

УДК 535.15, 533.6.011, 535.233

## Расчет газодинамики и ИК-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 и др. характеризуются ярко выраженным отклонением от равновесия между колебательными и поступательно-вращательными степенями свободы.

Радиационные процессы в таких системах имеют существенное влияние на энергетический баланс.

Газовые и гетерогенные струи, взаимодействующие со сверхзвуковым внешним потоком, натекающим на них под большим углом атаки, применяются во многих областях авиационно-космической 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, получается как бы две струи: частиц,

летающих параллельно оси сопла двигателя, и струи газа, поворачивающейся 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 предыдущих работах автора [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 ( $10^6$ – $10^8$ ). 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 предыдущих работах автора [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 предыдущих работах авторов [4, 8, 15] и поэтому здесь не приводятся.

Полная энергия включает внутреннюю  $e$  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 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  $\rho$  – плотность газовой смеси;  $u_j$  – компонента скорости в  $j$ -ом направлении;  $C_s$  – массовая доля компонента  $s$ ;  $\theta_m$  – 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  $m$ -я колебательная мода;  $R_U$  – универсальная газовая постоянная.

При расчете турбулентных течений используется трехпараметрическая  $K$ - $\varepsilon$ - $V_n$  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 Н, С, О, N, эти процессы подробно в [8].

В данной работе в систему добавлены уравнения, описывающие межмолекулярные  $V$ - $V'$  процессы с участием HCl, термическое состояние

Таблица 1. V-V процессы с участием HCl [11]

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. $HCl(1) + H_2O(000) = HCl(0) + H_2O(100)$

которого важно для ряда научных и практических 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  $r_\alpha$ , плотности  $\rho_\alpha = n_\alpha \cdot m_\alpha$ , компонент скорости  $u_{\alpha,j}$  и температуры  $T_\alpha$ . 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

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

2) 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:

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

$$q_{conv,\alpha} = \rho_\alpha C_q (T_\alpha - T),$$

$$C_q = \frac{3}{2} \frac{Nu \cdot \lambda}{r_\alpha^2 \rho_{Al_2O_3}},$$

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

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

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

где  $\rho_{Al_2O_3}$  – плотность материала частиц;  $q_{cr}$  – удельная теплота фазового перехода;  $T_M = 2300$  К – температура начала равновесной кристаллизации;  $r_{cr,\alpha}$  – 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:

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Для расчета теплового излучения частиц  $Al_2O_3$  использовалась методика, описанная в [1, 3]. В этих работах показана важность учета агрегатного состояния частиц  $Al_2O_3$ , 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 много-

фазных 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 мкм, 3 мкм 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 температуры 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 кристаллизироваться 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 Завелевича 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.

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

$P_a$ , атм		$T_a$ , К		$U_a$ , м/с		Число Маха		Плотность $Al_2O_3$ для каждой группы, г/см <sup>3</sup>	
0.4		2500		2895		2.35		$9.07 \cdot 10^{-6}$	
<i>Мольный состав газовых компонентов на срезе сопла</i>									
CO	CO <sub>2</sub>	Cl	H	H <sub>2</sub>	H <sub>2</sub> O	HCl	N <sub>2</sub>	O	OH
0.2862	0.01073	$1.23 \cdot 10^{-3}$	$5.109 \cdot 10^{-3}$	0.414	$7.409 \cdot 10^{-2}$	0.1319	$7.67 \cdot 10^{-2}$	$1.628 \cdot 10^{-7}$	$6.408 \cdot 10^{-5}$

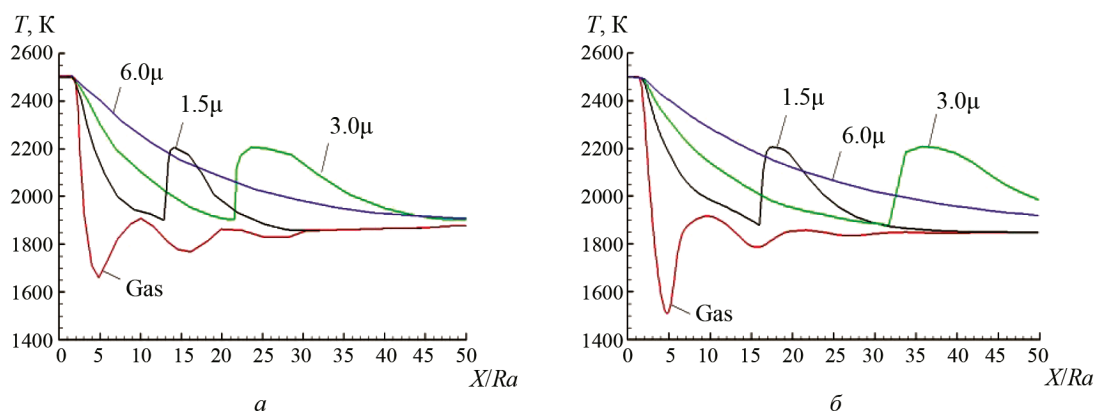
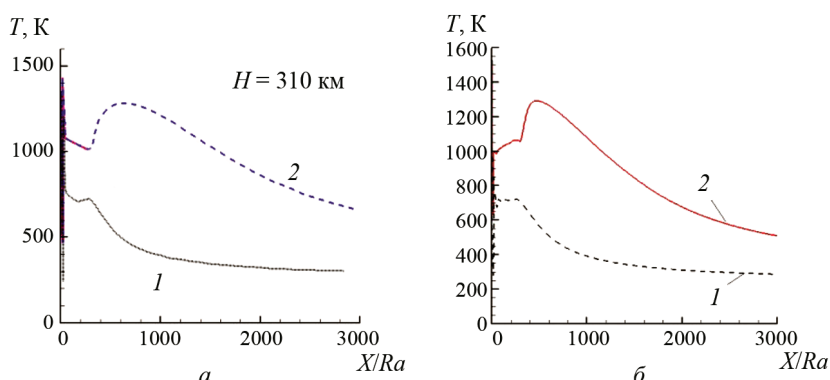


Рис. 1. Распределение температуры газа и частиц вдоль оси струи: а – расчет Родионова и др. [2]; б – расчет данной работы



**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; а – 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 течения струй (чисто газовой и гетерогенной) на высотах полета от 80 км до 115 км в диапазоне углов атаки от 0° до 68°.

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

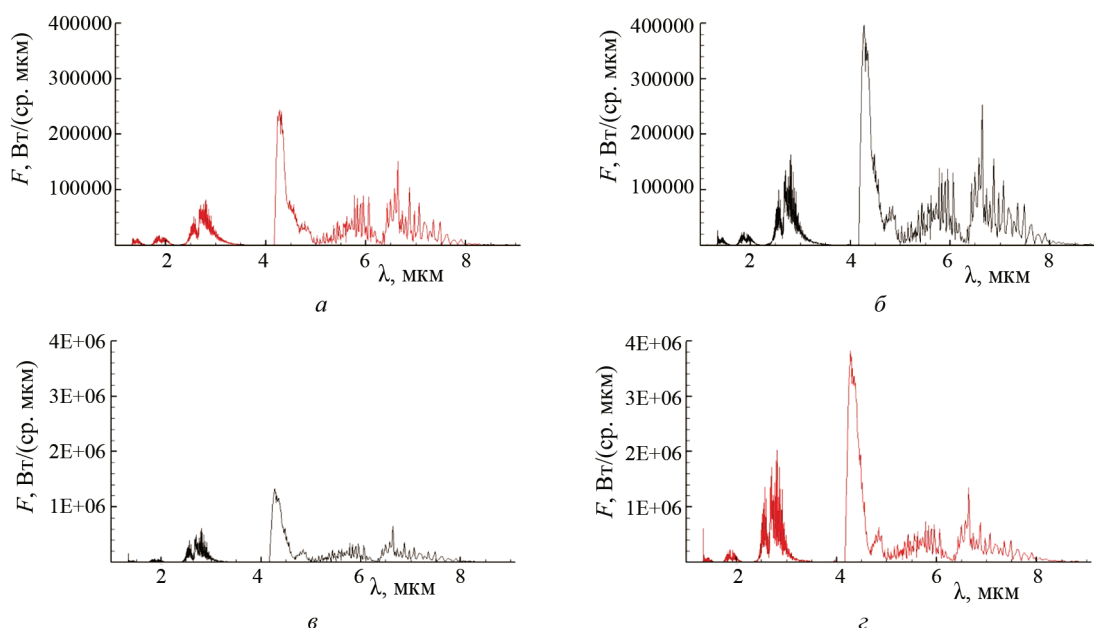
Параметры на срезе сопла представлены в табл. 3. Химический состав задан в мольных долях. Рассматривалось три высоты: 80 км (скорость внешнего потока 2600 м/с), 100 км (2800 м/с), 115 км (3000 м/с).

На рис. 3 показана зависимость спектральной интенсивности излучения на высоте 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<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O 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.

**Таблица 3.** Параметры на срезе сопла модельного ЖРД

$T_a$ , К	$U_a$ , м/с	$R_a$ , м	$P_a$ , атм	H <sub>2</sub>	H <sub>2</sub> O	CO	CO <sub>2</sub>	N <sub>2</sub>
2000	2500	0.5	0.3	0.05	0.4	0.05	0.15	0.35



**Рис. 3.** Спектральная интенсивность излучения на высоте 80 км при различных углах атаки набегающего потока: а – 0°; б – 20°; в – 40°; г – 60°

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  $T_{CO_2}(v_3)$  и  $T_{CO}$  оказываются существенно ниже поступательной температуры, в отличие от  $T_{H_2O}(v_3)$ , 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  $T_{H_2O}(v_3)$ , так и с переходами с верхних уровней  $2v_2 + v_3$ ,  $v_1 + v_3$   $CO_2$ . По этой причине преобладающий рост излучения в этом диапазоне несколько сглаживает сильная колебательная неравновесность  $CO_2$ .

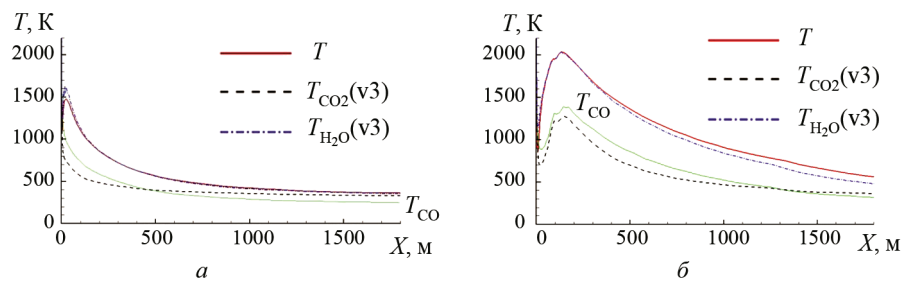
Очень важно отметить, что интегральная интенсивность излучения в диапазоне 1–9 мкм на высотах 100 и 115 км практически совпадает как для нулевого, так и для больших углов атаки.

**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  $Al_2O_3$ ). 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 рис. 5 показана зависимость интегральной интенсивности излучения в диапазоне 1–9 мкм от угла атаки

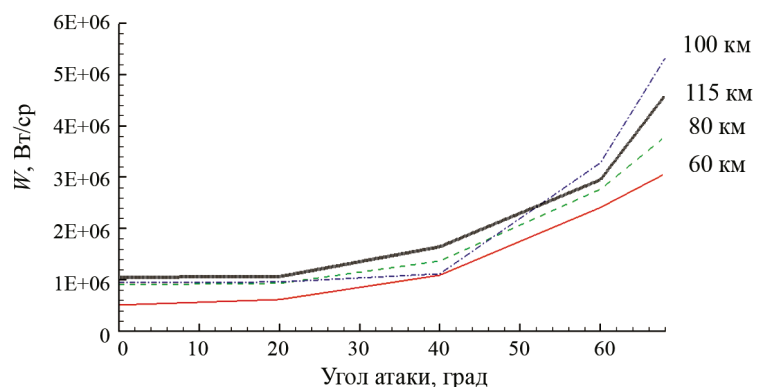


**Рис. 4.** Зависимость температур в середине слоя смешения с наветренной стороны струи от координаты  $X$ , направленной вдоль оси сопла, при различных углах атаки набегающего потока на высоте 100 км:  $a - 0^\circ$ ;  $b - 60^\circ$

набегающего потока на 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  $\sim 20^\circ$  основную роль в излучении играют частицы; при этом имеется два максимума: при  $\sim 1.5$  мкм (обусловлен горячей, но небольшой по размеру, областью вблизи среза сопла) и при  $\sim 7$  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).



**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  $Y$

**Таблица 4. Параметры на срезе сопла модельного твердотопливного двигателя**

$T_a$ , К	$U_a$ , м/с	$R_a$ , м	$P_a$ , атм	$H_2$	$H_2O$	$CO$	$CO_2$	$N_2$	$HCl$	$Al_2O_3$
1780	3000	0.5	0.3	0.042	0.12e-4	0.57	0.8e-5	0.378	0.01	0.4

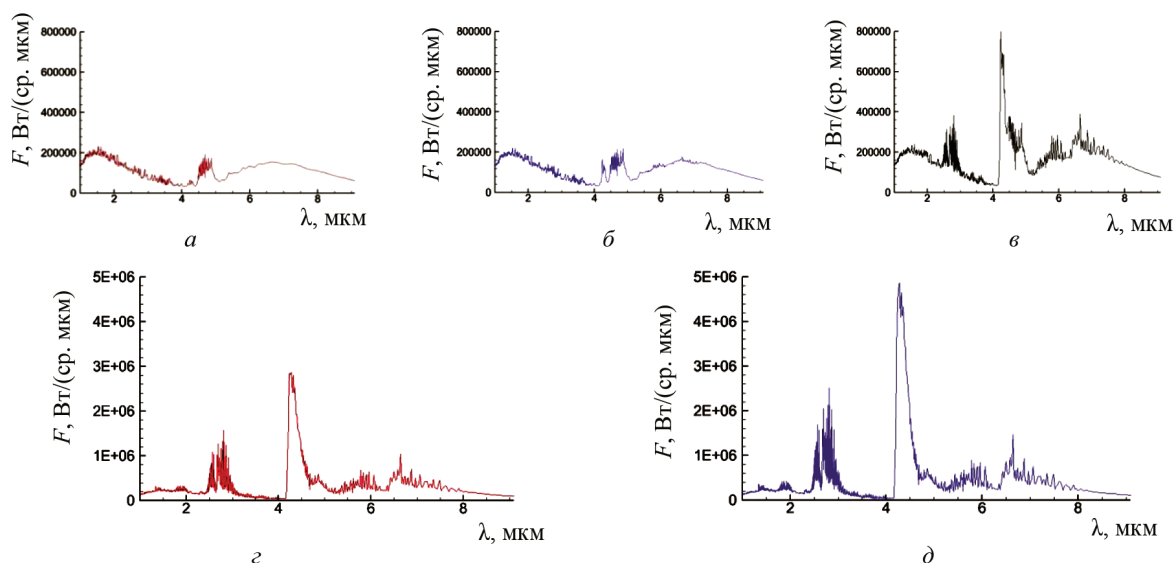


Рис. 6. Спектральная интенсивность излучения на высоте 80 км при различных углах атаки набегающего потока: а – 0°; б – 20°; в – 40°; г – 60°; д – 68°

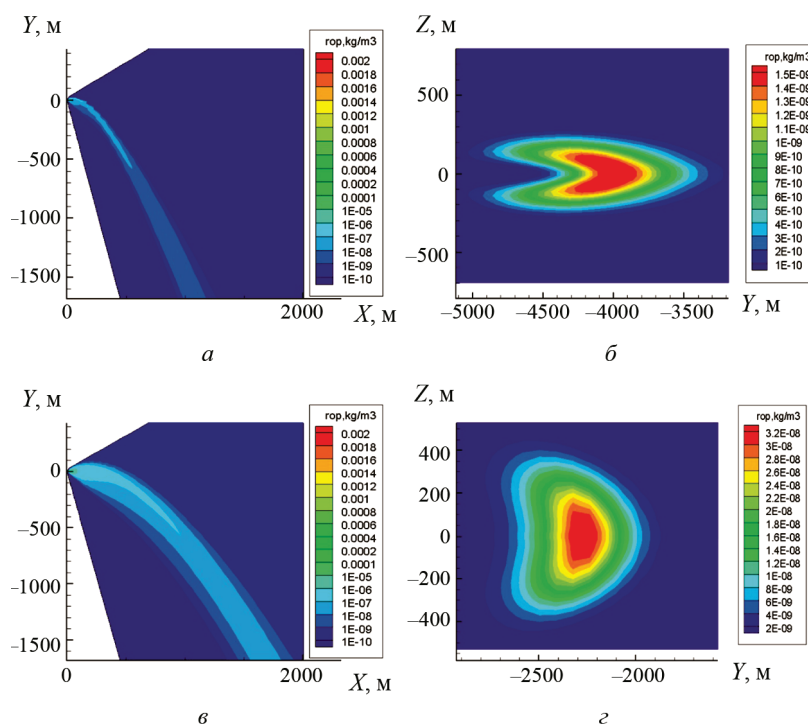


Рис. 7. Высота 80 км. Пространственное распределение плотности частиц  $Al_2O_3$  при угле атаки набегающего потока 68° для группы частиц минимального размера 0.5 мкм (а), (б) и группы частиц максимального размера 7 мкм (в), (г) в разных плоскостях течения. а, в – в плоскости симметрии XY ( $Z=0$ );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

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), 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  $H_2$  и  $CO$  с кислородом воздуха и увеличению массовых долей продуктов сгорания –  $H_2O$  и  $CO_2$  (до 0.06–0.07).

Очень интересно поведение частиц. На рис. 7 показано распределение плотности ча-

стиц различного размера в плоскости сноса потока ( $XU$ ) 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  $CO$  (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.

Табл. 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  $CO_2$  –  $0.8e-5$ ).

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 атмо-

сфере 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. 8 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.

Таблица 5. Максимальные значения массовых долей  $CO_2$  и  $H_2O$  в слое смешения на высоте 100 км

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

Таблица 6. Максимальные значения массовых долей  $CO_2$  и  $H_2O$  в слое смешения на высоте 115 км (в скобках указаны результаты расчета без учета реального химического состава атмосферы)

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)

Рис. 8 показывает, что при угле атаки  $60^\circ$  учет реального состава атмосферы приводит к

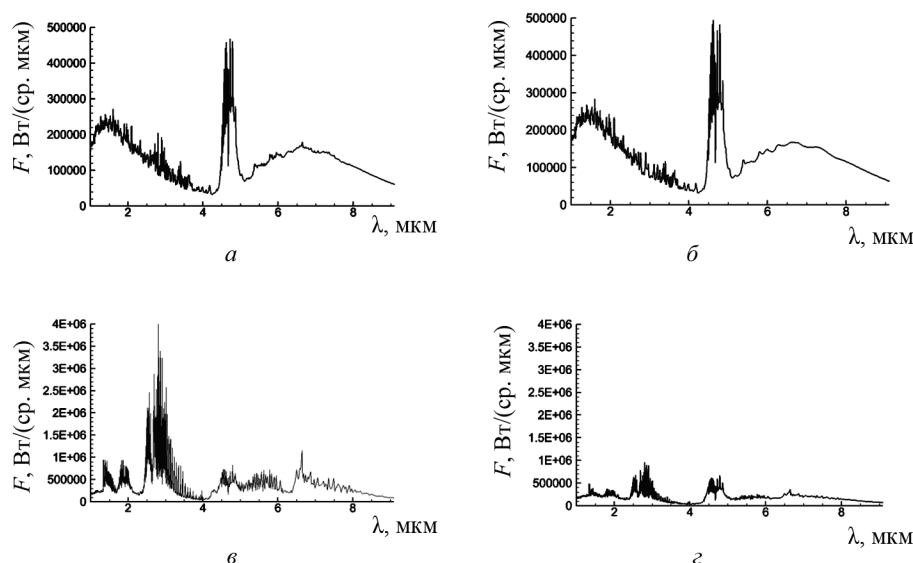


Рис. 8. Спектральная интенсивность излучения на высоте 115 км при углах атаки набегающего потока: а, б –  $0^\circ$ ; в, г –  $60^\circ$ . Расчеты а, в – с учетом реального химического состава атмосферы; б, г – без учета реального химического состава атмосферы

увеличению полученного в расчете излучения в районе 2.7 мкм почти в четыре раза. При этом вследствие сильной колебательной неравновесности  $\text{CO}_2(\nu_3)$  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 преобладает 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 3D-постановке. Газодинамическая модель включает в себя уравнения для колебательных энергий, учитывающие  $V-T$ ,  $V-V$  и  $V-V'$  процессы молекул  $\text{CO}$ ,  $\text{CO}_2$ ,  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{H}_2$ ,  $\text{O}_2$ ,  $\text{N}_2$ ,  $\text{NO}$ ,  $\text{OH}$ ,  $\text{HCl}$ ,  $\text{Cl}_2$ , 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  $\gamma$ -фазы к стабильной  $\alpha$ -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  $0^\circ$  до  $68^\circ$ , которое показало, что:

1) для газовых струй на высоте 80 км при увеличении угла наблюдается существенный рост интенсивности излучения, причем основные спектральные линии излучения ( $\text{CO}_2$ ,  $\text{H}_2\text{O}$  и  $\text{CO}$ ) возрастают примерно пропорционально друг другу;

2) на высотах 100 км и больше излучение  $\text{H}_2\text{O}$  в диапазоне 2.7 мкм с увеличением угла атаки возрастает сильнее, чем излучение  $\text{CO}_2$  (4.3 мкм) и  $\text{CO}$  (4.7 мкм), что обусловлено тем, что колебательные температуры  $T_{\text{CO}_2(\nu_3)}$  и  $T_{\text{CO}}$  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 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  $\sim 1.5$  мкм (обусловлен горячей, но небольшой по размеру, областью вблизи среза сопла) и при  $\sim 7$  мкм (обусловлен дальней областью струи – более холодной, но очень большой по размеру); некоторый пик излучения наблюдается на линии  $\text{CO}$  (4.7 мкм); линии  $\text{H}_2\text{O}$  и  $\text{CO}_2$  практически отсутствуют;

7) при больших углах атаки резко усиливаются линии  $\text{H}_2\text{O}$  (2.7 мкм, в меньшей степени 6.5 мкм) и  $\text{CO}_2$  (4.3 мкм и 2.7 мкм) и вклад частиц в излучение снижается; это обусловлено догоранием  $\text{H}_2$  и  $\text{CO}$  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  $\text{CO}_2$  и  $\text{H}_2\text{O}$ ; связано это с тем, что увеличение концентраций радикалов О и Н уменьшает время латентной стадии горения.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

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.
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., 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.
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. 2012. Выпуск № 3-1 (34).
6. 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.
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. Molchanov A.M., Vykov 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.
11. 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.
13. Henderson C.B. Drag Coefficient of Spheres in Continuum and Rarefied Flows // AIAA Journal. June 1976. V. 14. N 6. P. 707–708.
14. Стернин Л.Е. Двухфазные моно- и полидисперсные течения газа с частицами. М.: Машиностроение, 1980. 172 с.
15. Molchanov A.M. Numerical Simulation of Supersonic Chemically Reacting Turbulent Jets // AIAA Paper 2011-3211. 37 p.
16. 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.

### The calculation of gas dynamics and ir radiation of 3D jets with vibrational nonequilibrium

A.M. Molchanov, D.V. Maslova

Moscow Aviation Institute (National Research University), Moscow, 125993, Russia  
e-mail: alexmol\_2000@mail.ru

A 3D simulation method for calculating the gas dynamics and IR 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.

## REFERENCES

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. **Plastinin Yu.A.** Modelirovanie izlucheniya himicheski reagiruyushchih dvuhfaznyh sverzhvukovyh nedorasshirenykh struj // Kosmonavtika i raketostroenie. № 3 (36), 2004, S. 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. **Zavelevich F.S., Ushakov N.N.** Vzaimodejstvie vyhlopnykh struj raketnykh dvigatelej na razlichnykh toplivah s atmosferoj primenitel'no k ocnke ehkologicheskoy bezopasnosti zapuskov raket i raket-nositelej // Vestnik samarskogo universiteta. Aehrokosmicheskaya tekhnika, tekhnologii i mashinostroenie. Vypusk № 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. **Molchanov A.M., Nikitin P.V.** Uzkopolosnaya baza dannykh dlya rascheta izlucheniya produktov sgoraniya s ispol'zovaniem k-raspredeleniya // Teplovye processy v tekhnike, 2014, №10, S. 448–455.
8. **Molchanov A.M.** Raschet teplovogo izlucheniya kolebatel'no neravnovesnogo gaza metodom k-raspredeleniya//Fiziko-himicheskaya kinetika v gazovoj dinamike. 2015. T.16, vyp. 1. <http://chemphys.edu.ru/issues/2015-16-1/articles/317/>
9. **Molchanov A.M. and Bykov L.V.** Three-Equation K-ε-Vn Turbulence Model for High-Speed Flows // AIAA Paper 2013-3181. 30 pp.
10. **Molchanov A.M., Bykov L.V., Nikitin P.V.** Model' turbulentsnosti dlya szhimaemykh vysokoskorostnykh techenij, osnovannaya na predstavlenii korrelyacii «davlenie — skorosti deformacij» // Teplovye processy v tekhnike 2013, T. 5. № 4. S. 146–152.
11. **Leone S.R.** Rate Coefficients for Vibrational Energy Transfer Involving the Hydrogen Halides // Journal of Physical and Chemical Reference Data, Vol. 11, Iss. 3, July 1982, pp. 953–996.
12. **Henderson R.** Vliyanie kinetiki processa kristallizacii na ehnergeticheskie harakteristiki raketnogo dvigatelya // RTK. T. 15. № 4. 1977. C. 183–185.
13. **Henderson C.B.** Drag Coefficient of Spheres in Continuum and Rarefied Flows // AIAA Journal, Vol. 14, No. 6, June 1976, pp. 707-708.
14. **Sternin L.E.** Dvuhfaznye mono- i polidispersnye techeniya gaza s chasticami. M.: Mashinostroenie, 1980. 172s.
15. **Molchanov A.M.** Numerical Simulation of Supersonic Chemically Reacting Turbulent Jets // AIAA Paper 2011-3211, 37p.
16. **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.