с ростом угла атаки сильно возрастают температура и давление за скачком уплотнения, образующимся при натекании внешнего потока на струю, что приводит к существенной интенсификации химического взаимодействия H₂ и CO с кислородом воздуха и увеличению массовых долей продуктов сгорания – H₂O и CO₂ (до 0.06–0.07).



Рис. 6. Спектральная интенсивность излучения на высоте 80 км при различных углах атаки набегающего потока: $a - 0^{\circ}$; $\delta - 20^{\circ}$; $e - 40^{\circ}$; $e - 60^{\circ}$; $\partial - 68^{\circ}$



Рис. 7. Высота 80 км. Пространственное распределение плотности частиц Al_2O_3 при угле атаки набегающего потока 68° для группы частиц минимального размера 0.5 мкм (*a*), (*б*) и группы частиц максимального размера 7 мкм (*b*), (*c*) в разных плоскостях течения: *a*, *b* – в плоскости симметрии *XY* (*Z* = 0); *b*, *c* – в плоскости *YZ* в последнем расчетном сечении (*X* = 2000 м)

Очень интересно поведение частиц. На рис. 7 показано распределение плотности частиц различного размера в плоскости сноса потока (*XY*) и в последнем расчетном сечении струи (плоскость *YZ*). Легкие частицы сносятся гораздо сильнее, чем тяжелые, и сильнее деформируются. Поперечное сечение потока частиц имеет форму подковы.

На высоте 100 км излучение ведет себя, в целом, так же, как и на высоте 80 км. Только при малых углах атаки возрастает роль излучения СО (4.7 мкм). Кроме того, с ростом угла атаки наблюдается предоминирующее увеличение излучения в районе 2.7 мкм. Прирост излучения в районе 4.3 мкм гораздо слабее. Причины этого те же, что и в чисто газовой струе.

Табл. 5 показывает, что догорание H₂ и CO приводит к существенному возрастанию концентраций H₂O и CO₂ в струе, особенно при больших углах атаки (для сравнения: на срезе сопла массовая доля H₂O равна $0.12 \cdot 10^{-4}$, а CO₂ – $0.8 \cdot 10^{-5}$).

На высоте 115 км при малых углах атаки еще больше возрастает роль излучения СО (4.7 мкм). Это связано с тем, что с увеличением высоты растет интенсивность скачка в набегающем потоке, увеличивается поступательная температура и, как следствие, растет колебательная температура СО (даже с учетом колебательной неравновесности).

Важнейшим фактором на таких высотах является учет реального химического состава атмосферы. При высотах больше 100 км в атмосфере начинает проявляться эффект диссоциации кислорода, и на высоте 115 км массовая доля атомарного кислорода может быть больше массовой доли О₂. Кроме того, появляется атомарный водород. В результате, как видно из рис. 8 и табл. 6, существенно усиливается догорание и, следовательно, возрастают концентрации CO₂ и H₂O. Связано это с тем, что увеличение концентраций радикалов О и Н уменьшает время латентной стадии горения.

Таблица 5. Максимальные значения массовых долей CO₂ и H₂O в слое смешения на высоте 100 км

Угол ата- ки, град	0	20	40	60	68
$C_{\rm CO_2,max}$	0.0009	0.0015	0.002	0.012	0.0165
$C_{\mathrm{H_2O,max}}$	0.0054	0.0089	0.012	0.040	0.0488



Рис. 8. Спектральная интенсивность излучения на высоте 115 км при углах атаки набегающего потока: $a, \delta - 0^\circ$; $b, \epsilon - 60^\circ$. Расчеты $a, \delta - c$ учетом реального химического состава атмосферы; $\delta, \epsilon - \delta$ ез учета реального химического состава атмосферы

Таблица 6. Максимальные значения массовых долей СО₂ и H₂O в слое смешения на высоте 115 км (в скобках указаны результаты расчета без учета реального химического состава атмосферы)

Угол						
атаки,	0	20	40	60	68	
град						
Can	0.006	0.0065	0.0065	0.007	0.008	
CCO ₂ ,max	$(8 \cdot 10^{-5})$	$(8 \cdot 10^{-5})$	(0.0001)	(0.0011)	(0.0021)	
C	0.028	0.031	0.032	0.032	0.033	
C _{H2} O,max	(0.0007)	(0.0007)	(0.00088)	(0.0089)	(0.015)	

Рис. 8 показывает, что при угле атаки 60° учет реального состава атмосферы приводит к увеличению полученного в расчете излучения в районе 2.7 мкм почти в четыре раза. При этом вследствие сильной колебательной неравновесности CO₂(v3) излучение в диапазоне 4.3 мкм практически не меняется.

Яркость излучения в диапазоне 2.7–2.9 мкм отслеживает поворот струи в сносящем потоке, так как в этом диапазоне предоминирует излучение газа, а не частиц.

Распределение частиц на такой высоте очень слабо зависит от внешнего потока. Как мелкие, так и крупные частицы практически не отклоняются от оси сопла. Правда, поперечное сечение потока частиц несколько вытягивается в сторону сносящего потока и приобретает овальную форму.

Тестовые расчеты показывают, что в рассмотренном диапазоне параметров «чистое» излучение частиц (без учета излучения газа) практически не зависит от высоты полета и от угла атаки набегающего потока.

Заключение

Разработана методика расчета газодинамики и излучения термически и химически неравновесных газовых и гетерогенных потоков в 3Dпостановке. Газодинамическая модель включает в себя уравнения для колебательных энергий, учитывающие V-T, V-V и V-V' процессы молекул CO, CO₂, H₂O, H₂, O₂, N₂, NO, OH, HCl, Cl₂, а также спонтанную излучательную дезактивацию колебательных мод. Математическая модель многофазных потоков учитывает взаимное термическое и динамическое влияние твердых/жидких частиц и газа, фазовые преобразования частиц (кристаллизацию и переход от метастабильной γ -фазы к стабильной α -фазе). Модель излучения основана на методе *k*-распределения для колебательно неравновесного газа, в которой используются специальные формулы для средних по полосе пропускательной способности и эффективной функции Планка.

Сопоставление расчетов тестовых задач с результатами других авторов показало удовлетворительное согласование.

Проведено численное исследование двух модельных струй (чисто газовой и гетерогенной) на высотах полета от 80 до 115 км в диапазоне углов атаки от 0° до 68° , которое показало, что:

1) для газовых струй на высоте 80 км при увеличении угла атаки наблюдается существенный рост интенсивности излучения, причем основные спектральные линии излучения (СО₂, H₂O и CO) возрастают примерно пропорционально друг другу;

2) на высотах 100 км и больше излучение H_2O в диапазоне 2.7 мкм с увеличением угла атаки возрастает сильнее, чем излучение CO_2 (4.3 мкм) и CO (4.7 мкм), что обусловлено тем, что колебательные температуры $T_{CO2}(v3)$ и T_{CO} существенно отстают от поступательной температуры, в отличие от $T_{H2O}(v3)$, которая близка к поступательной температуре;

3) в газовых струях интегральная интенсивность излучения в диапазоне 1–9 мкм на высотах 100 и 115 км практически совпадает как для нулевого угла атаки, так и для бо́льших углов;

4) интенсивность излучения факела слабо зависит от направления наблюдения;

5) в гетерогенных струях влияние высоты полета (в пределах от 60 до 115 км) на интегральную интенсивность излучения (диапазон 1–9 мкм) проявляется очень слабо практически для всех рассмотренных углов атаки;

6) в гетерогенных струях при малых углах атаки основную роль в излучении играют частицы; при этом имеется два максимума: при ~1.5 мкм (обусловлен горячей, но небольшой по размеру, областью вблизи среза сопла) и при ~7 мкм (обусловлен дальней областью струи – более холодной, но очень большой по размеру); некоторый пик излучения наблюдается на линии СО (4.7 мкм); линии H₂O и CO₂ практически отсутствуют;

7) при бо́льших углах атаки резко усиливаются линии H₂O (2.7 мкм, в меньшей степени

6.5 мкм) и CO₂ (4.3 мкм и 2.7 мкм) и вклад частиц в излучение снижается; это обусловлено догоранием H_2 и CO вследствие того, что с ростом угла атаки сильно возрастают температура и давление за скачком уплотнения, образующимся при натекании внешнего потока на струю, что приводит к существенной интенсификации химического взаимодействия с кислородом воздуха;

8) на высотах 100 км и выше частицы практически не сносятся внешним потоком и летят параллельно оси сопла (в первую очередь, крупные частицы); это приводит тому, что распределение интегральной яркости в диапазоне 1–9 мкм очень близко к симметричному относительно оси сопла;

9) на высотах полета больше 100 км состав атмосферы начинает меняться (существенно возрастает концентрация атомарного кислорода, а также появляется атомарный водород), что приводит к существенному усилению догорания и, следовательно, к возрастанию концентраций CO₂ и H₂O; связано это с тем, что увеличение концентраций радикалов О и Н уменьшает время латентной стадии горения.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- Anfimov N.A., Karabadjak G.F., Khmelinin B.A., Plastinin Y.A., Rodinov A.V. Analysis of Mechanisms and Nature of Radiation from Aluminum Oxide in Different Phase States in Solid Rocket Exhaust Plumes // AIAA Paper 93-2818, 1993.
- Rodionov A., Plastinin Yu., Drakes J., Simmons M., Hiers III. R. Modeling of multiphase alumina-loaded jet flow fields // AIAA Paper 98-3462, 1998.
- Пластинин Ю.А. Моделирование излучения химически реагирующих двухфазных сверхзвуковых недорасширенных струй // Космонавтика и ракетостроение. № 3 (36). 2004. С. 18–26.
- Zavelevich F.S., Molchanov A.M., Ushakov N.N. Computation of gas and multiphase supersonic jets with nonequilibrium processes // Journal of Thermophysics and Heat Transfer. 2015. V. 29. N 3. P. 587–593.
- Завелевич Ф.С., Ушаков Н.Н. Взаимодействие выхлопных струй ракетных двигателей на различных топливах с атмосферой применительно к оценке экологической безопасности запусков ракет и ракет-носителей // Вестник самарского университета. Аэрокосмическая техника, технологии и машиностроение. 2012. Выпуск № 3-1 (34). С. 226–234.
- Burt J.M., Boyd I.D. High altitude plume simulations for a solid propellant rocket // AIAA Journal. 2007. V. 45. N 12. P. 2872–2884.
- 7. Молчанов А.М., Никитин П.В. Узкополосная база данных для расчета излучения продуктов сгорания с использованием k-распределения // Тепловые процессы в технике. 2014. Т. 6. №10. С. 448–455.

- Молчанов А.М. Расчет теплового излучения колебательно неравновесного газа методом k-распределения // Физико-химическая кинетика в газовой динамике. 2015. Т. 16. Вып. 1. http://chemphys.edu.ru/issues/2015-16-1/articles/317/
- Molchanov A.M., Bykov L.V. Three-Equation K-ε-Vn Turbulence Model for High-Speed Flows // AIAA Paper 2013-3181. 30 p.
- 10. Молчанов А.М., Быков Л.В., Никитин П.В. Модель турбулентности для сжимаемых высокоскоростных течений, основанная на представлении корреляции «давление скорости деформаций» // Тепловые процессы в технике. 2013. Т. 5. № 4. С. 146–152.
- Leone S.R. Rate coefficients for vibrational energy transfer involving the hydrogen halides // Journal of Physical and Chemical Reference Data. July 1982. V. 11. Iss. 3. P. 953–996.

- 12. **Хендерсон Р.** Влияние кинетики процесса кристаллизации на энергетические характеристики ракетного двигателя // РТК. 1977. Т.15. № 4. С. 183–185.
- Henderson C.B. Drag coefficient of spheres in continuum and rarefied flows // AIAA Journal. June 1976. V. 14. N 6. P. 707–708.
- Стернин Л.Е. Двухфазные моно- и полидисперсные течения газа с частицами. М.: Машиностроение, 1980. 172 с.
- Molchanov A.M. Numerical Simulation of Supersonic Chemically Reacting Turbulent Jets // AIAA Paper 2011-3211. 37 p.
- Vitkin E.I., Karelin V.G., Kirillov A.A., Suprun A.S., Khadyka Ju.V. A Physico-mathematical model of rocket exhaust plumes // Int. J. Heat Mass Transfer. 1997. V. 40. N 5. P. 1227–1241.

Gas dynamic and infrared radiation computing of 3D jets with account for vibrational nonequilibrium

A.M. Molchanov, D.V. Maslova

Moscow Aviation Institute (National Research University), Moscow, 125993, Russia e-mail: alexmol 2000@mail.ru

A technique for gas dynamic and IR radiation computing of vibrational non-equilibrium gas and multiphase flows in the three-dimensional statement was developed. The radiation model is based on the *k*-distribution method for the vibrational non-equilibrium gas, which employs special equations for the averages over the throughput capacity band and effective Plank function. Comparison of the test problems computational results with the results obtained by the other authors demonstrated satisfactory agreement. The article shows significant growth of heat radiation while the incoming flow angle of attack increases. Accounting for the real atmosphere chemical composition plays significant role in jets computing at the heights above 100 km.

Keywords: vibrational non-equilibrium, radiation, multiphase flows, heat radiation, *k*-distribution.

REFERENCES

- 1. Anfimov N.A., Karabadjak G.F., Khmelinin B.A., Plastinin Y.A., Rodinov A.V. Analysis of Mechanisms and Nature of Radiation from Aluminum Oxide in Different Phase States in Solid Rocket Exhaust Plumes. AIAA Paper 93-2818, 1993.
- 2. Rodionov A., Plastinin Yu., Drakes J., Simmons M., Hiers III. R. Modeling of Multiphase Alumina-Loaded Jet Flow Fields. AIAA Paper 98-3462, 1998.
- Plastinin Yu.A. Modelirovanie izlucheniya himicheski reagiruyushchih dvuhfaznyh sverhzvukovyh nedorasshirennyh struj [The radiation modeling of chemically reacting twophase supersonic underexpanded jets]. Kosmonavtika i raketostroenie – Astronautics and rocket science, 2004, no. 3 (36), pp. 18–26. In Russ.
- 4. Zavelevich F.S., Molchanov A.M., Ushakov N.N. Computation of gas and multiphase supersonic jets with nonequilibrium processes. *Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, 2015, vol. 29, no. 3, pp. 587–593
- Zavelevich F.S., Ushakov N.N. Vzaimodejstvie vyhlopnyh struj raketnyh dvigatelej na razlichnyh toplivah s atmosferoj primenitel'no k ocenke ehkologicheskoj bezopasnosti zapuskov raket i raket-nositelej. [Interaction of

exhaust jets of rocker propulsions on various propellants with atmosphere for estimation of ecological safety of firing of rockets and launchers]. *Vestnik Samarskogo universiteta. Aehrokosmicheskaya tekhnika, tekhnologii i mashinostroenie – Vestnik of Samara University. Aerospace and Mechanical Engineering*, 2012, no. 3–1 (34), pp. 226–234. In Russ.

- Burt J.M., Boyd I.D. High altitude plume simulations for a solid propellant rocket. *AIAA Journal*, 2007, vol. 45, no. 12, pp. 2872–2884.
- 7. **Molchanov A.M., Nikitin P.V.** Uzkopolosnaya baza dannyh dlya rascheta izlucheniya produktov sgoraniya s ispol'zovaniem k-raspredeleniya [Narrowband database for calculating the radiation of combustion products by using k-distribution]. *Teplovye processy v tekhnike – Thermal processes in engeneering*, 2014, no. 10, pp. 448–455. In Russ.
- Molchanov A.M. Raschet teplovogo izlucheniya kolebatel'no neravnovesnogo gaza metodom k-raspredeleniya [thermal radiation simulation of vibrationally nonequilibrium gas using k-distribution method]. *Fizikohimicheskaya kinetika v gazovoj dinamike – Physicalchemical kinetics in gas dynamics*, 2015, vol. 16, no. 1. In Russ. http://chemphys.edu.ru/issues/2015-16-1/articles/317/

- Molchanov A.M., Bykov L.V. Three-Equation K-ε-Vn Turbulence Model for High-Speed Flows. AIAA Paper 2013-3181. 30 pp.
- Molchanov A.M., Bykov L.V., Nikitin P.V. Model' turbulentnosti dlya szhimaemyh vysokoskorostnyh techenij, osnovannaya na predstavlenii korrelyacii «davlenie — skorosti deformacij» [turbulence model for compressible highspeed flows based on modelling of pressure-strain correlation]. *Teplovye processy v tekhnike – Thermal processes in engeneering*, 2013, no. 4, pp. 146–152. In Russ.
- 11. Leone S.R. Rate coefficients for vibrational energy transfer involving the hydrogen halides. *Journal of Physical and Chemical Reference Data*, 1982, vol. 11, no. 3, pp. 953–996.
- 12. **Henderson R.** Vliyanie kinetiki processa kristallizacii na ehnergeticheskie harakteristiki raketnogo dvigatelya [Influence of the kinetics of the crystallization process on the en-

ergy characteristics of a rocket engine]. *Raketnaya texnika i kosmonavtika – Rocket technology and astronautic*, 1977, vol. 15, no. 4, pp. 183–185. In Russ.

- 13. Henderson C.B. Drag coefficient of spheres in continuum and rarefied flows. *AIAA Journal*, 1976, vol. 14, no. 6, pp. 707–708.
- Sternin L.E. Dvuhfaznye mono- i polidispersnye techeniya gaza s chasticami [Two-phase mono-and polydisperse gas flows with particles]. Moscow: Mashinostroenie, 1980. 172 p. In Russ.
- 15. **Molchanov A.M.** Numerical Simulation of Supersonic Chemically Reacting Turbulent Jets. AIAA Paper 2011-3211, 37 p.
- Vitkin E.I., Karelin V.G., Kirillov A.A, Suprun A.S., Khadyka Ju.V. A physico-mathematical model of rocket exhaust plumes. Int. *J. Heat Mass Transfer*. 1997, vol. 40, no. 5, pp. 1227–1241.