

УПРОЩЕННЫЕ МОДЕЛИ РАСЧЕТА ЗАСЕЛЕННОСТЕЙ ВОЗБУЖДЕННЫХ ЭЛЕКТРОННЫХ СОСТОЯНИЙ МОЛЕКУЛ ЗА ФРОНТОМ УДАРНЫХ ВОЛН

А.С. Дикалюк^{1,2}

¹*Институт проблем механики РАН им. А.Ю. Ишлинского, Россия, Москва, 119526*

²*Московский физико-технический институт, Россия, Долгопрудный, 141700*

Аннотация

В данной работе выполнено сравнение различных методов для расчета заселенностей возбужденных электронных состояний молекул за фронтом ударных волн. Сравниваются как сами заселенности возбужденных электронных состояний, рассчитанные с использованием данных методов, так и спектральные интенсивности излучения, рассчитанные на основе этих заселенностей. На основе выполненных расчетов формулируются рекомендации для специалистов, выполняющих расчеты тепловых радиационных потоков к поверхностям спускаемых космических и гиперзвуковых аппаратов.

SIMPLIFIED MODELS FOR CALCULATION OF POPULATIONS OF ELECTRONIC EXCITED STATES OF MOLECULES BEHIND THE SHOCK FRONT

A.S. Dikalyuk^{1,2}

¹*Institute for Problems in Mechanics RAS after A. Yu. Ishlinskii, Russia, Moscow, 119526*

²*Moscow Institute of Physics and Technology, Russia, Moscow, 141700*

In the paper various methods for calculation of populations of electronic excited states of molecules in the relaxation zone behind the shock front are compared against each other. Both populations of electronic excited states of molecules obtained using these methods and spectral intensities of radiation calculated based on these populations are compared. Based on the calculations performed recommendations for the specialists working on calculations of radiative heat fluxes to the surfaces of re-entry and hypersonic vehicles are formulated.

1. ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время космические агентства различных стран (США, Россия) занимаются разработкой новых видов спускаемых космических аппаратов (КА), способных доставлять на поверхности планет до 6 человек. Форма этих КА не претерпела изменений по сравнению с КА предыдущих поколений, однако, их размеры увеличились [1]. Увеличение размеров спускаемых КА привело к тому, что толщина сжатого слоя перед аппаратом равна ~50 см. Это означает, что по сравнению с КА, разработанными в 60-х годах XX века, существенно возросли радиационные потоки к их поверхностям. То есть для правильного проектирования теплозащиты перспективных КА необходимо правильно предсказывать радиационные тепловые потоки.

При расчетах радиационных тепловых потоков определение заселенностей возбужденных электронных излучающих состояний атомов, молекул и ионов является одной из важнейших подзадач. В настоящее время наиболее физически оправданным способом является расчет заселенностей электронных состояний по радиационно-столкновительным моделям с максимально возможным числом учтенных процессов возбуждения/тушения этих состояний [2, 3]. Однако, решение огромного числа кинетических уравнений (в количестве число химических компонент плюс число учтенных электронных возбужденных состояний молекул, атомов и ионов) вместе с задачей внешнего обтекания КА (со всеми имеющимися в ней проблемами) даже на самых мощных современных компьютерах не

представляется возможным. Поэтому авторы радиационно-столкновительных моделей ищут физически обоснованные способы для сокращения числа решаемых в них кинетических уравнений.

В нашей научной группе особое внимание уделяется построению гибридных радиационно-столкновительных моделей [4, 5]. Гибридных в том смысле, что в качестве отдельных компонент (т.е. тех, для которых формулируются отдельные кинетические уравнения) учитываются только наиболее важные излучающие состояния молекул, атомов и ионов. Однако использование даже таких моделей в трехмерных расчетах внешнего обтекания КА затруднено. Поэтому в данной работе выполнен анализ способов, которые могут быть использованы для упрощения развитого к настоящему времени подхода.

В части 2 данной работы будут представлены основные положения модели, разработанной в нашей группе, в части 3 – представлены возможности для ее упрощения. Далее будет выполнено сравнение результатов, полученных с использованием полной и упрощенных моделей. Сравниваться будут как собственно заселенности возбужденных электронных состояний, так и спектральные интенсивности излучения, рассчитанные на их основе. На основе результатов будут сформулированы рекомендации для расчета заселенностей возбужденных электронных состояний тем специалистам, которые работают в области расчетов аэротермодинамики спускаемых и гиперзвуковых аппаратов.

2. ОСНОВНЫЕ ПОЛОЖЕНИЯ ПОЛНОЙ МОДЕЛИ

Полное описание модели, разработанной в нашей группе, можно найти в [4, 5]. В данном разделе представлено лишь ее описание. Модель для расчета неравновесного излучения газов нагретых ударной волной (УВ) основана на маршевом методе. Задача решается в одномерной постановке вдоль оси x . Рассмотрение производится в системе отсчета связанной с фронтом ударной волны. Фронт находится в точке $x=0$. Параметры газа за фронтом УВ рассчитываются с использованием соотношений Ренкина–Гюгонно на основе параметров (давление, температура, скорость фронта) в невозмущенном газе. При этом считается, что колебательная температура учитываемых молекулярных мод, температура газа электронов, а так же концентрации химических компонент за фронтом равны своим значениям перед фронтом УВ. За фронтом УВ от точки $x=0$ решается система уравнений для определения структуры релаксационной зоны. В эту систему уравнений входят: система уравнений Эйлера (для определения газодинамических параметров газовой смеси) дополненная термическим уравнением состояния многокомпонентного химически реагирующего газа; система уравнений химической кинетики; уравнения для расчета температур, учитываемых колебательных мод молекул; уравнение для определения температуры газа электронов.

Уравнения химической кинетики формулируются как для собственно химических компонент, так и для избранных электронных возбужденных состояний молекул. Данные состояния выбираются на основе их значимости с точки зрения расчета излучения. Для этих электронных состояний формулируется кинетический механизм их заселения/опустошения, определяются константы скоростей соответствующих процессов. Данный подход мы называем гибридным радиационно-столкновительным.

Для определения колебательных температур используется модовое приближение. Для расчета температуры колебательной моды учитываются процессы VT- и CV-обмена. Времена релаксации определяются с помощью соотношений Миликана–Вайта с учетом поправки Парка [6, 7]. Модель Тринора–Мэррона используется для описания механизма CV-обмена (механизма исчезновения/появления колебательных квантов избранной моды в результате химических реакций) [8]. Механизм VV-обмена не учитывается, т.к. он приводит, только к перераспределению колебательных квантов между модами, но не изменяет их полного числа. В качестве модели неравновесной диссоциации используется модель Кузнецова.

Для определения температуры электронного газа решается соответствующее уравнение [9]. Учитываются различные процессы, ответственные за разогрев/охлаждение электронного газа: упругие электронно-ионные столкновения, упругие электронно-атомные столкновения, ассоциативная ионизация и диссоциативная рекомбинация, ионизация атомов электронным ударом, электронно-колебательное взаимодействие. Температура электронного газа используется для определения констант скоростей реакций, в которых участвуют электроны.

3. ВОЗМОЖНЫЕ ВАРИАНТЫ УПРОЩЕНИЯ ПОЛНОЙ МОДЕЛИ

3.1. Отказ от использования уравнения для расчета температуры электронного газа

В работах, посвященных исследованию структуры релаксационной зоны за фронтом ударной волны, было показано, что температура газа электронов совпадает с хорошей точностью с колебательной температурой тех молекул, чья концентрация является максимальной в данный момент времени [9]. Этот эффект наблюдается как раз в той области, где в основном происходит возбуждение электронных состояний молекул. Это происходит вследствие высокой эффективности процесса взаимодействия колебательных степеней свободы молекул и газа электронов. Данный эффект также отслеживает и полная модель, изложенная выше.

Таким образом, первым упрощением может служить отказ от решения уравнения для расчета температуры электронного газа. Вместо него предлагается использовать средневзвешенную колебательную температуру с весами равными относительным концентрациям тех молекулярных компонент, для мод которых рассчитываются колебательные температуры. Соответственно, как и в полной модели, эта средневзвешенная колебательная температура будет использоваться для определения констант скоростей тех реакций, в которых участвуют электроны.

3.2. Использование распределения Больцмана для определения заселенностей электронных состояний молекул в неравновесной области

На первый взгляд такой подход может оказаться неверным. Возможно, что заселенности электронных состояний молекул, рассчитанные по данному методу, будут достаточно сильно отличаться от тех, что рассчитаны по полной модели или по методу, описанному выше. Но стоит отметить, что нас интересует в первую очередь не сами заселенности, а та или иная радиационная характеристика (например, спектральная интенсивность излучения). И может так получиться, что различием в излучательных характеристиках, рассчитанных с помощью такого элементарного подхода и более сложного, можно будет пренебречь. Причем в данном подходе можно пробовать использовать как температуру тяжелых частиц, так и средневзвешенную колебательную температуру, о которой шла речь выше.

Стоит, однако, обратить внимание на следующий момент. Для расчета спектральных интенсивностей излучения используется модель перекрывающихся линий, модифицированная для расчета неравновесных спектральных интенсивностей (т.е. когда не совпадают температуры различных внутренних степеней свободы молекул: вращательная, равная поступательной температуре тяжелых частиц, и колебательная температура). Представляя дальнейшие результаты, будет полагаться, что при расчетах спектральных интенсивностей излучения использовались различные вращательные и колебательные температуры, если не оговорено обратное. Заселенности же рассчитывались одним из указанных выше методов.

4. РЕЗУЛЬТАТЫ

4.1. Сравнение профилей заселенностей

На Рис. 1 представлены результаты расчетов заселенностей электронных возбужденных состояний $\text{NO}(\text{B}^2\Pi)$ – сплошная линия, $\text{N}_2(\text{C}^3\Pi)$ – точки, $\text{N}_2^+(\text{B}^2\Sigma)$ – штриховая линия с использованием различных упрощающих предположений. Линиями без символов обозначены результаты, полученные по полной модели. Линиями с квадратами представлены результаты, полученные с помощью упрощенной модели, из которой исключено решение уравнения для определения температуры газа электронов. Линиями с правыми треугольниками представлены результаты, полученные с помощью распределения Больцмана с поступательной температурой тяжелых частиц, выбранной в качестве параметра. Линиями с левыми треугольниками пред-

ставлены результаты, полученные с использованием распределения Больцмана с соответствующей колебательной температурой, выбранной в качестве параметра. Параметры расчетов следующие: газовая смесь – 80% N_2 – 20% O_2 , скорость ударной волны – 5.56 км/с, давление невозмущенного газа перед фронтом – 1 Торр.

Как видно из рисунка полная модель и ее модификация, не использующая уравнение для расчета температуры газа электронов, дают идентичные результаты. Заметные отличия видны только в профиле, описывающем заселенность состояния $\text{NO}(\text{B}^2\Pi)$ в области $t = 0.2$ мкс. Как указывалось ранее, это связано с тем, что температура газа электронов в области, где происходит возбуждение электронных состояний молекул, с хорошей точностью совпадает с колебательной температурой.

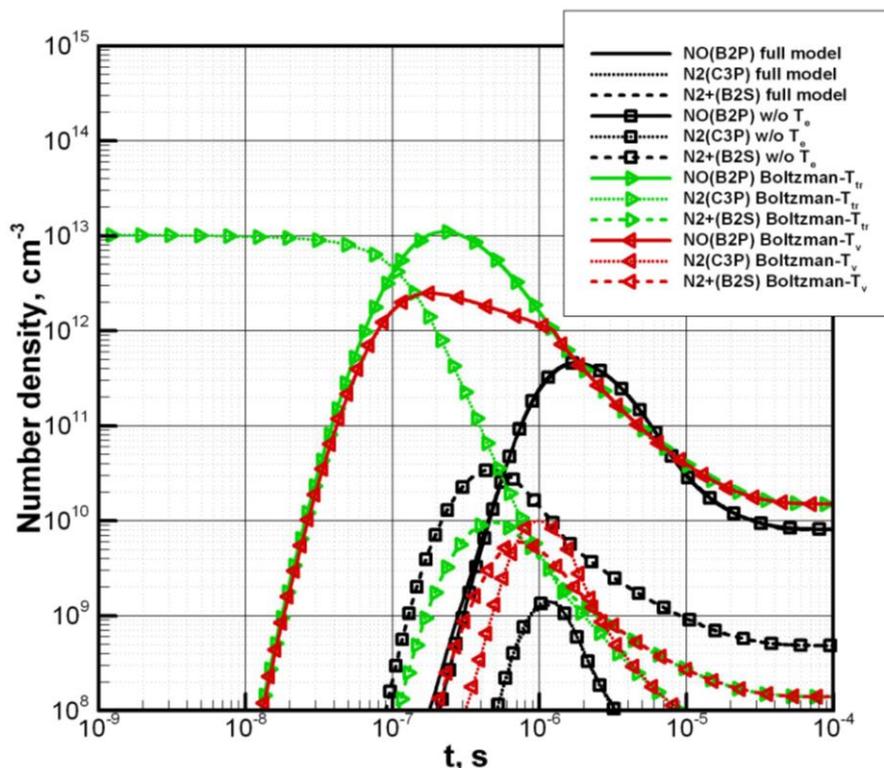


Рис. 1. Распределения заселенностей электронных возбужденных состояний в релаксационной зоне за фронтом ударной волны (80% N_2 - 20% O_2 , $p = 1$ Торр, $V_{sh} = 5.56$ км/с), рассчитанные с использованием различных упрощающих предположений

Использование распределения Больцмана с поступательной температурой тяжелых частиц, как видно из рис. 1, не желательно для определения заселенностей возбужденных электронных состояний атомов, молекул и ионов в неравновесной области. В этом случае можно получить не только неверные величины заселенностей (по сравнению с полной моделью), но и в некоторых случаях, когда молекула присутствует в изначальной газовой смеси, неправильное качественное поведение профиля заселенности (обратить внимание на состояние $\text{N}_2(\text{C}^3\Pi)$ – правые треугольники). Использование распределения Больцмана с колебательной температурой позволяет качественно верно отразить ход профилей заселенностей всех исследованных возбужденных состояний молекул. По абсолютной величине в максимуме различия результатов,

полученных с использованием данного подхода и полной модели, различаются приблизительно на порядок.

Сделаем несколько общих замечаний, которые должны представлять интерес для читателя. Во-первых, по-видимому, ни один из методов, основанных на использовании какого-либо заданного наперед распределения с набором параметров, получаемых из кинетического расчета, не способен правильно описывать кинетику возбуждения электронных состояний молекул (т.е. давать результаты близкие к результатам, получаемым с помощью радиационно-столкновительных моделей). Если же в прикладной задаче интерес представляет интегральная по времени величина (например, спектральная интенсивность излучения, усредненная по промежутку времени), а не кинетика процесса, то, при некоторых условиях, этот подход можно считать оправданным для выполнения оценоч-

ных расчетов. Однако, решение вопроса о том, находятся ли исследуемые условия в области тех, где этот подход оправдан, может стать даже более сложной задачей, чем собственно получение интересующих исследователя результатов. Во-вторых, хотелось бы обратить внимание читателя еще раз на рис. 1. А именно на область времени $t = 10^{-5} \div 10^{-4}$ с. В этой области как видно, заселенности электронных возбужденных состояний выходят на полочку и перестают меняться. С точки зрения температурных распределений в этой области происходит термализация релаксационной области. Из рис. 1 видно, что заселенности, рассчитанные с использованием распределения Больцмана с той или иной температурой (хотя в этой области их числовые значения совпадают), принимают так же одинаковые значения, как и должно быть. Если сравнить результаты в термализованной области, полученные по полной модели и по распределениям Больцмана, то окажется, что они близки (различия составляют до 3 раз), хотя и не совпадают. Этот факт может означать две вещи: либо это численный артефакт, связанный с несовершенством используемой радиационно-столкновительной модели, либо это означает, что термализованная область не является равновесной (что представляет собой интересный физический результат). Для получения окончательного ответа на этот вопрос требуется проведение дополнительных расчетных и экспериментальных исследований. Так же из рис. 1 видно, что в неравновесной части релаксационной зоны заселенности, рассчитанные с использованием распределения Больцмана с поступательной температурой выше, чем заселенности, рассчитанные с использованием распределения Больцмана с колебательной температурой. При этом максимумы последних, в целом смещены левее, чем максимумы последних. Исключение составляет заселенность электронного состояния молекулы NO($V^2\Pi$), рассчитанная с использованием распределения Больцмана с колебательной температурой молекулы основного электронного состояния молекулы NO. Видно, что профили, рассчитанные с помощью распределения Больцмана с той или иной температурой, практически совпадают. Это связано с особым поведением колебательной температуры молекулы NO в релаксационной области (см. рис. 2, сравнить с поведением колебательных температур N_2 или O_2). В свою очередь, такое поведение колебательной температуры NO связано с механизмом образования этой молекулы (в результате обменных реакций).

4.2. Сравнение неравновесных спектральных интенсивностей излучения

На рис. 3 представлены результаты сравнения неравновесных спектральных интенсивностей излучения за фронтом ударной волны (80% N_2 – 20% O_2 , $p = 1$ Торр, $V_{sh} = 5.56$ км/с), полученные различными методами.

Сплошная светло-серая линия соответствует результатам экспериментальных измерений, выполненных на установках НИИ механики МГУ О.П. Шаталовым, П.В. Козловым, Ю.В. Романенко.

Штриховая линия с короткими штрихами соответствует результатам расчетов, выполненных на основе заселенностей электронных возбужденных состояний

молекул, полученных по полной модели. Видно, что результаты, полученные по полной модели, хорошо согласуются с экспериментальными данными.

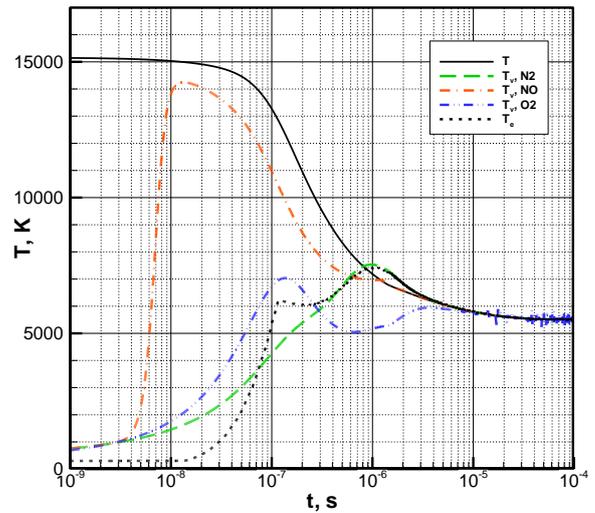


Рис. 2. Распределение температур за фронтом ударной волны: 80% N_2 – 20% O_2 , $p = 1$ Торр, $V_{sh} = 5.56$ км/с

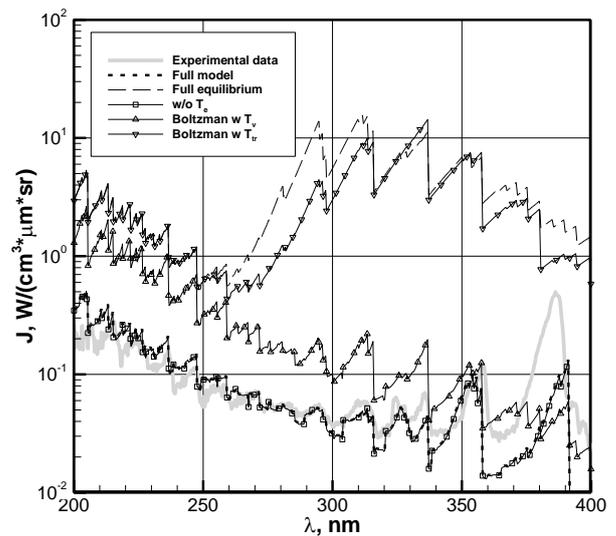


Рис.3. Сравнение спектральных интенсивностей неравновесного излучения за фронтом ударной волны (80% N_2 – 20% O_2 , $p = 1$ Торр, $V_{sh} = 5.56$ км/с) рассчитанных с помощью различных моделей. Время усреднения спектра 35 мкс

Штриховая линия с длинными штрихами соответствует полностью равновесному расчету: заселенности рассчитаны на основе распределения Больцмана с поступательной температурой, при расчетах излучения вращательная и колебательная температура полагаются одинаковыми и равными поступательной.

Тонкая сплошная линия с квадратами соответствует расчету излучения по заселенностям, рассчитанным с помощью модели, из которой исключено уравнение для расчета температуры электронного газа. Как было отмечено ранее результаты, полученные по этой модели, не отличаются от результатов, которые дает полная модель. Поэтому не отличаются и рассчитанные неравновесные спектральные интенсивности излучения.

Тонкая сплошная линия с дельтами соответствует расчетам излучения по заселенностям, полученным с

использованием распределения Больцмана и колебательной температуры. Как видно, эта модель дает достаточно адекватные (верные, по крайней мере, по порядку величины) неравновесные спектральные интенсивности излучения. Основное расхождение наблюдается в области спектра $200 \div 300$ нм. В этом спектральном интервале спектр формируется в результате переходов между электронными состояниями молекулы NO. Таким образом, можно предположить, что если бы рассчитанная колебательная температура молекул NO была подобная колебательным температурам N_2 или O_2 (см. рис. 2), то можно было бы ожидать от этой модели результатов, которые лучше согласуются с экспериментальными.

Тонкая сплошная линия с градиентами соответствует расчетам излучения по заселенностям, полученным с помощью распределения Больцмана с поступательной температурой. При расчетах излучения вращательная температура полагалась равной поступательной, а колебательная соответствовала расчетной величине, полученной на кинетической стадии расчетов. Результаты, полученные по этой модели, близки к результатам, полученным по полностью равновесному расчету. Это означает, что для данного класса задач основное влияние на величину излучения оказывает именно величина заселенности возбужденных электронных состояний.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе выполнено численное исследование и анализ упрощенных моделей и результатов, получаемых по ним. Выполнено сравнение результатов, получаемых по упрощенным моделям с результатами, полученными по полной гибридной радиационно-столкновительной модели, разработанной в нашей группе.

Из проведенных исследований можно сделать следующий вывод: среди всех исследованных методов, использующих распределение Больцмана для оценки заселенностей электронных возбужденных состояний молекул, наиболее адекватные результаты по спектральным интенсивностям излучения можно получать с использованием в качестве параметра в распределении Больцмана колебательной температуры. При расчетах излучения вращательную температуру следует полагать равной поступательной, а колебательную брать из кинетической стадии расчетов. При этом в некоторых спектральных интервалах можно получить расхождение около 1 порядка.

Стоит отметить, что результаты аналогичных расчетов, однако, с использованием сложных многомерных моделей представлены в [10]. Исследованию структуры фронта ударной волны посвящена работа [11].

Работа выполнена в Лаборатории радиационной газовой динамики ИПМех РАН и на базовой кафедре МФТИ «Физическая и химическая механика» при поддержке Российского Фонда Фундаментальных Исследований, в рамках программы фундаментальных исследований РАН, а так же в рамках 7^{ой} Европейской рамочной программы (FP7/2007-2013) грант №242311.

СПИСОК ОБОЗНАЧЕНИЙ

УВ	– ударная волна;
КА	– космический аппарат;
p	– давление в невозмущенном газе, Торг;
V_{sh}	– скорость ударной волны, км/с;

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Diadkin A., Beloshitsky A., Shuvalov M, and Surzhikov S., Nonequilibrium radiative gasdynamics of segmental-conical space vehicle of large size // AIAA 2011-453. 2011. 29 p.
2. Panesi M., Magin T., Bourdon A., Bultel A., Chazot O. Fire II Flight Experiment Analysis by Means of a Collisional-Radiative Model // JTHT. Vol. 23. No. 2. 2009. Pp. 236–248.
3. Colonna G., Pietanza L.D., Capitelli M. Coupled Solution of a Time-Dependent Collisional-Radiative Model and Boltzmann Equation for Atomic Hydrogen Plasmas: Possible Implications with LIBS Plasmas // Spectrochimica Acta, Part B: Atomic Spectroscopy. 56B. 2001. Pp. 587–598.
4. Kudryavtsev N.N., Kuznetsova L.A., Surzhikov S.T. Kinetics and nonequilibrium radiation of CO_2-N_2 shock waves // AIAA 2001-2728. 2001. 20 p.
5. Dikalyuk A.S., Surzhikov S.T., Shatalov O.P., Kozlov P.V., Romanenko Yu.V. Nonequilibrium Radiation behind the Strong Shock Waves in Martian and Titan Atmospheres: Numerical Rebuilding of Experimental Data // AIAA 2012-0795. 2012. 31 p.
6. Park C., Howe J.T., Jaffe R.L., Candler G.V. Review of Chemical Kinetic Problems of Future NASA Mission. II Mars Entries // J. Thermophys. Heat Transf. Vol. 8. No. 1. 1994. Pp. 9–23.
7. Millikan R.C., White D.R. Systematic of Vibrational Relaxation // J. Chem. Phys. Vol. 39. No. 12. 1963. P. 3209-3212.
8. Treanor C.E., Marrone P.V. Effect of Dissociation on the Rate of Vibrational Relaxation // Phys. Fluids. Vol. 5. No. 9. 1962. Pp. 1022–1026.
9. Железняк М.Б., Мнацаканян А.Х., Якубов И.Т. Релаксация и неравновесное излучение за ударными волнами в воздухе // Изв. АН СССР МЖГ. №. 4. 1970. С. 161–174.
10. Суржиков С.Т. Перспективы многоуровневого подхода к задачам компьютерной аэрофизики // Физико-химическая кинетика в газовой динамике. 2008. Т. 7. <http://chemphys.edu.ru/media/files/2008-09-01-002.pdf>
11. Иванов И.Э., Крюков И.А., Тимохин М.Ю. Численное моделирование ударно-волновых течений с помощью моментных уравнений // Физико-химическая кинетика в газовой динамике. 2011. Т. 11. <http://www.chemphys.edu.ru/pdf/2011-02-01-010.pdf>