

研究種目：基盤研究 (B)

研究期間：2006～2008

課題番号：18360413

研究課題名 (和文)：先進的光学計測と微視的状态遷移理論の融合による
非平衡熱化学過程の高精度モデル化研究課題名 (英文)：Improved Modeling of Nonequilibrium Thermochemistry by Advanced
Optical Measurement and Microscopic State-to-state Analysis

研究代表者

藤田和央 (Fujita Kazuhisa)

宇宙航空研究開発機構 研究開発本部 主幹研究員

研究者番号：90281584

研究成果の概要：将来の大気再突入システムや惑星探査大気プローブの飛行環境（衝撃波速度～12 km/s）を実現できる装置として自由ピストン 2 段隔膜衝撃波管を開発し、先進的な超高速イメージング分光と computer aided molecular spectroscopy 法を用いて衝撃波背後の熱化学プロセスを計測することにより、従来の熱化学反応モデルを改善した。また量子化学計算により N₂-N₂ および CO-O 分子間相互作用ポテンシャルを解析し、これを用いた準古典的衝突解析を統計的に行うことにより、従来実験的に得られた温度範囲よりもより高温の領域において N₂ や CO 分子の内部モードの熱的緩和・解離速度係数を取得し、反応流解析のための巨視的モデルを開発した。

交付額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2006 年度	10,600,000	3,180,000	13,780,000
2007 年度	2,700,000	810,000	3,510,000
2008 年度	2,200,000	660,000	2,860,000
年度			
年度			
総計	15,500,000	4,650,000	20,150,000

研究分野：工学

科研費の分科・細目：総合工学・航空宇宙工学

キーワード：航空宇宙流体・構造・航法・制御・推進

1. 研究開始当初の背景

将来の大気再突入システムや惑星探査大気プローブを開発する中で、飛行環境を予測し、機体の極超音速空力設計を行い、空力加熱から機体を防御する熱防御システムを設計することは重要な課題であるが、従来用いられている半経験的な熱化学モデルの精度には限度があり、特に高温や強い非平衡過程では正確な予測が困難であった。これらの精度を向上させるためには、先進的な実験によるデータの蓄積と、物理過程を正確に反映したモデル化が必要である。

2. 研究の目的

そこで本研究では、将来の惑星サンプルリターンや金星・火星探査で、特に重要と考えられる N₂ (地球大気突入) および CO₂ (金星・火星大気突入) の熱的緩和・解離反応モデルの改善を目的として、これらの大気突入条件を実現可能な試験装置の開発を行い、これを用いた先進的な光学計測により熱化学データ取得を狙う。また微視的過程まで考慮した数値解析によりこれらの実験結果と合わせて、改善された熱化学モデルの開発を行う。

3. 研究の方法

(1) 実験手法

本研究ではまず、将来の大気再突入システムや惑星探査大気プローブの飛行環境（飛行速度 $\sim 12\text{km/s}$ ）を実験室に再現する装置として、中型の自由ピストン二段隔膜衝撃波管を開発する。従来の手法よりも正確に衝撃波位置および速度を計測する装置として、ダブルレーザーシュリーレン（DLS）システムを開発し、衝撃波管観測部に取り付ける。またゲート式ICCDを備えた超高速イメージング分光システムを開発し、DLSと合わせて衝撃波背後の放射スペクトルを高い空間解像度で取得する。得られたデータを、輻射解析コードSPRADIAN2を用いたCAMS法（computer aided molecular spectroscopy法）により処理し、衝撃波背後の N_2 分子の分子一回転励起状態や温度の空間変化を取得する。

(2) 解析手法

量子論的解析コード（GAUSSIAN03）を用いた *ab initio* 電子軌道解析により $\text{N}_2\text{-N}_2$ および CO-O 分子間衝突ポテンシャル面を決定し、解析近似を行う。これらポテンシャルモデルを用いて $\text{N}_2\text{-N}_2$ および CO-O 分子間衝突の準古典的軌道解析を行い、統計処理により状態遷移速度係数、解離係数を決定する。次に、これら状態遷移速度係数、解離係数を解析的に近似して数値解析に供する形に整備する。さらに、上記係数を利用したマスタ方程式、モンテカルロ直接法—準古典的衝突解析（DSMC-QCT解析）により、従来実験的に得られた温度範囲よりもより高温の領域において、 N_2 分子、 CO 分子の巨視的な回転—動緩和モデル、および解離モデルの開発を行う。

4. 研究成果

(1) 高速衝撃波管の開発

将来の大気再突入システムや惑星探査大気プローブの飛行環境を地上に実現するためには、飛行速度に相当する衝撃波速度を実現できる衝撃波管が有効である。そこで本研究では、最大衝撃波速度 14 km/s を目標とした自由ピストン二段隔膜衝撃波管を開発した。図1にその外観を示す。また本衝撃波管の最大性能マップを図2に示す。図2に示すように本衝撃波管は、スペースシャトルなど地球周回軌道からの大気突入はもとより、ハヤブサ大気再突入カプセルの大気再突入条件を完全に再現する能力を有しており、当初目標とした性能を実現することが出来た。

(2) 超高速イメージング分光システムの開発
2台のHe-Neレーザーと高応答のアバランチエピンプトダイオードからなるダブルレーザーシュリーレン（DLS）システムを開発し、衝撃波管観測部に取り付けることにより、



図1：高速衝撃波管外観図。

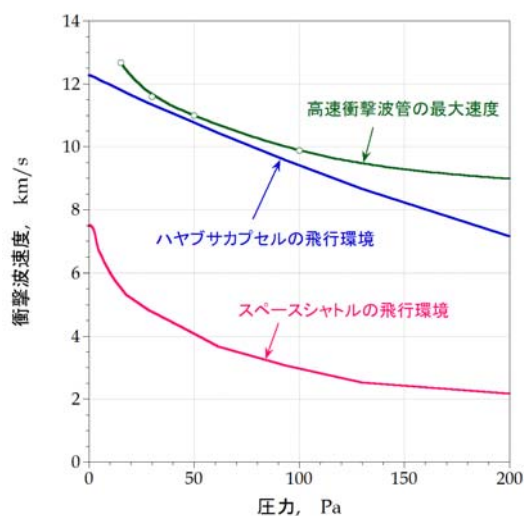
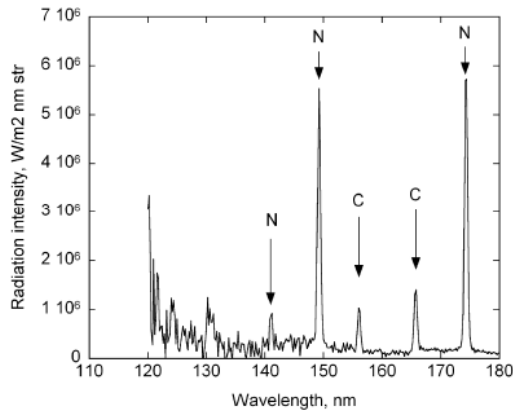


図2：高速衝撃波管最大性能マップ。

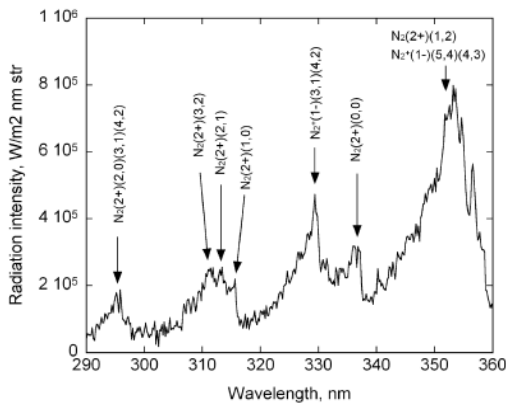
$\pm 0.3\text{ mm}$ の空間精度で衝撃波面の位置を計測することに成功した。また高速ゲート機能を有するICCDと真空紫外（VUV）及び可視—赤外（UV-IR）分光器からなる超高速イメージング分光システムを開発し、DLSと合わせて衝撃波背後の放射スペクトルを高い空間解像度で取得することに成功した。図3に N_2 ガスを試験気体とする場合のVUVおよびUV分光スペクトルデータの一例を示す。得られたスペクトルデータは輻射解析コードであるSPRADIAN2を用いたCAMS法（computer aided molecular spectroscopy法）により処理し、分子の振動—一回転励起状態や温度データに変換される。これにより、衝撃波背後の分子内部励起状態や温度の空間変化が正確に取得できるようになり、熱化学反応モデル改善のためのデータ取得が可能となった。

(3) DSMC-QCT法の開発

熱化学反応モデルの改善を行うもう一つの試みは、物理現象に忠実な過程—分子衝突—



a) VUV スペクトル.

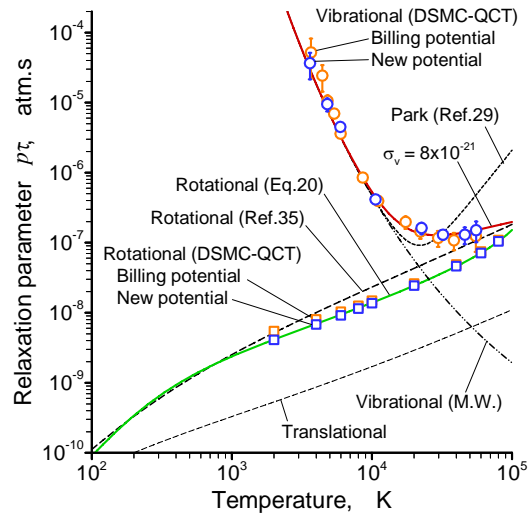


b) UV スペクトル

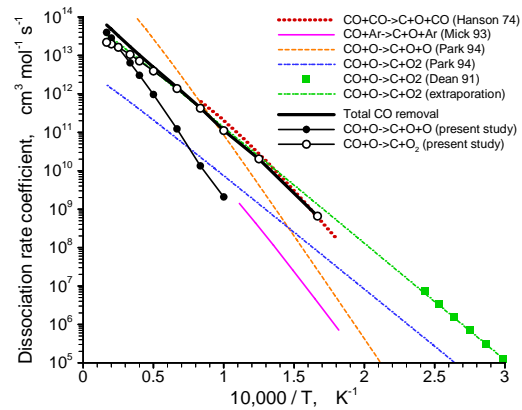
図 3：衝撃波背後のスペクトル例（試験気体=N₂, 衝撃波速度=10.0±0.1 km/s, 観測位置=衝撃波背後 2±0.3 mm）.

を再現する微視的解析手法により気相反応を統計的に取り扱い、巨視的な数理モデルを得る手法である。これを実現するには、分子衝突のポテンシャル面を定義し、これを用いた衝突解析を行わなければならない。衝撃波背後の高温気相中の現象を調べるには、数 eV まで定義されたポテンシャル面が必要となるが、一般にこのようなポテンシャル面は定義されていない。そこで本研究では、量子論的解析コード (GAUSSIAN03) を用いた *ab initio* 電子軌道解析により N₂-N₂ および CO-O 分子間衝突ポテンシャル面を決定し、解析近似を行った。これらポテンシャルモデルを用いて N₂-N₂ および CO-O 分子間衝突の準古典的軌道解析 (QCT) をモンテカルロ直接法 (DSMC 法) により行うという、DSMC-QCT 法を開発し、統計処理により状態遷移速度係数、解離係数を決定し、従来実験的に得られた温度範囲よりもより高温の領域において、N₂ 分子、CO 分子の巨視的な回転-動緩和モデル、および解離モデルを開発した。図 4 にその一例を示す。解析結果は実験データにより検証を行い、広い温度領域で

の一致が確認された。



a) N₂ の回転-振動緩和パラメータ.



b) CO の解離速度係数.

図 4：量子解析によるポテンシャル面を用いて行った DSMC-QCT 解析により得られた N₂ の緩和パラメータと CO の解離速度係数の例。

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計 13 件)

- [1] Fujita, K., Sumi, T, Yamada, T., and Ishii, N., "Heating Environments of a Venus Entry Capsule in a Trail Balloon Mission," *Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, Vol.20, No.3, 2006, pp. 507-516.
- [2] Furudate, M., Fujita, K., and Abe, T., "Coupled Rotational-Vibrational Relaxation of Molecular Hydrogen at High Temperatures," *Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, Vol.20, No.3, 2006, pp. 457-464.

- [3] Matsuyama, S., Shimogaya, Y., Ohnishi, N., Sasoh, A., and Sawada, K., "Multiband Radiation Model for Simulation of Galileo Probe Entry Flowfield," *Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, Vol.20, No.3, 2006, pp. 611-614.
- [4] Sakai, T., Suzuki, T., Fujita, K., and Ito, T., "Calculation of High-Enthalpy Aerothermal Environment in an Arcjet Facility," *Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, Vol.21, No.1, 2007, pp.249-251.
- [5] Suzuki, T., Sakai, T., and Yamada, T., "Calculation of Thermal Response of Ablator Under Arcjet Flow Condition," *Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, Vol.21, No.2, 2007, pp.257-266.
- [6] Suzuki, T., Fujita, K., Ando, K., Sakai, T., "Experimental Study of Graphite Ablation in Nitrogen Flow," *Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, Vol.22, No.3, 2008, pp. 382-389.
- [7] Fujita, K., Mizuno, M., Ishida, K., and Ito, T., "Spectroscopic Flow Evaluation in Inductively Coupled Plasma Wind Tunnel," *Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, Vol.22, No.4, 2008, pp.685-694.
- [8] 山田剛治, 鈴木俊之, 高柳大樹, 藤田和央, "再突入飛行技術向上を目的とした衝撃波管の開発," 日本航空宇宙学会誌論文集(査読済).
- [9] Kurosawa, K., Sugita, S., Fujita, K., Ishibashi, K., Kadono, T., Ohno, S., Matsui, T., "Rotational-Temperature Measurements of Chemically Reacting CN Using Band-Tail Spectra," *Journal of Thermophysics and Heat Transfer* (accepted for publication).
- [10] Fujita, K., Suzuki, T., Mizuno, M., Fujii, K., "Comprehensive Flow Characterization in a 110-kW Inductively-Coupled-Plasma Heater," *Journal of Thermophysics and Heat Transfer* (accepted for publication).
- [11] Suzuki, T., Fujita, K., and Sakai, T., "Graphite Nitridation in Lower Surface Temperature Regime," *Journal of Thermophysics and Heat Transfer* (accepted for publication).
- [12] Suzuki, T., Fujita, K., and Sakai, T., "Experimental Study of Graphite Ablation in Nitrogen Flow, Part II: Further Numerical Analysis," *Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, (accepted for publication).
- [13] 藤田和央, "CO-O 衝突による CO の内部モード緩和と解離の DSMC-QCT 解析," 日本航空宇宙学会誌論文集(査読済).
- [1] Fujita, K., Matsukawa, Y., Yamada, T., and Ishii, N., "Evaluation of Heat Transfer Rates of Venus Entry Capsules Along Flight Trajectories," AIAA Paper 2006-3580, 9th AIAA/ASME Joint Thermophysics and Heat Transfer Conference, San Francisco, California, USA, June 2006.
- [2] Fujita, K., and Yamada, T., "Conceptual Study of Venus Balloon Mission Using a Compact Aerocapture System," 1st International ARA Days - Atmospheric Reentry Systems, Missions and Vehicles, Arcachon, France, July 2006.
- [3] 藤田 和央, "アブレーション熱防御評価のための熱化学物性値と動的モデルの改善," 日本流体力学会 年会 2006, 九州大学, 福岡県春日市, 2006年9月.
- [4] 鈴木俊之, 藤田和央, 酒井 武治, "アブレータの熱応答に対する気相-固相反応モデルの影響," 第38回流体力学講演会, 室蘭工業大学, 北海道室蘭市, 2006年9月.
- [5] 藤田和央, 松山新吾, 鈴木俊之, 松川豊, "惑星大気突入飛行環境評価技術と熱防御評価技術の向上," JAXA 総研本部・科学本部合同成果報告会, 筑波宇宙センター, 茨城県つくば市, 2006年11月.
- [6] 松山新吾, "木星大気圏突入時の空力加熱予測における感度解析-C₃の吸収断面積データの不確定性による影響," 第20回数値流体力学シンポジウム, 名古屋大学, 愛知県名古屋市, 2006年12月.
- [7] Matsuyama, S., Furudate, M., and Fujita, K., "Numerical Attempt for Reproducing the Surface Recession Data of Galileo Probe," AIAA Paper 2007-414, 45th AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit, Reno, Nevada, USA, January 2008.
- [8] Sakai, T., Saruhashi, Y., Suzuki, T., and Matsuyama, S., "Calculation of Radiation from a Shock Layer Flow in an Arc-Jet Facility," AIAA Paper 2007-0808, 45th AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit, Reno, Nevada, USA, January 2008.
- [9] Suzuki, T., Mizuno, M., Fujita, K., and Sakai, T., "Experimental and Numerical Study of Thermal Response of Ablator in an Arc-Jet Facility," AIAA Paper 2007-0415, 45th AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit, Reno, Nevada, USA, January 2008.
- [10] Suzuki, T., Fujita, K., Sakai, T., "Experimental and Numerical Study of Surface Nitridation of Thermal Protection Material," Lectures and Workshop International - Recent Advances in Multidisciplinary Technology and Modeling

[学会発表] (計 44 件)

- , Univ. of Tokyo, Tokyo, Japan, May 2008.
- [11] Suzuki, T., Fujita, K., and Sakai, T., “Observation of Graphite Nitridation in High Enthalpy Wind Tunnel,” AIAA Paper 2007-4402, 39th AIAA Thermophysics Conference, Miami, FL, USA, June 2007.
- [12] Fujita, K., “Assessment of Molecular Internal Relaxation and Dissociation by DSMC-QCT Analysis,” AIAA Paper 2007-4345, 39th AIAA Thermophysics Conference, Miami, FL, USA, June 2007.
- [13] 藤田和央, 鈴木俊之, 山田剛司, “大気突入極超音速機の空力加熱評価のための衝突積分モデルについて,” 第 51 回宇宙科学技術連合講演会, 札幌コンベンションセンター, 北海道札幌市, 2007 年 10 月.
- [14] 山田剛司, 藤田和央, 鈴木俊之, “熱化学モデルの開発と改善を目的とした衝撃波管の開発,” 第 51 回宇宙科学技術連合講演会, 札幌コンベンションセンター, 北海道札幌市, 2007 年 10 月.
- [15] 藤田和央, 鈴木俊之, 松山新吾, “月・惑星探査と将来輸送システムを支える熱化学流体解析技術の開発,” JAXA 総研・宇宙研・利用本部・月惑星合同研究発表会, 筑波宇宙センター, 茨城県つくば市, 2007 年 11 月.
- [16] 藤田和央, 鈴木俊之, 山田剛治, “再突入飛行環境評価技術向上のための高速衝撃波管の開発,” 第 79 回風洞研究会, 岐阜県各務原テクノプラザ, 岐阜県各務原市, 2007 年 11 月.
- [17] 藤田和央, “窒素分子の回転振動緩和モデル—微視的解析とマクロモデル—,” 平成 19 年度宇宙航行の力学シンポジウム, 宇宙科学研究本部, 神奈川県相模原市, 2007 年 12 月.
- [18] 藤田和央, 水野雅仁, 石田清道, 藤井啓介, 長井遵正, “ARC 110 kW 誘導加熱風洞の試験気流検定,” 平成 19 年度宇宙航行の力学シンポジウム, 宇宙科学研究本部, 神奈川県相模原市, 2007 年 12 月.
- [19] 山田剛治, 藤田和央, 鈴木俊之, “衝撃波管を用いた非平衡熱化学過程研究のための予備試験,” 平成 19 年度宇宙航行の力学シンポジウム, 宇宙科学研究本部, 神奈川県相模原市, 2007 年 12 月.
- [20] 菊池庄太, 藤田和央, “N₂-N 衝突の半古典的解析,” 平成 19 年度宇宙航行の力学シンポジウム, 宇宙科学研究本部, 神奈川県相模原市, 2007 年 12 月.
- [21] 鈴木俊之, 藤田和央, 酒井武治, “グラフアイトの窒化特性解明に向けた実験的数値的研究,” 平成 19 年度宇宙航行の力学シンポジウム, 宇宙科学研究本部, 神奈川県相模原市, 2007 年 12 月.
- [22] Fujita, K., Suzuki, T., Mizuno, M., and Fujii, K., “Comprehensive Characterization of Test Flows in 110-kW Inductively-Coupled-Plasma Heater,” AIAA Paper 2008-1254, 46th AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit, Reno, Nevada, USA, January 2008.
- [23] Suzuki, T., Fujita, K., and Sakai, T., “Numerical Analysis of Graphite Ablation in Nitrogen Flow,” AIAA Paper 2008-1217, 46th AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit, Reno, Nevada, USA, January 2008.
- [24] 山田剛治, 鈴木俊之, 藤田和央, “強い衝撃波背後の窒素分子の回転・振動温度計測,” 平成 19 年度衝撃波シンポジウム, 東京工業大学, 東京都目黒区, 2008 年 3 月.
- [25] Fujita, K., “State-Resolved Vibrational Relaxation and Dissociation Kinetics of N₂,” Paper ISTS 2008-e-27, 26th International Symposium on Space Technology and Science, Hamamatsu, Shizuoka, Japan, June 2008.
- [26] Yamada, T., Hirose, K., Toda, T., Takeuchi, H., Izutsu, N., Fujita, K., and Ishii, N., “Research Activities on Venus Atmosphere Balloon Observation Mission,” Paper ISTS 2008-k-15, 26th International Symposium on Space Technology and Science, Hamamatsu, Shizuoka, Japan, June 2008.
- [27] Fujita, K., “Vibrational Relaxation and Dissociation Kinetics of CO by CO-O Collisions,” AIAA Paper 2008-3919, 40th AIAA Thermophysics Conference, Seattle, WA, USA, June 2008.
- [28] Yamada, G., Takayanagi, H., Fujita, K., and Suzuki, T., “Measurements of Rovibrational Temperatures Derived from N₂ (1+) and N₂ (2+) behind Shock Waves,” AIAA Paper 2008-4253, 40th AIAA Thermophysics Conference, Seattle, WA, USA, June 2008.
- [29] 鈴木俊之, 藤田和央, 酒井武治, “窒素気流中におけるグラフアイトアブレーションに関する実験的数値的研究,” 第 40 回流体力学講演会/航空宇宙数値シミュレーション技術シンポジウム 2008, 東北大学, 宮城県仙台市, 2008 年 6 月.
- [30] 藤田和央, 水野雅人, 石田清道, 鈴木俊之, 藤井啓介, “熱防御システムの高信頼性評価に向けた誘導加熱風洞の高精度気流検定,” 第 40 回流体力学講演会/航空宇宙数値シミュレーション技術シンポジウム 2008, 東北大学, 宮城県仙台市, 2008 年 6 月.
- [31] 山田剛治, 藤田和央, 鈴木俊之, “窒素分子の緩和現象における電子励起準位の

- 影響,” 第40回流体力学講演会/航空宇宙数値シミュレーション技術シンポジウム 2008, 東北大学, 宮城県仙台市, 2008年6月.
- [32] Fujita, K. and Noda, A., “Aerodynamics of Satellites on a Super Low Earth Orbit,” 26th International Symposium on Rarefied Gas Dynamics, Kyoto, Japan, July 2008.
- [33] Fujita, K. and Yamada, T., “Preliminary Study of Venus Exploration with Aerocapture System,” AIAA Paper 2008-6392, AIAA Atmospheric Flight Mechanics Conference and Exhibit, Honolulu, Hawaii, August 2008.
- [34] 鈴木俊之, 大澤弘始, 高柳大樹, 藤田和央, “SiC表面上の窒素原子触媒性再結合反応に関する実験的数値的研究,” 日本流体力学学会年会 2008, 神戸大学, 兵庫県神戸市, 2008年9月.
- [35] 山田剛治, 高柳大樹, 藤田和央, 鈴木俊之, “N₂(1+)バンドから求めた衝撃背後の窒素分子の緩和現象,” 日本流体力学学会年会 2008, 神戸大学, 兵庫県神戸市, 2008年9月.
- [36] 藤田和央, “CO-O 衝突による CO の内部モード緩和と乖離の DSMC-QCT 解析,” 日本流体力学学会年会 2008, 神戸大学, 兵庫県神戸市, 2008年9月.
- [37] 藤田和央, 鈴木俊之, 高柳大樹, 加納希生, “火星・金星探査におけるエアロキャプチャシステムの検討,” 第52回宇宙科学技術連合講演会, 淡路夢舞台国際会議場, 兵庫県淡路市, 2008年11月.
- [38] 鈴木俊之, 高柳大樹, 加納希生, 藤田和央, “アブレーション熱防御システムを用いたエアロキャプチャシステムの検討,” 第52回宇宙科学技術連合講演会, 淡路夢舞台国際会議場, 兵庫県淡路市, 2008年11月.
- [39] 古館美智子, 竹内玲司, 保江かな子, 澤田恵介, 藤田和央, “熱化学非平衡を考慮した二酸化炭素大気を飛行する宇宙機の空力解析,” 第52回宇宙科学技術連合講演会, 淡路夢舞台国際会議場, 兵庫県淡路市, 2008年11月.
- [40] 鈴木俊之, 藤田和央, 酒井武治, “グラフアイト表面上の窒化反応特性に関する実験的数値的研究,” 平成20年度宇宙航行の力学シンポジウム, 宇宙科学研究本部, 神奈川県相模原市, 2008年12月.
- [41] 山田剛治, 高柳大樹, 鈴木俊之, 藤田和央, “衝撃波背後のスペクトル観測の空間分解能向上化について,” 平成20年度宇宙航行の力学シンポジウム, 宇宙科学研究本部, 神奈川県相模原市, 2008年12月.
- [42] Suzuki, T., Fujita, K., and Sakai, T.,

“Graphite Nitridation in Lower Surface Temperature Regime,” AIAA Paper 2009-0260, 47th AIAA Aerospace Sciences Meeting Including The New Horizons Forum and Aerospace Exposition, Orlando, Florida, USA, January 2009.

- [43] Yamada, G., Takayanagi, H., Suzuki, T., and Fujita, K., “Experimental Investigations of Rovibrational Temperatures Derived from Different Electronic State,” AIAA Paper 2009-1594, 47th AIAA Aerospace Sciences Meeting Including The New Horizons Forum and Aerospace Exposition, Orlando, Florida, USA, January 2009.
- [44] 山田剛治, 高柳大樹, 鈴木俊之, 藤田和央, “衝撃波背後の窒素分子の真空紫外分光,” 平成20年度の衝撃波シンポジウム, 名古屋大学, 愛知県名古屋市, 2009年3月.

[図書] (計1件)

- [1] Suzuki, T. and Fujita, K., “Improved thermochemical models for assessment of CFRP ablator performance,” JAXA Research and Development Report, JAXA RR-06-024, JAXA Publication, 2006.

[産業財産権]

- 出願状況 (計0件)
- 取得状況 (計0件)

[その他]

特記事項無し

6. 研究組織

(1) 研究代表者

藤田 和央 (Fujita Kazuhisa)

宇宙航空研究開発機構・研究開発本部・研究開発本部未踏技術研究センター・主幹研究員
研究者番号: 90281584

(2) 研究分担者

鈴木 俊之 (Suzuki Toshiyuki)

宇宙航空研究開発機構・研究開発本部未踏技術研究センター・研究員
研究者番号: 20392839

松山 新吾 (Matsuyama Shingo)

宇宙航空研究開発機構・研究開発本部数値解析グループ・研究員
研究者番号: 60392841

(3) 連携研究者

酒井 武治 (Sakai Takeharu)

名古屋大学・工学研究科・准教授
研究者番号: 90323047