

卒業論文要旨

CO₂ 電子励起状態を考慮した衝突輻射モデルによる

火星大気圏突入流れの非平衡流体計算

Nonequilibrium Flow Computation using Collisional-radiative Model with CO₂ Electronic Excitation in a Mars Atmospheric Entry

システム工学群

航空エンジン超音速流研究室 氏平 佳希

1 緒言

近年、火星着陸探査に向けたプロジェクトが活発化しており、今後火星大気圏への突入機会の増加が見込まれる。極超音速で突入する宇宙機の前方には強い衝撃波が形成され、機体表面は過酷な加熱環境に晒される。この環境から探査機を保護するために表面には熱防護材が配置される。ペイロード重量の増加や打上コストの削減には熱防護材の削減が必要であり、そのためには数値計算による正確な加熱率予測が重要となる。

大気圏突入時の流れ場は高温低密度であることから、数値計算では流れ場の非平衡性を考慮する必要がある。従来広く用いられてきた Park モデル⁽¹⁾では、熱化学非平衡性を考慮した流体計算を可能としている。しかし、電子励起状態分布を局所熱力学平衡と仮定しているため、流れ場の代表時間と輻射の代表時間が同程度となる環境では、正確な加熱率予測が行えない課題がある。そこで浅井による先行研究⁽²⁾では、地球大気において電子励起状態を直接計算する衝突輻射モデルを用いることで、電子励起非平衡性を考慮した計算を行い、輻射強度の予測精度を向上させた。

本研究では、地球大気用モデルを主にCO₂由来の8化学種の熱化学非平衡性を追加し、火星大気用へと拡張を行う。また衝突輻射モデルとして、近年の分光計測において発光が確認されているCO₂励起種⁽³⁾を追加し、その影響について報告する。

2 数値計算方法

2.1 流れ場計算

流体計算には以下に示す軸対称 Navier-Stokes 方程式を用いる。

$$\frac{\partial Q}{\partial t} + \frac{\partial(F - F_v)}{\partial x} + \frac{\partial(G - G_v)}{\partial y} + \frac{H - H_v}{y} = W \quad (1)$$

ここで、保存量ベクトル Q 、非粘性流束ベクトル F 、 G 、粘性流束ベクトル F_v 、 G_v 、軸対称の効果を表すベクトル H 、 H_v 、および生成項ベクトル W である。計算において考慮する化学種はN, O, C, Ar, N₂, O₂, NO, CO, CN, C₂, CO₂, N⁺, O⁺, C⁺, N₂⁺, O₂⁺, NO⁺, CO⁺, e⁻の19化学種である。支配方程式の離散化は有限体積法で2次精度 MUSCL 法を用い、数値流束は SLAU スキーム⁽⁴⁾、粘性流束は2次精度中心差分を用いた。流れ場の時間積分は1次精度 Euler 陽解法を用いた。

2.2 衝突輻射モデル

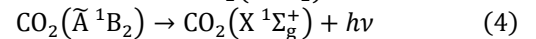
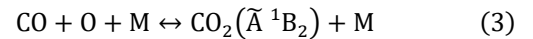
流れ場の電子励起非平衡性を考慮するため、衝突輻射モデル(以下 Collisional-Radiative : CR モデル)を用いる⁽⁵⁾。このモデルでは、まず各化学種、励起準位ごとの自由電子衝突、重粒子衝突による遷移と輻射脱励起の速度定数を計算する。化学種 s の i 励起準位の数密度 $n_{s,i}$ は、保存則を用いて計算される。その後、密度 $\rho_{s,i}$ の生成率 $W_{s,i}$ を次式で求める。

$$W_{s,i} = \sum \text{populating processes} - \sum \text{depopulating processes} \quad (2)$$

右辺は数密度の単位時間当たりの増減量であり、衝突遷移と輻射脱励起反応の総和で表される。考慮する電子励起状態は12化学種、計221状態とした。CRモデルの時間積分には Extended Robustness-Enhanced Numerical Algorithm (ERENA)⁽⁶⁾を用いる。計算量が非常に多いため、流れ場計算10stepごとに1回実行し定常解を求める。

2.3 CO₂電子励起反応

CO₂電子励起反応について以下の反応を考慮する。



式(3)の順反応速度係数 k_f は以下の式により求め、逆反応については詳細釣り合いから求める。

$$k_f = C_f \exp\left(-\frac{E_a}{T}\right) \quad (5)$$

C_f はアレニウスパラメータ、 E_a は活性化エネルギー、 T は並進-回転温度である。 C_f 、 E_a は Kopp らの値⁽⁷⁾を使用した。式(4)の反応については Oehlschlaeger らの吸収断面積⁽⁸⁾を採用し、Milne の関係式からCO₂(X¹Σ_g⁺)の生成率 $R_{\text{CO}_2(\tilde{\text{A}}^1\text{B}_2 \rightarrow \text{X}^1\Sigma_g^+)}$ を次式で求める。

$$R_{\text{CO}_2(\tilde{\text{A}}^1\text{B}_2 \rightarrow \text{X}^1\Sigma_g^+)} = n_M n_{\text{CO}_2(\tilde{\text{A}}^1\text{B}_2)} \int_{-\infty}^{\infty} \sigma_r(u) u f(u) du \quad (6)$$

ここで、 M は第三体、 n_s は化学種 s の数密度、 $\sigma_r(u)$ は衝突断面積、 u は相対速度、 $f(u)$ は Maxwell 分布関数である。

3 計算条件

主流条件は Mars2020 カプセルの飛行データ⁹⁾をもとに表1の条件で計算を行った。格子点数はカプセル周方向に151点、主流方向に151点として衝撃波背後の物理過程を正確に解くため、衝撃波面に格子を寄せている。

Table. 1 Mainstream condition

Density [kg/m ³]	Velocity [m/s]	Temperature [K]	Mass fraction	
			CO ₂	N ₂
8.79 × 10 ⁻⁴	4680	273	0.968	0.0320

4 計算結果

4.1 淀み流線上での温度分布とモル分率分布

図1に淀み流線上での温度分布を示す。衝撃波離脱距離は約11cmとなり、最高温度は並進-回転温度で11,400 K、振動-電子励起-自由電子温度で6,500 Kとなった。

次に淀み流線上における代表的な化学種のモル分率分布を図2に示す。主流組成であるCO₂, N₂は衝撃波背後で解離反応により減少し、衝撃層内ではCO, O, Nが生成されていることが確認できる。壁面付近では、温度低下による再結合反応が生じ、CO₂, O₂, N₂のモル分率が増加している。

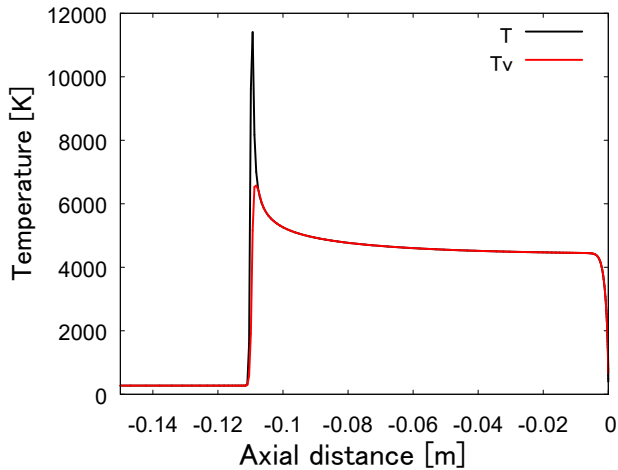


Fig. 1 Axial profile of temperature

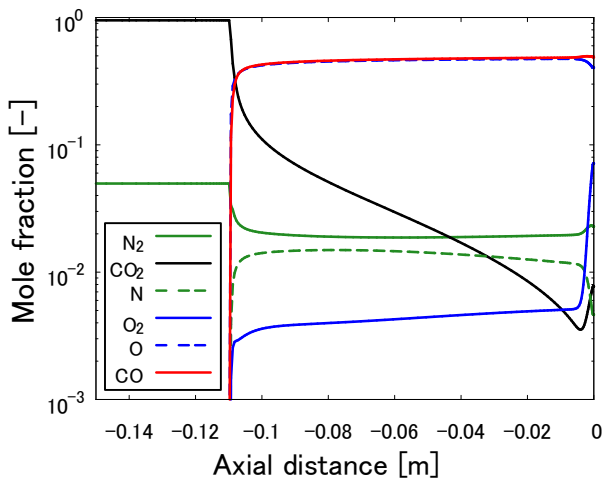


Fig. 2 Axial profile of mole fractions

4.2 カプセル周りにおけるCO₂電子励起状態分布

図3にCO₂第1電子励起状態であるCO₂(\tilde{A}^1B_2)の数密度分率を示す。カプセル半径0.25 m位置から2.25 mにかけて分

布していることが分かる。式(3)の反応は活性化エネルギーが低く、CO, Oの数密度に比例することから壁面近傍や膨張域で割合が高くなったと考えられる。

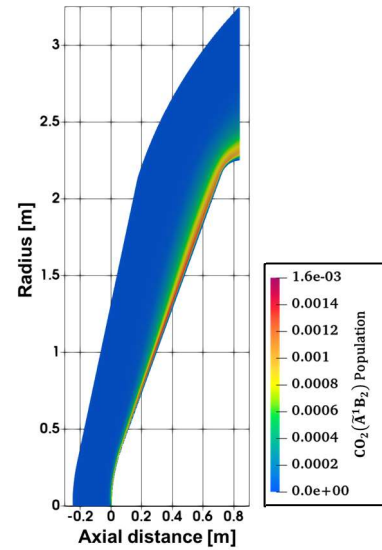


Fig. 3 CO₂(\tilde{A}^1B_2) population

5 結言

本研究では、先行研究で使用していた地球大気用の計算コードを火星大気用に拡張し、CO₂の励起種について追加を行った。淀み流線上での計算結果から、火星大気における化学反応を再現できている。また、カプセル壁面や膨張域においては、発光の可能性があるCO₂(\tilde{A}^1B_2)が存在することが分かった。今後は簡略化した輻射輸送を解くことで、大気圏突入環境におけるCO₂発光がどれほどの寄与となるのか評価する予定である。

6 参考文献

- (1) Park, C., "Nonequilibrium Hypersonic Aerothermodynamics", John Wiley and Sons, Inc., New York, (1989).
- (2) 浅井友彰, "輻射熱輸送を結合した衝突輻射モデルによる衝撃波管流れの励起非平衡流体計算", 高知工科大学修士学位論文, (2024).
- (3) C. J. Malerich, J. H. Scanlon, "Calculation of CO($X^1\Sigma^+$) + O(3P) Recombination Chemiluminescence Spectrum", Chemical Physics, Vol. 110, issue 2-3, pp. 303-313, (1986).
- (4) Kitamura, K., Shima, E., "A New Pressure Flux for AUSM-Family Schemes for Hypersonic Heating Computations", AIAA Paper 2011-3056, (2011).
- (5) Ogino, Y., Ohnishi, N., "A Collisional-Radiative Code for Computing Air Plasma in High Enthalpy Flow", Shock Waves, Vol. 21, issue 3, pp. 289-299, (2011).
- (6) Y. Morii, H. Terashima, M. Koshi, T. Shimizu, E. Shima, "Fast and robust time integration method for stiff chemical kinetic ODEs", AIAA paper 2014-3920, (2014).
- (7) M. M. Kopp, O. Mathieu, E. L. Petersen, "Rate Determination of the CO₂* Chemiluminescence Reaction CO + O + M \rightleftharpoons CO₂* + M", International Journal of Chemical Kinetics, Vol. 47, issue 1, pp. 50-72, (2014).
- (8) M. A. Oehlschlaeger, D. F. Davidson, J. B. Jeffries, R. K. Hanson, "Ultraviolet absorption cross-sections of hot carbon dioxide", Chemical Physics Letters, Vol. 399, issue 4-6, pp. 490-495, (2004).
- (9) K. T. Edquist, M. Mahzari, H. S. Alpert, "Mars 2020 Reconstructed Aerothermal Environments and Design Margins", AIAA paper 2022-0553, (2022).