

УДК 533.92:533.93

ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ИЗЛУЧЕНИЯ В УДАРНО-НАГРЕТОЙ СМЕСИ CO_2 И N_2 МЕТОДОМ ПРЯМОГО СТАТИСТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

© 2023 г. А. Л. Кусов^а, Н. Г. Быкова^а, Г. Я. Герасимов^а, И. Е. Забелинский^а, П. В. Козлов^а, В. Ю. Левашов^{а,*,**}

^аМГУ им. М.В. Ломоносова, Научно-исследовательский институт механики, Москва, Россия

*E-mail: vyl69@mail.ru

**E-mail: levashovvy@imec.msu.ru

Поступила в редакцию 03.05.2023 г.

После доработки 25.06.2023 г.

Принята к публикации 01.08.2023 г.

Предложена модель для численного исследования излучения за фронтом сильной ударной волны в газовой смеси CO_2 – N_2 . Модель основана на методе прямого статистического моделирования Монте-Карло и учитывает физико-химические свойства атомов и молекул, поступательно-вращательный и поступательно-колебательный обмен энергией, кинетику химических реакций, возбуждение электронных уровней атомов и молекул, а также процессы переноса радиационной энергии. Проведена серия расчетов спектральных характеристик ударно нагретой смеси. Полученные результаты сравниваются с имеющимися экспериментальными данными.

Ключевые слова: ударные волны, излучение, смесь CO_2 – N_2 , метод прямого статистического моделирования Монте-Карло, спектральные характеристики

DOI: 10.31857/S1024708423600252, **EDN:** QOXBJC

Обеспечение надежной тепловой защиты перспективных космических аппаратов (десантных модулей), входящих в атмосферу Земли и других планет Солнечной системы с супер-орбитальными скоростями, зависит от правильной оценки конвективных и радиационных тепловых нагрузок на их поверхность [1]. Это, в частности, относится к атмосферам Марса и Венеры, которые состоят из CO_2 и небольшой примеси N_2 [2, 3], а также к спутнику Сатурна Титану, обладающего плотной атмосферой, состоящей преимущественно из CO_2 с небольшой примесью углеводородов. При этом, как показывают результаты численного моделирования, радиационная составляющая теплового потока на отдельных участках траектории движения космического аппарата в атмосфере может превышать конвективную составляющую [4].

Основным источником информации по излучению ударно нагретых газовых смесей, содержащих CO_2 , являются результаты обработки экспериментальных данных, полученных на ударных трубах [5]. Эта информация используется как для оценки тепловых потоков к поверхности космического аппарата, так и для тестирования различного рода физико-математических моделей, способных предсказать поведение высокотемпературной газовой среды за фронтом отошедшей ударной волны. Эксперименты по измерению радиационных характеристик смеси CO_2 – N_2 за фронтом сильной ударной волны проводились на различного типа ударных установках. К ним относятся электро-разрядные установки EAST (Исследовательский центр NASA Ames) [6–13] и ADST (ЦАГИ) [14], поршневая ударная труба HVST (JAXA, Японское агентство космических исследований) [15], а также детонационные ударные трубы, эксплуатируемые в МИФИ [16] и Институте механики МГУ [17, 18].

Методы численного моделирования позволяют получить информацию по тем параметрам течения, которые трудно поддаются измерению. Основы расчета спектральных характеристик ударно нагретого газа заложены в пионерских работах отечественных и зарубежных авторов [19–28]. При моделировании излучения обычно используются спектральные [29–32] и столкновительно-радиационные (CR) [33–37] модели. Среди спектральных моделей наибольшей популяр-

ностью пользуется вычислительная процедура NEQAIR [29], которая выполняет полинейный (line-by-line) расчет спектров излучения и поглощения атомов и молекул, входящих в состав исследуемой газовой смеси. Данная модель часто используется в качестве радиационного блока в компьютерных программах, описывающих газодинамику течения [38, 39]. Более сложные CR модели включают кинетический блок, который содержит уравнения для определения газодинамических параметров газа за ударной волной, а также систему кинетических уравнений, позволяющих вычислять состав химически реагирующей смеси и заселенность возбужденных уровней атомов и молекул [34]. Результаты расчета кинетического блока являются исходной информацией для определения спектральных и энергетических характеристик излучения.

Метод прямого статистического моделирования Монте-Карло (DSMC, direct simulation Monte Carlo), разработанный Бёрдом [40], является кинетическим подходом к моделированию течения разреженных газов. Он основан на построении процесса, который имитирует движение частиц газа, а также их столкновения между собой с химическими реакциями, возбуждением внутренних степеней свободы и излучением фотонов [41]. Ранее с помощью DSMC метода проведено моделирование различных кинетических процессов в ударно нагретом воздухе, включая вращательно-поступательный энергообмен [42], кинетику химических реакций [43, 44] и перенос радиационной энергии [45, 46]. В настоящей работе DSMC процедура применена для расчета спектральных характеристик высокотемпературной смеси $\text{CO}_2\text{--N}_2$, моделирующей атмосферу Марса и Венеры. В предлагаемом алгоритме процессы столкновения молекул и излучения фотонов проводятся одновременно: фотоны рождаются непосредственно при переходах возбужденных молекул на низколежащие уровни. При этом газ теряет часть энергии на излучение, что моделирует влияние излучения на течение газа.

1. ОПИСАНИЕ МОДЕЛИ

В методе DSMC большое количество реальных частиц газа (молекул, атомов, ионов и фотонов) заменяется гораздо меньшим набором модельных частиц. Эти модельные частицы движутся в физическом пространстве, сталкиваются с другими частицами и с твердыми границами области течения аналогично элементарным процессам, протекающим в реальной газовой динамике [41]. Столкновения частиц моделируются как мгновенный случайный переход системы из одного состояния в другое, что отличает метод DSMC от метода молекулярной динамики, в котором столкновения рассматриваются как детерминированный процесс.

Следует отметить, что в отличие от стандартных кинетических моделей, в которых газодинамические параметры течения и концентрации возбужденных частиц определяются в результате решения системы дифференциальных уравнений (см., например, [47]), метод DSMC оперирует только с вероятностями соответствующих столкновительных и излучательных процессов. В предлагаемом алгоритме расчета ударная волна в исследуемом неподвижном газе генерируется движением твердого поршня. Скорость поршня подбирается таким образом, чтобы скорость образующейся перед ним ударной волны равнялась заданному значению. Кинетические процессы, протекающие за ударной волной, определяют состояние системы сталкивающихся частиц в каждый момент времени. Это состояние позволяет вычислить макроскопические свойства системы, включая концентрации возбужденных частиц, ответственных за излучательные характеристики газа.

Существует большое количество упрощенных моделей взаимодействия частиц газа при их столкновении. Наиболее простой является модель VHS (variable hard spheres), в которой сталкивающиеся частицы рассматриваются как твердые шарики, диаметр которых зависит от их относительной скорости [40]. Данная модель позволяет правильно описать экспериментально наблюдаемую степенную зависимость вязкости газа от температуры с показателем степени ω . При этом диаметр d_{ij} сталкивающихся частиц сортов i и j должен зависеть от их относительной скорости g следующим образом:

$$d_{ij} = d_{ij}^{ref} \sqrt{(2kT_{ref}m_{ij}^{-1}g^{-2})^{\omega_{ij}-1/2} \Gamma^{-1}\left(\frac{5}{2} - \omega_{ij}\right)} \quad (1)$$

где d_{ij}^{ref} и ω_{ij} — постоянные величины для частиц сортов i и j ; $T_{ref} = 273$ К; m_{ij} — приведенная масса сталкивающихся частиц; $\Gamma(x)$ — гамма-функция. Рассеяние в VHS модели предполагается изотропным, т.е. дифференциальное сечение σ и угол рассеяния χ равны:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{d^2}{4}, \quad \chi = 2 \arccos\left(\frac{b}{d}\right) \quad (2)$$

где b – прицельное расстояние, $d\Omega = \sin(\chi)d\chi d\phi$ – элемент телесного угла. Принятые в настоящей работе параметры VHS модели для компонентов смеси $\text{CO}_2\text{--N}_2$, которые используются в выражениях (1) и (2), приведены в [47] и равны примерно 4.0 Å для d_{ij} и 0.75 для ω_{ij} .

Моделирование поступательно-вращательного обмена энергией осуществлялось с помощью алгоритма, в котором лишь доля столкновений молекул, равная вероятности изменения вращательной энергии P_{RT} , приводит к изменению вращательной энергии молекул. Величина P_{RT} зависит от полной энергии столкновения E_C , равной сумме поступательной и вращательной энергии сталкивающихся частиц, и определяется зависимостью вида [41]

$$P_{RT} = Z_R^{-1} = Z_{R\infty}^{-1} \left(1 + \frac{\Gamma(2-\eta)}{\Gamma(1.5-\eta)} \sqrt{\frac{kT_*}{E_C}} \frac{\pi\sqrt{\pi}}{2} + (1-\eta) \frac{kT_*}{E_C} \left(\frac{\pi^2}{4} + \pi \right) \right) \quad (3)$$

где Z_R – среднее число столкновений, необходимое для релаксации вращательной температуры к поступательной; $Z_{R\infty}$ и T_* – константы; $\eta_{ij} = \omega_{ij} - (1 + \xi_i + \xi_j)/2$; ξ_i – количество степеней свободы i -й частицы. Входящие в (3) параметры модели $Z_{R\infty}$ и T_* , рекомендованные в данной работе исходя из данных различных авторов по вращательно-поступательной релаксации, приведены в [47].

Моделирование поступательно-колебательного обмена проводится аналогичным образом. Вероятность изменения колебательной энергии P_{VT} , которая определяется как отношение времени свободного пробега молекул τ_c ко времени поступательно-колебательной релаксации τ_{VT} , вычисляется по формуле [41]

$$P_{VT} = \min \left\{ Z_0^{-1} g^{3+2(\omega_{ij}-1/2)} \exp\left(-\frac{g^*}{g}\right), Z_2^{-1} g^{2\omega_{ij}} \right\} \quad (4)$$

где второй член представляет собой высокотемпературную коррекцию Парка [48]. Параметры модели, входящие в выражение (4) для вероятности P_{VT} , приведены в [47].

Для описания кинетики химических реакций в методе DSMC наиболее часто используется модель полной энергии столкновения TCE (total collision energy) Бёрда [40], в которой константа скорости бинарной реакции k_d представляется в модифицированной форме Аррениуса:

$$k_d = AT^n \exp\left(-\frac{E_d}{kT}\right) \quad (5)$$

где A и n – константы, E_d – энергия активации реакции, k – постоянная Больцмана. Интегрирование в TCE модели по равновесной функции распределения при фиксированной полной энергии столкновения E_C и константе скорости реакции вида (5) приводит к следующему выражению для вероятности P_{TCE} бинарной реакции [40]:

$$P_{TCE} = B \left(1 - \frac{E_d}{E_C} \right)^{n+\xi/2+1/2} E_C^{\omega_{ij}+n-1} \theta(E_C - E_d) \quad (6)$$

$$B = \frac{A \Gamma(\xi/2 + 5/2 - \omega_{ij})}{\Gamma(n + \xi/2 + 3/2) \pi (d_{ij}^{ref})^2 k^n} \sqrt{\frac{m_{ij}}{8\pi}} (kT_{ref})^{1/2-\omega_{ij}}$$

Здесь E_C – суммарная энергия столкновения двух частиц с учетом всех внутренних степеней свободы; ξ – суммарное количество степеней свободы; θ – функция Хэвисайда. Если столкновение привело к диссоциации в соответствии с вероятностью P_{TCE} , описываемой выражением (6), производится столкновение молекулы с частицей по обычным правилам с перераспределением энергии в соответствии с методом Боргнакке–Ларсена [49]. При этом из полной энергии столкновения вычитается энергия реакции. После столкновения проводится процедура разделения молекулы на два атома в случае диссоциации или изменение сортов сталкивающихся частиц в случае обменной реакции. Рекомбинация моделируется двумя последовательными бинарными столкновениями с образованием промежуточной возбужденной молекулы.

Кинетический механизм химических реакций, использованный в настоящей работе для расчета спектральных характеристик высокотемпературной смеси $\text{CO}_2\text{--N}_2$, разработан на основании рекомендаций [48] с дополнениями и уточнениями, предложенными в обзоре [50]. Полная схема механизма с соответствующими параметрами констант скоростей реакций приведена в [47]. Рассматриваются реакции с участием как нейтральных, так и заряженных частиц. Константы скоростей реакций получены для основного уровня атомов и молекул, однако они применяются также и для возбужденных уровней. При этом энергия реакции поправляется на энергию возбуждения участвующих частиц. Образование заряженных частиц описывается набором реакций ассоциативной и ударной ионизации. При этом электроны являются единственной отрицательно заряженной частицей. Следует отметить, что заметный вклад в концентрацию электронов в области за фронтом ударной волны могут вносить электроны, образовавшиеся перед ударной волной за счет фотоионизации молекул газа жестким излучением ударно нагретого газа [51]. Данный процесс до настоящего времени плохо изучен и в расчетах не учитывается.

При высокой температуре газовой среды начинают возбуждаться электронные уровни атомов и молекул. При электронных переходах меняются параметры молекул, поэтому возбужденная и невозбужденная молекулы рассматриваются как разные частицы. Возбуждение атомов и молекул за счет их столкновений с электронами является доминирующим механизмом в значительной части ионизационного процесса. Вероятность изменения электронного состояния m при этом можно оценить с помощью выражения $P_m = \sum_n \sigma_{m \rightarrow n}(E)/\sigma(E)$, где $\sigma_{m \rightarrow n}$ – сечение перехода с уровня m на уровень n , E – кинетическая энергия налетающего электрона или поступательная энергия относительного движения тяжелых частиц, σ – сечение упругого столкновения. В приближении Борна аппроксимация сечения $\sigma_{m \rightarrow n}$ при $n > m$ (возбуждение) имеет вид [25]:

$$\sigma_{m \rightarrow n}(E) = \frac{\pi a_0^2}{4} \left(\frac{d}{a_0} \right)^2 f \frac{(E_n - E_m)}{(E + E_m)} \ln \left(\frac{(E + E_m)}{(E_n - E_m)} \right) \frac{(E + E_m - E_n)}{E} \frac{g_n}{g_m} \theta(E + E_m - E_n) \quad (7)$$

Здесь d – параметр модели ($d \sim a_0$, где $a_0 = 0.529 \text{ \AA}$ – радиус первой боровской орбиты); $f = \max(f_{mn}, 10^{-4})$ – сила осциллятора возбуждения в переходе $m \rightarrow n$; E_n и E_m – энергии электронных уровней n и m ; θ – функция Хэвисайда, g_n и g_m – кратности вырождения уровней n и m . При $n < m$ (тушение) соответствующее выражение для $\sigma_{m \rightarrow n}$ записывается в виде:

$$\sigma_{m \rightarrow n}(E) = \frac{\pi a_0^2}{4} \left(\frac{d}{a_0} \right)^2 f \frac{(E_m - E_n)}{(E + E_m)} \ln \left(\frac{(E + E_m)}{(E_m - E_n)} \right) \frac{(E + E_m - E_n)}{E} \frac{g_n}{g_m}$$

На рис. 1 в качестве примера приведено сравнение сечения возбуждения молекулы CO электронным ударом из основного состояния $X^1\Sigma^+$ в электронно-возбужденное состояние $A^1\Pi$, вычисленного по выражению (7), с имеющимися теоретическими оценками [52, 53] и данными измерений [54, 55]. Видно, что приближение Борна вполне адекватно описывает зависимость сечения возбуждения от энергии электрона E .

Моделирование излучения, возникающего за счет дискретного перехода возбужденной частицы с верхнего уровня n на нижний уровень m , проводится с использованием коэффициентов Эйнштейна. В общем случае рассматриваются процессы спонтанного излучения, индуцированного излучения и поглощения. Ввиду большого времени работы программы при моделировании излучения в ударных волнах индуцированное излучение и поглощение не учитывались, т.е. использовалось приближение высвечивания.

Объемная мощность излучения, испускаемого частицами определенного сорта при переходе $n \rightarrow m$, в общем случае определяется выражением [23]

$$dE_{nm}/dt = \int_{4\pi} [x_n A_{nm} + I_{v,nm}(x_n B_{nm} - x_m B_{mn})] h\nu_{nm} d\Omega \quad (8)$$

где x_n и x_m – заселенности соответствующих уровней; A_{nm} – вероятность перехода (коэффициент Эйнштейна) для спонтанного излучения; $I_{v,nm}$ – спектральная интенсивность излучения с частотой ν_{nm} ; B_{nm} – вероятность перехода для индуцированного излучения; B_{mn} – коэффициент Эйн-

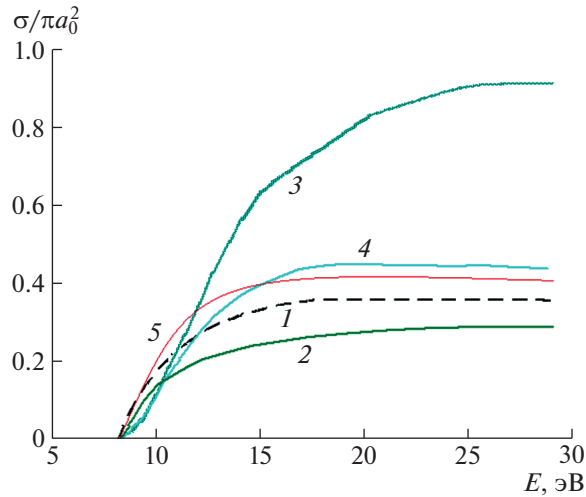


Рис. 1. Сечение возбуждения молекулы СО электронным ударом при переходе $X^1\Sigma^+ \rightarrow A^1\Pi$: 1 – расчет по формуле (7); 2 – расчет методом функции подобия [52]; 3 – расчет вариационным методом Швингера [53]; 4 и 5 – экспериментальные данные [54] и [55] соответственно.

штейна для поглощения; h – постоянная Планка; $d\Omega$ – элемент телесного угла. Коэффициенты Эйнштейна, входящие в выражение (8), связаны друг с другом следующими соотношениями:

$$A_{nm} = \frac{g_m}{g_n} B_{mn} \frac{8\pi h \nu_{nm}^3}{c^3}, \quad g_n B_{nm} = g_m B_{mn}$$

Здесь g_n – статистический вес n -го уровня; c – скорость света.

Наряду с вероятностями переходов A_{nm} , B_{nm} и B_{mn} часто используются безразмерные величины – силы осцилляторов f_{nm} , которые пропорциональны вероятностям переходов. В частности, имеет место соотношение

$$f_{nm} = \frac{m_e c^3}{8\pi^2 e^2 \nu_{nm}^2} A_{nm}$$

Здесь m_e и e – масса и заряд электрона. При расчете радиационных характеристик ударно нагретого газа силы осцилляторов f_{nm} для атомов взяты из базы данных NIST [56]. Уширение отдельных линий оценивалось с помощью теории уширения атомарных линий [28].

Параметрами, характеризующими двухатомную молекулу, являются номер ее колебательного уровня V , вращательное квантовое число J , проекция момента количества движения на межъядерную ось молекулы Λ и полный спин электронов молекулы S . Отдельная линия молекулы представляет собой переход между двумя состояниями, в каждом из которых фиксированы S , Λ , V и J . Многочисленные молекулярные линии перекрывают друг друга, образуя полосы.

Переходы в двухатомных молекулах, которые учитывались в расчетах, приведены в табл. 1. В предположении независимости электронного, колебательного и вращательного движения молекулы, силы осцилляторов молекул можно представить в виде

$$f(S_n, \Lambda_n, V_n, J_n \rightarrow S_m, \Lambda_m, V_m, J_m) = f_0(S_n, \Lambda_n, V_n \rightarrow S_m, \Lambda_m, V_m) S_{J_n J_m}$$

Здесь $S_{J_n J_m}$ – факторы Хёндля–Лондона, формулы, для вычисления которых можно найти в [57]. Для вращательного перехода $J_n \rightarrow J_m$ новый уровень J_m выбирается случайным образом в соответствии с общей концепцией метода Монте-Карло и с учетом правил отбора. Число учитываемых вращательных уровней зависит от типа и электронного состояния молекулы и меняется в интервале от 20 до 300 [58].

Силы осцилляторов f_0 для системы полос основных молекулярных компонентов взяты из [24]. На рис. 2 в качестве примера показаны величины f_0 для третьей и четвертой положительной системы полос молекулы СО, которые характеризуют интенсивность и спектральный диапазон излучения данных полос. Фоновое излучение включает в себя тормозное излучение, которое оце-

Таблица 1. Системы полос молекулярных компонентов, учитываемые в вычислениях

Молекула	Система полос	Переход	Спектральный диапазон, нм
N ₂	1-я положительная	$B^3\Pi_g \rightarrow A^3\Sigma_u^+$	500–1100
	2-я положительная	$C^3\Pi_u \rightarrow B^3\Pi_g$	250–450
	Birge-Hopfield I	$b^1\Pi_u \rightarrow X^1\Sigma_g^+$	98–132
	Birge-Hopfield II	$b^1\Sigma_u^+ \rightarrow X^1\Sigma_g^+$	83–180
	1-я отрицательная	$B^1\Sigma_u^- \rightarrow X^2\Sigma_g^+$	250–600
NO	ϵ	$D^2\Sigma^+ \rightarrow X^2\Pi$	166–350
	δ	$C^2\Pi_r \rightarrow X^2\Pi$	160–570
	β	$B^2\Pi_r \rightarrow X^2\Pi$	170–450
	γ	$A^2\Sigma^+ \rightarrow X^2\Pi$	160–500
O ₂	Schumann-Runge	$B^3\Sigma_u^- \rightarrow X^3\Sigma_g^-$	200–400
C ₂	Swan	$d^3\Pi_g \rightarrow a^3\Pi_u$	400–600
CN	Фиолетовая	$B^2\Sigma^+ \rightarrow X^2\Sigma^+$	340–450
	Красная	$A^2\Pi_i \rightarrow X^2\Sigma^+$	580–1450
	Le Blanc	$B^2\Sigma^+ \rightarrow A^2\Pi_i$	400–600
CO	3-я положительная	$b^3\Sigma^+ \rightarrow a^3\Pi$	200–400
	4-я положительная	$A^1\Pi \rightarrow X^1\Sigma^+$	125–240

нивалось по формуле Крамера [59] и фото-рекомбинационное излучение электронов, сечения для которого взяты из базы данных TOPbase [60].

2. РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Моделирование радиационных характеристик смеси CO₂–N₂ за фронтом сильной ударной волны выполнялось для двух вариантов состава смеси: 70%CO₂ + 30%N₂ и 96%CO₂ + 4%N₂. Они были использованы при приведении экспериментов на детонационной ударной трубе DDST-M

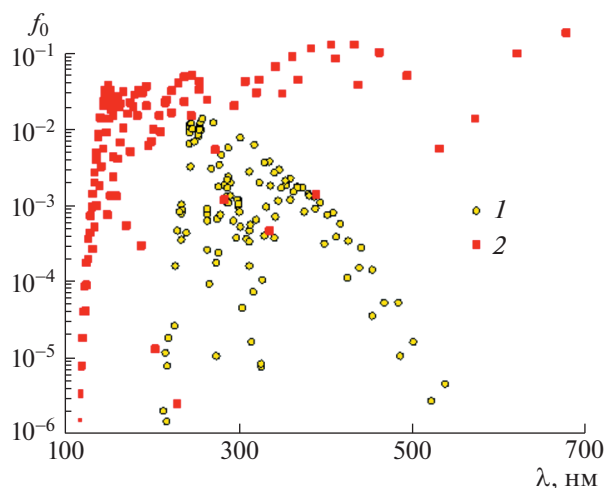


Рис. 2. Силы осцилляторов для систем полос: 1 – CO(3+) и 2 – CO(4+).

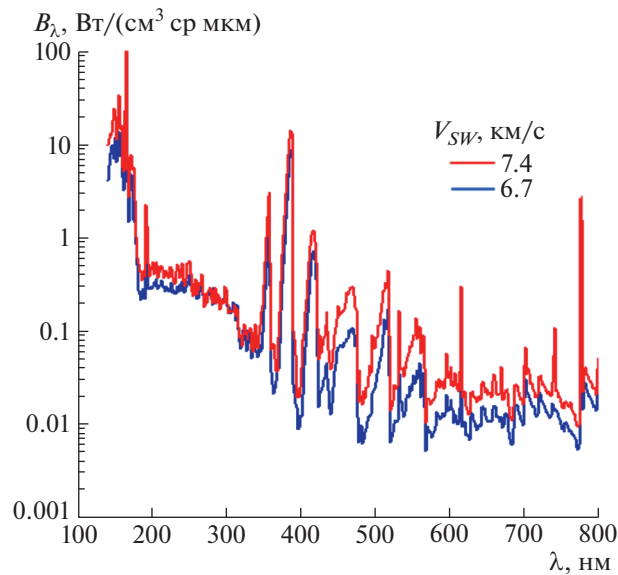


Рис. 3. Вычисленные спектрограммы излучения смеси 70%CO₂+30%N₂ при начальном давлении $p_0 = 0.33$ Торр и скоростях ударной волны $V_{SW} = 6.7$ и 7.4 км/с.

Института механики МГУ [18] и электро-разрядной ударной установке EAST Исследовательского центра NASA Ames [8] соответственно. Первый состав отличается от состава атмосфер Марса и Венеры большим содержанием молекулярного азота и полученные на его основе расчеты могут служить лишь для оценки интенсивности излучения, возникающего при спуске космического аппарата в атмосферах этих планет. Расчеты проведены при различных скоростях V_{SW} ударной волны и давлениях p_0 в невозмущенном потоке перед ударной волной.

На рис. 3 приведены спектрограммы объемной мощности излучения B_λ (панорамные спектры), рассчитанные для первого варианта состава смеси при скоростях ударной волны $V_{SW} = 6.7$ и 7.4 км/с и начальном давлении $p_0 = 0.33$ Торр. Исследованный диапазон длин волн излучения включает вакуумно-ультрафиолетовую (VUV), ультрафиолетовую (UV) и видимую (VIS) спектральные области. Видно, что при увеличении скорости V_{SW} мощность излучения растет. Этот рост особенно заметен в VUV области, где при $V_{SW} = 7.4$ км/с появляются интенсивные линии атома углерода на длинах волн $\lambda = 156.1$, 165.8 и 195.5 нм, а также в VIS области, где наблюдается резкий всплеск излучения мультиплетов атома кислорода на длинах волн $\lambda = 616$ и 777 нм.

Парциальный вклад молекулярных полос и атомарных линий в спектрограмму излучения смеси 70%CO₂ + 30%N₂ при скорости ударной волны $V_{SW} = 6.7$ км/с и давлении перед ударной волной $p_0 = 0.33$ Торр приведен на рис. 4. Видно, что в VUV спектральном диапазоне ($\lambda = 120$ –200 нм) наряду с линиями атома углерода наблюдается интенсивное излучение третьей положительной системы полос молекулы CO. В спектральном диапазоне $\lambda = 190$ –300 нм, относящемся к UV области излучения, регистрируется в основном система полос Шумана-Рунге молекулярного кислорода, которая возникает за счет электронного перехода $B^3\Sigma_u^- \rightarrow X^3\Sigma_g^-$. Значительный вклад в излучение в этом диапазоне вносит также система полос β , γ и δ молекулы NO, а также четвертая положительная система молекулы CO. Молекулярные полосы излучения играют основную роль и в VIS спектральной области. В первую очередь это относится к фиолетовой и красной системе полос цианистого радикала CN и системе полос Свана молекулы C₂. Следует отметить, что ионы при рассматриваемых скоростях ударной волны не вносят заметного вклада в излучение.

На рис. 5 проводится сравнение спектрограммы объемной мощности излучения B_λ , вычисленной в настоящей работе с помощью метода DSMC, с соответствующей спектрограммой, измеренной на ударной трубе DDST-M [18] и спектрограммой, вычисленной с помощью CR модели [61]. Все спектральные кривые получены для смеси 70%CO₂ + 30%N₂ при $V_{SW} = 6.7$ км/с и $p_0 = 0.33$ Торр. Видно, что в общих чертах спектрограммы повторяют друг друга. Данные расчета

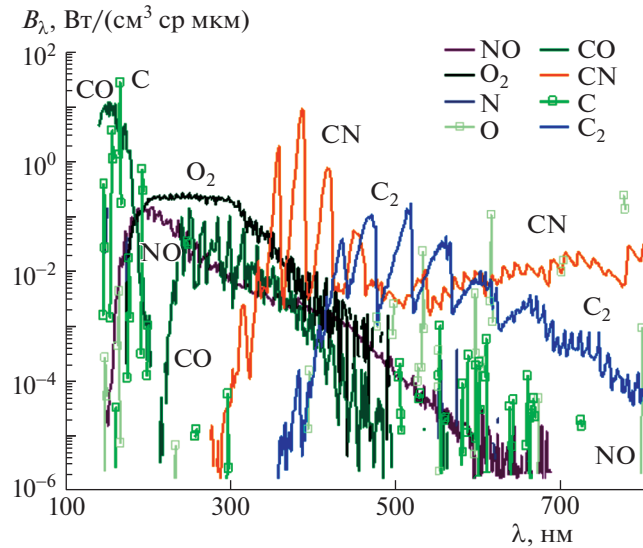


Рис. 4. Вклад различных компонентов в излучение ударно нагретой смеси 70%CO₂+30%N₂ при $V_{SW} = 6.7$ км/с и $p_0 = 0.33$ Торр.

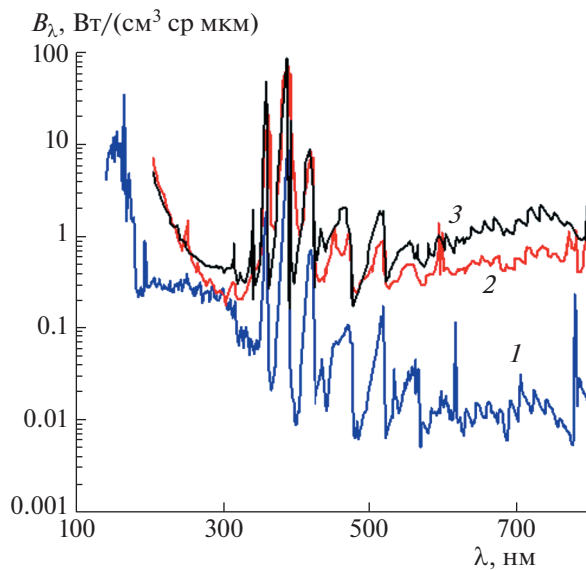


Рис. 5. Сравнение спектрограмм излучения смеси 70%CO₂ + 30%N₂ при $V_{SW} = 6.7$ км/с и $p_0 = 0.33$ Торр, полученных с помощью: 1 – расчета методом DSMC (настоящая работа); 2 – измерений на ударной трубе DDST-M [18]; 3 – расчета по CR модели [49].

объемной мощности излучения, полученные в настоящей работе, лежат значительно ниже экспериментальных данных, особенно в VIS спектральной области. Расчет по CR модели более точно воспроизводит экспериментальную спектрограмму.

На рис. 6 спектрограмма объемной мощности излучения B_λ вычислена в настоящей работе при $V_{SW} = 5.2$ км/с и $p_0 = 1$ Торр. Она сравнивается с экспериментально измеренной спектральной кривой [18] и результатами расчета по CR модели [61] при той же скорости ударной волны и начальном давлении. Видно, что результаты DSMC моделирования в UV области излучения не сильно отличаются от приведенных экспериментальных данных. С другой стороны, в VIS спектральном диапазоне расчетная кривая лежит значительно ниже экспериментальной. Сравнение с результатами, приведенными на рис. 5, показывает, что наблюдается резкое уменьшение мощ-

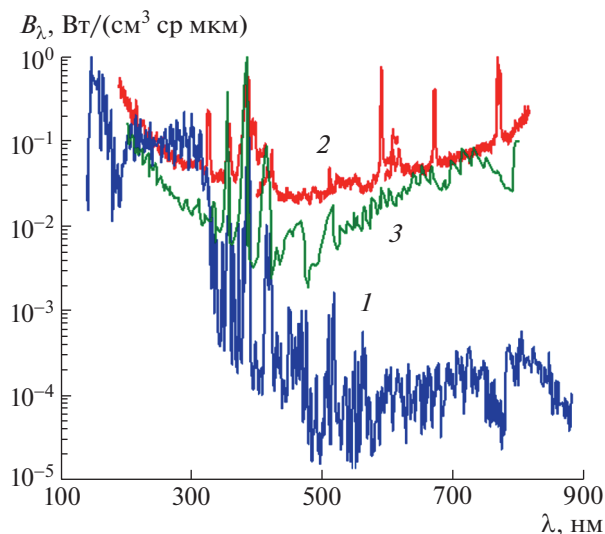


Рис. 6. Сравнение спектрограмм излучения смеси 70%CO₂ + 30%N₂ при $V_{sw} = 5.2$ км/с и $p_0 = 1$ Торр, полученных с помощью: 1 – расчета методом DSMC (настоящая работа); 2 – измерений на ударной трубе DDST-M [18]; 3 – расчета по CR модели [49].

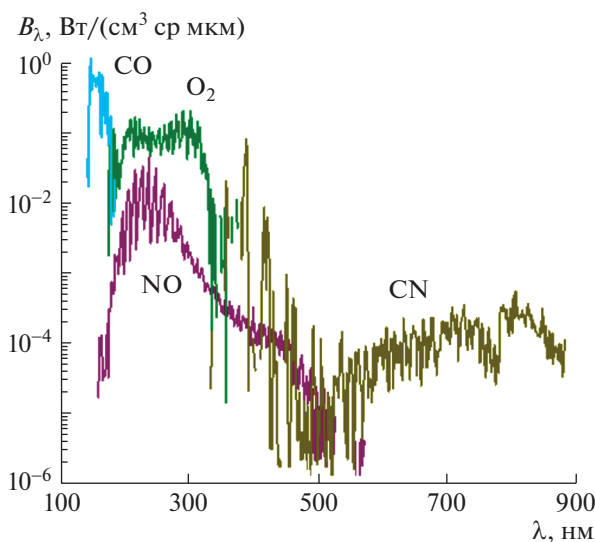


Рис. 7. Вклад различных компонентов в излучение в ударно нагретой смеси 70%CO₂ + 30%N₂ при $V_{sw} = 5.2$ км/с и $p_0 = 1$ Торр.

ности излучения B_λ во всем спектральном диапазоне при уменьшении скорости ударной волны с 6.7 до 5.2 км/с. При этом начальное давление увеличивается с 0.33 до 1 Торр.

Следует отметить, что на экспериментальной спектральной кривой в VIS диапазоне ($\lambda = 450$ –850 нм) наблюдаются только фоновое излучение и линии излучения щелочных металлов, таких как Na ($\lambda = 589$ нм), Li ($\lambda = 671$ нм) и K ($\lambda = 766$ –769 нм) [18]. Появление атомарных линий Na, Li, и K вызвано присутствием этих элементов в кварцевом стекле, из которого сделаны окна наблюдения. Именно в этом диапазоне, как видно из рис. 6, вычисленная спектрограмма сильно отличается от экспериментальной. Парциальный вклад молекулярных полос и атомарных линий в спектрограмму излучения рассматриваемой смеси при $V_{sw} = 5.2$ км/с и $p_0 = 1$ Торр показан на рис. 7. Видно, что интенсивность излучения молекулярных полос в рассматриваемом диапазоне очень низкая. Отсюда можно сделать вывод, что при DSMC моделировании недостаточно корректно учитывается фоновое излучение. Это является причиной большого различия между вы-

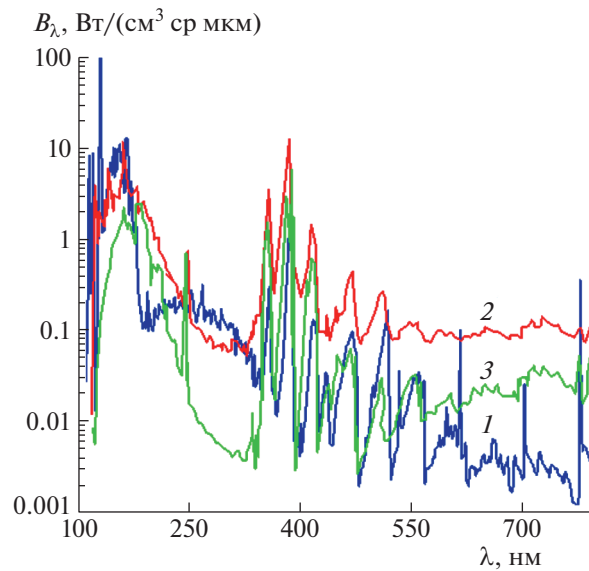


Рис. 8. Сравнение спектрограмм излучения смеси 96%CO₂ + 4%N₂ при $V_{sw} = 6.8$ км/с и $p_0 = 0.25$ Торр, полученных с помощью: 1 – расчета методом DSMC (настоящая работа); 2 – измерений на ударной трубе EAST [8]; 3 – расчета по модели NEQAIR [29].

численной и измеренной спектральными кривыми. Похожая проблема существует при описании результатов измерения на ударной трубе EAST. Здесь фоновое излучение, наблюдаемое в эксперименте, также значительно превосходит расчетные значения, полученные с помощью вычислительной процедуры NEQAIR [62].

Эксперименты на электро-разрядной ударной установке EAST Исследовательского центра NASA Ames [8] проводились для смеси, имеющей состав 96%CO₂+4%N₂, который совпадает с составом атмосфер Марса и Венеры. На рис. 8 проводится сравнение спектральной кривой, вычисленной в настоящей работе при $V_{sw} = 6.8$ км/с и $p_0 = 0.25$ Торр для данного состава смеси, с соответствующей спектральной кривой, полученной на EAST, а также вычисленной с помощью спектральной модели NEQAIR [29]. Видно, что в VUV спектральной области, которая вносит значительный вклад в суммарную интенсивность излучения. Данные DSMC расчета достаточно хорошо согласуются с экспериментальной кривой и лежат несколько выше расчета по NEQAIR модели. В спектральном диапазоне длин волн $\lambda > 250$ нм расчетная спектральная кривая в общих чертах повторяет экспериментальную кривую, но лучше согласуется со спектральной кривой, полученной с помощью расчета по NEQAIR модели. Как и в предыдущем случае, более высокие экспериментальные значения величины B_λ могут свидетельствовать о недостаточно корректном учете фонового излучения в расчетных моделях.

Как уже отмечалось выше, фотоионизация молекул газа перед фронтом ударной волны жестким излучением ударно нагретого газа может заметно увеличить начальную электронную концентрацию за ударным фронтом [51]. Это, в свою очередь, ведет к увеличению скорости возбуждения электронных уровней атомов и молекул электронным ударом и, соответственно, к повышению их излучательной способности. Так как данный процесс не учитывался в рассматриваемой модели, расчетная спектрограмма должна быть несколько ниже экспериментальной.

Значительное влияние на рассчитываемую величину излучательной способности ударно нагретого газа могут оказывать погрешности при определении кинетических и спектроскопических параметров газа. В первую очередь это относится к значениям констант скоростей химических реакций, которые могут иметь разброс в несколько порядков. Как показано в [61], варьирование параметров констант скоростей некоторых ключевых химических реакций может заметно улучшить согласие между расчетными и экспериментальными спектральными кривыми. Аналогичная ситуация наблюдается при определении сечений возбуждения электронных уровней молекул газа. Имеющаяся информация относится, как правило, к переходам из основного электронного состояния молекул при их столкновениях с электронами. С другой стороны, база данных по силам осцилляторов также является далеко не полной [63]. Отсутствие же в вычислительной мо-

дели полного набора спектроскопических параметров ведет к снижению расчетной эффективности излучения по сравнению с экспериментальной.

Следует также отметить, что методики регистрации излучения на ударных установках DDST-M и EAST отличаются друг от друга. На первой установке измеряется объемная плотность энергии излучения I_λ в определенном измерительном сечении, которая затем пересчитывается на объемную мощность излучения B_λ с использованием значений эффективного времени излучения Δt , зависящих от длины волны излучения [64]. На второй установке используется так называемая 3D спектроскопия изображения, которая позволяет сразу измерять величину B_λ [65]. Сравнение результатов измерения объемной мощности излучения с помощью этих методик показывает, что данные, полученные на ударной трубе DDST-M, как правило, превышают данные, полученные на установке EAST. Этим можно объяснить тот факт, что результаты настоящего расчета лучше согласуются с экспериментальными данными EAST, чем с данными измерений, проведенных на ударной трубе DDST-M. Это хорошо видно при сопоставлении спектральных кривых, приведенных на рис. 5 и 8.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Построена математическая модель для численного исследования излучения за фронтом сильной ударной волны в газовой смеси $\text{CO}_2\text{--N}_2$, которая основана на методе прямого статистического моделирования Монте-Карло. Моделирование радиационных характеристик смеси $\text{CO}_2\text{--N}_2$ за фронтом сильной ударной волны выполнено для двух вариантов состава смеси: $70\%\text{CO}_2 + 30\%\text{N}_2$ и $96\%\text{CO}_2 + 4\%\text{N}_2$, которые были использованы при приведении экспериментов на детонационной ударной трубе DDST-M Института механики МГУ и электро-разрядной ударной установке EAST Исследовательского центра NASA Ames соответственно.

Показано, что при увеличении скорости ударной волны V_{SW} мощность излучения растет. Этот рост особенно заметен в вакуумно-ультрафиолетовой области, где при $V_{SW} = 7.4$ км/с появляются интенсивные линии атома углерода на длинах волн $\lambda = 156.1, 165.8$ и 195.5 нм. Схожий эффект просматривается также в видимой области, где наблюдается резкий всплеск излучения мультиметов атома кислорода на длинах волн $\lambda = 616$ и 777 нм.

Проведено сравнение рассчитанных спектрограмм объемной мощности излучения B_λ с соответствующими спектрограммами, измеренными на ударных трубах, а также вычисленными с помощью столкновительно-радиационной модели и спектральной модели NEQAIR. Показано, что в общих чертах все спектрограммы повторяют друг друга. Тем не менее данные расчета, полученные в настоящей работе, лежат значительно ниже экспериментальных данных. Обсуждаются причины данного разногласия.

Из анализа полученных результатов ясно, что необходима дальнейшая работа по модернизации предложенной модели как с точки зрения усовершенствования ее составляющих, так и с точки зрения расширения и уточнения используемых баз данных.

Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации “Экспериментальное и теоретическое исследование кинетических процессов в газах” (номер гос. регистрации AAAA-A19-119012990112-4).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Braun M., Bruce P., Levis E. Strategies to utilize advanced heat shield technology for high-payload Mars atmospheric entry missions // *Acta Astronaut.* 2017. V. 136. P. 22–33.
2. Суржиков С.Т., Яцухно Д.С. // Анализ летных данных по конвективному и радиационному нагреву поверхности спускаемого марсианского космического аппарата SCHIAPARELLI // *Изв. РАН. МЖГ.* 2022. № 6. С. 73–84.
3. Суржиков С.Т. Радиационно-конвективный теплообмен космического аппарата сферической формы // *ТВТ.* 2011. Т. 49. № 1. С. 92–107.
4. Reyner P. Survey of CO_2 radiation experimental data in relation with planetary entry // *Galaxies.* 2021. V. 9. № 15. 41 p.
5. Gu S., Olivier H. Capabilities and limitations of existing hypersonic facilities // *Prog. Aerospace Sci.* 2020. V. 113. № 100607. 27 p.
6. Bose D., Grinstead J.H., Bogdanoff D.W., Wright M.J. Shock layer radiation measurements and analysis for Mars entry // *Proc. 3rd Int. Workshop on Radiation of High Temperature Gases in Atmospheric Entry.* 2008. ESA SP-667. Heraklion, Greece.

7. *Grinstead J.H., Wright M.J., Bogdanoff D.W., Allen G.A.* Shock radiation measurements for mars aerocapture radiative heating analysis // J. Thermophys. Heat Transfer. 2009. V. 23. P. 249–255.
8. *Cruden B.A., Prabhu D., Martinez R., Le H., Bose D., Grinstead J.H.* Absolute radiation measurement in Venus and Mars entry conditions // AIAA Paper 2010–4508. 15 p.
9. *Cruden B.A., Prabhu D., Martinez R.* Absolute radiation measurement in Venus and Mars entry conditions // J. Spacecr. Rockets. 2012. V. 49. 1069–1079.
10. *Brandis A.M., Johnston C.O., Cruden B.A., Prabhu D.* Investigation of nonequilibrium radiation for Mars entry // AIAA Paper 2013–1055. 36 p.
11. *Brandis A.M., Johnston C.O., Cruden B.A.* Validation of CO 4th positive radiation for Mars entry // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. 2013. V. 121. P. 91–104.
12. *Cruden B.A.* Absolute radiation measurement in Earth and Mars entry conditions // Von Karman Inst. Lecture Ser. 2014. № STO-AVT-218-VKI.
13. *Johnston C.O., Brandis A.M.* Modeling of nonequilibrium CO Fourth-Positive and CN Violet emission in CO₂–N₂ gases // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. 2014. V. 149. P. 303–317.
14. *Горелов В.А., Киреев А.Ю., Шиленков С.В.* Неравновесное молекулярное излучение за фронтом сильной ударной волны в смеси CO₂–N₂–O₂ // ПМТФ. 2005. Т. 46. № 2. С. 13–22.
15. *Takayanagi H., Lemal A., Nomura S., Fujita K.* Measurements of carbon dioxide nonequilibrium infrared radiation in shocked and expanded flows // J. Thermophys. Heat Transfer. 2018. V. 32. P. 483.
16. *Анохин Е.М., Иванова Т.Ю., Кудрявцев Н.Н., Стариковский А.Ю.* Динамика излучения в смеси CO–N₂ за сильными ударными волнами // ТВТ. 2007. Т. 45. № 6. С. 807–813.
17. *Залогин Г.Н., Козлов П.В., Кузнецова Л.А., Лосев С.А., Макаров В.Н., Романенко Ю.В., Суржиков С.Т.* Излучение смеси CO₂–N₂–Ar в ударных волнах: эксперимент и теория // ЖТФ. 2001. Т. 71. № 6. С. 10–16.
18. *Козлов П.В., Забелинский И.Е., Быкова Н.Г., Герасимов Г.Я., Левашов В.Ю.* Экспериментальное исследование радиационных характеристик смеси CO₂–N₂ за фронтом сильной ударной волны // Хим. физика. 2021. Т. 40. № 12. С. 23–28.
19. *Ступоченко Е.В., Лосев С.А., Осипов А.И.* Релаксационные процессы в ударных волнах. М.: Наука, 1965. 484 с.
20. *Грим Г.* Спектроскопия плазмы. М.: Атомиздат, 1969. 452 с.
21. *Авилова И.В., Биберман Л.М., Воробьев В.С. и др.* Оптические свойства горячего воздуха. М.: Наука, 1970. 320 с.
22. *Каменщиков В.А., Пластинин Ю.А., Николаев В.М. и др.* Радиационные свойства газов при высоких температурах. М.: Машиностроение, 1971. 440 с.
23. *Лохте-Хольтгревен В.* Методы исследования плазмы. Спектроскопия, лазеры, зонды. М.: Мир, 1971. 126 с.
24. *Кузнецова Л.А., Кузьменко Н.Е., Кузяков Ю.Я., Пластинин Ю.А.* Вероятности оптических переходов двухатомных молекул. М.: Наука, 1980. 320 с.
25. *Park C.* Nonequilibrium Hypersonic Aerothermodynamics. New York: Wiley, 1990. 358 p.
26. *Уэйн Р.* Основы и применения фотохимии. М.: Мир, 1991. 304 с.
27. *Ельяшевич М.А.* Атомная и молекулярная спектроскопия. М.: УРСС. 2001. 894 с.
28. *Суржиков С.Т.* Оптические свойства газов и плазмы. М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2004. 575 с.
29. *Whiting E., Park C., Yen L., Arnold J., Paterson J.* NEQAIR96, Nonequilibrium and equilibrium radiative transport and spectra program: user's manual // Tech. Rep. NASA RP-1389. Moffett Field: Ames Research Center, 1996.
30. *Кузнецова Л.А., Суржиков С.Т.* Информационно-вычислительный комплекс MSRT-RADEN. I. Основная модель коэффициентов поглощения // Мат. моделирование. 1998. Т. 36. № 3. С. 15–28.
31. *Johnston C.O., Hollis B.R., Sutton K.* Spectrum modeling for air shock-layer radiation at lunar-return conditions // J. Spacecr. Rockets. 2008. V. 45. P. 865–878.
32. *Kumar N., Bansal A.* Flow and radiation modeling over a Martian entry vehicle // Acta Astronaut. 2023. V. 205. P. 172–184.
33. *Johnston C.O., Hollis B.R., Sutton K.* Non-Boltzmann modeling for air shock-layer radiation at lunar-return conditions // J. Spacecr. Rockets. 2008. V. 45. P. 879–890.
34. *Суржиков С.Т.* Применение квазистационарных eRC-моделей для расчета неравновесного излучения ударных волн при скорости порядка 10 км/с // Физ.-хим. кинет. газ динам. 2022. Т. 23. № 4. 39 с.
35. *Lemal A., Jacobs C.M., Perrin M.-Y., Laux C.O., Tran P., Raynaud E.* Prediction of nonequilibrium air plasma radiation behind a shock wave // J. Thermophys. Heat Trans. 2016. V. 30. P. 197–210.
36. *Karpuzcu I.T., Jouffray M.P., Levin D.A.* Collisional radiative modeling of electronically excited states in a hypersonic flow // J. Thermophys. Heat Transfer. 2022. V. 36. P. 982–1002.
37. *Du Y.W., Sun S.R., Tan M.J., Zhou Y., Chen X., Meng X., Wang H.X.* Non-equilibrium simulation of energy relaxation for earth reentry utilizing a collisional-radiative model // Acta Astronaut. 2022. V. 193. P. 521–537.

38. Zhu T., Li Z., Levin D.A. Modeling of unsteady shock tube flows using direct simulation Monte Carlo // J. Thermophys. Heat Transfer. 2014. V. 28. P. 623–634.
39. Gimelshein S.F., Wysong I.J., Fangman A.J. et al. Kinetic and continuum modeling of high-temperature air relaxation // J. Thermophys. Heat Transfer. 2022. V. 36. P. 870–893.
40. Bird G.A. Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows. Oxford: Clarendon Press, 1994. 458 p.
41. Boyd I.D. Computation of hypersonic flows using the direct simulation Monte Carlo method // AIAA Paper 2013–2557. 33 p.
42. Кусов А.Л. О релаксации вращательной энергии молекул в методе прямого статистического моделирования Монте-Карло // Мат. моделирование. 2017. Т. 29. № 8. С. 95–109.
43. Grover M.S., Schwartzentruber T.E. Internal energy relaxation and dissociation of molecular oxygen using direct molecular simulation // AIAA Paper 2017–3488. 16 p.
44. Wysong I., Gimelshein S. Modeling hypersonic reacting flows using DSMC with the Bias reaction model // AIAA Paper 2017–4025. 15 p.
45. Beyer J., Pfeiffer M., Fasoulas S. Non-equilibrium radiation modeling in a gas kinetic simulation code // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. 2022. V. 280. № 108083. 13 p.
46. Tibère-Inglesse A., Cruden B.A. Analysis of nonequilibrium atomic and molecular nitrogen radiation in pure N₂ shockwaves // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. 2022. V. 280. № 108302. 16 p.
47. Кусов А.Л., Быкова Н.Г., Герасимов Г.Я., Забелинский И.Е., Козлов П.В., Левашов В.Ю. Прямое статистическое моделирование излучения за фронтом ударной волны в смеси CO₂ и N₂ // Физ.-хим. кинет. газ. динам. 2023. Т. 24. № 2. 63 с.
48. Park C., Howe J.T., Jaffe R.L., Candler G.V. Review of chemical-kinetic problems of future NASA missions, II: Mars entries // J. Thermophys. Heat Transfer. 1994. V. 8. P. 9–23.
49. Borgnakke C., Larsen P.S. Statistical collision model for Monte Carlo simulation of polyatomic gas mixture // J. Comput. Phys. 1975. V. 18. P. 405–420.
50. Ibragimova L.B., Shatalov O.P. Non-equilibrium kinetics behind shock waves experimental aspects // High Temperature Phenomena in Shock Waves. Berlin: Springer, 2012. P. 99–147.
51. Nomura S., Kawakami T., Fujita K. Nonequilibrium effects in precursor electrons ahead of shock waves // J. Thermophys. Heat Transfer. 2021. V. 35. P. 518–523.
52. Adamson S., Astapenko V., Deminskii M., Eletskii A., Potapkin B., Sukhanov L., Zaitsevskii A. Electron impact excitation of molecules: Calculation of the cross section using the similarity function method and ab initio data for electronic structure // Chem. Phys. Lett. 2007. V. 436. P. 308–313.
53. Sun Q., Winstead C., McKoy V. Electronic excitation of carbon monoxide by low-energy electron impact // Phys. Rev. A. 1992. V. 46. P. 6987–6994.
54. Mumma M.J., Stone E.J., Zipf E.C. Excitation of the CO Fourth Positive Band System by Electron Impact on Carbon Monoxide and Carbon Dioxide // J. Chem. Phys. 1971. V. 54. P. 2627–2634.
55. Ajello J.M. Emission Cross Sections of CO by Electron Impact in the Interval 1260–5000 Å // J. Chem. Phys. 1971. V. 55. P. 3158–3168.
56. NIST Atomic Spectra Database, Version 5.9. Gaithersburg: NIST, 2021.
57. Кусов А.Л., Быкова Н.Г. Теоретические основы расчета факторов Хёня-Лондона двухатомных молекул // Физ.-хим. кинет. газ. динам. 2022. Т. 23. № 1. 21 с.
58. Гурвич Л.В., Вейц И.В., Медведев В.А и др. Термодинамические свойства индивидуальных веществ. Т. I. Кн. 1. М.: Наука, 1978. 496 с.
59. Зельдович Я.Б., Райзер Ю.П. Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений. М.: Физматлит, 2008. 656 с.
60. Badnell N.R., Bautista M.A., Butler K., Delahaye F., Mendoza C., Palmeri P., Zeippen C.J., Seaton M.J. Updated opacities from the Opacity Project // Mon. Not. R. Astron. Soc. 2005. V. 360. P. 458–464.
61. Дикалюк А.С., Суржиков С.Т. Расчетное исследование модели неравновесного излучения за фронтом ударных волн в марсианской атмосфере // Изв. РАН. МЖГ. 2013. № 1. С. 141–160.
62. Collen P.L., Doherty L.J., McGilvray M. Measurements of radiating hypervelocity air shock layers in the T6 free-piston driven shock tube // Intern. Conf. FAR–2019. 2019. № 1053360.
63. Qin Z., Zhao J.M., Liu L.H. Radiative transition probabilities for the main diatomic electronic systems of N₂, N₂⁺, NO, O₂, CO, CO⁺, CN, C₂ and H₂ produced in plasma of atmospheric entry // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. 2017. V. 202. P. 286–301.
64. Козлов П.В., Забелинский И.Е., Быкова Н.Г., Герасимов Г.Я., Левашов В.Ю. Экспериментальное исследование излучательных характеристик ударно-нагретого воздуха в ультрафиолетовой и видимой областях спектра // Изв. РАН. МЖГ. 2022. № 6. С. 85–93.
65. Greenberg R.B., Cruden B.A., Grinstead J.H., Yeung D. Collection optics for imaging spectroscopy of an electric arc shock tube // Proc. SPIE 7429, Novel Optical Systems Design and Optimization XII. 2009. № 74290H.