Моделирование спектроэнергетических характеристик светимости факелов ракет с использованием банков данных молекулярной спектроскопии HITRAN и HITEMP



Козин Ф.А., к.т.н. Лагуткин В.Н., к.т.н. Лукьянов А.П., Пругло А.В., Равдин С.С., Слынько Ю.В.

ОАО «МАК «Вымпел»

Назначение и состав компьютерной модели



Назначение компьютерной модели

Расчет спектральных характеристик наблюдаемого ИК излучения факелов ракет (спектральной плотности яркости и интенсивности излучения) в зависимости от траекторных параметров (высоты, скорости и углового положения ракеты) и параметров выхлопной струи в выходном сечении сопла

Состав компьютерной модели

- модуль расчета пространственных распределений параметров факела;
- модуль расчета спектральных характеристик светимости факела с учетом спектральных характеристик прохождения излучения в атмосфере

Входные данные модели



Параметры условий наблюдения

- Дата и время;
- Координаты датчика (высота, долгота, широта);
- Координаты, скорость и угловое положение ракеты;
- Высотные профили атмосферных параметров: давления, температуры, состава;

Параметры струи в выходном сечении сопла

- радиус выходного сечения и угол раскрыва сопла,
- давление,
- температуры газа и частиц,
- скорости газа и частиц,
- состав продуктов сгорания,
- размеры частиц

Параметры расчета

- пространственное разрешение,
- границы спектрального диапазона,
- спектральное разрешение

Выходные данные модели

- 4
- Пространственное распределение яркости факела изображение - B= f(x,y) в заданном спектральном диапазоне,
- Функция линейной (погонной) яркости в заданном спектральном диапазоне L = f(x) для заданного пространственного разрешения,
- Спектральная плотность интенсивности излучения $I = f(\lambda)$ в заданном спектральном диапазоне с заданным спектральным разрешением.

Указанные выходные характеристики рассчитываются с учетом пропускания атмосферы.

Минимальные требования к ВК: Pentium-4 с тактовой частотой ~ 2 ГГц, 1 ГБ ОЗУ

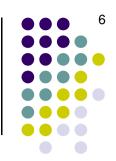
МОДУЛЬ РАСЧЕТА ПРОСТРАНСТВЕННЫХ РАСПРЕДЕЛЕНИЙ ПАРАМЕТРОВ ФАКЕЛА РАКЕТЫ



ОСНОВНЫЕ ФИЗИЧЕСКИЕ ОСОБЕННОСТИ ЗАДАЧИ РАСЧЕТА ПАРАМЕТРОВ ФАКЕЛА

- сверхзвуковая скорость истечения продуктов сгорания из сопла,
- неизобаричность струи, вызванная тем, что давление на срезе сопла отличается от давления окружающей атмосферы,
- многофазность струи, содержащей газ и частицы,
- многокомпонентность газа струи,
- распределение частиц по фракциям (размерам),
- неравновесность газа по степеням свободы и частиц по фракциям,
- смешение продуктов сгорания со спутным воздушным потоком, параметры которого зависят от высоты и скорости полета ракеты

ВХОДНЫЕ ДАННЫЕ МОДУЛЯ



Параметры спутного воздушного потока:

• давление, плотность, состав и скорость потока

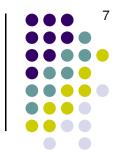
Параметры струи в выходном сечении сопла

- радиус выходного сечения и угол раскрыва сопла,
- давление,
- температуры газа и частиц,
- скорости газа и частиц,
- состав продуктов сгорания,
- размеры частиц

Учитываются следующие основные компоненты продуктов сгорания:

- газовые компоненты: $O, O_2, H, H_2, HO, H_2O, CO, CO_2, N_2, NO, HCl, Cl, Cl_2$
- частицы: Al_2O_3 (окись алюминия), C (сажа).

ВЫХОДНЫЕ ДАННЫЕ МОДУЛЯ

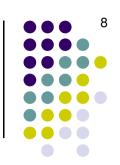


Распределения параметров в поперечных сечениях струи:

<u>Газ</u>

- давление,
- плотность,
- температура,
- относительные массовые концентрации,
- колебательные температуры компонент газовой фазы.
 Частицы (по каждой фракции)
- плотность,
- температура.

Система параболических дифференциальных уравнений



• запись в векторном виде

$$\frac{\partial \vec{A}}{\partial x} + \frac{\partial \vec{B}}{\partial y} + \frac{\vec{C}}{y} = \frac{1}{y} \frac{\partial}{\partial y} \left(y \mu_t \frac{\partial \vec{D}}{\partial y} \right) + \vec{E}$$

$$\vec{A} = \left[\rho u, \rho u^{2} + p, \rho u v, \rho H u, \rho C_{i} u, \rho \alpha_{i} u, \rho_{sj} u_{sj}, \rho_{sj} u_{sj}^{2}, \rho_{sj} u_{sj} v_{sj}, \rho_{sj} e_{sj} u_{sj}\right]^{T}$$

$$\vec{B} = \left[\rho v, \rho u v, (\rho v^{2} + p), \rho H v, \rho C_{i} v, \rho \alpha_{i} v, \rho_{sj} v_{sj}, \rho_{sj} u_{sj} v_{sj}, \rho_{sj} v_{sj}^{2}, \rho_{sj} e_{sj} v_{sj}\right]^{T}$$

$$\vec{C} = \left[\rho v, \rho u v, \rho v^{2}, \rho H v, \rho C_{i} v, \rho \alpha_{i} v, \rho_{sj} v_{sj}, \rho_{sj} u_{sj} v_{sj}, \rho_{sj} v_{sj}^{2}, \rho_{sj} e_{sj} v_{sj}\right]^{T}$$

$$\vec{D} = \left[0, u, \frac{4}{3} v, \frac{H}{Pr_{t}} + \left(1 - Pr_{t}^{-1}\right) \frac{u^{2}}{2}, \frac{C_{i}}{Sm_{t}}, \frac{\alpha_{i}}{Sm_{t}}, \frac{\rho_{sj}}{Sm_{tsj}}, u_{sj}, 0, \frac{e_{sj}}{Pr_{tsj}}\right]^{T}$$

$$\vec{E} = \left[0, -\sum_{j=1}^{M} \rho_{sj} f_{sxj}, -\sum_{j=1}^{M} \rho_{sj} f_{syj}, \rho Q -\sum_{j=1}^{M} \rho_{sj} q_{sj}, \rho R_{i}, \rho E_{vi} - \rho Q_{vi}, 0, \rho_{sj} f_{sxj}, \rho_{sj} f_{syj}, \rho_{sj} (q_{sj} - Q_{sj})\right]^{T}$$

$$i = 1, ..., K \qquad j = 1, ..., M$$

ОСНОВНЫЕ БЛОКИ МОДУЛЯ Управляющий блок Поперечный Невязкое Параметры перенос потока частиц течение в зоне смешения Граница Взаимодействие Физикоракетной химические потоков газа превращения струи и частиц Эффекты Колебательная Параметры разреженного турбулентности релаксация

Формирование выходной информации

газа

ЗАДАЧИ, РЕШАЕМЫЕ ОСНОВНЫМИ БЛОКАМИ МОДУЛЯ

№	Наименование блока	Решаемая задача	
1	Управляющий блок	Управление работой модуля	
2	Невязкое течение	Расчет параметров струи и спутного потока в текущем поперечном слое без учета эффектов вязкости, релаксации, влияния частиц	
3	Граница ракетной струи	Расчет границы контактного разрыва между струей и спутным потоком с учетом ГУВ.	
4	Поперечный перенос в зоне смешения	Расчет изменений параметров потока в зоне смешения, вызванных эффектами турбулентного и молекулярного переноса.	
5	Физико-химические превращения	Расчет изменений параметров потока в зоне смешения, вызванных химическими реакциями.	
6	Колебательная релаксация	Расчет изменений параметров потока, обусловленных процессами колебательно-вращательной релаксации	
7	Параметры потока частиц	Расчет параметров потока частиц с учетом кристаллизации	
8	Взаимодействие потоков газа и частиц	Расчет изменений параметров потоков газа и частиц, обусловленных процессами динамического и теплового взаимодействия газа и частиц с учетом процесса кристаллизации.	
9	Параметры турбулентности	Расчет параметров, определяющих зависимость турбулентной вязкости от продольной и поперечной координат.	
10	Эффекты разреженного газа	Расчет эффектов взаимодействия газовых потоков и потоков газа и частиц на высотах разреженной атмосферы	
11	Формирование выходной информации	Формируются массивы распределений параметров струи в поперечных сечениях, отображаются поперечные и продольные профили основных параметров струи	



БАНК ДАННЫХ МОДУЛЯ



Банк данных модуля включает:

- параметры моделей турбулентной вязкости,
- параметры моделей колебательной релаксации молекул,
- параметры моделей динамического и теплового взаимодействия частиц и газа,
- параметры температурных зависимостей констант скоростей химических реакций,
- значения теплоты образования и теплоемкости молекул.

ЭТАПЫ РАСЧЕТА ПАРАМЕТРОВ ФАКЕЛА НА ОДНОМ ШАГЕ

12

Газовый поток

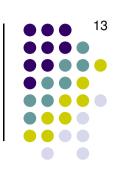
- расчет невязкой газодинамики
- расчет процессов вязкого смешения струи и спутного потока
- расчет химической кинетики в зоне смешения
- расчет динамического и теплового воздействия потока частиц на газ
- расчет колебательной релаксации и потерь на излучение.

Поток частиц:

- расчет переноса массы и энергии потока частиц
- расчет динамического и теплового воздействия потока газа на частицы
- расчет процессов кристаллизации частиц и потерь на излучение

Расчет основан на численном решении методом сеток (стационарная модификация метода С.К.Годунова и метод расщепления) системы уравнений в частных производных, описывающих течение гетерогенной струи (газ + частицы).

Модуль расчета спектральных характеристик светимости факела с учетом прохождения излучения в атмосфере



В модуле учтены следующие явления:

- Тонкая структура колебательно-вращательных линий поглощения излучения газов, с учетом зависимости силы линий от температуры.
- Излучение частиц, поглощение и рассеяние излучения частицами.
- Многократное рассеяние излучения на частицах с заданной индикатрисой рассеяния.
- Излучение в состоянии неполного термодинамического равновесия, когда колебательные температуры газовых компонент отличаются от поступательно-вращательной температуры газа.
- Излучение в состоянии неполного термодинамического равновесия, когда температуры каждой фракции частиц различаются между собой и отличаются от температуры окружающего газа.
- Значительная вытянутость факела вдоль оси и сильное различие геометрических масштабов потока на разных участках.
- Сильная корреляция между тонкими структурами линий излучения факела и линий поглощения атмосферы.

Входные данные

- Дата и время наблюдений (для учета внешней подсветки)
- Координаты датчика (высота, долгота, широта);
- Координаты и положение факела в пространстве;
- Высотные профили атмосферных параметров: давления, температуры, влажности, - для заданных условий наблюдения;
- Распределения параметров в поперечных сечениях факела: давления газа, парциальных плотностей компонент газа и фракций частиц, поступательной и колебательных температур газовых компонент, температур фракций частиц.
- Параметры расчета: пространственное разрешение, границы спектрального диапазона, спектральное разрешение.

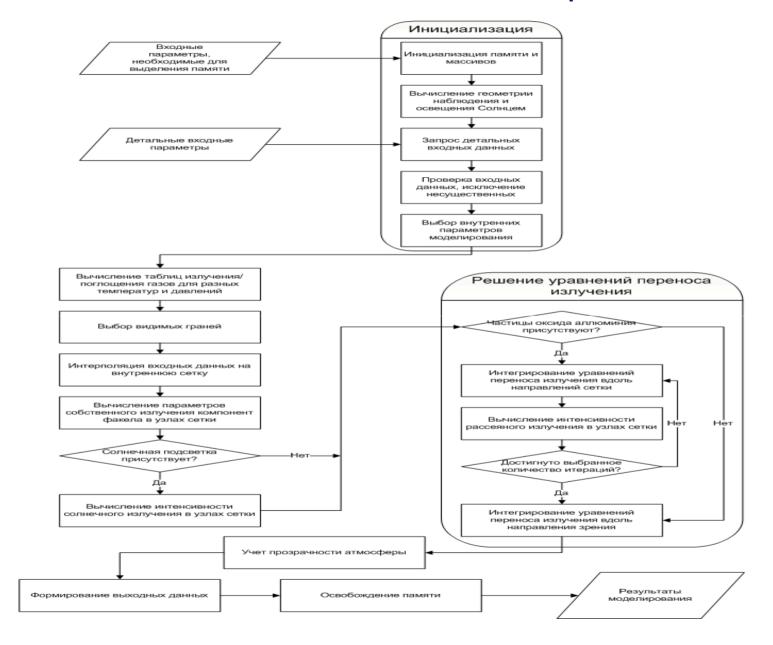
Выходные данные

- Пространственное распределение яркости факела *B=f(x,y)* (изображение) в заданном спектральном диапазоне.
- Функция линейной (погонной) яркости в заданном спектральном диапазоне L = f(x) для заданного пространственного разрешения.
- Спектральная плотность интенсивности излучения $I = f(\lambda)$ в заданном спектральном диапазоне с заданным спектральным разрешением.

Указанные выходные характеристики рассчитываются с учетом пропускания атмосферы.



Блок-схема вычислений светимости факела.

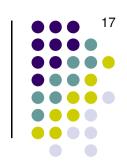


ЗАДАЧИ, РЕШАЕМЫЕ ОСНОВНЫМИ БЛОКАМИ МОДУЛЯ

№	Наименование блока	Решаемая задача
1	Инициализация	Инициализация памяти, запрос и проверка входных данных, выбор внутренних параметров моделирования
2	Расчет переноса излучения в факеле	Определение пространственно-угловой функции спектральной плотности энергетической яркости внутри и на границе факела методом итераций.
3	Расчет спектральных характеристик излучения и поглощения для газовых компонент	Рассчитываются спектральные функции показателей поглощения газовых компонент с использованием банков данных HITEMP и HITRAN
4	Интерполяция данных на внутреннюю сетку	Интерполяция входных распределений параметров в поперечных сечениях факела на внутреннюю прямоугольную сетку
5	Расчет спектральной плотности энергетической яркости внутри факела	Для заданной сетки угловых направлений и заданной длины волны интегрируется уравнение переноса.
6	Расчет спектральных характеристик поглощения и рассеяния ИК излучения частицами	Рассчитываются спектральные показатели поглощения и рассеяния и спектральные индикатрисы частиц различных фракций.
7	Расчет рассеянной составляющей спектральной плотности яркости факела	Методом итераций рассчитывается составляющая спектральной плотности яркости факела, обусловленная внешней (солнечной) подсветкой
8	Расчет спектральной функции пропускания атмосферы	Для заданной геометрии наблюдения и атмосферных профилей рассчитывается спектральная функция пропускания атмосферы с использованием банка данных HITRAN.



Итерационная схема решения системы интегральных уравнений переноса излучения



$$B_{\nu(n)}(\vec{r}(S),\vec{l}) = B_{\nu(0)}(\vec{l})e^{-\int_{-|\alpha_{\nu}(\vec{r}(\vec{S}'))d\vec{S}'}^{S}} + \int_{0}^{S} e^{-\int_{-|\alpha_{\nu}(\vec{r}(\vec{S}'))d\vec{S}'}^{S}} E_{\nu(n)}(\vec{r}(p),\vec{l})dp$$

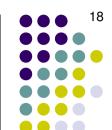
$$E_{\nu(n)}(\vec{r},\vec{l}) = \frac{\sigma_{\nu}(\vec{r})}{4\pi} \int_{4\pi}^{S} B_{\nu(n-1)}(\vec{r},\vec{l}') \chi_{\nu}(\vec{r},\vec{l},\vec{l}')d\vec{l}' + E_{\nu}^{in}(\vec{r})$$

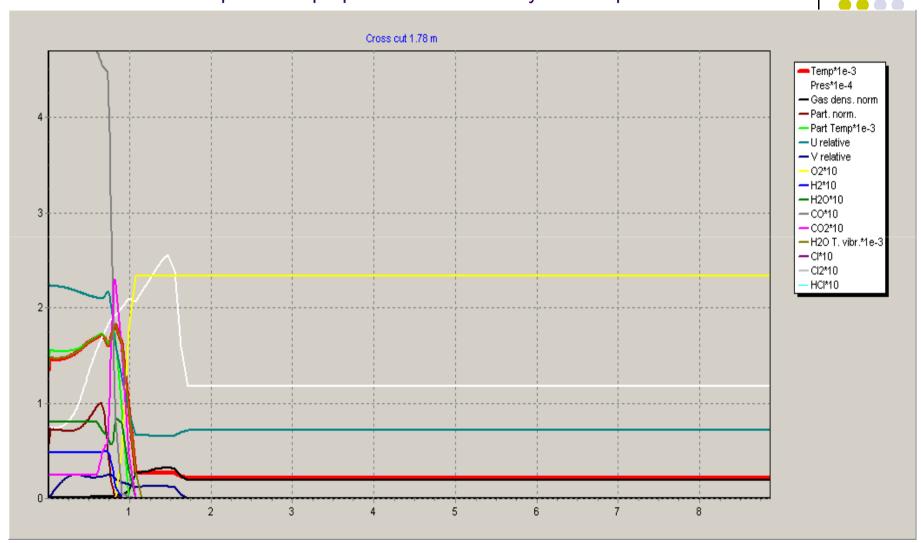
$$n = 1.2...$$

Банк данных модуля включает:

- Банк данных НІТЕМР,
- Банк данных HITRAN,
- Банк данных по спектральным характеристикам поглощения и рассеяния частиц в зависимости от температуры.

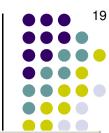
ТТРД, $n = p_a/p_{\infty} = 10$ поперечные профили в начальном участке факела





TTРД,
$$n = p_a/p_{\infty} = 10$$

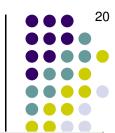
поперечные профили в переходном участке факела

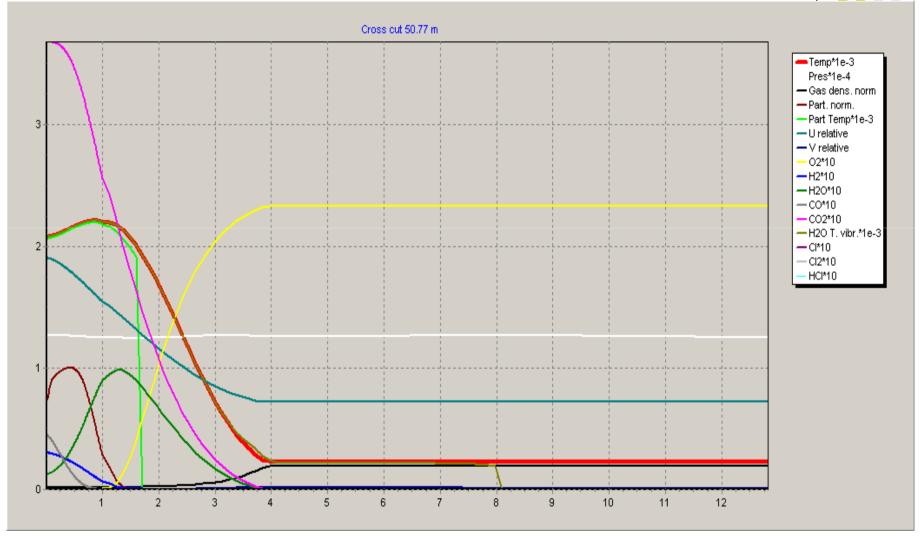




ТТРД, $n = p_a/p_{\infty} = 10$

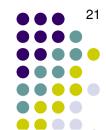
поперечные профили в основном участке факела

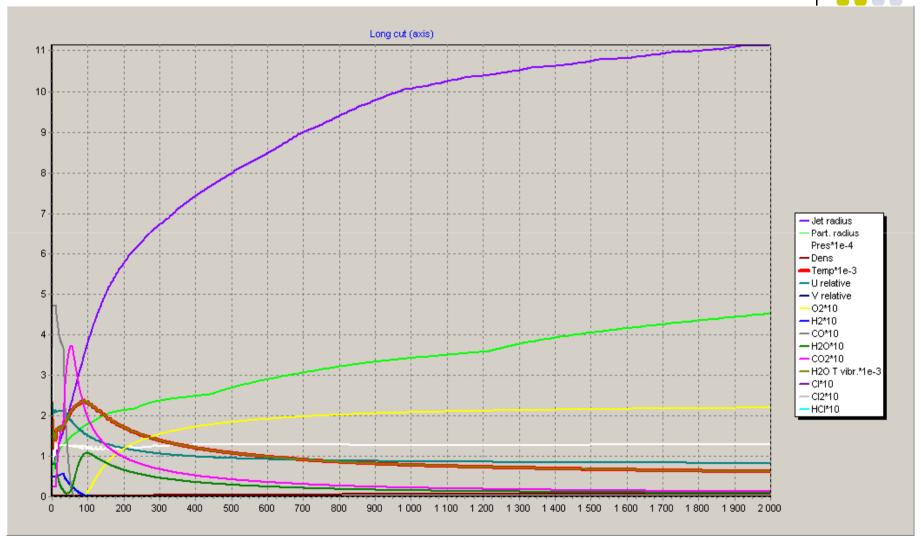




TТРД, $n = p_a/p_{\infty} = 10$

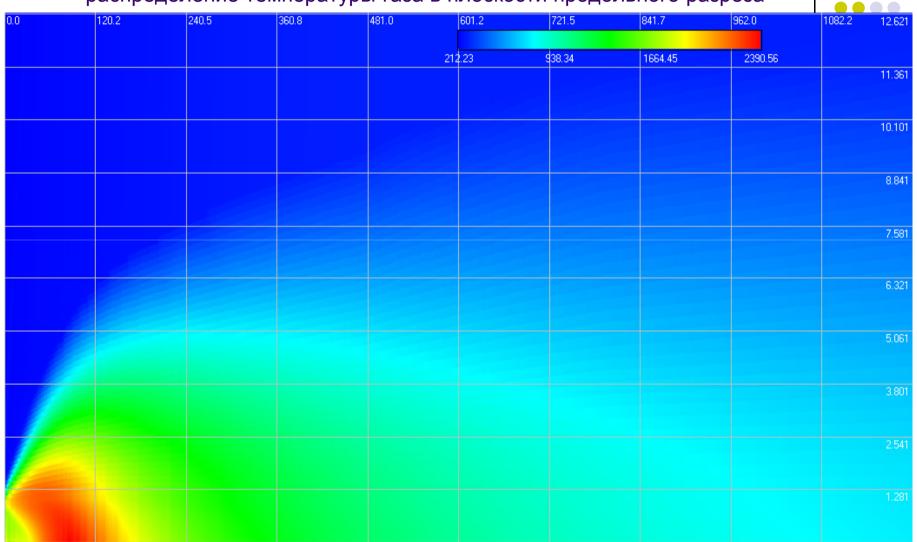
продольные профили значений основных параметров на оси факела





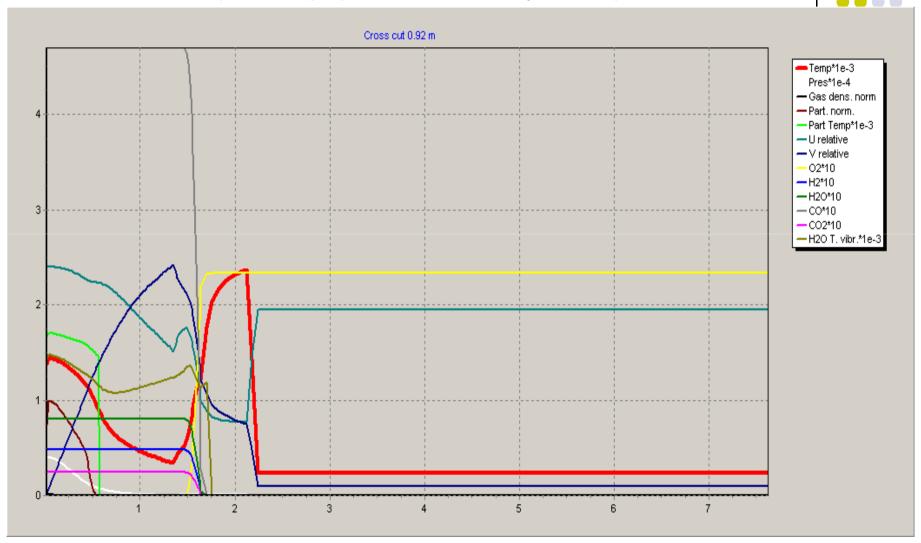
ТТРД, $n = p_a/p_{\infty} = 10$

распределение температуры газа в плоскости продольного разреза



TТРД, $n = p_a/p_{\infty} = 10^5$

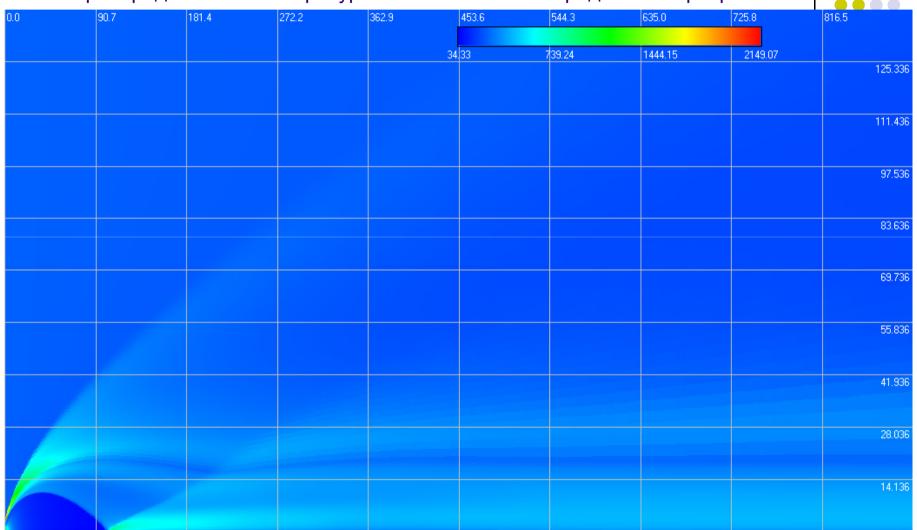
поперечные профили в начальном участке факела





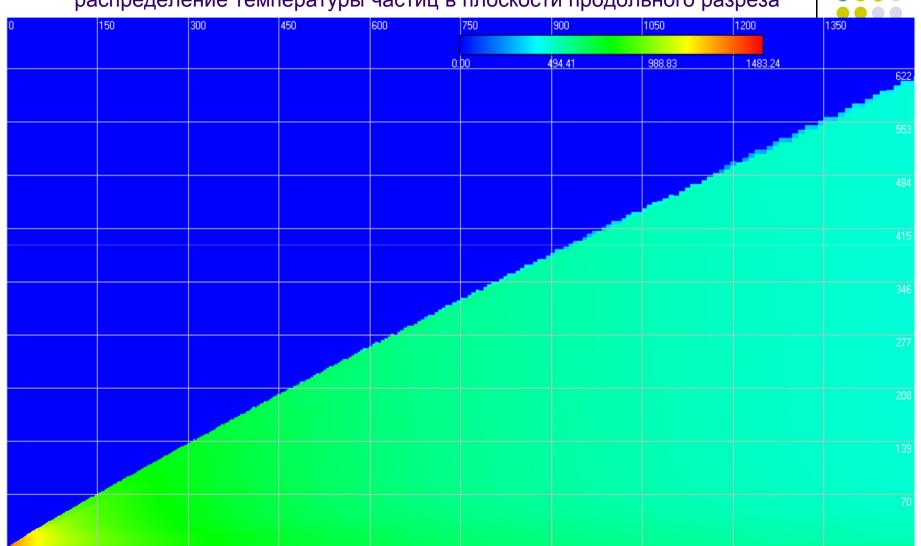
Результаты расчетов пространственных распределений параметров факелов ТТРД, $n = p_a/p_{\infty} = 10^5$

распределение температуры газа в плоскости продольного разреза



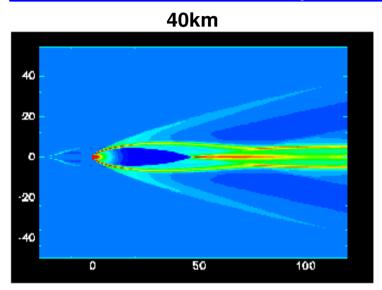
TТРД, $n = p_a/p_{\infty} = 10^5$

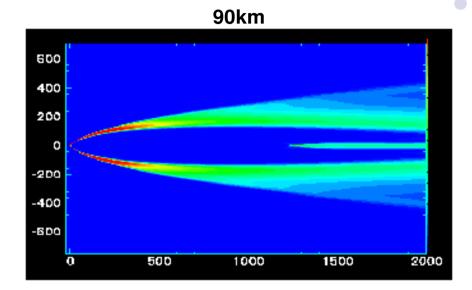
распределение температуры частиц в плоскости продольного разреза



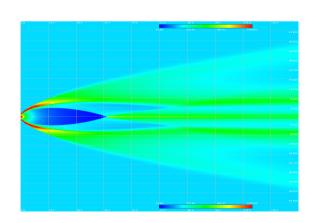
Сопоставление с расчетами по другим моделям (CFD)

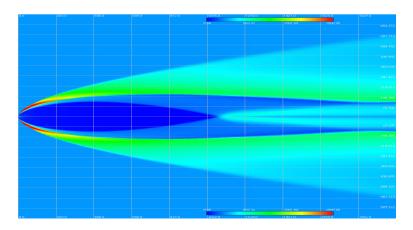
Computational Fluid Dynamics (CFD)



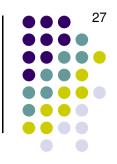


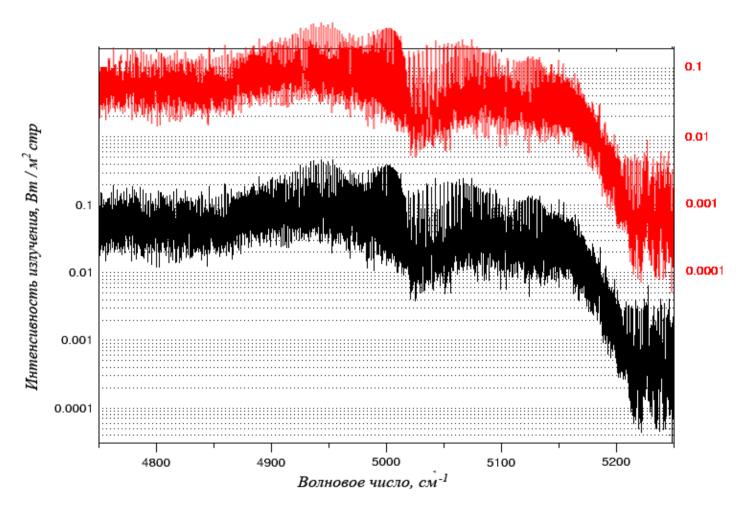
Computational fluid dynamics simulation of an axisymmetric missile plume during ascent.





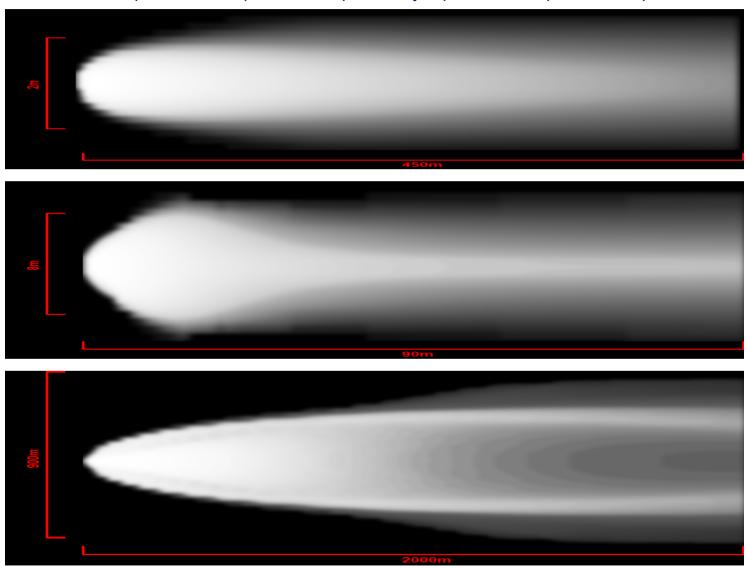
Сопоставление с расчетами по другим моделям (LINEPAK)





Сравнение разработанной модели (верхний график) с моделью LINEPAK (нижний график). Представлена зависимость излучения ячейки с углекислым газом. Длина ячейки – 10 см, температура – 1200K, давление – 1 атм.

Распределения яркости в перпендикулярном к оси факела направлении

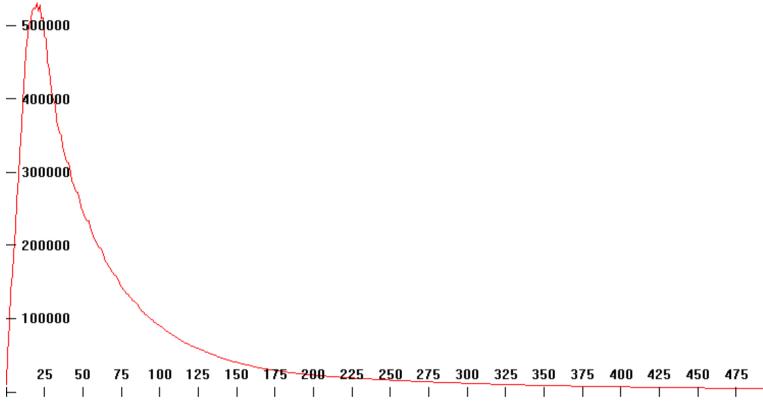






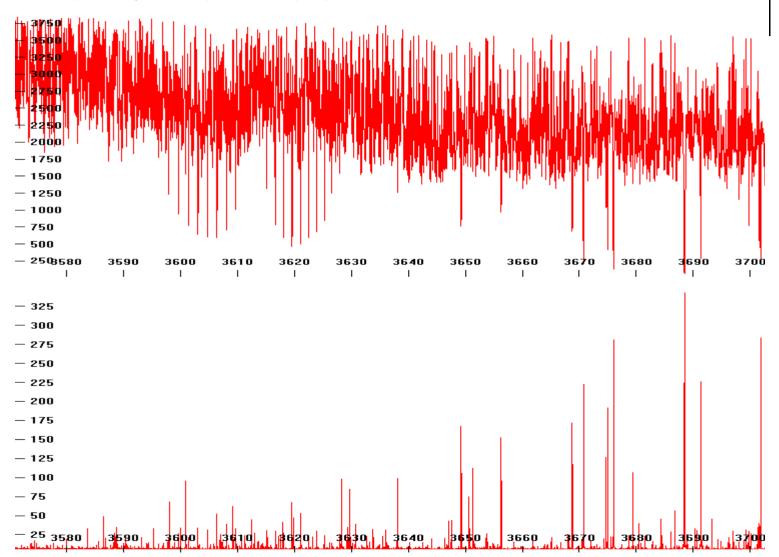
Линейная яркость в перпендикулярном к оси факела направлении





Линейная функция яркости факела в полосе поглощения 2.7 мкм. Высота – 5 км.

Спектры излучения факелов с разрешением по волновым числам $\Delta v = 0.01$ см-1

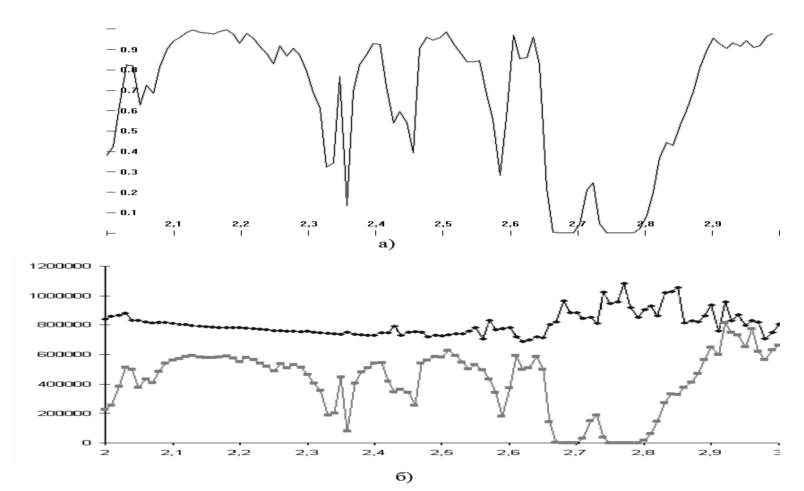


Тонкая структура спектра излучения (Вт/см⁻¹/стер) факела в зависимости от волнового числа $v(\text{см}^{-1})$ в полосе поглощения 2.7 мкм для высоты 5 км (вверху) и 50 км (внизу).

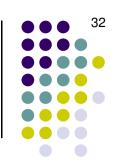


Влияние поглощения на трассе наблюдения на спектр излучения факела ракеты (высота 15 км)

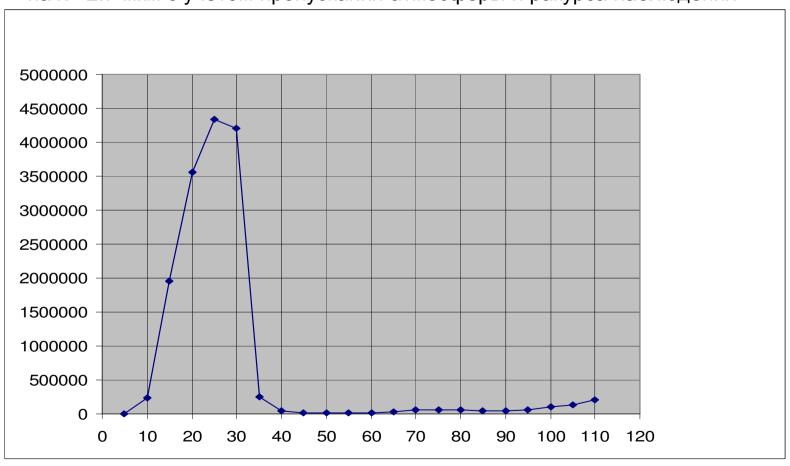




- а) спектральная зависимость коэффициента пропускания атмосферы вдоль луча с перигеем 15 км,
- б) сравнение спектра излучения факела без учета атмосферного поглощения (верхний график) и с учетом поглощения на трассе (нижний график).



Высотная зависимость спектральной плотности излучения факела
 на λ= 2.7 мкм с учетом пропускания атмосферы и ракурса наблюдения



- Разработана компьютерная модель для расчетов с высоким спектральным разрешением характеристик светимости факелов ракет. Модель состоит из двух основных модулей: модуля расчета пространственных распределений параметров факела и модуля расчета спектральных характеристик светимости факела с учетом поглощения излучения в атмосфере.
- Модуль расчета пространственных распределений параметров факела основан на численном решении методом сеток в сочетании с методом расщепления системы уравнений в частных производных, описывающих течение гетерогенного потока газа с частицами в спутном воздушном потоке, и на использовании упрощенных моделей релаксационных процессов.
- Модуль расчета характеристик светимости факела основан на численном решении методом последовательных приближений системы уравнений переноса излучения заданной частоты в многокомпонентной среде факела. В модуле учтены все основные явления, влияющие на спектральные характеристики светимости высокотемпературных неравновесных потоков смеси газа и частиц в различных условиях. Для расчета характеристик излучения факела и затухания излучения в атмосфере используются банки данных молекулярной спектроскопии HITRAN и HITEMP.
- Проведено моделирование пространственных распределений параметров факелов с частицами при умеренно нерасчетных и сильно нерасчетных режимах. Полученные результаты расчетов соответствуют физическим закономерностям изменения структуры и параметров течения вдоль факела в зависимости от характеристик спутного потока.
- Для проверки адекватности модели проведено сравнение с результатами расчетов по другим моделям. Сравнение показало хорошее согласие результатов расчетов.
- Для проверки функциональных возможностей разработанной модели проведены расчеты спектральных характеристик светимости факелов ракет в различных условиях. Полученные результаты расчетов соответствуют закономерностям изменения спектральных характеристик светимости факелов при изменении пространственных распределений параметров факела и условий наблюдения.