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

#### ОАО «МАК «Вымпел»

# Моделирование спектроэнергетических характеристик светимости газодинамических факелов с использованием банков данных молекулярной спектроскопии

Разработана компьютерная модель для расчета характеристик светимости факелов газодинамических систем с высоким спектральным разрешением. Описаны основные модули компьютерной модели: модуль расчета пространственных распределений параметров факела и модуль расчета спектральных характеристик светимости факела. Проведены расчеты пространственных распределений параметров и спектральных характеристик светимости газодинамических факелов в различных условиях для проверки функциональных возможностей разработанной модели и сравнения с результатами аналогичных расчетов по другим моделям и с экспериментальными данными.

Решение задачи расчета спектроэнергетических характеристик светимости газодинамических факелов складывается из решения двух задач: задачи расчета структуры и пространственных распределений параметров факелов и задачи переноса излучения в факеле и в атмосфере. Соответственно компьютерная модель для расчета характеристик светимости факелов должна состоять из двух модулей: модуля расчета пространственных распределений параметров факела и модуля расчета спектральных

характеристик светимости факела с учетом прохождения излучения в атмосфере.

Хорошо известны исследования [1,2], в которых рассмотрены закономерности изменения структуры и параметров газодинамических сверхзвуковых струй в зависимости от давления, плотности и скорости набегающего потока. Определяют эти закономерности следующие физические факторы:

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.

Для того чтобы обеспечить высокие функциональные возможности модуля расчета параметров газодинамических факела в спутном воздушном потоке с учетом ограничений вычислительной техники, он создан на основе упрощенных релаксационных моделей физико-химических процессов, которые тем не менее учитывают все вышеперечисленные физические факторы и имеют достаточную методическую точность.

В модуле расчета спектральных характеристик светимости факела учтены такие явления, как:

тонкая структура колебательно-вращательных линий поглощения и излучения газов

с учетом зависимости силы линий от температуры (вплоть до 3000 К);

излучение частиц, поглощение и рассеяние излучения частицами;

многократное рассеяние излучения на частицах с заданной индикатрисой рассеяния;

излучение в состоянии неполного термодинамического равновесия, когда колебательная и поступательно-вращательная температуры газов отличаются;

излучение в состоянии неполного термодинамического равновесия, когда температуры каждой фракции частиц различаются между собой и отличаются от температуры окружающего газа;

сильная корреляция между тонкими структурами линий излучения факела и линий поглощения атмосферы.

Для учета всех этих факторов использован метод, основанный на численном решении путем итераций системы уравнений переноса излучения с определенной длиной волны. Для составления банка спектроскопических данных по линиям излучения использованы наиболее полная база данных колебательно-вращательных линий излучения атмосферных газов HITRAN и ее высокотемпературная модификация HITEMP [3]. Они позволяют методически корректно рассчитывать многократное рассеяние излучения на частицах и учитывать сильную корреляцию между тонкими структурами линий излучения факела и поглощения атмосферы.

#### Модуль расчета пространственных распределений параметров факела

Газодинамическая сверхзвуковая струя в спутном воздушном потоке представляет собой гетерогенный поток с взаимопроникающим движением составляющих потока и

обменом массой, импульсом и энергией. Составляющими потока являются газовые компоненты, соответствующие различным молекулам, и частицы различных размеров.

Расчет параметров струи основан на численном решении системы параболических дифференциальных уравнений в частных производных для осредненных параметров стационарного осесимметричного турбулентного потока с учетом неравновесного протекания химических реакций и неравновесного возбуждения колебательных степеней свободы молекул. Система состоит из уравнений сохранения массы, импульса и энергии газа, уравнений для массовых концентраций газовых компонентов, уравнений для среднего числа колебательных квантов молекул, уравнений сохранения массы, импульса и энергии частиц [1,2]. Система уравнений дополняется термическим уравнением состояния, связывающим давление, плотность и поступательную температуру газа, калорическими уравнениями состояния, определяющими внутреннюю энергию газовых компонентов и газа в целом, и уравнениями состояния для частиц.

На вход модуля подаются следующие данные: параметры спутного воздушного потока (давление, плотность, состав и скорость потока) и параметры струи в выходном сечении сопла (его радиус, давление, температура и скорость газа и частиц, состав продуктов сгорания, размеры частиц).

Для параметров струи в выходном сечении сопла используются данные, известные по работам [1,2,4-6].

Выходными данными модуля являются распределения параметров в поперечных сечениях факела, а именно, давления, плотности, температуры, относительных массовых концентраций и колебательных температур компонентов газовой фазы, а также

плотности и температуры частиц каждой фракции.

Расчет основан на численном решении методом сеток (модифицированным методом Годунова [7]) и методом расщепления [8] системы уравнений в частных производных, описывающих течение гетерогенной струи (газ и частицы). Задачи, решаемые основными блоками модуля, определены в табл. 1.

#### Таблица 1

Наименование блока	Решаемая задача				
Невязкое течение	Вычисление параметров струи и спутного потока в текущем				
	поперечном слое без учета эффектов вязкости, релаксации,				
	влияния частиц				
Поперечный перенос в	Определение изменений параметров потока в зоне				
зоне смешения	смешения, вызванных эффектами турбулентного и				
	молекулярного переноса				
Физико-химические	Вычисление изменений параметров потока в зоне				
превращения	смешения, вызванных химическими реакциями				
Колебательная	Определение изменений параметров потока, обусловленных				
релаксация	процессами колебательной релаксации				
Параметры потока	Получение параметров потока частиц с учетом				
частиц	кристаллизации				
Взаимодействие потоков	Определение изменений параметров потоков газа и частиц,				
газа и частиц	обусловленных процессами динамического и теплового				
	взаимодействия газа и частиц				

Граница струи	Определение границы контактного разрыва между струей и		
	спутным потоком с учетом головной ударной волны		
Параметры	Расчет параметров, определяющих зависимость		
турбулентности	турбулентной вязкости от продольной и поперечной		
	координат		
Эффекты разреженного	Формирование поперечных профилей ударных волн и		
газа	контактного разрыва, расчет поправочных множителей для		
	динамического и теплового взаимодействия газа и частиц в		
	случае разреженного спутного потока		

Хотя в модуле приближенно учтены эффекты разреженного газа, его область применения ограничивается условием малости длины свободного пробега молекул по сравнению с характерными размерами структуры факела. Использование метода Годунова налагает ограничение на скорости струи и спутного потока: они должны быть сверхзвуковыми.

Банк данных модуля включает параметры моделей турбулентной и молекулярной вязкости, теплопроводности, диффузии в газах, колебательной релаксации молекул, динамического и теплового взаимодействия частиц и газа, температурных зависимостей констант скоростей химических реакций, а также значения теплоты образования и теплоемкости молекул.

Код программы написан в среде Visual Studio на языке ANSI C. Объем исходного кода 450 кБ. Программа реализуется на любых компьютерах под управлением ОС Windows XP. Минимальные требования: Pentium 4 с тактовой частотой ~ 2 ГГц, 1 ГБ

ОЗУ.

## Модуль расчета спектральных характеристик светимости факела

Определение спектроэнергетических характеристик светимости факела представляет собой задачу переноса лучистой энергии в высокотемпературной гетерогенной среде [9]. Для ее численного решения в модуле использован метод последовательных приближений (табл. 2).

Предусмотрены следующие входные данные модуля:

время наблюдений и координаты измерителя;

координаты и положение факела в пространстве;

высотные профили атмосферных параметров (давление, температура, влажность) для заданных условий наблюдения;

распределения параметров в поперечных сечениях факела: давления газа, парциальных плотностей компонентов газа и фракций частиц, поступательной и колебательных температур газовых компонентов и температур фракций частиц;

параметры расчета: пространственное разрешение, границы спектрального диапазона, спектральное разрешение.

В результате моделирования определяются следующие выходные данные модуля, рассчитанные с учетом пропускания атмосферы:

распределение спектральной плотности яркости факела B = B(x, y) (изображение) в заданном спектральном диапазоне (x – продольная координата, y - поперечная);

функция линейной (погонной) яркости L = L(x) для заданного пространственного разрешения;

спектральная плотность интенсивности излучения  $I = I(\lambda)$  с заданным спектральным разрешением.

Таблица 2

Наименование блока	Решаемая задача
Решение уравнений переноса	Определение пространственно-угловой функции
излучения в факеле	спектральной плотности энергетической яркости
	внутри и на границе факела методом итераций
Формирование таблиц	Расчет спектральных функций показателей
спектральных характеристик	поглощения газовых компонентов с
излучения и поглощения для	использованием банков данных НІТЕМР и
газовых компонентов	HITRAN
Формирование таблиц	Расчет спектральных показателей поглощения и
спектральных характеристик	рассеяния и спектральных индикатрис частиц
поглощения и рассеяния	различных фракций
ИК-излучения частицами	
Вычисление параметров	Интегрирование уравнения переноса для заданной
собственного излучения	сетки угловых направлений и заданной длины
компонентов факела	волны
Расчет рассеянной (солнечной)	Вычисление методом итераций составляющей
составляющей спектральной	спектральной плотности яркости факела,
плотности яркости факела	обусловленной внешней (солнечной) подсветкой

Расчет	спектральной	функции	Определение спектральной функции пропускания
прозрачі	ности атмосферь	I	атмосферы для заданной геометрии наблюдения и
			атмосферных профилей с использованием банка
			данных HITRAN

Модуль включает банки данных HITRAN, HITEMP, а также банк данных по спектральным характеристикам поглощения и рассеяния частиц (эффективные поперечники, альбедо, индикатрисы) в зависимости от температуры.

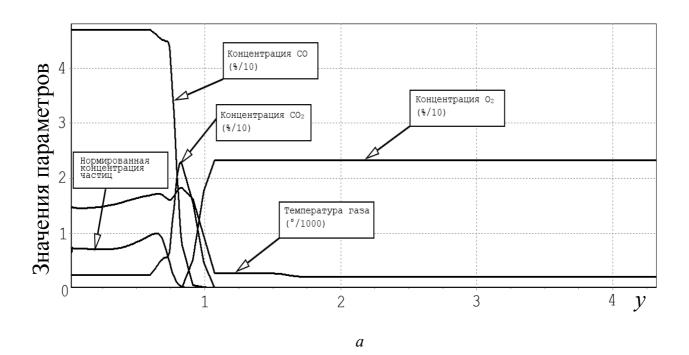
Код модуля написан в программной среде Microsoft Visual Studio (6.0 и выше). Объем исходного текста компиляции составляет ~ 111 кБ, объем исходного кода используемых библиотек ~ 206 кБ. Модуль оттестирован и работоспособен на любых компьютерах под управлением ОС Windows XP. Минимальные требования: Pentium — совместимый процессор с тактовой частотой ~ 2 ГГц, объем оперативной памяти — не менее 600 МБ.

#### Результаты расчетов пространственных распределений параметров факелов

Сверхзвуковые струи, истекающие на умеренно нерасчетных режимах, т.е. при параметре нерасчетности  $n=p_a/p_\infty$ :  $1 < n < 10^3$  (  $p_a$  - давление на срезе сопла,  $p_\infty$  - давление в спутном потоке), условно разделяются на три характерных участка: начальный, переходный и основной. Результаты расчетов пространственных распределений параметров сверхзвуковой струи при n=10 представлены на рис. 1,2. На рис. 1 показаны поперечные относительные профили основных параметров потока для сечений в начальном (a), переходном  $(\delta)$  и основном  $(\epsilon)$  участках струи. Начальные

значения параметров струи взяты из работы [4]. По оси абсцисс отложены относительные значения поперечной координаты y.

Значения параметров в относительных единицах откладываются по оси ординат. Значения температуры даны по Кельвину (в тысячах градусов), остальные параметры для удобства демонстрации приведены к различным условным значениям. На рис. 2 показаны продольные профили значений основных параметров (в тех же относительных единицах) на оси струи. По оси абсцисс отложено относительное расстояние от среза сопла x.



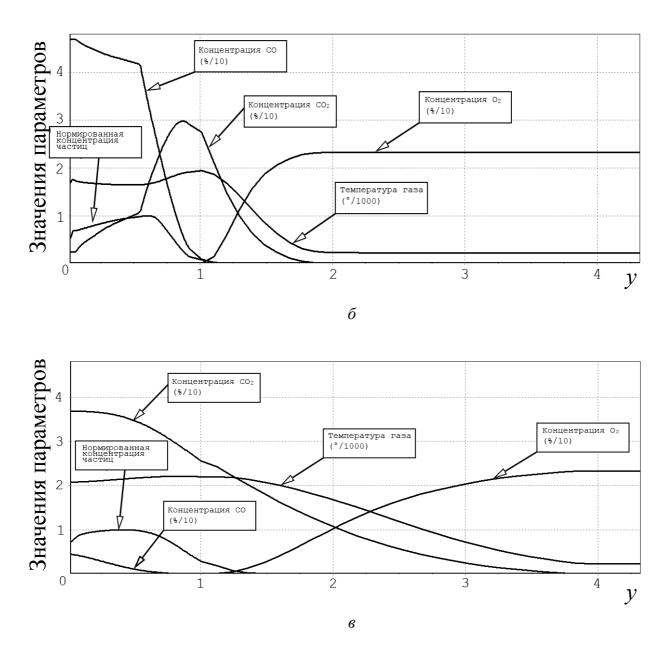


Рис.1. Поперечные профили основных параметров в начальном (a), переходном  $(\delta)$  и основном  $(\epsilon)$  участках струи при n=10

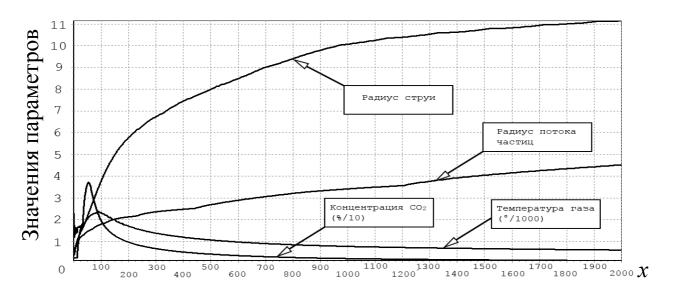


Рис. 2. Продольные профили значений основных параметров на оси струи при n=10

Полученные распределения параметров струи соответствуют общим физическим закономерностям изменения структуры и параметров течения вдоль струи в условиях относительно плотного спутного потока [1,2].

В сверхзвуковых струях при  $n > 10^3$  влияние эффектов турбулентного течения уменьшается, взаимодействие выхлопных продуктов со спутным потоком и релаксация проходят в основном на молекулярном уровне. На рис. 3, 4 представлены результаты моделирования сверхзвуковой струи при  $n = 10^5$ .

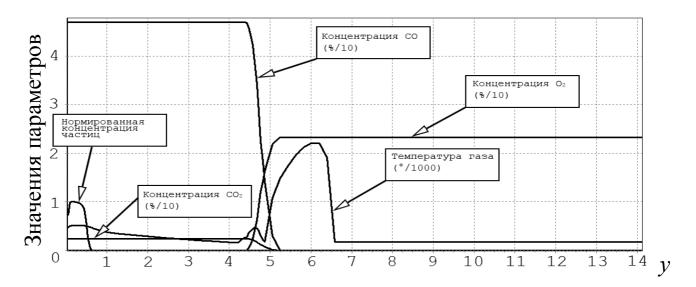
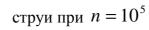


Рис. 3. Поперечные относительные профили основных параметров на начальном участке



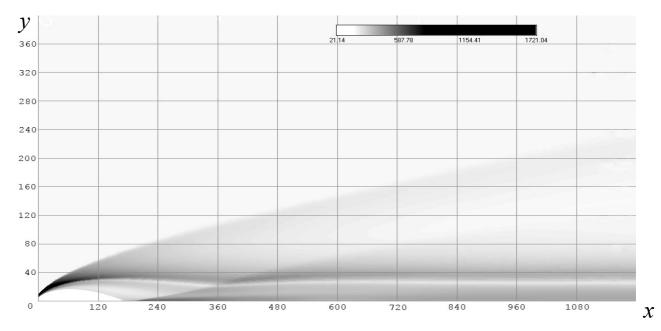


Рис.4. Распределение температуры газа в плоскости продольного разреза при  $n=10^5$ 

На начальном участке (см. рис. 3) достаточно четко выделяются границы контактного разрыва, висячего скачка, головной ударной волны. При значениях

параметра нерасчетности  $n > 10^3$  происходит существенное повышение поступательной температуры газа в области локализации сжатого слоя вблизи оси струи (см. рис. 4), а также наблюдается существенное различие поступательной и колебательной температуры, обусловленное замедленной релаксацией колебательных степеней свободы молекул.

# Результаты моделирования спектроэнергетических характеристик светимости газодинамических факелов

Для проверки функциональных возможностей разработанной модели проведены расчеты спектральных характеристик светимости газодинамических факелов в различных условиях.

На рис. 5 представлены изображения факелов (с повышенной контрастностью) в полосе поглощения углекислого газа и паров воды 2,7 мкм. Расчеты проведены для параметров спутного воздушного потока, соответствующих высотам 5, 50, 120 км. Поглощение излучения в атмосфере не учитывалось. Направление наблюдения перпендикулярно оси факела. Изменение структуры ИК-изображений факелов с увеличением высоты соответствует характерным изменениям пространственных распределений основных параметров факела, в частности температуры газа и частиц.

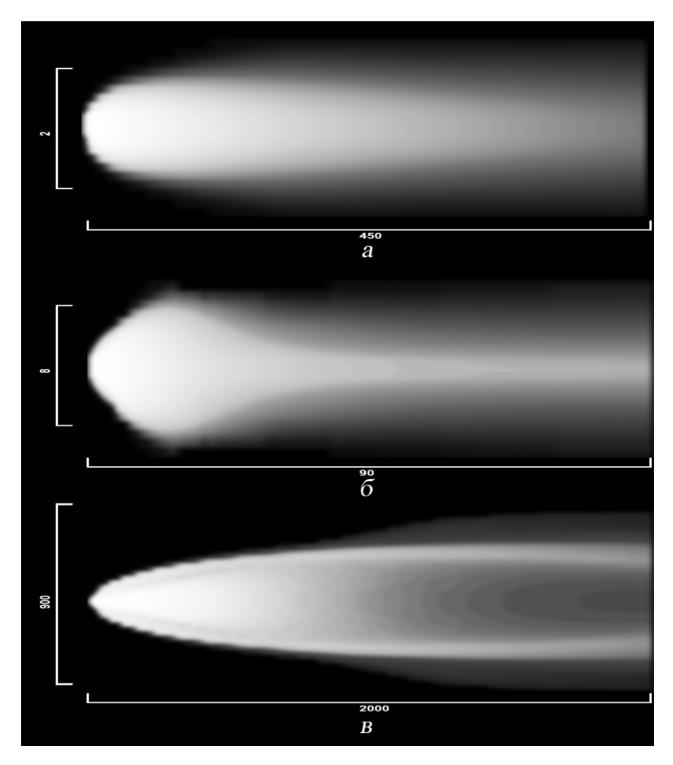


Рис. 5. Изображения факелов в полосе поглощения 2,7 мкм, рассчитанные для параметров спутного воздушного потока на высотах 5 (a), 50 (b), 120 (b) км (продольные и поперечные размеры указаны в относительных единицах)

На рис. 6 представлен график функции линейной яркости факела, рассчитанной для высоты 5 км, в зависимости от относительного расстояния X, начиная от среза сопла, в полосе поглощения 2,7 мкм. Эта функция немонотонна, ее максимум приходится на участок, где температура факела максимальна и велика концентрация углекислого газа и паров воды.

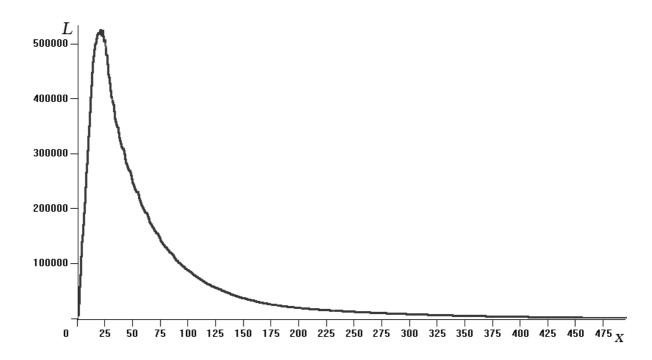


Рис. 6. Функция линейной яркости факела L в полосе поглощения 2,7 мкм, рассчитанная для высоты 5 км

На рис. 7 представлены графики спектральной плотности излучения факела в полосе поглощения 2,7 мкм, рассчитанные с высоким разрешением по волновым числам v (0,01cm $^{-1}$ ) для высот 5 и 50 км. Спектр излучения меняется существенно, что

обусловлено значительным изменением температуры и давления в факеле.

На рис. 8, 9 продемонстрировано влияние поглощения атмосферы на трассе наблюдения на спектр излучения факела при высоте 15 км и спектральном диапазоне 2-3 мкм. Для наглядности графиков проведено усреднение результатов спектроскопических расчетов в полосах длин волн шириной 0.025 мкм. На рис. 8 показана спектральная функция коэффициента пропускания атмосферы вдоль луча с перигеем 15 км (горизонтальная трасса). На рис. 9 представлены спектры излучения факела, рассчитанные без учета поглощения в атмосфере и с учетом поглощения на трассе. При сопоставлении рис. 8 и 9 видно, что полосы максимума поглощения в атмосфере соответствуют максимуму излучения факела без учета поглощения в атмосфере и минимуму принимаемого излучения при учете поглощения.

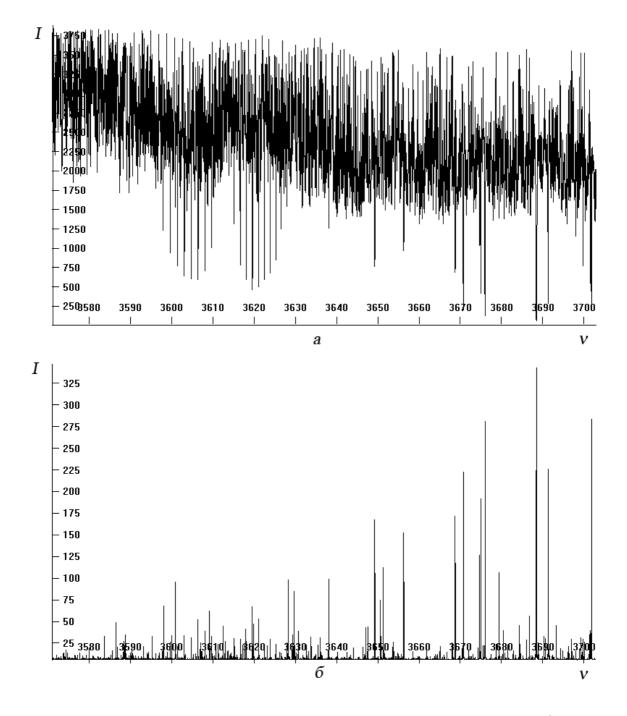


Рис. 7. Тонкая структура спектральной плотности излучения I (Вт/см<sup>-1</sup>/стер) факела в зависимости от волнового числа v (см<sup>-1</sup>) в полосе поглощения 2,7 мкм для высоты 5 км (a) и 50 км (б)

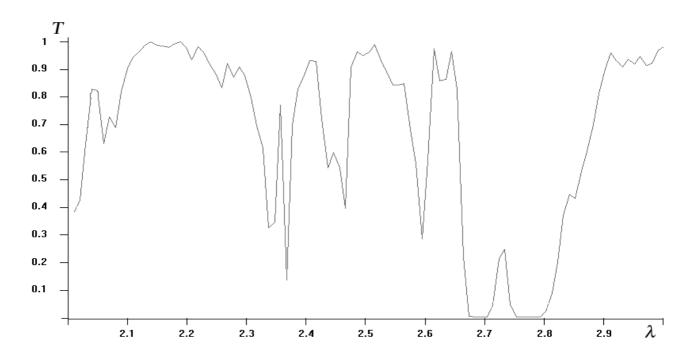


Рис. 8. Зависимость от длины волны коэффициента пропускания атмосферы T вдоль луча с перигеем 15 км

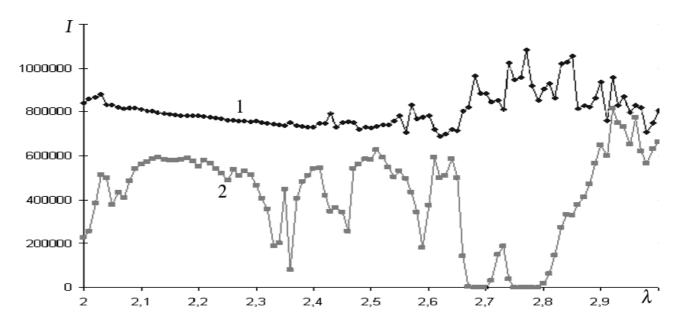
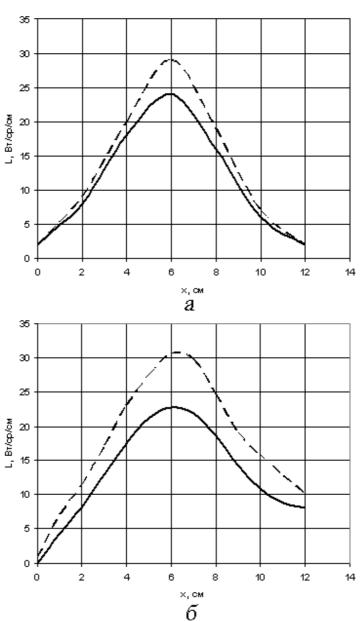


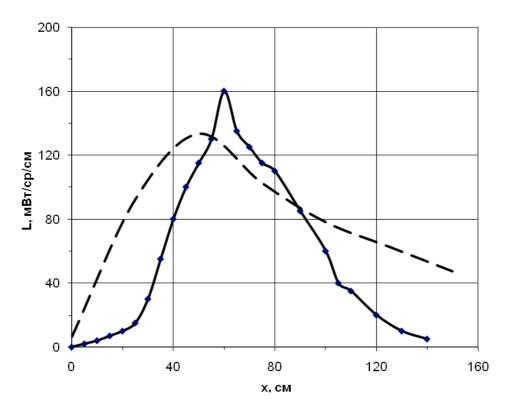
Рис. 9. Спектры излучения факела I без учета атмосферного поглощения (1) и с учетом поглощения на трассе (2) вдоль луча с перигеем 15 км

Проведено сравнение с результатами аналогичных расчетов по другим моделям и с экспериментальными данными. На рис. 10 представлены расчетные графики функций линейной яркости факела в зависимости от расстояния от среза сопла для двух размеров частиц: 1 и 10 мкм.



Графики, показанные на рис. 10a, взяты из работы [6]. Графики, показанные на рис. 10b, рассчитаны на описываемой в статье модели. Для параметров потока на срезе сопла использовались значения, приведенные в работе [6]. Сравнение позволяет говорить о хорошем соответствии расчетных функций линейной яркости факела и их зависимостей от размеров частиц.

На рис. 11 представлены результаты лабораторных измерений в вакуумной камере функции линейной яркости факела L (для параметров атмосферы на высоте 12,2 км) и соответствующие результаты расчета, полученные на описываемой модели. Экспериментальные данные и значения параметров потока на срезе сопла приведены в работе [10]. Учитывая неизбежное неполное соответствие исходных данных для расчета условиям эксперимента, можно отметить, что результаты моделирования неплохо соответствуют экспериментальным данным.



#### Заключение

Разработанная компьютерная модель предназначена для расчетов характеристик светимости газодинамических факелов с высоким спектральным разрешением. Использование спектроскопических данных позволяет методически корректно учесть сильную корреляцию между тонкими структурами линий излучения факела и линий поглощения атмосферы и, как следствие, повысить точность расчетов принимаемого излучения при наблюдении факела через атмосферу. Результаты расчетов на модели могут быть использованы при исследовании возможностей классификации продуктов сгорания газодинамических факелов по измерениям спектральных характеристик их

светимости.

## Литература

- 1. *Авдуевский В.С.*, *Ашратов Э.А.*, *Иванов А.В.*, *Пирумов У.Г.* Газодинамика сверхзвуковых неизобарических струй. М.: Машиностроение, 1989.
- 2. Аэродинамика ракет / Под ред. М.Хемша и Дж.Нилсена. Кн.2.- М.: Мир, 1989.
- 3. Rothman L. S. et all, The HITRAN molecular spectroscopic database and HAWKS (HITRAN atmospheric workstation): 1996 edition. J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer Vol. 60, No. 5, P. 665-710, 1998.
- 4. *Шишков А.А.*, *Панин С.Д.*, *Румянцев Б.В.* Рабочие процессы в ракетных двигателях твердого топлива. М.: Машиностроение, 1989.
- 5. Криксунов Л.З. Справочник по основам инфракрасной техники. М.: Сов. радио, 1978.
- 6. *Нельсон Х.Ф.* Влияние частиц на ИК-излучение выхлопных струй тактических ракет//Аэрокосмическая техника, 1986. №1. С. 128-130.
- 7. Годунов С.К., Забродин А.В., Иванов М.Я., Крайко А.Н., Прокопов Г.П. Численное решение многомерных задач газовой динамики. М.: Наука, 1976.
- 8. Марчук Г.И. Методы вычислительной математики. М.: Наука, 1977.
- 9. Чандрасекар С. Перенос лучистой энергии. М.: Иностр. лит-ра, 1953.
- 10. *Андреев Е.П. Завелевич Ф.С., Макаров И.П.* Сравнение результатов расчета ИК-излучения факела с экспериментальными данными, полученными в вакуумной камере //Оптический журнал, 1998. Т 65. № 11. С. 34-36.