

Stream Angle Effect on Thermal Radiation of Gas and Multiphase Jet

A. Molchanov, M. Solntsev, D. Maslova

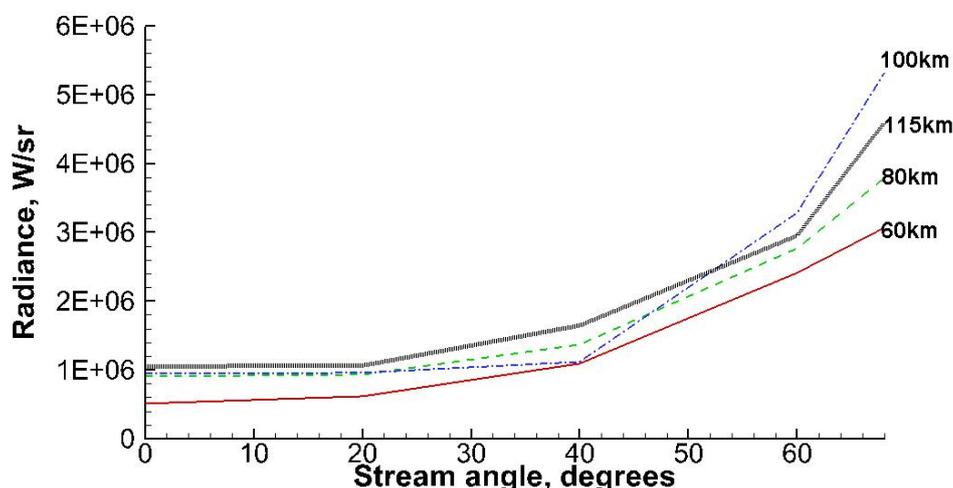
Moscow Aviation Institute, Moscow, 125993, Russia

alexmol_2000@mail.ru

Abstract

A 3D simulation method for calculating the gas dynamics and radiation of chemically and thermally non-equilibrium multiphase and gas flows has been developed. The gas-dynamic model includes the equations for the vibrational energy considering V-T, V-V and V-V' processes for various vibrational modes. The mathematical model of multiphase flows takes into account the mutual thermal and dynamic impact of solid&liquid particles and gas as well as the phase transition of the particles. The radiation model is based on the method of k-distribution for the vibrational non-equilibrium gas, which uses the special formulas for average transmittance and effective Planck function. The comparison of test simulations with the results of other authors showed a satisfactory agreement. There is a significant increase in thermal radiation intensity when the attack angle of the free-stream flow is increased. When calculating the jets at heights of over 100 kilometers it is essential to consider the real chemical composition of the atmosphere.

Keywords: vibrationally nonequilibrium gas, radiation, multiphase.



The dependence of the integrated radiance (band 1÷9 μm) on stream angle at altitudes from 60 to 115 km

УДК 535.15, 533.6.011

Влияние угла атаки на тепловое излучение газовой и многофазной струи

А.М. Молчанов, М.В. Солнцев, Д.В. Маслова

*Московский авиационный институт (Национальный исследовательский университет),
Российская Федерация, Москва, 125993, Волоколамское шоссе, д.4*

alexmol_2000@mail.ru

Аннотация

Разработана трехмерная методика расчета газодинамики и излучения термически и химически неравновесных газовых и гетерогенных потоков. Газодинамическая модель включает в себя уравнения для колебательных энергий, учитывающие V-T, V-V и V-V' процессы для различных колебательных мод. Математическая модель многофазных потоков учитывает взаимное термическое и динамическое влияние твердых/жидких частиц и газа, фазовые преобразования частиц. 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. 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, излучение, многофазные потоки.

1. Введение

Газовые и многофазные струи, истекающие в высокоскоростной сносящий внешний поток, имеют большое практическое применение, например, в реактивной системе управления, для системы двигателей ориентации, для системы аварийного спасения, в гиперзвуковых двигателях при боковом впрыске топлива. Излучение таких струй важно для определения теплового воздействия на элементы конструкции, а также для дистанционного мониторинга летательных аппаратов.

Целью данной работы является разработка методики расчета газовой и гетерогенной струи, истекающей из сопла двигателя при различных углах между осью двигателя (летательного аппарата) и направлением полета на высотах полета до 115 км.

При увеличении угла растет температура за присоединенным скачком уплотнения, что приводит к локальному возрастанию интенсивности теплового излучения с наветренной стороны. При больших степенях нерасчетности такие области могут иметь достаточно большую протяженность.

Течение в таких струях имеет очень сложный волновой трехмерный характер, что порождает большие математические сложности. В гетерогенных струях появляются дополнительные проблемы, связанных 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, получается, как бы 2 струи: частиц, летящих параллельно оси сопла двигателя, и струи газа, поворачивающейся в сторону направления внешнего потока.

На высотах полета от 70 ÷ 80 км начинает проявляться эффект колебательной неравновесности, когда наблюдается 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 данной тематике. В основном, рассматривались двумерные течения (например, работы Пластинина Ю.А. и др. [1, 2, 3], Завелевича Ф.С. и др [4, 5], Берта и Бойда [6]).

В предыдущих работах автора [7, 8] разработана методика расчета теплового излучения колебательно неравновесного газа на основе метода k-распределения, показано, что метод k-распределения позволяет с высокой эффективностью проводить расчеты узкополосного излучения горячих газов с ярко выраженным линейчатым характером спектра. Полученные результаты сопоставимы с методом прямого расчета по спектральным линиям (line-by-line, LBL) и хорошо согласуются с экспериментальными данными, как для однородных, так и для неоднородных газовых смесей.

В данной работе рассматривается применение этой методики для трехмерных струй в сносящем потоке.

2. Основная система уравнений, описывающих течение термически и химически неравновесного газа

Основная система уравнений включает: общее уравнение неразрывности, уравнение количества движения, уравнения неразрывности для компонентов газовой смеси, уравнение полной энергии и уравнения колебательной энергии для всех колебательных энергетических мод.

1) Уравнение неразрывности

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j) = 0, \quad (1)$$

где ρ – плотность газовой смеси; u_j – компонента скорости в j -м направлении.

2) Уравнение количества движения

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho u_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j u_i + \delta_{ji} p - \tau_{ij}) = F_{u,i}, \quad (2)$$

где p – давление; τ_{ij} – тензор вязких напряжений,

$$\tau_{ij} = \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \mu \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ji}, \quad (3)$$

μ – коэффициент динамической вязкости; $F_{u,i}$ учитывает динамическое взаимодействие с жидкими/твердыми частицами.

3) Уравнение сохранения массы химического компонента s

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho C_s) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j C_s + J_{s,j}) = \dot{w}_s, \quad s = 1, 2, \dots, N_C - 1, \quad (4)$$

$$\text{где} \quad C_s = \frac{\rho_s}{\rho} \quad (5)$$

– массовая доля компонента s ; ρ_s – плотность компонента s ; \dot{w}_s – скорость образования компонента s в результате химических реакций; N_C – количество компонентов газовой смеси; для диффузионной скорости $J_{s,j} \equiv \rho_s V_{s,j}$ используется закон Фика

$$J_{s,j} \equiv \rho_s V_{s,j} = -\rho D \frac{\partial C_s}{\partial x_j} = -\frac{\mu}{Sc} \frac{\partial C_s}{\partial x_j}, \quad (6)$$

где D – обобщенный единый коэффициент бинарной диффузии, одинаковый для всех компонентов; $V_{s,j}$ – диффузионная скорость компонента s в j -м направлении. Здесь коэффициент диффузии выражается через единое число Шмидта

$$\rho D = \frac{\mu}{Sc} \quad (7)$$

где μ – коэффициент динамической вязкости газовой смеси.

4) Уравнение полной энергии

$$\frac{\partial}{\partial t}(E_t) + \frac{\partial}{\partial x_j} [u_j (E_t + p) + q_j - u_i \tau_{ij}] = -Q_R + F_h, \quad (8)$$

где E_t – полная энергия на единицу объема [Па]; q_j – плотность теплового потока за счет теплопроводности и диффузии в j -м направлении [Вт/м²]; Q_R – потери на излучение [Дж/(м³·с)]; F_h учитывает тепловое взаимодействие с жидкими/твердыми частицами.

5) Для колебательной энергии в данной работе используется подход, основанный на моделировании колебательного движения молекул моделью гармонического осциллятора. При использовании этой модели среднее число m -х колебательных квантов α_m , приходящихся на одну молекулу, определяется формулой

$$\alpha_m = r_m \frac{1}{\exp(\theta_m/T_{v,m}) - 1}, \quad (9)$$

где θ_m – характеристическая колебательная температура m -ой колебательной моды; $T_{v,m}$ – соответствующая колебательная температура; r_m – кратность вырождения m -й моды молекулы.

Энергия одного кванта равна $h\nu_m = k\theta_m$, где k – постоянная Больцмана. $k = 1.3806488 \times 10^{-23}$ [Дж/К].

Удельная (на единицу массы компонента, к которому относится данная мода) колебательная энергия m -й колебательной моды $e_{v,m}$ связана с α_m следующим соотношением:

$$e_{v,m} = \frac{R_U \theta_m}{M_{s(m)}} \alpha_m, \quad (10)$$

где $M_{s(m)}$ – молярная масса компонента s , к которому относится m -я колебательная мода; R_U – универсальная газовая постоянная.

Изменение во времени числа квантов каждой моды определяется всеми энергетическими переходами с общей скоростью ψ_m и может быть записано в виде

$$\frac{d\alpha_m}{dt} = \psi_m \quad (11)$$

Рассматривая левую часть этого уравнения как субстанциональную производную, получаем уравнение переноса α_m

$$\frac{\partial \alpha_m}{\partial t} + u_{s(m),j} \frac{\partial \alpha_m}{\partial x_j} = \psi_m, \quad (12)$$

где $u_{s(m),j}$ – скорость движения компонента s , к которому относится m -я колебательная мода.

Скорость отдельного компонента можно представить как сумму скорости всей газовой смеси и диффузионной

$$u_{s,j} = u_j + V_{s,j} \quad (13)$$

Тогда с учетом (6) уравнение (12) преобразуется к виду

$$\frac{\partial \alpha_m}{\partial t} + u_j \frac{\partial \alpha_m}{\partial x_j} - \frac{1}{\rho_{s(m)}} \frac{\mu}{Sc} \frac{\partial C_{s(m)}}{\partial x_j} \frac{\partial \alpha_m}{\partial x_j} = \psi_m, \quad (14)$$

где $C_{s(m)}$ – массовая доля компонента s , к которому относится m -я колебательная мода.

Умножая (14) на $\rho \frac{R_U \theta_m}{M_{s(m)}}$ и переходя к консервативному виду, получаем уравнение переноса m -й колебательной энергии

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho e_{V,m}) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j e_{V,m}) - \frac{\mu}{Sc} \frac{1}{C_{s(m)}} \frac{\partial C_{s(m)}}{\partial x_j} \frac{\partial e_{V,m}}{\partial x_j} = \rho \dot{e}_{V,m}, \quad m = 1, 2, \dots, N_M, \quad (15)$$

где N_M – количество колебательных мод,

$$\dot{e}_{V,m} = \frac{R_U \theta_m}{M_{s(m)}} \psi_m \quad (16)$$

б) Уравнение состояния имеет вид

$$p = \rho \frac{R_U}{M_\Sigma} T, \quad (17)$$

где $T = T_{TR}$ – единая поступательно-вращательная температура. (Считается, что вращательные энергетические моды находятся в равновесии с поступательными.)

Кажущаяся молекулярная масса газовой смеси M_Σ определяется формулой

$$M_\Sigma = \left(\sum_{s=1}^{N_c} \frac{C_s}{M_s} \right)^{-1} \quad (18)$$

3. Полная энергия

Внутренняя энергия каждого компонента s складывается из поступательной $e_{T,s}$, вращательной $e_{R,s}$, колебательной и химической h_s^0 составляющих.

Таким образом, внутренняя энергия газовой смеси e равна

$$e = \sum_{s=1}^{N_c} C_s e_{T,s} + \sum_{s=1}^{N_c} C_s e_{R,s} + \sum_{m=1}^{N_M} C_{s(m)} e_{V,m} + \sum_{s=1}^{N_c} C_s h_s^0 \quad (19)$$

Полная энергия определяется соотношением

$$E_t = \rho \left(e + \frac{u_k^2}{2} \right), \quad (20)$$

Химическая энергия h_s^0 привязана к температуре 0 К.

Если для энтальпий компонентов используются справочные термодинамические формулы вида

$$\frac{h_s(T)}{R_s T} = a_{1,s} + a_{2,s} \frac{T}{2} + a_{3,s} \frac{T^2}{3} + a_{4,s} \frac{T^3}{4} + a_{5,s} \frac{T^4}{5} + \frac{b_{1,s}}{T}, \quad (21)$$

то
$$h_s^0 = h_s(0) = R_s b_{1,s} \quad (22)$$

Здесь $R_s = R_U / M_s$ – газовая постоянная компонента s .

Поступательная и вращательная энергии линейно зависят от поступательно-колебательной температуры T

$$e_{T,s} = (C_V)_{T,s} T, \quad e_{R,s} = (C_V)_{R,s} T \quad (23)$$

Предполагается, что поступательные и вращательные теплоемкости имеют постоянные значения и определяются по формулам

$$(C_V)_{T,s} = \frac{3}{2} R_s, \quad (C_V)_{R,s} = \frac{i_s}{2} R_s, \quad (24)$$

где i_s – число вращательных степеней свободы молекулы: $i_s = 0$ для одноатомных молекул, $i_s = 2$ для линейных молекул, $i_s = 3$ для многоатомных нелинейных молекул (число молекул больше 2).

С учетом вышесказанного уравнение (19) принимает вид

$$e = C_{V,TR} T + \sum_{m=1}^{N_M} C_{s(m)} e_{V,m} + \sum_{s=1}^{N_c} C_s h_s^0, \quad (25)$$

где
$$C_{V,TR} = \sum_{s=1}^{N_c} \frac{(3+i_s)}{2} C_s R_s \quad (26)$$

поступательно-вращательная теплоемкость газовой смеси при постоянном объеме.

Введем параметр $e_{V,s}$ – колебательную энергию компонента s . Она складывается из всех колебательных мод, относящихся к данному компоненту

$$e_{V,s} = \sum_{m=1}^{m(s)} e_{V,m} \quad (27)$$

У атомов колебательная энергия отсутствует – $e_{V,s} = 0$; у двухатомных молекул всего одна колебательная степень свободы и $m(s) = 1$; у трехатомных $m(s) = 3$.

Замечание. В общем случае для линейных трехатомных молекул (например, CO_2) число колебательных степеней свободы равно 4, но две из них вырождены. Так как коэффициент вырождения r_m уже учтен в формуле для $e_{V,m}$, то и для таких молекул $m(s) = 3$.

С учетом (27) формула внутренней энергии газовой смеси принимает вид

$$e = \sum_{s=1}^{N_c} C_s (e_{T,s} + e_{R,s} + e_{V,s} + h_s^0) = \sum_{s=1}^{N_c} C_s e_s \quad (28)$$

Здесь внутренняя энергия компонента s задается формулой

$$e_s = e_{T,s} + e_{R,s} + e_{V,s} + h_s^0 \quad (29)$$

Вводим энтальпию газовой смеси по традиционной формуле

$$h = e + \frac{p}{\rho} = e + \frac{R_U}{M_\Sigma} T = \sum_{s=1}^{Nc} C_s e_s + \sum_{s=1}^{Nc} C_s R_s T = \sum_{s=1}^{Nc} C_s h_s, \quad (30)$$

где
$$h_s = e_s + R_s T \quad (31)$$

– энтальпия компонента s .

Удобно ввести поступательно-вращательную энтальпию, поступательно-вращательную теплоемкость газовой смеси при постоянном давлении и соответствующие теплоемкости компонентов – по следующим формулам:

$$h_{TR} = C_{V,TR} T + \frac{p}{\rho} = C_{V,TR} T + \frac{R_U}{M_\Sigma} \tilde{T} = T \sum_{s=1}^{Nc} \frac{(5+i_s)}{2} R_s C_s = T \sum_{s=1}^{Nc} (C_P)_{s,TR} C_s = C_{P,TR} T, \quad (32)$$

$$C_{P,TR} = \sum_{s=1}^{Nc} (C_P)_{s,TR} C_s, \quad (33)$$

$$(C_P)_{s,TR} = \frac{(5+i_s)}{2} R_s \quad (34)$$

С учетом этого все введенные энтальпии можно выразить по формулам

$$h_s = \frac{(5+i_s)}{2} R_s T + e_{s,V} + h_s^0 = (C_P)_{s,TR} T + e_{s,V} + h_s^0, \quad (35)$$

$$h = \sum_{s=1}^{Nc} C_s \left((C_P)_{s,TR} T + e_{s,V} + h_s^0 \right) = C_{P,TR} T + \sum_{s=1}^{Nc} C_s e_{s,V} + \sum_{s=1}^{Nc} C_s h_s^0 \quad (36)$$

4. Тепловой поток и переносные свойства газа

Как уже говорилось, тепловой поток q_j , входящий в уравнение энергии (8), обусловлен теплопроводностью газа и переносом теплоты за счет диффузии.

Плотность теплового потока $q_{\lambda,j}$, обусловленного теплопроводностью, для всех энергетических мод определяется законом Фурье

$$q_{\lambda,j} = -\lambda_{TR} \frac{\partial T}{\partial x_j} - \sum_{m=1}^{Nm} \lambda_{V,m} \frac{\partial T_{V,m}}{\partial x_j}, \quad (37)$$

а перенос за счет диффузии – соотношением

$$q_{D,j} = \sum_s V_{s,j} \rho_s h_s = -\frac{\mu}{Sc} \sum_s \frac{\partial C_s}{\partial x_j} h_s \quad (38)$$

Здесь использовалась формула (6).

Переносные свойства определяются следующим образом.

Для газовой смеси используется формула Уилки [9]

$$\mu = \sum_{s=1}^{Nc} \frac{X_s \mu_s}{\phi_s}, \quad (39)$$

где X_s – мольная доля компонента s ,

$$\phi_s = \sum_{r=1}^{Nc} X_r \left[1 + \sqrt{\frac{\mu_s}{\mu_r}} \left(\frac{M_r}{M_s} \right)^{1/4} \right]^2 \left[\sqrt{8 \left(1 + \frac{M_s}{M_r} \right)} \right]^{-1}, \quad (40)$$

μ_s – динамическая вязкость компонента s , определяемая по формуле [10]

$$\mu_s = 0.1 \exp \left[(A_s \ln T + B_s) \ln T + C_s^* \right], \quad (41)$$

где A_s, B_s, C_s^* – справочные константы [11].

Коэффициенты теплопроводности задаются формулами

$$\lambda_{TR} = \sum_s \frac{X_s \lambda_{TR,s}}{\phi_s}, \quad \lambda_{V,m} = \mu_s C_{s(m)} C_{V,m}, \quad (42)$$

где колебательные теплоемкости вводятся из соотношений

$$\frac{\partial e_{m,V}}{\partial x_j} = C_{V,m} \frac{\partial T_{V,m}}{\partial x_j} \quad (43)$$

Поступательно-вращательные коэффициенты теплопроводности компонентов $\lambda_{TR,s}$ определяются по формулам аналогичным формуле (41), а коэффициенты, входящие в формулы, берутся из справочника [11].

Для определения градиента температуры используем формулы (30), (35) и (33):

$$\begin{aligned} \frac{\partial h}{\partial x_j} &= \sum_{s=1}^{Nc} \frac{\partial C_s}{\partial x_j} h_s + \sum_{s=1}^{Nc} C_s \frac{\partial h_s}{\partial x_j} = \sum_{s=1}^{Nc} \frac{\partial C_s}{\partial x_j} h_s + \frac{\partial T}{\partial x_j} C_{P,TR} + \sum_{s=1}^{Nc} C_s \frac{\partial e_{s,V}}{\partial x_j} = \\ &= \sum_{s=1}^{Nc} \frac{\partial C_s}{\partial x_j} h_s + \frac{\partial T}{\partial x_j} C_{P,TR} + \sum_{m=1}^{Nm} C_{s(m)} \frac{\partial e_{m,V}}{\partial x_j} \end{aligned} \quad (44)$$

Отсюда

$$\frac{\partial T}{\partial x_j} = \frac{1}{C_{P,TR}} \left(\frac{\partial h}{\partial x_j} - \sum_{s=1}^{Nc} \frac{\partial C_s}{\partial x_j} h_s - \sum_{m=1}^{Nm} C_{s(m)} \frac{\partial e_{m,V}}{\partial x_j} \right) \quad (45)$$

Таким образом, общая плотность теплового потока получается из следующего преобразования:

$$\begin{aligned} q_j &= q_{\lambda,j} + q_{D,j} = -\lambda_{TR} \frac{\partial T}{\partial x_j} - \sum_{m=1}^{Nm} \lambda_{V,m} \frac{\partial T_{V,m}}{\partial x_j} - \frac{\mu}{Sc} \sum_s \frac{\partial C_s}{\partial x_j} h_s = \\ &= -\frac{\mu}{Pr_{TR}} \frac{\partial h}{\partial x_j} + \left(\frac{\mu}{Pr_{TR}} - \frac{\mu}{Sc} \right) \sum_s \frac{\partial C_s}{\partial x_j} h_s + \sum_{m=1}^{Nm} \left(\frac{\mu}{Pr_{TR}} C_{s(m)} C_{V,m} - \lambda_{V,m} \right) \frac{\partial T_{V,m}}{\partial x_j} = \\ &= -\frac{\mu}{Pr_{TR}} \frac{\partial h}{\partial x_j} + \left(\frac{\mu}{Pr_{TR}} - \frac{\mu}{Sc} \right) \sum_s \frac{\partial C_s}{\partial x_j} h_s + \sum_{m=1}^{Nm} \left(\frac{\mu}{Pr_{TR}} - \mu_s \right) C_{s(m)} C_{V,m} \frac{\partial T_{V,m}}{\partial x_j} \end{aligned} \quad (46)$$

Здесь введено поступательно-вращательное число Прандтля

$$Pr_{TR} = \frac{\mu C_{P,TR}}{\lambda_{TR}} \quad (47)$$

Обычно считается, что $Pr_{TR} \approx Sc$, $\frac{\mu}{Pr_{TR}} \approx \mu_s$, поэтому с достаточной точностью для полного теплового потока можно использовать следующую формулу:

$$q_j = -\frac{\mu}{Pr_{TR}} \frac{\partial h}{\partial x_j} \quad (48)$$

При расчете турбулентных течений используется осредненная система основных дифференциальных уравнений, получаемая из уравнений (1), (2), (3), (4), (8) и (15). В ней вводятся средние значения параметров по Рейнольдсу и по Фавру. В этих уравнениях появляются дополнительные неизвестные величины – корреляции пульсаций различных газодинамических параметров. Наиболее важную роль из этих величин играют корреляции пульсаций скорости и основных газодинамических параметров (энергии, скорости, массовых долей компонентов и т.п.), имеющих физический смысл дополнительных турбулентных потоков энергии, концентраций и напряжений турбулентного трения. Для расчета этих параметров используется трехпараметрическая $K-\varepsilon-V_n$ модель, подробно описанная в [12, 13]. Основные осредненные уравнения по форме совпадают с исходными (1), (2), (3), (4), (8) и (15).

5. Колебательные энергетические переходы

Источник в уравнении переноса колебательной энергии $\dot{e}_{v,m}$ обусловлен 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 в предыдущей работе [8]. В данной работе в систему добавлены межмолекулярные V-V' процессы с участием HCl, термическое состояние которого важно для ряда научных и практических задач.

Таблица 1

V-V' процессы с участием HCl [14]

36. $HCl(1) + CO(0) = HCl(0) + CO(1)$ ()	40. $HCl(1) + NO(0) = HCl(0) + NO(1)$
37. $HCl(1) + N_2(0) = HCl(0) + N_2(1)$	41. $HCl(1) + O_2(0) = HCl(0) + O_2(1)$
38. $HCl(1) + CO_2(00^00) = HCl(0) + CO_2(00^01)$	42. $HCl(1) + H_2O(000) = HCl(0) + H_2O(001)$
39. $HCl(1) + H_2(0) = HCl(0) + H_2(1)$	43. $HCl(1) + H_2O(000) = HCl(0) + H_2O(100)$

Нумерация приведена с учетом процессов, описанных в работе [8].

6. 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 $u_{\alpha,j}$ и температуры T_α . Предполагается, что частицы имеют сферическую форму, химически инертны по отношению к газовой фазе и не взаимодействуют между собой.

Для каждой группы частиц ($\alpha = 1, 2, \dots, L$) уравнения, описывающие движение частиц Al_2O_3 , включают в себя [2, 4]:

1) уравнение неразрывности

$$\frac{\partial \rho_\alpha}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho_\alpha u_{\alpha,j}) = 0; \quad (49)$$

2) уравнение сохранения количества движения

$$\rho_\alpha \frac{du_{\alpha,i}}{dt} = f_{\alpha,i}; \quad (50)$$

3) уравнение сохранения энергии

$$\rho_{\alpha} C_S \frac{dT_{\alpha}}{dt} = q_{phase,\alpha} - q_{conv,\alpha} - q_{rad,\alpha} \quad (51)$$

Здесь 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:

$$f_{\alpha,i} = \rho_{\alpha} C_f (u_i - u_{\alpha,i}) = \frac{3}{8} \frac{C_{D,\alpha} \rho (u_i - u_{\alpha,i}) |\vec{V} - \vec{V}_{\alpha}| \rho_{\alpha}}{r_{\alpha} \rho_{Al_2O_3}} \quad (52)$$

$$q_{conv,\alpha} = \rho_{\alpha} C_q (T_{\alpha} - T), \quad C_q = \frac{3}{2} \frac{Nu \cdot \lambda}{r_{\alpha}^2 \rho_{Al_2O_3}}, \quad (53)$$

$$q_{rad,\alpha} = \rho_{\alpha} \exp(C_{rad}),$$

$$C_{rad} = \begin{cases} 1.25 \times 10^{-2} T_{\alpha} - 0.5, & T_{\alpha} < 1000, \\ 10 + 2 \times 10^{-3} T_{\alpha}, & 1000 < T_{\alpha} < 2000, \\ 7.143 \times 10^{-3} T_{\alpha} - 0.286, & T_{\alpha} > 2000 \end{cases} \quad (54)$$

$$\frac{q_{phase,\alpha}}{\rho_{\alpha}} = 3q_{cr} \frac{r_{cr,\alpha}^2}{r_{\alpha}^3} a (T_M - T_{\alpha})^{1.8}, \quad (55)$$

где $\rho_{Al_2O_3}$ – плотность материала частиц; q_{cr} – удельная теплота фазового перехода; $T_M = 2300$ К – температура начала равновесной кристаллизации; $r_{kp,\alpha}$ – радиус фронта кристаллизации; $a = 0.64 \times 10^{-6}$ – константа в формуле для скорости распространения фронта кристаллизации. Предполагается, что начало неравновесной кристаллизации соответствует температуре $T = 0.82T_M$ согласно работе [15].

Для определения положения фронта кристаллизации во времени используется условие

$$\frac{dr_{kp,\alpha}}{dt} = -a (T_M - T_{\alpha})^{1.8} \quad (56)$$

При интенсивном догорании температура газа может превысить температуру плавления частиц, поэтому закристаллизовавшиеся частицы могут начать плавиться. В этом случае из условия совместности процессов $q_{conv,\alpha} = q_{phase,\alpha}$ определяется положение фронта кристаллизации (расплавленной зоны).

Предполагается, что сначала жидкая фаза Al_2O_3 кристаллизуется в метастабильную твердую γ -фазу, которая затем переходит в стабильную α -фазу. Доля α -фазы от общей твердой фазы определяется по формуле [2]

$$\frac{dC_{\alpha}}{dt} = A \exp(-B/T_{\alpha}), \quad 0 < C_{\alpha} < 1, \quad (57)$$

где $A = 1.5 \times 10^{12} s^{-1}$, $B = 58368$ К.

Для коэффициента сопротивления используется формула Хендерсона [16], а для критерия Нуссельта – формула Кавано [17], в которой учтено отличие от течения сплошной среды

$$Nu = \frac{Nu_0}{1 + [3.42 Nu_0 M / (Re Pr)]}, \quad (58)$$

где $Nu_0 = 2 + 0.459 Re^{0.55} Pr^{0.33}$ – формула Дрейка для сплошной среды. Числа Маха и Рейнольдса равны

$$M = \frac{|\vec{V} - \vec{V}_\alpha|}{a}, \quad Re = \frac{\rho |\vec{V} - \vec{V}_\alpha| r_\alpha}{\mu} \quad (59)$$

Динамическое и тепловое воздействие частиц на газовую фазу в уравнениях (2) и (8) определяется по формулам

$$F_{u,i} = -\sum_{\alpha=1}^L f_{\alpha,i}, \quad F_h = \sum_{\alpha=1}^L (q_{conv,\alpha} - f_{\alpha,i} u_{\alpha,i}) \quad (60)$$

7. Методика расчета ИК излучения газовых и гетерогенных потоков с учетом колебательной неравновесности

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

В них разработана методика расчета теплового излучения колебательно неравновесного газа на основе метода k-распределения, получены формулы для расчета средних по полосе пропускательной способности и эффективной функции Планка для колебательно неравновесной газовой смеси, создана база данных для каждого компонента, в которой зависимость коэффициента поглощения получена для различных значений волновых чисел, температур (всех энергетических мод) и парциальных давлений газовых компонентов.

Для расчета теплового излучения частиц Al_2O_3 использовалась методика, описанная в работах [1, 3]. В этих работах показана важность учета агрегатного состояния частиц Al_2O_3 , т.к. от этого существенно зависят оптические характеристики частиц.

8. Численные методы решения основных уравнений

Для численного решения основных газодинамических уравнений использовался численный метод, описанный в работе [18], и программа Universe CFD, разработанная в МАИ на кафедре Авиационно-космической теплотехники. Для решения уравнений переноса излучения использовалась методика, описанная в [8].

При расчете химически реагирующих течений для горения водорода использовалась система реакций Коннера и др. [19]. Она включает 19 реакций. Кроме того, в некоторых расчетах использовалась упрощенная, краткая система, состоящая из 7 реакций [18]. Для учета углеродных соединений добавлены реакции с участием CO и CO₂ [18]. Для учета соединений хлора и азота использовались реакции из работы [20].

Особый интерес представляет решение уравнений для конденсированной фазы (49), (51), (56), (57).

Существует два принципиальных подхода к решению уравнений переноса дискретной фазы: метод Лагранжа (отслеживаются траектории каждой частицы) и метода Эйлера (решаются уравнения подобные уравнениям для непрерывной среды – газа). Во втором случае расчетные сетки частиц и газа совпадают, в методе Лагранжа траектории частиц естественно отличаются от расчетной сетки газа.

Оба метода обладают как преимуществами, так и недостатками по сравнению друг с другом. Для рассматриваемой в данной статье задачи наиболее важно то, что метод Лагранжа позволяет максимально точно отследить эволюцию каждой частицы, в частности, фазовые переходы. При использовании метода Эйлера с этим возникают проблемы – частицы, в которых уже началась кристаллизация, на сетке газа могут оказаться в области, где кристаллизация еще невозможна с точки зрения предыстории траекторий частиц; возможна и обратная ситуация. Кроме того, метод Эйлера требует существенно большие компьютерные ресурсы, так как для каждой группы частиц приходится решать фактически полную

систему уравнений типа Навье – Стокса. В методе Лагранжа решаются обыкновенные дифференциальные уравнения, поэтому она значительно экономичнее.

С другой стороны, при использовании метода Лагранжа возникают проблемы с решением уравнения неразрывности (49) на сетке частиц. Дело в том, что траектории частиц могут иметь весьма сложную геометрию и неоднократно пересекаться между собой. По этой же причине проблематичен пересчет сил воздействия частиц на газ и соответствующих конвективных потоков с сетки частиц на сетку газа. Даже в двумерном случае эта проблема решается довольно сложно (см, например, [2,21]). Для трехмерного течения задача усложняется еще сильнее: при поперечном сносе частицы сбиваются в узкие области, и на очень близком расстоянии могут оказаться частицы с совершенно разными скоростями и температурой, т.е. нарушается непрерывность решения. Интерполяция параметров для пересчета параметров с траекторий частиц на сетку газа и наоборот становится практически невозможной.

Вследствие всех этих обстоятельств в данной работе использовался комплексный подход, основанный на сочетании метода Лагранжа для решения уравнений количества движения (50), энергии (51), фазовых переходов (56) и (57) и метода Эйлера – для уравнения неразрывности (49), а также для расчета динамического и теплового воздействия частиц на газ.

Использовался следующий алгоритм.

- 1) Выбирается координата, по которой осуществляется основное направление движения частиц, в данной задаче – ось x .
- 2) На каждом шаге по этой координате Δx решаются уравнения (50), (51), (56) и (57) методом, описанным ниже. При этом начальные точки траекторий берутся совпадающими с сеткой газа. Отпадает необходимость интерполяции.
- 3) Конечные точки этих траекторий не совпадают с сеткой газа. Но из-за малости шага Δx пересечений траекторий не происходит. Поэтому интерполяционный перенос параметров частиц на сетку газа не представляет сложности.
- 4) Решение уравнения неразрывности (49) осуществляется на сетке газа таким же методом, как решение уравнений для газовой фазы.

Общий вид уравнений (50), (51), (56) и (57) следующий:

$$\frac{dg_{\alpha}}{dt} = C(g - g_{\alpha}) + a \quad (61)$$

Уравнение (61) решается на каждом шаге $\Delta t = \Delta x/u$ на участке от $t=0$ до $t=\Delta t$. Считается, что на этом участке C, g, a постоянны и определяются по параметрам на n -м слое. Аналитическое решение уравнения (61) имеет вид

$$\begin{aligned} g_{\alpha}^{n+1} \equiv g_{\alpha}(\Delta t) &= g + \frac{a}{C} + \left(g_{\alpha}^n - g - \frac{a}{C} \right) \exp(-C\Delta t) = \\ &= g + \left(g_{\alpha}^n - g \right) \exp(-C\Delta t) + a \frac{[1 - \exp(-C\Delta t)]}{C} \end{aligned} \quad (62)$$

Используя решение (61), находим конечные точки траекторий

$$\begin{aligned}
 x_{\alpha}^{n+1} &= x_{\alpha}^n + u\Delta t + \left(u_{\alpha}^n - u\right) \frac{\left[1 - \exp\left(-C_f \Delta t\right)\right]}{C_f}, \\
 y_{\alpha}^{n+1} &= y_{\alpha}^n + v\Delta t + \left(v_{\alpha}^n - v\right) \frac{\left[1 - \exp\left(-C_f \Delta t\right)\right]}{C_f}, \\
 z_{\alpha}^{n+1} &= z_{\alpha}^n + w\Delta t + \left(w_{\alpha}^n - w\right) \frac{\left[1 - \exp\left(-C_f \Delta t\right)\right]}{C_f}
 \end{aligned}
 \tag{63}$$

9. Результаты расчетов

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

Вариант 1

Расчет с параметрами из работы Родионова и др. [2]. Рассматриваются 3 группы частиц с размерами 1.5 мкм, 3 мкм и 6 мкм. Предполагается, что частицы и газ имеют одинаковую температуру на срезе сопла.

Таблица 2

Параметры на срезе сопла

P_a , атм	T_a , К	U_a , м/с	Число Маха	Плотность Al_2O_3 для каждой группы, г/см ³					
0.4	2500	2895	2.35	9.07×10^{-6}					
<i>Мольный состав газовых компонентов на срезе сопла</i>									
CO	CO ₂	Cl	H	H ₂	H ₂ O	HCl	N ₂	O	OH
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}

На рис. 1 представлено изменение температур газа и частиц вдоль оси струи. Результаты расчетов удовлетворительно согласуются с расчетом Родионова и др. [2]. Здесь R_a – радиус срез сопла. Наблюдается ярко выраженное повышение температуры частиц вследствие кристаллизации. Считается, что во всех случаях частицы не успевают кристаллизоваться в сопле. Охлаждение частиц в расчете данной работы протекает несколько медленнее, чем в [2]. Это приводит к тому, что и кристаллизация происходит позже. Связано это с тем, что в данной работе используется сетка с намного большим разрешением по обеим осям, чем в [2]. Из-за этого в нашем расчете получается существенно более низкое давление в бочке Маха. Это приводит к уменьшению числа Рейнольдса, числа Нуссельта (см. формулу (58) и формулу для Nu_0) и, как следствие, к замедлению охлаждения частиц.

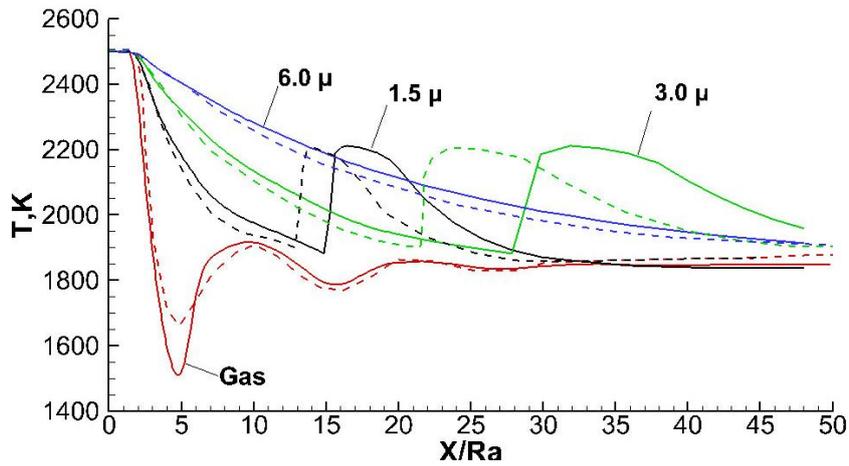


Рис. 1. Распределение температуры газа и частиц вдоль оси струи. Пунктир – расчет Родионова и др.[2]; сплошные линии – расчет данной работы

Рисунок 2 показывает осевое распределение доли α -фазы Al_2O_3 . Эти расчетные данные также хорошо согласуются с результатами Родионова и др. [2], где кристаллизация частиц группы 1.5 мкм начинается примерно на расстоянии 16 радиусов сопла и величина доли α -фазы достигает величины $\sim 1.6 \cdot 10^{-3}$ (см. рис. 6 и 7 работы [2]).

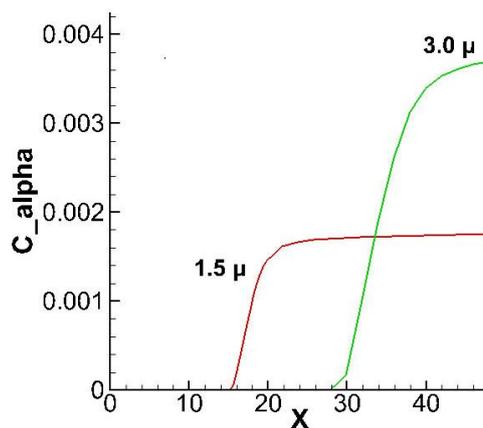


Рис. 2. Распределение доли α -фазы вдоль оси струи

Вариант 2

Сопоставление результатов расчета с данными из работы Завелевича и др. [4] для типичной твердотопливной ракеты тягой 12 тонн на высоте 31 км.

Результаты расчета осевой температуры (рис. 3) хорошо согласуются с данными Завелевича и др. [4].

Здесь виден очень важный для практики результат: частицы "поджигают" газ и интенсифицируют догорание на этой высоте. Без учета этого эффекта догорание отсутствует.

Рисунок 4 показывает распределение для температур газа и частиц.

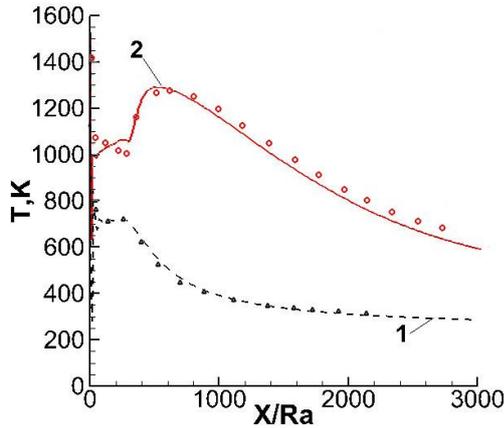


Рис. 3. Осевое распределение температуры газа в струе типичного твердотопливного двигателя на высоте 31 км.
1 – расчет без учета влияния частиц на газовую фазу; 2 – расчет с учетом влияния частиц на газовую фазу. Фигуры – данные работы Завелевича и др. [4]; линии – расчет данной работы

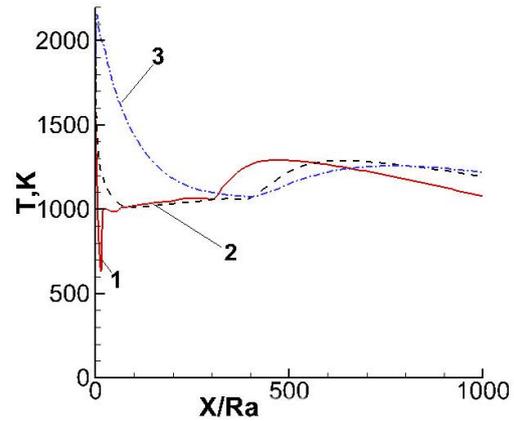


Рис. 4. Осевое распределение температур частиц и газа в струе типичного твердотопливного двигателя на высоте 31 км.
1 – температура газа; 2 – температура частиц 1.0 мкм; 3 – температура частиц 3.5 мкм

Вариант 3

Рассматривалась струя модельного жидкостного двигателя с параметрами из [22].

Таблица 3

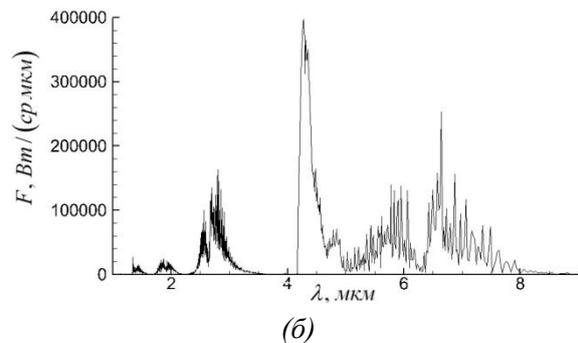
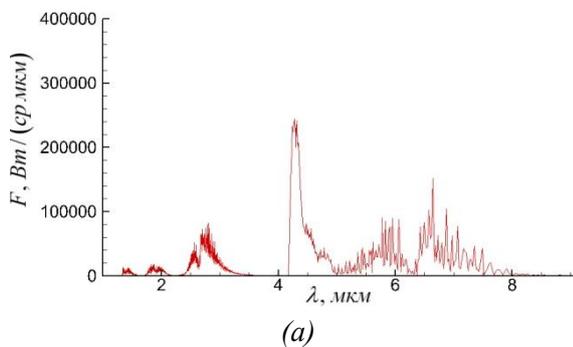
Параметры на срезе сопла

T_a , К	U_a , м/с	R_a , м	P_a , атм	H_2	H_2O	CO	CO_2	N_2
2000	2500	0.5	0.3	0.05	0.4	0.05	0.15	0.35

Химический состав задан в мольных долях.

Рассматривались 3 высоты: 80 км (скорость внешнего потока 2600 м/с), 100 км (2800 м/с), 115 км (3000 м/с).

На рисунке 5 показана зависимость спектральной интенсивности излучения на высоте 80 км от угла атаки набегающего потока. При изменении угла от 0 до 60° наблюдается существенный рост спектральной интенсивности излучения, причем основные линии излучения (CO_2 , H_2O и CO) возрастают примерно пропорционально друг другу.



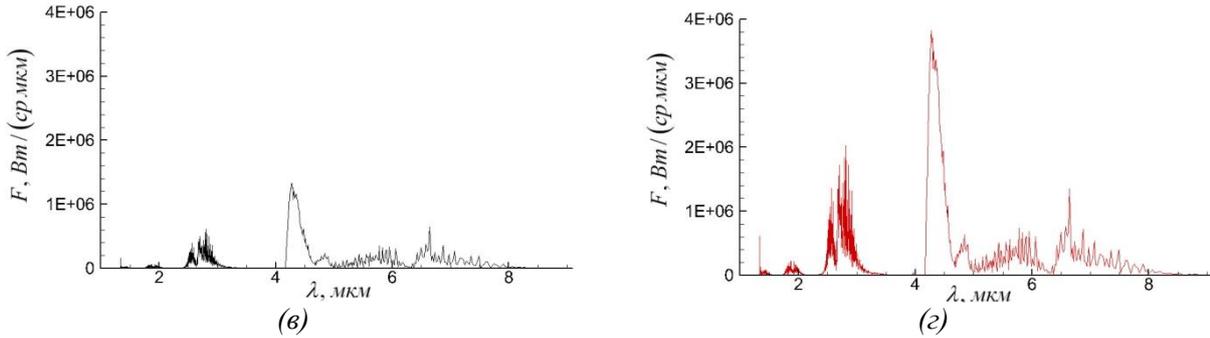


Рис. 5. Спектральная интенсивность излучения на высоте 80 км при различных углах атаки набегающего потока. (а) – 0°, (б) – 20°, (в) – 40°, (г) – 60°

Интегральная интенсивность излучения также возрастает с увеличением угла (рис. 6), при этом рост носит существенно нелинейный характер.

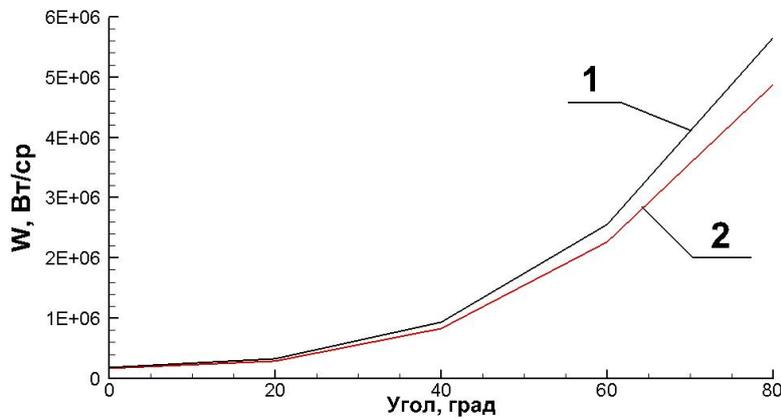


Рис. 6. Зависимость интегральной интенсивности излучения (диапазон 1 ÷ 9 мкм) от угла атаки набегающего потока на высоте 80 км при различных направлениях наблюдения струи. 1 – направление вдоль оси Z, 2 – направление вдоль оси Y

На такой высоте колебательная неравновесность проявляется еще слабо, колебательные температуры слабо отличаются от поступательной (рис. 7) и с увеличением угла атаки растут аналогично последней, чем и объясняется примерно пропорциональное увеличение основных спектральных линий.

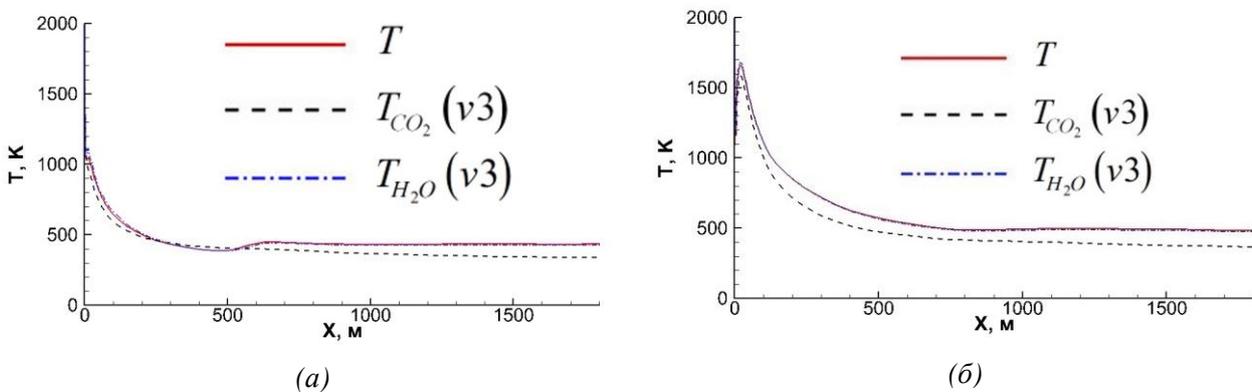


Рис. 7. Зависимость температур в середине слоя смешения с наветренной стороны струи от координаты X, направленной вдоль оси сопла при различных углах атаки набегающего потока, на высоте 80 км. (а) – 0°, (б) – 40°

Рисунок 8 показывает, что на высоте 80 км струя достаточно быстро поворачивает и становится параллельной внешнему потоку. Это касается как газодинамических параметров, так и яркости излучения. (Внешний поток направлен в сторону уменьшения координаты Y под углом 60° с осью X).

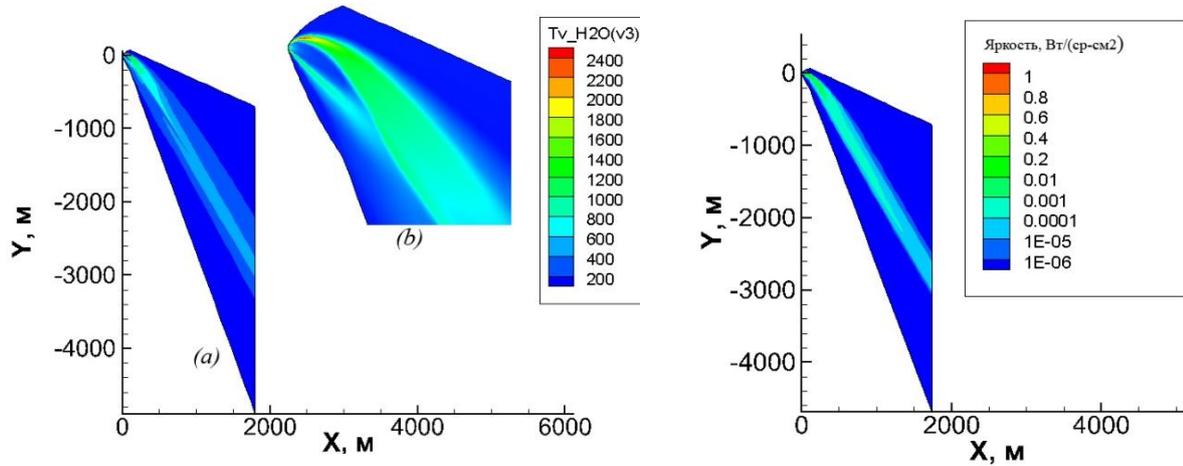


Рис. 8. Пространственное распределение температуры $T_{\text{H}_2\text{O}} (\text{v}3)$ и яркости струи в диапазоне диапазон $1 \div 9$ мкм в плоскости XY при угле атаки набегающего потока равном 60° на высоте 80 км

На высоте 100 км также наблюдается существенный рост интенсивности излучения с увеличением угла атаки набегающего потока (рис. 9, 10). 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 $T_{\text{CO}_2} (\text{v}3)$ и T_{CO} существенно отстают от поступательной температуры, в отличие от $T_{\text{H}_2\text{O}} (\text{v}3)$, которая почти совпадает с поступательной температурой (рис. 11).

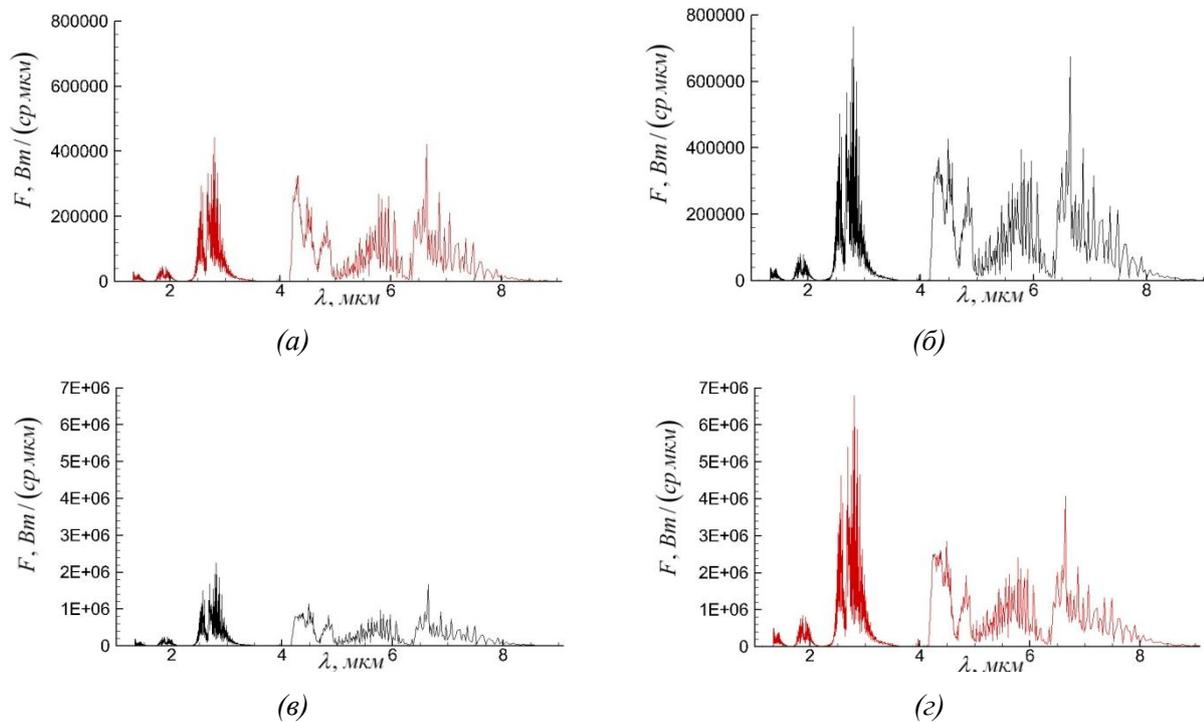


Рис. 9. Спектральная интенсивность излучения на высоте 100 км при различных углах атаки набегающего потока. (а) – 0° , (б) – 20° , (в) – 40° , (г) – 60°

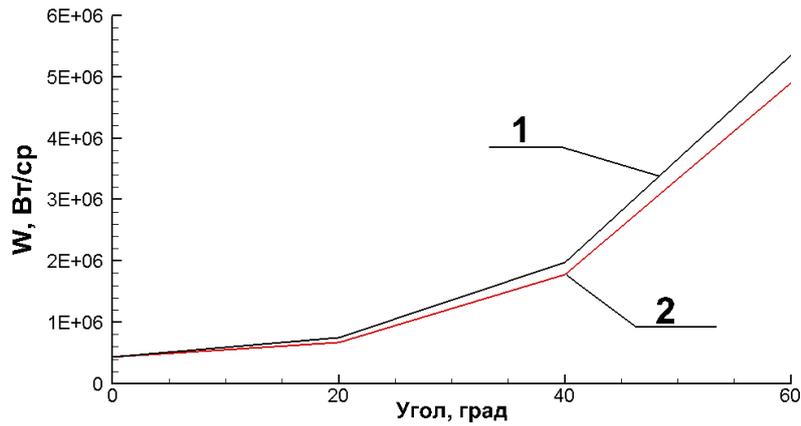


Рис. 10. Зависимость интегральной интенсивности излучения (диапазон $1 \div 9$ мкм) от угла атаки набегающего потока на высоте 100 км при различных направлениях наблюдения струи. 1 – направление вдоль оси Z, 2 – направление вдоль оси Y

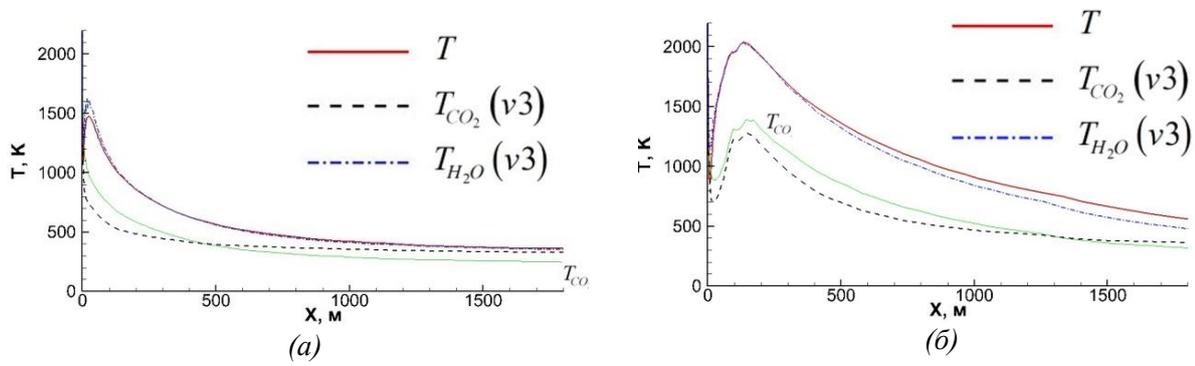
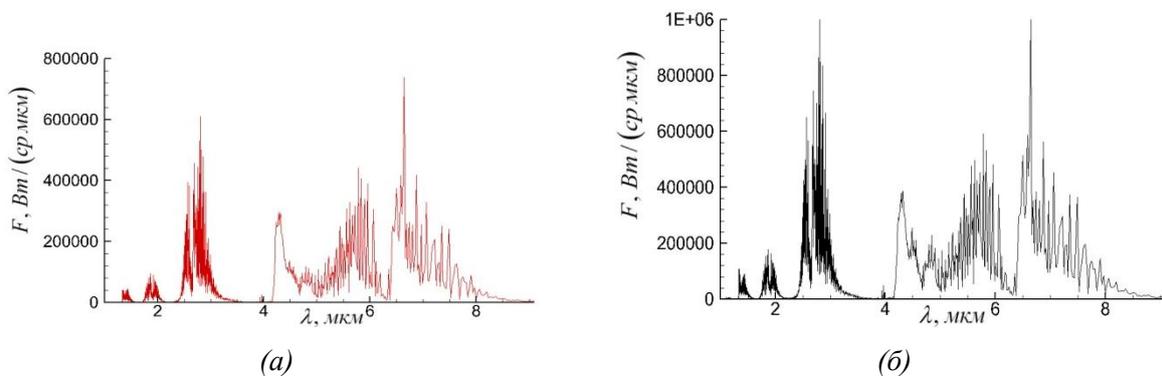


Рис. 11. Зависимость температур в середине слоя смешения с наветренной стороны струи от координаты X, направленной вдоль оси сопла, при различных углах атаки набегающего потока на высоте 100 км. (а) – 0° , (б) – 60°

Указанный эффект проявляется и на высоте 115 км (рис. 12, 13), на которой колебательная неравновесность проявляется еще сильнее (рис. 14). Заметим, что в районе 2.7 мкм излучение связано не только с $T_{H_2O}(\nu_3)$, но с переходами с верхних уровней $2\nu_2 + \nu_3$, $\nu_1 + \nu_3$ CO_2 , поэтому сильная колебательная неравновесность CO_2 несколько сглаживает преобладающий рост излучения в этом диапазоне.



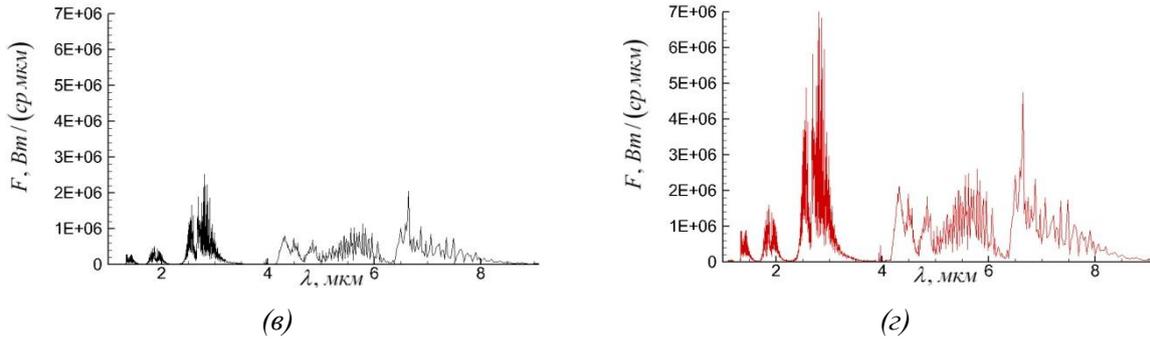


Рис. 12. Спектральная интенсивность излучения на высоте 115 км при различных углах атаки набегающего потока. (а) – 0°, (б) – 20°, (в) – 40°, (г) – 60°

Очень важно отметить, что интегральная интенсивность излучения в диапазоне 1 ÷ 9 мкм на высотах 100 и 115 км практически совпадает (сравните рис. 13 и рис. 10), как для нулевого угла атаки, так и для больших углов.

Кроме того, на всех рассмотренных высотах интенсивность излучения факела слабо зависит от направления наблюдения (сравните линии 1 и 2 на рис. 6, 10 и 13).

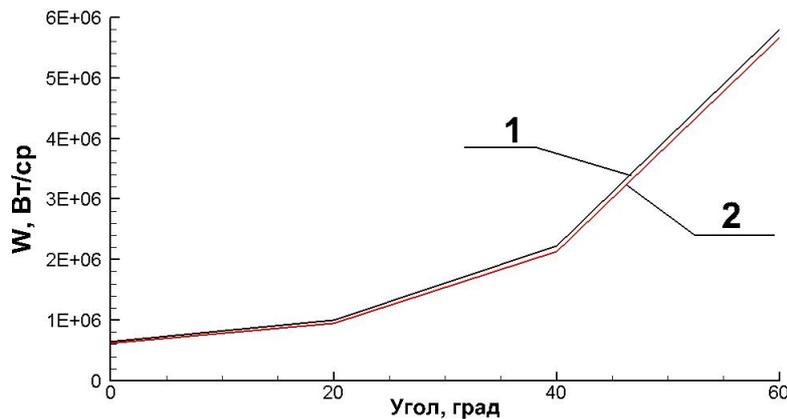


Рис. 13. Зависимость интегральной интенсивности излучения (диапазон 1 ÷ 9 мкм) от угла атаки набегающего потока на высоте 115 км при различных направлениях наблюдения струи. 1 – направление вдоль оси Z, 2 – направление вдоль оси Y

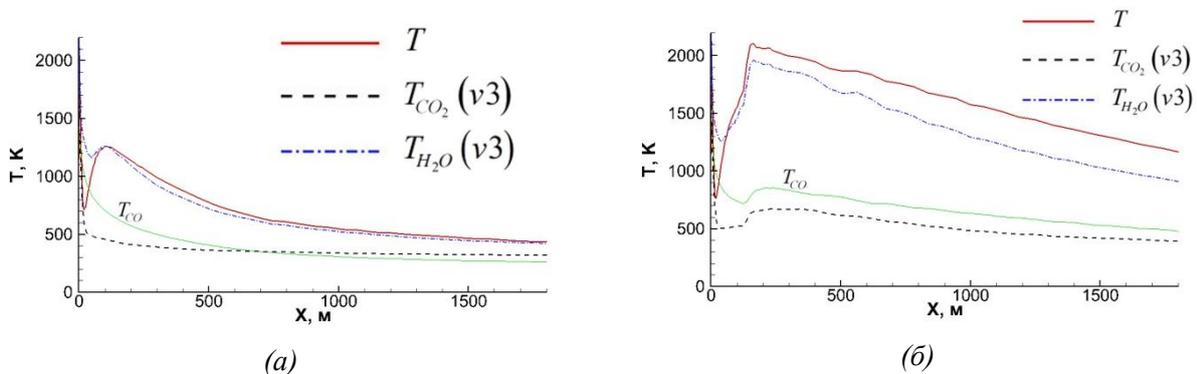


Рис. 14. Зависимость температур в середине слоя смешения с наветренной стороны струи от координаты X, направленной вдоль оси сопла при различных углах атаки набегающего потока, на высоте 115 км. (а) – 0°, (б) – 60°

Интересно проанализировать, как влияет выбор коэффициентов скоростей энергообмена на результаты расчета. Большая часть расчетов проводилась с использованием спра-

вочных данных из работы Блауера и Никерсона [23]. На рис. 15, 16 показано сравнение этих расчетов с результатами, полученными при использовании коэффициентов скоростей из работ Булгаковой, Ачасова и Рагозина [24, 25]. В целом, несмотря на существенно разный набор реакций энергообмена и коэффициентов скоростей, наблюдается хорошее совпадение результатов расчета, как для нулевого угла (рис. 15) так и для большого угла 60° (рис. 16), как для температур, так и для интенсивности излучения. Основное отличие приходится на линию CO в районе 4.7 мкм. Вероятно, это обусловлено тем, что в [24, 25] выше скорость V-T обмена CO, а также V-V' обмена CO с N_2 , который замораживается существенно быстрее остальных колебательных мод. Но, несомненно, это утверждение требует более тщательной проверки.

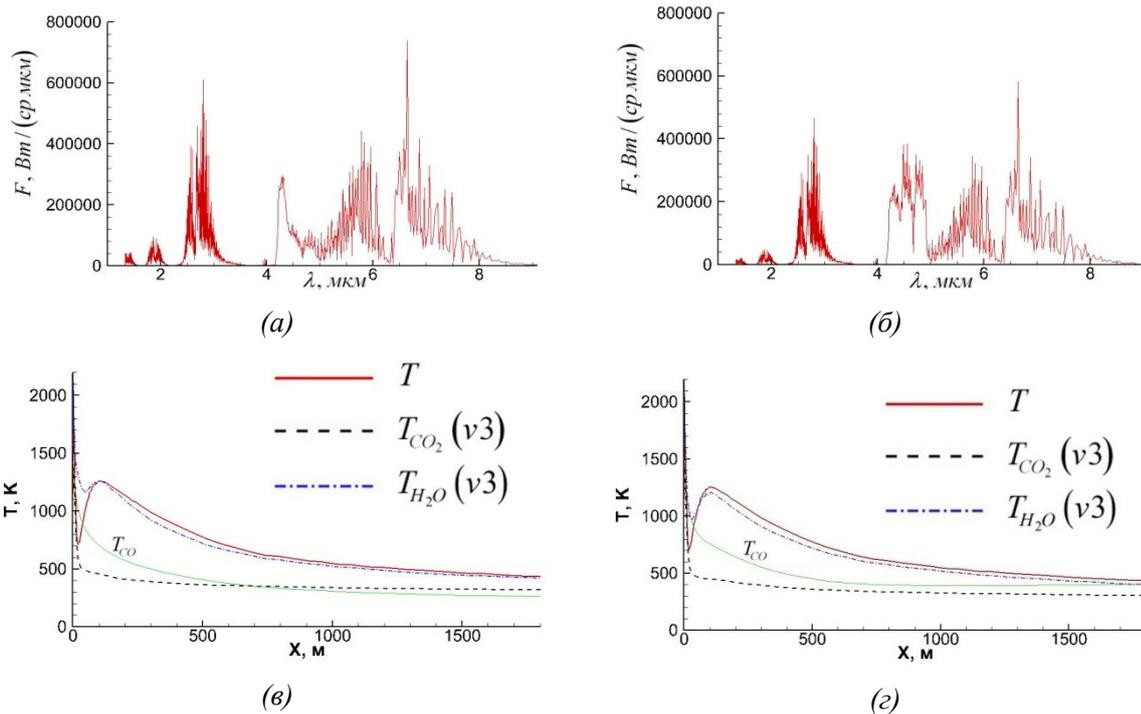
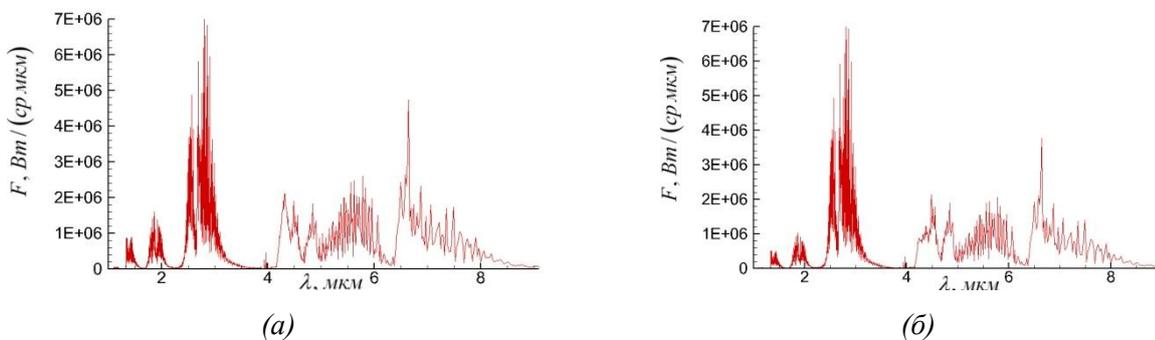


Рис. 15. Высота 115 км. Спектральная интенсивность излучения (а), (б) и температуры в середине слоя смешения (в), (г) при нулевом угле атаки.

Результаты расчета при различных наборах констант колебательного энергообмена: (а), (в) – из [23]; (б), (г) – из [24, 25]



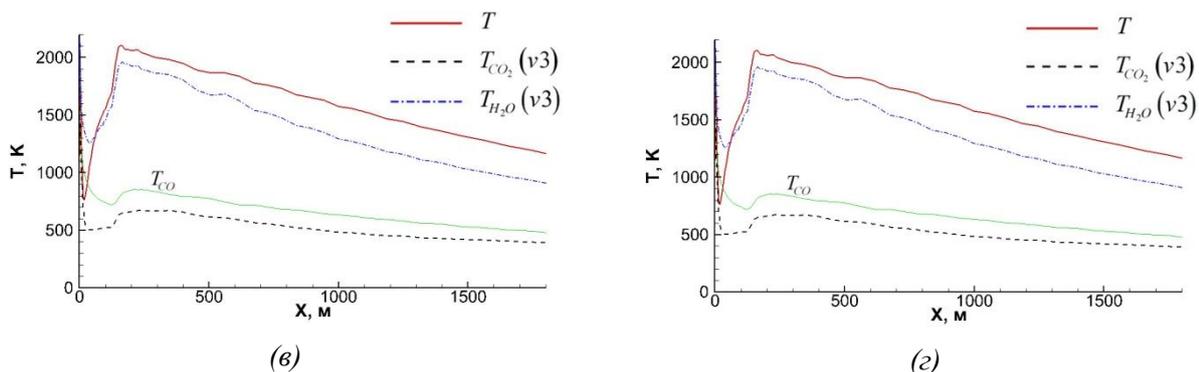


Рис. 16. Высота 115 км. Спектральная интенсивность излучения (а), (б) и температуры в середине слоя смешения (в), (г) при угле атаки 60°. Результаты расчета при различных наборах констант колебательного энергообмена: (а), (в) – из [23]; (б), (г) – из [24, 25]

Рисунок 17 показывает, что влияние сносящего потока на струю на высоте 115 км существенно слабее, чем на высоте 80 км. Это связано с гораздо большим перепадом давления. Степень нерасчетности на высоте 115 км составляет около 7еб, а на высоте 80 км – ~ 30 000).

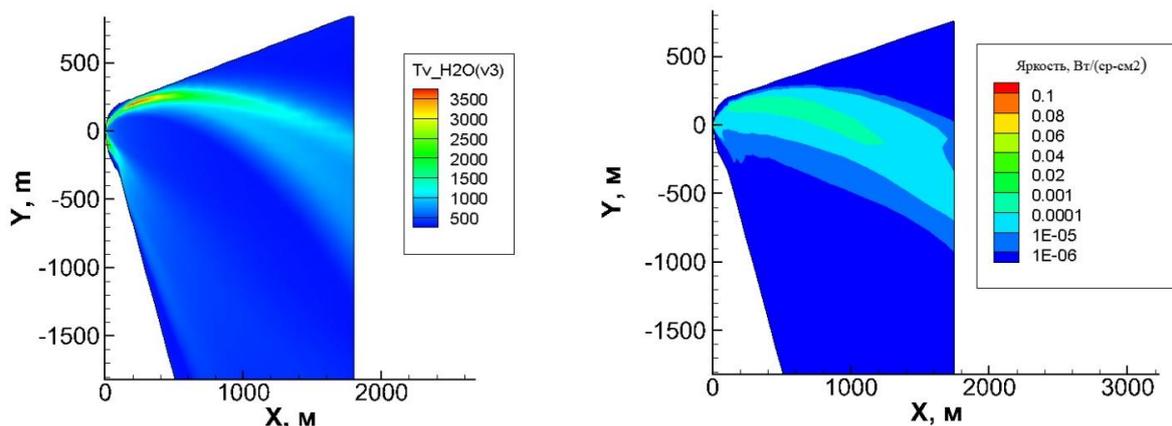


Рис. 17. Пространственное распределение температуры $T_{H_2O}(v_3)$ и яркости струи в диапазоне $2.7 \div 2.9$ мкм в плоскости XY при угле атаки набегающего потока равном 60° на высоте 115 км

Вариант 4

Струя модельного твердотопливного двигателя с следующими параметрами.

Таблица 4

Параметры на срезе сопла

T_a , К	U_a , м/с	R_a , м	P_a , атм	H ₂	H ₂ O	CO	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

Химический состав задан в массовых долях (для газа – без учета частиц Al₂O₃). Частицы разбиты на 10 групп размером от 0.5 мкм до 7 мкм. Рассматривались те же высоты и скорости внешнего потока, что и в предыдущем варианте.

На рисунке 18 показана зависимость интегральной интенсивности излучения в диапазон 1 ÷ 9 мкм от угла атаки набегающего потока на 4 высотах: 60, 80, 100 и 115 км. Очевидно, что высота полета очень слабо влияет на эту величину практически для всех рассмотренных углов атаки.

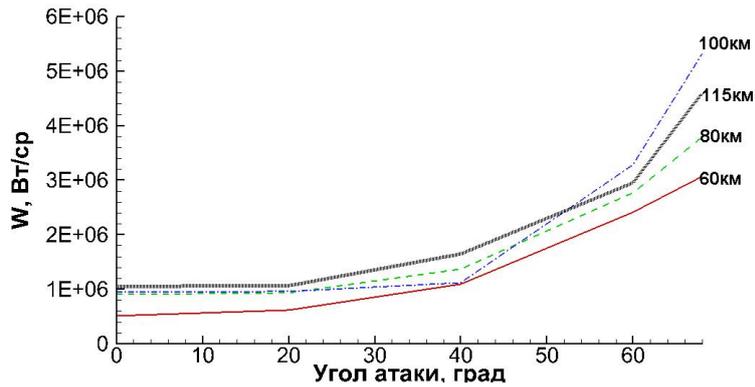


Рис. 18. Зависимость интегральной интенсивности излучения (диапазон $1 \div 9$ мкм) от угла атаки набегающего потока на высотах от 60 до 115 км при направлении наблюдения вдоль оси Y

Поведение спектральной интенсивности на высоте 80 км (рис.19) носит достаточно сложный характер.

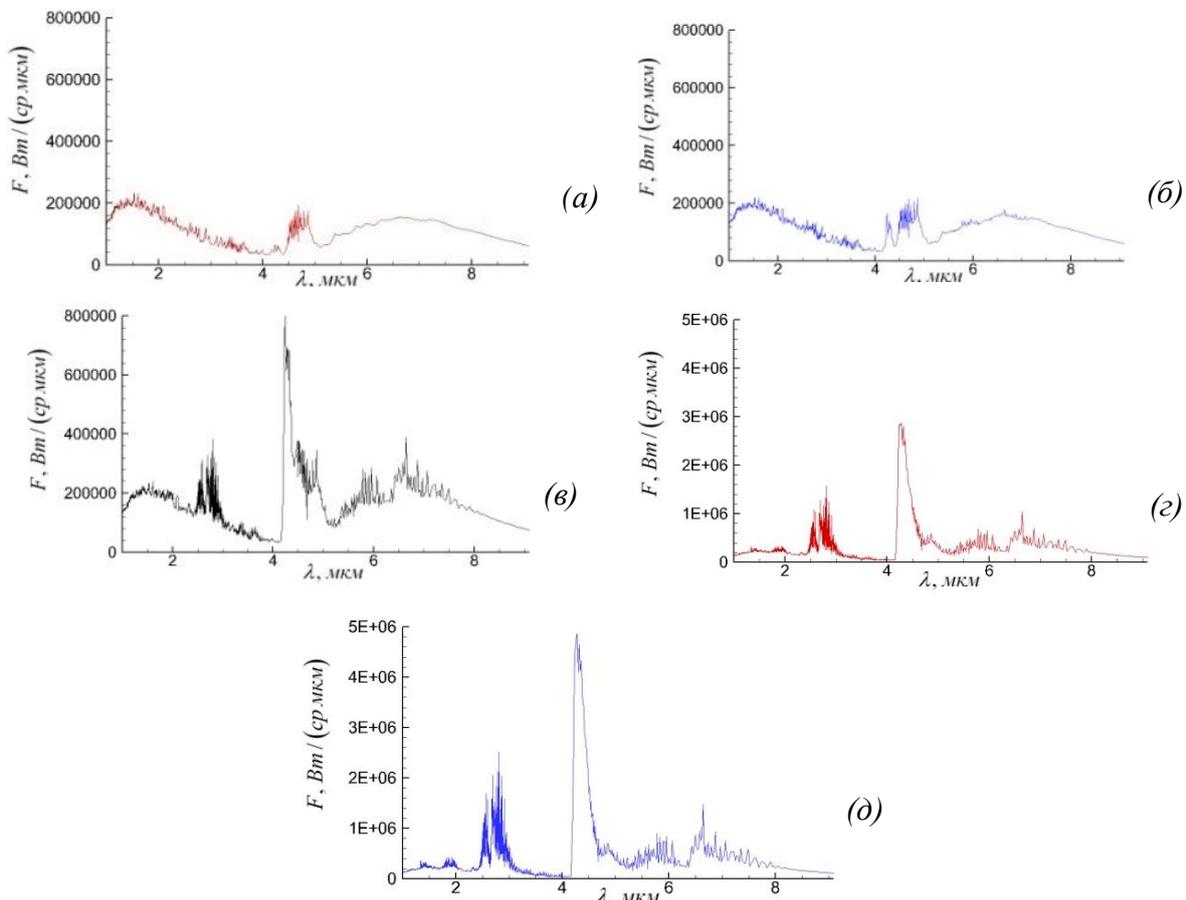


Рис. 19. Спектральная интенсивность излучения на высоте 80 км при различных углах атаки набегающего потока. (а) – 0° , (б) – 20° , (в) – 40° , (г) – 60° , (д) – 68°

При углах атаки до $\sim 20^\circ$ основную роль в излучении играют частицы; при этом имеется 2 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 CO (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 бóльших углах атаки резко усиливаются линии H_2O (2.7 мкм, в меньшей степени 6.5 мкм) и CO_2 (4.3 мкм и 2.7 мкм) и 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 H_2 и CO с кислородом воздуха и увеличению концентрации продуктов сгорания – H_2O и CO_2 (рис. 20)

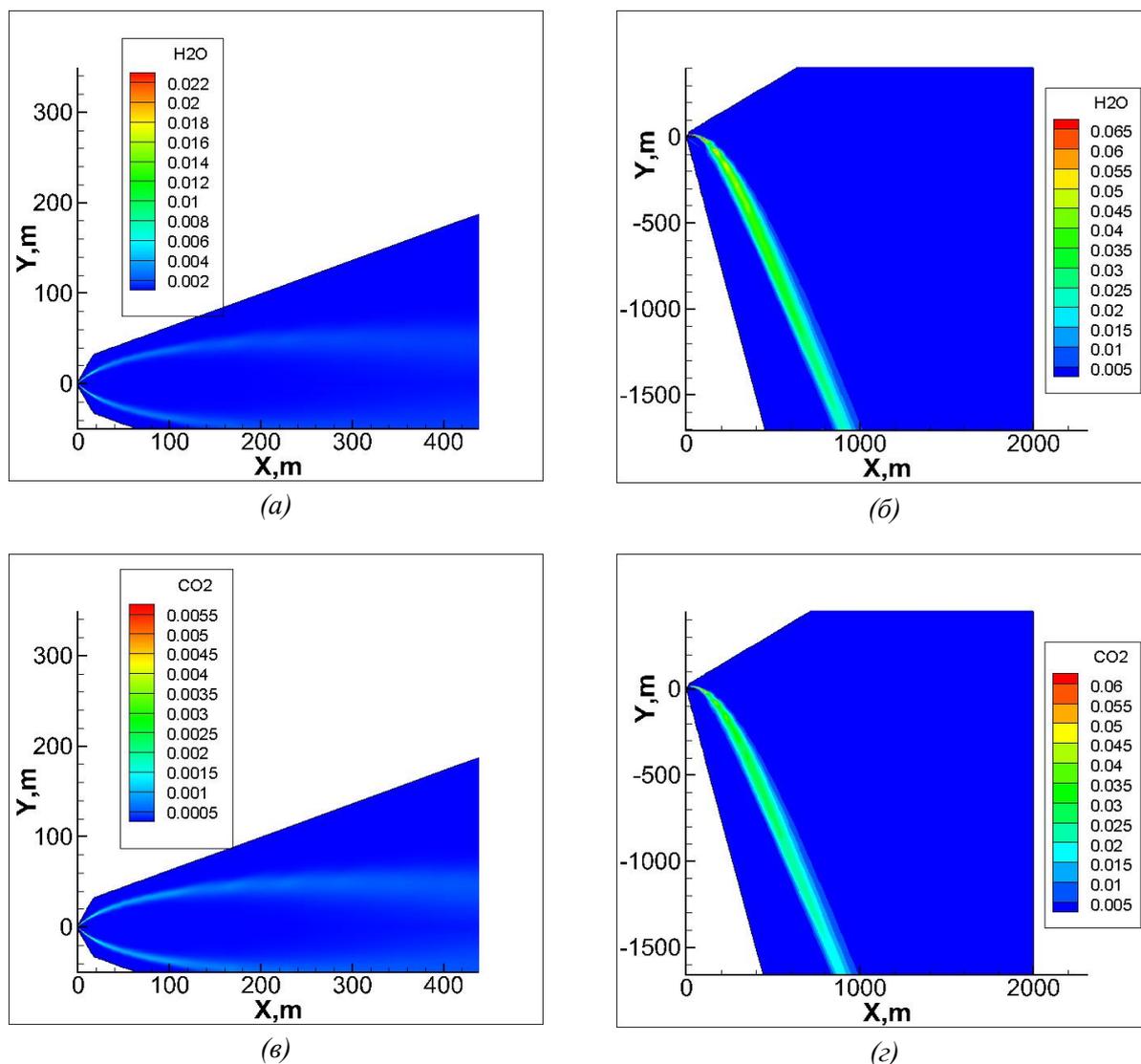


Рис. 20. Высота 80 км. Пространственное распределение массовых долей H_2O (а, б) и CO_2 (в, з) при двух различных углах атаки: (а, в) – 0° , (б, з) – 60°

Очень интересно поведение частиц. На рис. 21 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.

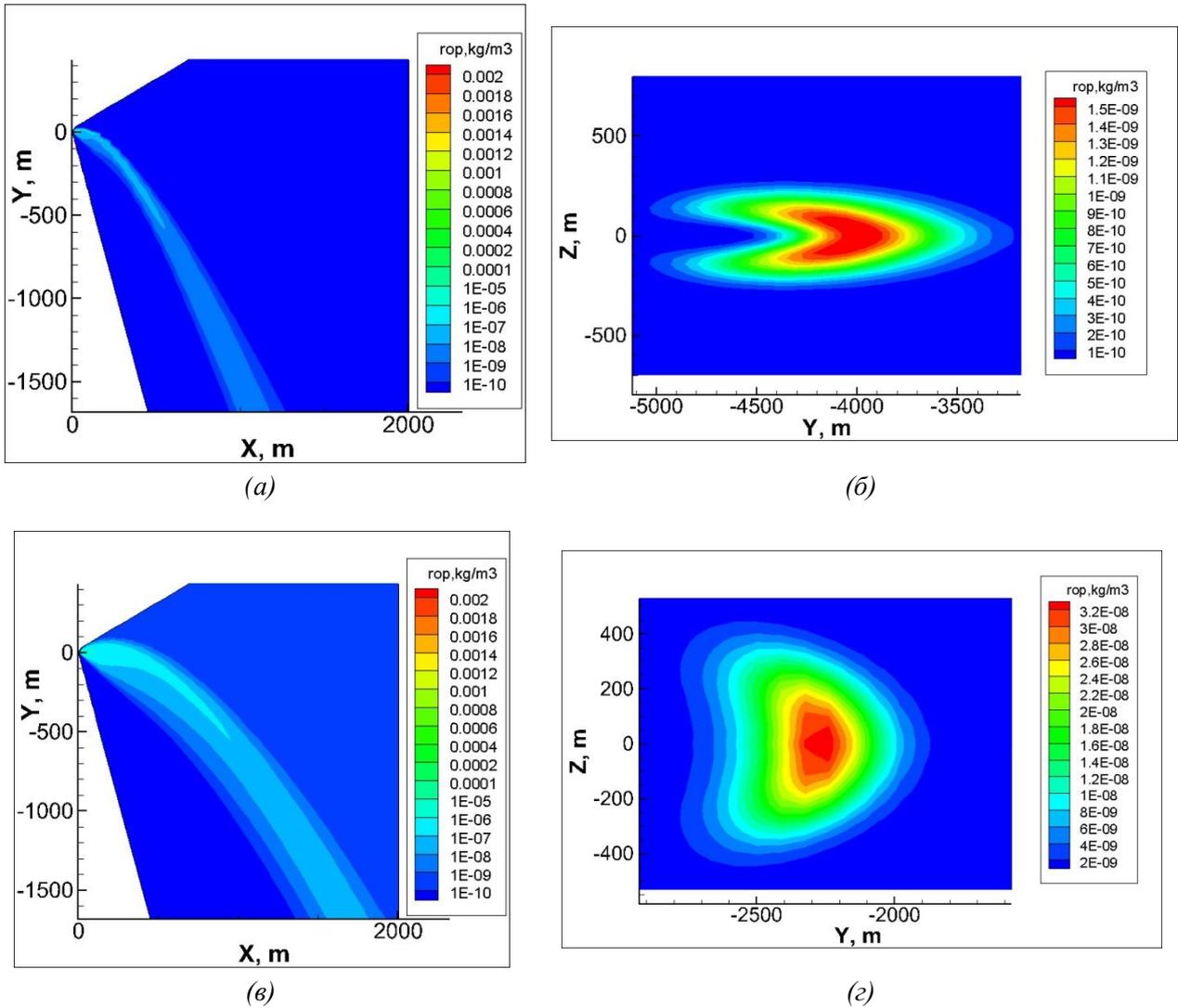


Рис. 21. Высота 80 км. Пространственное распределение плотности частиц Al_2O_3 при угле атаки набегающего потока 68° для группы частиц минимального размера 0.5 мкм (а), (б) и группы частиц максимального размера 7 мкм (в), (г) в разных плоскостях течения. (а), (в) – в плоскости симметрии XY ($Z=0$); (б), (г) – в плоскости YZ в последнем расчетном сечении ($X=2000$ м)

На высоте 100 км излучение ведет себя, в целом, так же, как и на высоте 80 (рис. 22). Только при малых углах атаки возрастает роль излучения CO (4.7 мкм). Кроме того, с ростом угла атаки наблюдается преобладающее 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 (см. выше).

Таблица 5 показывает, что догорание H_2 и CO приводит к существенному возрастанию концентраций H_2O и CO_2 в струе особенно при больших углах атаки (Для сравнения: на срезе сопла массовая доля H_2O равна $0.12e-4$, а CO_2 – $0.8e-5$).

Таблица 5

Высота 100км

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

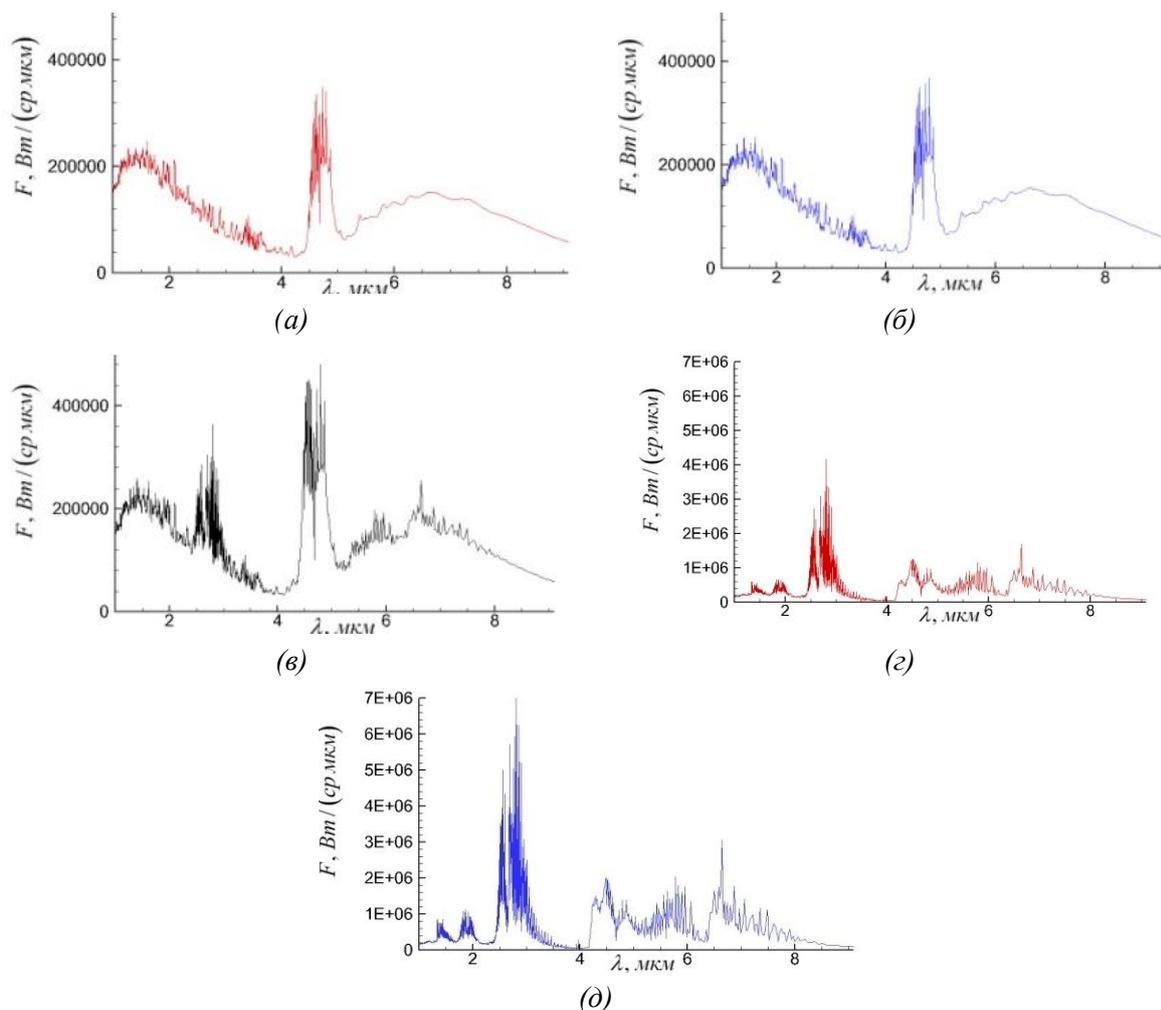


Рис. 22. Спектральная интенсивность излучения на высоте 100 км при различных углах атаки набегающего потока. (а) – 0°, (б) – 20°, (в) – 40°, (г) – 60°, (д) – 68°

Более подробная информация о распределении концентраций H_2O и CO_2 при угле 40° показана на рис. 23, (а, б). На этом же рисунке показано распределение плотности тяжелых частиц Al_2O_3 (в). Видно, что частицы практически не сносятся внешним потоком и летят параллельно оси сопла. Распределение яркости в диапазоне 1 ÷ 9 мкм (г) обусловлено излучением как частиц, так и газа, и поэтому близко к симметричному относительно оси сопла в направлении наблюдения по оси Z.

На высоте 115 км при малых углах атаки еще больше возрастает роль излучения CO (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 CO (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 O_2 . Кроме того, появляется атомарный водород. В результате, как видно из рис. 24 и табл. 6, существенно усиливается догорание и, следовательно, возрастают концентрации CO_2 и H_2O . Связано это с тем, что увеличение концентраций радикалов O и H уменьшает время латентной стадии горения.

Рисунок 24 показывает, что при угле атаки 60° учет реального состава атмосферы приводит к увеличению полученного в расчете излучения в районе 2.7 мкм почти в 4 раза. При этом вследствие сильной колебательной неравновесности $CO_2(v_3)$ излучение в диапазоне 4.3 мкм практически не меняется.

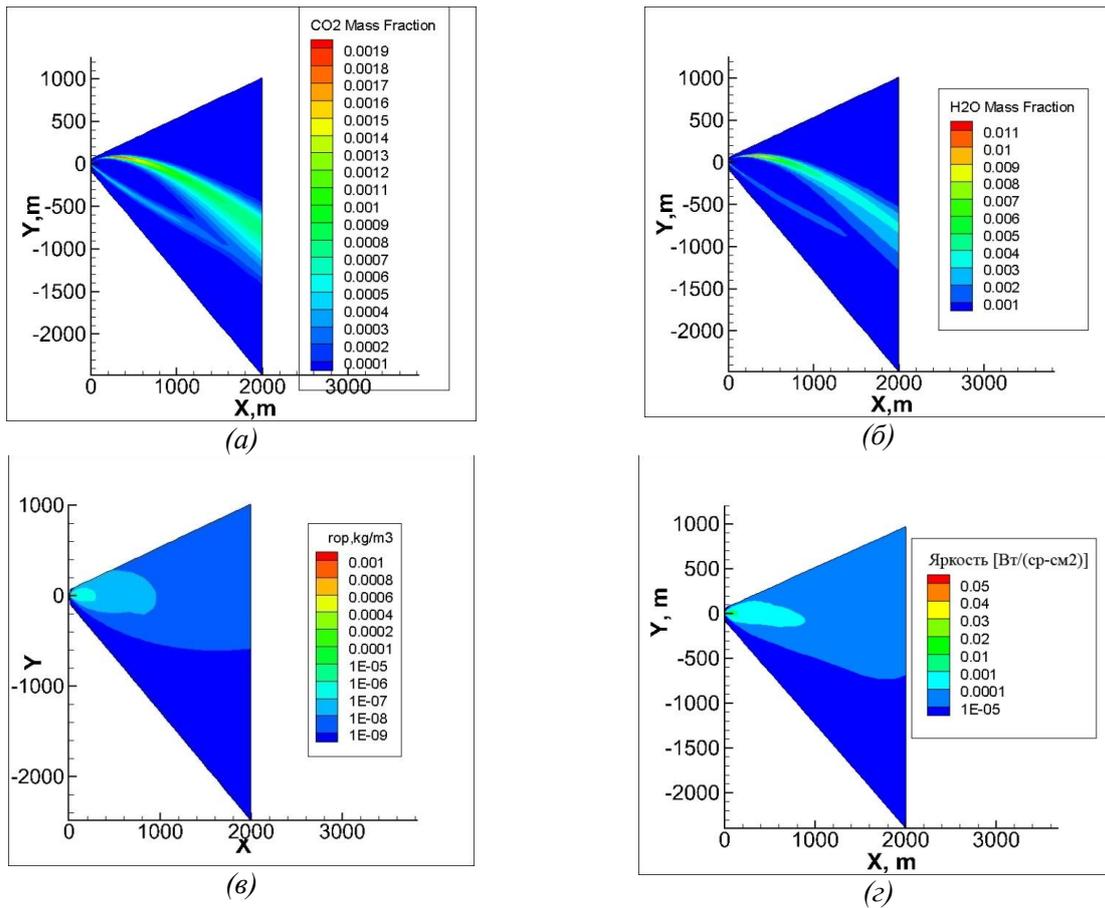


Рис. 23. Высота 100 км. Пространственное распределение массовых долей CO_2 (а) и H_2O (б), плотности крупных частиц Al_2O_3 (7 мкм)(в) и яркости струи в диапазоне $1 \div 9$ мкм (г) при угле атаки набегающего потока 40° в плоскости симметрии XY ($Z=0$)

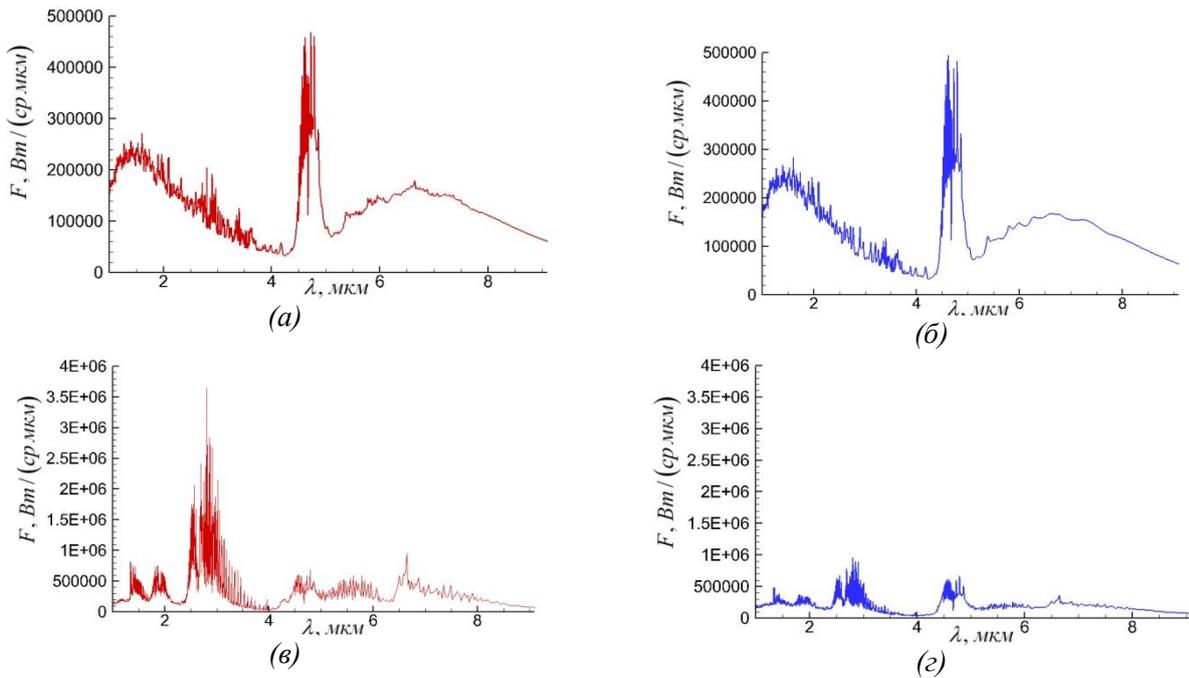


Рис. 24. Спектральная интенсивность излучения на высоте 115 км при углах атаки набегающего потока. (а, б) – 0° , (в, г) – 60° . Расчеты (а, в) – с учетом реального химического состава атмосферы; (б, г) – без учета реального химического состава атмосферы

Таблица 6

Высота 115 км

Угол атаки, град	0	20	40	60	68
$C_{CO_2,max}$	0.006 (8e-5)	0.0065 (8e-5)	0.0065 (0.0001)	0.007 (0.0011)	0.008 (0.0021)
$C_{H_2O,max}$	0.028 (0.0007)	0.031 (0.0007)	0.032 (0.00088)	0.032 (0.0089)	0.033 (0.015)

В скобках – результаты расчета без учета реального химического состава атмосферы.

Анализ влияния выбора коэффициентов скоростей энергообмена представлен на рис. 25. Видно, что при использовании данных из работы Блауера и Никерсона [23] температура $T_{H_2O}(\nu\bar{3})$ в расчете получается несколько выше, чем при использовании коэффициентов скоростей из работ Булгаковой, Ачасова и Рагозина [24, 25]. Однако, интенсивность излучения в районе 2.7 мкм возрастает не очень сильно (примерно, в 1.5 раза).

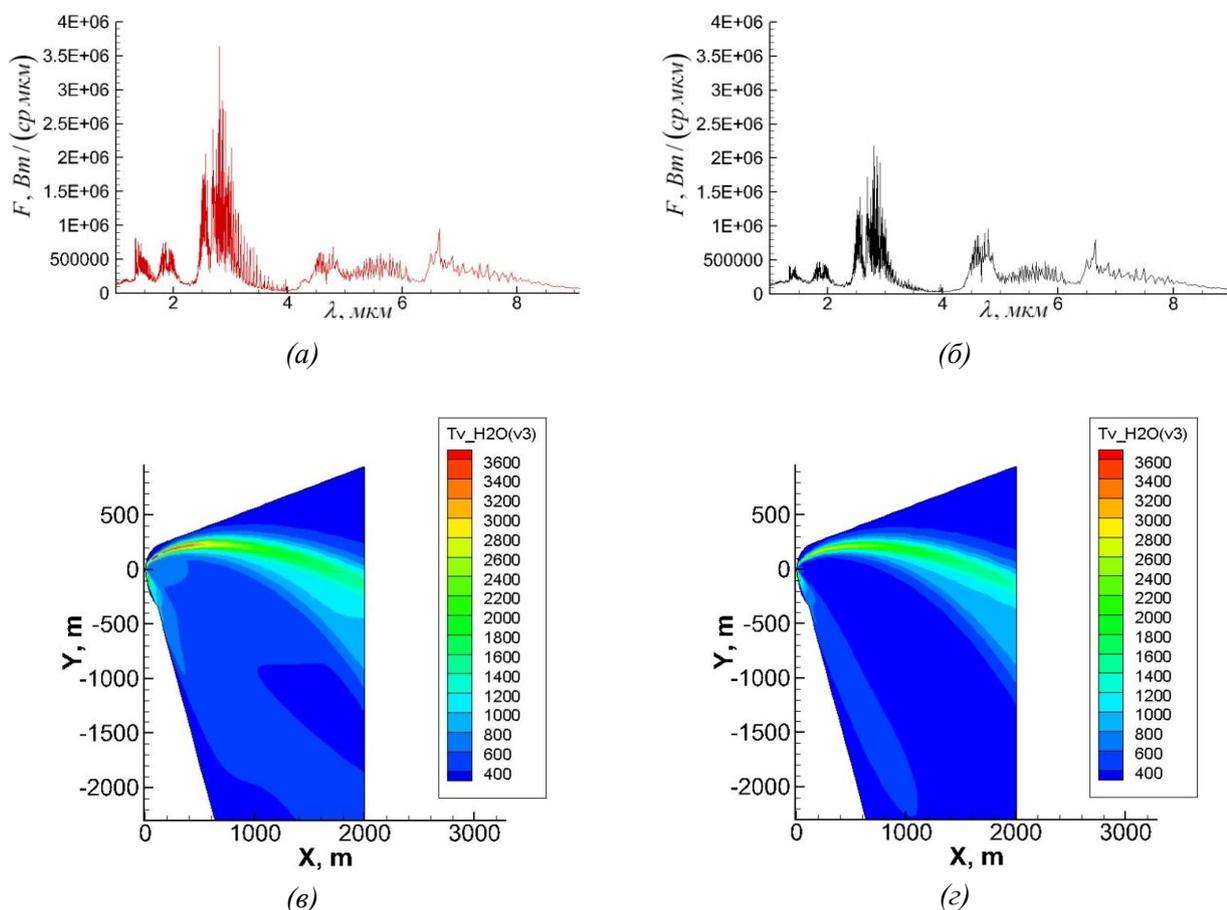


Рис. 25. Высота 115 км. Спектральная интенсивность излучения (а, б) и пространственное распределение колебательной температуры $T_{H_2O}(\nu\bar{3})$ (в, г) при угле атаки 60°. Результаты расчета при различных наборах констант колебательного энергообмена: (а), (в) – из [23],); (б), (г) – из [24, 25]

Как показано на рис. 26, яркость излучения в диапазоне 2.7 ÷ 2.9 мкм отслеживает поворот струи в сносящем потоке, т.к. в этом диапазоне преобладает излучение газа, а не частиц.

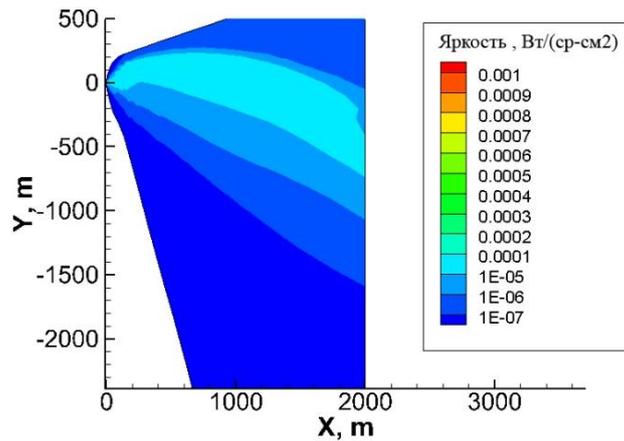


Рис. 26. Высота 115 км. Пространственное распределение яркости струи в диапазоне 2.7 ÷ 2.9 мкм при угле атаки набегающего потока 60°. Направление наблюдения вдоль оси Z

Распределение частиц на такой высоте очень слабо зависит от внешнего потока. Как мелкие, так и крупные частицы практически не отклоняются от оси сопла (рис. 27). Правда, поперечное сечение потока частиц несколько вытягивается в сторону сносящего потока и приобретает овальную форму.

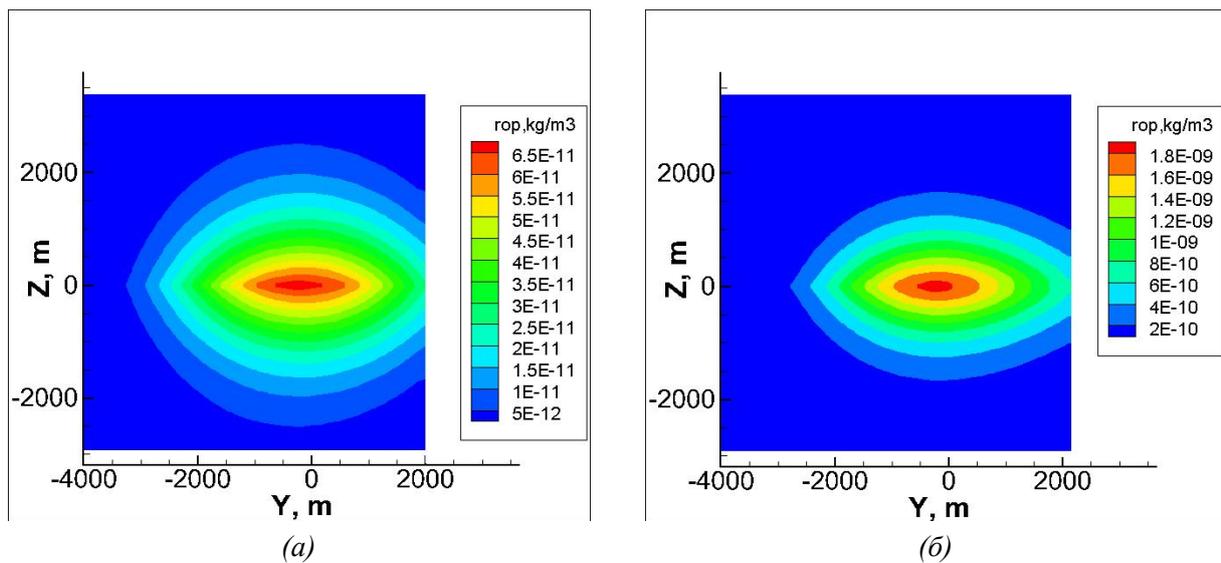


Рис. 27. Высота 115 км. Пространственное распределение плотности частиц Al_2O_3 в поперечной плоскости YZ при $X=2000$ м при угле атаки набегающего потока 60°. (а) – плотность мелких частиц (0.5 мкм); (б) – плотность крупных частиц (7 мкм)

Тестовые расчеты и сравнительный анализ графиков на рис. 19, 22, 24 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.

10. Заключение

Разработана методика расчета газодинамики и излучения термически и химически неравновесных газовых и гетерогенных потоков в 3D постановке.

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).

Численное решение уравнений для дискретных частиц основано на комплексном сочетании подходов Лагранжа и Эйлера.

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 км 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 наблюдается существенный рост интенсивности излучения, причем основные спектральные линии излучения (CO_2 , H_2O 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 $T_{\text{CO}_2}(\nu_3)$ и T_{CO} существенно отстают от поступательной температуры, в отличие от $T_{\text{H}_2\text{O}}(\nu_3)$, 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 больших углов;

4) интенсивность излучения факела слабо зависит от направления наблюдения;

5) в гетерогенных струях влияние высоты полета (в пределах от 60 км 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 2 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 CO (4.7 мкм); линии H_2O и CO_2 практически отсутствуют;

7) при больших углах атаки резко усиливаются линии H_2O (2.7 мкм, в меньшей степени 6.5 мкм) и CO_2 (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 CO_2 и H_2O ; связано это с тем, что увеличение концентраций радикалов O и H уменьшает время латентной стадии горения;

10) чистое излучение частиц (без учета излучения газа) практически не зависит от высоты полета и от угла атаки набегающего потока;

11) в рассмотренном диапазоне рабочих параметров разброс справочных данных при задании коэффициентов скоростей колебательного энергообмена не очень сильно влияет на результаты расчета как колебательных температур основных излучающих газов, так и на неравновесное излучение.

Литература

1. Anfimov, N.A., Karabadjak, G.F., Khmelinin, B.A., Plastinin, Y.A., and 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., and Hiers, III. R. "Modeling of multiphase alumina-loaded jet flow fields", AIAA Paper 98-3462, 1998.
3. Пластинин Ю.А. Моделирование излучения химически реагирующих двухфазных сверхзвуковых недорасширенных струй. Космонавтика и ракетостроение. № 3 (36), 2004, С. 18–26.
4. Zavelevich F.S., Molchanov A.M., and Ushakov N.N. "Computation of Gas and Multiphase Supersonic Jets with Nonequilibrium Processes", Journal of Thermophysics and Heat Transfer, Vol. 29, No. 3 (2015), pp. 587–593.
5. 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. Выпуск № 3–1 (34) / 2012.
6. Burt J.M. and Boyd I.D. "High Altitude Plume Simulations for a Solid Propellant Rocket", AIAA Journal, Vol. 45, No. 12 (2007), pp. 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, № 10, С. 448–455.
8. 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/>
9. Wilke C.R. "A Viscosity Equation for Gas Mixtures // Journal of Chemical Physics," 1950. Vol. 18. No. 4. Pp. 517–519.
10. Blottner F. G., Johnson M., Ellis M. "Chemically Reacting Viscous Flow Program for Multi-Component Gas Mixtures," Sandia Laboratories, Albuquerque, NM, Rept. SC-RR-70-754. Dec. 1971.
11. McBride B.J., Gordon S., Reno M.A., "Coefficients for Calculating Thermodynamic and Transport Properties of Individual Species," NASA Technical Memorandum 4513, October 1993.
12. Molchanov A.M. and Bykov L.V. "Three-Equation K - ϵ - V_n Turbulence Model for High-Speed Flows," AIAA Paper 2013-3181. 30 p.
13. 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.
14. Leone S.R. "Rate Coefficients for Vibrational Energy Transfer Involving the Hydrogen Halides," Journal of Physical and Chemical Reference Data, Volume 11, Issue 3, July 1982, pp. 953–996.
15. Хендерсон Р. Влияние кинетики процесса кристаллизации на энергетические характеристики ракетного двигателя // ПТК. Т15. № 4. 1977. С. 183–185.
16. Henderson, C. B., "Drag Coefficient of Spheres in Continuum and Rarefied Flows," AIAA Journal, Vol. 14, No. 6, June 1976, pp. 707–708.
17. Стернин, Л.Е. Двухфазные моно- и полидисперсные течения газа с частицами. -М., "Машиностроение", -1980, 172 с.
18. Molchanov A.M. "Numerical Simulation of Supersonic Chemically Reacting Turbulent Jets," 2011. AIAA Paper 2011-3211, 37 p.
19. Connaire M.O., Curran H.J., Simmie J.M., Pitz W.J., Westbrook C.K. "A Comprehensive Modeling Study of Hydrogen Oxidation. International Journal of Chemical Kinetics," 2004. Vol. 36. Pp. 603–622.

20. Denison J.J., Lamb W.D., Bjorndahl E.Y., Wong and Lohn P.D. "Solid Rocket Exhaust in the Stratosphere: Plume Diffusion and Chemical Reactions," *Journal of Spacecraft and Rockets*, Vol. 31, 1994, pp. 435–442.
21. Трунов А.П., Завелевич Ф.С. Взаимодействие газа и частиц в сверхзвуковой струе на разных высотах // *Вестник Московского авиационного института*. 1995. Т. 2. № 1. С. 59–62.
22. Vitkin E. I., Karelin V. G., Kirillov A. A., Suprun A. S. and Khadyka Ju. V. "A Physico-Mathematical Model of Rocket Exhaust Plumes," *Int. J. Heat Mass Transfer*. Vol.40, No 5. Pp. 1227–1241. 1997.
23. Blauer J.A., Nickerson G.R. "A Survey of Vibrational Relaxation Rate Data for Processes Important to CO₂-N₂-H₂O Infrared Plume Radiation," *Ultrasystems, Incorporated, Technical rept. Report Number 0455177*. 1973. 72 p.
24. Ачасов О.В., Рагозин Д.С. Константы колебательного энергообмена в лазерно-активных средах CO₂-ГДЛ с добавками O₂, #2, H₂O, CO. Препринт № 16, ИТМО, Минск, Белоруссия, 1986.
25. Булгакова Н.М. Физико-химическое взаимодействие молекулярных газов с газом верхней атмосферы. Диссертация на соискание ученой степени к.ф.-м.н., Новосибирск, Институт теплофизики СО РАН, 1985. -177 с.

Статья поступила в редакцию 2 декабря 2016 г.