

На правах рукописи

ДИКАЛЮК Алексей Сергеевич

**РАДИАЦИОННО-СТОЛКНОВИТЕЛЬНЫЕ МОДЕЛИ
В ЗАДАЧАХ РАСЧЕТА ИНТЕНСИВНОСТИ ИЗЛУЧЕНИЯ УДАРНЫХ
ВОЛН**

01.02.05 – Механика жидкости, газа и плазмы

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Москва 2013

Работа выполнена в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Институте проблем механики им. А.Ю. Ишлинского Российской Академии Наук (ИПМех РАН)

Научный руководитель: член-корреспондент РАН, профессор
Суржиков Сергей Тимофеевич

Официальные оппоненты: доктор физико-математических наук, профессор
Райзер Юрий Петрович

доктор технических наук

Залогин Георгий Николаевич

Ведущая организация: **Центральный аэрогидродинамический институт им. профессора Н.Е. Жуковского**

Защита состоится 19 сентября 2013 года в 15⁰⁰ часов на заседании диссертационного совета Д002.240.01 при Институте проблем механики им. А.Ю. Ишлинского РАН по адресу: 119526, Москва, проспект Вернадского, д. 101, к. 1.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ИПМех РАН.

Автореферат разослан «___» августа 2013 года.

Ученый секретарь диссертационного совета Д002.240.01
при ИПМех РАН

кандидат физико-математических наук

Сысоева Е.Я.

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность работы. С развитием и распространением в последнее десятилетие оптической диагностической техники (ICCD-камеры, высокоскоростные камеры) во многих лабораториях мира продолжились на новом этапе систематические исследования в области регистрации излучения газов, нагретых ударными волнами. В этих исследованиях измеряются излучательные характеристики ударных волн, создаваемых в широком диапазоне параметров и распространяющихся по газовым смесям различного химического состава.

Для описания результатов этих экспериментов необходимо привлечение различных физико-химических и кинетических моделей в силу многообразия явлений, протекающих за фронтом ударной волны. Среди этих явлений такие как: колебательная релаксация; неравновесная диссоциация, а так же другие химические превращения; ионизация и неравновесное возбуждение излучающих электронных состояний молекул, атомов и ионов. При этом, в силу высокой чувствительности исследуемой величины спектральной излучательной способности к каждой составляющей, возможна не только отработка моделей отдельных элементарных процессов, но и тестирование того, как эти модели сочетаются друг с другом.

Комплексное расчетно-экспериментальное исследование проблемы излучения ударных волн позволит не только лучше понять структуру релаксационной зоны за фронтом ударной волны, но и выработать рекомендации для инженеров, выполняющих сложные газодинамические расчеты в области оценки конвективных и радиационных тепловых потоков к поверхности спускаемых космических аппаратов нового поколения, создаваемых в настоящее время. Таким образом, построение и тестирование моделей для описания излучения газов, нагретых ударной волной, является актуальной фундаментальной и прикладной задачей.

Данная работа является продолжением аналитических и теоретико-вычислительных исследований в области изучения излучения и структуры ударных волн, выполненных советскими и российскими учеными (в алфавитном порядке): Биберман Л.М., Гордиец Б.Ф., Горелов В.А., Железняк М.Б., Залогин Г.Н., Зельдович Я.Б., Киреев А.Ю., Кузнецов Н.М., Лосев С.А., Макаров В.Н., Мнацаканян А.Х., Осипов А.И., Погосбекян М.Ю., Райзер Ю.П., Старик А.М., Ступоченко Е.В., Якубов И.Т.

Цель работы заключается в разработке и тестировании модели для описания излучения ударных волн, путем сравнения с соответствующими современными экспериментальными данными, а так же в выполнении численных исследований влияния различных составляющих модели на исследуемую величину.

Научная новизна работы заключается в следующем:

1. Разработана расчетно-теоретическая модель сильных ударных волн (скорость ударной волны $V_{sh} \sim 4-8$ км/с), в которой учитываются процессы физико-химической кинетики, возбуждения электронных состояний частиц и неравновесное излучение из релаксационной зоны. Показана применимость модели для атмосферных газов Земли и Марса в условиях экспериментов, выполненных в 2010-2012 гг. в НИИ Механики МГУ и научном центре NASA (NASA Ames);
2. Разработана новая модель и выполнены расчеты констант скоростей возбуждения электронных состояний двухатомных молекул и ионов за фронтом ударной волны. Модель основана на использовании соотношений теории Бете-Борна (теория возмущения волновой механики применительно к задаче рассеяния) и результатов квантовомеханических расчетов коэффициентов Эйнштейна $A_{v',v''}$. Дана формулировка кинетического механизма заселения электронно-возбужденных состояний ($CN(A^2\Pi)$, $CN(B^2\Sigma^+)$, $C_2(d^3\Pi)$, $CO(A^1\Pi)$, $NO(A^2\Sigma^+)$, $NO(B^2\Pi)$, $NO(C^2\Pi)$, $N_2(A^3\Sigma)$, $N_2(B^3\Pi)$, $N_2(C^3\Pi)$, $N_2^+(B^2\Sigma)$) в релаксационной зоне ударной волны;
3. С использованием разработанной физико-химической и радиационно-столкновительной модели получены данные по абсолютным величинам спектральной излучательной способности сильных ударных волн и закономерностям их изменения в зависимости от скорости ударной волны и давления исследуемого газа;
4. Выполнено систематическое исследование закономерностей изменения неравновесного излучения сильных ударных волн в атмосферах газов N_2-O_2 , CO_2-N_2 и CH_4-N_2 применительно к условиям выполненных экспериментов на ударных трубах;
5. Выполнено исследование по лабораторному моделированию неравновесного излучения сильных ударных волн посредством контролируемого подбора параметров плазмы тлеющего разряда и решена двумерная задача о структуре соответствующего нормального тлеющего разряда.

Основными защищаемыми положениями и результатами являются:

1. Результаты расчетно-теоретических исследований по абсолютным величинам спектральной интенсивности неравновесного излучения сильных ударных волн в газовых смесях N_2-O_2 , CO_2-N_2 и CH_4-N_2 .
2. Применение разработанной модели для обработки результатов современных ударноволновых экспериментов по регистрации излучения различных газовых смесей в широком диапазоне параметров. Сравнение

расчетных и экспериментальных данных в абсолютных единицах, анализ расхождений;

3. Количественная оценка влияния различных факторов и упрощающих предположений на точность результатов, получаемых с использованием предложенной модели;
4. Приближенная *ab-initio* квантовомеханическая методика для расчета констант скоростей возбуждения электронно-колебательных и электронных состояний двухатомных молекул и ионов электронным ударом.

Практическая значимость. Построенная в работе модель, а так же сформулированные механизмы кинетики возбуждения могут быть использованы при расчетах излучения ударных волн или при расчетах радиационных тепловых потоков к поверхности спускаемых космических аппаратов. Описанные расчетные методы могут быть использованы для выполнения расчетов химической кинетики. Выполненные оценки влияния различных факторов на точность предсказания излучательных характеристик ударнонагретых газов позволяют получить представление о типичной точности соответствующих расчетов, выполняемых в настоящее время.

Научные исследования, проведенные в диссертационной работе, осуществлялись в рамках проектов РФФИ № 10-01-00544, 10-01-00468-а, 11-08-12072-офи-м, 09-08-00272а; федеральной целевой программы «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» 2010-1.1-112-024-055; 7^{ой} Европейской рамочной программы (FP7/2007-2013) грант №242311 и программы фундаментальных исследований Российской Академии Наук.

Достоверность результатов диссертации подтверждается физической обоснованностью постановок задач и строгим аналитическим характером их рассмотрения с применением современных теоретических концепций и математических средств физической и химической механики, сравнением собственных численных результатов с расчетами других авторов, а так же соответствием расчетных и экспериментальных данных.

Апробация работы. Основные результаты работы докладывались и обсуждались на всероссийских и международных профильных научных конференциях и семинарах:

1. International School of Quantum Electronics, 53rd Course Molecular Physics and Plasmas in Hypersonics, Ettore Majorana Centre, Erice, Sicily (Italy), 8-15 September 2012.
2. 44th AIAA Thermophysics Conference, 24 – 27 June 2013, San Diego, California.

3. 50th AIAA Aerospace Sciences Meeting including the New Horizons Forum and Aerospace Exposition, 09 - 12 January 2012, Nashville, Tennessee.
4. 41st AIAA Plasmadynamics and Laser conference, 28 June - 1 July 2010, Chicago, Illinois.
5. 4th International Workshop on Radiation of High Temperature Gases in Atmospheric Entry. Lausanne, Switzerland, 12 – 15 October, 2010.
6. Семинар «Физико-химическая кинетика в газовой динамике», НИИ Механики МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва, 01.11.2012.
7. Всероссийская научно-техническая конференция молодых ученых и специалистов «Новые решения и технологии в газотурбостроении», 5-8 октября, ЦИАМ, Москва, 2010.
8. XVIII Школы-семинара молодых ученых и специалистов под руководством акад. РАН А.И. Леонтьева «Проблемы газодинамики и теплообмена в новых энергетических технологиях».
9. Международный симпозиум по радиационной плазмодинамике, Москва, Московский государственный технический университет имени Н.Э. Баумана, 2012 г.
10. Всероссийская школа-семинар «Аэрофизика и физическая механика классических и квантовых систем» (АФМ), Москва, Институт проблем механики им. А.Ю. Ишлинского РАН, 2008-2012;
11. Научная конференция МФТИ, Москва-Долгопрудный, Московский Физико-Технический Институт, 2011–2012 гг;
12. Научный семинар профессора В.В. Лунева в ЦНИИМАШ.

Публикации. По теме диссертации опубликовано 14 печатных работ, в том числе 2 статьи в журналах из перечня Высшей аттестационной комиссии РФ. Список работ приведен в конце автореферата.

Структура и объем работы. Диссертация состоит из введения, 8 глав, заключения и списка литературы. Общий объем работы составляет 140 страниц, включая 64 рисунка и 10 таблиц. Список литературы содержит 121 наименование.

СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во **введении** обоснована актуальность темы исследований. Сформулирована цель и задачи диссертационной работы, перечислены представленные в диссертации новые результаты, их практическая ценность и положения, выносимые на защиту. Кратко изложена структура диссертации.

В первой главе приводится обзор работ посвященных использованию радиационно-столкновительных моделей для описания различных неравновесных систем, а так же современных экспериментальных работ, посвященных регистрации излучения газов, нагретых ударной волной.

В первой части этой главы рассматриваются многотемпературный (MT) и радиационно-столкновительный (RC) подходы для описания состояния неравновесной системы. Обсуждаются преимущества и недостатки каждого из них. Вводится классификация RC-моделей по уровням сложности и затратам машинного времени. Отдельно рассматриваются работы, посвященные описанию релаксационной зоны за фронтом ударной волны, а так же излучения, испускаемого из нее, с использованием RC-моделей. Проводится обзор работ, посвященных описанию других неравновесных систем (пограничный слой у поверхности тела, обтекаемого гиперзвуковым потоком, сопловые течения, газоразрядная плазма) с использованием радиационно-столкновительных моделей.

Во второй части первой главы проводится обзор современных экспериментальных исследований, посвященных измерению излучения газов, нагретых ударной волной. Подчеркивается, что интерес к данному кругу задач в мире возрос в последнее десятилетие в связи с развитием регистрирующего оптического оборудования (ICCD/CCD-камеры, высокоскоростные камеры). Особое внимание уделяется работам, в которых проводилась регистрация излучения в *абсолютных единицах* измерения, так как адекватное тестирование создаваемых RC-моделей возможно только с привлечением этих результатов. Отмечается, что в настоящее время исследуются различные газовые смеси ($\text{CO}_2\text{-N}_2$, $\text{CH}_4\text{-N}_2$, $\text{O}_2\text{-N}_2$) в лабораториях, расположенных в России, США, Европе, Японии, Австралии. Описываются неравновесные радиационные характеристики, которые измеряются в современных работах. В этой части работы в виде графиков представлен обзор данных по наборам параметров (скорость ударной волны V_{sh} - давление исследуемого газа p), для которых выполнены эксперименты по регистрации излучения ударных волн за прошедшие пятнадцать лет (так же известны как матрицы экспериментальных параметров).

Компьютерная модель, развиваемая в данной работе, предназначена для расчета неравновесного излучения различных газовых смесей, нагретых ударной волной. В данную модель включаются различные элементы. Наиболее важными, с точки зрения качества описания рассчитываемой величины,

являются механизмы химической кинетики за фронтом ударной волны, а так же *eRC*-модель заселения электронных возбужденных излучающих состояний молекул и их ионов. Тестирование модели выполнено путем сравнения с результатами современных экспериментальных измерений. Развитие такого подхода позволяет надеяться на более точное качественное и количественное описание процессов неравновесного излучения за фронтом ударных волн.

Во второй главе формулируются основные положения и уравнения модели для расчета излучения ударных волн. Среди них: система уравнений для расчета газодинамических параметров за фронтом ударной волны, дополненная термическим уравнением состояния многокомпонентного химически реагирующего газа; система уравнений химической кинетики для расчета концентраций химических компонент газовой смеси (определяются на основе механизма химической кинетики) и заселенностей электронных возбужденных состояний молекул и их ионов (определяются на основе *eRC*-модели); уравнение колебательной релаксации для расчета температуры колебательных мод молекул; уравнение баланса энергии свободных электронов для расчета соответствующей температуры. Температура газа свободных электронов используется на кинетической стадии расчета. С использованием этой температуры рассчитываются константы скорости процессов, в которых участвуют электроны. Приведено описание созданных и используемых баз данных.

Уравнения, описанные выше, составляют вместе систему уравнений кинетической стадии расчета. Результаты, полученные на этой стадии, выступают в качестве входных параметров для стадии, на которой рассчитывается собственно величина интенсивности излучения в *абсолютных единицах*. При этом предполагается, что излучение не влияет на распределение параметров в релаксационной зоне (не влияет на результаты кинетической стадии расчетов). Таким образом, полная система уравнений модели (в системе отсчета, связанной с фронтом ударной волны) выглядит следующим образом:

$$\frac{d}{dx}(\rho u) = 0; \quad \frac{d}{dx}(p + \rho u^2) = 0; \quad \frac{d}{dx}\left(h + \frac{u^2}{2}\right) = 0 \quad (1)$$

$$p = \frac{\rho RT}{M_\Sigma}; \quad M_\Sigma = \sum_{i=1}^{N_s} \eta_i x_i; \quad \eta_i = m_i N_A \quad (2)$$

$$h = \frac{1}{M_\Sigma} \sum_{i=1}^{N_s} \Delta_f H_i^0 x_i + \frac{R}{M_\Sigma} \left[\left(\frac{5}{2} + \sum_{i=1}^{N_t} x_i + \frac{3}{2} \sum_{i=1}^{N_{NL}} x_i \right) T + \sum_{i=1}^{N_M} x_i \sum_{j=1}^{N_{V,i}} g_{ij} \frac{\theta_{ij}}{\exp(\theta_{ij} / T_{V,ij}) - 1} \right] \quad (3)$$

$$\frac{dX_k}{dt} = \sum_{j=1}^{N_r} \left[(b_{kj} - a_{kj}) k_j^f \prod_{i=1}^{N_s} X_i^{a_{ij}} + (a_{kj} - b_{kj}) k_j^r \prod_{i=1}^{N_s} X_i^{b_{ij}} \right], \quad k = \overline{1, N_s} \quad (4)$$

$$\frac{de_m}{dt} = Q_{VT}^m + Q_{CV}^m \quad (5)$$

$$\frac{d}{dx} \left(\frac{3}{2} T_e X_e u \right) + T_e X_e \frac{du}{dx} = Q_{ei} + Q_{ea} + Q_{ai} + Q_{ion} + Q_{eV} \quad (6)$$

$$j_\lambda = 3.202 \times 10^{-10} \frac{N_{eel}}{Q_{VR} \lambda^6} \sum_V \sum_{V'} \frac{S_{V'V''}}{|\Delta B_V|} \cdot \exp \left[-\frac{hc}{kT_V} E_{eel}(V') \right] \exp \left[-\frac{hc}{kT_R} \frac{B_{V'}}{\Delta B_V} (\omega - \omega_{V'V''} + B_{V'}) \right] \quad (7)$$

Здесь p , ρ , u , h - давление, плотность, скорость и энтальпия газа в релаксационной зоне, R - универсальная газовая постоянная, N_A - постоянная Авогадро, M_Σ - молярная масса газовой смеси, η_i - молярная масса химической компоненты газовой смеси, m_i - масса молекулы, x_i - относительная концентрация химической компоненты газовой смеси, N_s - полное число химических компонент газовой смеси, $N_M = N_L + N_{NL}$ - число молекулярных компонент газовой смеси, N_L - число линейных молекулярных компонент газовой смеси, N_{NL} - число нелинейных молекулярных компонент газовой смеси, $N_{V,i}$ - число колебательных мод данной молекулярной компоненты газовой смеси, g_{ij} - вырожденность j -ой колебательной моды i -ой молекулярной компоненты, θ_{ij} - характеристическая температура j -ой колебательной моды i -ой молекулярной компоненты, $T_{V,ij}$ - температура j -ой колебательной моды i -ой молекулярной компоненты, $\Delta_f H_i^0$ - энтальпия образования вещества при 298,15 К, X_k - молярная объемная концентрация k -ой компоненты газовой смеси, N_s - полное количество химических компонент (включая учитываемые в качестве отдельных компонент электронные возбужденные излучающие состояния молекул и их ионов), a_{ij} , b_{ij} - стехиометрические коэффициенты прямых и обратных реакций, k_j^f и k_j^r - константы скорости прямых и обратных реакций, $e_m = [\exp(\theta_m / T_{V,m}) - 1]^{-1}$ - количество колебательных квантов m -ой колебательной моды при температуре, $T_{V,m}$, θ_m - характеристическая температура m -ой моды, Q_{VT}^m - слагаемое, описывающее скорость изменения количества колебательных квантов m -ой моды вследствие обмена энергии между поступательными и колебательными степенями свободы, Q_{CV}^m - слагаемое, описывающее скорость изменения количества колебательных квантов m -ой моды вследствие протекания химических реакций, T_e - температура свободных электронов в смеси, Q_{ei} , Q_{ea} , Q_{ai} , Q_{ion} , Q_{eV} в (6) - источниковые слагаемые, описывающие процессы обмена энергией при упругих электронно-ионных столкновениях, упругих

электронно-атомных столкновениях, в реакциях ассоциативной ионизации и диссоциативной рекомбинации, ионизации атомов электронным ударом, при электронно-колебательном взаимодействии, N_{eel} - заселенность излучающего электронного состояния [см^{-3}], $\omega = 10^4 / \lambda$ - волновое число [см^{-1}], λ - длина волны [$\mu\text{м}$], $\omega_{V'V''}$ - волновое число электронно-колебательного перехода, $E_{eel}(V')$ - колебательная энергия V' -го уровня возбужденного электронного состояния, $\Delta B_V = B_{V'} - B_{V''}$, $B_{V'}$, $B_{V''}$ - вращательные постоянные соответствующих электронно-колебательных уровней, Q_{VR} - колебательно-вращательная статистическая сумма возбужденного электронного состояния, T_V , T_R - колебательная и вращательная температуры соответственно, $S_{V'V''}$ - сила электронно-колебательного перехода. При расчете излучения с использованием модели перекрывающихся линий (7) $T_R = T$. Колебательная температура T_V электронного возбужденного излучающего состояния молекулы полагается равной колебательной температуре основного электронного состояния этой молекулы. Величина $S_{V'V''}$ определяется с использованием *ab-initio* коэффициентов Эйнштейна. База данных [1] коэффициентов Эйнштейна создана в результате анализа многочисленных *ab-initio* квантовомеханических расчетов и верифицирована в работах Кузнецовой Л.А. и Суржикова С.Т. [2, 3].

В соответствии с соотношениями системы уравнений (1)-(7) на рис. 1 приведено схематическое изображение влияния различных неравновесных процессов друг на друга в релаксационной зоне за фронтом ударной волны. Согласно этому рисунку в модель включено взаимное влияние процессов колебательной релаксации и химических превращений. Влияние колебательной релаксации на химическую кинетику учтено в соответствии с моделями неравновесной диссоциации (использовались подходы, созданные в работах Осипова А.И. и Лосева С.А. [4]):

$$k(T, T_V) = Z(T, T_V) \cdot k^0(T) \quad (8)$$

Здесь $k(T, T_V)$ и $k^0(T)$ - соответствующие неравновесная и равновесная константы скорости диссоциации, $Z(T, T_V)$ - фактор неравновесности. Существует множество моделей [5], которые могут быть использованы для расчета этой величины. В данной работе для этого была применена модель диссоциации ангармонического осциллятора Кузнецова Н.М.

Учет влияния химической кинетики на колебательную релаксацию выполнен с использованием модели Тринора-Мэррона [6].

Третья глава посвящена численным методам, положенным в основу компьютерных кодов, реализующих модель, описанную во второй главе. Условно третью главу можно разделить на две части.

В первой части рассматривается маршевый метод решения системы газодинамических уравнений, описывающих течение газа в релаксационной зоне за фронтом ударной волны в системе отсчета, связанной с фронтом ударной волны.

Во второй части описан неявный метод решения жестких систем уравнений вида:

$$\frac{d\vec{x}}{dt} = \vec{F}(\vec{x}) \quad (9)$$

Здесь $\vec{x} = (x_1, \dots, x_n)^T$ - вектор неизвестных размерностью n , $\vec{F}(\vec{x})$ - вектор правых частей. Система нелинейных дифференциальных уравнений (9) переписывается следующим образом:

$$\frac{\vec{x}^i - \vec{x}^{i-1}}{\tau} = \vec{F}(\vec{x}^i) \quad (10)$$

Для решения дискретизованной системы (10) используется метод квазилианеризации.

Так же, в диссертации описан один из возможных методов автоматического выбора временного шага для численного решения системы (10), основанный на условии диагонального преобладания.

В четвертой главе приведены механизмы химической кинетики, определяющие протекание химических реакций в газовых смесях $\text{CO}_2\text{-N}_2$, $\text{N}_2\text{-O}_2$ и $\text{CH}_4\text{-N}_2$. Наряду с механизмами и соответствующими им параметрами, включенными в *eRC*-модель, адекватные механизмы химической кинетики являются определяющими при расчетах спектральной интенсивности излучения в *абсолютных единицах*. В рассматриваемой главе приводятся таблицы, в которые включены химические реакции и соответствующие им прямые и обратные константы скорости. Последние в работе рассчитываются с использованием констант равновесия [7]. Приведенные в таблицах параметры

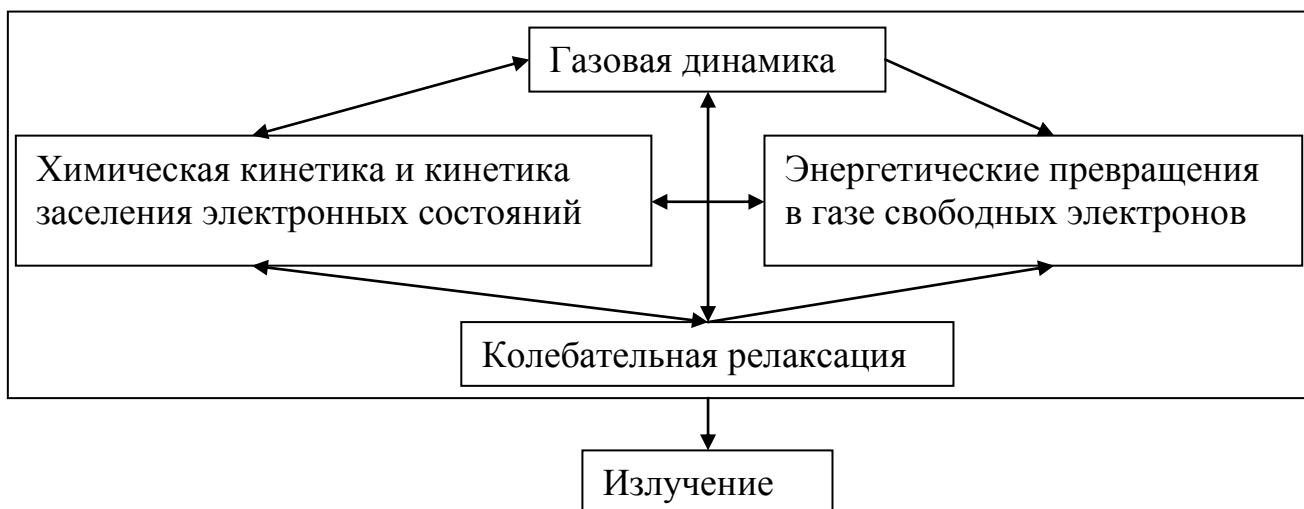


Рис. 1 Схематическая картина взаимного влияния неравновесных процессов друг на друга в релаксационной зоне за фронтом ударной волны.

А, В, С связаны с константами скоростей следующим соотношением:

$$k = AT^B \exp\left(-\frac{C}{T}\right) \quad (11)$$

В главе обсуждаются проблемы, которые могут возникнуть при использовании этой методики.

Для газовых смесей $\text{CO}_2\text{-N}_2$ и $\text{N}_2\text{-O}_2$ приведен единый механизм химических превращений. Это означает, что в его рамках можно успешно описывать химические превращения в этих смесях, не привлекая дополнительные реакции или параметры. Эффективность используемого механизма при описании спектральных излучательных характеристик указанных газовых смесей нагретых ударной волной продемонстрирована в последующих главах.

Тестирование численных методик, применяемых в данной работе на кинетической стадии для расчета неравновесных физико-химических процессов в релаксационной зоне за фронтом ударной волны, выполнено на примере газовой смеси $\text{CH}_4\text{-N}_2$, для которой в четвертой главе так же представлен механизм химической кинетики, в основном заимствованный из работы [8] Гоксена Т. Для этого проведены расчеты и выполнено сравнение с результатами, представленными в [9]. Параметры моделирования были следующими: состав газовой смеси – 98% CH_4 -2% N_2 , $V_{sh}=5.15$ км/с, $p=13.3$ Па. Соответствующие результаты приведены на рис. 2-4. В целом можно констатировать хорошее согласие между этими данными. Основные различия наблюдаются для концентраций частиц, а именно атомов N и молекул NH . Это в первую очередь связано с различием в параметрах механизмов химических реакций. В [9] для реакций диссоциации N_2 использовались константы скорости из [8].

Пятая глава посвящена разработке и описанию механизма возбуждения электронных излучающих состояний двухатомных молекул и их ионов. В диссертации рассматриваются следующие электронные состояния: $\text{CN}(A^2\Pi)$, $\text{CN}(B^2\Sigma^+)$, $\text{C}_2(d^3\Pi)$, $\text{CO}(A^1\Pi)$, $\text{NO}(A^2\Sigma^+)$, $\text{NO}(B^2\Pi)$, $\text{NO}(C^2\Pi)$, $\text{N}_2(A^3\Sigma)$, $\text{N}_2(B^3\Pi)$, $\text{N}_2(C^3\Pi)$, $\text{N}_2^+(B^2\Sigma)$. В качестве механизмов, ответственных за заселение этих состояний, выбраны: возбуждение/тушение тяжелыми частицам, электронами, процессы спонтанного излучения. Константы скорости тушения электронных состояний при столкновениях с тяжелыми частицами были заимствованы из работы [10], в которой был выполнен обзор соответствующих экспериментальных данных. Времена жизни τ_{el} верхнего излучающего электронного состояния были рассчитаны на основе *ab-initio* коэффициентов Эйнштейна $A_{\nu'\nu''}$. Рассчитанные значения τ_{el} сравнивались с данными, представленными в книге Кузнецовой Л.А. и др. [11].

Константы скорости возбуждения некоторых электронных состояний электронным ударом были заимствованы из данных доступных в литературе.

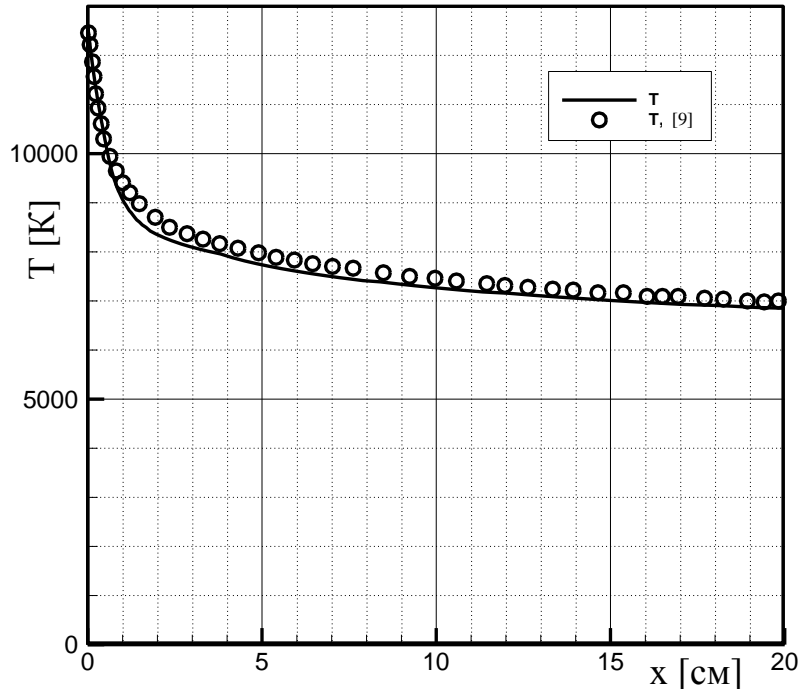


Рис. 2 Поступательная температура: сплошная линия – расчет по данным с использованием кинетического механизма, приведенного в диссертации (Табл. 3), \circ - результаты, представленные в [9].

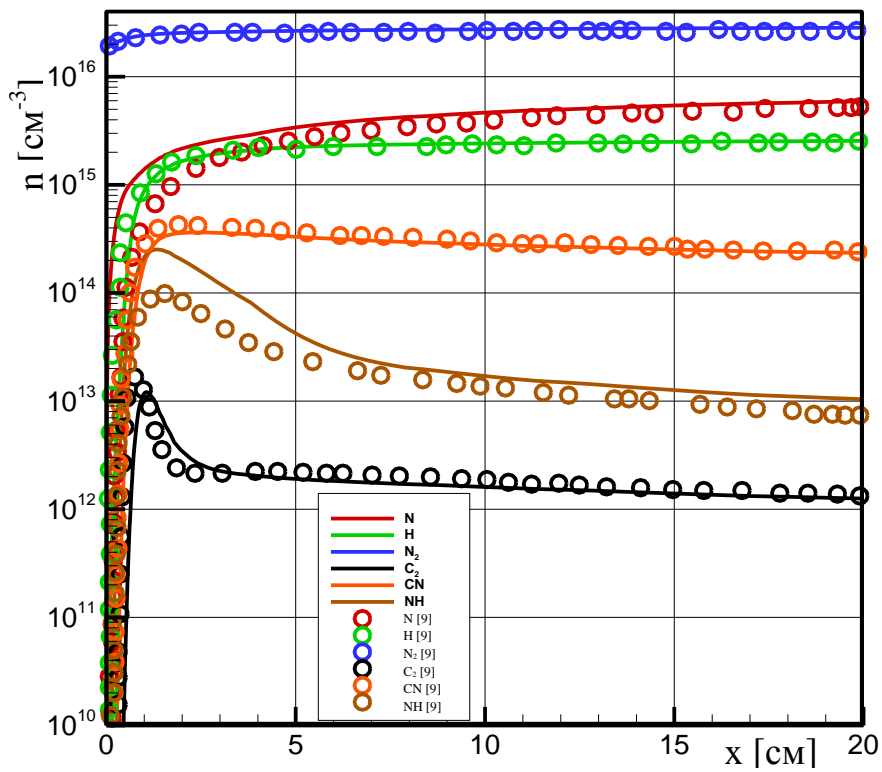


Рис. 3 Концентрация нейтральных частиц. Обозначения такие же, как на Рис. 2.

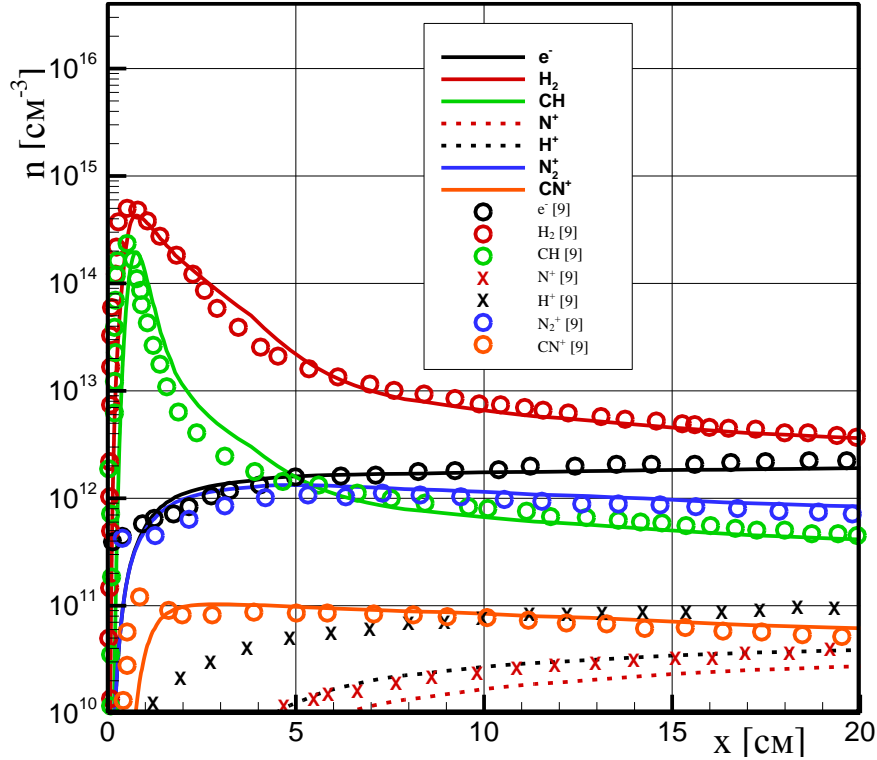


Рис. 4 Концентрация заряженных частиц.
Обозначения такие же, как на Рис. 2.

Для других – параметры этих процессов были рассчитаны с использованием приближенной методики, развиваемой в работе. В ее основе лежит использование формулы Бете-Борна [12]:

$$\sigma_{nm} = 4\pi a_0 \frac{Ry^2}{\Delta E_{nm}^2} f_{nm} \frac{\ln[c(1+u)]}{(1+u)} \quad (12)$$

Здесь Ry - постоянная Ридберга, a_0 - радиус Бора, $u = (\varepsilon - \Delta E_{nm}) / \Delta E_{nm}$, ε - энергия электрона, c - численный множитель, точное значение которого не определено, f_{nm} - сила осциллятора. Величина силы осциллятора связана с коэффициентами Эйнштейна следующим соотношением:

$$f_{(eV)^n \rightarrow (eV)^{n'}} = \frac{mc}{8\pi^2 e^2} \frac{1}{\nu^2} \frac{g_{e'}}{g_e} A_{(eV)^{n'} \rightarrow (eV)^n} \quad (13)$$

Совместное использование формул (12), (13) и последующее усреднение получившихся сечений по распределению электронов по энергиям (предполагается, что функция распределения $F(\nu)$ - максвелловская) позволяет получить константы скорости возбуждения электронно-колебательных уровней двухатомной молекулы:

$$k_{nm} = \int_0^{\infty} \sigma_{nm} \nu F(\nu) d\nu \quad (14)$$

Чтобы получить константу скорости возбуждения всего электронного состояния, необходимо усреднить константы скорости возбуждения электронно-колебательных уровней. Процедура усреднения описана подробным образом в диссертации. Данная методика подходит для описания оптически разрешенных переходов.

Результаты применения этой методики для расчета констант скоростей возбуждения электронных состояний $A^2\Sigma$ и $B^2\Pi$ молекулы NO из основного состояния $X^2\Pi$ электронным ударом приведены на рис. 5 и 6. Там же представлены аппроксимации, приведенные в [13]. Можно констатировать, что различия между наборами данных невелико (учитывая специфику рассчитываемой величины).

В настоящее время наиболее плохо исследованными являются механизмы возбуждения электронных состояний молекул при столкновении с тяжелыми частицами ввиду сложной структуры обеих взаимодействующих частиц. Это означает, что к приведенным в данной работе параметрам, описывающим скорости соответствующих процессов, следует относиться как к оценочным и требующим дальнейшего уточнения.

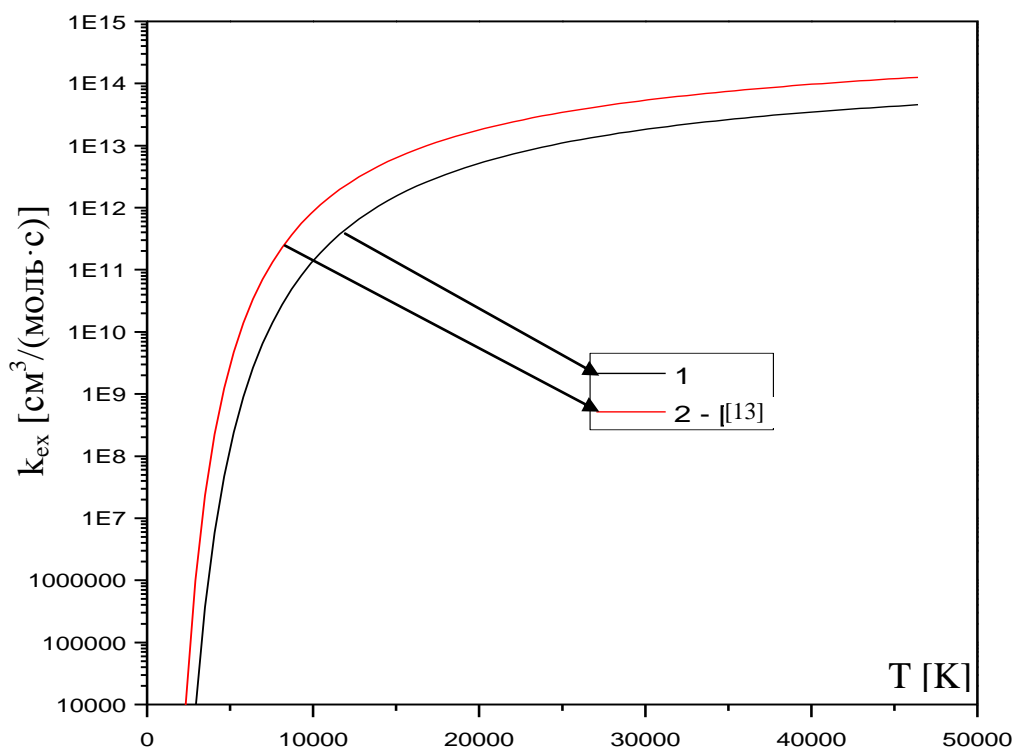


Рис. 5 Константа скорости возбуждения состояния $A^2\Sigma$ молекулы NO электронным ударом из состояния $X^2\Pi$: 1 - расчет по методике, представленной в диссертации; 2 – данные [13].

Шестая глава посвящена численному исследованию разработанной модели. Для анализа выбраны следующие параметры: 100% N_2 , $V_{sh} = 6.76$ км/с,

$p=40$ Па. На примере этих условий было рассмотрено влияние различных факторов на разброс в рассчитываемых интегральных по времени спектральных интенсивностях излучения в электронных системах полос $N_2(2^{ая}$ положительная): $N_2(C^3\Pi) - N_2(B^3\Pi)$ и $N_2^+(1^{ая}$ отрицательная): $N_2^+(B^2\Sigma) - N_2^+(X^2\Sigma)$ с помощью модели, изложенной в предыдущих главах диссертации. Среди этих факторов - различные модели неравновесной диссоциации, учет CVDV взаимодействия, параметры реакций ассоциативной ионизации.

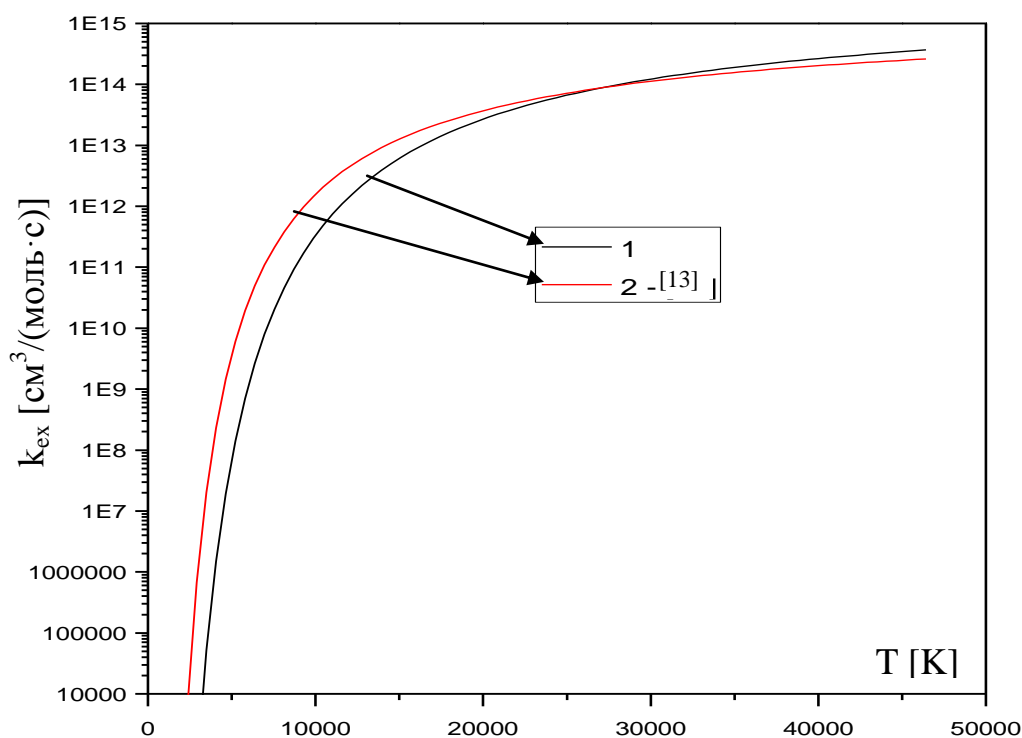


Рис. 6 Константа скорости возбуждения состояния $B^2\Pi$ молекулы NO электронным ударом из основного электронного состояния $X^2\Pi$. Обозначения те же, что на рис. 5.

При этом установлено, что рассчитываемые радиационные характеристики, получающиеся в результате использования CVDV-, CVD-модели или неучета взаимодействия между колебательной релаксацией и процессами диссоциации, могут отличаться друг от друга в ~ 5 раз. Отличие в интегральной спектральной интенсивности излучения системы $N_2(2^{ая}$ положительная): $N_2(C^3\Pi) - N_2(B^3\Pi)$, предсказываемое с использованием различных моделей неравновесной диссоциации составляет $\sim 45\%$, а системы $N_2^+(1^{ая}$ отрицательная): $N_2^+(B^2\Sigma) - N_2^+(X^2\Sigma)$ - 5% . Отличие между спектральным излучением системы $N_2(2^{ая}$ положительная) в зависимости от используемой константы скорости процесса $N + N \rightarrow N_2^+ + e$ составляет $\sim 70\%$, для $N_2^+(1^{ая}$ отрицательная) - 7% .

Так же в главе рассмотрено влияние упрощающих предположений на величину рассчитываемой интегральной по времени спектральной

интенсивности излучения. Среди таких предположений: отказ от использования уравнения баланса энергии для газа свободных электронов; использование распределения Больцмана для расчета заселенностей излучающих электронных возбужденных состояний двухатомных молекул с поступательной температурой тяжелых частиц или колебательной температурой соответствующей моды в качестве параметра. Оказалось, что в рассмотренных условиях (80% N₂ - 20% O₂, $p=1$ торр, $V_{sh}=5.56$ км/с) использование распределения Больцмана (независимо от температуры, выбранной в качестве параметра) для расчета заселенностей излучающих электронных состояний молекул приводит к значительным погрешностям при расчете величины интенсивности излучения релаксационной зоны по сравнению с результатами, получаемыми с помощью полной eRC-модели.

В седьмой главе модель для расчета неравновесного излучения газовых смесей нагретых ударной волной применена для описания современных экспериментальных данных. В основном производится сравнение с результатами измерений, выполненных на установках НИИ Механики МГУ им. М.В. Ломоносова в Лаборатории кинетических процессов в газах; Университет Квинсланд - установка X2; научный центр NASA (NASA Ames) - установка EAST. Сравняются как интегральные по времени спектральные интенсивности излучения, так и изменение интегральных по спектру интенсивностей излучения в зависимости от расстояния до фронта ударной волны. Сравняются расчетные и экспериментально измеренные интенсивности излучения в *абсолютных единицах* измерения. Анализируется излучение газовых смесей 70% CO₂ - 30% N₂, 80% N₂ - 20% O₂, 2% CH₄ - 98% N₂, нагретых ударными волнами, реализованными при следующих параметрах: скорость ударной волны $V_{sh} = 5-7, 5-8, 4-6$ км/с; давление исследуемого газа $p=0.3-1, 0.25-1, 1$ торр соответственно. Для газовой смеси CO₂-N₂ так же рассчитана равновесная спектральная интенсивность излучения и выполнено сравнение с доступными экспериментальными данными. На рис. 7-9 представлены примеры сопоставления расчетных и экспериментальных данных для различных газовых смесей для газовых смесей CO₂-N₂, N₂-O₂ и CH₄-N₂ соответственно.

В работе приведены так же парциальные вклады различных электронных систем полос в полные спектры. Пример такого распределения представлен на рис. 10. Подобные расчетные данные облегчают идентификацию отдельных спектральных особенностей регистрируемых в экспериментах.

Восьмая глава посвящена анализу возможности использования плазмы тлеющего разряда для лабораторного моделирования неравновесного излучения сильных ударных волн. Предварительные расчеты спектров выполнены с использованием модели перекрывающихся линий. Параметры газоразрядной азотной плазмы для расчета излучения получены в результате анализа данных работ [14] и [15]. В работе так же представлен анализ

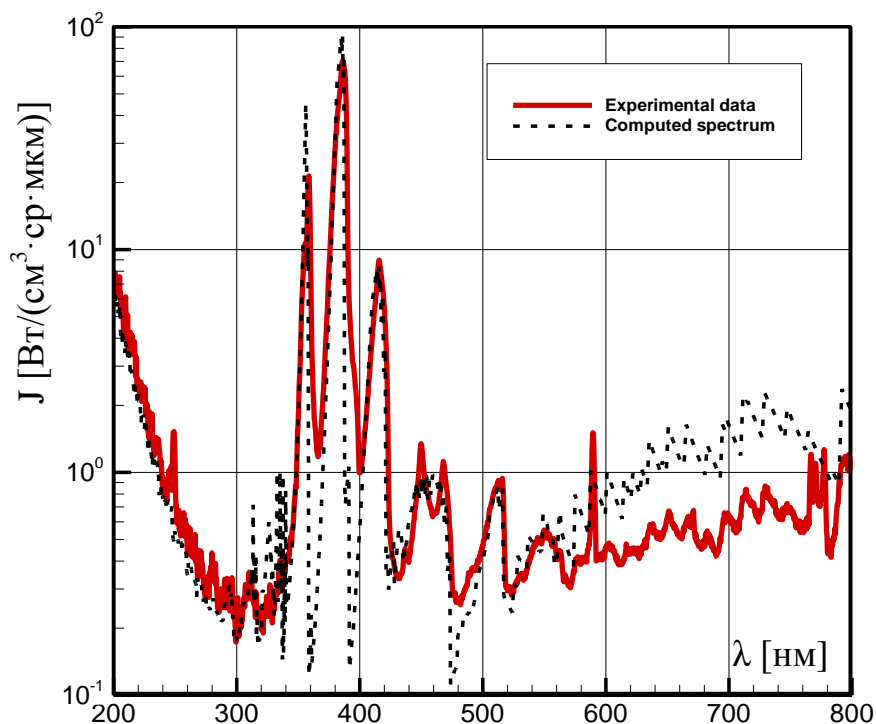


Рис. 7 Неравновесная спектральная интенсивность излучения релаксационной зоны за фронтом ударной волны, созданной в газовой смеси 70% CO_2 - 30% N_2 при $p=0.3$ торр, $V_{sh}=6.76$ км/с. Экспериментальные данные – сплошная линия, расчетные – штриховая.

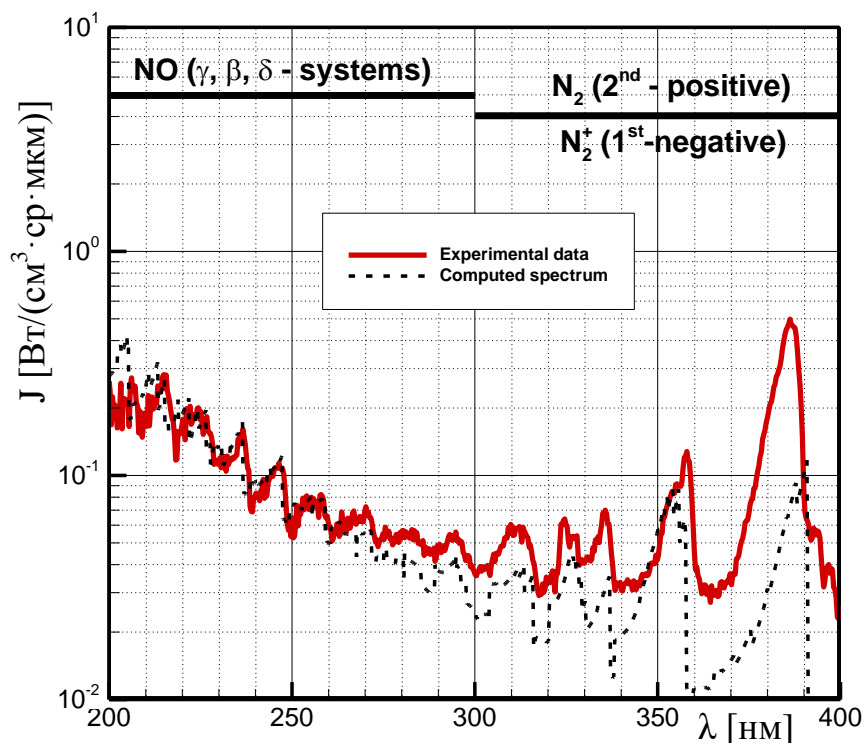


Рис. 8 Неравновесная спектральная интенсивность излучения релаксационной зоны за фронтом ударной волны (80% N_2 - 20% O_2 , $p=1$ торр, $V_{sh}=5.56$ км/с). Сплошная линия – эксперимент, штриховая - расчет.

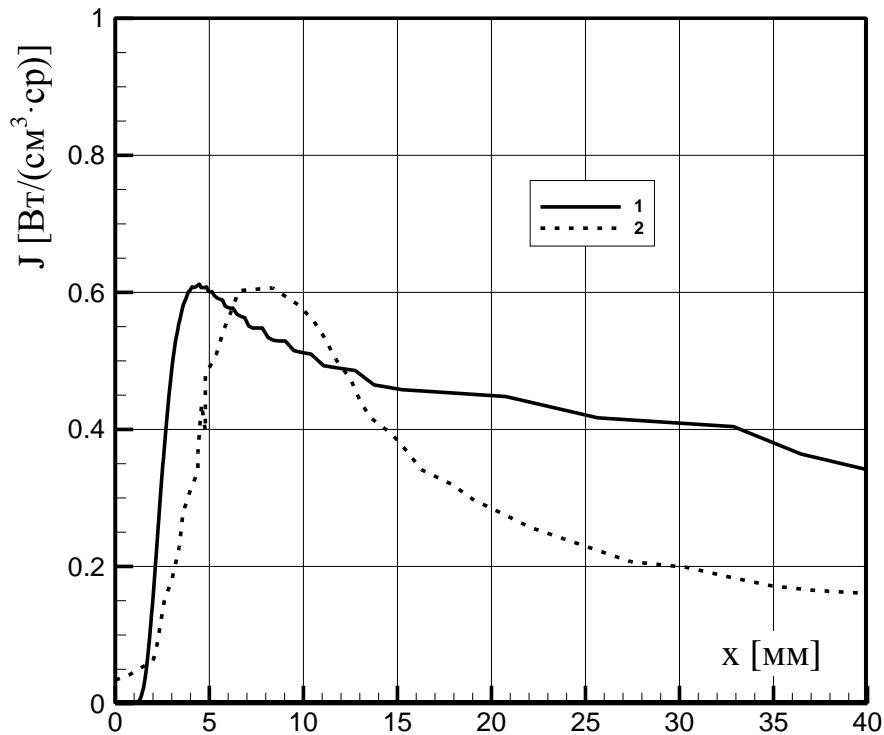


Рис. 9 Пространственное распределение излучения за фронтом ударной волны, проинтегрированного в спектральном диапазоне 310-450 нм. Газовая смесь 2% CH_4 - 98% N_2 , давление невозмущенного газ $p=1$ торр, $V_{sh}=5.00$ км/с. Сплошная линия – расчет, штриховая – эксперимент.

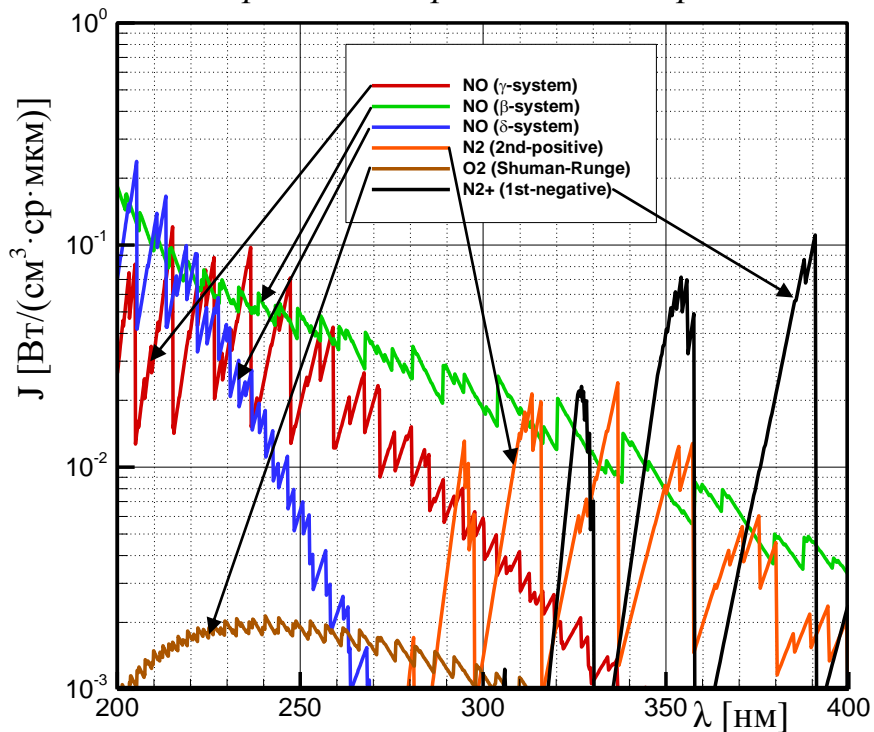


Рис. 10 Парциальные вклады различных молекулярных полос в неравновесный спектр: газовая смесь 80% N_2 - 20% O_2 , $p=1$ торр, $V_{sh}=5.56$ км/с (суммарный спектр – рис. 8).

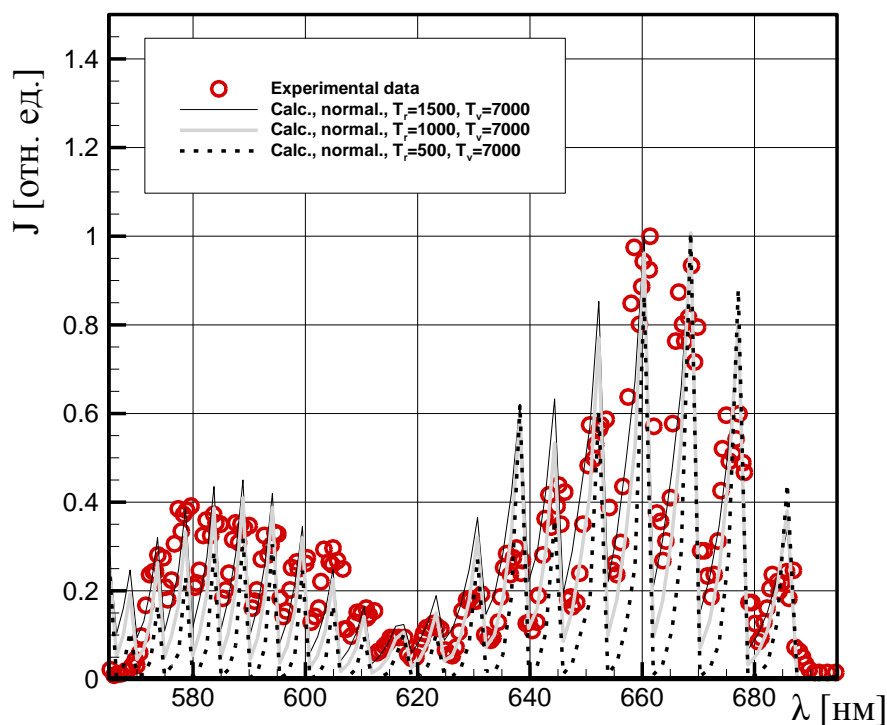


Рис. 11 Спектральные интенсивности излучения полосы $N_2(1^{ая}$ положительная): $N_2(B^3\Pi) - N_2(A^3\Sigma)$ разрядной плазмы постоянного тока в потоке N_2 : $p=3$ торр, $I=17$ мА, скорость потока N_2 200 см³/мин. Экспериментальные данные - \circ , линии – расчетные данные при постоянной колебательной температуре $T_v=7000$ К.

чувствительности спектральных распределений к входным параметрам, таким как вращательная и колебательная температура соответствующих излучающих электронных возбужденных состояний молекул. Пример такого расчета представлен на рис. 11. На рисунке представлен расчет спектральной интенсивности излучения электронной системы полос $N_2(1^{ая}$ положительная): $N_2(B^3\Pi) - N_2(A^3\Sigma)$ в разрядной плазме постоянного тока в потоке N_2 : $p=3$ торр, $I=17$ мА, скорость потока N_2 200 см³/мин. Расчеты выполнены при фиксированной колебательной температуре $T_v=7000$ К. Символы \circ – экспериментальные данные, штриховая линия соответствует расчету с вращательной температурой $T_r=500$ К, сплошная линия – расчет с $T_r=1000$ К, линия из точек - расчет с $T_r=1500$ К.

В **заключении** сформулированы основные результаты, полученные в работе, отражающие ее новизну и практическую значимость.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

1. Разработана расчетно-теоретическая модель сильных ударных волн (скорость ударной волны $V_{sh} \sim 4-8$ км/с), в которой учитываются процессы физико-химической кинетики, возбуждения электронных состояний

- частиц и неравновесное излучение из релаксационной зоны. Показана применимость модели для атмосферных газов Земли и Марса в условиях экспериментов, выполненных в 2010-2012 гг. в НИИ Механики МГУ и научном центре NASA (NASA Ames);
2. Разработана новая модель и выполнены расчеты констант скоростей возбуждения электронных состояний двухатомных молекул и ионов за фронтом ударной волны. Модель основана на использовании соотношений теории Бете-Борна (теория возмущения волновой механики применительно к задаче рассеяния) и результатов квантовомеханических расчетов коэффициентов Эйнштейна $A_{v',v''}$. Дана формулировка кинетического механизма заселения электронно-возбужденных состояний ($CN(A^2\Pi)$, $CN(B^2\Sigma^+)$, $C_2(d^3\Pi)$, $CO(A^1\Pi)$, $NO(A^2\Sigma^+)$, $NO(B^2\Pi)$, $NO(C^2\Pi)$, $N_2(A^3\Sigma)$, $N_2(B^3\Pi)$, $N_2(C^3\Pi)$, $N_2^+(B^2\Sigma)$) в релаксационной зоне ударной волны;
 3. С использованием разработанной физико-химической и радиационно-столкновительной модели получены данные по абсолютным величинам спектральной излучательной способности сильных ударных волн и закономерностям их изменения в зависимости от скорости ударной волны и давления исследуемого газа;
 4. Выполнено систематическое исследование закономерностей изменения неравновесного излучения сильных ударных волн в атмосферах газов N_2-O_2 , CO_2-N_2 и CH_4-N_2 применительно к условиям выполненных экспериментов на ударных трубах;
 5. Выполнено исследование по лабораторному моделированию неравновесного излучения сильных ударных волн посредством контролируемого подбора параметров плазмы тлеющего разряда и решена двумерная задача о структуре соответствующего нормального тлеющего разряда.

СПИСОК ЦИТИРУЕМОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

1. Кузнецова Л.А., Суржиков С.Т., Митрофанов Д.В. Атлас спектральных сечений поглощения электронных и колебательных систем полос двухатомных молекул. Препринт № 660. М.: ИПМех РАН, 1999.
2. Суржиков С.Т. Оптические свойства газов и плазмы. М.: Изд-во МГТУ им. Баумана, 2004.
3. Kuznetsova L.A. and Surzhikov S.T. Spectral radiation of shock waves and radiative models of diatomic molecules // AIAA Paper, AIAA 97-2564.
4. Лосев С.А., Осипов А.И. Исследование неравновесных явлений в ударных волнах // УФН. 1961. Т. 74. В. 3. С. 393-434.
5. Физико-химические процессы в газовой динамике, т. 1: Справочник под ред. Черного Г.Г. и Лосева С.А. М.: Изд-во МГУ, 1995. 349 с.

6. Treanor C.E., Marrone P.V. Effect of Dissociation on the Rate of Vibrational Relaxation // Phys. Fluids. 1962. V. 5. N. 9. P. 1022-1026.
7. Глушко В.П., Гурвич Л.В., Бергман Г.А., Вейц И.В. и др. Термодинамические свойства индивидуальных веществ. Справочное издание: В 4-х т. М.: Наука, 1978.
8. Gokcen T. N₂-CH₄-Ar Chemical Kinetic Model for Simulations of Atmospheric Entry to Titan // AIAA Paper. AIAA 2004-2469.
9. Bose D., Wright M.J., Bogdanoff D.W., Raiche G.A., Allen Jr. G.A. Modeling and Experimental Assessment of CN Radiation Behind a Strong Shock Wave // JTHT. 2006. V. 20. No. 2. P. 220-230.
10. Park C. Rate Parameters for Electronic Excitation of Diatomic Molecules II. Heavy Particle Impact Processes // AIAA Paper. AIAA 2008-1446.
11. Кузнецова Л.А., Кузьменко Н.Е., Кузяков Ю.Я., Пластинин Ю.А. Вероятности оптических переходов двухатомных молекул. М.: Наука, 1980.
12. Биберман Л.М., Воробьев В.С., Якубов И.Т. Кинетика неравновесной низко-температурной плазмы М.: Наука, 1982.
13. Teulet P., Sarrette J.P., Gomes A.M. Calculation of electron impact inelastic cross sections and rate coefficients for diatomic molecules. Application to air molecules // JQSRT. 1999. V. 62. P. 549-569.
14. Шахатов В.А., Лебедев Ю.А. Исследование кинетики возбуждения N₂(A³Σ, v_A), N₂(C³Π, v_C), N₂(B³Π, v_B) в азотной плазме газовых разрядов методами эмиссионной спектроскопии и численного моделирования // ХВЭ. 2008. Т. 42. № 3. С. 207-241.
15. Cicala G., De Tommaso E., Raino A.C., Lebedev Yu.A., Shakhmatov V.A. Study of positive column of glow discharge in nitrogen by optical emission and numerical simulation // Plasma Sources Sci. Technol. 2009. V. 18. 025032. 15 pp.

СПИСОК РАБОТ, ОПУБЛИКОВАННЫХ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

1. Дикалюк А.С., Суржиков С.Т. Расчетное исследование модели неравновесного излучения за фронтом ударных волн в марсианской атмосфере // МЖГ. 2013. № 1. С. 141-160.
2. Дикалюк А.С., Суржиков С.Т. Численное моделирование разреженной пылевой плазмы в нормальном тлеющем разряде // ТВТ. 2012. Т. 50. № 5. С. 611-620.
3. 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 // Proceedings of 50th AIAA Aerospace Sciences Meeting including the New Horizons Forum and Aerospace Exposition, 09 - 12 January 2012, Nashville, Tennessee, AIAA 2012-0795.

4. Dikalyuk A.S., Surzhikov S.T. , Shatalov O.P., Kozlov P.V., Romanenko Yu.V. Nonequilibrium Spectral Radiation Behind the Shock Waves in Martian and Earth Atmospheres // Proceedings of 44th AIAA Thermophysics Conference, AIAA-2013-2505.
5. Dikalyuk A.S., Surzhikov S.T. The modeling of dust particles in a normal glow discharge: the comparison of two charged models // Proceedings of 41st Plasmadynamics and Laser conference 28 June - 1 July 2010, Chicago, Illinois, AIAA 2010-4310.
6. Дикалюк А.С., Суржииков С.Т. Численное исследование модели неравновесного излучения за фронтом сильных ударных волн на основе сравнения с экспериментальными данными (смесь $\text{CO}_2\text{-N}_2$) // Препринт № 978 Института проблем механики РАН. 2011.
7. Дикалюк А.С., Суржииков С.Т. Моделирование пылевой компоненты плазмы методами молекулярной динамики в нормальном тлеющем разряде // Препринт № 931 Института проблем механики РАН. 2010.
8. Dikalyuk A.S., Surzhikov S.T. Computational model of nonequilibrium radiation of shock waves in $\text{CO}_2\text{-N}_2$ and $\text{CH}_4\text{-N}_2$ gas mixtures // Proceedings of 4th Int. Workshop on Radiation of High Temperature Gases in Atmospheric Entry. Lausanne, Switzerland, 12–15 October 2010 (ESA SP-689, February 2011).
9. Дикалюк А.С. Расчетная модель неравновесного излучения ударных волн в смеси газов $\text{CO}_2\text{-N}_2$ // Тезисы докладов всероссийской научно-технической конференции молодых ученых и специалистов «Новые решения и технологии в газотурбостроении», 5-8 октября, ЦИАМ, Москва, 2010.
10. Дикалюк А.С. Изучение влияния моделей неравновесной диссоциации на излучение ударных волн в смеси газов $\text{CO}_2\text{-N}_2$ // Тезисы докладов XVIII Школы-семинара молодых ученых и специалистов под руководством акад. РАН А.И. Леонтьева «Проблемы газодинамики и тепломассообмена в новых энергетических технологиях». С. 129. 2011.
11. Дикалюк А.С. Влияние моделей неравновесной диссоциации на кинетику и излучение ударных волн в воздушной газовой смеси // Труды 54-й научной конференции МФТИ «Проблемы фундаментальных и прикладных естественных и технических наук в современном информационном обществе». 2011.
12. Дикалюк А.С., Суржииков С.Т. Неравновесное спектральное излучение за ударными волнами в воздухе // Сборник научных трудов «IX Международный симпозиум по радиационной плазмодинамике РПД-2012». 2012.
13. Дикалюк А.С., Суржииков С.Т. Обзор экспериментальных работ по измерению излучения за фронтом ударных волн // Сборник научных трудов «IX Международный симпозиум по радиационной плазмодинамике РПД-2012». 2012.

14. Дикалюк А.С. Равновесное спектральное излучение за фронтом ударных волн в смесях газов $\text{CO}_2\text{-N}_2$ // Труды 55-ой научной конференции МФТИ «Проблемы фундаментальных и прикладных естественных и технических наук в современном информационном обществе». 2012.

Автор выражает благодарность научному руководителю, проф. С.Т. Суржикову, за постоянное внимание, ценные советы и большую помощь в подготовке работы. Так же автор выражает признательность коллективу лаборатории Кинетических Процессов в Газах, в частности Козлову П.В., Шаталову О.П., Романенко Ю.В., за постоянное внимание, ценные замечания и обсуждение результатов. Автор благодарит коллектив лаборатории Радиационной Газовой Динамики Института Проблем Механики РАН за плодотворные обсуждения и полезные замечания, сделанные при подготовке диссертации.

РАДИАЦИОННО-СТОЛКНОВИТЕЛЬНЫЕ МОДЕЛИ
В ЗАДАЧАХ РАСЧЕТА ИНТЕНСИВНОСТИ ИЗЛУЧЕНИЯ
УДАРНЫХ ВОЛН

Дикалюк Алексей Сергеевич

Автореферат диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Подписано к печати 12 августа 2013 г. Заказ № 27-2013. Тираж 100 экз.

Отпечатано на ризографе Федерального государственного бюджетного учреждения
науки Института проблем механики им. А.Ю. Ишлинского РАН
119526, Москва, проспект Вернадского д.101, корп.1