

航天器分子污染计算方法综述

焦子龙

(北京卫星环境工程研究所, 北京 100094)

摘要: 随着对航天器长寿命、高可靠、高性能要求的不断提高, 污染逐渐成为影响任务成功的重要因素之一。数值模拟是评估分子污染的主要手段之一。文章对航天器分子污染计算方法进行了总结, 详细介绍了污染源、污染沉积及效应、污染传输的模型以及计算方法。

关键词: 分子污染; 数值模拟; 放气; 质量传递系数; 光学性能

中图分类号: V524.3; O561.5

文献标识码: A

文章编号: 11673-1379(2010)02-0181-009

DOI: 10.3969/j.issn.1673-1379.2010.02.012

1 引言

随着航天器的发展对长寿命、高可靠、高性能等要求越来越突出, 以前通常忽略的环境因素可能也会影响系统性能甚至导致其失效, 例如污染环境效应。污染是指非要求外来物影响系统、分系统、部件、零件的工作和性能, 继而造成危害和不可忽略的影响。可大致分为分子污染、颗粒污染以及羽流污染。分子污染指分子悬浮在表面附近或沉积于表面造成的污染。本文针对航天器分子污染进行分析和计算。

2 分子污染概述

2.1 污染源分析

有机材料放气是航天器分子污染的主要来源。有关研究人员试验发现^[1-2], 在一般有机材料应用温度范围内, 材料放气的主要产物为水分子。表1列出了放气产物中的大分子污染物^[3]。

表1 典型大分子污染物
Table 1 Typical molecular contaminants

放气产物类别	可能来源	典型/常见污染物
邻苯二甲酸酯	聚酯/聚氨酯	邻苯二甲酸 二乙基己基酯
苯酚	环氧	4-肉桂苯酚 双酚-A
苯并咪唑	聚酰亚胺	n-苯基邻苯 二甲酰亚胺
芳香烃	多种来源	二芳基乙烷 十二氢苯并菲
芳香胺	聚氨酯/环氧	4-十四烷基苯胺
硅酮	硅酮	甲基苯基硅氧烷
烯烃	多种来源	三十碳六烯 A-葎草烯
脂肪烃	多种来源	10-十九烷酮 十四醛

2.2 分子污染影响

分子污染造成的影响是多方面的, 主要包括:

(1) 沉积造成的表面性能退化, 例如影响热控表面的发射率或吸收率, 进而影响卫星表面以及某些光学组件的温度, 降低光学元器件的工作性能, 使太阳能电池输出功率下降, 影响表面电性能如电导率等;

(2) 在航天器内部或周围形成的气体环境导致局部气体密度增高, 高压装置可能会发生电晕放电;

(3) 分子污染物还会与周围环境相互作用, 使污染效应进一步加强, 如紫外辐照会使有机沉积物质变暗, 更顽强地吸附于敏感表面上; 原子氧也会与硅树脂污染物作用, 使它变为永久沉积于敏感表面的硅酸盐层, 造成太阳光吸收率大大增加。

2.3 污染预估的目的及步骤

污染分析及预估的目的在于校核卫星的设计, 为总体部门提供优化设计方案; 将模拟结果作为航天器污染控制的基本依据, 由此制定污染控制计划, 对设计、研制和使用各阶段的污染指标进行分配。

一般污染分析流程如图1所示^[4]。首先需要确认关键的子系统及关键(敏感)表面、污染源; 接着确定需要进行分析的污染传输类型, 如直接流、返回流等, 获得有关数据后, 输入分析软件或模型进行系统分析, 获得污染沉积及其效应的结果; 最后, 将结果与污染控制要求进行比较, 满足要求就进入污染监测环节, 不满足要求则需要更换材料或者更改设计, 然后再进行上述分析, 直到达到要求为止。

收稿日期: 2009-09-04; 修回日期: 2010-03-15

作者简介: 焦子龙(1979-), 男, 博士学位, 现从事航天器污染研究工作。E-mail: jiaozilong@yahoo.com。

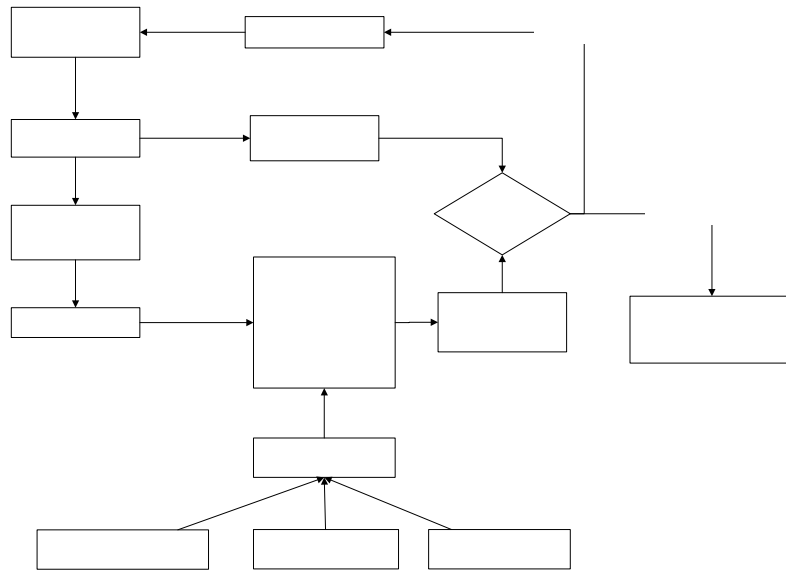


图1 污染分析流程
Fig. 1 Flowchart of contamination analysis

卫星系统、设计 及材料数据

3 放气过程分析方法

放气研究的主要目的是建立放气过程随温度和时间变化的一般函数关系,以在短期试验测定的基础上对材料长期放气过程作出准确预示。

一般认为放气有3种过程起作用:(1)材料内部和表面吸附的气体分子解吸,例如H₂O、N₂等,它们为地面加工、测试、储存、装卸、发射过程中吸附的;(2)材料内含的稀释剂、未聚合的单体、增塑剂、润滑剂等扩散及从表面解吸;(3)材料基体由于材料暴露于其他环境而产生裂解。例如热环境、太阳辐照、带电粒子辐照、原子氧环境、微流星及碎片环境、静电放电等。相对于材料内已有分子,这些产物分子量较低(挥发性高)。

3.1 扩散模型

一般认为,扩散是材料放气的主要机制。对于有限厚度 h 的无限大平板材料,某种放气产物的Fick 扩散方程为

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + f(x,t), \quad (1)$$

式中: C 为放气产物的浓度分布,即 $C=C(x,t)$; t 为时间; x 为距离; D 为扩散系数; $f(x,t)$ 表示材料本体内挥发性组分的生成速率。

扩散系数 D 与温度 T 之间关系为

$$D = D_0 \exp\left(-\frac{E}{RT}\right), \quad (2)$$

式中: D_0 为常数; E 为扩散激活能; R 为普适气体常数。上述问题的定解条件一般为

$$\begin{cases} C|_{x=0} = C|_{x=h} = 0 \\ C|_{t=0} = \varphi(x) \end{cases} \quad (3)$$

该定解问题是方程为非齐次、而边界条件为标准抛物型方程。在 $f(x,t)$ 给定条件下,只要确知初始条件 $\varphi(x)$ 的具体形式,就可对它求解。一般认为初始浓度为一常数,即 $C|_{t=0} = C_0$ 。

上述用扩散方程描述的模型存在的主要问题是:如何从试验数据中获得关键输入参数,即扩散系数 D 、扩散激活能 E 和污染物初始浓度 C_0 。已有一些试验数据仅针对水分子等分子,对于分子污染关心的大分子污染物相关试验数据极少。

3.2 工程经验模型

由于存在参数难以精确估计,采用工程经验模型拟合放气测试数据是另外一种经常使用的方法。污染初步分析时可采用材料放气总量参数。通过ASTM E595 标准可获得被测试材料在加热至125 °C,真空度优于 7×10^{-3} Pa,持续时间24 h条件下的总质损(TML)、收集的可凝挥发物(CVCM)和水气回收量(WVR)。在初步的污染分析中可以使用这些参数估算放气量。

若需获得放气过程的详细信息,可采用放气量的幂级数模型或指数模型:

污染控制计划
确认关键表面
或关键子系统
确认污染源

$$m = a \cdot \exp\left(\frac{-E_q}{RT_s}\right) \cdot t^b + c, \quad (4)$$

$$m = a \cdot \left[1 - \exp\left(-b \cdot \exp\left(\frac{-E_q}{RT_s}\right) \cdot t\right) \right] + c. \quad (5)$$

式中: m 为材料放气量; E_q 为激活能; R 为普适气体常数; T_s 为材料温度; a, b, c 为待定常数。

上述模型对于放气产物单一的材料拟合效果较好。对于多组分的放气产物, 需要采用叠加形式的模型, 即

$$m = \sum_{i=1}^K W_i \times m_i, \quad (6)$$

式中: W_i 为待定系数; m_i 一般用幂级数表示。

试验时, 需按阶梯式地升高材料加热温度, 例如从 25 °C 升至 125 °C, 每 25 °C 为一个台阶, 每个台阶持续时间 4 h 以上。按照式(6)对试验数据分段拟合, 获得总的放气特性方程。

3.3 小结

放气过程分析是以获得材料放气成分特性参数为基础, 重要的参数包括放气激活能 E_q 、扩散系数 D 、扩散激活能 E 和污染物初始浓度 C_0 。这些参数的估算需要试验数据支持, 因此污染源分析应首先建立材料放气试验设备以及较为详尽的材料放气特性数据库。

4 沉积量分析方法

污染分子与表面的相互作用涉及到多种因素, 机理复杂。在工程应用中, 认为除原子氧及紫外辐照造成的固化效应外, 污染物在表面的吸附属于不饱和的多层吸附。因此进行沉积计算分析的关键在于建立黏附系数模型 (sticking coefficient model)。国外研究人员通过对实际问题进行简化获得描述沉积总量的平均黏附系数模型及描述沉积量变化的瞬态黏附系数模型。

4.1 平均黏附系数模型

若假设表面黏附系数与污染物入射通量无关, 与已沉积污染物类型和质量无关, 不与已沉积污染物发生反应, 则可将黏附系数表示为敏感表面温度和/或污染源温度的函数。通过不同污染源温度 (或敏感表面温度) 组合的试验数据拟合函数中的常数, 即可建立模型。

常用的模型有以下两种, 分别应用于 COMOVA 软件^[5]和 SPACE 软件^[6]平台上。

COMOVA 软件平台采用的模型为

$$S(T) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{T - T_C^\alpha}{\Delta T_C^\alpha}\right)}, \quad (7)$$

式中: $S(T)$ 为平均黏附系数; T_C^α 为捕获温度; ΔT_C^α 为过渡参数。

SPACE 软件平台使用模型:

$$S(T) = \frac{T_j - T_i}{\Delta T}, \quad (8)$$

式中: $S(T)$ 为平均黏附系数; T_j 为接收表面的温度; T_i 为污染源表面的温度; ΔT 为试验拟合常数, 在 SPACE 软件中取值 200。

应用上述两个模型时需要注意, 对于不同的污染源及敏感表面组合, 模型的常数数值一般不相同, 需要通过试验确定, 不能采用经验数值。式(8)的模型仅在较小的温度范围内有效。

4.2 瞬态黏附系数模型

随着污染研究的深入, 在获得大量污染物在敏感表面动态吸附解吸的数据后, 国外研究人员提出了不同的瞬态黏附系数模型。

4.2.1 多组分瞬态黏附系数模型

为了表征黏附系数随时间的变化, M. C. Fong 和 A. L. Lee 提出了一种多组分黏附系数模型^[7-8]。

假设污染物入射通量在积分时间段 t 内是常数, 且源表面和敏感表面的温度在该时间段内也是常数。又假设吸附作用为一阶 Arrhenius 类型, 则根据吸附动力学微分方程有

$$\dot{m}_d = (1 - \sigma) \dot{m}_i - \frac{m_d}{\tau}, \quad (9)$$

式中: \dot{m}_d 为污染沉积速率; \dot{m}_i 为污染物入射通量; m_d 为已沉积量; σ 为反射系数; τ 为驻留时间, τ 可以表示为

$$\tau = \tau_0 \exp\left(\frac{E_d}{RT}\right), \quad (10)$$

其中, E_d 为解吸热; R 为气体常数; T 为敏感表面温度; τ_0 为污染分子在敏感表面的平均振动时间。

根据黏附系数的定义, 得到

$$S = \frac{\dot{m}_d}{\dot{m}_i} \quad (11)$$

对式(10)积分,并结合式(11),则得到瞬态黏附系数表达式为

$$S = (1 - \sigma) \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right) \quad (12)$$

由公式(12)可以得到时间段 t 内的平均黏附系数 \bar{S} 为

$$\bar{S} = \frac{\int_0^t S dt}{\int_0^t dt} = (1 - \sigma) \frac{t}{\tau} \left[1 - \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right) \right] \quad (13)$$

对于 n 种放气成分的材料,其平均黏附系数可以表示为

$$\begin{aligned} \bar{S} &= \sum_{i=1}^n x_i \bar{S}_i = \sum_{i=1}^n x_i (1 - \sigma_i) \left(\frac{\tau_i}{t}\right) \left[1 - \exp\left(-\frac{t}{\tau_i}\right) \right] \\ &= \sum_{i=1}^n x_i (1 - \sigma_i) \left(\frac{\tau_0}{t}\right) \exp\left(\frac{E_{di}}{RT_i}\right) \left\{ 1 - \exp\left[-\frac{t}{t_0} \exp\left(\frac{E_{di}}{RT_i}\right)\right] \right\} \quad (14) \end{aligned}$$

式中 x_i 表示的是成分 i 的组分分数。

式(14)表明,要获得特定温度下的平均黏附系数,需要放气产物中各组分的精确含量和解吸热。M. C. Fong 和 A. L. Lee 对 DC-704 硅油和 R-2560 硅胶的试验数据进行了分析,分别采用单组分模型和多组分模型进行预估,模型结果与试验数据符合较好。

但是,该模型需要的输入参数过多,大大降低了其应用性,并且输入参数是模型误差的主要来源。首先,解吸热的正确估计没有给出具体方法,随意性很大;其次,材料放气成分的组分及含量随着时间变化(例如 R-2560),也受到材料加热温度的影响,使模型变得更为复杂;再次,对于不同温度、不同材料等,需要调节 σ 才能使模型与试验数据符合得更好,但该参数取值的随意性较大。

4.2.2 基于覆盖度的瞬态黏附系数模型

与多组分通用黏附系数模型中的公式(9)类似,在不考虑环境影响时,敏感表面的污染沉积速率为污染物入射速率与解吸速率的差,即

$$\dot{m}_d = \dot{m}_i - \dot{m}_r \quad (15)$$

美国 Aerospace 公司的 G. S. Arnold 等人认为解吸速率与表面温度及污染分子的覆盖度相关,据此建立了基于覆盖度的黏附系数模型表达式^[9]。

(1) 解吸速率模型

首先定义 3 种覆盖度类型,即亚单层(sub-monolayer)、不完全覆盖的多层吸附(multilayer with incomplete coverage)、饱和覆盖(saturation coverage)。根据对文献的调研分析,G. S. Arnold 提出了如下模型^[10]:

$$\frac{dn}{dt} = \begin{cases} -K(T) & (n > n_l) \\ -k(T)n & (n \leq n_l) \end{cases} \quad (16)$$

式中: n 为吸附于表面的污染物数密度; $K(T)$ 和 $k(T)$ 分别为饱和覆盖及亚单层覆盖时的解吸速率; n_l 为单分子层数密度,

$$n_l = \left(\frac{\rho N_0}{M}\right)^{\frac{2}{3}} \quad (17)$$

其中, N_0 为阿伏加德罗常数; M 为相对分子质量。对于不完全覆盖的多层吸附,Zeiner 提出了一种过渡函数模型^[9]:

$$\frac{dn}{dt} = -K(T) \left[1 - \exp\left(-\frac{k(T)n}{K(T)}\right) \right] \quad (18)$$

对于饱和覆盖,解吸速率即为 Langmuir 蒸发速率。考虑理想气体方程,则有:

$$K(T) = P(T) \left(\frac{N_0}{2\pi k_b T M}\right)^{\frac{1}{2}} \quad (19)$$

对于亚单层覆盖解吸速率,认为单分子层的解吸速率与饱和覆盖解吸速率相等, $k(T)n_l = K(T)$ 。则 $k(T)$ 表达式为

$$k(T) = P(T) \left(\frac{N_0}{2\pi k_b T M}\right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{M}{\rho N_0}\right)^{\frac{2}{3}} \quad (20)$$

式(19)、(20)中, $P(T)$ 为饱和蒸气压; k_b 为 Boltzmann 常量。根据 Clausius-Clapeyron 方程, $P(T)$ 与蒸发热 ΔH_v 有如下关系:

$$\ln P(T) = -\frac{\Delta H_v}{k_b T} + P_0 \quad (21)$$

(2) 拟合方法

上述函数关系中存在 4 个需估计的参数: P_0 、 M 、 ρ 和 ΔH_v 。G. S. Arnold 等人采用的估计方法可参考文献^[9]。实际上,如果通过 QCM 热重分析(QTGA)能够准确确定放气成分,则上述 4 个参数可直接从手册中获得。

这种方法的不足在于上述拟合方法仅能给出

一组不同相对分子质量的最佳拟合结果, 仍需确定哪个结果最符合实际情况。这需要相关的经验, 因而实际应用存在一些困难。从图 2 可以看出, 相对分子质量 $M=329$ 和 $M=18.56$ 两种参数均与试验结果符合较好。

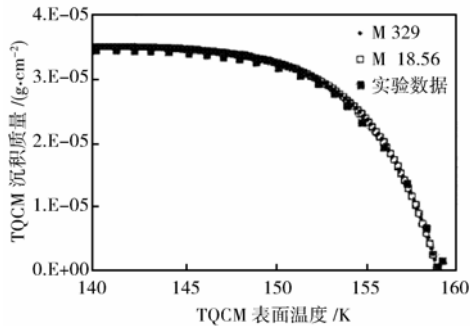


图 2 AS4/3501-6 碳纤维/热固型环氧热重分析试验结果与拟合结果比较

Fig. 2 Comparison of experimental results of AS4/3501-5 Carbon Fiber/Thermoset Epoxy with the results of curve fitting

4.3 小结

瞬态黏附系数模型更符合实际, 但与放气特性分析类似, 模型应用同样需要污染物成分的特性参数, 主要估计参数为解吸热 E_d 。但是, 考虑到污染属于累积效应, 在大多数情况下可以利用现有放气特性试验设备结合平均黏附系数模型获得敏感表面的黏附系数。

5 污染效应分析方法

如 2.2 节所述, 容易遭受分子污染影响的表面主要为光学表面、热控表面、太阳能电池表面等。分子污染的影响表现为对不同波长能量的反射、干涉、散射和吸收。前 3 种现象主要依赖于污染膜厚度、折射率等参数及沉积物形态 (薄膜或液滴), 而吸收则主要由污染物的化学结构决定。一般认为, 航天器在轨运行敏感表面上分子污染沉积形成的污染膜是均匀的薄膜, 因此主要考虑其对辐射能量的吸收。

污染膜的吸收符合 Lambert-Beer 定律。按照该定律, 透过率 T 与污染膜厚度 l 及污染物的吸收系数 α 具有如下关系:

$$T = \frac{I}{I_0} = e^{-\alpha l}, \quad (22)$$

式中 I_0 和 I 分别为入射光强及通过污染膜后的光强。

污染膜厚度可根据污染沉积量及污染物面密度求得。一般认为, 厚 1 nm 的污染膜近似对应于

$1 \times 10^{-7} \text{g/cm}^2$ 的污染量。因此, 计算污染膜吸收的关键是获得吸收系数 α 。该系数与消光系数 k (复折射率虚部) 的关系为

$$\alpha = \frac{4\pi k}{\lambda}, \quad (23)$$

式中 λ 为波长。

由于复折射率属于基本物性参数, 与物体组成成分、温度水平等有关, 与表面状况有关。该参数不可直接测量 (没有直接测量复折射率的仪器), 只能利用某种试验结果结合相应理论模型, 利用反问题研究方法计算求得。国外在这方面进行了大量试验和分析, 获得了多种污染物的数据。阿诺德工程发展中心 (AEDC) 的 J. A. Roux 和 B. E. Wood 等人分别对 12 种双组元发动机燃烧产物 (如 H_2O 、 CO 、 N_2 等) 和 30 种材料在低温表面沉积的污染膜折射率参数进行了测量分析 [11-15]。

根据水的吸收系数计算得到的透过率与污染膜厚度的关系如图 3 所示。假设敏感表面透过率为 100%, 污染膜厚度单位为 nm。图中 4 条曲线分别代表水分子的 4 个吸收峰位置: 3250cm^{-1} 、 2240cm^{-1} 、 1650cm^{-1} 和 820cm^{-1} 。

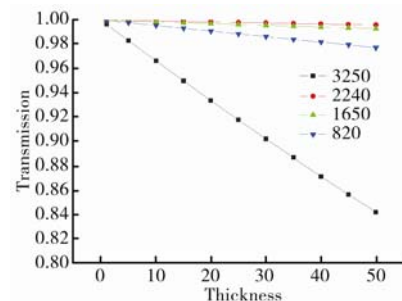


图 3 透过率与水沉积膜厚度的关系

Fig. 3 Relationship of transmission vs. deposition thickness of water molecule

典型大分子污染物的吸收峰位置如表 2 所示。

对于光化学沉积导致的暗化效应, G. S. Arnold 和 K. Luey 获得了 4 种污染物光化学沉积的吸收谱 [16], 如图 4 所示。图中表示的 4 种污染物分别为: 邻苯二甲酸二乙基己基酯 (DEHP)、双酚 (Bisphenol)、三十碳六烯 (Squalene)、扩散泵油 (DC-704)。图中细实线表示效应分析中一般采用的污染物吸收谱。比较发现, 经过紫外辐照发生了光化学沉积的污染物吸收系数增大一个数量级以上。

表2 典型大分子污染物吸收峰位置

Table 2 Absorption bands of typical molecular contaminants

污染物类别	吸收峰位置/cm ⁻¹	强度
碳氢化合物	3 000~2 850	强
酯	1 750~1 735	强
	1 300~1 050	强
甲基硅酮	1 280~1 255	很强
	1 130~1 000	强
	860~760	很强
甲基苯基硅酮	1 280~1 255	很强
	1 130~1 000	强
	1 125~1 100	很强
	860~760	很强

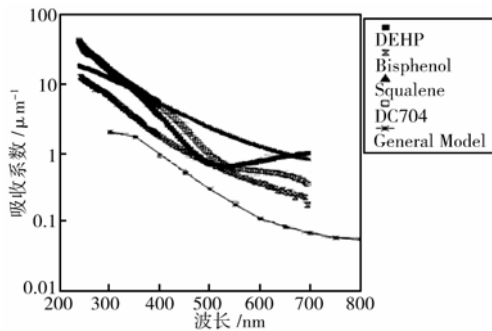


图4 典型污染物光化学沉积吸收系数

Fig. 4 Absorption coefficient of typical contaminant in photochemical deposition

6 污染传输计算方法

6.1 传输机制

污染分子传输过程(传输机制)依据污染分子是否通过分子间碰撞到达敏感表面,一般可以分为视线传输和返回流。

(1) 视线传输(line-of-sight, LOS): 污染分子通过与表面碰撞到达敏感表面,可以分为直接视线传输(direct LOS)、表面反射间接视线传输(surface reflect LOS)、衰减视线传输(LOS with attenuation)等几种。一般来说,污染量与两表面间距离的平方成反比,和角系数成正比。所有传输机制中,直接视线传输带来的污染量最大。

(2) 返回流(return flux, RF)包括自散射(self scatter RF)、背景散射(ambient scatter RF)等。自散射指放气分子之间发生碰撞而有一部分污染分子返回敏感表面。背景散射则是放气分子与轨道环境分子碰撞返回表面。由于要考虑分子间碰撞,返回流最难于求解。总的来说返回流通量正比于分子的碰撞截面和源通量。分子越重,平均速度越小,平均自由程越小,在表面附近经受碰撞越多,相应

的返回流越大。

6.2 直接流计算方法

针对直接视线传输及表面反射合适的建模方法是角系数方法,这种方法采用的基本假设为:(1)不考虑分子间碰撞;(2)出气分子发射及分子从表面反射符合余弦规律。基于上述假设,分子传输与辐射热传递过程有着极为相似的物理特性,因而可以采用辐射热传递的方法及工具进行求解分析。

设 \dot{m}_i 为敏感表面*i*的入射流, S_i 为该表面污染分子的沉积系数,定义为沉积的污染分子数与入射分子数的比, F_{ij} 为表面*i*对表面*j*的角系数, \dot{m}_0 为污染源表面*i*的出气速率,则:

$$\begin{bmatrix} \dot{m}_1 \\ \dot{m}_2 \\ \vdots \\ \dot{m}_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} F_{11} \frac{A_1}{A_1} & F_{21} \frac{A_2}{A_1} & \dots & F_{n1} \frac{A_n}{A_1} \\ F_{12} \frac{A_1}{A_2} & F_{22} \frac{A_2}{A_2} & \dots & F_{n2} \frac{A_n}{A_2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ F_{1n} \frac{A_1}{A_n} & F_{2n} \frac{A_2}{A_n} & \dots & F_{nn} \frac{A_n}{A_n} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \dot{m}_{01} + (1-S_1)\dot{m}_1 \\ \dot{m}_{02} + (1-S_2)\dot{m}_2 \\ \vdots \\ \dot{m}_{0n} + (1-S_n)\dot{m}_n \end{bmatrix} \quad (24)$$

为求得入射流 \dot{m}_i ,令

$$\begin{cases} a_{ji} = F_{ji} \frac{A_j}{A_i} \\ \alpha_{ji} = \delta_{ji} - (1-S_i)a_{ji} \\ C_i = \sum_j \alpha_{ji} \dot{m}_{0j} \end{cases}$$

式中: δ_{ji} 为delta函数,当*i=j*时, $\delta_{ji}=1$; *i≠j*时, $\delta_{ji}=0$ 。则方程变为

$$\begin{bmatrix} \alpha_{11} & \alpha_{21} & \dots & \alpha_{n1} \\ \alpha_{12} & \alpha_{22} & \dots & \alpha_{n2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \alpha_{1n} & \alpha_{2n} & \dots & \alpha_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \dot{m}_1 \\ \dot{m}_2 \\ \vdots \\ \dot{m}_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} C_1 \\ C_2 \\ \vdots \\ C_n \end{bmatrix} \quad (25)$$

求解此矩阵方程即可得到表面*i*的入射流 \dot{m}_i ,单位g/cm²·s,则表面*i*沉积速率为 $\dot{m}_i \cdot S_i$ 。

6.3 返回流计算方法

针对返回流问题,从20世纪70年代起不同研究者发展了不同的求解方法,主要可以分为两大类:解析求解与Monte Carlo数值模拟,如图5所示。解析求解通过理论分析,经过对物理问题的适当简化,获得返回流的表达式求解。而Monte-Carlo方法则直接通过对分子运动过程进行统计模拟,得

到返回流的统计值。

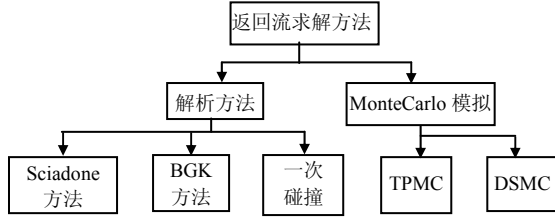


图 5 返回流求解方法

Fig. 5 Simulation methods for return flux

本文仅对 BGK 方法和 TPMC 方法进行介绍。

其他方法的详细介绍可参考文献[17]。

6.3.1 BGK 方法

由于 Boltzmann 碰撞项十分复杂, 导致该方程求解十分困难。许多研究者作了很多工作试图简化碰撞项以减少求解难度, 这其中最著名的工作是 Bhatnagar、Gross、Krook 提出的模型方程, 简称为 BGK 方程^[18]:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{c} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} + \mathbf{F} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{c}} = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_c = \nu (f_0 - f) \quad (26)$$

上式中: f 为速度分布函数; f_0 为局部平衡分布即 Maxwell 分布; ν 为碰撞频率; \mathbf{c} 为速度; \mathbf{r} 为位置。

需要注意的是研究者提出 BGK 方程时, 其适用的条件是近平衡态, 而返回流问题绝对不属于此状态。因此使用 BGK 方法需要对方法的正确性进行分析验证。Robertson 对该问题进行分析后, 认为采用 BGK 方法是可行的。Robertson 首次将 BGK 方程用于球形航天器的返回流求解, 随后这种方法进一步发展, 编制了计算机程序用于计算航天器返回流, 例如 MOLESCAT、NASAN、COMOVA 等软件。下面给出利用 BGK 方程计算返回流的基本思路^[19-20], 具体的计算步骤可以参考文献[21]。

对于双组元的碰撞, BGK 方程具有如下形式:

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_1}{\partial t} + \mathbf{c} \cdot \frac{\partial f_1}{\partial \mathbf{r}} &= \nu_{11}(M_{11} - f_1) + \nu_{12}(M_{12} - f_1) \\ \frac{\partial f_2}{\partial t} + \mathbf{c} \cdot \frac{\partial f_2}{\partial \mathbf{r}} &= \nu_{22}(M_{22} - f_2) + \nu_{21}(M_{21} - f_2) \end{aligned} \quad (27)$$

式中: ν 为碰撞频率; M 表示平衡态 Maxwell 速度分布。双组元的 Maxwell 速度分布可表示为

$$M_{ij} = \left(\frac{m_i}{2\pi kT_{ij}} \right)^{3/2} n_i \exp \left(-\frac{m_i}{2kT_{ij}} (\mathbf{c} - V_{ij})^2 \right), \quad (28)$$

式中: 下标 ii 表示某组分自碰撞; ij 表示组分间分子碰撞; V_{ij} 为平均速度。

若认为返回流问题为处于近自由分子流条件, 则放气分子的分布函数 f_1 可以表示为

$$f_1 = f_{1,0} + \hat{f}_1, \quad (29)$$

式中: $f_{1,0}$ 为自由分子流解, 表示的是放气分子从污染源逸出遭遇碰撞前的分布; \hat{f}_1 为碰撞引起的偏离。当只考虑由于分子间碰撞引起的返回流问题时, 返回的污染分子速度指向航天器表面, $f_{1,0}$ 等于零。将式(29)代入 BGK 方程, 可得

$$\frac{\partial \hat{f}_1}{\partial t} + \mathbf{c} \cdot \frac{\partial \hat{f}_1}{\partial \mathbf{r}} = \nu_{11}(M_{11} - \hat{f}_1) + \nu_{12}(M_{12} - \hat{f}_1), \quad (30)$$

式中, ν_{11} , ν_{12} 分别为自散射和背景散射的碰撞频率。

\hat{f}_1 可以表示成自散射 \hat{f}_{11} 与背景散射 \hat{f}_{12} 的叠加,

$\hat{f}_1 = \hat{f}_{11} + \hat{f}_{12}$ 。则式(30)可变换为

$$\frac{\partial \hat{f}_{11}}{\partial t} + \mathbf{c} \cdot \frac{\partial \hat{f}_{11}}{\partial \mathbf{r}} = \nu_{11}(M_{11} - \hat{f}_{11}) - \nu_{12}\hat{f}_{11}, \quad (31)$$

$$\frac{\partial \hat{f}_{12}}{\partial t} + \mathbf{c} \cdot \frac{\partial \hat{f}_{12}}{\partial \mathbf{r}} = \nu_{12}M_{12} - \nu_{11}\hat{f}_{12}, \quad (32)$$

式(31)描述自散射的返回流, 式(32)描述背景散射的返回流。求解这两个方程, 可以得到返回流率 (return flux)

$$q_{1j} = \int \int_0^\pi \nu_{1j} \cos \phi_{n1} (f_{1j} - g_{1j}) d\mathbf{r}' d\omega, \quad (33)$$

式中: j 为 1 代表自散射; j 为 2 代表背景散射; ϕ 为敏感表面的法线方向与返回流速度矢量反方向的夹角; 碰撞频率 $\nu_{11} = 1.11n_1V_1\sigma_{11}$, $\nu_{12} = 1.023n_2V_2\sigma_{12}$; f_{1j} 为散射分子的分布函数, 其表达式为

$$\hat{f}_{1j} = \frac{1}{2\pi^{3/2}} e^{-(s_{1j} \sin \alpha_{1j})^2} \left\{ s_{1j} \cos \alpha_{1j} e^{-(s_{1j} \sin \alpha_{1j})^2} + \frac{\sqrt{\pi}}{2} \left[1 + 2(s_{1j} \cos \alpha_{1j})^2 \right] \left[1 + \operatorname{erf}(s_{1j} \sin \alpha_{1j}) \right] \right\},$$

其中 α_{1j} 为返回流速度矢量与平均速度矢量的夹角; g_{1j} 为考虑散射返回分子之间的碰撞对 f_{1j} 的修正, 远小于 f_{1j} , 可忽略不计; s_{1j} 为速度比, $s_{1j} = \sqrt{\frac{m_i}{2kT_{1j}}} V_{1j}$ 。

根据 BGK 方法的公式很容易看出返回流与分子量 1/2 次方成正比。

当航天器是简单的球形或者平板等形状时,可以得出解析形式返回流表达式,但对于复杂几何构型则需要数值求解。

6.3.2 TPMC 方法

TPMC 方法应用硬球碰撞模型,考虑二体弹性碰撞,采用统计方法对大量单个放气分子的运动、碰撞和轨迹进行模拟,以获得相应的散射分布和返回流比率。返回流比率定义为返回放气表面的样本分子数与总的抽样分子数的比。

该方法假设:

(1) 放气分子流和环境分子流服从麦克斯韦速率分布;

(2) 放气分子飞离表面时其方向服从余弦分布。

TPMC 方法模拟的流程如图 6 所示,其模拟的基本步骤^[22]为:

(1) 根据航天器轨道环境及放气表面特性设置初始参数及边界条件。

(2) 设置放气分子位置及速度。随机布置放气分子的初始坐标,按照 Maxwell 分布律赋予分子速度。

(3) 抽样分子的自由程。分子在空间运动自由程 λ_1 后会与其他分子发生碰撞。自由程 λ 服从 Maxwell 指数分布规律,因此 λ_1 可通过随机抽样得出,

$$\lambda_1 = \lambda_0 \ln(1/R_f), \quad (34)$$

式中: R_f 为随机数; λ_0 为平均自由程。抽样得到分子自由程后,可计算得到粒子新的位置。

(4) 判断粒子是否仍处于计算区域内,若否,则结束对该粒子的跟踪,重新产生一个试验粒子并跟踪。

(5) 判断分子是否返回放气表面,若否,计算分子碰撞后速度,转到步骤(3)继续计算;若是,结束对该粒子的跟踪,重新产生一个试验粒子并跟踪。

(6) 当跟踪粒子达到需要的样本数后,计算返回流比率并输出结果。从上述计算过程可以看出,TPMC 方法不需要划分空间网格,仅在计算返回流表面分布时需要划分网格,因此极大地减少了编程的工作量。并且,TPMC 方法每个循环仅追踪单个放气分子,可利用并行计算等技术提高计算效率。对复杂几何形体,表面网格划分可采用成熟软件包实现。但在步骤(5)中,需要判断粒子是否与某个表面元相交。对复杂几何形体,需要采用计算机图形学中的八叉树算法加快求交的计算速度。

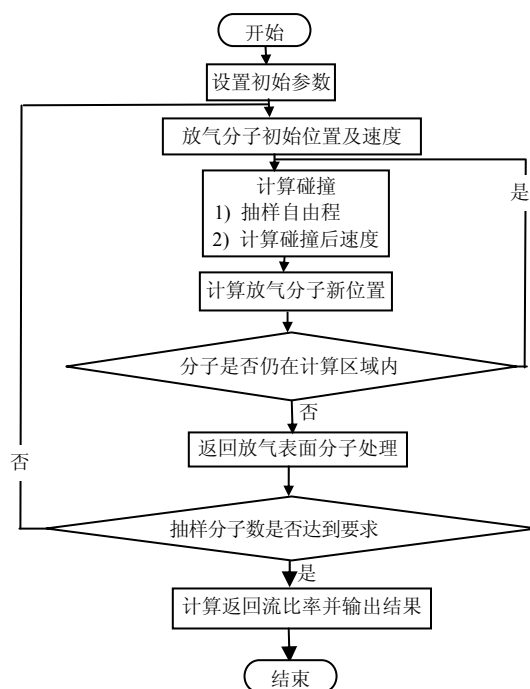


图 6 TPMC 流程图

Fig. 6 Flowchart of TPMC

6.4 小结

污染传输的计算是航天器污染预估中最为复杂的环节。需根据实际情况作出选择,并不是算法越复杂越好。例如,对于中高轨道运行的航天器,背景散射以及自散射都极小,仅需考虑直接流造成的污染。而计算低轨道运行航天器外部污染时,对于污染源与敏感表面不直接可见的情况则需采用返回流计算,而具体选择何种计算方法的依据在于克努森数 Kn 。 $Kn < 100$ 时,采用 DSMC 方法;若 Kn 远大于 100,则可采用 TPMC 方法或工程估算方法。

角系数计算中也常采用蒙特卡罗方法,与之比较可以发现 TPMC 方法仅增加了分子自由程抽样的步骤,很容易在 TPMC 方法的基础上构造直接流与背景散射返回流统一算法。该算法对迅速建立污染分析软件包、形成污染分析能力具有很大意义。

从返回流计算方法可以发现,返回流比率的计算与碰撞频率及平均自由程参数直接相关,因此,准确的污染物分子特性参数是必要的。

7 模型及方法验证

分子污染分析模型及方法多为工程经验模型或高度简化的理论模型,对其进行验证极为重要。

J. J. Scialdone 提出采用 AE-D 卫星上的返回流试验数据对返回流计算模型及方法进行验证^[23]。该试验采用位于卫星本体上特殊设计的氩气喷嘴发

射高速气流,此分子流与轨道残余气体分子碰撞产生返回流。利用距喷嘴不远的质谱计探测返回的氩分子。文献[24]提出利用空间环境模拟器进行返回流计算验证。利用两只朝向相反的石英晶体微量天平在环模器中建立真空低温环境,通过记录两只天平在某时间段 t 内的频率比值即可得到返回流比率。数值计算得到的返回流比率在 10^{-3} 量级。

文献[25]提出采用 OSR 的太阳吸收率变化对整星污染分析模型进行验证,原因在于 OSR 一般采用熔融石英,轨道辐照环境等因素对其性能影响极小,因此其变化主要受分子污染影响。

8 结束语

本文对污染源、污染效应、污染传输的计算分析方法进行了介绍。利用这些方法进行航天器外部污染及内部污染的分析计算。除了模型及计算方法的误差外,准确的输入数据也是实现精确污染分析的必要条件。获得污染物成分及其特性参数是分子污染分析研究的主要内容之一。

这些特性参数包括污染物在材料中的浓度、扩散系数、在敏感表面的吸附热和解吸热、吸收光谱等等。要获得这些数据仍需要进一步的研究:

- (1) 建立符合 ASTM E1559 标准的材料放气特性测试设备,建立材料放气特性数据库;
- (2) 建立污染物沉积及解吸特性分析设备及试验方法,建立污染物沉积及解吸特性数据库;
- (3) 建立污染沉积光学损失原位测试系统,建立污染物光学特性参数数据库。

除上述内容外,分子污染分析仍然有一些重要问题没有涉及到,如高轨道航天器的静电吸引返回流污染,紫外辐照导致的光化学沉积,原子氧对污染物的作用等。这些问题在不同条件下可能成为主要影响因素,因此必须加以研究以建立分析计算方法。

参考文献 (References)

- [1] Muscari J. Non-metallic materials contamination studies final technical report, MCR-80-637[R]
- [2] Glassford A P, Garrett J. Characterization of Contamination Generation characteristics of satellite materials, WRDC-TR-89-4114[R]
- [3] Judeikis H S, Arnold G S, Young Owl R C, et al. Design of a Laboratory Study of Contaminant Film Darkening in Space, TR-94(4935)-3[R]
- [4] 焦子龙. GEO 卫星整星分子污染初步预估[J]. 航天器环境工程, 2008, 25(6)
- [5] Lemcke C, Giunta I, Roussel J F. A new contamination analysis software, SAE 2000-01-2525[R]
- [6] Rantanen R O. Spacecraft contamination modeling, AIAA 1977-739[R]
- [7] Fong M C, Lee A L. A time-dependent sticking coefficient model for multi-species spacecraft material, AIAA 2005-5072[R]
- [8] Fong M C. General sticking coefficient theory for neutral and photochemically excited molecules[C]//SPIE 1998, 3427
- [9] Hall D F, Arnold G S, Simpson T R, et al. Progress on spacecraft contamination model development[C]//SPIE 2000, 4096
- [10] Glassford A P M. Practical model of molecular contaminant deposition kinetics[J]. Thermophysics, 1992(6)
- [11] Roux J A, Wood B E, Smith A M. IR optical properties of thin H_2O , NH_3 , and CO_2 cryofilms, AEDC-TR-79-57[R]
- [12] Roux JA, Wood B E, Smith A M, et al. Infrared optical properties of thin CO , NO , CH_4 , HCl , N_2O , O_2 , N_2 , Arand Air cryofilms, AEDC-TR-79-81[R]
- [13] Wood B E, Bertrand W T, Brayson R J, et al. Surface effects of sate llite outgassing products, AEDC-TR-87-8[R]
- [14] Wood B E, Bertrand W T, Kiech E L, et al. Surface effects of satellite material outgassing products, AEDC-TR-89-2[R]
- [15] Wood B E, Bertrand W T. Effects of spacecraft materials outgassing products on cryogenic surfaces, AEDC-TR-92-18[R]
- [16] Arnold G S, Luey K. Photochemically deposited contaminant film effects: data archive, Aerospace report TR-94(4935)-13[R]
- [17] 焦子龙. 航天器分子污染返回流计算方法[J]. 航天器环境工程, 2008, 25(3): 269-275
- [18] Bhatnagar P L, Gross E P, Krook M. A model for collision processes in gases[J]. Phys Rev, 1954, 94: 511-525
- [19] Robertson S J. Bhatnagar-Gross-Krook model solution of backscattering of outgas flow from spherical spacecraft[J]. Progress in Astronautics and Aeronautics, 1977, 51: 479-489
- [20] Абрамовский Е Р, Басс В П. Аэродинамические характеристики тел в разреженном газе[M]. Днепропетровск: ДГУ, 1986: 128
- [21] Fong M C, Lee A L. BGK method to determine thruster plume backscatter[C]//SPIE, 1990, 1329: 318-325
- [22] Fan C, Gee C, Fong M C, Monte Carlo simulation of molecular flux on simple spacecraft surfaces due to self- and ambient-scatter of outgassing molecules, AIAA 1993-2867[R]
- [23] Scialdone J J. Correlation of self-contamination experiments in orbit and scattering return flux calculations, NASA TN D-8438[R], 1977
- [24] 焦子龙. 真空热试验分子污染返回流建模计算[J]. 航天器环境工程, 2009, 26(7)
- [25] Sanders J, Rosecrans G. GOES-12 molecular contamination[C]//SPIE, 2006, 6291: 85-90