

На правах рукописи



Маслова Дарья Владимировна

**ВЛИЯНИЕ НЕРАВНОВЕСНОСТИ НА ХАРАКТЕРИСТИКИ
ИЗЛУЧЕНИЯ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНЫХ ГАЗОВЫХ СМЕСЕЙ**

Специальность 01.04.14 – «Теплофизика и теоретическая теплотехника»

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени

кандидата технических наук

Москва, 2019

Работа выполнена в федеральном государственном бюджетном образовательном учреждении высшего образования «Московский авиационный институт (национальный исследовательский университет)»

Научный руководитель: доктор технических наук, доцент,
Молчанов Александр Михайлович

Официальные оппоненты: **Ребров Сергей Григорьевич**, доктор технических наук, Государственный научный центр Российской Федерации — федеральное государственное унитарное предприятие «Исследовательский центр имени М.В. Келдыша», начальник отдела

Рыжков Сергей Витальевич, доктор физико-математических наук, доцент, Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Московский государственный технический университет имени Н. Э. Баумана (национальный исследовательский университет)», профессор кафедры теплофизики.

Ведущая организация: Публичное акционерное общество «Ракетно-космическая корпорация «Энергия» имени С.П. Королева».

Защита состоится «23» декабря 2019 года в 11:00 часов на заседании диссертационного совета Д212.152.08, созданного на базе ФГБОУ ВО «Московский авиационный институт (национальный исследовательский университет)», по адресу: 125993, Москва, А-80, ГСП-3, Волоколамское шоссе, д. 4.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке и на сайте ФГБОУ ВО «Московский авиационный институт (национальный исследовательский университет)»

https://mai.ru/upload/iblock/d12/DISSERTASIYA_MASLOVA_D_V.pdf

Автореферат разослан « ____ » _____ 2019 г.

Ученый секретарь диссертационного совета,
доктор технических наук, профессор

Зуев Юрий Владимирович

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы диссертации и степень ее разработанности. На каждом этапе своего развития ракетно-космическая техника ставит перед наукой новый ряд проблемных задач как фундаментального, так и прикладного характера.

На современном этапе фундаментальность таких задач связана с необходимостью учета термодинамических неравновесных процессов: неравновесности химических реакций, тепловой и динамической неравновесности между различными фазами течения, термической неравновесности между различными степенями свободы молекул газа, а также неравновесности развития процессов турбулентного смешения.

В этой связи одной из важнейших проблем в настоящее время является учет влияния колебательной неравновесности на интенсивность теплового излучения.

Газовые смеси, характеризующиеся неравновесным возбуждением колебательных степеней свободы молекул, широко используются в различных областях науки и техники. В качестве примеров следует отметить:

- газодинамические лазеры;
- реагирующие газовые смеси;
- течения за ударной волной;
- сверхзвуковые струи с большой степенью нерасчетности.

Для всех указанных выше типов течений первостепенное значение имеет неравновесность протекающих в них физико-химических процессов и, в частности, термическая и химическая неравновесность. Кроме того, существенное влияние на энергетический баланс подобных систем имеют радиационные процессы. Поэтому исследование влияния неравновесности на характеристики излучения высокотемпературных газовых смесей представляется весьма актуальной задачей современной науки и техники.

Исследованиям в этой области посвящено значительное количество работ таких авторов как: Завелевич Ф.С., Пластинин Ю.А., Суржиков С.Т., Modest M. F., Вткин Е.И., Молчанов А.М. и др. В своих работах они отмечают сложность

аппроксимации спектральных характеристик молекулярных газов, особенно в условиях термической неравновесности и подчеркивают необходимость разработки соответствующих математических моделей.

Цель диссертационной работы - изучение влияния термической неравновесности на интенсивность излучения в высокотемпературных газах.

Задачи исследования:

1. Проведение критического анализа методов расчета неравновесного излучения молекулярных газов.

2. Построение адекватной математической модели течения химически и термически неравновесной газовой смеси.

3. Выбор системы энергетических переходов, пригодной для решения различных классов задач высокотемпературной термогазодинамики.

4. Разработка эффективной методики расчета интенсивности узкополосного излучения горячих газов с ярко выраженным линейчатым спектром.

5. Обоснование достоверности предложенной методики путём ее сопоставления с имеющимися в литературе экспериментальными данными, а также результатами расчёта ряда отечественных и зарубежных авторов.

6. Математическое моделирование высотных струй РД и анализ влияния термической неравновесности на интенсивность и спектр излучения этих течений.

Научная новизна работы состоит в следующем:

1. Предложена новая методика расчета теплового излучения колебательно неравновесной газовой смеси на основе метода k -распределения.

2. Проведен анализ влияния колебательной неравновесности на газодинамические параметры и интенсивность излучения высокоскоростного турбулентного течения колебательно неравновесного газа.

3. Получены обобщающие зависимости по скоростям энергетических реакций с участием возбужденных молекул HCl для достаточно широкого диапазона температур.

4. Проведен анализ влияния коэффициентов скоростей энергетических реакций с участием молекул HCl на интенсивность излучения данного компонента смеси.

5. Показано, что при определенных условиях возможно догорание струй РД на высотах полета существенно больше, чем общепринятые 50-60 км.

6. Получены зависимости излучения факелов двигателей от угла атаки набегающего потока.

Теоретическая и практическая значимость работы заключается в возможности их использования в решении широкого круга практических задач. Предложенная методика расчёта позволяет с высокой эффективностью проводить расчет интенсивности узкополосного излучения горячих газов с ярко выраженным линейчатым спектром. Результаты работы позволяют выработать рекомендации по выбору коэффициентов скоростей реакций энергообмена с участием молекул HCl , а также дать предложения по выбору нового спектрального диапазона для дистанционной диагностики факелов двигателей летательных аппаратов.

Объект исследования – высокотемпературные газовые смеси с ярко выраженной термической неравновесностью.

Предмет исследования – неравновесные физико-химические и теплообменные процессы, протекающие в высокотемпературных газах.

Методы исследования. Результаты представленной работы получены на основе метода математического моделирования с последующим сопоставлением полученных результатов с имеющимися в литературе экспериментальными данными и с результатами расчетов других авторов.

Достоверность результатов подтверждается использованием законов сохранения массы химических компонентов, количества движения и энергии; сравнением результатов расчётов с экспериментальными данными и результатами расчётов аналогичных задач другими авторами.

Положения, выносимые на защиту:

1. методика расчета теплового излучения колебательно неравновесной газовой смеси на основе метода k -распределения;
2. результаты исследования влияния колебательной неравновесности на газодинамические параметры и интенсивность излучения высокоскоростного турбулентного течения колебательно неравновесного газа;
3. результаты исследования влияния коэффициентов скоростей энергетических реакций с участием молекул HCl на интенсивность излучения данного компонента смеси;
4. алгоритмическая программа для создания базы данных для расчета узкополосного спектра неравновесного излучения HCl методом k -распределения;
5. база данных коэффициентов поглощения и излучения для термически неравновесного газа в зависимости от поступательно-вращательной температур, температур колебательных мод, парциальных давлений компонентов;
6. зависимости излучения факелов двигателей от угла атаки набегающего потока.

Апробация результатов. Основные результаты работы докладывались и обсуждались на научно-технических конференциях и семинарах в 2015–2018 гг., проводимых в МАИ, ЦАГИ и ЦИАМ.

- Всероссийская научно-техническая конференция «Авиадвигатели XXI века». Москва, ЦИАМ имени П.И. Баранова. 24-27 ноября 2015 г.

- ЦАГИ – ИТПМ СО РАН – СПбПУ – НИИ механики МГУ. Видеосеминар по аэромеханике. Молчанов А.М., Маслова Д.В. (МАИ НИУ). Газодинамика и неравновесное тепловое излучение гетерогенных струй при вариации угла атаки потока.

- XLII Международная молодёжная научная конференция «Гагаринские чтения». Москва, 12-15 апреля 2016 г.

Личный вклад автора. Автор принимал участие в постановке цели и задач исследования, поиске и обобщении имеющихся в литературе экспериментальных данных, разработке математической модели, создании базы данных

коэффициентов поглощения и излучения для термически неравновесного газа, а также разработке методики расчета теплового излучения колебательно неравновесных газов. Автором проведено численное исследование процессов, обработка и обобщение результатов математического моделирования.

Публикации. По теме диссертации опубликовано 4 работы, из них в рецензируемых изданиях опубликовано 2 работы.

Структура и объем диссертации. Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения, списка используемой литературы из 114 наименований и приложения. Объем работы составляет 154 страницы машинописного текста, включающего 49 иллюстраций, 20 таблиц. Приложение составляет 32 страницы.

СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении обоснована актуальность темы диссертации, определены цель и задачи исследования, выделены основные положения работы, имеющие новизну и практическую значимость.

В первой главе обозначена необходимость исследования неравновесных физико-химических процессов для создания современных образцов авиационной и ракетно-космической техники, а также подчеркнута важность численных методов исследования (численных экспериментов), как одного из важнейших инструментов исследований в настоящее время. Показано, что исследование влияния термической неравновесности на излучение горячего газа является актуальной задачей. Рассмотрены основные методы расчета интенсивности излучения молекулярных газов, а также указаны основные проблемы, возникающие при математическом моделировании течений газовых смесей с ярко выраженной колебательно неравновесностью. Выявлено, что высокая точность расчетов спектра излучения неравновесного газа сопряжена с большими затратами вычислительных мощностей и времени счета, что затрудняет применение точных методов в составе комплексного моделирования течений с наличием химических реакций и горением. Показано, что в качестве наиболее

перспективного метода для создания эффективной (с точки зрения точности и объема вычислений) методики расчета неравновесного излучения выступает метод k -распределения.

Во второй главе рассматриваются основные уравнения, описывающая течение химически и термически неравновесной газовой смеси, а также предлагается новая методика расчета оптических характеристик газовых потоков, основанная на методе k -распределения и учитывающая колебательную неравновесность течения.

Основная система уравнений включает:

Уравнение неразрывности (общее):

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

где ρ - плотность газовой смеси; u_j - компонента скорости в j -ом направлении;

Уравнение количества движения:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho u_i) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_j u_i + \delta_{ji} p - \tau_{ij}) = 0, \quad (2)$$

где p - давление; τ_{ij} - тензор вязких напряжений.

Уравнение сохранения массы химического компонента s :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho C_s) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho C_s u_j + \rho C_s V_{s,j}) = \dot{w}_s, \quad s = 1, 2, \dots, N_C - 1, \quad (3)$$

где $C_s = \rho_s / \rho$ 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; $V_{s,j}$ - диффузионная скорость компонента s в j -ом направлении, для диффузионной скорости используется закон Фика.

При описании колебательно-неравновесного газа используются следующие предположения:

- 1) вращательные и поступательные энергетические моды молекул находятся в равновесии, а их энергия определяется единой поступательно-вращательной температурой T_{TR} ;

- 2) энергия возбужденных электронных состояний молекул пренебрежимо мала по сравнению остальными энергетическими модами;
- 3) считается, что потери тепла на излучение в уравнении энергии обусловлены в основном высвечиванием (дезактивацией) колебательных мод;
- 4) не учитываются энергетические переходы электронов и ионов.

Уравнение полной энергии:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho E) + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\rho u_j \left(E + \frac{p}{\rho} \right) + q_j - u_i \tau_{ij} \right] = -Q_R, \quad (4)$$

где E - полная энергия на единицу массы; q_j - плотность теплового потока, обусловленного теплопроводностью и диффузией, в j -ом направлении; Q_R - потери на излучение.

Для расчета кинетики процессов колебательного энергообмена используется модель модовой кинетики. При этом колебания в каждой моде (и для двухатомных, и для многоатомных молекул) моделируются гармоническими осцилляторами. Среднее число m -ых колебательных квантов α_m , приходящихся на одну молекулу вычисляется в этом случае по формуле:

$$\alpha_m = r_m \frac{1}{\exp(\theta_m / T_{v,m}) - 1} \quad (5)$$

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

Изменение во времени числа квантов каждой моды определяется всеми энергетическими переходами, в которых участвует данная мода, с общей скоростью ψ_m :

$$\frac{d\alpha_m}{dt} = \psi_m \quad (6)$$

Скорость образования колебательной энергии связана со скоростью ψ_m следующим соотношением:

$$\dot{e}_{v,m} = \frac{R_U \theta_m}{M_{s(m)}} \psi_m, \quad (7)$$

где $e_{v,m}$ - удельная (на единицу массы компонента, к которому относится данная мода) колебательная энергия m -ой колебательной моды, $M_{s(m)}$ - молярная масса компонента s , к которому относится m -ая мода колебаний, R_U - универсальная газовая постоянная.

Используя (6) и (7) можно записать уравнение переноса колебательной энергии m -ой колебательной моды:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho e_{v,m}) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho e_{v,m} u_j) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\mu}{Sc} \frac{\partial}{\partial x_j} e_{v,m} \right) + 2 \frac{\mu}{Sc} \frac{1}{C_{s(m)}} \frac{\partial e_{v,m}}{\partial x_j} \frac{\partial C_{s(m)}}{\partial x_j} + \rho \dot{e}_{v,m}, \quad (8)$$

$$m = 1, 2, \dots, N_M$$

Здесь N_M – количество колебательных мод, $C_{s(m)}$ - массовая доля компонента s , к которому относится m -ая мода, Sc - число Шмидта. Источник колебательной энергии, содержащийся в правой части этого уравнения, обусловлен $V-T$ и $V-V$ энергетическими переходами, скоростью образования колебательной энергии в результате химических реакций, а также потерей колебательной энергии в результате спонтанной излучательной дезактивации.

Термодинамические свойства газовой смеси рассчитываются с учетом наличия колебательной, поступательной и вращательной степеней свободы.

Удельная (на единицу массы) полная энергия газовой смеси E представляет собой сумму внутренней и кинетической энергии $E = e + u_k^2/2$. Внутренняя энергия каждого компонента складывается из поступательной $e_{T,s}$, вращательной $e_{R,s}$, колебательной и химической составляющих:

$$e = \sum_{s=1}^{N_C} C_s e_{T,s} + \sum_{s=1}^{N_C} C_s e_{R,s} + \sum_{m=1}^{N_M} C_{s(m)} e_{v,m} + \sum_{s=1}^{N_C} C_s h_s^0, \quad (9)$$

где h_s^0 - теплота образования компонента s , N_C – число компонентов.

Удельная поступательно-вращательная теплоемкость компонента s при постоянном объеме $C_{V,TR,s}$ состоит из поступательной и вращательной частей:

$$C_{V,TR,s} = (C_V)_{T,s} + (C_V)_{R,s} \quad (10)$$

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

$$(C_V)_{T,s} = \frac{3}{2} \frac{R_U}{M_s}, \quad (C_V)_{R,s} = \frac{i_s}{2} \frac{R_U}{M_s} \quad (11)$$

где i_s - число вращательных степеней свободы молекулы: $i_s = 0$ для одноатомных молекул, $i_s = 2$ для двухатомных молекул, $i_s = 3$ для многоатомных нелинейных молекул.

При расчете турбулентных течений используется трехпараметрическая $k - \varepsilon - V_n$ модель турбулентности, разработанная в МАИ специально для расчета сжимаемых высокоскоростных течений.

Модель термической кинетики включает следующие процессы колебательного энергетического обмена, характерные для газовой смеси продуктов сгорания двигателей ЛА:

V – T процессы:

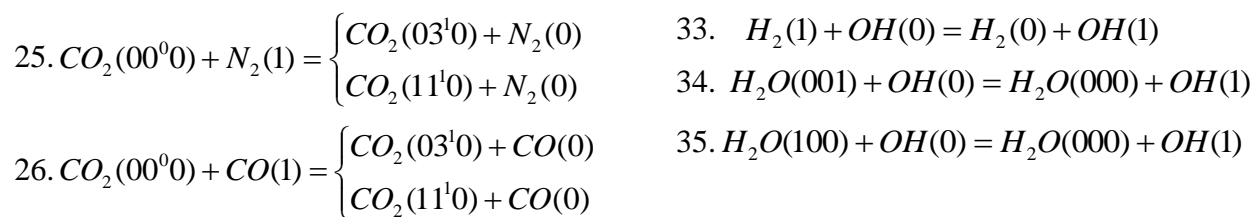
- | | |
|--|------------------------------------|
| 1. $N_2(1) + M = N_2(0) + M$ | 7. $NO(1) + M = NO(0) + M$ |
| 2. $CO_2(01^10) + M = CO_2(00^00) + M$ | 8. $H_2O(100) + M = H_2O(000) + M$ |
| 3. $CO(1) + M = CO(0) + M$ | 9. $H_2O(001) + M = H_2O(000) + M$ |
| 4. $H_2O(010) + M = H_2O(000) + M$ | 10. $O_2(1) + M = O_2(0) + M$ |
| 5. $H_2(1) + M = H_2(0) + M$ | 11. $OH(1) + M = OH(0) + M$ |
| 6. $CO_2(00^01) + M = CO_2(00^00) + M$ | |

Внутримолекулярные V – V процессы:

- | | |
|--|-------------------------------------|
| 14. $CO_2(00^01) + M = \begin{cases} CO_2(03^10) + M \\ CO_2(11^10) + M \end{cases}$ | 16. $H_2O(100) + M = H_2O(020) + M$ |
| | 17. $H_2O(001) + M = H_2O(020) + M$ |
| | 18. $H_2O(001) + M = H_2O(100) + M$ |
| 15. $CO_2(10^00) + M = CO_2(02^00) + M$ | |

Межмолекулярные V – V' процессы:

- | | |
|---|---|
| 19. $CO_2(00^01) + N_2(0) = CO_2(00^00) + N_2(1)$ | 27. $N_2(1) + O_2(0) = N_2(0) + O_2(1)$ |
| 20. $CO_2(00^01) + CO(0) = CO_2(00^00) + CO(1)$ | 28. $CO_2(01^11) + N_2(0) = CO_2(01^10) + N_2(1)$ |
| 21. $CO(1) + N_2(0) = CO(0) + N_2(1)$ | 29. $CO(1) + O_2(0) = CO(0) + O_2(1)$ |
| 22. $N_2(1) + NO(0) = N_2(0) + NO(1)$ | 30. $CO_2(01^11) + CO(0) = CO_2(01^10) + CO(1)$ |
| 23. $CO(1) + NO(0) = CO(0) + NO(1)$ | 31. $H_2(1) + H_2O(000) = H_2(0) + H_2O(001)$ |
| 24. $CO_2(00^01) + NO(0) = CO_2(00^00) + NO(1)$ | 32. $H_2(1) + H_2O(000) = H_2(0) + H_2O(100)$ |



Для определения скоростей реакций колебательных переходов с участием возбужденных молекул CO , CO_2 , N_2 , H_2O , H_2 , O_2 , OH используются имеющиеся в литературе зависимости, полученные на основе теории SSH и, по возможности, проверенные экспериментально.

Перенос лучистой энергии описывается уравнением переноса излучения (УПИ) при отсутствии рассеяния:

$$\frac{dI_\eta}{ds} = \kappa_\eta N (B_\eta^{ne} - I_\eta) \quad (12)$$

где κ_η - спектральный коэффициент поглощения, отнесенный к числу частиц излучающего компонента N ; B_η^{ne} - неравновесная функция Планка.

Так как уравнение (12) включает в себя неравновесную функцию Планка, то для его решения необходимо определить заселенности энергетических уровней. Поскольку внутри одной энергетической моды имеют место резонансные переходы, протекающие с большой скоростью, правомерно сделать допущение, что для каждой отдельной моды колебаний формируется квазистационарное распределение Больцмана по соответствующим колебательным и вращательным температурам. В этом случае заселенность колебательно-вращательного уровня, характеризующегося колебательным уровнем V и вращательным уровнем J , можно найти по следующей формуле:

$$n_{VJ} = n_0 Q_V^{-1} Q_R^{-1} g X_R X_V \quad (13)$$

здесь $g = g_V g_J$; $g_J = 2J + 1$ - статистический вес J -го вращательного уровня; g_V - статистический вес колебательного уровня; Q_R - вращательная функция распределения; Q_V - колебательная функция распределения; X_R , X_V - есть функции Больцмана по вращательной и колебательным температурам соответственно; n_0 - число частиц излучающего компонента в единице объема.

Уравнение (12) справедливо для термически равновесной среды. Для термически неравновесного газа уравнение (12) необходимо записать в несколько иной форме:

$$\frac{dI_\eta}{ds} = \kappa_\eta(\underline{\phi})N(B_\eta^{ne}(\underline{\phi}) - I_\eta) \quad (14)$$

где $\underline{\phi} = (T_{TR}, T_V)$ в случае доплеровского уширения; $I_\eta = I(\eta)$ - функция волнового числа.

Для применения метода k -распределения, строго справедливого в случае термического равновесия, для термически неравновесной среды имеющийся метод был модифицирован таким образом, чтобы учесть зависимость радиационных свойств газа от нескольких температур. В итоге для неравновесного случая была получена формула для функции k -распределения, имеющая в качестве весового множителя функцию Планка:

$$f(\underline{\phi}, k) = \frac{1}{\Delta\eta} \frac{1}{B_\eta^{ne}(\underline{\phi})_{\Delta\eta}} \int B_\eta^{ne}(\eta, \underline{\phi}) \delta(k - \kappa_\eta) d\eta \quad (15)$$

где $\delta(k - \kappa_\eta)$ - функция Дирака.

Входящая в формулу (15) функция Планка $B_\eta^{ne}(\underline{\phi})$ может быть выбрана достаточно произвольно, средней по полосе $\Delta\eta$. Полагаем ее равной:

$$B_\eta^{ne}(\underline{\phi}) = \frac{\bar{\varepsilon}(\underline{\phi})}{\bar{\kappa}(\underline{\phi})} \quad (16)$$

где $\bar{\varepsilon}$, $\bar{\kappa}$ - средние значения на полосе $\Delta\eta$ коэффициентов излучения и поглощения соответственно.

Поскольку функция $f(\underline{\phi}, k)$ носит весьма неупорядоченный (беспорядочный) характер, необходимо перейти к монотонной функции:

$$g(\underline{\phi}, k) = \int_0^k f(\underline{\phi}, k) dk \quad (17)$$

Таким образом, средний по полосе коэффициент пропускания равен:

$$\bar{\tau} = \int_{k_{\min}}^{k_{\max}} \exp(-kNL) f(\underline{\phi}, k) dk = \int_0^1 \exp(-k(g)NL) dg \quad (18)$$

где L - длина пути вдоль траектории луча, $k(g)$ - функция, обратная $g(\phi, k)$.

Для расчета среднего коэффициента пропускания неоднородного слоя газа используется коррелированный k -метод:

$$\bar{\tau} = \int_{k_{\min}}^{k_{\max}} \exp\left(-\int_{s'}^s kN(y)dy\right) f(\phi, k) dk = \int_0^1 \exp\left(-\int_{s'}^s k(g, y)N(y)dy\right) dg \quad (19)$$

Среднее по полосе значение интенсивности излучения определяется по формуле:

$$I = \frac{1}{\Delta\eta} \int_{\Delta\eta} I_{\eta} d\eta = \int_0^1 I_k(k(g)) dg = \int_0^s B^{ne}(\phi) \frac{d\bar{\tau}}{ds'} ds' \quad (20)$$

где $B^{ne}(\phi)$ рассчитывается по формуле (16).

Отмечается, что использование метода k -распределения предполагает создание баз данных (БД) для отдельных веществ, где функция $k(g)$ зависит от распределения коэффициента поглощения данного компонента внутри рассматриваемой полосы. Коэффициент поглощения в этом случае является функцией многих параметров: поступательной, вращательной и колебательных температур, общего давления, парциального давления компонента, а также от волнового числа и ширины полосы. Указывается, что для упрощения использования подобной БД следует сделать две различные базы данных: 1) для высоких и средних давлений - в зависимости от 3-х параметров: температуры, давления и мольной доли компонента; 2) для низких давлений - в зависимости от поступательно-вращательной температуры (с учетом предположения о равенстве вращательной и поступательной температур $T_R = T_T$) и колебательных температур.

Также отмечается, что приведенная математическая модель учитывает только колебательно-вращательные переходы молекул и непосредственно применима для расчета интенсивности излучения в инфракрасной области спектра, что ограничивает круг задач. Однако указывается, что расчет течений с наличием электронных переходов атомов и молекул и излучением в видимом спектре потребует лишь некоторого расширения модели (включения в нее набора уравнений для реакций энергетического обмена и кинетических уравнений,

описывающих процессы релаксации электронной энергии), в то время как предложенный в настоящей работе подход к расчету оптических характеристик газа на основе метода k -распределения останется общим, как и структура математической модели.

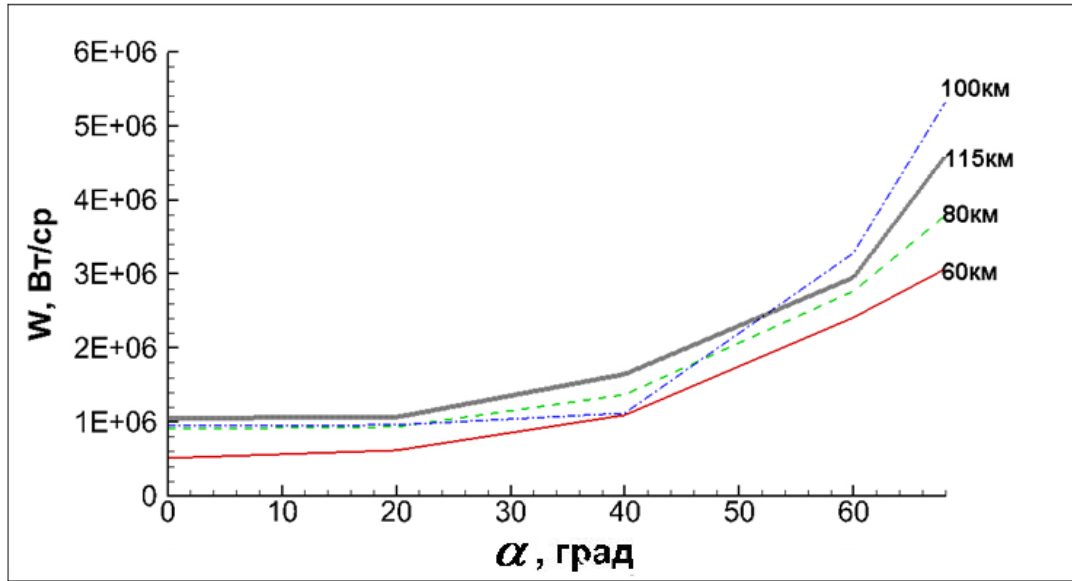
В третьей главе представлены результаты тестирования предлагаемой методики расчета неравновесного излучения, а также результаты численного исследования (с применением уже апробированной методики) некоторых неравновесных течений, имеющих большое практическое значение в современной ракетно-космической технике.

Тестирование методики проводилось на основании имеющихся экспериментальных данных и результатов моделирования других авторов. В ходе тестирования рассмотрены как простые задачи, связанные с излучением однородных слоев горячего газа, так и излучение сверхзвуковых струй высокотемпературных продуктов сгорания, в том числе с наличием конденсированной фазы.

После подтверждения адекватности методики с ее помощью было проведено численное исследование влияния угла атаки внешнего потока на интенсивность излучения факела модельных газовых и многофазных струй. В результате показано, значительное (до 5,3 раза) увеличение интегральной интенсивности излучения струи, при изменении угла атаки набегающего потока от 0° до 68° (рисунок 1).

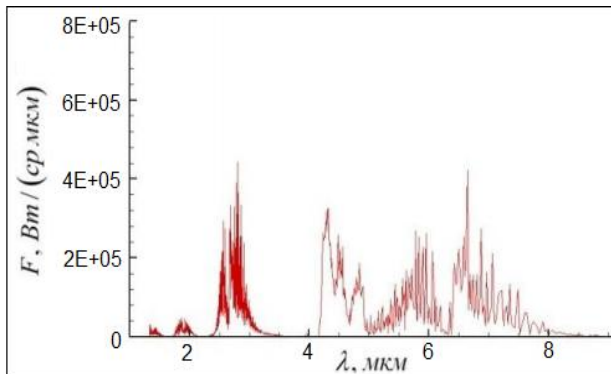
Также показано, что до высоты 100 км и в газовой, и в гетерогенной струе с ростом угла атаки спектральные линии основных излучающих компонентов (CO_2 , H_2O и CO) возрастают примерно пропорционально друг другу.

На больших же высотах с увеличением угла атаки излучение H_2O возрастает сильнее (особенно в диапазоне 2.7 мкм), чем излучение CO_2 (4.3 мкм) и CO (4.7 мкм), что показано на рисунке 2.

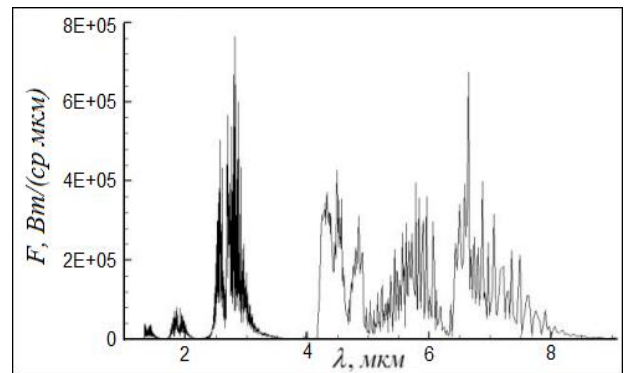


Спектральный диапазон 1÷9 мкм, высота 60÷115 км.

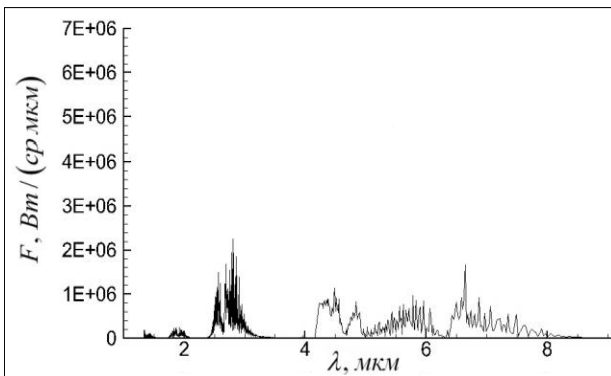
Рис. 1. Зависимость интегральной интенсивности излучения струи модельного РДТТ от угла атаки набегающего потока при направлении наблюдения вдоль оси Y (перпендикулярно оси сопла).



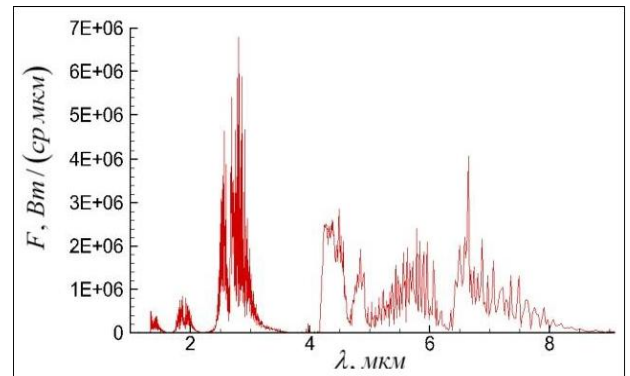
(а) – угол атаки 0° .



(б) – угол атаки 20° .



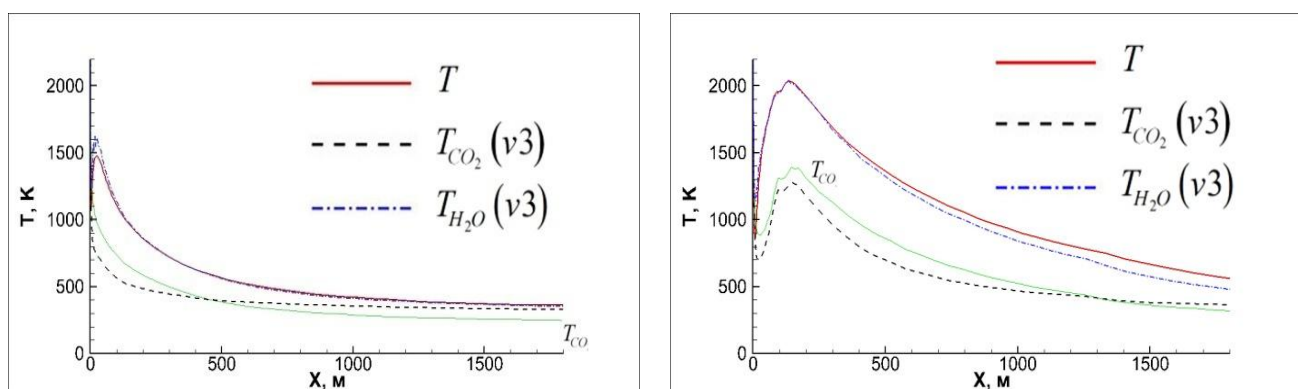
(в) – угол атаки 40° .



(г) – угол атаки 60° .

Рис. 2. Спектральная интенсивность излучения струи модельного ЖРД на высоте 100 км при различных углах атаки набегающего потока.

Данный факт обусловлен существенным отставанием колебательных температур $T_{CO_2(v3)}$ и T_{CO} от поступательной температуры, в отличие от $T_{H_2O(v3)}$, которая близка ней (рисунок 3).



(а) – угол атаки 0° .

(б) – угол атаки 60° .

На рисунке координата X направлена вдоль оси сопла.

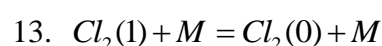
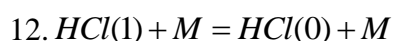
Рис. 3. Распределение температур в середине слоя смешения с наветренной стороны струи модельного ЖРД на высоте 100 км при различных углах атаки набегающего потока.

Кроме того выявлено, что на больших высотах (больше 100 км) изменение химического состава атмосферы, а именно увеличение концентраций радикалов O и H вследствие диссоциации приводит к существенному усилению догорания и росту интенсивности излучения факела (рисунок 4).

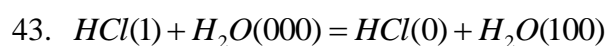
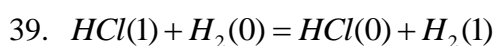
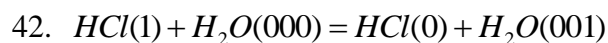
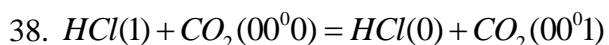
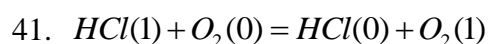
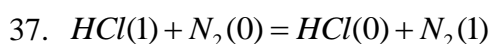
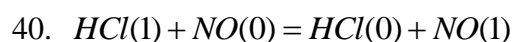
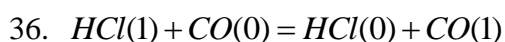
В четвертой главе проводится исследование ИК излучения колебательно возбужденной газовой смеси, содержащей HCl (струя модельного РДТТ).

Для учета колебательной неравновесности хлорсодержащих соединений в общую систему уравнений добавлены следующие энергетические процессы:

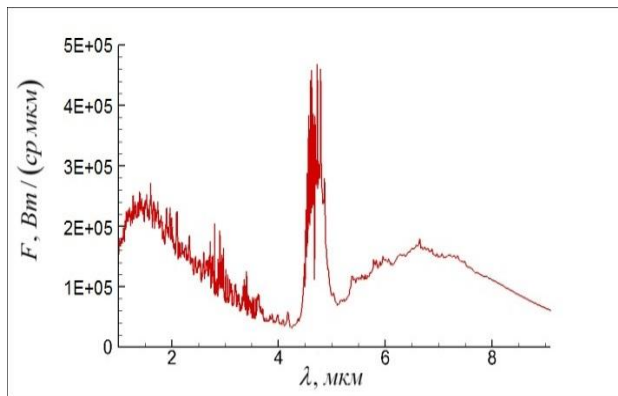
$V - T$ процессы:



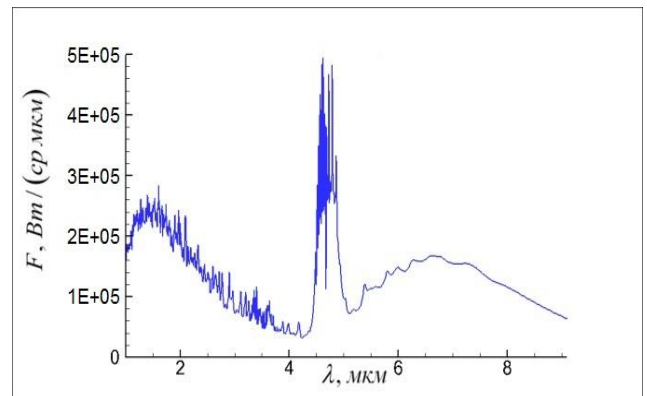
Межмолекулярные $V - V'$ процессы:



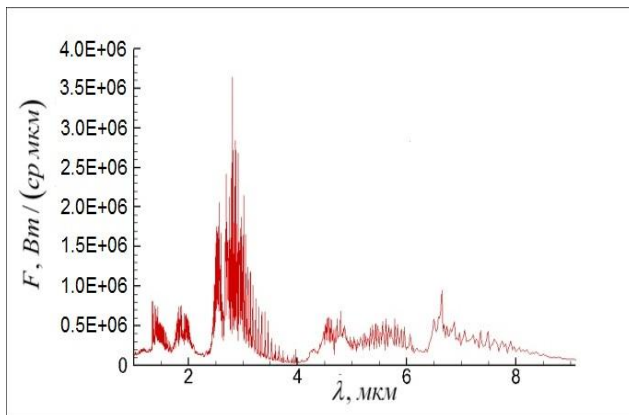
Показано, что варьирование коэффициентов скоростей $V-T$ и $V-V'$ энергетических переходов с участием колебательно возбужденных молекул HCl в 5-10 раз относительно номинальных значений (полученных на основе обобщения имеющихся в литературе данных) существенно влияет на интенсивность излучения данного компонента смеси. При этом определяющее влияние оказывают скорости реакций обмена энергией с молекулами CO_2 , CO , N_2 и H_2O (сравните рисунки 5 (а) и б).



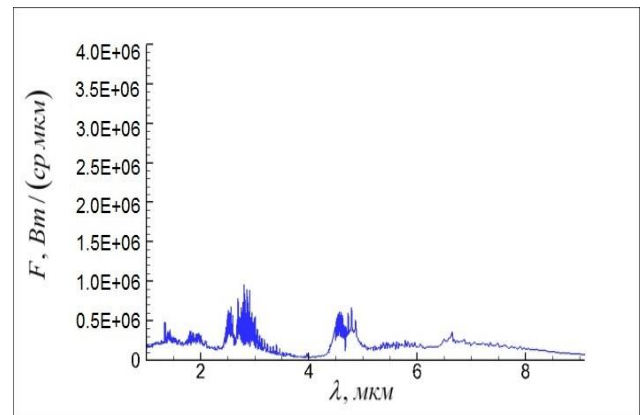
(а) – угол атаки 0° , расчет с учетом реального состава атмосферы.



(б) – угол атаки 0° , расчет без учета реального состава атмосферы.



(в) – угол атаки 60° , расчет с учетом реального состава атмосферы.



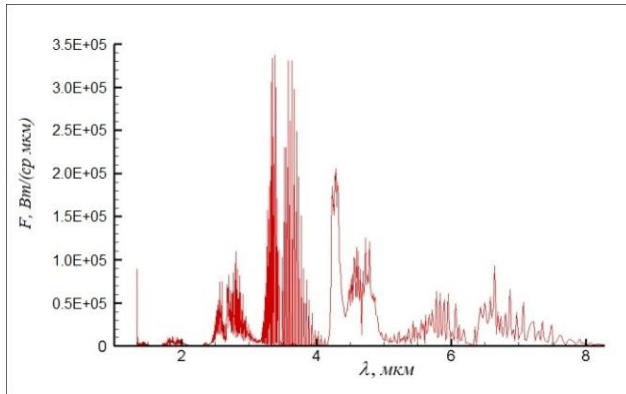
(г) – угол атаки 60° , расчет без учета реального состава атмосферы.

Высота 115 км, углы атаки набегающего потока $0^\circ \div 60^\circ$.

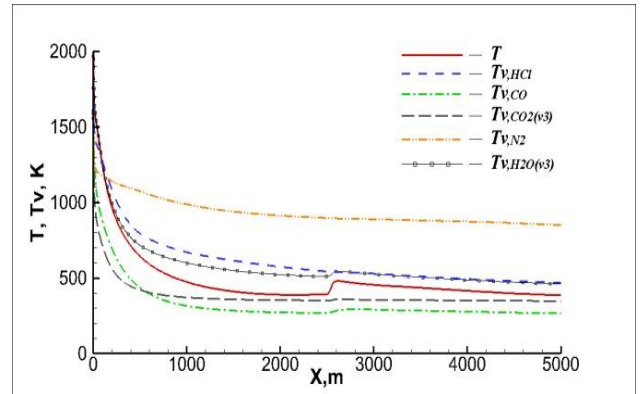
Рис. 4. Влияние учета реального химического состава атмосферы на спектральную интенсивность излучения струи модельного РДТТ.

Отмечается, что основная доля общего излучения струи приходится на начальный участок, поэтому изменение колебательной температуры HCl в этой

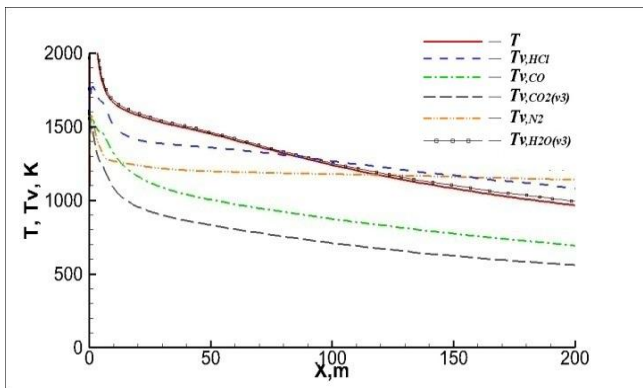
области течения в значительной степени определяет интенсивность излучения данного компонента (смотри рис. 5 (б, в) и 7).



(а) - спектральная интенсивность излучения, проинтегрированная по длине струи 5 км.

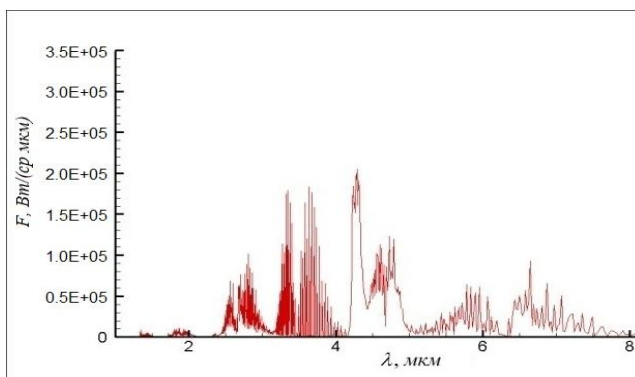


(б) - изменение поступательной и колебательных температур в середине слоя смешения (начальный участок).

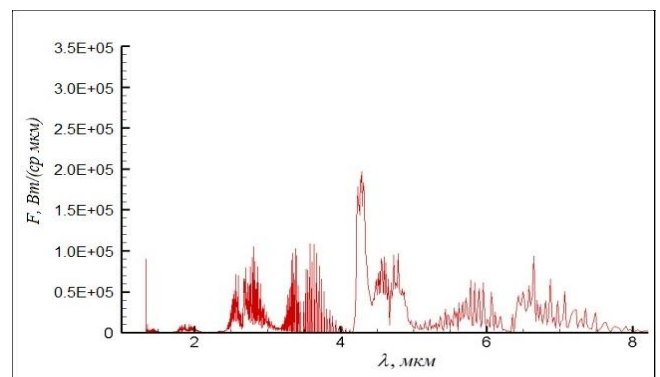


(в) - изменение поступательной и колебательных температур в середине слоя смешения.

Рис. 5. Расчет параметров струи с использованием номинальных значений коэффициентов скоростей реакций колебательного обмена для молекул HCl .



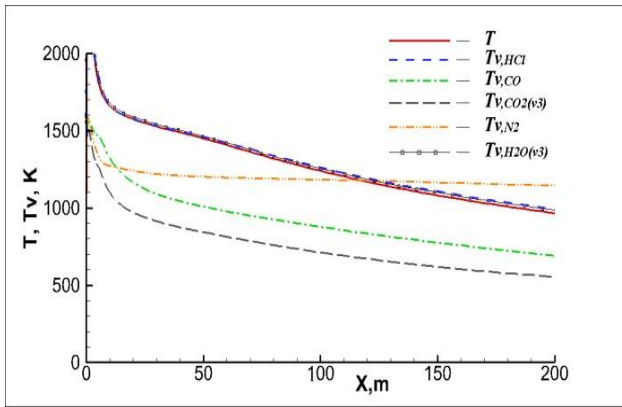
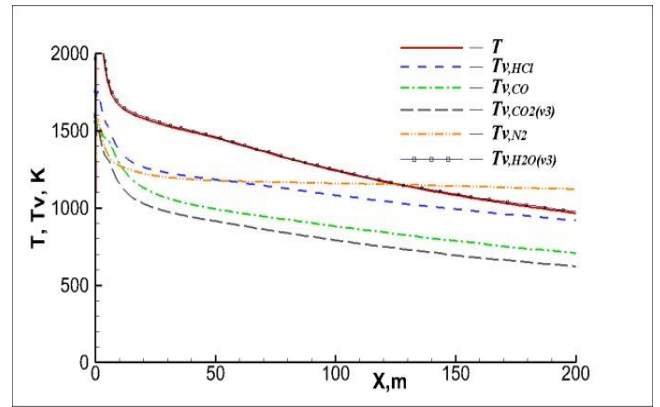
(а) – для взаимодействия HCl с H_2O .



(б) – для взаимодействия HCl с CO_2 , CO и N_2 .

В 10 раз относительно номинальных увеличены коэффициенты скоростей $V-T$ и $V-V'$ процессов с участием молекул HCl .

Рис. 6. Спектральная интенсивность излучения, проинтегрированная по длине струи 5 км.

(а) – для взаимодействия HCl с H_2O .(б) – для взаимодействия HCl с CO_2 , CO и N_2 .

В 10 раз относительно номинальных увеличены коэффициенты скоростей $V-T$ и $V-V'$ процессов с участием молекул HCl .

Рис. 7. Распределение поступательной и колебательных температур на начальном участке струи в середине слоя смешения.

Рисунок 8 демонстрирует зависимость интегральной интенсивности излучения струи в интервале 3-4 мкм от скоростей энергетических переходов молекулы HCl .

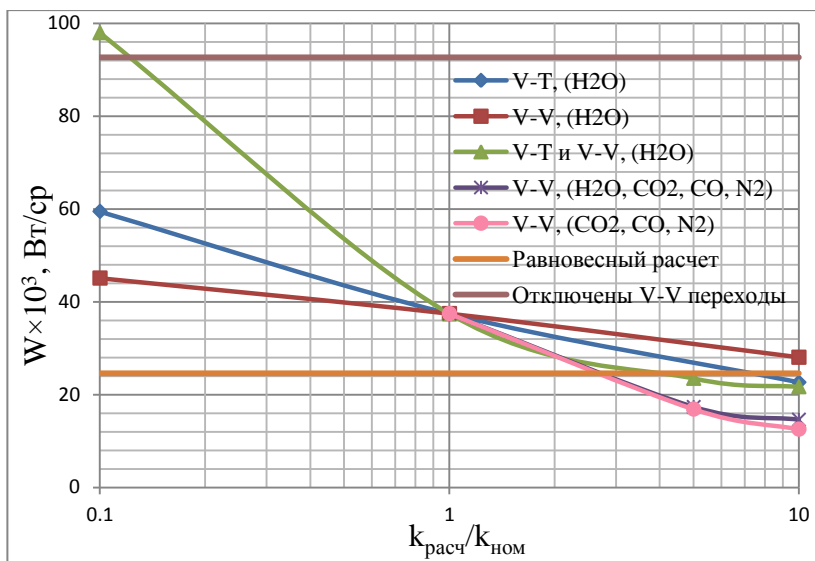


Рис. 8. Интегральная интенсивность излучения струи в интервале 3...4 мкм в зависимости от скоростей энергетических переходов молекулы HCl

По результатам исследования рекомендуется при проведении практических расчетов для взаимодействия возбужденной молекулы HCl с такими партнерами, как CO_2 , CO и N_2 увеличить коэффициенты скоростей $V-V'$ переходов в 10 раз относительно номинальных, для остальных же реакций использовать номинальные значения скоростей.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

По результатам исследований, проведенных в представляемой диссертационной работе можно сформулировать следующие основные выводы:

1. Проведен анализ существующих методов расчета неравновесного излучения молекулярных газов и выявлены основные проблемы, возникающие при математическом моделировании течений газовых смесей с ярко выраженной колебательной неравновесностью.

На основании анализа научных исследований российских и зарубежных авторов показано, что в качестве наиболее перспективного метода для создания эффективной (с точки зрения точности и объема вычислений) методики расчета неравновесного излучения выступает метод k -распределения.

2. Построена математическая модель, адекватно описывающая течение химически и термически неравновесной газовой смеси. Осуществлен выбор системы энергетических переходов, пригодной для решения различных классов задач высокотемпературной термогазодинамики.

3. Предложена новая методика расчета теплового излучения колебательно неравновесной газовой смеси, основанная на методе k -распределения. Методика позволяет с высокой эффективностью проводить расчеты узкополосного излучения молекулярных газов с линейчатым характером спектра.

4. Произведена верификация предложенной методики путём ее сопоставления с имеющимися в литературе экспериментальными данными, а также результатами расчёта ряда отечественных и зарубежных авторов, показана адекватность используемой математической модели.

5. Проведен анализ влияния колебательной неравновесности на газодинамические параметры и интенсивность излучения высокоскоростного турбулентного течения колебательно неравновесного газа. Получены зависимости излучения факелов двигателей от угла атаки набегающего потока.

6. Показано, что при определенных условиях возможно догорание струй РД на высотах полета существенно больше, чем общепринятые 50-60 км.

7. Получены обобщающие зависимости по скоростям энергетических реакций с участием возбужденных молекул HCl для достаточно широкого диапазона температур. Проведен анализ влияния коэффициентов скоростей энергетических реакций с участием молекул HCl на интенсивность излучения данного компонента смеси. Выработаны рекомендации по выбору коэффициентов скоростей $V-V'$ переходов при проведении практических расчетов с участием возбужденной молекулы HCl .

8. Разработана алгоритмическая программа для создания базы данных для расчета узкополосного спектра неравновесного излучения HCl методом k -распределения. Создана база данных коэффициентов поглощения и излучения для термически неравновесного газа.

Перспективы развития исследования. При дальнейшей разработке тематики перспективным представляется проведение математического моделирования излучения в сильных ударных волнах при больших числах Маха. Что, в свою очередь, потребует расширения математической модели путем включения в нее набора уравнений для реакций энергетического обмена и кинетических уравнений, описывающих процессы релаксации электронной энергии, для расчета излучения в видимой части спектра.

ПУБЛИКАЦИИ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

Публикации в рецензируемых изданиях:

1. Маслова Д.В., Молчанов А.М. Теоретическое исследование ИК излучения колебательно возбужденной газовой смеси, содержащей HCl // Тепловые процессы в технике. 2017. №. 6. - С.252-261.

2. Молчанов А.М., Маслова Д.В. Расчет газодинамики и ИК излучения 3D-струй с учетом колебательной неравновесности. // Тепловые процессы в технике. 2019. №. 4. – С. 146-157.

Публикации в других изданиях:

3. Маслова Д.В., Молчанов А.М. Расчет неравновесного излучения горячих газовых потоков с использованием модели k-распределения // Сборник тезисов докладов Всероссийской научно-технической конференции «Авиадвигатели XXI века». Москва. ЦИАМ имени П.И. Баранова. 24-27 ноября 2015 г. С. 1076-1078.

4. Молчанов А. М., Солнцев М. В., Маслова Д. В. Влияние угла атаки на тепловое излучение газовой и многофазной струи // Физико-химическая кинетика в газовой динамике. 2016. Т. 17, №. 3. – Режим доступа: <http://chemphys.edu.ru/issues/2016-17-3/articles/636/> (дата обращения 29.07.2019).