

2A05 加熱率予測精度向上を目指した衝突輻射モデルの 反応速度定数修正方法の提案

○安田裕貴，荻野要介（高知工科大学）

An Approach to Modify The Reaction Rates of Collisional-Radiative Model
for Improvement of Heating Prediction Accuracy

Key Words : CFD, Aerodynamic Heating, Non-equilibrium Flow

Abstract

When a spacecraft enters into the Earth's atmosphere at hypersonic speed, causing a high-temperature shock layer to form at its front. As a result, the surface of the spacecraft undergoes intense aerodynamic heating. To improve the accuracy of heating rate prediction, it is necessary to perform simulations that consider thermochemical non-equilibrium flow, including the distribution of excitation states. In this work, numerical spectra were calculated from fluid dynamics simulations that reproduced shock tube experiments. By comparing these with the radiative spectra obtained from experiments, the reaction rate constants were corrected to describe the internal states of flow field.

1. はじめに

宇宙機が地球に帰還する際、高速で大気圏に突入するため、機体前方には強い衝撃波が発生し、機体表面は過酷な加熱環境に曝される⁽¹⁾。そのため熱防護材を設置し熱の流入を抑制することで宇宙機内の試料や乗員の安全性を確保している。ここで実際の機体を例にとるとアポロ宇宙船は全体重量のうち12.8%の約660kg、スペースシャトルでは全体重量のうち10.5%の約8500kgを熱防護材が占めている⁽²⁾。しかしこれらの宇宙機の打ち上げには莫大な費用が必要であり、アルテミス計画のスペースローンチシステム(SLS)では最大ペイロード46トン⁽³⁾で打ち上げコストが20億ドル⁽⁴⁾となっており、1kgあたり約4万ドルの費用が掛かることになる。そこでより高精度な数値計算による機体周りの加熱率予測が実現できれば、熱防護材の適切な配置と削減により、機体の軽量化による打ち上げ費用削減と安全性の確保を両立することができる。

従来から広く用いられている Park モデル⁽⁵⁻⁶⁾と呼ばれる計算モデルでは、流れ場の温度を並進-回転温度、振動-電子励起-自由電子の並進温度の2温度に分割し、化学反応による各化学種の密度変化と受吸熱を流体運動と同時に計算することで流れ場の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、衝撃層内の輻射による熱輸送の再現には化学種の内部エネルギー状態を正確に求める必要があり、流れ場内の化学種の励起状態分布を局所熱力学平衡と仮定しているParkモデルでは不十分であった。そこで本研究では、流れ計算と電子励起状態を計算する

衝突輻射モデルを結合したコードに輻射熱輸送を組み込み、流れ場の電子励起非平衡性と輻射熱輸送を考慮した計算を行うことで、大気圏突入時の加熱率予測精度向上を目指す。今回の発表ではNASAが保有するアーク放電を利用した衝撃波管であるElectric Arc Shock Tube (EAST)⁽⁷⁻⁹⁾による実験から得られた輻射スペクトルと数値計算から得られた数値スペクトルを比較することで、電子励起非平衡モデル内の励起反応速度の修正を行った結果について報告する。

2. 数値計算法

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。

$$\frac{\partial Q}{\partial t} + \frac{\partial (F - F_v)}{\partial x} + \frac{\partial (G - G_v)}{\partial y} + \frac{H - H_v}{y} = W \quad (2.1)$$

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 、軸対象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。簡単のため Q と x 方向の流束ベクトル F 、 F_v と W について示す。

$$Q = \begin{pmatrix} \rho_s \\ \rho u \\ \rho v \\ E \\ E_v + E_{ex} + E_{el} \end{pmatrix} \quad (2.2)$$

$$\mathbf{F} = \begin{pmatrix} \rho_s u \\ \rho u^2 + p \\ \rho uv \\ (E + p)u \\ (E_v + E_{ex} + E_{el})u \end{pmatrix} \quad (2.3)$$

$$\mathbf{F}_v = \begin{pmatrix} -\rho_s u_s \\ \tau_{xx} \\ \tau_{xy} \\ \tau_{xx}u + \tau_{xy}v - q_x - q_{vx} - \sum_s \rho_s u_s h_s \\ -q_{vx} - \sum_s \rho_s e_{v,s} u_s \end{pmatrix} \quad (2.4)$$

$$\mathbf{W} = \begin{pmatrix} W_s \\ 0 \\ 0 \\ -Q_{rad} \\ W_v - Q_{rad} \end{pmatrix} \quad (2.5)$$

ここで、 ρ は密度、 ρ_s は化学種 s ごとの密度、 u は速度の x 方向成分、 v は速度の y 方向成分、 u_s は化学種 s ごとの速度の x 方向成分、 E は単位体積あたりの全エネルギー、 E_v は単位体積あたりの振動エネルギー、 E_{el} は単位体積あたりの電子エネルギー、 p は圧力、 τ は粘性応力、 \mathbf{q} は熱流束、 h はエンタルピー、 e_{vs} は化学種 s ごとの単位質量あたりの振動内部エネルギー、 e_{el} は自由電子の単位質量あたりの振動内部エネルギーである。 \mathbf{W} は生成率であり、 W_s は化学種 s ごとの質量生成率、 Q_{rad} は輻射エネルギー生成項、 W_v は振動・電子励起・自由電子の内部エネルギーの生成率である。

計算において考慮する化学種 s は N, O, N₂, O₂, NO, N⁺, O⁺, N₂⁺, O₂⁺, NO⁺, e⁻ の 11 化学種である。支配方程式の離散化は有限体積法、数値流束は 2次精度MUSCL⁽¹⁰⁾法を用いたSLAUスキーム⁽¹¹⁾、粘性流束は2次精度中心差分を用いた。

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(Collisional-Radiative: CRモデル)を用いる⁽¹²⁻¹³⁾。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。その後、化学種 s の i 励起準位の密度 $\rho_{s,i}$ の生成率 $W_{s,i}$ を、次式で求める。

$$W_{s,i} = \sum \text{populating processes} - \sum \text{depopulating processes} \quad (2.6)$$

右辺は数密度の単位時間当たりの増減量であり、関わる衝突励起と脱励起反応の総和で表される。電子衝突励起反応の衝突断面積は Drawin の衝突断面積⁽¹⁴⁾を採用し、二つの量子状態間の選択律によって次のように示される。

(1) 電子双極子許容遷移

$$\sigma(i, j; E) = 4\pi a_0^2 \alpha_{ij} f_{ij} \xi \left(\frac{E_H}{E_{ji}} \right)^2 \frac{U_{ji} - 1}{U_{ji}^2} \ln \left(\frac{5}{4} U_{ji} \right) \quad (2.7)$$

(2) スピン多重度の変化しない禁制遷移

$$\sigma(i, j; E) = 4\pi a_0^2 \alpha_{ij} \xi \frac{U_{ji} - 1}{U_{ji}^2} \quad (2.8)$$

(3) スピン多重度の変化する禁制遷移

$$\sigma(i, j; E) = 4\pi a_0^2 \alpha_{ij} \xi \frac{U_{ji}^2 - 1}{U_{ji}^5} \quad (2.9)$$

$U_{ji} = E/E_{ji}$ は規格化された電子の運動エネルギー、 a_0 は第一ボーア半径、 E_H は水素の基底状態におけるイオン化エネルギー、 ξ は i 準位での光学電子の数、 f_{ij} は吸収振動子強度、 α_{ij} は無次元パラメータを表す。考慮する電子励起状態は 11 化学種、計 219 状態とした。また、自由電子密度は電化中性を仮定した。時間積分には Extended Robustness-Enhanced Numerical Algorithm (ERENA)⁽¹⁵⁾を用いる。また、衝突輻射モデルの計算は計算量が非常に多いため、流れ場計算 10step ごとに 1 回実行する。流れ場計算から得た化学種ごとの密度 ρ_s と並進回転温度 T と振動電子温度 T_v を用いて上式を解く。算出した密度 $\rho_{s,i}$ から式 (2.5) の質量生成項 W_s とエネルギー生成項 W_v の一部を求める。

2.3 輻射輸送計算

吸収係数と放射係数は Matsuyama の構築した計算コード⁽¹⁶⁾を電子励起非平衡計算用へ拡張し、line-by-line 計算によって求める。輻射による計算セル間のエネルギー輸送によって生じる流れ場の変化を計算するため、セル中心から有限個の光線を引き、それぞれの光線上で次の輻射輸送方程式を解く。

$$\frac{l}{\kappa_\lambda} \frac{\partial I_\lambda}{\partial s} = \frac{\varepsilon_\lambda}{\kappa_\lambda} - I_\lambda \quad (2.10)$$

ここで、 s は光線に沿った座標、 l は方向余弦($l = \cos \varphi$)、 φ は接平板の垂直軸と光線のなす角、 I_λ は輻射強度、 ε_λ 、 κ_λ は放射係数、吸収係数で、流れ場の温度 T_v と衝突輻射モデルより求めた $\rho_{s,i}$ で算出する。流体のエネルギー生成率 W_v の一部となる輻射熱流束の発散量は、次式で表される。

$$\nabla \cdot q_{rad} = \int_0^\infty \left[4\pi \varepsilon_\lambda - \int_{4\pi} \kappa_\lambda I_\lambda d\Omega \right] d\lambda \tag{2.11}$$

ここで Ω は立体角である。計算量削減のため、輻射輸送計算は流れ場計算1000stepごとに1回実行する。

3. 計算条件

EAST では管内を平面衝撃波が一方方向に進行する非定常な流れとなる。本計算では、曲率半径1mで衝撃層厚さに対して相対的に大きな半球へ向かって極超音速気流が衝突する流れを解析する。半球物体の淀み流線付近に着目すると、物体前方に発生した平面衝撃波に主流が流入する定常一次元流れとなる。

計算条件は Table 1 に示す EAST で実施された Test 59 の Shot 15 を用いた。また、壁面温度は 273[K] の非触媒等温壁とする。計算格子は Fig. 1 と Fig.2 に示す通りで、格子点数は周方向に101点、半径方向に121点である。

Table 1 Free Stream Condition	
Shot 15	
Density[kg/m³]	1.69 × 10 ⁻⁵
Velocity[m/s]	8180
Temperature[K]	273
Mass fraction	
N ₂	0.767
O ₂	0.233

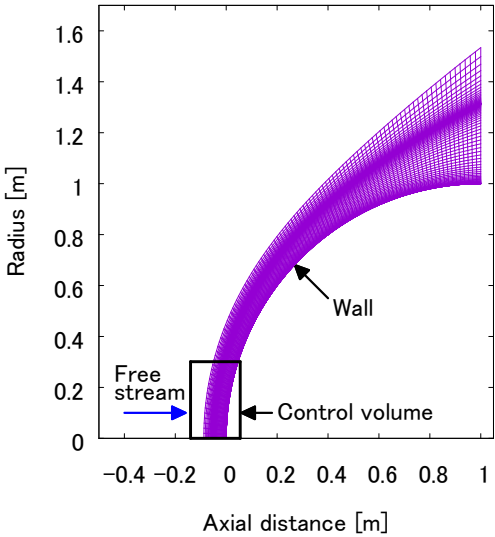


Fig. 1 Computational grids

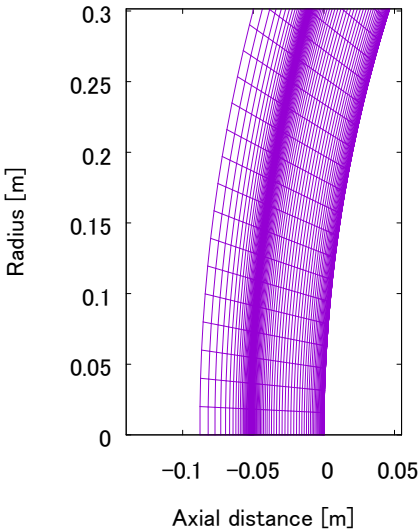


Fig. 2 Detailed view of control volume

4. 計算結果

Fig. 3 に淀み流線付近の温度分布図を示す。最高温度は黒線で示す並進-回転温度で 26,000[K]、赤線で示す振動-電子温度で 10,000[K]に達していることがわかる。衝撃層内のほぼ全域が熱非平衡であり、熱平衡に達するのは壁面から0.015m位置となった。また、各温度は壁面付近の温度境界層で壁面温度に向かって低下する。

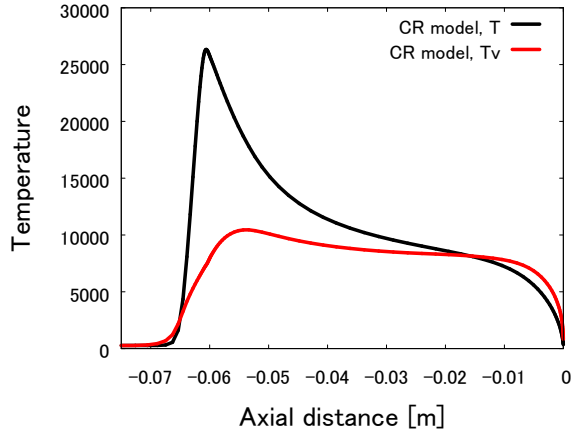


Fig. 3 Axial profile of temperatures

次に淀み流線上のモル分率分布を Fig. 4 に示す。主流の主組成であった N_2 、 O_2 は衝撃波背後で解離反応などによって減少し、衝撃層内では N 、 O が主組成となっている。また、電荷中性を仮定したためイオン種の総和が自由電子密度となるが、衝撃波直後では会合性電離反応による N_2^+ 、 NO^+ の生成が主な自由電子の発生源である。その後、衝撃層中では NO^+ と自由電子衝突電離によって増加する N^+ によって自由電子が生成される。壁面近傍では温度低下に伴って再結合が進み、自由電子密度が減少する。

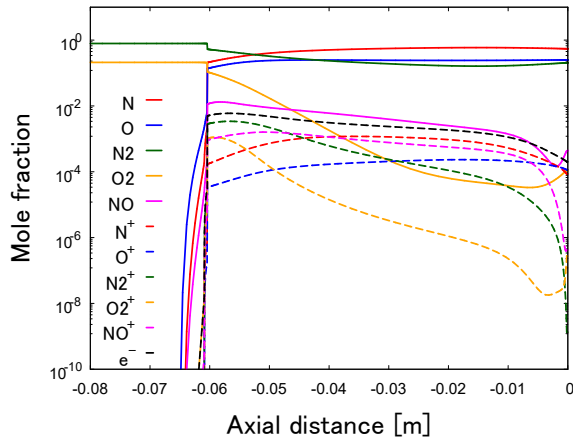


Fig. 4 Axial profile of mole fractions

5. 輻射スペクトル比較

EAST の分光計測結果との比較のため、式 (2.7) を半径方向に積分して算出した輻射強度 $I_\lambda(x)$ を次式で空間平均することで、輻射強度最高点の前後 0.02 [m] の領域からの輻射スペクトルの平均値を取得している。

$$I_{\lambda,avg} = \frac{1}{D_{tube}} \int_{x_{peak}-0.02}^{x_{peak}+0.02} I_\lambda(x) dx \quad (5.1)$$

式中の $I_{\lambda,avg}$ が波長ごとの輻射強度の平均値、 D_{tube} が衝撃波管の直径、 x_{peak} が輻射強度最高点の軸方向位置である。

得られた結果を Fig. 5 に示す。図中の赤線が CR モデルから算出した数値スペクトル、黒線が分光測定値である。左上の赤文字、黒文字はそれぞれ CR モデル、分光計測結果の波長積分値である。また、Fig. 6に Fig. 5 で示した CR モデルの輻射強度の平均値を分子のバンドスペクトルごとに分解した結果を示す。数値スペクトルは $NO \gamma$ バンドが支配的となる約 2,600Å 以下の波長域では、分光測定値とよく一致しているが、 N_2 2nd positive バンドと N_2^+ 1st negative バンドが支配的となる約 2,600Å 以降の波長域では、輻射強度を過大評価していることが分かる。それにより CR モデルの波長積分値は分光計測結果の 3.5 倍となった。

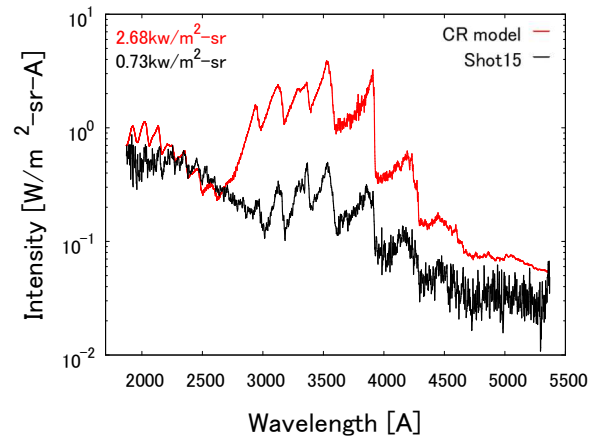


Fig. 5 Comparison of spectral intensity between CR model and experimental data

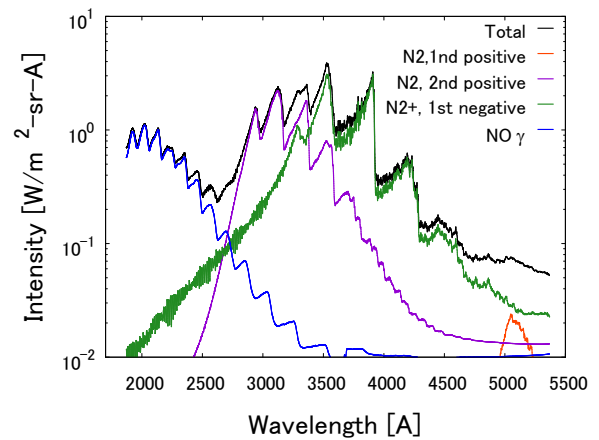


Fig. 6 Decomposition of spectral intensity of CR model

6. 反応速度定数の修正

6.1 修正を行う反応の選定

N_2^+ 1st negative バンド, N_2 2nd positive バンドの強度が計測結果よりも高くなったことから, 本研究で用いた CR モデルでは, それぞれのバンドの光を放射する遷移の上準位側の励起状態である $N_2^+(B^2\Sigma_u^+)$ と $N_2(C^3\Pi_u)$ の生成を実際よりも多く見積もっている. そこで考慮している反応が $N_2^+(B^2\Sigma_u^+)$ と $N_2(C^3\Pi_u)$ の生成にどれだけ寄与したかを調べるため, Fig. 7, Fig. 8 に淀み流線上における各反応の生成率を図示した. $N_2^+(B^2\Sigma_u^+)$ と $N_2(C^3\Pi_u)$ の生成は, それぞれ2つの電子衝突励起反応による密度増加が支配的となった. よって, これら合計4つの電子衝突励起反応の速度定数が実現象よりも大きいと考えられる.

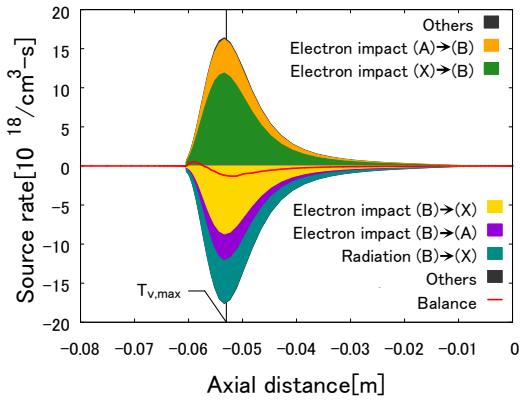


Fig. 7 Axial profile of $N_2^+(B^2\Sigma_u^+)$ source rate

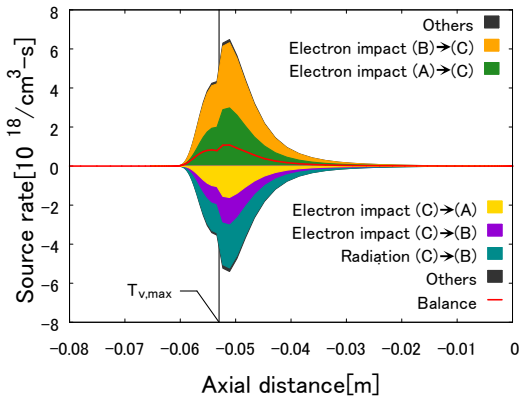


Fig. 8 Axial profile of $N_2(C^3\Pi_u)$ source rate

そこで式(2.7)-(2.9)中の無次元パラメータ α_{ij} に着目する. Drawin の断面積モデルは水素様原子の近似であり, α_{ij} は他の実験または経験則に基づいて N_2 , N_2^+ 用に適した値を選定しなければならない. ここまでの CR モデルでは標準的な α_{ij} 値を採用しているが過大評価であったと言える.

6.2 無次元パラメータの算出

まず CR モデルから算出した数値スペクトルと分光測定値のそれぞれに対して別途 $N_2^+(B^2\Sigma_u^+)$ と $N_2(C^3\Pi_u)$ の密度を変化させスペクトル適合を行い, 適合前後の密度の比を算出した. そして, 十分な時間収束の結果, この密度比を解消するように近似的に無次元パラメータの値を求めた. 求めた無次元パラメータを Table 2 に示す. この無次元パラメータを用いた CR モデルを α モデルと呼称し, 修正前の CR モデルと比較を行う.

Table 2 Dimensionless parameter α_{ij}

Species	Electron impact transition	α_{ij}
N_2	$C^3\Pi_u \leftrightarrow A^3\Sigma_u^+$	4.26×10^{-2}
	$C^3\Pi_u \leftrightarrow B^3\Pi_g$	
N_2^+	$B^2\Sigma_u^+ \leftrightarrow X^2\Sigma_g^+$	3.82×10^{-5}
	$B^2\Sigma_u^+ \leftrightarrow A^2\Sigma^+$	

7. α モデルから算出した数値スペクトル

得られた結果をFig. 9 に示す. 図中の赤線が α モデルの結果であり, 比較のためFig. 5と同じく青線の CR モデル, 黒線の分光測定値も図示している. 左上の青文字, 赤文字, 黒文字はそれぞれ CR モデル, α モデル, 分光計測結果の波長積分値である. また, Fig. 10 にFig. 9 で示した α モデルの輻射強度の平均値を分子のバンドスペクトルごとに分解した結果を示す. 約2,600Å以降の波長域で支配的となっている N_2 2nd positive と N_2^+ 1st negative のバンドスペクトルの強度が CR モデルと比べて減少することで, 数値スペクトルが測定値に近づいたことが分かる. 波長積分値を分光測定結果と比較すると CR モデルは3.5倍以上であったが, α モデルは1.3倍程度になり, 差は 90% 以上改善した.

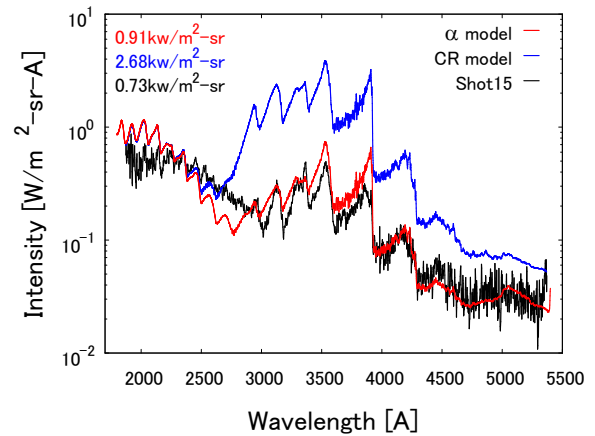


Fig. 9 Comparison of spectral intensity between numerical spectrum and experimental data

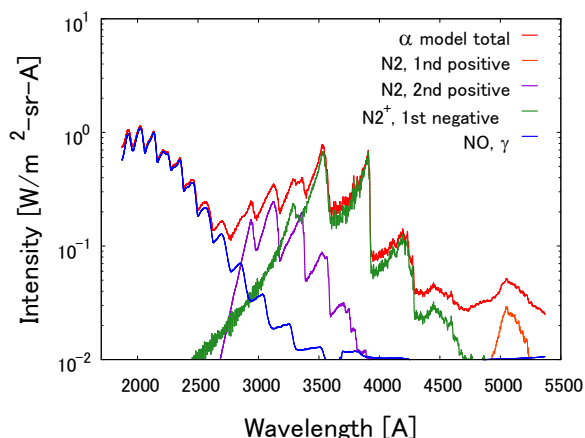


Fig. 10 Decomposition of spectral intensity of α model

また、同様にTable 1 に示した EAST 条件を変更した解析を行う。Test 59 の Shot 8 , Shot 12 を用いて CR モデルと α モデルの比較を行った。得られた結果をFig. 11, Fig. 12に示す。どの実験条件でも α モデルでは CR モデルにおいて輻射強度を過大評価していた領域で分光測定結果に近づいたことが分かる。波長積分値の差を比較すると Shot 8 では77% Shot 12 では88%改善した。

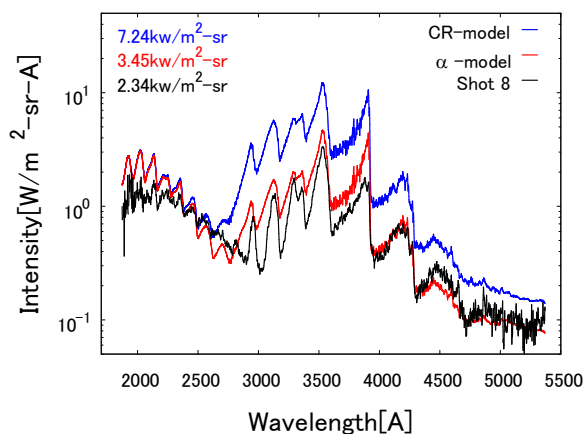


Fig. 11 Comparison of spectral intensity in Shot 8

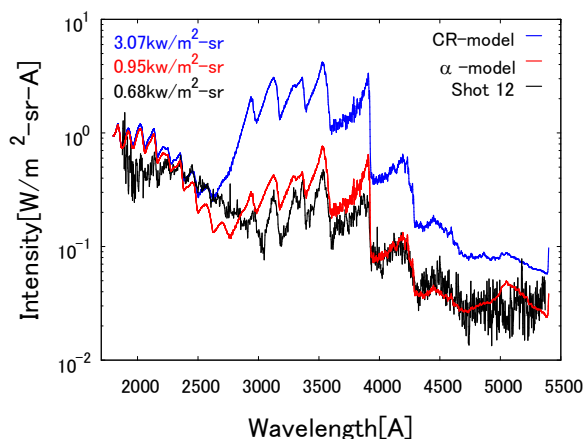


Fig. 12 Comparison of spectral intensity in Shot 12

8. まとめ

大気圏突入時の加熱予測精度向上を目的として、EAST の Test 59 の Shot 15 の流れ場について衝突輻射モデルによる非平衡流体計算を行った。その結果、スペクトル強度の比較において、約 2,600 以上の波長域では強度が計測結果を大きく上回った。この波長域では N_2 2nd positive バンドと N_2^+ 1st negative バンドが支配的であり、これらの強度を過大評価している。そこで N_2 2nd positive バンド、 N_2^+ 1st negative バンドを放射する遷移の上準位側の励起状態である $N_2^+(B^2\Sigma_u^+)$, $N_2(C^3\Pi_u)$ を生成する電子衝突励起反応の速度定数の無次元パラメータを修正した。その結果、修正前に比べて輻射スペクトルが分光測定結果に近づき、波長積分値の差は 90% 以上改善した。同様のモデルを用いて他の実験条件を再現した場合でも、波長積分値の差はそれぞれ 77%, 88% と大幅に精度が改善した。

しかし、いずれも EAST による実験を模擬したものであるため試験気流の条件や分光測定時の詳細などの影響も考えられる。今後、他の高エンタルピー気流が生成可能な設備や、より非平衡性の強い気流条件で、CR 反応をすべて含んだ検討を重ねることで洗練された CR モデルの完成を目指す。

参考文献

- (1) 久保田弘敏, 鈴木宏二郎, 綿貫忠晴, 宇宙飛行体の熱気体力学, 東京大学出版会, 2002.
- (2) Curry, D., "Thermal Protection System Needs", The Boeing Company, Mar. 11, 2011.
- (3) National Aeronautics and Space Administration(NASA), "NASA's Space Launch System Reference Guide", August, 2022.
- (4) Christopher Cokinos, "By the numbers: The Space Launch System, NASA's next Moon rocket", May 18, 2023.
- (5) C. Park, Nonequilibrium Hypersonic Aerothermodynamics, John Wiley and Sons Inc., New York, 1989.
- (6) C. Park, "Assessment of Two-Temperature Kinetic Model for Ionizing Air", *Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, Vol. 3, 1999, pp. 233–244.
- (7) Jay H. Grinstead, Michael C. Wilder, Daniel C. Reda, Charles J. Cornelison, Brett A. Cruden and David W. Bogdanoff, "Shock tube and ballistic range facilities at NASA Ames Research Center", RTO-EN-AVT-186, 2010.
- (8) Brett A. Cruden, "Absolute Radiation Measurements in Earth and Mars Entry Conditions", ARC-E-DAA-TN13965, 2014.

- (9) A. M. Brandis and B. A. Cruden, “Benchmark Shock Tube Experiments of Radiative Heating Relevant to Earth Re-entry”, ARC-E-DAA-TN37935, 2017.
- (10) B. Van Leer, “Towards the Ultimate Conservation Difference Scheme V, A Second-Order Sequel to Godunov’s Method,” *Journal of Computational Physics*, Vol. 32, 1979, pp. 101–136.
- (11) Y. Wada, and M. S. Liu, “A Flux Splitting Scheme with High-Resolution and Robustness for Discontinuities,” AIAA Paper 94-0083, 1994.
- (12) Arnaud Bultel, Bruno G. Chéron, Anne Bourdon, Ousmanou Motapon, Ioan F. Schneider, ” Collisional-radiative model in air for earth re-entry problems”, *Physics of Plasmas*, Vol.13, issue 4, 2006.
- (13) Christopher O. Johnston, Brian R. Hollis and Kenneth Sutton, “Non-Boltzmann Modeling for Air Shock-Layer Radiation at Lunnar-Return Conditions”, *Journal of Spacecraft and Rockets*, Vol. 45, No. 5, 2008.
- (14) H. W. Drawin, “Collision and Transport Cross Sections”, Tech. Rep. EUR-CEA-FC-383 revised, Fontenay-aux-Roses, 1967.
- (15) 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.
- (16) Matsuyama, S., *Numerical Study of Galileo Probe Entry Flowfield*, PhD thesis, Tohoku University, 2004.