

卒業論文要旨

極超音速流れの新たな非平衡モデル構築へ向けた発光スペクトル同定

Emission Spectral Identification for the Development of a New Non-equilibrium Model in Hypersonic Flow

システム工学群

航空エンジン超音速流研究室 1210006 安部 翔太

1. はじめに

近年、太陽系の起源や生命誕生の原材料の解明を目標とした小惑星へのサンプルリターンが行われている。探査により入手したサンプルはカプセルによって地球大気圏に突入するが、この時カプセルが探査機から分離される速度は非常に高速で秒速 11km 以上の超軌道速度となる。カプセル前方には強い衝撃波が形成され、衝撃波背後の気体は非常に高温となり、カプセルは過酷な加熱環境に曝される。カプセルを防護するためには、加熱量の予測をより正確に行う必要があるため、コンピュータを用いた数値計算による精度の高い流れ場の再現が求められる。

大気圏突入時の流れ場を再現するには、熱的・化学的非平衡性に加えて、励起非平衡性も考慮して気流の大気組成を詳細に把握する必要がある。組成は密度の時間変化を表すレート方程式を解くことで算出できるが、レート方程式中に使用される反応速度係数の理論式には、実験適合パラメータが含まれている。解離や電離などの化学反応における反応速度係数は数多くの実験が行われており、精度の高い信用できる値が得られている。しかし、励起非平衡性を考慮するために必須となる遷移に関する反応速度係数は実験計測が困難で、現状では水素原子様の値⁽¹⁾を近似値として参照している場合も多く、精度が低くなっている。

反応速度係数の高精度化に向けて主に 2 つのアプローチが考えられる。1 つ目は分子運動をコンピュータ上で再現し、解離や再結合などの反応を膨大な回数を繰り返すことで理論的に導出する準古典近似などの方法である。2 つ目はアーク風洞や誘導プラズマ加熱風洞を用いて分光計測を行うことで取得できる実験スペクトルに対して、直接的にスペクトル適合を行うことで一致しなかった差分を反応速度係数の不整合として修正を行う方法がある。

そこで本研究では反応速度係数の高精度化に向けて、誘導プラズマ加熱風洞実験から得られる輻射スペクトルに対して、スペクトル適合を行うことで流れ場の化学組成を推定し、感度解析を行うことで、どの遷移が実験スペクトルとの不一致を生んでいるのかを特定、修正すべき反応速度係数の選定を行う。

2. 数値計算法

2.1 理論スペクトル計算

理論スペクトルの計算法は Line-by-line 法⁽²⁾を用いる。本研究では、観測点から分光器までは光学的に薄いものとし、観測されるスペクトルは放射スペクトルに等しいものと仮定する。原子および分子の線スペクトルは Einstein 係数およびエネルギー準位、励起分布⁽²⁾から計算する。放射係数は原子を例に挙げると、以下のように表される。

$$\epsilon_{\lambda} = n_u \frac{hcA_{ul}}{4\pi\lambda_{ul}} \Phi_{\lambda}$$

ここで、 n_u は上準位の数密度、 h はプランク定数、 c は光速、 A_{ul} は Einstein の A 係数、 λ_{ul} はエネルギー準位差に相当する線中心波長、 Φ_{λ} は線スペクトルの広がりを示す分布関数を表す。

2.2 スペクトル適合

実験スペクトルを理論スペクトルで再現することで実験時の大気組成、温度を推定する。各化学種、励起準位の密度、温度を設計変数として最適化を行う。ただし、すべての密度、温度を設計変数とすると膨大な数になるため、先に感度解析を行い、実験と理論スペクトルの差異の原因となっている変数を特定する。感度解析結果をもとにスペクトル適合を行い、最適化手法には最急降下法を用いる。

3. 計算条件

3.1 実験スペクトル及び考慮する気体状態

本研究では非平衡性を考慮した計算を行うため、実験スペクトルは、藤田ら⁽³⁾による ICP 風洞を用いた測定結果から、流れに対して垂直に 32mm の位置で観測されたスペクトルを使用した。作動気体は乾燥空気とし、0.1 気圧の加熱部下流の試験部において流れに垂直な系方向で測定された。乾燥空気を模擬するため N, N+, O, O+, O-, N2, N2+, NO, O2, O2+, CN, OH, NH, e- の 14 化学種を考慮する。スペクトル計算の初期組成は化学平衡組成計算コード CEA⁽⁴⁾で与えた。考慮する励起状態と遷移の詳細を表 1, 2 に示す。

各励起準位における初期の占有密度はボルツマン分布を基準とした。全ての電子、振動励起準位の初期占有密度に対して、係数を付けることで全状態の密度からスペクトルを計算する。

Table 1 Number of states for each species

Species	Ele-States	Species	Ele-Vib States
N	378	N ₂	121
N ⁺	192	N ₂ ⁺	73
O	610	NO	98
O ⁺	282	O ₂	82
O ⁻	-	O ₂ ⁺	77
		CN	80
		OH	21
		NH	15

Table 2 List of diatomic molecular transitions

Species	Transition	Species	Transition
N ₂	First-Positive	NO	Gamma
	Second-Positive		Beta
	Birge-Hopfield 1		Delta
	Birge-Hopfield 2		Epsilon
	Carroll-Yoshino		Beta'
N ₂ ⁺	Meinel	CN	Red
	First-Negative		Violet
N ₂ ⁺	Second-Negative	OH	A-X
			NH
N ₂	Worley-Jenkins	O ₂	Schumann-Runge
		O ₂ ⁺	First-Negative
			Second-Negative

3.2 光学系

実験で観測されるスペクトルはレンズやファイバーなどの光学系によって実現とは異なるスペクトルをとる。本研究では、使用された光学系の広がり補正する。

4. スペクトル適合の計算結果

実験、計算スペクトルおよび各化学種の線スペクトルを図1に示す。b-bはbound-bound遷移、b-fはbound-free遷移を表す。実験、計算スペクトルを比較すると200-220nm、500nm以降ではずれが大きく、原因はO₂, NO, N₂のbound-boundのスペクトルではないかと考えられる。

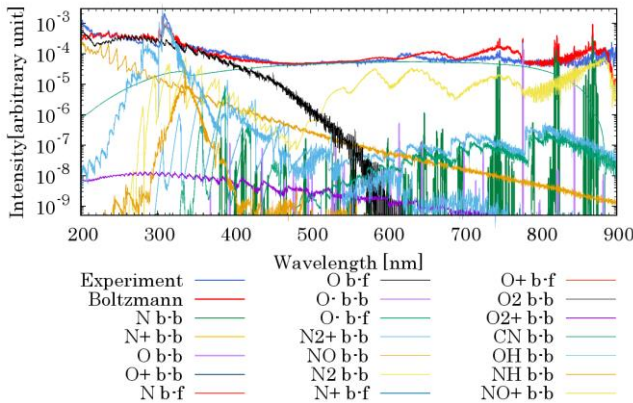


Fig.1 Comprison of computed and measured spectra

図2にNO, O₂, N₂の各遷移ごとのバンドスペクトルを示す。3化学種の他のバンドは値が小さすぎる、もしくは観測波長域外となったため図中に現れていない。図2より200-220nmではNOのGamma, Beta, Delta, Epsilon, O₂のSchumann Rungeが、600nm以降ではN₂のFirst-Positiveが支配的であることがわかる。

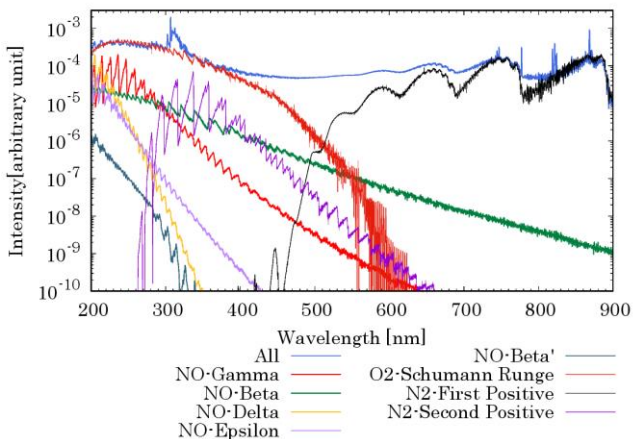


Fig.2 NO, O₂, N₂ band spectra

N₂のFirst-Positiveを例に取ると、電子-振動励起状態間の遷

移で、電子励起状態の上準位B³Π_gは21の振動状態を、下準位のA³Z_u⁺は16の振動状態を持つ。そこで各化学種の上準位の振動準位の占有密度に対して、200-220nm, 700-800nmの範囲でスペクトル適合を行った。スペクトル適合の結果を図3に示す。N₂, O₂, NOの各振動状態の密度がボルツマン分布に対する比率が1.3倍以下ではスペクトルに対してほとんど変化がなかったため、1.3倍以上の励起準位を表3に示す。図3より200-220nm, 700-800nmの範囲におけるスペクトルの一致が確認できる。つまりスペクトルを一致させるには、表3の振動励起準位の数密度を補正する必要がある。

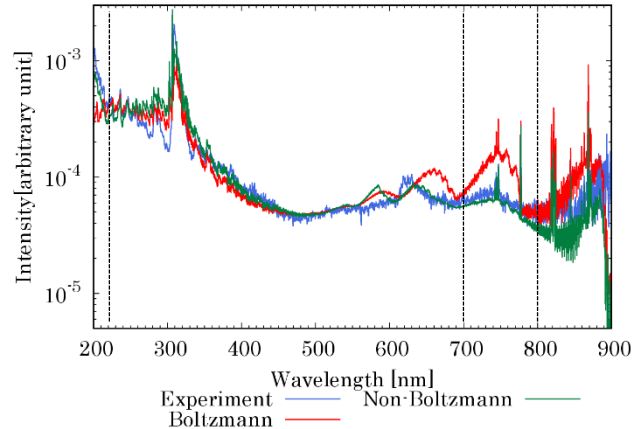


Fig.3 Results of spectral fitting

Table 3 Deviated vibrational states from Boltzmann distribution

Species	Electronic states	Vibrational states		
NO	C ² Π	0		
		A ² Σ ⁺	1	
			3	
O ₂	B ³ Σ _u	4		
		5		
		6		
		7		
		8		
		9		
		11		
		12		
		13		
		14		
		N ₂	B ³ Π _g	1
				2
				3
				4
5				
6				
7				
8				
	10			

5. まとめ

本研究では、反応速度定数の高精度化に向けて、実験スペクトルに対する計算スペクトルの適合を行うことで、反応速度定数を修正すべき遷移の選定を行った。短波長側ではNOのGamma, Beta, Delta, Epsilon, O₂のSchumann Rungeが、長波長側ではN₂のFirst-Positiveが支配的であることがわかった。また、NOのA²Σ⁺, C²Π, O₂のB³Σ_u, B³Π_g, N₂のB³Π_g振動準位の占有密度が実験と計算スペクトルの差異の原因であることを確認した。これらの振動準位に関わる遷移の反応速度定数を修正する必要がある。今後は、他の複数の気流条件で数値計算と分光実験を行う。

文献

- (1) H. W. Drawin, "Collision and transport cross sections," Technical Report EUR-CEA-FC-383 revised. Fontenay-aux-Roses (1967).
- (2) 猿橋裕太, "Line-by-line 法による理論輻射スペクトル計算," 名古屋大学大学院修士論文 (2007).
- (3) K. Fujita, et al, "Spectroscopic Flow Evaluation in Inductively Coupled Plasma Wind Tunnel," *Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, Vol. 22, No. 4 (2008).
- (4) S. Gordon and B. J. McBride, "Computer Program for Calculation of Complex Chemical Equilibrium Compositions and Applications," NASA Reference Publication 1311 (1994)