

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 26 年 5 月 20 日現在

機関番号：11301

研究種目：若手研究(B)

研究期間：2012～2013

課題番号：24760657

研究課題名(和文) 衝突輻射過程を考慮した非平衡プラズマ流の統合解析コード開発とその応用

研究課題名(英文) Integrated code development of nonequilibrium plasma flow with collisional-radiative processes and its application

研究代表者

荻野 要介(Ogino, Yousuke)

東北大学・工学(系)研究科(研究院)・助教

研究者番号：90586463

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,500,000円、(間接経費) 1,050,000円

研究成果の概要(和文)：地球大気組成種の非平衡原子・分子過程と高エンタルピー流の結合計算コードの開発を行った。本計算コードでは、プラズマ内部の原子・分子励起状態間の遷移過程を直接解くことで非平衡状態分布を計算する。このようなマルチスケールな計算手法は、局所的に非平衡な原子・分子過程を伴う非定常プラズマの大域的な運動を記述することができる。本計算コードを大気圏突入問題へ適用し、既存コードや計測データとの詳細な比較検討を行った結果をまとめ、学術誌へ投稿した。

研究成果の概要(英文)：An integrated code of air nonequilibrium plasma flow with atomic and molecular processes has been developed. Nonequilibrium state distributions inside an air plasma are directly calculated by solving the transition processes among the atomic and molecular excitation states. Such a multi-scale numerical approach can accurately describe the unsteady plasma fluid motions with the local nonequilibrium properties. The developed code was applied to an atmospheric entry problem, and the results were compared and validated with the existing code and measured data.

研究分野：工学

科研費の分科・細目：総合工学・航空宇宙工学

キーワード：非平衡流解析

1. 研究開始当初の背景

これまで、大気圏突入物体まわにおける高温衝撃層内の流れ場や、ビーム生成プラズマ流れ場といった高エンタルピー流に関する数値解析を行ってきた。これらの流れ場では、原子・分子ばかりでなく、イオン、電子そして光子が混在した系となり、流体要素内部は平衡に達しない場合が多い。分子の回転・振動運動や電離、解離などの化学反応による熱化学非平衡、励起状態分布の非 Boltzmann 分布化、それらに伴う輻射過程の非平衡性は、流動や拡散などの巨視的ダイナミクスをも変化させ得る。このような非平衡複合系の流れ場の解明とその理解を深めることは、基礎的な物理過程と工学応用とを結びつける非常に重要な研究である。

2. 研究の目的

本研究の目的は、非平衡原子・分子過程と流れ場の統合数値計算コードの開発である。従来の熱化学非平衡流体解析では、励起状態分布を Boltzmann 平衡分布関数によって平均化するが、本手法では流体要素内部に自由度を導入し、励起状態ごとの保存則を解くことで状態分布を決定する。このようなマルチスケールな計算手法は、局所的に非平衡な原子・分子過程を伴う非定常プラズマの大域的な運動を記述する。そのため大気圏突入物体まわりの極超音速流れだけでなく、レーザーやマイクロ波を利用した推進技術、大気圧グローやストリーマ放電に代表される大気圧非平衡プラズマなど多くの先進的な応用技術に対しても適用可能であり、従来法よりも格段に正確な数値解析が可能である。現在、欧米各国においても、大気圏突入問題を想定した原子・分子過程の非平衡数値計算コードが NASA や ESA 系の研究チームによって開発が進められているが、それらの実験データはもちろん、計算コードも一般公開されていない。我々日本の多くの研究者にとってはブラックボックスと化しており、同等の結果を得ることができる計算コードはまだない。こういった日本の現状を打破し、プラズマ流れ場の実験、数値解析を更なる高みへと引き上げる礎を築くために、非平衡プラズマ解析コードの開発が急務である。

3. 研究の方法

(1) 原子・分子過程計算コードの概要

空気プラズマ内部の原子・分子励起状態間の遷移レート方程式計算コードを開発する。特筆すべきは、要素内部の状態分布に対して、Boltzmann 平衡を仮定しない点である。本計算コードは、空気プラズマ内部の原子・分子励起状態間の遷移過程を直接解き、非平衡状態分布を計算する。考慮した遷移過程は、電子・原子・分子間衝突による励起、電離、解離過程、重粒子間衝突による化学反応、輻射の放出・吸収過程である。適用可能な温度域を 300K から 40,000K、密度域を

$10^{12}/\text{cm}^3$ から $10^{19}/\text{cm}^3$ とし、真空紫外から近赤外までの主要な発光スペクトルを解析できるように、各化学種の電子励起状態を選定した。数万本以上に及び全ての輝線と連続波長スペクトルに対して、発光源となった原子や分子化学種の励起状態と、その占有数密度までを特定することができる。得られた状態分布から、Boltzmann 分布による平均化を施さずに、化学組成や状態方程式、輻射放出・吸収率などの巨視的物理量を計算し、流れ場の保存量にフィードバックさせることができる。つまり、通常無視されているプラズマ内部状態の寄与を考慮した実在気体の物性を評価することができる。また、本計算手法による研究結果から、特に化学反応生成率と輻射熱放出・吸収率は数 10%以上もの増減を示すことが分かっており、これらの影響を流れ場に考慮することで、対流や拡散といった大域的な流体運動との相互関係を解析できるようになる。従来の熱化学非平衡流体解析では評価することが出来なかった、状態分布の非平衡性による流れ場への影響を明確に見積もることができる。

(2) 流れ場との結合計算コード開発

図 1 に原子・分子過程を考慮したプラズマ流れ場の物理モデルの概念図を示す。遷移レート方程式から得られた各化学種組成と励起状態分布から分配関数を求めることで、プラズマの内部状態を直接評価できる。流体の情報伝搬速度である音速や、粘性や熱伝導などの輸送係数、質量・運動量・エネルギー間の構成方程式となる状態方程式、そして温度と内部エネルギーを関連付ける定積比熱をより正確に評価することが可能である。また、状態分布の算出にあたって用いた量子力学的な物理量を共有することで、整合性のとれた輻射熱放出・吸収率と化学反応速度定数を算出できる。

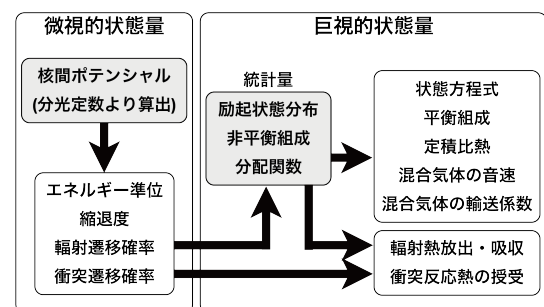


図 1: プラズマ流れ場の物理モデル

4. 研究成果

空気プラズマを、窒素分子 76.7%、酸素分子 23.3% の混合気体と仮定し、それらの生成物である、 N_2 , O_2 , NO , N , O , N_2^+ , O_2^+ , NO^+ , N^+ , O^+ , N^{2+} , O^{2+} , O_2^- , O^- , e^- の 15 化学種を考慮し、原子・分子構造データベースの検証と統合を行った。原子化学種のエネルギー準

位と縮退度は、NISTのデータベースを参照した。そのデータ総数は微細構造まで含めて合計 7,000 程度となった。また、分子の量子状態については、分子構造の理論的な解析は非常に困難であるため、分光実験定数の収集を行った。次に、電子励起状態間の遷移反応速度定数の理論的・実験的な経験式について調べ、様々な遷移反応過程を計算コードに組み込んだ。原子化学種の自然放射係数の総数は 8,000 遷移程度をデータベース化した。分子のバンド放射係数の計算に必要な電気双極モーメント関数についても、最新の実験データを参照した。また、電子衝突による励起、電離、解離過程には Drawin の反応断面積を用い、解離性再結合や電荷交換などの重粒子間衝突反応には Park の反応モデルを用いた。衝撃背後の非平衡組成に大きく影響を及ぼす NO 交換反応には Bose & Candler の提案モデルを採用した。構築した衝突輻射モデルを基に、非常常遷移レート方程式の数値計算を行い、得られた計算結果を既存の衝突輻射レート方程式計算コードと比較した。

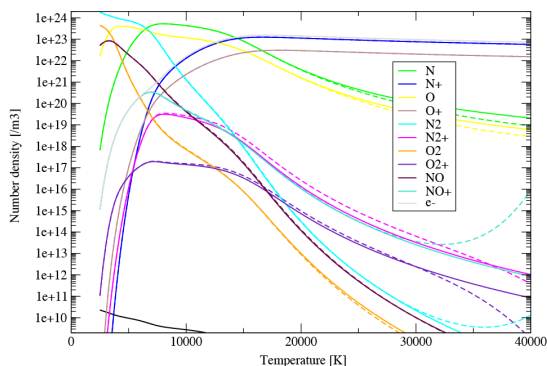


図 2: 衝突輻射平衡モデルより算出した組成分布数密度 (数密度 $10^{18} / \text{cm}^3$)

定常状態に達した際の各化学種の組成分布を数密度 $10^{18} / \text{cm}^3$ 、温度域 $2,000 \text{ K} < T < 40,000 \text{ K}$ に対して計算した結果を図 2 に示す。実線で示したのが本計算による結果である。他方、破線で示した組成分布は NASA-CEA コードに採録されているデータベースにより算出した分布に相応する。両者の差異は、特に温度が 20,000 K 以上において顕著となっていることが確認できる。NASA-CEA コードでは、室温から 20,000 K 以下で実験計測された熱力学諸量を曲線適合し、熱平衡状態にある化学種組成をギブス自由エネルギーが最小となるよう算出する。航空宇宙工学に関連する応用問題に非常に良く使用され、多くの実績を持つ計算コードである。20,000 K を越す高温環境下では、物性値の計測が比較的困難であること、そして公表データが少ないことから NASA-CEA では組成分布を近似曲線によって推算する。そのため、20,000 K 以上の値は近似曲線の外挿に因り、非物理的である。それに対して、我々の計算コー

ドはより高温な環境であっても信頼に足る化学種分布の計算が可能である。

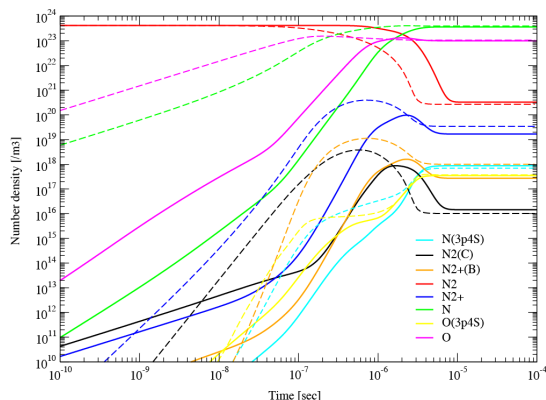


図 3: 励起化学種数密度の時間変化

また、図 3 に励起化学種数密度の時間変化の計算結果を示す。図中に示した化学種は、N 原子の 3p4S 励起状態(準安定状態)、 N_2 分子の C 励起状態(特徴的な輻射バンドの放出源となる励起状態)、 N_2^+ 分子の B 励起状態(特徴的な輻射バンド源)、 N_2 分子の基底状態、 N_2^+ 分子の基底状態、N 原子の基底状態、O 原子の 3p4S 励起状態(準安定状態)、O 原子の基底状態である。実線が既存の計算コードによる結果を、破線が我々の構築した衝突輻射コードによる結果である。地球大気圏への再突入環境を模擬するため、初期状態(主流条件)を、Firell と呼ばれる試験機にて実際に計測が行われた条件と一致させてある。大気圏突入問題の解析テストケースとして非常に良く用いられている条件である。衝撃層内に突入した流体要素に含まれる窒素分子と酸素分子は衝撃加熱によって解離し、各原子種を生成する。ごく初期の N 原子と O 原子数密度の生成量の違いは、解析に用いた解離反応速度定数が二桁程度大きな値を与えているためである。また、解離生成された原子種は会合性電離反応によりイオン種を生成するため、 N_2^+ イオンの数密度が遅れて増加している様を確認できる。解離反応と同様、反応モデルの違いに起因して基底状態、励起状態ともに一桁程度の数密度の差異が生じた。 N_2^+ 分子の B 状態は second negative バンドと呼ばれる特徴的な輻射発光を放出することから、分光実験比較によるモデル検討を行う窓口として有効利用することができる。発光強度は励起種数密度に比例するため、正確にバンド検証を行うことも可能である。加えて、N 原子と O 原子の準安定状態については、同じ衝突励起モデルを採用してはいるものの、時間発展の傾向に違いが見られた。原子ライン輻射遷移モデルの導入に用いたデータベースが異なること、原子種の解離生成量が異なることが主要因である。準安定状態は占有率が基底状態に次いで高く、分配関数や輸送係数、その他の物性に与える寄与が大きい。

流れ場との統合計算コストの削減を行う際にも準安定励起種の存在確率を正確に評価することが非常に重要であることがわかる。

5. 主な発表論文等

(研究代表者, 研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文](計 4 件)

1. Yousuke Ogino, Atsushi Nagano, Tomoaki Ishihara, and Naofumi Ohnishi, "Fitting Formula for Radiative Cooling Based on Non-local Thermodynamic Equilibrium Population from Weakly-ionized Air Plasma," *Journal of Physics: Conference Series*, 査読有, Vol. 454, No. 012080, pp. 1-10, 2013.
doi:10.1088/1742-6596/454/1/012080
2. Naofumi Ohnishi, Masami Tate, and Yousuke Ogino, "Computational Study of Shock Wave Control by Pulse Energy Deposition," *Shock Waves*, 査読有, Vol. 22, issue 6, pp. 521-531, 2012.
doi:10.1007/s00193-012-0407-6
3. Yousuke Ogino, Tomoaki Ishihara, Naofumi Ohnishi, and Keisuke Sawada, "Code Development of Atmospheric Reentry Flow with Atomic and Molecular Processes," Proceedings of the 5th International Workshop on Radiation of High Temperature Gases in Atmospheric Entry, 査読無, ESA Publications Division, ESA SP-714, pp. 1-7, 2012.
4. Yousuke Ogino, Tomoaki Ishihara, Atsushi Nagano, and Naofumi Ohnishi, "Computational Code for Air Plasma Flowfield with Atomic and Molecular Processes," 43rd AIAA Thermophysics Conference, 査読無, AIAA Paper 2012-3308, pp. 1-10, 2012.

[学会発表](計 3 件)

1. Yousuke Ogino, Tomoaki Ishihara, Naofumi Ohnishi, and Keisuke Sawada, "Code Development of Atmospheric Reentry Flow with Atomic and Molecular Processes," 5th International Workshop on Radiation of High Temperature Gases in Atmospheric Entry, Barcelona, Spain, 16th October, 2012.
2. Yousuke Ogino, Tomoaki Ishihara, and Naofumi Ohnishi, "Computational Code of High-Enthalpy Flow Equations with Collisional-Radiative Processes," Conference on Computational Physics, Kobe, Japan, 13th October, 2012.
3. Yousuke Ogino, Tomoaki Ishihara, Atsushi Nagano, and Naofumi Ohnishi,

"Computational Code for Air Plasma Flowfield with Atomic and Molecular Processes," 43rd AIAA Thermophysics Conference, New Orleans, US, 28th June, 2012.

6. 研究組織

(1) 研究代表者

荻野 要介 (OGINO, YOUSUKE)

東北大学・大学院工学研究科・助教

研究者番号：90586463

(2) 研究分担者

()

研究者番号：

(3) 連携研究者

()

研究者番号：