

2023（令和5）年度 修士学位論文

輻射熱輸送を結合した衝突輻射モデルによる
衝撃波管流れの励起非平衡流体計算

Excitation nonequilibrium flow computation of shock tube flow by
collisional-radiative model coupled with radiative heat transfer

2024年2月13日

高知工科大学大学院 工学研究科基盤工学専攻
航空宇宙工学コース

1265023 浅井 友彰

指導教員 荻野 要介, 野崎 理

目次

第1章 緒言	1
1.1 研究背景	1
1.1.1 実験による加熱予測	2
1.1.2 大気圏突入流れの数値計算	2
1.2 研究目的	3
第2章 数値計算法	4
2.1 流れ場計算法	4
2.1.1 支配方程式	4
2.1.2 輸送係数	6
2.1.3 熱化学モデル	7
2.1.4 化学反応モデル	9
2.1.5 エネルギー交換	11
2.1.6 支配方程式の離散化	12
2.2 衝突輻射モデル	13
2.2.1 原子・分子の電子励起準位	13
2.2.2 輻射遷移反応	13
2.2.3 自由電子衝突反応	14
2.2.4 重粒子衝突反応	16
2.2.5 遷移レート方程式	16
2.3 輻射計算法	17
2.3.1 放射係数・吸収係数	17
2.3.2 輻射輸送	17
2.4 衝突輻射モデルと流体計算の結合方法	19
2.5 衝撃波管内流れの再現方法	19

第 3 章 衝撃波管流れの励起非平衡流体計算	32
3.1 Test 50 Shot 29	32
3.1.1 計算条件	32
3.1.2 淀み流線上の流れ場	34
3.1.3 スペクトル強度比較	37
3.2 Test 59 Shot 15	39
3.2.1 計算条件	39
3.2.2 淀み流線上の流れ場	40
3.2.3 スペクトル強度比較	44
3.2.4 さらなる加熱予測精度向上へ向けた考察	46
第 4 章 結言	50
参考文献	51
謝辞	55

第 1 章

緒言

1.1 研究背景

近年行われた宇宙探査の例として、JAXA のはやぶさ 2 [1]、NASA の OSIRIS-REx[2]に代表される小惑星サンプルリターンや、NASA が主導するアルテミス計画[3]、国際共同で運用されている国際宇宙ステーションでの活動[4]が挙げられる。サンプルリターンとは、探査機が目的天体へ向かい試料を採取し、再突入カプセルを用いて地球へ持ち帰る探査手法であり、持ち帰った試料を地上の設備を用いて分析できることから、天体ヘローバ等を送り込み現地で試料の分析を行う手法に比べ、より大きな科学的成果が期待できる。2026 年度には火星の衛星フォボスからのサンプルリターンを目的とする MMX が打上げ予定であり[5]、今後も様々な探査が計画されると考えられる。またアルテミス計画では、アポロ計画以来の有人月探査が計画されており、2022 年 11 月には無人試験機であるアルテミス 1 号が打上げられ、月への試験飛行に成功した[6]。

サンプルリターンや有人宇宙探査では、採取した試料や宇宙飛行士等を地球に帰還させることがミッションの最終段階となる。宇宙機が地球に帰還する際には、秒速 11km を超える超軌道速度で大気圏に突入する。このため、機体前方に強い衝撃波が発生し、衝撃層内が高温環境となることから、機体表面は強烈な空力加熱を受ける。はやぶさカプセルを例にとると、大気圏突入速度は秒速約 12km、最大の加熱率は 15 MW/m^2 以上であった[7]。

空力加熱から機体を保護するための熱防御システムとして、主にアブレーション冷却法[8]が採用されている。この手法では、機体表面に配置したアブレータと呼ばれる防護材が加熱により熱分解されることで、潜熱と気化したガスの吸熱反応によって機体表面の冷却を行う。同時に、気化したガスが機体表面と衝撃層の間に境界層を形成することで、表面への熱の流入を抑制する[8]。これらの設計では、風洞実験や数値計算による空力加熱の正確な予測が重要となる。予測精度の向上は、乗員や試料の安全性向上はもちろんのこと、余分に配置していた防護材の削減に繋がる。これにより、機体の軽量化による打ち上げコストの低減や、空いたペイロード重量を活かした観測機器の追加ができる可能性がある。

1.1.1 実験による加熱予測

実験計測による加熱予測では、JAXA の HIEST などの極超音速衝撃風洞[9]や、自由ピストン型膨張波管 HVET[10]、Ballistic Range[11]、アーク加熱風洞[12]といった大気圏突入環境を模擬できる実験装置が用いられ、模型周りに形成される衝撃層のシュリーレン写真や、層内の発光スペクトルの計測、模型表面でのピトー孔による圧力分布の計測や、壁面加熱率分布の取得が行われる。

大気圏突入環境を模擬できる装置の一つに NASA Ames Research Center が保有する Electric Arc Shock Tube (EAST) がある[13, 14]。試験気体に空気をを用いる場合、最高で衝撃波速度約24 km/sの条件で試験可能である[13]。EAST の概略図を図 1.1 に示す。装置はアークドライバ、衝撃波管、試験部によって構成されており、作動気体にはヘリウムまたは水素が用いられる。衝撃波管は内径 60.3cm、長さ 23.5m のステンレス管と内径 10.16cm、長さ 15m のアルミニウム管の 2 種類あり、実験条件によって使い分けられる。試験部はそれぞれの衝撃波管の下流側 21m と 7.5m に位置しており、測定波長域の異なる 4 つの分光器と CCD カメラが設置されている。実験では、アークドライバ内の作動気体がアーク放電により加熱され、高圧となりダイヤフラムを破断、前方に衝撃波を形成しつつ衝撃波管内を進行する。このとき衝撃波背後の流れが、鈍頭物体の大気圏突入時の淀み流線上の流れを模擬できる。衝撃波背後の輻射スペクトル測定が行われ、得られたデータの一部は公開されており[15]、数値計算のベンチマークとして活用されている[16, 17, 18]。

1.1.2 大気圏突入流れの数値計算

実験計測では取得可能なデータに限りがあり、衝撃層内の温度や化学組成の空間分布といった空力加熱現象を理解する上で重要なデータの計測ができないことから、加熱予測には数値計算による流れ場の再現が有効である。

大気圏突入時は流れ場が極超音速かつ高温低密度であることから、衝撃層内では原子・分子運動の非平衡性が顕著となる。衝撃波背後で断熱圧縮と衝撃加熱により内部エネルギーの並進モードが励起され、粒子間衝突によって生じる温度緩和により、回転・振動・電子励起といった各モードが励起されることが多い。同時に解離や電離、化学種間の衝突による化学反応や輻射による熱輸送も活発となるため、数値計算による加熱予測ではこれらの熱化学非平衡性を考慮することが重要となる。数値計算における代表的な非平衡モデルの一つが Park の 2 温度モデルである[19, 20]。このモデルでは、流れ場の温度を並進-回転温度、振動-電子励起-自由電子の並進温度の 2 温度に分割し、化学反応による各化学種の密度変化と受吸熱を流体運動と同時に計算することで流れ場の熱化学非平衡性を考慮できる。しかし、各化学種の電子励起等の各内部エネルギーモードは、Boltzmann 分布に従う局所熱力学平衡を仮定している。大気密度が低い 80km 以上の高高度では、流れの代表時間と化学種間の衝突、輻射の代表時間が同程度となるため、電子励起状態の非平衡性を考

慮する必要があり、局所熱力学平衡を仮定している Park モデルでは正確な計算を行えないという課題がある。

これに対し、各化学種の電子励起状態を計算によって求めるモデルが衝突輻射モデル (Collisional-Radiative model) である [21, 22]。このモデルでは化学種間の衝突や自由電子衝突、輻射発光による励起・脱励起の直接計算から電子励起状態分布を導出する。電子励起状態を局所熱力学平衡と仮定する Park モデルと比べ、より実際の物理に即した計算が可能である。Panesi らが行った大気圏突入実験機 FIRE II を対象とした一次元流れと原子種に対する衝突輻射モデルとの結合解析 [23] では、衝撃波背後の電子励起状態分布が Boltzmann 分布を下回ることが示された。また、Lemal らによる振動励起状態へも適用したコードの開発が進められている [24]。先行研究である砂辺の研究 [25] では、Palumbo 等による高度約 76km を想定した主流条件でのアーク加熱風洞実験 [26] について、衝突輻射モデルと輻射熱輸送の結合による数値的な再現が行われ、電子励起状態分布を Boltzmann 分布と仮定した場合と比較してより実験値に近い淀み点輻射スペクトルが得られた。先行研究ではアーク加熱風洞内の流れ場の再現であったが、大気圏突入時の加熱予測精度向上のためにも輻射熱輸送を結合した衝突輻射モデルが有効であると考えられる。

1.2 研究目的

本研究の目的は、衝突輻射モデルに輻射熱輸送を組み込み、流体との結合計算を行うことで、大気圏突入時の加熱予測精度向上を図ることである。EAST で実施された実験について計算をし、Park モデルで計算した場合と輻射スペクトルを比較し、輻射加熱率の予測精度を評価する。また、より精度を向上させるための方法についても考察する。

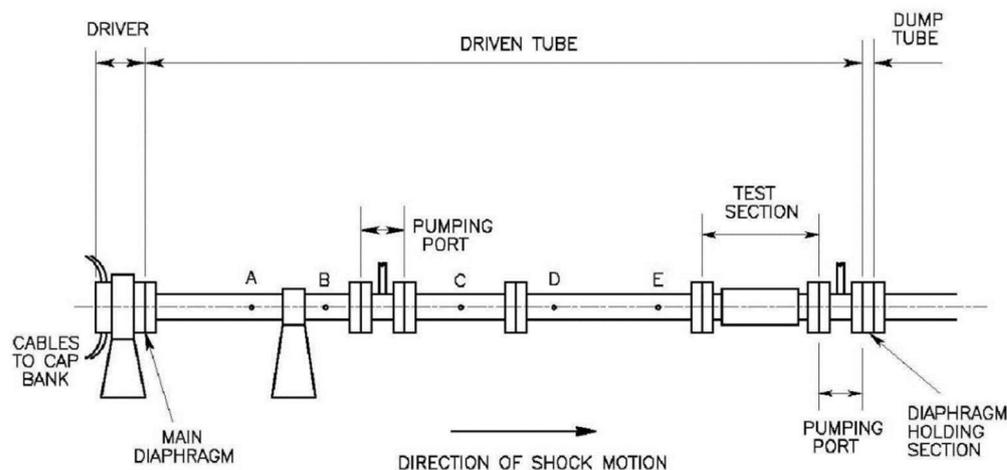


図 1.1 EAST の概略図 [13]

第 2 章

数値計算法

本章では, 使用した物理モデル及び数値計算法について述べる.

2.1 流れ場計算法

2.1.1 支配方程式

供試体周りの流れ場の計算には以下に示す軸対称 Navier-Stokes 方程式を用いる. 熱化学非平衡性を考慮するため, 化学種ごとの質量保存と, 分子運動モードごとのエネルギー保存を解く.

$$\frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial t} + \frac{\partial(\mathbf{F} - \mathbf{F}_v)}{\partial x} + \frac{\partial(\mathbf{G} - \mathbf{G}_v)}{\partial y} + \frac{\partial(\mathbf{H} - \mathbf{H}_v)}{y} = \mathbf{W}. \quad (2.1)$$

ここで, 保存量ベクトル \mathbf{Q} , 非粘性流束ベクトル \mathbf{F} , \mathbf{G} , 粘性流束ベクトル \mathbf{F}_v , \mathbf{G}_v , 軸対称項ベクトル \mathbf{H} , \mathbf{H}_v および生成項ベクトル \mathbf{W} は以下のように与えられる.

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

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

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

$$\mathbf{G}_v = \begin{pmatrix} -\rho_s v_s \\ \tau_{xy} \\ \tau_{yy} \\ \tau_{xy}u + \tau_{yy}v - q_y - q_{vy} - \sum_s \rho_s v_s h_s \\ -q_{vy} - \sum_s \rho_s e_{v,s} v_s \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{H} = \begin{pmatrix} \rho_s u \\ \rho_{uv} \\ \rho v^2 \\ (E + p)v \\ (E_v + E_{el})v \end{pmatrix}, \mathbf{H}_v = \begin{pmatrix} -\rho_s v_s \\ \tau_{xy} \\ \tau_{yy} - \tau_{\theta\theta} \\ \tau_{xy}u + \tau_{yy}v - q_y - q_{vy} - \sum_s \rho_s v_s h_s \\ -q_{v,y} - \sum_s \rho_s e_{v,s} v_s \end{pmatrix}, \quad (2.5)$$

$$\mathbf{W} = \begin{pmatrix} W_s \\ 0 \\ 0 \\ -Q_{rad} \\ W_v - Q_{rad} \end{pmatrix}. \quad (2.6)$$

ここで、 ρ は密度、 ρ_s は化学種 s の密度、 u は速度の x 方向成分、 v は速度の y 方向成分、 E は単位体積あたりの全エネルギー、 E_v は単位体積あたりの振動内部エネルギー、 E_{el} は単位体積あたりの電子励起・自由電子の内部エネルギー、 p は圧力、 $\boldsymbol{\tau}$ は粘性応力、 \mathbf{q} は熱流束、 h はエンタルピー、 u_s 、 v_s はそれぞれ化学種ごとの拡散速度の x 、 y 方向成分、 $e_{v,s}$ は化学種ごとの単位質量あたりの振動内部エネルギー、 W_s は化学種ごとの質量生成率、 W_v は振動・電子励起・自由電子の内部エネルギーの生成率、 Q_{rad} は輻射エネルギー生成項である。本計算では、 N 、 O 、 N_2 、 O_2 、 NO 、 N^+ 、 O^+ 、 N_2^+ 、 O_2^+ 、 NO^+ 、 e^- の 11 化学種を考慮に入れる。各計算セルで電氣的に中性であると仮定し、次の関係式を用いることで電子の質量保存則を省略する。

$$\frac{\rho_{el}}{M_{el}} = \frac{\rho_{N^+}}{M_{N^+}} + \frac{\rho_{O^+}}{M_{O^+}} + \frac{\rho_{N_2^+}}{M_{N_2^+}} + \frac{\rho_{O_2^+}}{M_{O_2^+}} + \frac{\rho_{NO^+}}{M_{NO^+}}. \quad (2.7)$$

ここで M_s は化学種 s の分子量である。

粘性応力は Stokes の定理を用いて以下のように求める。

$$\tau_{xx} = \frac{2}{3}\mu \left(2 \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{\partial v}{\partial y} - \frac{v}{y} \right), \quad (2.8)$$

$$\tau_{xy} = \mu \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right), \quad (2.9)$$

$$\tau_{yy} = \frac{2}{3}\mu \left(2 \frac{\partial v}{\partial y} - \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{v}{y} \right), \quad (2.10)$$

$$\tau_{yy} = \frac{2}{3}\mu \left(-\frac{\partial v}{\partial y} - \frac{\partial u}{\partial x} - 2 \frac{v}{y} \right). \quad (2.11)$$

ここで μ は粘性係数である。熱流束は Fourier の法則から次のように定める。

$$q_x = -\kappa \frac{\partial T}{\partial x}, q_y = -\kappa \frac{\partial T}{\partial y}, \quad (2.12)$$

$$q_{v,x} = -\kappa_v \frac{\partial T_v}{\partial x}, q_{v,y} = -\kappa_v \frac{\partial T_v}{\partial y}, \quad (2.13)$$

ここで T は並進-回転温度、 T_v は振動-電子励起-自由電子温度、 κ, κ_v はそれぞれ、 T, T_v に対する熱伝導係数である。

2.1.2 輸送係数

混合気体の粘性係数は、次に示す Gupta の混合則[27]を用いて求める。

$$\mu = \sum_{s \neq e} \frac{m_s \gamma_s}{\sum_{r \neq e} \gamma_r \Delta_{sr}^{(2)}(T) + \gamma_e \Delta_{se}^{(2)}(T_v)} + \frac{m_e \gamma_e}{\sum_r \gamma_r \Delta_{se}^{(2)}(T_v)}, \quad (2.14)$$

$$m_s = \frac{M_s}{N_A}, \quad (2.15)$$

ここで N_A はアボガドロ数、 γ_s はモル濃度である。添字 sr は化学種 s, r の衝突の組み合わせ、添字 e は自由電子を表し、 Δ_{sr} は以下の通りに求める。

$$\Delta_{sr}^{(1)}(T) = \frac{8}{3} \left[\frac{2M_s M_r}{\pi R T (M_s + M_r)} \right]^{1/2} 10^{-20} \pi \Omega_{sr}^{(1,1)}(T), \quad (2.16)$$

$$\Delta_{sr}^{(2)}(T) = \frac{16}{5} \left[\frac{2M_s M_r}{\pi R T (M_s + M_r)} \right]^{1/2} 10^{-20} \pi \Omega_{sr}^{(2,2)}(T), \quad (2.17)$$

ここで $\pi \Omega_{sr}^{(1,1)}, \pi \Omega_{sr}^{(2,2)}$ は衝突断面積であり、次の通りに求める[28].

$$\pi \Omega_{sr}^{(1,1)} = \left[\exp(D_{\Omega_{sr}^{(1,1)}}) \right] T \left[A_{\Omega_{sr}^{(1,1)}} (\ln T)^2 + B_{\Omega_{sr}^{(1,1)}} \ln T + C_{\Omega_{sr}^{(1,1)}} \right], \quad (2.18)$$

$$\pi \Omega_{sr}^{(2,2)} = \left[\exp(D_{\Omega_{sr}^{(2,2)}}) \right] T \left[A_{\Omega_{sr}^{(2,2)}} (\ln T)^2 + B_{\Omega_{sr}^{(2,2)}} \ln T + C_{\Omega_{sr}^{(2,2)}} \right]. \quad (2.19)$$

係数 $A_{\Omega_{sr}^{(1,1)}}, B_{\Omega_{sr}^{(1,1)}}, C_{\Omega_{sr}^{(1,1)}}, D_{\Omega_{sr}^{(1,1)}}$ と $A_{\Omega_{sr}^{(2,2)}}, B_{\Omega_{sr}^{(2,2)}}, C_{\Omega_{sr}^{(2,2)}}, D_{\Omega_{sr}^{(2,2)}}$ をそれぞれ表 2.1, 表

2.2 に示す。

混合気体の熱伝導係数も粘性係数と同様に Gupta の混合則[27]を用いて求める。

$$\kappa = \kappa_t + \kappa_r, \quad (2.20)$$

$$\kappa_v = k \frac{C_{v,vib}}{R} \sum_{s=mol} \frac{\gamma_s}{\sum_{r \neq e} \gamma_r \Delta_{sr}^{(1)}(T_v) + \gamma_e \Delta_{se}^{(1)}(T_v)}, \quad (2.21)$$

ここで k は Boltzmann 定数, $C_{v,vib}$ は混合気体の振動運動の定積比熱, R は気体定数である。
 κ_t , κ_r はそれぞれ並進温度, 回転温度の熱伝導率であり, 次の通りに求める。

$$\kappa_t = \frac{15}{4} k \sum_{s \neq e} \frac{\gamma_s}{\sum_{r \neq e} a_{sr} \gamma_r \Delta_{sr}^{(1)}(T) + 3.54 \gamma_e \Delta_{se}^{(1)}(T_v)}, \quad (2.22)$$

$$\kappa_r = k \sum_{s=mol} \frac{\gamma_s}{\sum_{r \neq e} \gamma_r \Delta_{sr}^{(1)}(T) + \gamma_e \Delta_{se}^{(1)}(T_v)}, \quad (2.23)$$

$$a_{sr} = 1 + \frac{[1 - (m_s/m_r)][0.45 - 2.54(m_s/m_r)]}{[1 + (m_s/m_r)]^2}. \quad (2.24)$$

各化学種の並進運動, 回転運動, 振動運動に対する定積比熱は次のように定める。

$$c_{v,tr,s} = \frac{3}{2} \frac{R}{M_s},$$

$$c_{v,rot,s} = \begin{cases} \frac{R}{M_s} & \text{for } N_s, O_2, NO, N_2^+, O_2^+ \text{ and } NO^+ \\ 0 & \text{for } N, O, N^+, O^+ \text{ and } e^- \end{cases}, \quad (2.25)$$

$$c_{v,vib,s} = \begin{cases} \frac{R}{M_s} & \text{for } N_s, O_2, NO, N_2^+, O_2^+ \text{ and } NO^+ \\ 0 & \text{for } N, O, N^+, O^+ \text{ and } e^- \end{cases}.$$

各化学種の質量拡散流束は以下のように求める[29].

$$\rho_s u_s = -\rho D_s \frac{\partial X_s}{\partial x} - X_s \sum \left(-\rho D_s \frac{\partial X_s}{\partial x} \right),$$

$$\rho_s v_s = -\rho D_s \frac{\partial X_s}{\partial y} - X_s \sum \left(-\rho D_s \frac{\partial X_s}{\partial y} \right), \quad (2.26)$$

ここで X_s は化学種 s の質量分率であり, 拡散係数 D_s は以下のように求める。

$$D_s = \frac{(1 - X_s)}{\sum_{r \neq s} \frac{X_r}{D_{sr}}}, \quad (2.27)$$

ここで二成分拡散係数 D_{sr} は以下のように与えられる[27].

$$D_{sr} = \frac{kT}{p \Delta_{sr}^{(1)}(T)}, \quad (2.28)$$

$$D_{er} = \frac{kT_v}{p \Delta_{er}^{(1)}(T_v)}. \quad (2.29)$$

2.1.3 熱化学モデル

本研究では熱化学モデルとして, Park の 2 温度モデルを採用する [19]. 並進温度は全エネルギーの定義から求める。

$$E = \sum_{s \neq e^-} \rho_s \left[c_{v,s} T + \frac{1}{2} (u^2 + v^2) \right] + E_v + E_{el} + \sum_{s \neq e^-} \rho_s h_s^0. \quad (2.30)$$

ここで、各化学種の生成エンタルピー h_s^0 を表 2.3 に示す。各化学種の定積比熱は並進-回転運動の定積比熱より求める。

$$c_{v,s} = c_{v,tr,s} + c_{v,rot,s}. \quad (2.31)$$

振動温度 T_v の熱平衡状態における調和振動子の振動内部エネルギーは次式となる。

$$E_v = \sum_s \rho_s e_{v,s}, \quad (2.32)$$

$$e_{v,s} = \frac{R}{M_s} \frac{\theta_{v,s}}{\exp(\theta_{v,s}/T_v) - 1}. \quad (2.33)$$

ここで、 $\theta_{v,s}$ は振動の特性温度であり、表 2.4 にまとめた。それぞれの電子励起状態は振動温度 T_v によって定まる Boltzmann 分布に従う。電子励起エネルギーは以下のように与えられる。

$$E_{el} = \sum_s \rho_s e_{ex,s}, \quad (2.34)$$

$$e_{ex,s} = \frac{R}{M_s} \frac{g_{1,s} \theta_{ex1,s} \exp(-\theta_{ex1,s}/T_v)}{g_{0,s} + g_{1,s} \exp(-\theta_{ex1,s}/T_v)} \quad (s = \text{N, O, N}^+, \text{N}_2^+), \quad (2.35)$$

$$e_{ex,s} = \frac{R}{M_s} \frac{g_{1,s} \theta_{ex1,s} \exp(-\theta_{ex1,s}/T_v) + g_{2,s} \theta_{ex2,s} \exp(-\theta_{ex2,s}/T_v)}{g_{0,s} + g_{1,s} \exp(-\theta_{ex1,s}/T_v) + g_{2,s} \exp(-\theta_{ex2,s}/T_v)} \quad (s = \text{O}_2), \quad (2.36)$$

ここで、 $g_{0,s}$, $g_{1,s}$, $g_{2,s}$ は基底状態、第一および第二励起状態の縮退度、 $\theta_{ex1,s}$, $\theta_{ex2,s}$ は第一および第二励起状態の電子励起特性温度である。これらの定数を表 2.5 にまとめる。

静圧 p 状態方程式から次式となる。

$$p = T \sum_s \rho_s \frac{R}{M_s}. \quad (2.37)$$

ここで、電子の分圧 p_{el} は T_v から求める。

$$p_{el} = \rho_{el} \frac{R}{M_{el}} T_v. \quad (2.38)$$

自由電子の内部エネルギーは以下のように与えられる。

$$E_{el} = \rho_{el} e_{el}, \quad (2.39)$$

$$e_{el} = c_{v,el} T_v. \quad (2.40)$$

また、各化学種の単位質量当たりのエンタルピーは、

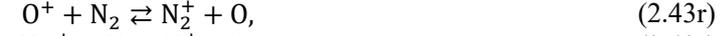
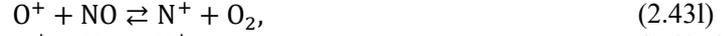
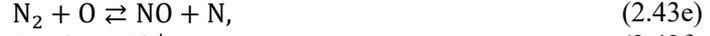
$$h_s = c_{v,s} T + \frac{R}{M_s} T + e_{v,s} + e_{ex,s} + e_{el,s} + h_s^0, \quad (2.41)$$

と定義される。振動-電子励起-自由電子温度は、次式を Newton 反復法で解くことで求める。

$$E_v + E_{el} = \text{a function of } \rho, \rho_s, \text{ and } T_v. \quad (2.42)$$

2.1.4 化学反応モデル

本計算では、次の 21 の化学反応を考慮する。ただし、(2.43t),(2.43u)の電子衝突電離は Boltzmann 平衡計算でのみ使用する。(衝突-輻射モデルでは自由電子衝突遷移反応の一部として扱うため、詳細は 2.2.3 項に後述.)



ここで M は衝突可能性のある化学種を表す。これらの反応に対する反応速度式は次のようになる。

$$R_1 = \sum_s \left[k_{f1} \frac{\rho_{\text{N}_2} \rho_s}{M_{\text{N}_2} M_s} - k_{b1} \frac{\rho_{\text{N}} \rho_{\text{N}} \rho_s}{M_{\text{N}} M_{\text{N}} M_s} \right], \quad (2.44a)$$

$$R_2 = \sum_s \left[k_{f2} \frac{\rho_{\text{O}_2} \rho_s}{M_{\text{O}_2} M_s} - k_{b2} \frac{\rho_{\text{O}} \rho_{\text{O}} \rho_s}{M_{\text{O}} M_{\text{O}} M_s} \right], \quad (2.44b)$$

$$R_3 = \sum_s \left[k_{f3} \frac{\rho_{\text{NO}} \rho_s}{M_{\text{NO}} M_s} - k_{b3} \frac{\rho_{\text{N}} \rho_{\text{O}} \rho_s}{M_{\text{N}} M_{\text{O}} M_s} \right], \quad (2.44c)$$

$$R_4 = k_{f4} \frac{\rho_{\text{NO}} \rho_{\text{O}}}{M_{\text{NO}} M_{\text{O}}} - k_{b4} \frac{\rho_{\text{O}_2} \rho_{\text{N}}}{M_{\text{O}_2} M_{\text{N}}}, \quad (2.44d)$$

$$R_5 = k_{f5} \frac{\rho_{\text{N}_2} \rho_{\text{O}}}{M_{\text{N}_2} M_{\text{O}}} - k_{b5} \frac{\rho_{\text{NO}} \rho_{\text{N}}}{M_{\text{NO}} M_{\text{N}}}, \quad (2.44e)$$

$$R_6 = k_{f6} \frac{\rho_{\text{N}} \rho_{\text{O}}}{M_{\text{N}} M_{\text{O}}} - k_{b6} \frac{\rho_{\text{NO}^+} \rho_{e^-}}{M_{\text{NO}^+} M_{e^-}}, \quad (2.44f)$$

$$R_7 = k_{f7} \frac{\rho_{\text{O}} \rho_{\text{O}}}{M_{\text{O}} M_{\text{O}}} - k_{b7} \frac{\rho_{\text{O}_2^+} \rho_{e^-}}{M_{\text{O}_2^+} M_{e^-}}, \quad (2.44g)$$

$$R_8 = k_{f8} \frac{\rho_{\text{N}} \rho_{\text{N}}}{M_{\text{N}} M_{\text{N}}} - k_{b8} \frac{\rho_{\text{N}_2^+} \rho_{e^-}}{M_{\text{N}_2^+} M_{e^-}}, \quad (2.44h)$$

$$R_9 = k_{f9} \frac{\rho_{NO^+} \rho_O}{M_{NO^+} M_O} - k_{b9} \frac{\rho_{N^+} \rho_{O_2^+}}{M_{N^+} M_{O_2^+}}, \quad (2.44i)$$

$$R_{10} = k_{f10} \frac{\rho_{N^+} \rho_{N_2}}{M_{N^+} M_{N_2}} - k_{b10} \frac{\rho_{N_2^+} \rho_N}{M_{N_2^+} M_N}, \quad (2.44j)$$

$$R_{11} = k_{f11} \frac{\rho_{O_2^+} \rho_N}{M_{O_2^+} M_N} - k_{b11} \frac{\rho_{N^+} \rho_{O_2}}{M_{N^+} M_{O_2}}, \quad (2.44k)$$

$$R_{12} = k_{f12} \frac{\rho_{O^+} \rho_{NO}}{M_{O^+} M_{NO}} - k_{b12} \frac{\rho_{N^+} \rho_{O_2}}{M_{N^+} M_{O_2}}, \quad (2.44l)$$

$$R_{13} = k_{f13} \frac{\rho_{O_2^+} \rho_{N_2}}{M_{O_2^+} M_{N_2}} - k_{b13} \frac{\rho_{N_2^+} \rho_{O_2}}{M_{N_2^+} M_{O_2}}, \quad (2.44m)$$

$$R_{14} = k_{f14} \frac{\rho_{O_2^+} \rho_O}{M_{O_2^+} M_O} - k_{b14} \frac{\rho_{O_2} \rho_N}{M_{O_2} M_N}, \quad (2.44n)$$

$$R_{15} = k_{f15} \frac{\rho_{NO^+} \rho_N}{M_{NO^+} M_N} - k_{b15} \frac{\rho_{O^+} \rho_{N_2}}{M_{O^+} M_{N_2}}, \quad (2.44o)$$

$$R_{16} = k_{f16} \frac{\rho_{NO^+} \rho_{O_2}}{M_{NO^+} M_{O_2}} - k_{b16} \frac{\rho_{O_2^+} \rho_{NO}}{M_{O_2^+} M_{NO}}, \quad (2.44p)$$

$$R_{17} = k_{f17} \frac{\rho_{NO^+} \rho_O}{M_{NO^+} M_O} - k_{b17} \frac{\rho_{O_2^+} \rho_N}{M_{O_2^+} M_N}, \quad (2.44q)$$

$$R_{18} = k_{f18} \frac{\rho_{O^+} \rho_{N_2}}{M_{O^+} M_{N_2}} - k_{b18} \frac{\rho_{N_2^+} \rho_O}{M_{N_2^+} M_O}, \quad (2.44r)$$

$$R_{19} = k_{f19} \frac{\rho_{NO^+} \rho_N}{M_{NO^+} M_N} - k_{b19} \frac{\rho_{N_2^+} \rho_O}{M_{N_2^+} M_O}, \quad (2.44s)$$

$$R_{20} = k_{f20} \frac{\rho_O \rho_{e^-}}{M_O M_{e^-}} - k_{b20} \frac{\rho_{O^+} \rho_{e^-} \rho_{e^-}}{M_{O^+} M_{e^-} M_{e^-}}. \quad (2.44t)$$

$$R_{21} = k_{f21} \frac{\rho_N \rho_{e^-}}{M_N M_{e^-}} - k_{b21} \frac{\rho_{N^+} \rho_{e^-} \rho_{e^-}}{M_{N^+} M_{e^-} M_{e^-}}, \quad (2.44u)$$

ここで、順反応、逆反応速度係数は以下の式より求める[19].

$$k_{fn}(T_a) = C_f T_a^\eta \exp\left(-\frac{\theta_{ds}}{T_a}\right), \quad (2.45)$$

$$k_{bn}(T_a) = \frac{k_{fn}(T_a)}{K_{eq}(T_a)}. \quad (2.46)$$

本研究で用いる C_f, η, θ_{ds} の各値を表 2.6 に示す. 平衡定数 K_{eq} は、次の式より求める[19].

$$K_{eq} = \exp\left(A_1 Z + A_2 + A_3 \ln\left(\frac{1}{Z}\right) + \frac{A_4}{Z} + \frac{A_5}{Z^2}\right), \quad (2.47)$$

$$Z = \frac{T_a}{10,000}. \quad (2.48)$$

ここで用いる係数 A_i の値を表 2.7 に示す. 有効温度 T_a は順反応に対して次のように定義する.

$$\text{Dissociation reactions: } T_a = \sqrt{TT_v}, \quad (2.49)$$

$$\text{NO Exchange reactions: } T_a = T, \quad (2.50)$$

$$\text{Associative ionization reactions: } T_a = T, \quad (2.51)$$

$$\text{Charge exchange reactions: } T_a = T, \quad (2.52)$$

$$\text{Electron-impact ionization reactions: } T_a = T_v. \quad (2.53)$$

逆反応に対しては, $T_a = T$ を用いる. 式(2.6)の化学反応による生成項 W_s は次のように与えられる.

$$W_O = M_O(2R_2 + R_3 - R_4 - R_5 - R_6 - 2R_7 - R_9 - R_{14} - R_{17} + R_{18} + R_{19} - R_{20}), \quad (2.54a)$$

$$W_N = M_N(2R_1 + R_3 + R_4 + R_5 - R_6 - 2R_8 + R_{10} - R_{11} - R_{15} + R_{17} - R_{19} - R_{21}), \quad (2.54b)$$

$$W_{NO} = M_{NO}(-R_3 - R_4 + R_5 - R_{12} + R_{16}), \quad (2.54c)$$

$$W_{O_2} = M_{O_2}(-R_2 + R_4 + R_9 + R_{11} + R_{12} + R_{13} + R_{14} - R_{16}), \quad (2.54d)$$

$$W_{N_2} = M_{N_2}(-R_1 - R_5 - R_{10} - R_{13} + R_{15} - R_{18}), \quad (2.54e)$$

$$W_{O^+} = M_{O^+}(-R_{12} + R_{14} + R_{15} - R_{18} + R_{20}), \quad (2.54f)$$

$$W_{N^+} = M_{N^+}(R_9 - R_{10} + R_{11} + R_{12} + R_{21}), \quad (2.54g)$$

$$W_{NO^+} = M_{NO^+}(R_6 - R_9 - R_{15} - R_{16} - R_{17} - R_{19}), \quad (2.54h)$$

$$W_{O_2^+} = M_{O_2^+}(R_7 - R_{11} - R_{13} - R_{14} + R_{16} + R_{17}), \quad (2.54i)$$

$$W_{N_2^+} = M_{N_2^+}(R_8 + R_{10} + R_{13} + R_{18} + R_{19}), \quad (2.54j)$$

$$W_{e^-} = M_{e^-}(R_6 + R_7 + R_8 + R_{20} + R_{21}). \quad (2.54k)$$

2.1.5 エネルギー交換

式(2.6)の振動-電子励起-自由電子の内部エネルギーの生成項は以下のように記述される.

$$W_v = Q_{T-v} + Q_{D-v} + Q_{T-el} + Q_{E-E} + Q_{E-Ex} + Q_{E-el}, \quad (2.55)$$

まず, Q_{T-v} は並進-振動エネルギー交換率である. これは Park が修正した Landau-Teller 緩和方程式を用いて以下の式で求める.

$$Q_{T-v} = \sum_{s=\text{molecule}} Q_{T-v_s}, \quad (2.56)$$

$$Q_{T-v_s} = \rho_s \frac{e_{v,s}^*(T) - e_{v,s}}{\tau_{sLT} + \tau_{c,s}} \left| \frac{T_{shock} - T_v}{T_{shock} - T_{vshock}} \right|^{s-1}. \quad (2.57)$$

ここで,

$$s = 3.5 \exp\left(-\frac{50000}{T_{shock}}\right), \quad (2.58)$$

また, T_{shock} は並進-回転温度の最大値であり, 以下のように定義する.

$$T_{shock} = \text{Max}(300, T). \quad (2.59)$$

モル平均 Landau-Teller 振動緩和時間は次式で与えられる.

$$\tau_{sLT} = \frac{\sum_r X_r}{\sum_r \left(\frac{X_r}{\tau_{sLT}}\right)}. \quad (2.60)$$

ここで,

$$\tau_{sLT} = \frac{1}{p} \exp\left(AT^{-\frac{1}{3}} - B\right), \quad p \text{ in atm.} \quad (2.61)$$

定数 A , B を表 2.8 に示す. また, 化学種 s の衝突制限緩和時間 $\tau_{c,s}$ は次のように与えられる.

$$\tau_{c,s} = \frac{1}{c_s \sigma_{sr} n_s}, \quad (2.62)$$

$$\sigma_{sr} = 10^{-20} \left(\frac{50,000}{T}\right)^2, \quad (2.63)$$

$$c_s = \sqrt{8RT/\pi M_s}. \quad (2.64)$$

次に、 Q_{D-v} は、解離に関するエネルギー交換を表し、次式で与えられる。

$$Q_{D-v} = \sum_{s=\text{molecule}} \widehat{D}_s W_s. \quad (2.65)$$

本研究では選択的解離モデルを用い、解離・再結合する分子の平均振動エネルギー \widehat{D}_s は、分子の解離エネルギー \widehat{D}_s の30%であると仮定する。解離エネルギーを表2.9に示す。

$$\frac{\widehat{D}_s}{\widehat{D}_s} = 0.3. \quad (2.66)$$

Q_{T-el} は並進-電子エネルギー交換を表し、以下のようになる。

$$Q_{T-el} = 3\rho_e - R(T - T_v) \sum_{s \neq e^-} \frac{v_s}{M_s}, \quad (2.67)$$

$$v_s = \frac{\rho_s}{M_s} N_A \sigma_{er} \sqrt{\frac{8RT_{el}}{\pi M_{e^-}}}. \quad (2.68)$$

電子と重粒子 s の間のエネルギー伝達断面積 σ_{er} は次式で与えられる。

$$\sigma_{er} = \begin{cases} 1.0 \times 10^{-20} & (r = \text{neutrals}) \\ \frac{\pi \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\right)^2}{3 k^2 T_v^2} \ln \left(\frac{2 k^3 T_v^3}{3 \pi N_A \frac{\rho_e}{M_e} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\right)^3} \right) & (r = \text{ions}) \end{cases} \quad (2.69)$$

ここで、 e は電気素量、 ϵ_0 は真空の誘電率である。

Q_{E-E} は電子衝突エネルギー交換であり、次式で与えられる。

$$Q_{E-E} = \sum_{s=O^+, N^+} Q_{E-E_s}, \quad (2.70)$$

$$Q_{E-E_s} = -e_{\infty} W_s. \quad (2.71)$$

ここで、 e_{∞} はイオン化ポテンシャルである。

Q_{E-Ex} は電子励起エネルギー交換であり、次式で与えられる。

$$Q_{E-Ex} = \sum_{s=\text{molecule}} Q_{e-Ex_s}, \quad (2.72)$$

$$Q_{E-Ex_s} = e_{ex_s} W_s. \quad (2.73)$$

Q_{E-el} は電離反応で生成される自由電子のエネルギーであり、次式で与えられる。

$$Q_{E-el} = e_{el} W_{el}. \quad (2.74)$$

2.1.6 支配方程式の離散化

離散化はセル中心有限体積法により行う。数値流束は SLAU 風上スキーム[30]を用いて評価し、空間制度は MUSCL 法[31]により 2 次精度化を行う。また時間積分は 1 次精度 Euler 陽解法で行う。

2.2 衝突輻射モデル

本研究では衝突輻射モデルとして、荻野らによって開発された空気プラズマ用の衝突輻射モデル[32, 33]を用いる。

2.2.1 原子・分子の電子励起準位

本計算では、N, O, N₂, O₂, NO, N⁺, O⁺, N₂⁺, O₂⁺, NO⁺, e⁻の11化学種を考慮に入れる。表2.10に本モデルで考慮する電子励起準位を示す。電子励起準位は、 p 状態における縮退度 g_p とエネルギー準位 E_p とを縮退させ、次式で定義する i 状態における縮退度 G_i とエネルギー準位 E_i にまとめる。

$$G_i = \sum_{p \in i} g_p, E_i = \frac{1}{G_i} \sum_{p \in i} g_p E_p, \quad (2.75)$$

縮退させた状態 i の数密度を n_i と表す。 p 状態の数密度を同様に n_p とすると、励起平衡になる場合二者は次のような関係を満たす。

$$n_p = \frac{n_i}{G_i} g_p \exp\left(\frac{E_i - E_p}{kT_{el}}\right). \quad (2.76)$$

量子状態 p の縮退度 g_p とエネルギー準位 E_p はNational Institute of Standards and Technology (NIST)のデータベース[34]から得る。分子種は、Teuletらと同様の電子励起準位を採用する[35]。また、回転、振動モードとの相互作用は無視する。各モードの分配関数は分離できて、それぞれ次のように定義する。

$$Q_i(T_{el}) = g_e g_N \exp\left(-\frac{hcT_i}{kT_v}\right) \quad (2.77)$$

$$Q_v(T_v) = \sum_{v=0}^{v_{max}(i)} \exp\left(-\frac{hcG(v)}{kT_v}\right), Q_r(T) = \sum_{j=0}^{\infty} (2j+1) \exp\left(-\frac{hcF_v(j)}{kT}\right) \approx \frac{kT}{B}, \quad (2.78)$$

ここで Q_i は電子励起、 Q_v は振動、 Q_r は回転の分配関数である。 T_i は電子励起エネルギー、 G は振動エネルギー、 F_v は回転エネルギー、 g_N は核スピン多重度、 h はプランク定数、 c は光速、 B は剛体回転子の慣性モーメントに相当する展開係数を表す。 $v_{max}(i)$ は振動励起準位 v の最大値である。エネルギー状態を記述するための分子の分光定数は、猿橋のデータベース[36]を用いる。

2.2.2 輻射遷移反応

原子と分子の輻射脱励起の速度定数には、猿橋のデータベース[36]を用いる。原子の線輻射について、縮退させた状態 i と j ($i > j$)間の輻射脱励起による遷移確率 $A(i, j)$ は縮退させていない準位 p と q ($p > q$)間の遷移確率 $A(p, q)$ を用いて次のように表す。

$$A(i, j) = \frac{1}{G_i} \sum_{p \in i} g_p \sum_{q \in j} A(p, q). \quad (2.79)$$

考慮する分子のバンドスペクトルを表2.11にまとめる。温度 T_v で振動平衡が成立する

と仮定すると，等価遷移確率 $A(i, j; T_v)$ は次のように計算できる．

$$A(i, j; T_v) = \sum_{v'} \exp\left(-\frac{hc\mathcal{G}(v')}{kT_v}\right) \sum_{v''} A_{v'v''} \left(\sum_{v'} \exp\left(-\frac{hc\mathcal{G}(v)}{kT_v}\right) \right)^{-1}. \quad (2.80)$$

輻射再結合の速度定数 $R_r(i, j; T_{el})$ は，Nahar の再結合速度定数のデータベース[37, 38] を使用する．

吸収励起の速度定数 R_{abs} は次式で求める．

$$R_{abs} = B_{ij} \int u_\lambda \Phi_{ij}(\lambda) d\lambda, \quad (2.81)$$

B_{ij} は Einstein の B 係数， u_λ は輻射エネルギー密度， Φ_{ij} は線輪郭を決める関数である．

B 係数は A 係数との詳細つり合いの関係より次式で求められる．

$$B(i, j) = \frac{\lambda_{ij}^3}{8\pi h} A(i, j), \quad (2.82)$$

ここで， λ_{ij} は $i-j$ 間の遷移によって放射される光の中心波長である．輻射エネルギー密度 u_λ は 2.3 節で後述する計算により求める．

2.2.3 自由電子衝突反応

電子衝突励起の衝突断面積は Drawin の衝突断面積[39] を採用する．これは，二つの量子状態間の選択律によって次のように示される．

1. 電気双極子許容遷移

$$\sigma(i, j; E) = 4\pi a_0^2 a_{ij} f_{ij} \xi \left(\frac{E_H}{E_{ji}}\right)^2 \frac{U_{ji} - 1}{U_{ji}^2} \ln\left(\frac{5}{4} U_{ji}\right), \quad (2.83)$$

2. スピン多重度の変化しない禁制遷移

$$\sigma(i, j; E) = 4\pi a_0^2 \alpha_{ij}^P \xi \frac{U_{ji} - 1}{U_{ji}^2}, \quad (2.84)$$

3. スピン多重度の変化する禁制遷移

$$\sigma(i, j; E) = 4\pi a_0^2 \alpha_{ij}^S \xi \frac{U_{ji}^2 - 1}{U_{ji}^5}. \quad (2.85)$$

$U_{ji} = E/E_{ji}$ は規格化された電子の運動エネルギー， a_0 は第一ボーア半径， E_H は水素の基底状態におけるイオン化エネルギー， ξ は i 準位での光学電子の数， f_{ij} は吸収振動子強度を表す．無次元パラメータ α_{ij} ， α_{ij}^P ， α_{ij}^S は実験に一致するように選ぶ[36, 40, 41]．電子のエネルギー分配関数が Maxwell 分布に従うと仮定すると，電子励起の速度定数は次のように表される．

$$\begin{aligned}
E_a(i, j; T_e) &= \left(\frac{8}{\pi\mu}\right)^{\frac{1}{2}} (kT_e)^{-\frac{3}{2}} \int_{E_{ji}}^{\infty} E\sigma(i, j; E) \exp\left(-\frac{E}{kT_e}\right) dE \\
&= \begin{cases} \left(\frac{128\pi}{\mu}\right)^{\frac{1}{2}} a_0^2 \alpha_{ij} f_{ij} \xi \left(\frac{E_H}{E_{ji}}\right)^2 (kT_e)^{\frac{1}{2}} u_x \Psi_1(u_x) & (\text{許容}) \\ \left(\frac{128\pi}{\mu}\right)^{\frac{1}{2}} a_0^2 \alpha_{ij}^p \xi (kT_e)^{\frac{1}{2}} u_x \Psi_2(u_x) & (\text{パリティ禁制}) \\ \left(\frac{128\pi}{\mu}\right)^{\frac{1}{2}} a_0^2 \alpha_{ij}^s \xi (kT_e)^{\frac{1}{2}} u_x \Psi_3(u_x) & (\text{スピン禁制}) \end{cases}
\end{aligned} \tag{2.86}$$

ここで $u_x = E_{ji}/kT_e$ である。また μ は原子あるいは電子の換算質量を表す。

$\Psi_1(u_x), \Psi_2(u_x), \Psi_3(u_x)$ は補助的な関数で、次のように表される。

$$\Psi_1(u_x) \simeq \frac{\exp(-u_x)}{1+u_x} \left[\frac{1}{20+u_x} + \ln\left(\frac{5}{4}\left(1+\frac{1}{u_x}\right)\right) \right], \tag{2.87}$$

$$\Psi_2(u_x) = \exp(-u_x) - u_x \varepsilon_1(u_x), \tag{2.88}$$

$$\Psi_3(u_x) = u_x \varepsilon_2(u_x) - u_x^3 \varepsilon_4(u_x). \tag{2.89}$$

$\varepsilon_n(u_x) = \int_{u_x}^{\infty} e^{-t}/t^n dt$ は指数積分である。 $\varepsilon_1(u_x)$ の値は、Barry らの近似関数を用いる [42]。

$\varepsilon_2(u_x)$ と $\varepsilon_4(u_x)$ の値は、次の反復計算から得る。

$$\varepsilon_{n+1}(u_x) = \frac{1}{n} \left(\frac{\exp(-u_x)}{u_x^n} - \varepsilon_n(u_x) \right). \tag{2.90}$$

逆反応と脱励起の速度定数は、詳細釣り合いの原理から決定する。

$$E(j, i; T_v) = E(i, j; T_{el}) \frac{G_i}{G_j} \exp\left(-\frac{E_i - E_j}{kT_v}\right). \tag{2.91}$$

自由電子衝突によるイオン化の衝突断面積は Drawin の衝突断面積 [43] を用いる。振動子強度は式(2.83)と同様の値を採用し、イオン化の速度定数 $I(i, j; T_{el})$ は次のように表される。

$$\begin{aligned}
I(i, j; T_v) &= \left(\frac{8}{\pi\mu}\right)^{\frac{1}{2}} (kT_v)^{-\frac{3}{2}} \int_{E_{ji}}^{\infty} E\sigma(i, j; E) \exp\left(-\frac{E}{kT_v}\right) dE \\
&= \left(\frac{128\pi}{\mu}\right)^{\frac{1}{2}} a_0^2 \alpha_{ij} \xi \left(\frac{E_H}{E_{ji}}\right)^2 (kT_v)^{\frac{1}{2}} u_x \Psi_1(u_x).
\end{aligned} \tag{2.92}$$

三体再結合の速度定数 $R_3(j, i; T_{el})$ は、式(2.89)から詳細釣り合いの原理を用いて次のように表す。

$$R_3(j, i; T_v) = I(i, j; T_v) \frac{G_i}{2G_j} \frac{h^3}{(2\pi m_e)^2} (kT_v)^{-\frac{3}{2}} \exp\left(-\frac{E_i - E_j - \chi}{kT_v}\right). \tag{2.93}$$

m_e は電子質量である。 χ はイオン化ポテンシャルの減少を表し、Bourdon と Vervisch のモデル [44] を用いる。

$$\chi = 2.38 \times 10^{-4} \left(\frac{n_{e,\max}}{T_{v,\min}} \right)^{\frac{1}{2}} \text{ (cm}^{-1}\text{)}. \quad (2.94)$$

二原子分子の電子衝突過程では、Bacri の Weighted Total Cross Section (WTCS) method [45,46] を用いた Teulet らの速度定数を採用する[35]. 逆方向遷移速度定数は、原子と同様に詳細釣り合いの原理に従って求める. ただし、低温域での計算の安定化のため、電子温度 T_{el} の下限を 3,000K とした.

2.2.4 重粒子衝突反応

2 温度モデル[19,20] を用いて、表 2.7 に示す 21 化学反応の内、電子衝突電離以外の 19 化学反応、および表 2.12 の 9 衝突励起反応を扱う. 順方向速度定数 $k_f(T_a)$ と逆方向速度定数 $k_b(T_a)$ は、次のように表される.

$$k_f(T_a) = C_f T_a^\eta \exp\left(-\frac{\theta_{ds}}{T_a}\right), k_b(T_a) = \frac{k_f(T_a)}{K_{eq}(T_a)}. \quad (2.95)$$

有効温度 T_a , アレニウスパラメータ C_f , η , θ_{ds} は表 2.6 に示す. 解離, 解離性再結合, 電荷交換には Park の速度定数[19] を, NO 交換反応には, Bose と Candler のモデル [47,48] を採用する. 衝突励起反応では Starik のモデル[49]を用いる. 平衡定数 K_{eq} として, 化学反応については式(2.47)と同様に Park がまとめた CEA 値[20]を用い, 衝突励起反応については詳細釣り合いから求める.

2.2.5 遷移レート方程式

化学種 s の i 励起準位の数密度 $n_{s,i}$ は, 保存則を用いて計算される.

$$\frac{dn_{s,i}}{dt} = \sum \text{population processes} - \sum \text{depopulating processes}. \quad (2.96)$$

生成項は数密度の時間あたりの増減量であり, 関わる遷移反応の総和で表される. 熱非平衡性を考慮して, 並進・回転温度 T と振動・電子励起・自由電子温度 T_v からなる 2 温度モデルを採用する. 式(2.96) の右辺の遷移速度定数は, (T, T_v) の関数として表される. 自由電子の数密度は, 部分電離プラズマのために電荷中性を仮定し次のように表す.

$$n_e = n_{N^+} + n_{O^+} + 2n_{N_2^+} + 2n_{O_2^+} + n_{NO^+}. \quad (2.97)$$

時間積分には Extended Robustness-Enhanced Numerical Algorithm (ERENA)を用いる[50]. これは堅牢かつ高速な陽解法で stiff な常微分方程式を安定に解くことができる.

2.3 輻射計算法

Line-by-line 計算により、波長域 1,500~6,000Å における輻射スペクトルを 9,000 波長点で求める。輻射に寄与する化学種として N, N⁺, O, O⁺, N₂, O₂, NO, N₂⁺ を考慮する。スペクトル計算は、松山の構築した計算コード[51]を電子励起非平衡計算用に拡張したものを、分光データは NIST[34]、および Nahar の光電離断面積のデータベース[37, 38]から引用する。

2.3.1 放射係数・吸収係数

束縛-束縛遷移において、波長 λ に関する放射係数 ε_λ および吸収係数 κ_λ は次式で与えられる。

$$\varepsilon_\lambda = n_i \frac{hcA(i,j)}{4\pi\lambda_{ij}} \phi(\lambda), \quad (2.98)$$

$$\kappa_\lambda = \frac{h\lambda_{ij}}{c} (n_j B(j,i) - n_i B(i,j)) \phi(\lambda). \quad (2.99)$$

本研究では電子励起非平衡性を考慮した輻射スペクトルを計算するため、 n_i, n_j には衝突輻射モデルによって計算された値を用いる。

束縛-自由遷移において、波長 λ に関する放射係数 ε_λ および吸収係数 κ_λ は次式で与えられる。

$$\varepsilon_{\lambda,b-f} = n_e n_i \frac{h^4 c^2}{(2\pi m_e k T_{el})^{3/2}} \frac{g_j \sigma_{ji}(\lambda)}{g_i \lambda^5} \exp\left(-\frac{hc/\lambda - I_{ij}}{k T_{el}}\right), \quad (2.100)$$

$$\kappa_{\lambda,b-f} = n_j \sigma_{ji}(\lambda) (1 - R_{bf}). \quad (2.101)$$

σ_{ji} は光電離衝突断面積、 I_{ij} はイオン化エネルギーである。束縛-束縛遷移のときと同様に、 n_e, n_i, n_j は衝突輻射モデルで求めた値を用いる。 R_{bf} は誘導放射による吸収の減少分であり次式で表される。

$$R_{bf} = \frac{n_e n_i}{n_j} \frac{g_i}{2g_j} \left(\frac{h^2}{2\pi m_e k T_{el}}\right)^{\frac{3}{2}} \exp\left(-\frac{hc/\lambda - I_{ij}}{k T_{el}}\right). \quad (2.102)$$

なお、自由-自由遷移による輻射は微弱なため、本研究では計算しない。

2.3.2 輻射輸送

本研究では接平板近似を用いた一次元輻射輸送を解くことで流れ場に吸収されるエネルギー量を求める[52]。この場合の輻射輸送方程式は次のようになる。

$$\frac{l}{\kappa_\lambda} \frac{\partial I_\lambda}{\partial s} = \frac{\varepsilon_\lambda}{\kappa_\lambda} - I_\lambda, \quad (2.103)$$

ここで、 s は光線に沿った座標、 l は方向余弦 ($l = \cos\varphi$)、 φ は接平板の垂直軸と光線のなす角、 I_λ は波長 λ における輻射強度である。上式の形式解は次式で与えられる。

$$I_\lambda(s, l) = I_\lambda(s_b, l) \exp\left[-\frac{\tau_\lambda(s) - \tau_\lambda(s_b)}{l}\right] + \int_{s_b}^s \frac{\varepsilon_\lambda}{l} \exp\left[-\frac{\tau_\lambda(s) - \tau_\lambda(\hat{s})}{l}\right] d\hat{s}. \quad (2.104)$$

ここで、添え字 b は境界を表す。また、 $\tau_\lambda(s)$ は次式で与えられる光学厚さである。

$$\tau_\lambda(s) = \int_{s_b}^s \kappa_\lambda d\hat{s}. \quad (2.105)$$

波長 λ に関する輻射熱流束 q_λ は輻射強度 I_λ を立体角 Ω について積分することによって求められる。接平板近似の場合、次式となる。

$$\begin{aligned} q_\lambda &= \int_{4\pi} I_\lambda l d\Omega \\ &= \int_0^{2\pi} \int_0^\pi I_\lambda l \sin\varphi d\varphi d\theta \\ &= 2\pi \int_0^\pi I_\lambda l \sin\varphi d\varphi, \\ &= 2\pi \int_{-1}^1 I_\lambda l dl \\ &= q_\lambda^+ - q_\lambda^- \end{aligned} \quad (2.106)$$

ここで、 q_λ^+ は衝撃波方向、 q_λ^- は壁面方向の熱流束である。輻射エネルギー生成項 Q_{rad} は次式から求める。

$$Q_{rad} = \nabla \int_0^\infty q_\lambda d\lambda = \int_0^\infty [4\pi\varepsilon_\lambda - \kappa_\lambda q_\lambda] d\lambda. \quad (2.107)$$

また、衝突輻射モデルの吸収励起遷移で用いられる輻射エネルギー密度 u_λ は次式で表される。

$$u_\lambda = \frac{1}{c} q_\lambda. \quad (2.108)$$

2.4 衝突輻射モデルと流体計算の結合方法

表 2.10 で示した衝突輻射モデルで扱う 219 状態全てを、流体の支配方程式(式(2.1))で直接取り扱うことは計算コストが膨大となるため困難である。これは、状態数が多いだけでなく、基底状態と高励起状態では密度が 10 桁以上異なることも多く、数値誤差により高励起状態の密度が正確に取り扱えないためである。よって、本研究では流体の質量保存則は 11 の化学種ごとに解き、別に化学種ごとの励起状態分布 $P_{s,i}$ を計算する。 $P_{s,i}$ は次のように書ける。

$$P_{s,i} = \frac{\rho_{s,i}}{\rho_s} = \frac{n_{s,i}}{n_s},$$

$$\rho_s = \sum_i \rho_{s,i}, \quad n_s = \sum_i n_{s,i}, \quad (2.109)$$

ここで ρ, n は密度と数密度で、添え字 s, i は化学種と励起状態のインデックスである。化学種ごとの密度 ρ_s と励起状態の密度比率 $P_{s,i}$ の時間更新方法について述べる。簡単のため、流体は一次元とし、 j セルにおける $k \rightarrow k+1$ ステップの更新について示す。

まず、衝突輻射モデルにより Δt 秒後の j セルの化学組成が得られる。

$$\rho_s^n(j), P_{s,i}^n(j) \rightarrow \text{CR model} \rightarrow \rho_s^*(j), P_{s,i}^*(j).$$

次に、 $j-1, j+1$ セルからの移流を考慮し、先に $\rho_s^{n+1}(j)$ を決定する。ここで、 $\hat{f}(a, b)$ はセル a, b 境界での質量流束を示し、 $j \rightarrow j+1$ 方向を正とする。

$$\rho_s^{n+1}(j) = \rho_s^*(j) + (\hat{f}_s(j-1, j) - \hat{f}_s(j, j+1))\Delta t, \quad (2.110)$$

$\rho_s^{n+1}(j)$ の決定後、一時的な変数 $\rho_{s,i}^{n+1}(j)$ を決定する。

$$\begin{aligned} \rho_{s,i}^{n+1}(j) = & \rho_s^*(j)P_{s,i}^*(j) + \min(\hat{f}_s(j-1, j)\Delta t, 0)P_{s,i}^*(j) \\ & + \min(\hat{f}_s(j, j+1)\Delta t, 0)P_{s,i}^*(j+1) \\ & + \max(\hat{f}_s(j-1, j)\Delta t, 0)P_{s,i}^*(j-1) \\ & + \max(\hat{f}_s(j, j+1)\Delta t, 0)P_{s,i}^*(j). \end{aligned} \quad (2.111)$$

最後に $\rho_{s,i}^{n+1}(j)$ を用いて $P_{s,i}^{n+1}(j)$ を更新する。

$$P_{s,i}^{n+1}(j) = \frac{\rho_{s,i}^{n+1}(j)}{\sum_i \rho_{s,i}^{n+1}(j)}, \quad (2.112)$$

ただし、 $\rho_{s,i}^{n+1}(j)$ が全密度 $\rho^{n+1}(j)$ に対して十分小さい時は、全て基底状態にあるとみなす。

$$P_{s,i}^{n+1}(j) = 1, P_{s,i \neq 1}^{n+1}(j) = 0. \quad (2.113)$$

2.5 衝撃波管内流れの再現方法

衝撃波管内を垂直衝撃波が進行する流れについて衝撃波視点で考えると、衝撃波に対して主流が流入する流れとみなせる。そこで本研究では、衝撃層厚さよりも十分に大きな曲

率半径をもつ半球壁へ衝撃波進行速度と同速の主流が流入する流れ場を計算し、淀み流線上の流れを求めることで衝撃波管内流れを模擬する。

表 2.1 衝突断面積 $\pi\Omega_{sr}^{(1,1)}$ の係数[28]

衝突する 化学種の組	$A_{\Omega_{sr}^{(1,1)}}$	$B_{\Omega_{sr}^{(1,1)}}$	$C_{\Omega_{sr}^{(1,1)}}$	$D_{\Omega_{sr}^{(1,1)}}$	適応可能な 温度範囲(K)
$N_2 - N_2$	0	-0.0112	-0.1182	4.8464	1,000 - 30,000
$O_2 - N_2$	0	-0.0465	0.5729	1.6185	1,000 - 30,000
$O_2 - O_2$	0	-0.0410	0.4977	1.8302	1,000 - 30,000
$N - N_2$	0	-0.0194	0.0119	4.1055	1,000 - 30,000
$N - O_2$	0	-0.0179	0.0152	3.9996	1,000 - 30,000
$N - N$	0	-0.0033	-0.0572	5.0452	1,000 - 30,000
$O - N_2$	0	-0.0139	-0.0825	4.5785	1,000 - 30,000
$O - O_2$	0	-0.0226	0.1300	3.3363	1,000 - 30,000
$O - N$	0	0.0048	-0.4195	5.7774	1,000 - 30,000
$O - O$	0	-0.0034	-0.0572	4.9901	1,000 - 30,000
$NO - N_2$	0	-0.0291	0.2324	3.2082	1,000 - 30,000
$NO - O_2$	0	-0.0438	0.5352	1.7252	1,000 - 30,000
$NO - N$	0	-0.0185	0.0118	4.0590	1,000 - 30,000
$NO - O$	0	-0.0179	0.0152	3.9996	1,000 - 30,000
$NO^+ - N_2$	0	-0.0364	0.3825	2.4718	1,000 - 30,000
$NO^+ - O_2$	0	0	-0.4000	6.8543	1,000 - 30,000
$NO^+ - N$	0	0	-0.4000	6.8543	1,000 - 30,000
$NO^+ - O$	0	0	-0.4000	6.8543	1,000 - 30,000
$NO^+ - NO$	0	-0.0047	-0.0551	4.8737	1,000 - 30,000
$NO^+ - NO^+$	0	0	-2.0000	23.8237	1,000 - 30,000
$e^- - N_2$	0.1147	-2.8945	24.5080	-67.3691	1,000 - 30,000
	0.0241	-0.3467	1.3887	-0.0110	1,000 - 9,000
$e^- - O_2$	0.0025	-0.0742	0.7235	-0.2116	9,000 - 30,000
$e^- - N$	0	0	0	1.6094	1,000 - 30,000
	0.0164	-0.2431	1.1231	-1.5561	1,000 - 9,000
$e^- - O$	-0.2027	5.6428	-51.5646	155.6091	9,000 - 30,000
	-0.2202	5.2265	-40.5659	104.7126	1,000 - 8,000
$e^- - NO$	-0.2871	8.3757	-81.3787	265.6292	8,000 - 30,000
$e^- - NO^+$	0	0	-2.0000	23.8237	1,000 - 30,000
$e^- - e^-$	0	0	-2.0000	23.8237	1,000 - 30,000

表 2.1 続き

衝突する 化学種の組	$A_{\Omega_{SR}^{(1,1)}}$	$B_{\Omega_{SR}^{(1,1)}}$	$C_{\Omega_{SR}^{(1,1)}}$	$D_{\Omega_{SR}^{(1,1)}}$	適応可能な 温度範囲(K)
$N^+ - N_2$	0	0	-0.4000	6.8543	1,000 - 30,000
$N^+ - O_2$	0	0	-0.4000	6.8543	1,000 - 30,000
$N^+ - N$	0	-0.0033	-0.0572	5.0452	1,000 - 30,000
$N^+ - O$	0	0	-0.4000	6.8543	1,000 - 30,000
$N^+ - NO$	0	0	-0.4000	6.8543	1,000 - 30,000
$N^+ - NO^+$	0	0	-2.0000	23.8237	1,000 - 30,000
$N^+ - e^-$	0	0	-2.0000	23.8237	1,000 - 30,000
$N^+ - N^+$	0	0	-2.0000	23.8237	1,000 - 30,000
$O^+ - N_2$	0	0	-0.4000	6.8543	1,000 - 30,000
$O^+ - O_2$	0	0	-0.4000	6.8543	1,000 - 30,000
$O^+ - N$	0	0	-0.4000	6.8543	1,000 - 30,000
$O^+ - O$	0	-0.0034	-0.0572	4.9901	1,000 - 30,000
$O^+ - NO$	0	0	-0.4000	6.8543	1,000 - 30,000
$O^+ - NO^+$	0	0	-2.0000	23.8237	1,000 - 30,000
$O^+ - e^-$	0	0	-2.0000	23.8237	1,000 - 30,000
$O^+ - N^+$	0	0	-2.0000	23.8237	1,000 - 30,000
$O^+ - O^+$	0	0	-2.0000	23.8237	1,000 - 30,000
$N_2^+ - N_2$	0	0	-0.4000	6.8543	1,000 - 30,000
$N_2^+ - O_2$	0	0	-0.4000	6.8543	1,000 - 30,000
$N_2^+ - N$	0	0	-0.4000	6.8543	1,000 - 30,000
$N_2^+ - O$	0	0	-0.4000	6.8543	1,000 - 30,000
$N_2^+ - NO$	0	0	-0.4000	6.8543	1,000 - 30,000
$N_2^+ - NO^+$	0	0	-2.0000	23.8237	1,000 - 30,000
$N_2^+ - e^-$	0	0	-2.0000	23.8237	1,000 - 30,000
$N_2^+ - N^+$	0	0	-2.0000	23.8237	1,000 - 30,000
$N_2^+ - O^+$	0	0	-2.0000	23.8237	1,000 - 30,000
$N_2^+ - N_2^+$	0	0	-2.0000	23.8237	1,000 - 30,000

表 2.1 続き

衝突する 化学種の組	$A_{\Omega_{sr}^{(1,1)}}$	$B_{\Omega_{sr}^{(1,1)}}$	$C_{\Omega_{sr}^{(1,1)}}$	$D_{\Omega_{sr}^{(1,1)}}$	適応可能な 温度範囲(K)
$O_2^+ - N_2$	0	0	-0.4000	6.8543	1,000 - 30,000
$O_2^+ - O_2$	0	0	-0.4000	6.8543	1,000 - 30,000
$O_2^+ - N$	0	0	-0.4000	6.8543	1,000 - 30,000
$O_2^+ - O$	0	0	-0.4000	6.8543	1,000 - 30,000
$O_2^+ - NO$	0	0	-0.4000	6.8543	1,000 - 30,000
$O_2^+ - NO^+$	0	0	-2.0000	23.8237	1,000 - 30,000
$O_2^+ - e^-$	0	0	-2.0000	23.8237	1,000 - 30,000
$O_2^+ - N^+$	0	0	-2.0000	23.8237	1,000 - 30,000
$O_2^+ - O^+$	0	0	-2.0000	23.8237	1,000 - 30,000
$O_2^+ - N_2^+$	0	0	-2.0000	23.8237	1,000 - 30,000
$O_2^+ - O_2^+$	0	0	-2.0000	23.8237	1,000 - 30,000

表 2.2 衝突断面積 $\pi\Omega_{sr}^{(2,2)}$ の係数[28]

衝突する 化学種の組	$A_{\Omega_{sr}^{(2,2)}}$	$B_{\Omega_{sr}^{(2,2)}}$	$C_{\Omega_{sr}^{(2,2)}}$	$D_{\Omega_{sr}^{(2,2)}}$	適応可能な 温度範囲(K)
$N_2 - N_2$	0	-0.0203	0.0683	4.0900	1,000 - 30,000
$O_2 - N_2$	0	-0.0558	0.7590	0.8955	1,000 - 30,000
$O_2 - O_2$	0	-0.0485	0.6475	1.2607	1,000 - 30,000
$N - N_2$	0	-0.0190	0.0239	4.1782	1,000 - 30,000
$N - O_2$	0	-0.0203	0.0730	3.8818	1,000 - 30,000
$N - N$	0	-0.0118	-0.0960	4.3252	1,000 - 30,000
$O - N_2$	0	-0.0169	-0.0143	4.4195	1,000 - 30,000
$O - O_2$	0	-0.0247	0.1783	3.2517	1,000 - 30,000
$O - N$	0	0.0065	-0.4467	6.0426	1,000 - 30,000
$O - O$	0	-0.0207	0.0780	3.5658	1,000 - 30,000

表 2.2 続き

衝突する 化学種の組	$A_{\Omega_{sr}^{(2,2)}}$	$B_{\Omega_{sr}^{(2,2)}}$	$C_{\Omega_{sr}^{(2,2)}}$	$D_{\Omega_{sr}^{(2,2)}}$	適応可能な 温度範囲(K)
NO – N ₂	0	-0.0385	0.4226	2.4507	1,000 - 30,000
NO – O ₂	0	-0.0522	0.7045	1.0738	1,000 - 30,000
NO – N	0	-0.0196	0.0478	4.0321	1,000 - 30,000
NO – O	0	-0.0203	0.0730	3.8818	1,000 - 30,000
NO ⁺ – N ₂	0	-0.0453	0.5624	1.7669	1,000 - 30,000
NO ⁺ – O ₂	0	0	-0.4000	6.7760	1,000 - 30,000
NO ⁺ – N	0	0	-0.4000	6.7760	1,000 - 30,000
NO ⁺ – O	0	0	-0.4000	6.7760	1,000 - 30,000
NO ⁺ – NO	0	0	-0.4000	6.7760	1,000 - 30,000
NO ⁺ – NO ⁺	0	0	-2.0000	24.3602	1,000 - 30,000
e ⁻ – N ₂	0.1147	-2.8945	24.5080	-67.3691	1,000 - 30,000
e ⁻ – O ₂	0.0241	-0.3467	1.3887	-0.0110	1,000 - 9,000
e ⁻ – N	0.0025	-0.0742	0.7235	-0.2116	9,000 - 30,000
e ⁻ – N	0	0	0	1.6094	1,000 - 30,000
e ⁻ – O	0.0164	-0.2431	1.1231	-1.5561	1,000 - 9,000
e ⁻ – O	-0.2027	5.6428	-51.5646	155.6091	9,000 - 30,000
e ⁻ – NO	-0.2202	5.2265	-40.5659	104.7126	1,000 - 8,000
e ⁻ – NO	-0.2871	8.3757	-81.3787	265.6292	8,000 - 30,000
e ⁻ – NO ⁺	0	0	-2.0000	24.3061	1,000 - 30,000
e ⁻ – e ⁻	0	0	-2.0000	24.3061	1,000 - 30,000
N ⁺ – N ₂	0	0	-0.4000	6.7760	1,000 - 30,000
N ⁺ – O ₂	0	0	-0.4000	6.7760	1,000 - 30,000
N ⁺ – N	0	0	-0.4146	6.9078	1,000 - 30,000
N ⁺ – O	0	0	-0.4000	6.7760	1,000 - 30,000
N ⁺ – NO	0	0	-0.4000	6.7760	1,000 - 30,000
N ⁺ – NO ⁺	0	0	-2.0000	24.3602	1,000 - 30,000
N ⁺ – e ⁻	0	0	-2.0000	24.3061	1,000 - 30,000
N ⁺ – N ⁺	0	0	-2.0000	24.3602	1,000 - 30,000

表 2.2 続き

衝突する 化学種の組	$A_{\Omega_{sr}^{(2,2)}}$	$B_{\Omega_{sr}^{(2,2)}}$	$C_{\Omega_{sr}^{(2,2)}}$	$D_{\Omega_{sr}^{(2,2)}}$	適応可能な 温度範囲(K)
$O^+ - N_2$	0	0	-0.4000	6.7760	1,000 - 30,000
$O^+ - O_2$	0	0	-0.4000	6.7760	1,000 - 30,000
$O^+ - N$	0	0	-0.4000	6.7760	1,000 - 30,000
$O^+ - O$	0	0	-0.4235	6.7787	1,000 - 30,000
$O^+ - NO$	0	0	-0.4000	6.7760	1,000 - 30,000
$O^+ - NO^+$	0	0	-2.0000	24.3602	1,000 - 30,000
$O^+ - e^-$	0	0	-2.0000	24.3061	1,000 - 30,000
$O^+ - N^+$	0	0	-2.0000	24.3602	1,000 - 30,000
$O^+ - O^+$	0	0	-2.0000	24.3602	1,000 - 30,000
$N_2^+ - N_2$	0	0	-0.4000	6.7760	1,000 - 30,000
$N_2^+ - O_2$	0	0	-0.4000	6.7760	1,000 - 30,000
$N_2^+ - N$	0	0	-0.4000	6.7760	1,000 - 30,000
$N_2^+ - O$	0	0	-0.4000	6.7760	1,000 - 30,000
$N_2^+ - NO$	0	0	-0.4000	6.7760	1,000 - 30,000
$N_2^+ - NO^+$	0	0	-2.0000	24.3602	1,000 - 30,000
$N_2^+ - e^-$	0	0	-2.0000	24.3061	1,000 - 30,000
$N_2^+ - N^+$	0	0	-2.0000	24.3602	1,000 - 30,000
$N_2^+ - O^+$	0	0	-2.0000	24.3602	1,000 - 30,000
$N_2^+ - N_2^+$	0	0	-2.0000	24.3602	1,000 - 30,000
$O_2^+ - N_2$	0	0	-0.4000	6.7760	1,000 - 30,000
$O_2^+ - O_2$	0	0	-0.4000	6.7760	1,000 - 30,000
$O_2^+ - N$	0	0	-0.4000	6.7760	1,000 - 30,000
$O_2^+ - O$	0	0	-0.4000	6.7760	1,000 - 30,000
$O_2^+ - NO$	0	0	-0.4000	6.7760	1,000 - 30,000
$O_2^+ - NO^+$	0	0	-2.0000	24.3602	1,000 - 30,000
$O_2^+ - e^-$	0	0	-2.0000	24.3061	1,000 - 30,000
$O_2^+ - N^+$	0	0	-2.0000	24.3602	1,000 - 30,000
$O_2^+ - O^+$	0	0	-2.0000	24.3602	1,000 - 30,000
$O_2^+ - N_2^+$	0	0	-2.0000	24.3602	1,000 - 30,000
$O_2^+ - O_2^+$	0	0	-2.0000	24.3602	1,000 - 30,000

表 2.3 生成エンタルピー [53]

化学種	h^0 (J/kg)
O	1.543×10^7
N	3.36×10^7
NO	2.995×10^6
O ₂	0.0
N ₂	0.0
O ⁺	9.787×10^7
N ⁺	1.339×10^8
NO ⁺	3.282×10^7
O ₂ ⁺	3.639×10^7
N ₂ ⁺	5.372×10^7
e ⁻	0.0

表 2.4 振動モードに関する特性温度 [54]

化学種	θ_{vs} (K)
NO	2740
O ₂	2273
N ₂	3393
NO ⁺	3419
O ₂ ⁺	2740
N ₂ ⁺	3175

表 2.5 電子励起に関する縮退度および特性温度 [54]

化学種	θ_{ex1s} (K)	θ_{ex2s} (K)	$g_{0,s}$	$g_{1,s}$	$g_{2,s}$
O	22831	-	9	5	-
N	27665	-	4	10	-
O ₂	11341	18877	3	2	1
N ⁺	22036	-	9	5	-
N ₂ ⁺	12970	-	2	4	-

表 2.6 反応速度係数に関する定数 [19]

反応	M	$C_f \text{ m}^3/\text{mole s}$	η	$\theta_{ds}(\text{K})$
$\text{N}_2 + \text{M} \rightleftharpoons \text{N} + \text{N} + \text{M}$	O, N, O ⁺ , N ⁺	3.0×10^{16}	-1.6	113,200
	NO, O ₂ , N ₂ , NO ⁺ , O ₂ ⁺ , N ₂ ⁺	7.0×10^{15}	-1.60	113,200
	e ⁻	1.2×10^{19}	-1.6	113,200
$\text{O}_2 + \text{M} \rightleftharpoons \text{O} + \text{O} + \text{M}$	O, N, O ⁺ , N ⁺	1.0×10^{16}	-1.50	59,500
	NO, O ₂ , N ₂ , NO ⁺ , O ₂ ⁺ , N ₂ ⁺	2.0×10^{15}	-1.50	59,500
$\text{NO} + \text{M} \rightleftharpoons \text{N} + \text{O} + \text{M}$	O, N, O ⁺ , N ⁺	1.1×10^{11}	0.00	75,500
	O ₂ , N ₂ , NO, NO ⁺ , O ₂ ⁺ , N ₂ ⁺	5.0×10^9	0.00	75,500
$\text{NO} + \text{O} \rightleftharpoons \text{O}_2 + \text{N}$	-	5.7×10^9	0.00	19,400
$\text{N}_2 + \text{O} \rightleftharpoons \text{NO} + \text{N}$	-	8.4×10^9	0.42	42,938
$\text{N} + \text{O} \rightleftharpoons \text{NO}^+ + \text{e}^-$	-	8.8×10^2	1.00	31,900
$\text{O} + \text{O} \rightleftharpoons \text{O}_2^+ + \text{e}^-$	-	7.1×10^{-4}	2.70	80,600
$\text{N} + \text{N} \rightleftharpoons \text{N}_2^+ + \text{e}^-$	-	4.4×10^1	1.50	67,500
$\text{NO}^+ + \text{O} \rightleftharpoons \text{N}^+ + \text{O}_2$	-	1.0×10^6	0.50	77,200
$\text{N}^+ + \text{N}_2 \rightleftharpoons \text{N}_2^+ + \text{N}$	-	1.0×10^6	0.50	12,200
$\text{O}_2^+ + \text{N} \rightleftharpoons \text{N}^+ + \text{O}_2$	-	8.7×10^7	0.14	28,600
$\text{O}^+ + \text{NO} \rightleftharpoons \text{N}^+ + \text{O}_2$	-	1.4×10^{-1}	1.90	26,600
$\text{O}_2^+ + \text{N}_2 \rightleftharpoons \text{N}_2^+ + \text{O}_2$	-	9.9×10^6	0.00	40,700
$\text{O}_2^+ + \text{O} \rightleftharpoons \text{O}^+ + \text{O}_2$	-	4.0×10^6	-0.09	18,000
$\text{NO}^+ + \text{N} \rightleftharpoons \text{O}^+ + \text{N}_2$	-	3.4×10^7	-1.08	12,800
$\text{NO}^+ + \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{O}_2^+ + \text{NO}$	-	2.4×10^7	0.41	32,600
$\text{NO}^+ + \text{O} \rightleftharpoons \text{O}_2^+ + \text{N}$	-	7.2×10^6	0.29	48,600
$\text{O}^+ + \text{N}_2 \rightleftharpoons \text{N}_2^+ + \text{O}$	-	9.1×10^5	0.36	22,800
$\text{NO}^+ + \text{N} \rightleftharpoons \text{N}_2^+ + \text{O}$	-	7.2×10^7	0.00	35,500
$\text{O} + \text{e}^- \rightleftharpoons \text{e}^- + \text{e}^-$	-	3.9×10^{27}	-3.78	158,500
$\text{N} + \text{e}^- \rightleftharpoons \text{N}^+ + \text{e}^- + \text{e}^-$	-	2.5×10^{28}	-3.82	168,600

表 2.7 平衡定数に関する係数 [19]

反応	A_1	A_2	A_3	A_4	A_5
$N_2 + M \rightleftharpoons N + N + M$	1.540100	15.42160	1.29930	-11.4940	-0.006980
$O_2 + M \rightleftharpoons O + O + M$	0.553880	16.275511	1.776300	-6.57200	0.031450
$NO + M \rightleftharpoons N + O + M$	0.558890	14.53108	0.553960	-7.53040	-0.014089
$NO + O \rightleftharpoons O_2 + N$	0.004815	-1.744300	-1.22270	-0.95824	-0.050550
$N_2 + O \rightleftharpoons NO + N$	0.976460	0.890430	0.750720	-3.96420	0.007123
$N + O \rightleftharpoons NO^+ + e^-$	-0.579240	-7.307900	-1.999900	-3.22940	0.016382
$O + O \rightleftharpoons O_2^+ + e^-$	1.139500	-8.187600	-0.504610	-8.580800	0.041333
$N + N \rightleftharpoons N_2^+ + e^-$	-2.422900	-5.047400	-5.072400	-5.696100	-0.042167
$NO^+ + O \rightleftharpoons N^+ + O_2$	-0.906720	1.434000	-2.071400	-6.85920	-0.057110
$N^+ + N_2 \rightleftharpoons N_2^+ + N$	1.360710	14.774430	2.726324	-9.879787	0.044408
$O_2^+ + N \rightleftharpoons N^+ + O_2$	-2.625200	2.313600	-3.616300	-1.507900	-0.082048
$O^+ + NO \rightleftharpoons N^+ + O_2$	-1.640500	0.830580	-2.995200	-1.379400	-0.079927
$O_2^+ + N_2 \rightleftharpoons N_2^+ + O_2$	-2.581100	2.286300	-5.094600	-2.037800	-0.121920
$O_2^+ + O \rightleftharpoons O^+ + O_2$	-0.985020	-0.261250	-1.844000	-1.086600	-0.047674
$NO^+ + N \rightleftharpoons O^+ + N_2$	-0.247650	-0.286990	0.178020	-1.515500	0.015692
$NO^+ + O_2 \rightleftharpoons O_2^+ + NO$	1.713900	0.864690	2.767900	-4.393200	0.070493
$NO^+ + O \rightleftharpoons O_2^+ + N$	1.718500	-0.879580	1.544900	-5.401300	0.024936
$O^+ + N_2 \rightleftharpoons N_2^+ + O$	-1.596200	2.547600	-3.250700	-0.951160	-0.074249
$NO^+ + N \rightleftharpoons N_2^+ + O$	-1.843800	2.260600	-3.072600	-2.466700	-0.058554
$O + e^- \rightleftharpoons e^- + e^-$	0.708790	7.826511	-0.521690	-16.240000	0.025127
$N + e^- \rightleftharpoons N^+ + e^- + e^-$	-0.931840	10.401511	-2.294600	-16.661000	-0.009269

2.8 振動緩和時間に関する定数 [19]

分子化学種	衝突化学種	A	B
NO	O	46	20.4
	N	46	20.4
	NO	46	20.4
	O ₂	46	20.4
	N ₂	46	20.4
	O ⁺	138	22.3
	N ⁺	138	22.0
	NO ⁺	161	23.5
	O ₂ ⁺	184	23.6
	N ₂ ⁺	161	23.4
O ₂	O	46	21.1
	N	69	19.5
	NO	138	22.5
	O ₂	138	22.6
	N ₂	138	22.5
	O ⁺	115	21.5
	N ⁺	115	21.3
	NO ⁺	138	22.5
	O ₂ ⁺	138	22.6
	N ₂ ⁺	138	22.5
N ₂	O	69	19.5
	N	184	23.2
	NO	230	25.2
	O ₂	230	25.2
	N ₂	230	25.1
	O ⁺	184	23.5
	N ⁺	184	23.2
	NO ⁺	230	25.2
	O ₂ ⁺	230	25.2
	N ₂ ⁺	230	25.1

表 2.9 解離エネルギー [53]

化学種	$\hat{D}_s(K)$
NO	75500
O ₂	59500
N ₂	113200
NO ⁺	125900
O ₂ ⁺	77300
N ₂ ⁺	101100

表 2.10 電子-振動緩和の係数[20]

T_{el} range(K)	A	B	C
3,000-7,000	5.019	-38.625	64.219
7,000-20,000	2.448	-18.704	25.640

表 2.10 考慮する原子と分子の電子励起状態数

Index	Species	Electronic state representation
1 → 49	N	$2p^3, {}^4S^*, {}^2D^*, {}^2P^*, \dots, 2p^2({}^3P)9s$
50 → 95	N ⁺	$2p^2, {}^3P^*, {}^1D^*, {}^1S^*, \dots, 2p^2({}^2P^*)6f$
96 → 135	O	$2p^4, {}^3P, {}^1D, {}^1S, \dots, 2p^3({}^4S^*)10d$
136 → 184	O ⁺	$2p^3, {}^4S^*, {}^2D^*, {}^2P^*, \dots, 2p^2({}^3P)7p$
185 → 194	N ₂	$X^1\Sigma_g^+, A^3\Sigma_u^+, B^3\Pi_g, C^3\Pi_u, b^1\Pi_u, b'^1\Pi_u^+,$ $c_3^1\Pi_u, c_4^1\Pi_u^+, O_3^1\Pi_u, e'^1\Pi_u^+$
195 → 198	N ₂ ⁺	$X^2\Sigma_g^+, A^2\Sigma_u^+, B^2\Sigma_u^+, C^2\Sigma_u^+$
199 → 205	NO	$X^2\Pi, A^2\Sigma^+, B^2\Pi, C^2\Pi, D^2\Sigma^+, B'^2\Delta, F^2\Delta$
206 → 210	NO ⁺	$X^1\Sigma^+, A^3\Sigma^+, B^3\Pi, B^3\Sigma^-, A^1\Pi$
211 → 215	O ₂	$X^3\Sigma_g^-, A^1\Delta_g, B^1\Sigma_g^+, A^3\Sigma_u^+, B^3\Sigma_u^-$
216 → 219	O ₂ ⁺	$X^2\Sigma_g^-, A^2\Pi_u, A^2\Sigma_u, B^4\Sigma_g^-$

表 2.11 分子の輻射遷移

Species	Transition	System name	References
N ₂	$B^3\Pi_g \rightarrow A^3\Sigma_u^+$	First Positive	[54]
	$C^3\Pi_u \rightarrow B^3\Pi_g$	Second Positive	[55]
	$b^1\Pi_g \rightarrow X^1\Sigma_g^+$	Brige-Hopfield 1	[56]
	$b'^1\Pi_u^+ \rightarrow X^1\Sigma_g^+$	Brige-Hopfield 2	[56]
	$c_3^1\Pi_u \rightarrow X^1\Sigma_g^+$	Worley-Jenkins	[56]
	$c_4'^1\Pi_u^+ \rightarrow X^1\Sigma_g^+$	Carroll-Yoshino	[56]
	$O_3^1\Pi_u \rightarrow X^1\Sigma_g^+$	Worley	[56]
	$e'^1\Pi_u^+ \rightarrow X^1\Sigma_g^+$	$e' - X$	[56]
N ₂ ⁺	$A^2\Sigma_u \rightarrow X^2\Sigma_g^+$	Meinel	[57]
	$B^2\Sigma_u^+ \rightarrow X^2\Sigma_g^+$	First Negative	[58]
	$C^2\Sigma_u^+ \rightarrow X^2\Sigma_g^+$	Second Negative	[59]
NO	$B^2\Pi \rightarrow X^2\Pi$	β	[60]
	$A^2\Sigma^+ \rightarrow X^2\Pi$	γ	[61]
	$C^2\Pi \rightarrow X^2\Pi$	δ	[61]
	$D^2\Sigma^+ \rightarrow X^2\Pi$	ε	[61]
	$B'^2\Delta \rightarrow X^2\Pi$	β'	[61]
O ₂	$B^3\Sigma_u^- \rightarrow X^3\Sigma_g^-$	Schumann-Runge	[62,63]
O ₂ ⁺	$A^2\Sigma_u \rightarrow X^2\Sigma_g^-$	Second Negative	[55]
	$b^4\Sigma_g^- \rightarrow a^4\Pi_u$	First Negative	[64]

表 2.12 重粒子衝突励起速度係数に関する定数[49]

反応	M	$C_f m^3/mole s$	η	θ_{as}, K
$N_2(X) + M \rightleftharpoons N_2(A) + M$	N	2.6×10^8	0.507	72,737
	O	3.6×10^8	0.507	72,737
	N_2	7.8×10^2	0.507	72,737
	O_2	4.9×10^7	0.507	72,737
	NO	7.0×10^8	0.507	72,737
$N_2(A) + M \rightleftharpoons N_2(B) + M$	N	3.1×10^9	0.016	19,253
	O	2.9×10^9	0.032	19,253
	N_2	9.9×10^9	-0.777	19,253
	O_2	7.0×10^9	-0.601	19,253
	NO	1.3×10^9	0.3888	19,253
$O_2(X) + M \rightleftharpoons O_2(A) + M$	N	5.3×10^2	0.500	11,434
	O	1.9×10^2	0.500	11,434
	N_2	1.9×10^{-2}	0.500	11,434
	O_2	3.9×10^0	0.500	11,434
	NO	7.0×10^1	0.500	11,434
$O_2(A) + M \rightleftharpoons O_2(B) + M$	N	2.5×10^6	0.500	7,638
	O	2.5×10^6	0.500	7,638
	N_2	3.2×10^3	0.500	7,638
	O_2	4.8×10^2	0.500	7,638
	NO	4.2×10^4	0.500	7,638
$NO(X) + M \rightleftharpoons NO(A) + M$	N	9.3×10^7	0.496	62,912
	O	9.3×10^7	0.496	62,912
	N_2	1.5×10^5	0.496	62,912
	O_2	1.4×10^8	0.496	62,912
	NO	2.1×10^8	0.496	62,912
$NO(B) + M \rightleftharpoons NO(X) + M$	N, O, N_2 , O_2 , NO	6.4×10^6	0.500	0.0
$NO(C) + M \rightleftharpoons NO(X) + M$	N, O, N_2 , O_2 , NO	7.6×10^6	0.500	0.0
$N_2^+(A) + M \rightleftharpoons N_2^+(X) + M$	N	3.0×10^9	0.0	0.0
	N_2	1.8×10^9	0.0	0.0
$N_2^+(B) + M \rightleftharpoons N_2^+(A) + M$	N	6.0×10^9	0.0	0.0
	N_2	3.0×10^9	0.0	0.0
	NO	1.4×10^9	0.0	0.0

第 3 章

衝撃波管流れの励起非平衡流体計算

本章では，輻射熱輸送を結合した衝突輻射モデルによる衝撃波管流れの計算結果について述べる．計算対象は EAST で実施された Test 50 Shot 29 と，Test 59 Shot 15 の 2 つの実験を選択した．Test 50 Shot 29 は熱化学平衡に近い流れ場であり，Test 59 Shot 15 は Test 50 Shot 29 と比較して主流密度が低く，非平衡性の強い流れ場となっている．それぞれのケースについて輻射熱輸送を結合した衝突輻射モデル（以降，Collisional Radiative model：CR モデルと表記する）による流れ場の計算を行い，電子励起状態を局所熱力学平衡と仮定する Park モデルに輻射平衡を仮定した輻射熱輸送を結合した計算結果と比較する．

3.1 Test 50 Shot 29

Test 50 Shot 29 は 2010 年 2 月 26 日に実施された．内径 10.16cm の衝撃波管を用いて，主流圧力 0.2 torr，主流組成は質量分率で N_2 76.7% と O_2 23.3%，衝撃波速度 10.29 km/s の条件で衝撃波背後の輻射スペクトル測定が行われた[65]．

3.1.1 計算条件

計算格子を図 3.1 に示す．格子点数は周方向に 101 点，半径方向に 121 点であり，衝撃波付近の物理過程を正確に解くために，衝撃波位置に格子を寄せている．流入境界は左側の楕円弧である．主流条件を表 3.1 に示す．壁面は 273K の非触媒性等温壁とする．CR モデルによる電子励起状態分布の計算は流れ場計算 10 ステップに 1 回，輻射輸送計算は CR モデル，Park モデル共に 1000 ステップに 1 回の頻度で実行した．

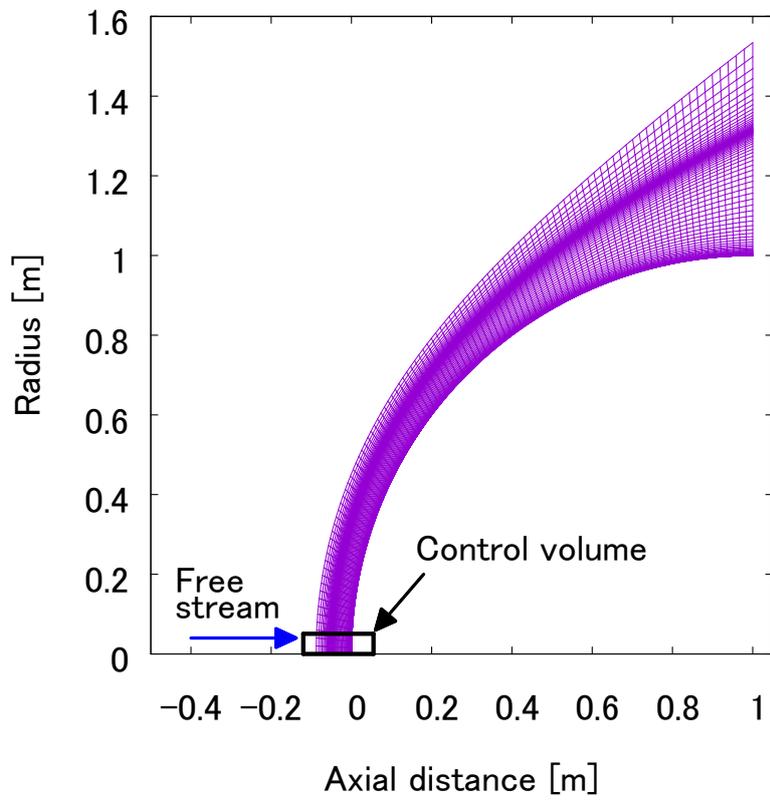


図 3.1 Test 50 Shot 29 における計算格子

表 3.1 主流条件

Density [kg/m ³]	3.3891×10^{-4}
Velocity [m/s]	10,290
T [K]	273
T _v [K]	273
Mass fraction	
N	0
O	0
N ₂	0.767
O ₂	0.233
NO	0
N ⁺	0
O ⁺	0
N ₂ ⁺	0
O ₂ ⁺	0
NO ⁺	0
e ⁻	0

3.1.2 淀み流線上の流れ場

図 3.2 に CR モデルにおける淀み流線上の温度分布を示す。壁面前方約 0.05m の位置で衝撃波が発生し、背後約 0.01m の範囲で熱非平衡となり、その後熱平衡に到達する。並進-回転温度は、衝撃波背後で散逸を伴う圧縮により最高温度である約 34,000K に到達したあと、分子種の解離反応や振動温度緩和により温度が低下し、熱平衡に到達する。振動-電子励起-自由電子の並進温度は、衝撃波背後で温度緩和により上昇し、最高温度である約 15,000K に到達したあと、解離反応により温度が低下し熱平衡に達する。等温壁としていため、壁面付近の温度境界層内では壁面温度向かって温度低下が生じる。

また、淀み流線上の温度分布について、CR モデルと Park モデルとの比較を図 3.3 に示す。図中の赤線が CR モデル、青線が Park モデルの温度である。CR モデルは Park モデルと比較して各温度の最高点に大きな違いはないが、衝撃層がわずかに狭くなっている。要因として、Park モデルでは輻射平衡と仮定して輻射熱輸送を計算しており、直接計算した電子励起状態分布を用いて輻射輸送を解く CR モデルと比較して、衝撃波背後での輻射放出によるエネルギー低下が小さかったことが考えられる。

次に、CR モデルにおける淀み流線上のモル分率分布を図 3.4 に示す。主流の主組成であった N_2 、 O_2 は衝撃波背後で解離反応により減少し、衝撃層内の主組成は N 、 O に変化する。衝撃波背後の並進-回転温度が高くなる領域では、 N 、 O の再結合や NO 交換反応により NO と NO^+ が、会合性電離により N_2^+ 、 O_2^+ が生成される。その後の熱平衡となる領域では、組成の変化は生じず、化学平衡となる。壁面付近では、温度低下に伴う N 、 O の再結合が発生し N_2 、 O_2 、 NO の密度が増加する。また、自由電子密度は電荷中性を仮定したためイオン種の総和であり、衝撃波背後では会合性電離による N_2^+ 、 O_2^+ の生成により自由電子が増加する。その後の化学平衡となる領域では、主に N^+ が供給源となる。

衝撃層内の主組成である N の各電子励起状態の一部について、淀み流線上での数密度分布を図 3.5 に示す。 n は電子励起状態の量子数を示しており、 $n = 0$ は基底状態、 $n = 1, 2$ が準安定状態である。衝撃波直後では N_2 の解離反応により基底状態の N が急激に生成され、主に化学種間の衝突により準安定状態へ励起する。その後、主に自由電子衝突によって高励起状態となる。また、淀み流線上の各軸方向位置における電子励起状態分布を図 3.6 に示す。赤線が CR モデルで求めた電子励起状態の密度割合、青線が振動-電子励起-自由電子の並進温度から求めた平衡分布である。(a) では衝撃波直後であるため、 N はほとんど基底状態であり、(b) では衝突反応が進むため、準安定状態の割合は平衡分布と一致し、高励起状態は平衡分布を上回った。(c) は熱平衡領域であり、衝突反応も平衡に到達するため、電子励起状態は平衡分布に一致する。

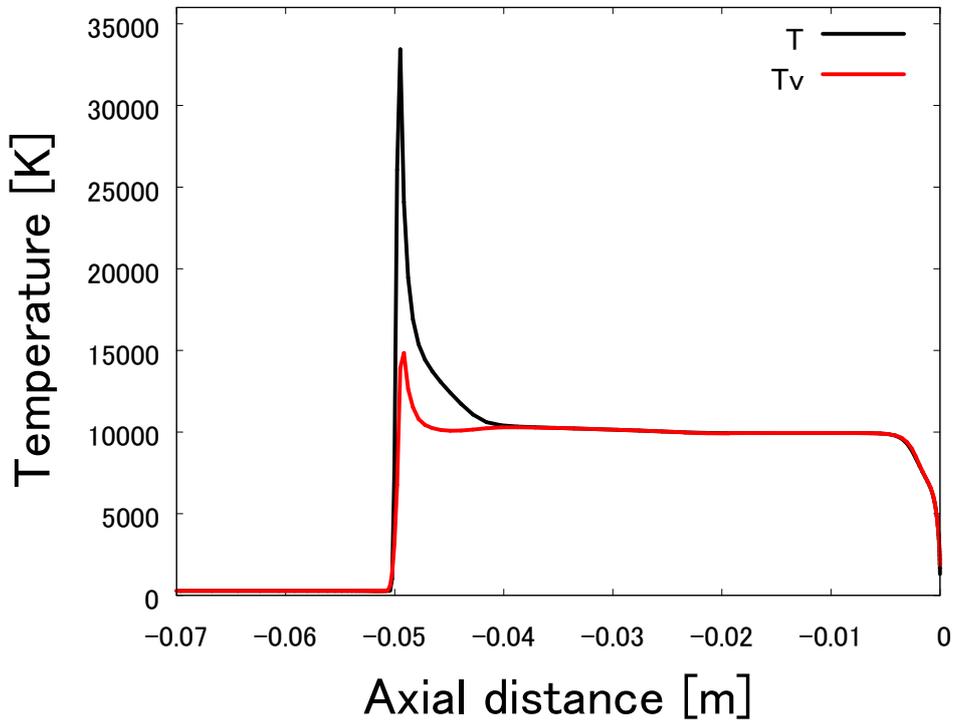


図 3.2 CR モデルにおける淀み流線上の温度分布

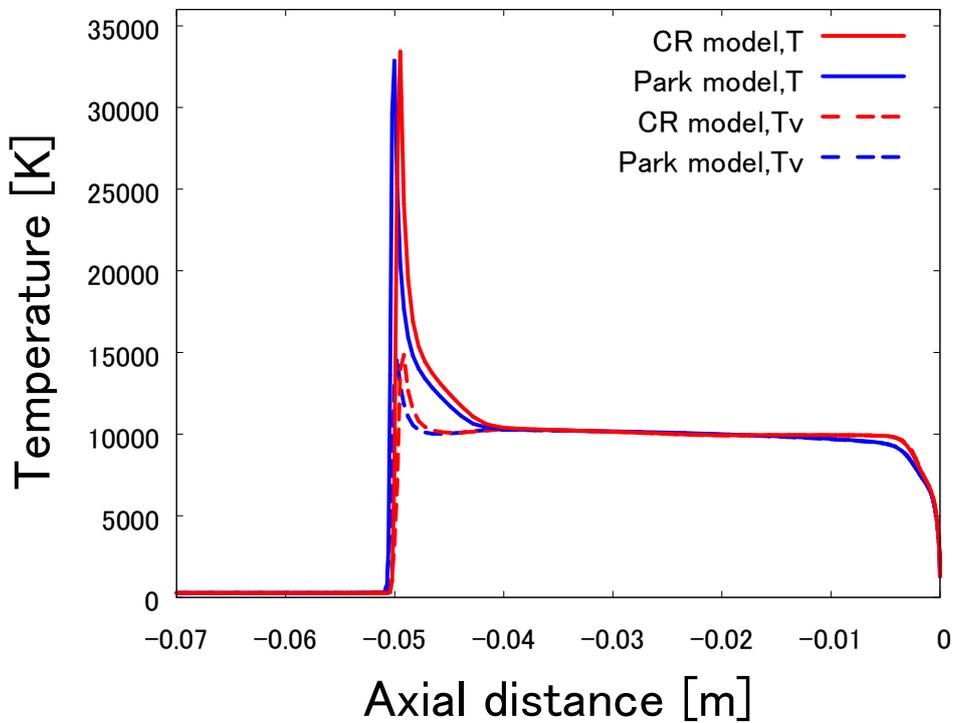


図 3.3 CR モデルと Park モデルの温度分布比較

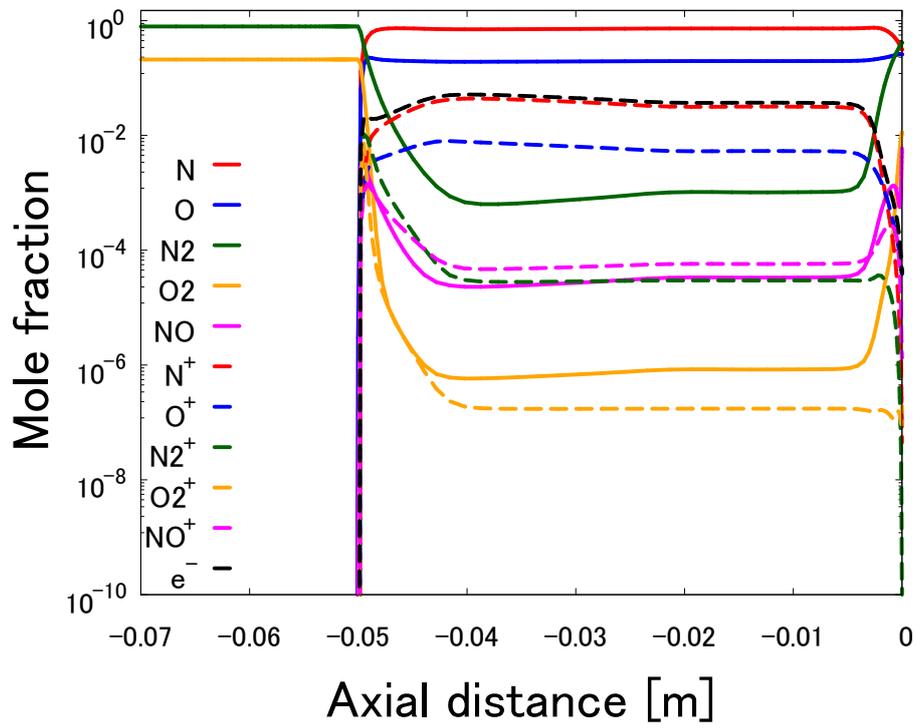


図 3.4 CR モデルにおける淀み流線上のモル分率分布

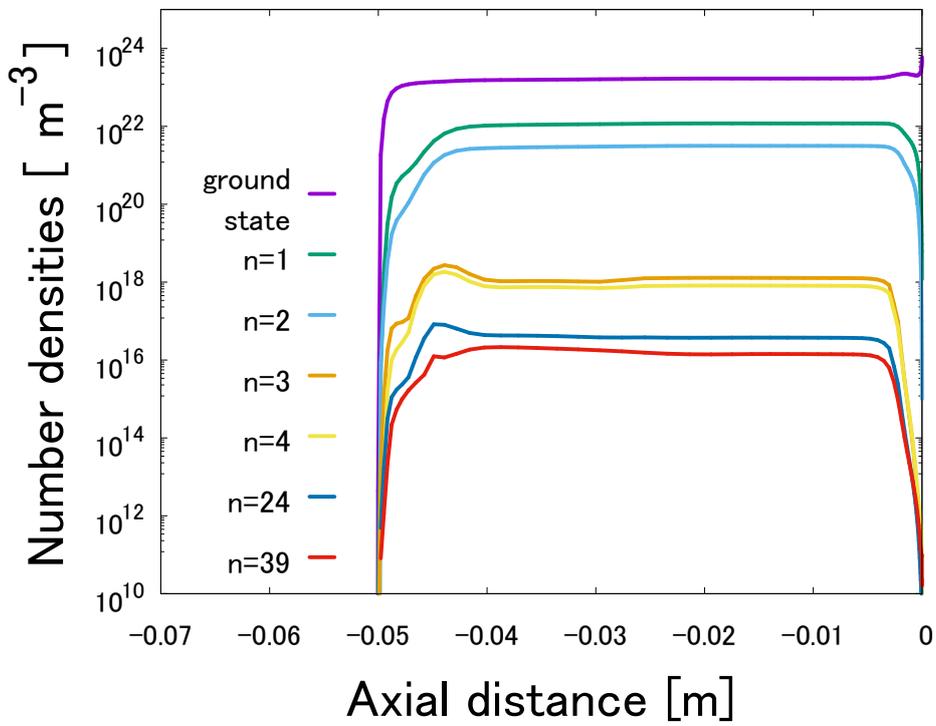
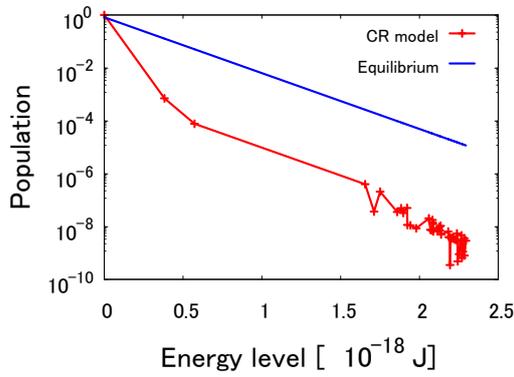
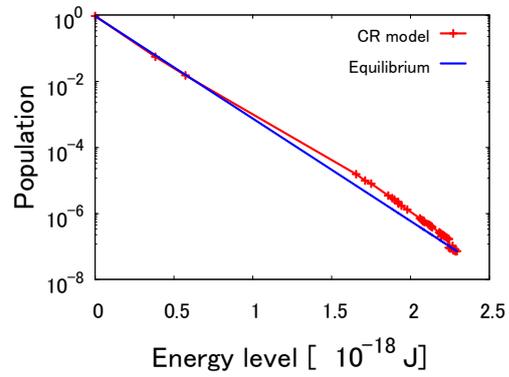


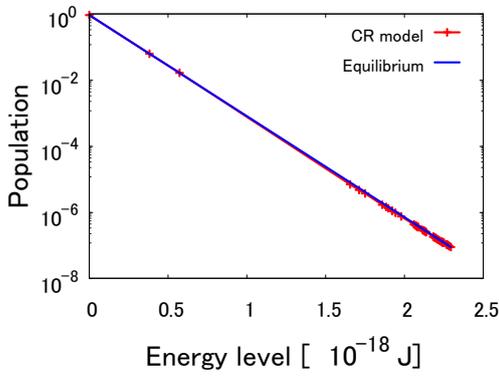
図 3.5 淀み流線上でのNの各電子励起状態の数密度



(a) 壁面前方約 0.0049m 位置



(b) 壁面前方約 0.043m 位置



(c) 壁面前方約 0.04m 位置

図 3.6 淀み流線上各点でのNの電子励起状態分布

3.1.3 スペクトル強度比較

分光計測結果との比較では、分光器内のレンズや回折格子の影響によるスペクトルの広がりやを考慮する必要がある。このため、式(2.103)を半径方向に積分して算出した輻射強度 I_λ に光学系の線輪郭関数 ILS_λ を畳み込み積分することで、光学系による広がりやを考慮した輻射強度 $I_{\lambda,opt}$ を求める[15].

$$I_{\lambda,opt} = \int_0^\infty I_{\lambda'} ILS_{\lambda-\lambda'} d\lambda'. \quad (3.1)$$

ここで、

$$ILS_{\lambda-\lambda'} = \frac{[V_{\lambda-\lambda'}]^{1/2}}{\int_{-\infty}^\infty [V_x]^{1/2} dx}, \quad (3.2)$$

$$V_{\lambda-\lambda'} = L_{\lambda-\lambda'} \otimes G_{\lambda-\lambda'}. \quad (3.3)$$

$V_{\lambda-\lambda'}$ は Voigt 関数、 $L_{\lambda-\lambda'}$ 、 $G_{\lambda-\lambda'}$ はそれぞれ次に示す Lorentz 関数、Gauss 関数である。

$$L_{\lambda-\lambda'} = \frac{1}{\pi} \frac{w_l^2}{(\lambda - \lambda')^2 + w_l^2} \quad (3.4)$$

$$G_{\lambda-\lambda'} = \frac{1}{\sqrt{\pi}w_g} \exp\left[-\left(\frac{\lambda - \lambda'}{w_g}\right)^2\right] \quad (3.5)$$

w_l , w_g はそれぞれの関数の半値全幅であり、計測時の較正作業により取得した表 3.2 の値を用いる。

壁面前方 0.02m 位置における輻射スペクトルについて、分光計測結果との比較を図 3.7 に示す。図中の赤線が CR モデル、青線が Park モデル、黒線が分光計測結果であり、図左上にそれぞれの波長積分値を示す。壁面前方 0.02m 位置は熱平衡領域であるため、電子励起状態は平衡分布となり、CR モデルと Park モデルのスペクトルがほぼ一致した。また、波長積分値は計測結果を約 10% 下回る結果となった。約 4,200Å までの波長域では計測結果に近いスペクトルが得られたが、4,200Å から 4,900Å の波長域では N, O それぞれの線スペクトル強度が計測結果を下回った。この N, O の強度低下が波長積分値の低下の要因だと考えられる。

表 3.2 分光結果との比較に用いる半値全幅[15]

w_l [Å]	1.4
w_g [Å]	5.6

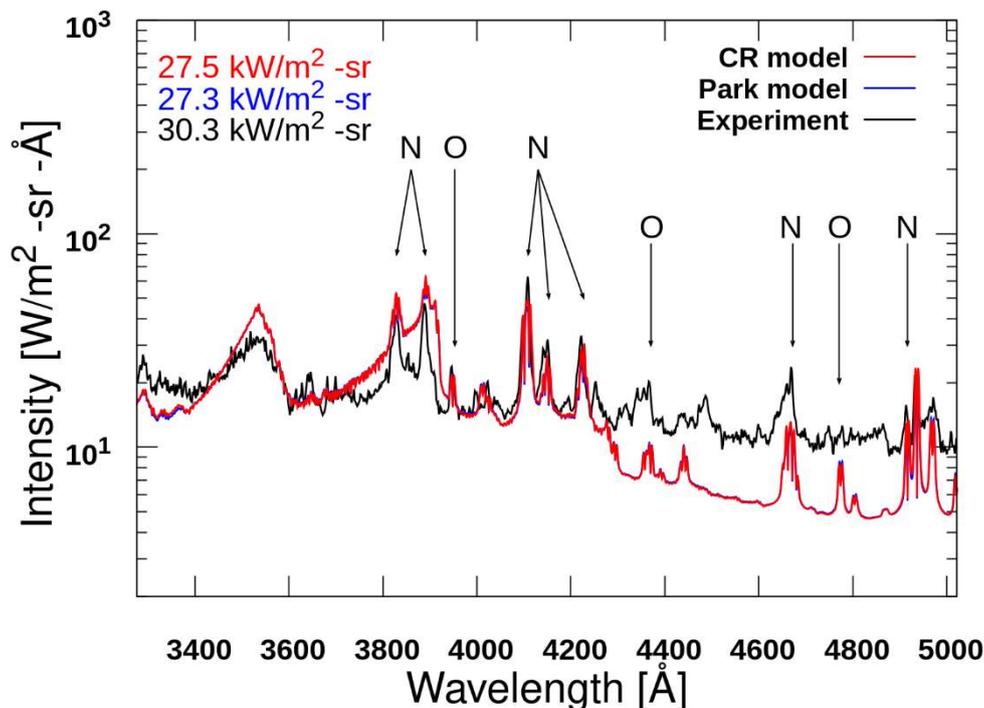


図 3.7 壁面前方 0.02m 位置での分光スペクトルとの比較

3.2 Test 59 Shot 15

Test 59 Shot 15 は 2015 年 9 月 17 日に実施された。内径 60.33cm の衝撃波管を用いて、主流圧力 0.01 torr、主流組成は質量分率で N_2 76.7% と O_2 23.3%、衝撃波速度 8.18 km/s の条件で衝撃波背後の輻射スペクトル測定が行われた[65]。

3.2.1 計算条件

計算格子を図 3.8 に示す。Test 50 Shot 29 と同様に格子点数は周方向に 101 点、半径方向に 121 点であり、衝撃波付近の物理過程を正確に解くために、衝撃波位置に格子を寄せている。流入境界は左側の楕円弧である。主流条件を表 3.3 に示す。壁面は 273K の非触媒性等温壁とする。CR モデルによる電子励起状態分布の計算は流れ場計算 10 ステップに 1 回、輻射輸送計算は、CR モデル Park モデル共に 1000 ステップに 1 回の頻度で実行した。

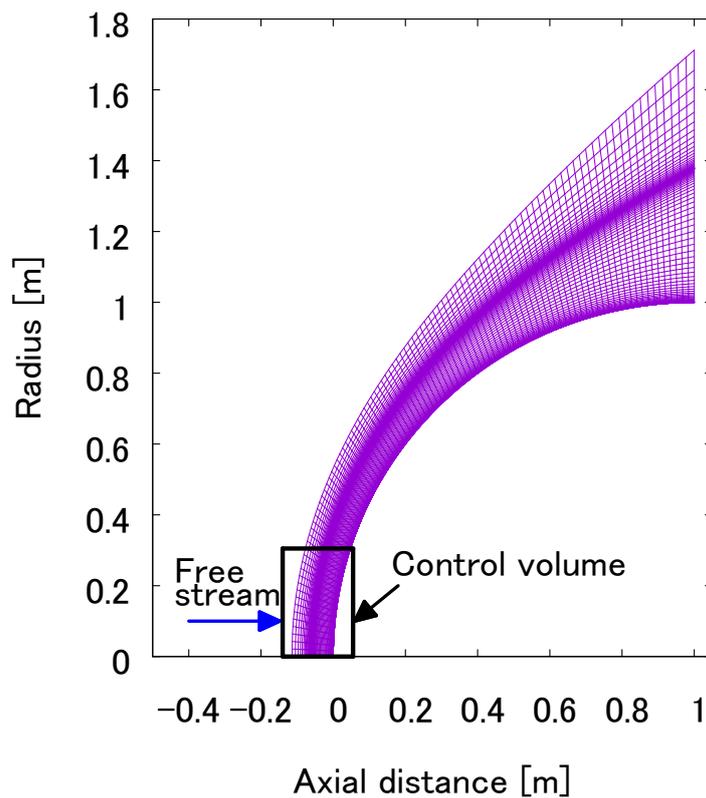


図 3.8 Test59 Shot15 における計算格子

表 3.3 主流条件

Density [kg/m ³]	1.6946×10^{-5}
Velocity [m/s]	8,180
T[K]	273
T _v [K]	273
Mass fraction	
N	0
O	0
N ₂	0.767
O ₂	0.233
NO	0
N ⁺	0
O ⁺	0
N ₂ ⁺	0
O ₂ ⁺	0
NO ⁺	0
e ⁻	0

3.2.2 淀み流線上の流れ場

図 3.9 に CR モデルにおける淀み流線上の温度分布を示す。衝撃波位置は壁面前方約 0.065m であり、衝撃層内のほぼ全域が熱非平衡となっている。並進-回転温度は衝撃波背後で圧縮により上昇し、最高温度である約 26,000K に到達する。その後は Test 50 Shot 29 と同様に解離反応と温度緩和により温度が低下するが、Test 50 Shot 29 と比較して密度が低く原子・分子間の衝突頻度が低くなるため、反応による温度低下は緩やかとなる。振動-電子励起-自由電子の並進温度は衝撃波背後で温度緩和により上昇し、最高温度である約 10,000K に到達する。並進-回転温度の温度低下と同様に、Test 50 Shot 29 と比較して温度緩和が進まないため衝撃波背後での温度上昇は緩やかである。各温度は熱平衡に到達せず、それぞれ壁面付近の温度境界層で壁面温度に向かって低下する。

また、淀み流線上の温度分布について、CR モデルと Park モデルとの比較を図 3.10 に示す。図中の赤線が CR モデル、青線が Park モデルの温度である。Test 50 Shot 29 と異なり CR モデルと Park モデルに大きな違いは見られなかった。

次に CR モデルにおける淀み流線上のモル分率分布を図 3.11 に示す。衝撃波背後での N₂、O₂ の解離反応により N、O が生成され、衝撃層内の主組成となる。Test 50 Shot 29 とは異なり、衝撃波背後から壁面付近まで組成が変化し続けており、衝撃層内の広範囲で化学非平衡となっている。また、電荷中性と仮定し、密度をイオン種の総和としている自由電子は、衝撃波背後で N₂⁺、NO⁺ の生成により増加し、その後の緩和領域では N⁺、NO⁺ が主な供給源となっている。

衝撃層内の主組成である N について、淀み流線上での電子励起状態の一部の数密度分布を図 3.12 に示す。主に化学種間の衝突により生じる準安定状態への遷移は壁面前方約 0.04m 位置で平衡に到達する。主に自由電子衝突により遷移する高励起状態の N は Test 50

Shot 29 と比較して衝撃波背後での数密度増加が緩やかであり，壁面前方約 0.05m 位置から壁面までの領域では密度が減少している．また，淀み流線上の各点におけるNの電子励起状態分布を図 3.13 に示す．(a)は並進-回転温度最高点である壁面前方約 0.06m 位置，(b)は振動-電子励起-自由電子の並進温度最高点である壁面前方約 0.053m 位置，(c)は壁面前方約 0.02m 位置である．Test 50 Shot 29 の際と同様に赤線が CR モデルで求めた電子励起状態の密度割合，青線が振動-電子励起-自由電子の並進温度から求めた平衡分布である．(a)は衝撃波直後であり衝突反応が十分に進まず，Nはほとんど基底状態である．(b)では準安定状態が平衡分布に近づくが，高励起状態の割合が低く，エネルギー準位の高い励起状態ほど顕著に割合が低くなっている．(c)は(b)と比較して高励起状態の割合が増加しており，自由電子衝突反応が進行したことがわかる．

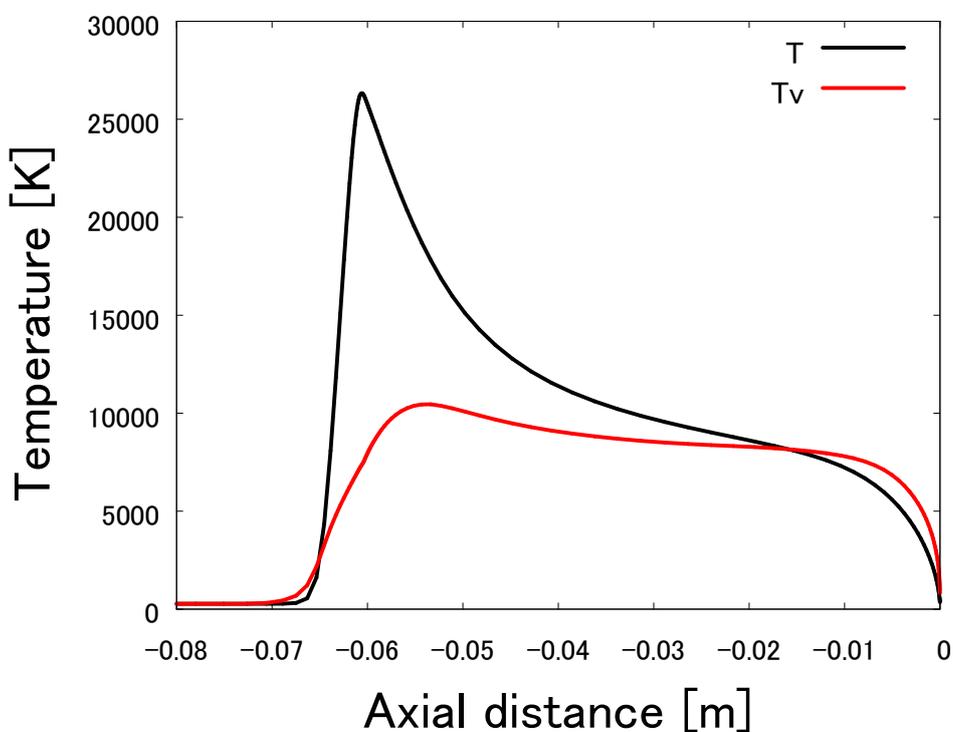


図 3.9 淀み流線上の温度分布

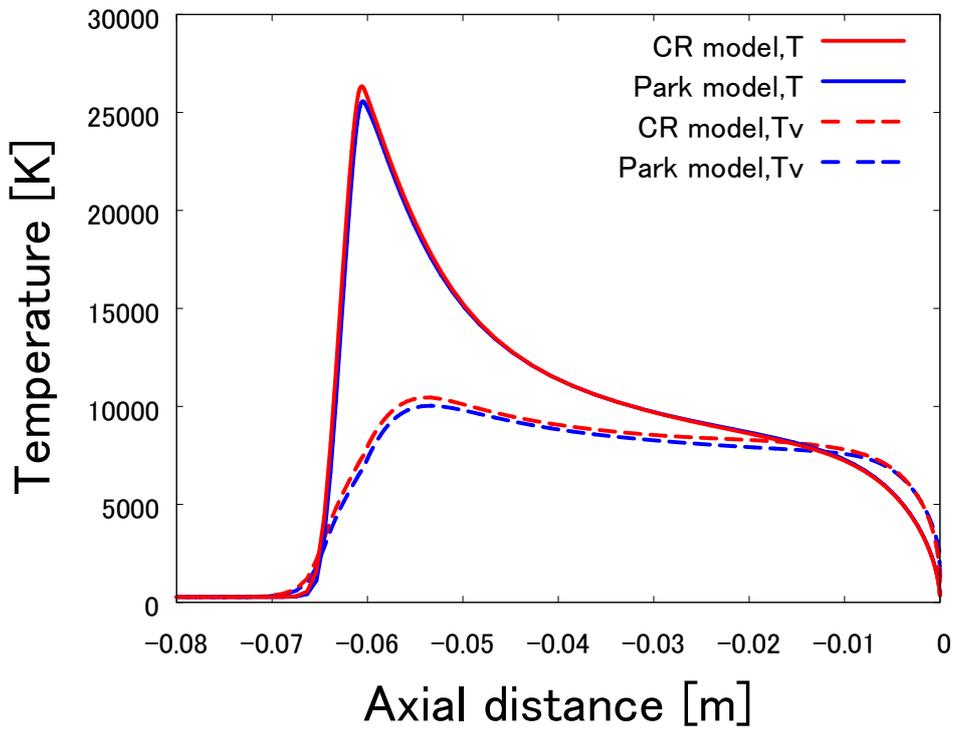


図 3.10 CR モデルと Park モデルの温度分布比較

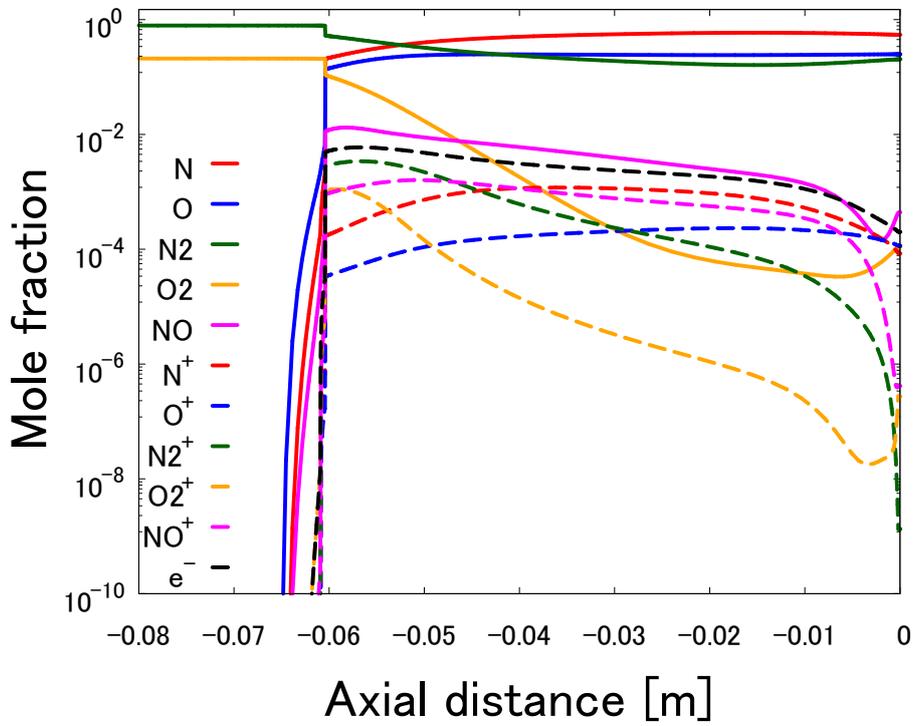


図 3.11 CR モデルにおける淀み流線上のモル分率分布

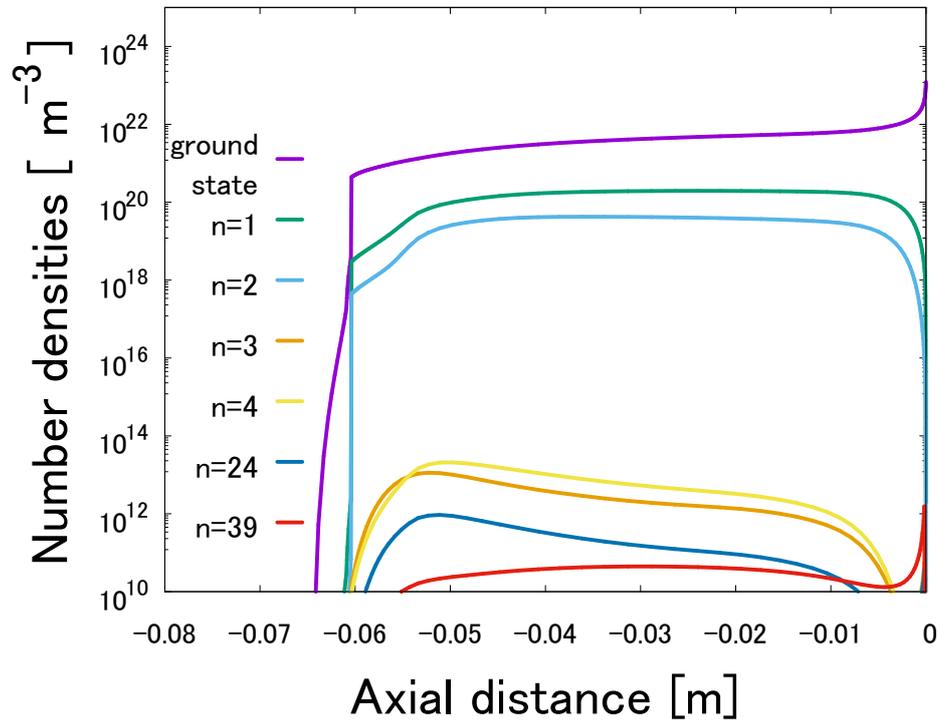
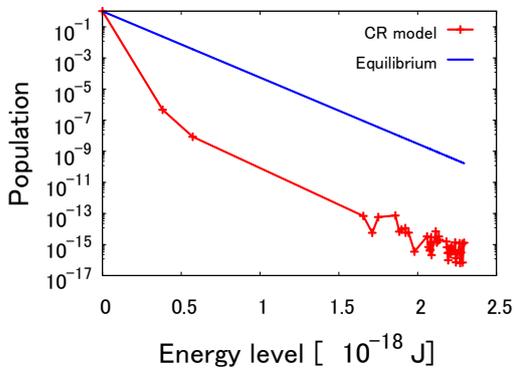
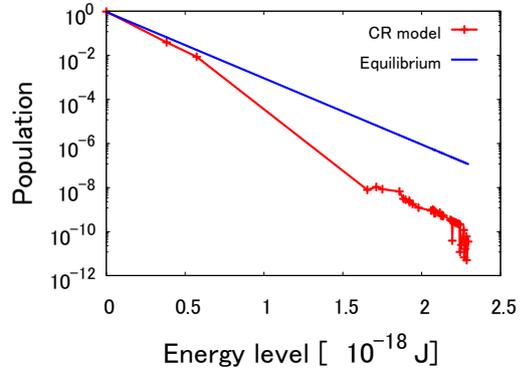


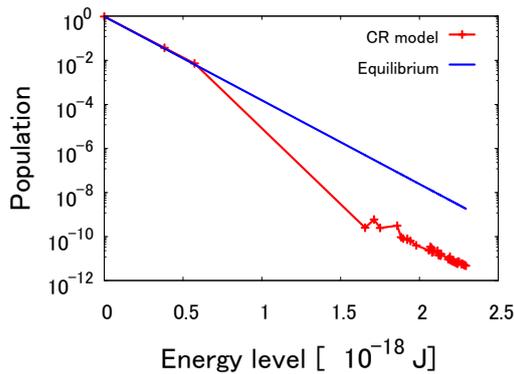
図 3.12 淀み流線上におけるNの一部の電子励起状態の数密度分布



(a) 壁面前方約 0.06m 位置



(b) 壁面前方約 0.053m 位置



(c) 壁面前方約 0.02m 位置

図 3.13 淀み流線上の各点におけるNの電子励起状態分布

3.2.3 スペクトル強度比較

輻射強度最高点の前後 0.02m の領域からの輻射スペクトルの平均値について、分光計測結果との比較を行う。式(3.1)より求めた輻射強度 $I_{\lambda,opt}(x)$ を次式で空間平均する。

$$I_{\lambda,avg} = \frac{1}{D_{tube}} \int_{x_{peak}-0.02}^{x_{peak}+0.02} I_{\lambda,opt}(x) dx. \quad (3.6)$$

式中の $I_{\lambda,avg}$ が波長ごとの輻射強度の平均値、 D_{tube} が衝撃波管の直径、 x_{peak} が輻射強度最高点の軸方向位置である。なお、Lorentz 関数、Gauss 関数それぞれの半値全幅は表 3.4 に示す値を用いる。

図 3.14 に計測結果とのスペクトル強度比較を示す。赤線が CR モデル、青線が Park モデル、紫線、緑線はそれぞれ 1,950Å から 4,129Å、3,630Å から 5,370Å の紫外域と可視光域の分光計測結果である。また、左上の赤文字、青文字、黒文字はそれぞれ CR モデル、Park モデル、分光計測結果の波長積分値である。約 2,600Å 以下の波長域では Park モデルと比べて強度が低下し、計測結果と強度がほぼ一致した。約 2,600Å から約 3,400Å の波長域では Park モデルより強度が上昇し、約 3,600Å 以降の波長域では Park モデルと比較してわずかに強度が低下した。波長積分値は CR モデル、Park モデルともに分光計測結果の 4 倍以上となったが、分光結果との差は Park モデルと比較して約 16%減少した。

図 3.15 に CR モデルのスペクトルを分子のバンドスペクトルごとに分解した結果を示す。図中左上にはそれぞれのバンドスペクトルの波長積分値を示す。NO γ バンドは約 2,600Å 以下の波長域で支配的であり、この波長域で計測結果と強度が一致した要因はNO γ バンドの強度低下だと考えられる。N₂ 2nd positive バンドは約 2,600Å から約 3,400Å の波長域で支配的である。この波長域は Park モデルから強度が上昇しているため、N₂ 2nd positive バンドの強度を Park モデルよりも高く見積もっていると考えられる。また、波長積分値は全体の約 35%を占める。N₂⁺ 1st negative バンドは約 3,400Å 以上の波長域で支配的であ

る。波長積分値は全体の約 50%であり、N₂ 2nd positive バンドと合わせて全体の 8 割以上を占めている。N₂ 1st positive バンドは約 5,000Å 付近の波長域に現れたが、波長積分値は他のバンドスペクトルと比較して十分低い結果となった。

表 3.4 分光結果との比較に用いる半値全幅[65]

適応する波長域[Å]	1,950-4,120	3,630-5,370
w_l [Å]	0.18	0.26
w_g [Å]	12.32	8.64

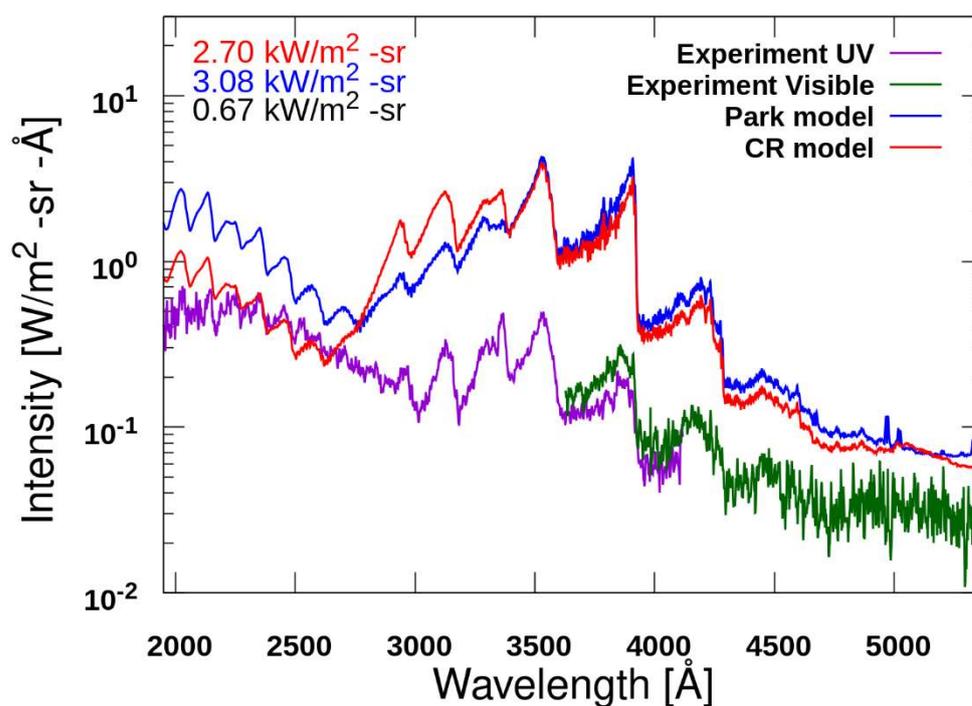


図 3.14 スペクトル強度比較

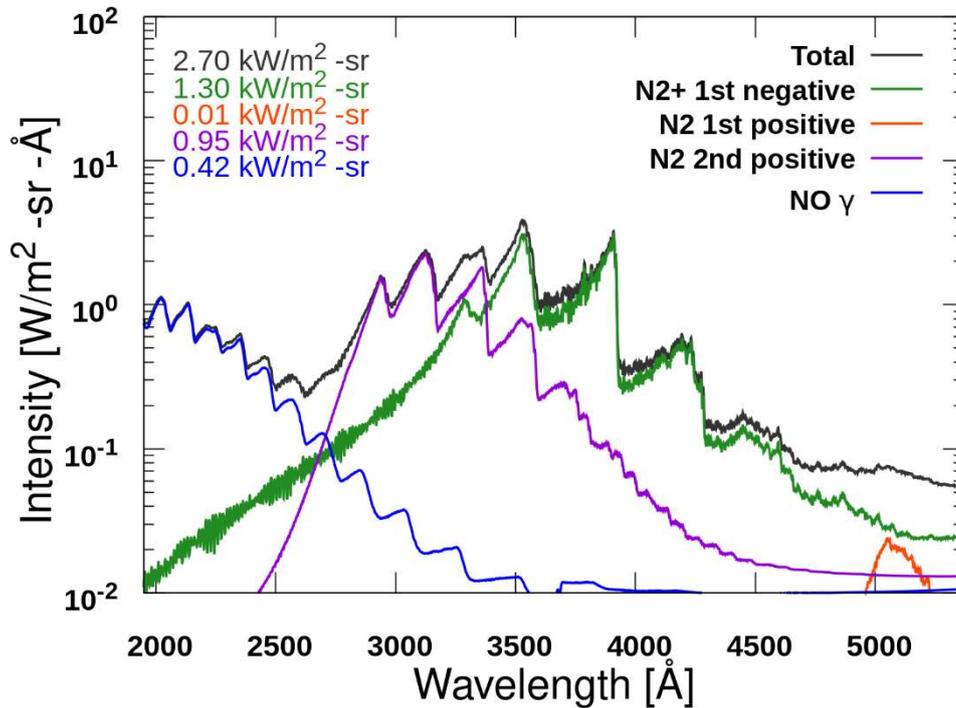


図 3.15 CR モデルのスペクトルをバンドスペクトルごとに分解した結果

3.2.4 さらなる加熱予測精度向上へ向けた考察

N_2^+ 1st negative バンド, N_2 2nd positive バンドの強度が計測結果よりも高くなったことから, 本研究で用いた CR モデルでは, それぞれのバンドの光を放射する遷移の上準位側の励起状態である $N_2^+(B^2\Sigma_u^+)$ と $N_2(C^3\Pi_u)$ の生成を実際よりも多く見積もっていることが考えられる.

$N_2^+(B^2\Sigma_u^+)$ についてまず, 図 3.16 に振動-電子励起-自由電子の並進温度最高点である壁面前方約 0.053m 位置での N_2^+ の電子励起状態分布を示す. $N_2^+(B^2\Sigma_u^+)$ の割合は平衡分布とほぼ一致しており, 衝撃波背後で急激に反応が進行し, 平衡状態に到達したと考えられる. 次に, CR モデルで計算している化学種が衝突する重粒子衝突, 自由電子衝突, 輻射の 3 種類の反応が $N_2^+(B^2\Sigma_u^+)$ の生成にどれだけ寄与したかを調べるため, 図 3.17 に淀み流線上における各反応の $N_2^+(B^2\Sigma_u^+)$ 生成率を示す. 衝撃層内の広範囲で自由電子衝突による密度増加と輻射による減少が支配的であり, 重粒子衝突は全体の生成率にほとんど寄与しないと考えられる.

$N_2(C^3\Pi_u)$ について, N_2^+ と同様に壁面前方約 0.053m 位置における N_2 の電子励起状態分布を図 3.18 に示す. $N_2(C^3\Pi_u)$ が平衡分布を上回っており, これが 2nd positive バンドの強度が Park モデルより高くなった要因である. 次に, 図 3.19 に淀み流線上における重粒子衝突, 自由電子衝突, 輻射による $N_2(C^3\Pi_u)$ 生成率分布を示す. $N_2(C^3\Pi_u)$ の生成は,

$N_2^+(B^2\Sigma_u^+)$ と同様に自由電子衝突による密度増加と輻射による密度減少が支配的となった。よって、 $N_2^+(B^2\Sigma_u^+)$ と $N_2(C^3\Pi_u)$ の生成は主に自由電子衝突によるものだと考えられる。また、それぞれの生成量を過大評価していると考えられることから、式(2.86)に示した自由電子衝突の反応速度定数が実際よりも大きい可能性がある。この反応速度定数はチューニングパラメータを含んでおり、より速度定数が小さくなるよう修正することで加熱予測精度向上につながるのではないかと考えられる。

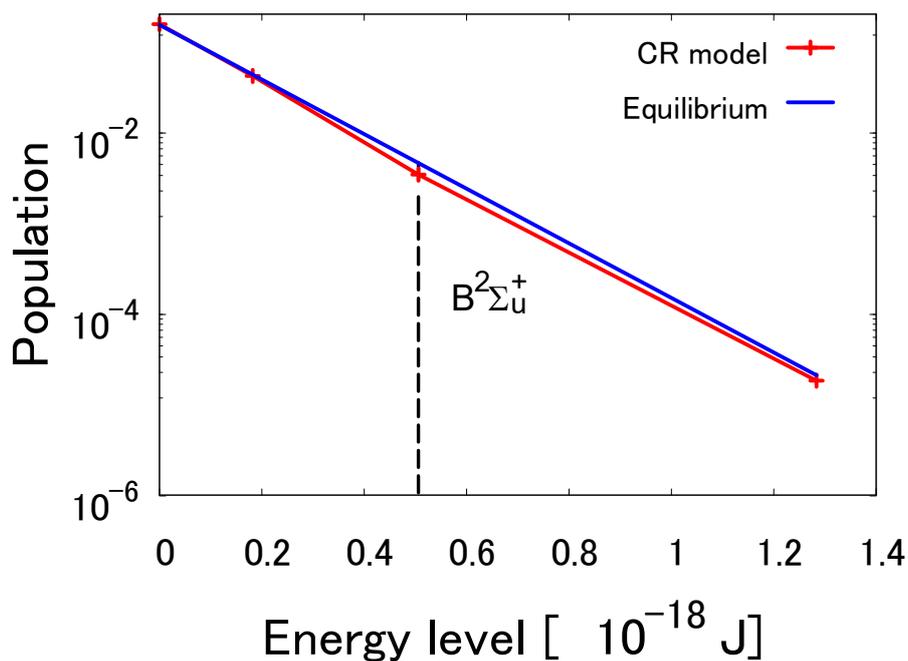


図 3.16 壁面前方約 0.053m 位置における N_2^+ の電子励起状態分布

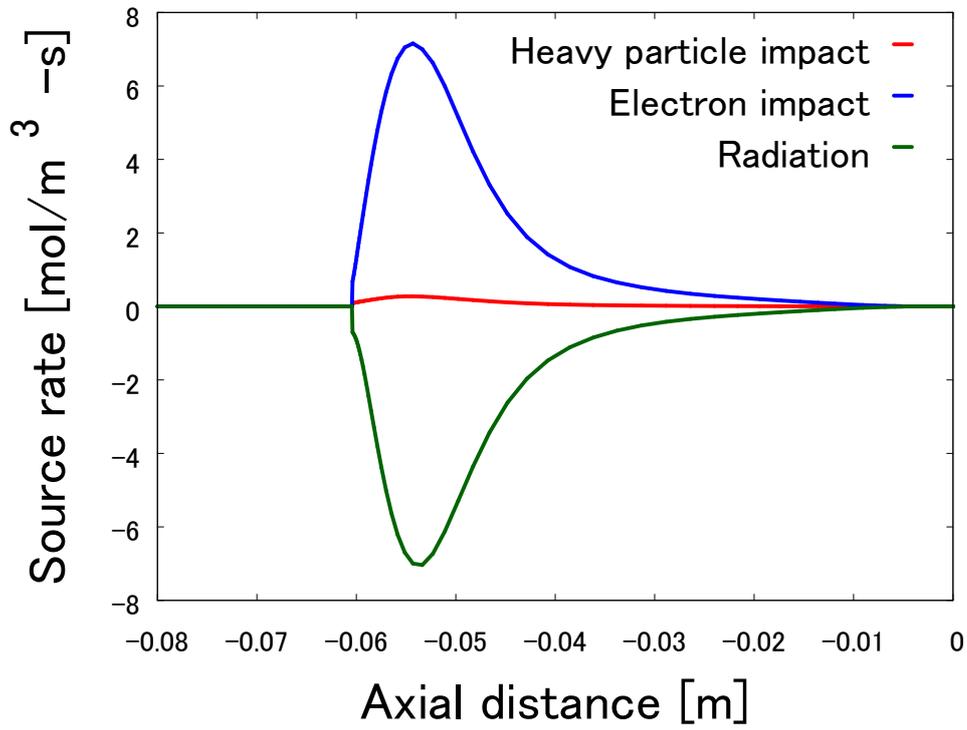


図 3.17 淀み流線上での $N_2^+(B^2\Sigma_u^+)$ 生成率分布

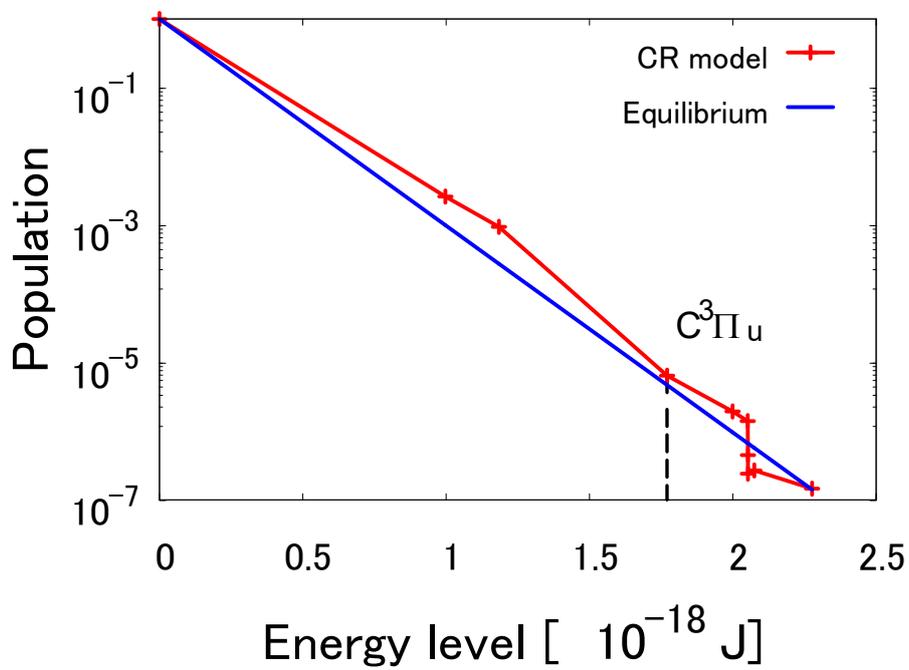


図 3.18 壁面前方約 0.053m 位置における N_2 の電子励起状態分布

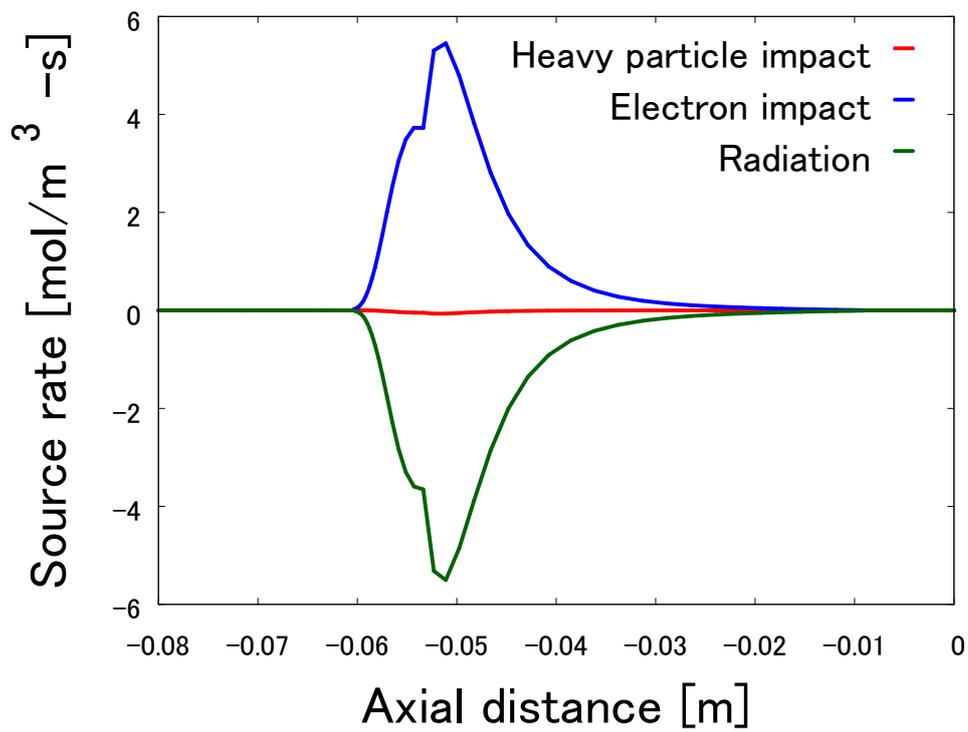


図 3.19 淀み流線上での $N_2(C^3\Pi_u)$ 生成率分布

第4章

結言

CR モデルと輻射熱輸送の結合計算による大気圏突入時の加熱予測精度向上を目的として、EAST で実施された実験のうち、非平衡性の異なる 2 つの流れ場について計算を実施し、Park モデルと輻射平衡を仮定した輻射熱輸送の結合計算との比較から、加熱予測精度の評価、さらなる精度向上のための考察を行った。

Test 50 Shot 29 は非平衡性が弱い流れ場であり、電子励起状態が平衡分布となったことからスペクトルは Park モデルとほぼ一致した。また計測結果との比較では、約 4,200Å から約 5,000Å の波長域での N, O の線スペクトル強度低下により、全体の波長積分値は計測結果を約 10% 下回ったが、約 4,200Å までの波長域において強度がよく一致した。

Test 59 Shot 15 は非平衡性が強く、衝撃層内の広範囲で熱非平衡となる流れ場であり、電子励起状態は平衡分布と異なる分布となった。スペクトル強度の比較では、計測結果との波長積分値の差が Park モデルと比較して約 16% 改善した。特に、NO γ バンドが支配的となる約 2,600Å 以下の波長域では強度が計測結果とほぼ一致した。しかし、約 2,600 Å 以上の波長域では強度が計測結果を上回った。この波長域では N₂ 2nd positive バンドと N₂⁺ 1st negative バンドが支配的であり、これらの強度を過大評価していると考えられる。

N₂ 2nd positive バンド、N₂⁺ 1st negative バンドを放射する遷移の上準位側の励起状態はそれぞれ N₂(C³Π_u)、N₂⁺(B²Σ_u⁺) であり、主に自由電子衝突反応によって生成される。よって、これらの励起状態の生成に寄与する自由電子衝突の反応速度定数を実際より過大評価していることが考えられる。

本研究で指摘した自由電子衝突の反応速度定数の過大評価については安部が提案したスペクトルフィッティングによる修正が有効だと考えられる[66]。EAST には本研究で計算した流れ場以外にも様々な主流条件で行われた実験データが数多く公開されており、これらの複数の流れ場に対して数値計算を行い、それぞれのスペクトル強度が測定結果と一致するよう反応速度定数を修正することで、さらなる加熱予測精度向上につながると考えられる。

参考文献

- [1] JAXA はやぶさ 2 プロジェクト, “小惑星探査機「はやぶさ 2」記者説明会”, December 24, 2020.
- [2] National Aeronautics and Space Administration (NASA) Press kit, ”OSIRIS-REx ASTEROID SAMPLE RETURN MISSION PRESS KIT”, September, 2023.
- [3] National Aeronautics and Space Administration (NASA), ”NASA’s Lunar Exploration Program Overview”, September, 2020.
- [4] Dempsey, R., ed., “The International Space Station Operating an outpost in the New Frontier”, NASA-SP-2017-634, 2017.
- [5] 宇宙開発戦略本部, ”宇宙基本計画工程表（令和 5 年度改訂）”, 2023.
- [6] National Aeronautics and Space Administration (NASA), ”Artemis I”, <https://www.nasa.gov/mission/artemis-i/>, (Retrieved January 23, 2024).
- [7] 山田哲哉, 安倍隆士, “「はやぶさ」カプセルの地球大気再突入時におけるプラズマ現象と圏周辺”, *Journal of Plasma and Fusion Research*, Vol. 82, No. 6, 2006, pp.368-374.
- [8] 久保田弘敏, 鈴木宏二郎, 綿貫忠晴, 宇宙飛行体の熱気体力学, 東京大学出版会, 2002.
- [9] H. Tanno, and T. Komuro, “Experimental Study of High-Enthalpy Heat Flux Augmentation in Shock Tunnels”, *Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, Vol. 29, No. 4, 2015, pp.858-862.
- [10] H. Takayanagi, A. Lemal, S. Nomura, and K., ”Measurements of Carbon Dioxide Nonequilibrium Infrared Radiation in Shocked and Expanded Flows”, *Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, Vol. 32, No. 2, 2018, pp.483-494.
- [11] S. Nonaka, T. Hashimoto, M. Furudate, and K. Takayama, “Measurement of Density Distribution over a Hemisphere in Ballistic Range”, *Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, Vol. 25, No. 3, 2011, pp.464-468.
- [12] 下田孝幸, 山田和彦, 高橋裕介, “JAXA 相模原アーク風洞の特性評価”, 第 46 回流体力学講演会/第 32 回航空宇宙数値シミュレーション技術シンポジウム論文集, 2015, pp. 13-16.
- [13] Jay H. Grinstead, Michael C. Wilder, Daniel C. Reda, Charles J. Cornelison, Brett A. Cruden and David W. Bogdanoff, “Shock tube and ballistic range facilities at NASA Ames Research Center”, RTO-EN-AVT-186, 2010.
- [14] Brett A. Cruden, “Absolute Radiation Measurements in Earth and Mars Entry Conditions”, ARC-E-DAA-TN13965, 2014.
- [15] A. M. Brandis and B. A. Cruden, “Benchmark Shock Tube Experiments of Radiative Heating Relevant to Earth Re-entry”, ARC-E-DAA-TN37935, 2017.
- [16] Brett A. Cruden, Aaron M. Brandis, “Measurement and Prediction of Radiative Non-equilibrium for Air Shocks Between 7-9 km/s”, AIAA paper 2017-4535, 2017.
- [17] A. M. Brandis, C. O. Johnston, B. A. Cruden, D. Prabhu and D. Bose, “Uncertainty Analysis and Validation of Radiation Measurements for Earth Reentry”, *Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, Vol. 29, No. 2, 2015, pp.209-221.
- [18] Jae Gang Kim and Sung Min Jo, “Modification of chemical-kinetic parameters for 11-air species in re-entry flows”, *Internal Journal of Heat and Mass Transfer*, Vol. 169, 2021.
- [19] C. Park, Nonequilibrium Hypersonic Aerothermodynamics, John Wiley and Sons Inc., New York, 1989.
- [20] C. Park, “Assessment of Two-Temperature Kinetic Model for Ionizing Air”, *Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, Vol. 3, 1999, pp. 233–244.
- [21] Arnaud Bultel, Bruno G. Chéron, Anne Bourdon, Ousmanou Motapon, Ioan F. Schneider, ” Collisional-radiative model in air for earth re-entry problems”, *Physics of Plasmas*, Vol.13,issue 4, 2006.

- [22] Christopher O. Johnston, Brian R. Hollis and Kenneth Sutton, “Non-Boltzmann Modeling for Air Shock-Layer Radiation at Lunnar-Return Conditions”, *Journal of Spacecraft and Rockets*, Vol. 45, No. 5, 2008.
- [23] Marco Panesi, Thierry Magin, Anne Bourdon, Arnaud Bultel and O. Chazot, “Fire II Flight Experiment Analysis by Means of a Collisional-Radiative Model”, *Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, Vol. 23, No. 2, 2009, pp.236-248.
- [24] A. Lemal, C. M. Jacobs, M.-Y. Perrin, and C.O. Laux, “Air Collisional-Radiative Modeling with Heavy-Particle Impact Excitation Processes”, *Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, Vol. 30, No. 1, 2016, pp.226-239.
- [25] 砂辺一行, “アーク加熱風洞内異常輻射加熱の再現を目指した励起非平衡計算コードの構築”, 高知工科大学修士学位論文, 2021.
- [26] G. Palumbo, R. G. Craig, E. W. Whiting, and C. Park, “Measured Specific Intensity from 130 to 900nm at the Stagnation Point of a Model in Arcjet Flow of 7.8km/sec”, *Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer*, Vol. 57, No. 2, pp. 207-236,1997.
- [27] J. H. Lee, “Basic Governing Equations for the Flight Regimes of Aeroassisted Orbital Transfer Vehicles”, AIAA paper 84-1729,1984.
- [28] Roop N. Gupta, Jerrold M. Yos, Richard A. Thompson, Kam-Pui Lee, “A review of reaction rates and thermodynamic and transport properties for an 11-species air model for chemical and thermal nonequilibrium calculations to 30000 K”, NASA-RP-1232,1990.
- [29] Kenneth Sutton, Peter A. Gnoffo, “Multi-Component Diffusion with Application To Computational Aerothermodynamic”, AIAA paper 98-2575,1998.
- [30] Y. Wada, and M. S. Liu, “A Flux Splitting Scheme with High-Resolution and Robustness for Discontinuities,” AIAA Paper 94-0083, 1994.
- [31] B. Van Leer, “Towards the Ultimate Conservation Difference Scheme V, A Second-Order Sequel to Godunov’s Method,” *Journal of Computational Physics*, Vol. 32, 1979, pp. 101–136.
- [32] Y. Ogino and N. Ohnishi, “A collisional-radiative code for computing air plasma in high enthalpy flow”, *Shock Waves*, Vol. 21, pp. 289-299, 2011.
- [33] Y. Ogino, PhD thesis, Department of Aerospace Engineering, Tohoku University, 2009.
- [34] National Institute of Standards and Technology(NIST) Physics Laboratory, “NIST Atomic Spectra Database Version 3”, 2008.
- [35] P. Teulet, J. P. Sarrette, and A. M. Gomes, “Calculation of Electron Impact In-elastic Cross Sections and Rate Coefficients for Diatomic Molecules. Application to Air Molecules”, *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, Vol. 62, pp. 549-569, 1999.
- [36] Y. Saruhashi, Master's thesis, Department of Aerospace Engineering, Nagoya University, 2008.
- [37] S. N. Nahar and A. K. Pradhan, “Electron-Ion Recombination Rate Coefficients, Photoionization Cross Sections, And Ionization Fractions for Astrophysically Abundant Elements. I. Carbon and Nitrogen”, *Astrophysical Journal Supplement Series*, Vol. 111, No. 1, pp. 339-355, 1997.
- [38] S. N. Nahar, “Electron-Ion Recombination Rate Coefficients, Photoionization Cross Sections, And Ionization Fractions for Astrophysically Abundant Elements. II. Oxygen Ions”, *Astrophysical Journal Supplement Series*, Vol. 120, No. 1, pp.131-145, 1999.
- [39] H. W. Drawin, “Collision and Transport Cross Sections”, Tech. Rep. EUR-CEA-FC-383 revised, Fontenay-aux-Roses, 1967.
- [40] A. Bultel, B. G. Cheron, and A. C. Bourdon, “Collisional-Radiative Model in Air for Earth Re-entry Problems”, *Physics of Plasma*, Vol. 13, No. 043502, pp.1-11, 2006.
- [41] C. Park, “Rate Parameters for Electronic Excitation of Diatomic Molecules : Electron-Impact Processes”, AIAA Paper 2008-1207, 2008.
- [42] D. A. Barry, J. Y. Parlange, and L. Li, “Approximation for The Exponential Integral (Theis Well Function)”, *Journal of Hydrogen*, Vol. 227, pp. 287-291, 2000.
- [43] H. W. Drawin, *Plasma Diagnostics*, North Holland, Amsterdam, 1968.

- [44] A. Bourdon and P. Vervisch, "Three-body recombination rate of atomic nitrogen in low-pressure plasma flows", *Physical Review E*, Vol. 54, No. 2, pp. 1888-1898, 1996.
- [45] J. Bacri and A. Medani, "Electron diatomic molecule weighted total cross section calculation. I. Principles for calculation", *Physica 101C*, pp. 399-409, 1980.
- [46] J. Bacri and A. Medani, "Electron diatomic molecule weighted total cross section calculation. II. Application to the nitrogen molecule", *Physica 101C*, pp. 410-419, 1980.
- [47] Bose and G. V. Candler, "Thermal Rate Constants of the $N_2 + O \rightarrow NO + N$ Reaction Using abinitio $3A''$ and $3A'$ Potential Energy Surfaces", *Journal of Chemical Physics*, Vol. 104, No. 8, pp. 2825- 2833, 1996.
- [48] D. Bose and G. V. Candler, "Thermal Rate Constants of the $O_2 + N \rightarrow NO + O$ Reaction based on the $2A'$ and $4A'$ Potential Energy Surfaces", *Journal of Chemical Physics*, Vol. 107, No. 16, pp. 6136- 6145, 1997.
- [49] A. M. Starik, N. S. Titova, and I. V. Arsentiev, "Comprehensive analysis of the effect of atomic and molecular metastable state excitation on air plasma composition behind strong shock waves", *Journal of Plasma Sources Sci. Technol.*, Vol. 19, No. 1, 015007, 2010.
- [50] Y. Morii, H. Terashima, M. Koshi, T. Shimizu, E. Shima, "Fast and robust time integration method for stiff chemical kinetic ODEs", AIAA paper 2014-3920, 2014.
- [51] Matsuyama, S., *Numerical Study of Galileo Probe Entry Flowfield*, PhD thesis, Tohoku University, 2004.
- [52] W. G. Vincenti, C. H. Kruger, Introduction to Physical Gas Dynamics, John Wiley and Sons, Inc., 1965.
- [53] NIST ChemistryWebBook, NIST Standard Reference Database Number 69, March, 2009 Release (<http://webbook.nist.gov/chemistry/>).
- [54] H. Werner, J. Kalcher, and E.A. Reinsch, "Accurate ab-initio calculations of radiative transition probabilities between the $A^3\Sigma_u^+$, $B^3\Pi_g$, $W^3\Delta_u$, $B^3\Sigma_u^-$ and $C^3\Pi_u$ state of N_2 ", *Journal of Chemical Physics*, Vol. 81, No. 5, pp. 2420-2431, 1984.
- [55] F.R. Gilmore, R.R. Laher, and P.J. Espy, "Franck-Condon Factors, r-centroids, Electronic Transition Moments, and Einstein Coefficients for Many Nitrogen and Oxygen Band Systems", *Journal of Physical Chemical Reference Data*, Vol. 21, No. 5, pp. 1005-1107, 1992.
- [56] D. Stahel, M. Leoni, and K. Dressler, "Nonadiabatic representations of the $^1\Sigma_u^+1$ and $1\Pi_u$ states of the N_2 molecule", *Journal of Chemical Physics*, Vol. 79, No. 6, pp. 2541-2558, 1983.
- [57] S. R. Langhoff, C. W. Bauschlicher Jr., and H. Partridge, "Theoretical Study of the N_2^+ Meinel System", *Journal of Chemical Physics*, Vol. 87, No. 8, pp. 4716-4721, 1987.
- [58] S. R. Langhoff and C. W. Bauschlicher Jr., "Theoretical Study of the First and Second Negative systems of N_2^+ ", *Journal of Chemical Physics*, Vol. 88, No. 1, pp. 329-336, 1988.
- [59] S. R. Langhoff, H. Partridge, C. W. Bauschlicher Jr., and A. Komornicki, "Theoretical Study of the $NO \beta$ System", *Journal of Chemical Physics*, Vol. 94, No. 10, pp. 6638-6643, 1991.
- [60] S. R. Langhoff, C. W. Bauschlicher Jr., and H. Partridge, "Theoretical Study of the $NO \gamma$ System", *Journal of Chemical Physics*, Vol. 89, No. 8, pp. 4909-4917, 1988.
- [61] R. De Vivie and S. D. Peyerimhoff, "Theoretical Spectroscopy of The NO Radical. I. Potential Curves and Lifetimes of Excited States", *Journal of Chemical Physics*, Vol. 89, No. 5, pp. 3028-3043, 1988.
- [62] A. C. Allison, S. L. Guberman, and A. A. Dalgarno, "A Model of The Schumann-Runge Continuum of O_2 ", *Journal of Geophysical Research*, Vol. 91, No. A9, pp.193-198, 1986.
- [63] R. S. Friedman, "Oscillator Strengths of Schumann-Runge Bands of Isotopic Oxygen Molecules", *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, Vol. 43, No. 3, pp. 225-238, 1990.
- [64] C. Bauschlicher, H. Partridge, and S. R. Langhoff, "Theoretical Study of the $NO b^4\Sigma^-$ and $O_2^+ b^4\Sigma_g^-$ Radiative Lifetimes", *Chemical Physics Letter*, Vol. 211, No. 4,5, pp. 312-318, 1993.

- [65] Brett Cruden , "Electric Arc Shock Tube (EAST) Test Data",
(<https://data.nasa.gov/docs/datasets/aerothermodynamics/EAST/index.html>), (Retrieved August 31,2023).
- [66] 安部翔太, "スペクトルフィッティングを用いた極超音速流れ場計算の高精度化へ向けた提案", 高知工科大学修士学位論文, 2024.

謝辞

本研究を行うにあたり、高知工科大学の荻野要介講師には多大なる御指導、御支援を賜りました。心より感謝申し上げます。毎週のミーティングだけでなく、研究で行き詰まるたびに、多くの助言や励ましのお言葉を頂きました。また、学会発表の機会を与えて頂き、全国の研究者の方々へ研究を発表する貴重な経験を得ることができました。重ねてお礼申し上げます。そして、新入生歓迎会では横山君と中澤君と共に海水浴ができ、良き思い出となりました。

高知工科大学の野崎理教授には、研究報告会や発表練習等で、私の拙い発表に対して、発表の問題点や、どうすれば相手に伝わる発表になるのか等多くのご指導頂きました。厚く感謝申し上げます。

同期の岩田君、久保田君、野老山君、沼野君、東谷君をはじめとした航空エンジン超音速流研究室の皆様には、日頃の相談や雑談を通して多くの楽しい時間を過ごすことができました。深く感謝申し上げます。

また、RaSKの先輩である筒井爽太様には、雑談や休日の遊びを通して精神面で大きな支えとなりました。この場を借りて御礼申し上げます。

そして、食料面において、FamilyMart 土佐山田談議所前店、くいしんぼ如月土佐山田店には大変お世話になりました。関係者の皆様、ありがとうございました。願わくば、まんぷくはみ出し弁当第 204 弾 お蕎麦屋さんの出汁香るカツカレーと天ぷらの合盛り丼をもう一度食べたいです。

最後に、楽しい学生生活を送れるよう、経済面、心理面で多大なる援助をしてくださった両親と妹には心より感謝を申し上げます。