

UDC 533.697:
629.7.036.5

航空宇宙技術研究所報告

TECHNICAL REPORT OF NATIONAL AEROSPACE LABORATORY

TR-508

酸素・水素燃焼生成物の非平衡ノズル流

松崎利一・平林則明

1977年8月

航空宇宙技術研究所
NATIONAL AEROSPACE LABORATORY

目 次

1. まえがき	1
2. 非平衡流の計算式	2
2.1 準一次元流の基礎方程式	2
2.2 化学非平衡過程	3
2.3 平衡および凍結流	5
3. 計算および結果	6
3.1 ノズルに沿っての変化	6
3.2 ノズル出口における諸量	8
3.3 ノズルの長さによる差異	10
3.4 反応過程の多寡による差異	10
3.5 境界層厚さの見積り	12
4. あとがき	13
付記(1) エンタルピ, 比熱, 平衡定数の計算	15
付記(2) 出発値の計算	17
付記(3) ノズル入口における流速	23
参考文献	24

酸素・水素燃焼生成物の非平衡ノズル流*

松崎利一** 平林則明**

Nonequilibrium Nozzle Flow of O₂/H₂ Combustion Products

By Riichi MATSUZAKI and Noriaki HIRABAYASHI

Chemically nonequilibrium nozzle flow of O₂/H₂ combustion products is theoretically studied in a quasi-one-dimensional framework. Initially the reactants O₂ and H₂ were both assumed to be in a gaseous state in a combustion chamber, and the products (O₂, H₂, O, H, OH, H₂O, and HO₂) each assumed to be a thermally perfect gas. The thermochemical properties were all calculated from partition functions: The present method permits calculations without tabulated thermochemical data or approximate polynomials. The present calculations were performed for a few typical nozzle geometries. Flow properties along the nozzle axis were also studied. Special studies were conducted on the effects of oxidizer-fuel ratio, combustion pressure, nozzle length, and rate processes on the flow properties at the nozzle exit. Boundary layer thickness along the nozzle wall was also discussed.

1 まえがき

実在気体の高速流における化学非平衡効果は、流れがある距離を通過する時間と、この間に化学反応が流れの中でおこなわれる時間とが同程度である場合に著しいが、特に燃焼生成物の流れの場合には、気体力学的なエンタルピの変化と化学的に発生するエンタルピが同程度の場合には、この種の化学非平衡効果が顕著になると考えられる。本報告では酸素水素燃焼生成物のノズル流について、上記の意味での化学非平衡効果がノズル出口における諸量に及ぼす効果を主眼として、その気体力学的特性を調べた結果について報告する。

燃焼生成物のノズル流の計算は、従来多種類の燃料と酸化剤の組合せに対して適用できる汎用計算方式が用いられているが、この種の計算方式は化学非平衡流の場合は勿論、化学平衡の場合もかなり膨大なものとなる。対象を特定の燃料と酸化剤の組合せに限り、それに適した解析をおこなえば、問題はかなり簡単になり精度の良い計算が可能となる。以下では酸素水素燃焼生成物として O₂, H₂, O, H, OH, H₂O および HO₂ の 7 種の化学種を考慮した場合のノズル流の特性を準一次元流の範囲で計算する。この種の

ノズル流の解析はロケットノズルの性能の問題と関連するが、化学非平衡ロケットノズル流に関する気体力学的问题は大別して二種類に分類される。一つは形状の既知のノズルにつき、燃焼室の状態をあたえてその性能を決定するもので、^{1~4)} 直接ノズル問題と呼ばれる。他は燃焼室の状態やノズル長さ、表面積等を一定とする条件のもとで最大推力を得るノズル形状を決定するもので、^{5, 6)} 逆ノズル問題と呼ばれる。前者はノズル形状と燃焼室の条件をあたえれば解決するが、後者はいくつかの拘束条件のもとで軸対称流を反復的に計算する必要があり、問題はより複雑である。本報告では直接ノズル問題のみを扱う。

計算に際しては上記 7 種の化学種の各々はすべて熱的完全気体であるとし、燃焼室ではすべての化学種は化学平衡状態にあり、いわゆる断熱火炎温度で等温状態にあるとする。本報告ではノズル流の気体力学的特性の研究を主眼とするので、水素と酸素はいずれも一定温度 (298.16 K) で气体であるとして断熱火炎温度を決定した。ノズル流は定常な準一次元流で、化学種はすべて同一速度で相互拡散ではなく、壁面での境界層の厚さを除去した有効断面内の流れを考え、この内部で粘性、熱伝導はないものとする。

さきに著者等は単原子気体および 2 原子分子気体の非平衡ノズル流の計算⁷⁾において、化学種のエンタルピや比熱、平衡定数などの熱力学的諸量を分配関数から直接導出する

* 昭和 52 年 4 月 18 日受付

** 空気力学第一部

方法を用いたが、今回も同じ計算方法を用いることとする。この方法の特徴は、熱力学的諸量の膨大な数値表やそれらの多項式近似を必要としない点である。酸素水素燃焼生成物の場合のように化学種の数が少なく、かつそれ等の組成が比較的単純な場合には、熱力学的な数値表を磁気テープに集録したもの用いるよりも、現在の方法の方が簡単である。また多項式近似を用いる方法は常温から燃焼温度までの全域で成立する良い近似式が得られない難点がある。それに反して現在の方法は正確な分光学的データを入力するだけで熱力学的諸量が必要に応じて計算できる利点がある。これらのデータは隨時、より新しいものと交換できる。今回の計算の他の特徴としては、 HO_2 (hydroperoxyl) を考慮したこと、反応過程をたくさん(順逆24通り)考慮したこと、ノズル壁に沿って境界層の厚さを見積ったこと等である。

記 号

a	: 音速
A	: ノズル断面積
C_P^*	: 粒子一ヶ当りの定圧比熱
D	: 拡散係数
EQ	: 平衡流
FR	: 凍結流
h	: 比エンタルピ
h^*	: 粒子一ヶ当りのエンタルピ
k	: Boltzmann定数
k_f	: 順方向の反応速度
k_r	: 逆方向の反応速度
m	: モル数
M	: 解離再結合反応の第三体
M_f	: マッハ数、式(10)
n	: 粒子数密度
\dot{n}	: 粒子発生率、式(1)
NEQ	: 非平衡流
O/F	: 混合比
p	: 圧力
Q	: 粒子発生率、式(17)～(23)
R	: 普遍気体定数
Re	: レイノルズ数
T	: 温度
v	: 流速
v_m	: 最大速度、式(34)
w	: 分子量
X	: モル分率
x	: ノズル軸方向距離

y	: ノズル半径
r	: 単位質量当りの粒子数 (n/ρ)
r_f	: 断熱指数、式(11)
δ^*	: 境界層排除厚
μ	: 粘性係数
ρ	: 密度

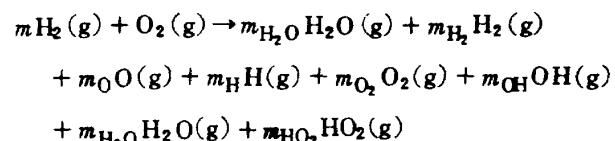
添 字

c	: ノズル上流入口
e	: ノズル出口
eq	: 平衡流
i, j, s	: 化学種
t	: ノズルスロート

2 非平衡流の計算式

2.1 準一次元流の基礎方程式

図1のように熱平衡状態にある燃焼室になめらかに接続する軸対称な収縮膨張ノズルを考える。以下では燃焼の際水素と酸素はいずれも最初から気体であるとし、これらの初期混合モル比 $m : 1$ とし



により気相の生成物を発生するとする。ここで(g)は気相を意味する。 $m = 2$ の場合が化学量論比となる。対称軸に沿って x 軸をとり、スロートで $x = 0$ とする。ノズルの断面積は x の関数とするがすべての諸量は x 方向にのみ変化し、これに垂直な方向では一定とする準一次元流の仮定を用いる。

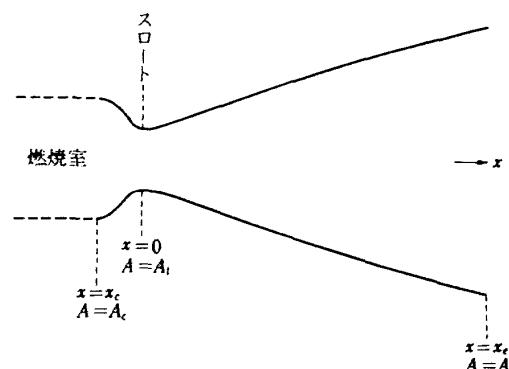


図1 ノズル。 A_c : 入口断面積 A_t : スロート断面積 A_e : 出口断面積。

二原子分子気体の場合⁷⁾ と全く同様にして、rate方程式、質量、運動量、エネルギーの各保存式として

$$\rho v d\tau_s / dx = \dot{n}_s, \quad s = \text{H}_2, \dots, \text{HO}_2 \quad (1)$$

$$d\rho / \rho dx + dv / v dx + dA / Adx = 0, \quad (2)$$

$$vdv / dx + dp / \rho dx = 0, \quad (3)$$

$$dh / dx + vd\tau_s / dx = 0 \quad (4)$$

が成立つ。但し(1)式で $\tau_s = n_s / \rho$ である。 \dot{n}_s は単位時間に単位体積中で生成する粒子数をあらわす。すべての化学種は等温とし、内部自由度の非平衡効果を無視するので化学種に対するエネルギー方程式や分子振動緩和の式は不要である。なお核種HとOの保存から

$$2\tau_{\text{H}_2} + \tau_{\text{OH}} + 2\tau_{\text{H}_2\text{O}} + \tau_{\text{HO}_2} + \tau_{\text{H}} = \text{一定}, \quad (5)$$

$$2\tau_{\text{O}_2} + \tau_{\text{OH}} + \tau_{\text{H}_2\text{O}} + 2\tau_{\text{HO}_2} + \tau_{\text{O}} = \text{一定} \quad (6)$$

が成立つので

$$2\dot{n}_{\text{H}_2} + \dot{n}_{\text{OH}} + 2\dot{n}_{\text{H}_2\text{O}} + \dot{n}_{\text{HO}_2} + \dot{n}_{\text{H}} = 0,$$

$$2\dot{n}_{\text{O}_2} + \dot{n}_{\text{OH}} + \dot{n}_{\text{H}_2\text{O}} + 2\dot{n}_{\text{HO}_2} + \dot{n}_{\text{O}} = 0$$

となり、(1)のrate方程式のうち独立のものは5個である。

圧力 p および比エンタルビ \hbar に対する熱的および熱量的状態方程式として、各化学種は熱的完全気体とする仮定から

$$p = \rho \sum_j \tau_j kT, \quad (7)$$

$$\hbar = \sum_j \tau_j h_j^*(T) \quad (8)$$

が成立つ。但し $h_j^*(T)$ は各化学種の粒子一個当たりの比エンタルビ \hbar で温度 T のみの関数である。(7), (8)式を x について微分し

$$dp / dx = \sum_j \tau_j kT d\rho / dx + \rho kT \sum_j d\tau_j / dx + \rho \sum_j \tau_j kdT / dx, \quad (7a)$$

$$dh / dx = \sum_j h_j^*(T) d\tau_j / dx + \sum_j \tau_j C_{pj}^* dT / dx \quad (8a)$$

を得る。但し

$$C_{pj}^* = dh_j^*(T) / dT$$

は粒子一ヶ当りの定圧比熱である。 $h_j^*(T)$ および $C_{pj}^*(T)$ としては通常数値表あるいは温度 T に対する近似多項式が用いられるが、ここでは各化学種の分配関数から直接計算する。これらの計算は巻末の付記(1)に示す。

式(1)～(4), (7a), (8a)から

$$\frac{dv}{dx} = \frac{v}{1 - M_f^2} \left[\frac{1}{pv} \sum_j \dot{n}_j \left(kT - \frac{\tau_f - 1}{\tau_f} h_j^* \right) - \frac{1}{A} \frac{dA}{dx} \right], \quad (9)$$

$$\frac{dT}{dx} = \frac{(\tau_f - 1)M_f^2 T}{1 - M_f^2} \left[\frac{1}{pv} \sum_j \dot{n}_j \left\{ kT - \left(1 - \frac{1}{\tau_f M_f^2} \right) h_j^* \right\} - \frac{1}{A} \frac{dA}{dx} \right] \quad (9a)$$

等を得る。但し

$$M_f = v / a_f, \quad (10)$$

$$a_f^2 = \tau_f p / \rho, \quad$$

$$\tau_f = \sum_j \tau_j C_{pj}^* / (\sum_j \tau_j C_{pj}^* - k \sum_j \tau_j). \quad (11)$$

式(9)は $M_f = 1$ となる点が特異点となる。この点は一般に $\dot{n}_s \neq 0$ であれば、ノズル流の場合スロート ($dA/dx = 0$) より下流にある。

式(1)～(4)および式(9)が τ_s, p, v, ρ, h に対する準一次元の方程式系となる。これらはノズルの形 $A(x)$ と \dot{n}_s をあたえれば適当な出発値のもとに数値的に解くことができる。 \dot{n}_s は次節で示すように考慮すべき化学非平衡過程のリストにより決まる。また出発値は、燃焼室での燃焼圧力と水素酸素混合比をあたえて燃焼室での化学平衡状態を決定すれば、それよりわずか下流で流れがまだ平衡状態を保っていると仮定することにより計算することができる。すなわち、

$$x = x_c + \Delta x$$

において

$$\tau_s = \tau_{s,c}, \quad (12)$$

$$v = v_c + (dv / dx)_{eq, x=x_c} \Delta x, \quad (13)$$

$$\rho = \rho_c + (d\rho / dx)_{eq, x=x_c} \Delta x, \quad (14)$$

$$p = p_c + (dp / dx)_{eq, x=x_c} \Delta x, \quad (15)$$

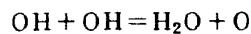
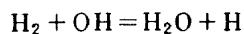
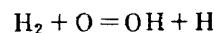
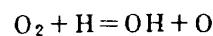
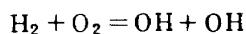
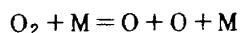
$$h = h_c + (dh / dx)_{eq, x=x_c} \Delta x \quad (16)$$

として計算される。 $(dv / dx)_{eq}$ 等は化学平衡流に対する dv / dx 等の値で付記(2)に示してある。なお式(13)の v_c は燃焼室出口での流速であるが、燃焼室が無限上流にあれば $v_c = 0$ とおくことができるが、ロケットノズルの場合のように x_c が有限の場合には3章で述べるように反復計算によりスロート直後で $M_f = 1$ となるように、適当な値を前以て決定する必要がある。

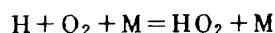
2.2 化学非平衡過程

特定の条件下での酸素水素燃焼の連鎖反応の機構は正確には明らかになっていない。Gardiner等⁸⁾ はアルゴンで希釈された酸素水素混合気体中の垂直衝撃波後方の流れの非平衡状態から平衡状態への漸近についての実験結果を説明するために、反応連鎖の開始および分枝の機構として

次の過程を考えている。

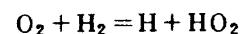
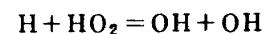
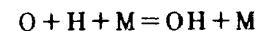


但し、Mは解離再結合反応にあずかる第三体である。衝撃波後方では再結合過程はあまり重要でなく



等も考えられるがその効果は小さいとしている。

衝撃波のような圧縮過程による非平衡状態から平衡状態への移行の場合とは逆に、ノズル流の場合は平衡状態から膨張過程をへて非平衡状態に移行する。このような場合には上記の諸過程の逆過程も重要と考えられる。それ故前記の7つの化学種を含む膨張ノズル流の非平衡過程として、他の文献^{1-4, 6, 9)}も考慮し、上記の各々の順逆方向の過程合計18の外に、反応速度係数のわかっている過程として



の各々の順逆過程6通りを加え、合計24通りの素過程を考慮することとした。これらの各過程の反応速度係数¹⁰⁻¹²⁾は表Iに示すものを用いた。

表IのNo.1~12の順逆過程の一対に対応して

$$\begin{aligned} Q_1 &= k_{f1} n_{O2} n_M - k_{r1} n_O^2 n_M, \\ Q_2 &= k_{f2} n_{H2} n_M - k_{r2} n_H^2 n_M, \\ Q_3 &= k_{f3} n_{OH} n_M - k_{r3} n_H n_O n_M, \\ Q_4 &= k_{f4} n_{H2O} n_M - k_{r4} n_H n_{OH} n_M, \\ Q_5 &= k_{f5} n_{HO2} n_M - k_{r5} n_{O2} n_H n_M, \\ Q_6 &= k_{f6} n_{O2} n_H - k_{r6} n_O n_{OH}, \\ Q_7 &= k_{f7} n_{H2} n_O - k_{r7} n_H n_{OH}, \\ Q_8 &= k_{f8} n_{H2} n_{OH} - k_{r8} n_{H2O} n_H, \\ Q_9 &= k_{f9} n_{H2O} n_O - k_{r9} n_{OH}^2, \\ Q_{10} &= k_{f10} n_H n_{HO2} - k_{r10} n_{OH}^2, \\ Q_{11} &= k_{f11} n_H n_{HO2} - k_{r11} n_{H2} n_{O2}, \\ Q_{12} &= k_{f12} n_{H2} n_{O2} - k_{r12} n_{OH}^2 \end{aligned}$$

とおくと、rate方程式(1)の \dot{n}_s は

表I 反応速度係数

No	過程	順方向反応速度係数 (cm ³ /mol/s)	文献
1	$O_2 + M \rightleftharpoons O + O + M$	$2.5 \times 10^{16} T^{-0.5} \exp(-59330/T)$	10
2	$H_2 + M \rightleftharpoons H + H + M$	$2.2 \times 10^{14} \exp(-48300/T)$	11
3	$OH + M \rightleftharpoons O + H + M$	$2.9 \times 10^{16} \exp(-48500/T)$	11
4	$H_2O + M \rightleftharpoons H + OH + M$	$2.2 \times 10^{16} \exp(-52900/T)$	11
5	$HO_2 + M \rightleftharpoons O_2 + H + M$	$2.1 \times 10^{15} \exp(-23000/T)$	11
6	$O_2 + H \rightleftharpoons OH + O$	$2.2 \times 10^{14} \exp(-8450/T)$	11
7	$H_2 + O \rightleftharpoons OH + H$	$1.8 \times 10^{10} T \exp(-4480/T)$	11
8	$H_2 + OH \rightleftharpoons H_2O + H$	$2.2 \times 10^{13} \exp(-2590/T)$	11
9	$H_2O + O \rightleftharpoons OH + OH$	$6.8 \times 10^{13} \exp(-9240/T)$	11
10	$HO_2 + H \rightleftharpoons OH + OH$	$2.5 \times 10^{14} \exp(-950/T)$	11
11	$HO_2 + H \rightleftharpoons H_2 + O_2$	$2.5 \times 10^{13} \exp(-350/T)$	11
12	$H_2 + O_2 \rightleftharpoons OH + OH$	$2.5 \times 10^{14} \exp(-33700/T)$	12

(註) 温度の単位は°K

MはO₂, H₂, O, H, OH, H₂O, HO₂のいずれかを表わす。

$$\dot{n}_{O2} = -Q_1 + Q_5 - Q_6 + Q_{11} - Q_{12}, \quad (17)$$

$$\dot{n}_{H2} = -Q_2 - Q_7 - Q_8 + Q_{11} - Q_{12}, \quad (18)$$

$$\dot{n}_O = 2Q_1 + Q_3 + Q_6 - Q_7 - Q_9, \quad (19)$$

$$\begin{aligned} \dot{n}_H &= 2Q_2 + Q_3 + Q_4 + Q_5 - Q_6 + Q_7 \\ &\quad + Q_8 - Q_{10} - Q_{11}, \end{aligned} \quad (20)$$

$$\begin{aligned} \dot{n}_{OH} &= -Q_3 + Q_4 + Q_6 + Q_7 - Q_8 + 2Q_9 \\ &\quad + 2Q_{10} + 2Q_{12}, \end{aligned} \quad (21)$$

$$\dot{n}_{H2O} = -Q_4 + Q_8 - Q_9, \quad (22)$$

$$\dot{n}_{HO2} = -Q_5 - Q_{10} - Q_{11} \quad (23)$$

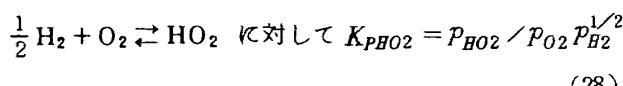
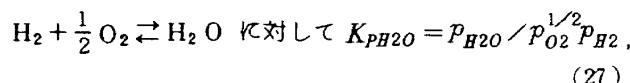
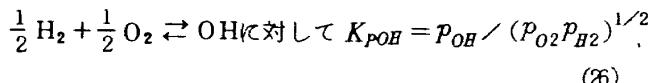
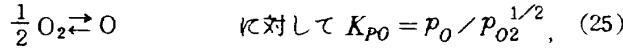
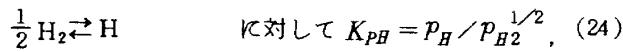
となる。但し

$$n_M = \sum_j n_j$$

とする。^{*} k_{f1}, \dots, k_{f12} は順方向の反応速度係数,
 k_{r1}, \dots, k_{r12} は逆方向の反応速度係数で

$$\begin{aligned} k_r &= k_f / (K_p / RT), \text{ 表 I の No.1 ～ 5 について,} \\ k_r &= k_f / K_p, \quad \text{表 I の No.6 ～ 12 について,} \end{aligned}$$

として求める。但し, $R = 8.206 \text{ cm}^3 \text{ atm} / \text{K mol}$ は普遍気体定数, K_p は圧力平衡定数で, 各化学種の分圧を p , として



すると, 表 I の No.1 ～ 12 の順逆過程の一対に対しても

$$K_{P1} = K_{PO}^2,$$

$$K_{P2} = K_{PH}^2,$$

$$K_{P3} = K_{PH} K_{PO} / K_{POH},$$

$$K_{P4} = K_{PH} K_{POH} / K_{H2O},$$

$$K_{P5} = K_{PH} / K_{PHO2},$$

$$K_{P6} = K_{PO} K_{POH} / K_{PH},$$

$$K_{P7} = K_{PH} K_{POH} / K_{PO},$$

$$K_{P8} = K_{PH} K_{PH2O} / K_{POH},$$

$$K_{P9} = K_{POH}^2 / K_{PH2O} K_{PO},$$

$$K_{P10} = K_{POH}^2 / K_{PH} K_{PHO2},$$

$$K_{P11} = 1 / K_{PH} K_{PHO2},$$

$$K_{P12} = K_{POH}^2$$

となる。平衡定数(24)～(28)も分配関数から直接計算することにする。これらの計算も付記(1)に示す。なお表 I の k_f をそのまま用いるためには式(17)～(23)の Q_1, \dots, Q_{12} で粒子数密度を粒子数/cm³から粒子数/moleに換算しておく。

2.3 平衡および凍結流

平衡流に対しては rate 方程式(1)において $k_f \rightarrow \infty, k_r \rightarrow \infty$ で局所平衡状態(24)～(28)の各式が流れの各点で成立している。準一次元平衡流の方程式は現在の場合

$$(dv/dx)_{eq} = (d\nu/dx)_{eq} \quad (29)$$

等となる。但し $(dv/dx)_{eq}$ は非平衡流の出発値の計算の際(13)式で用いたもので

$$(dv/dx)_{eq} = -v / (1 - M_{eq}^2) \cdot dA / Adx, \quad (30)$$

$$M_{eq} = v / a_{eq},$$

$$a_{eq}^2 = r_{eq} p / \rho,$$

$$r_{eq} = (d \ln p / d \ln \rho)_{eq} = \rho D_3 / p (D_1 - \rho D_3)$$

となる。 D_1, D_2, D_3 は付記(2)に示したように r_s の関数である。

凍結流に対しては rate 方程式(1)で $k_f = k_r = 0$, したがって $\dot{n}_s = 0$ で

$$r_s = \text{一定} = r_{s,c} \quad (31)$$

である。このときもし $r_s^*(T)$ や $C_{ps}^*(T)$ に分子振動状態や電子励起状態のような内部自由度からの寄与も 0 であるとする二原子分子気体の場合⁶⁾ と同様に(1)式の r_f も一定となり, いわば完全凍結流の状態となる。すなわち単に $k_f = k_r = 0$ とした場合は化学反応性が凍結しただけであり, 高温による内部自由度の励起状態は分配関数を通して寄与することに注意する必要がある。以下では凍結流は後者の意味で考えるものとする。

註 * 三体再結合が起こるために第三体 M は結合エネルギーを単に運動エネルギーとして持去るだけでなく, 一部を内部エネルギーに転化できるような活性が必要と考えられている。この種の活性の程度は反応の種類や第三体の化学種により異なるが, 各化学種についての資料が十分でないので, ここではすべての化学種は解離再結合反応に平等に関与すると仮定する。

3 計算および結果

方程式(1)～(4), (9), (9a) を出発値(12)～(16)を用いてRunge-Kutta-Gill 法により数値積分した。計算は前報⁷⁾ の二原子分子気体の場合と全く同様で、式(9), (9a) で $M_f = 1$ となる点を外挿によって越え、下流で $M_f > 1$ となり、流量がノズルの各断面を通して一定で、核種の保存則(5), (6)が成立している場合に正しい解を得たものとする。

式(12)～(16) であたえられる出発値を用いれば準一次元の計算はスロート近傍まで円滑に進められるが、スロート直後で $M_f = 1$ となるようにするためには式(13)の v_c を適当な値にとる必要があるが、この値は前以てはわからない。以下の計算では v_c として最初完全凍結流から予想される流速 v_p をとり、わずかずつ v_c を増大させて反復計算し、スロート直前で $M_f \lesssim 1.0$ となるようにする。この v_c の値は準一次元計算の範囲ではスロート上流のノズル形状にあまり関係なく、 A_c/A_t および燃焼室の条件によって決まる。予備計算によりこの値を前以て決定しておけば、広範囲の条件下でスロート上流からノズル出口まで一貫した計算が可能である。このようなノズル入口における流速の決定例を付記(3)に示す。

計算に用いたノズルの形状は図2に示すもので、その断面積分布はスロート上流が x の三次式

$$A(x) = A_t + a_2 x^2 + a_3 x^3, \quad x_c < x \leq 0 \quad (32)$$

$$a_2 = 3(A_c - A_t)/x_c^2, \quad a_3 = -2(A_c - A_t)/x_c^3$$

であたえられ、下流が次式

$$A(x) = A_t + c x^{1.5}, \quad 0 < x \leq x_e \quad (33)$$

$$c = (A_e - A_t)/x_e^{1.5}$$

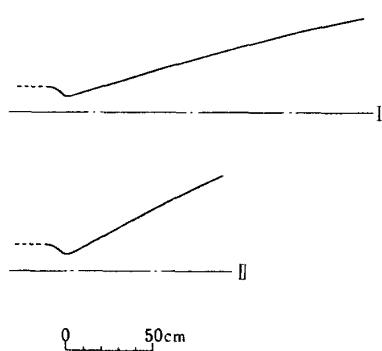


図2 計算に用いたノズル。 $A_c = 706.5 \text{ cm}^2$, $A_t = 314.0 \text{ cm}^2$, $A_c/A_t = 2.25$, $A_e = 30$, $x_c = -10 \text{ cm}$, $x_e = 170 \text{ cm}$ (ノズルI), $x_e = 90 \text{ cm}$ (ノズルII)。

であたえられる場合を計算した。なおスロート上流から非平衡流が開始するとした場合と、スロート上流は式(29)等が成立する平衡流のまま移行し、スロート下流から非平衡流が開始するとした場合とをいくつかの計算例につき比較したが、ノズル出口での巨視的諸量についてはいずれもほとんど差異はみられなかった。一般に上流は平衡流が持続するとした方が計算時間が少なくてすむので、3.2節以下のノズル出口の諸量についての計算結果はすべてこの場合である。

なお数値計算のステップサイズはスロート前後で特に細かくする必要がある。ステップサイズが粗すぎると数値計算は収束しないが、必要以上に細かくしても計算結果にはほとんど影響しない。

3.1 ノズルに沿っての変化

ノズルの断面積比 A/A_t の変化に対する圧力、温度、流速、粒子数密度の変化の計算例を図3～6に示す。図でEQは非平衡流の場合、EQおよびFRは平衡流および凍結流の場合を示す。これらの計算例はスロート上流から非

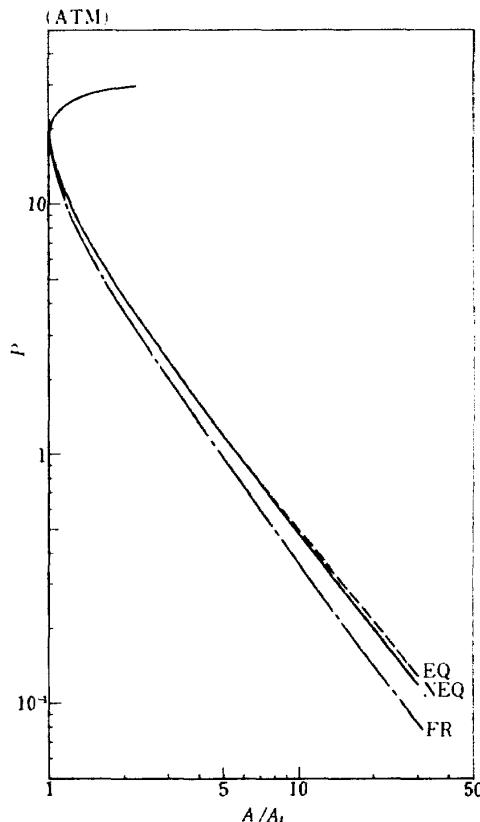


図3 ノズル断面積比による圧力変化。 $p_c = 30$ 気圧、初期混合モル比 2:1 の場合。EQ: 平衡流、NEQ: 非平衡流、FR: 凍結流。ノズルI。

平衡流が開始するとした場合であるが、いずれの量も最初は化学平衡の場合に近く、非平衡効果はスロート下流である程度膨張が進んでから顕著になる。同一の A/A_t のもとでは、圧力、温度、流速等は平衡流の場合に最大、凍結流で最小である。なお密度は平衡流で最小、凍結流で最大である。非平衡流では一般にこれらの中間にある。粒子数密度は化学種によって異なるが、図 6 の例では HO_2 以外

は非平衡流の数密度は平衡流と凍結流の中間にあり。一般にすべての化学種の非平衡流での数密度が必ずしも平衡流と凍結流の中間にあるとはいえない。それは式(17)～(23)で示される η が必ずしも平衡流と凍結流の間で単調に変化するのでなく、ある状態（温度および数密度の）で極値をとり得るであろう事と対応していると思われる。

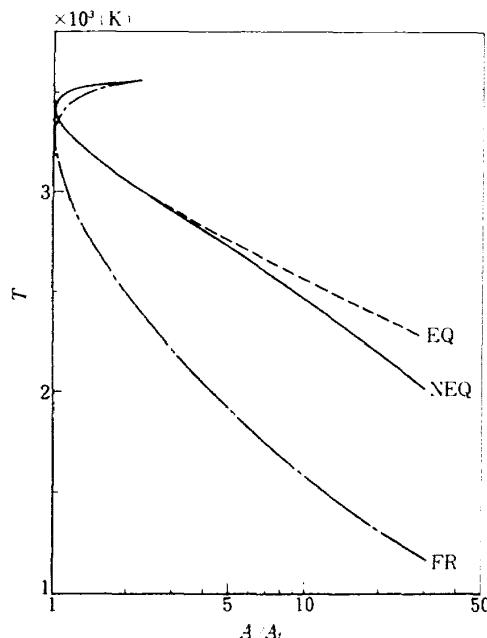


図 4 ノズル断面積比による温度変化。図 3 に同じ。

$$T_c = 3560 \text{ K}$$

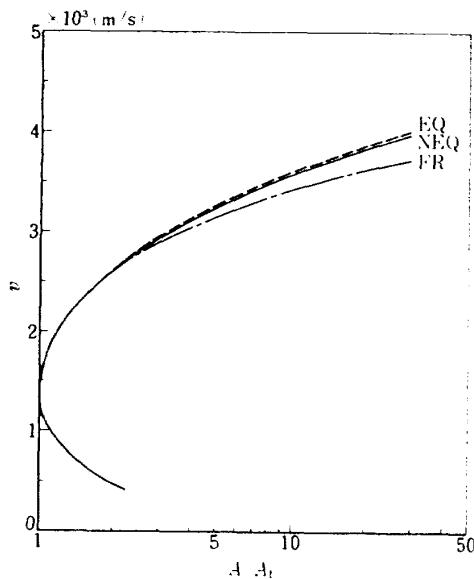


図 5 ノズル断面積比による流速変化。図 3 に同じ。

$$v_c = 403.8 \text{ m/s.}$$

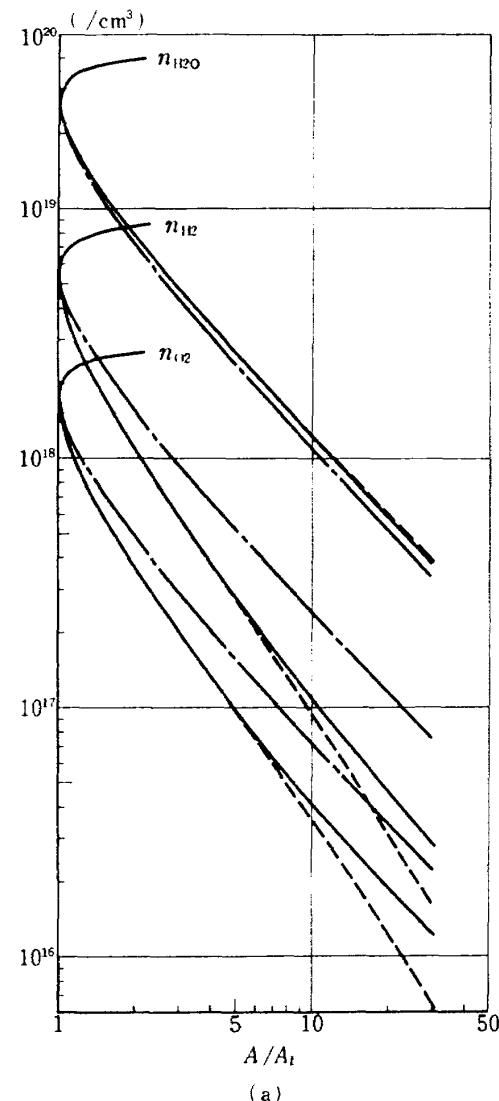


図 6 ノズル断面積比による粒子数密度変化。図 3 に同じ。

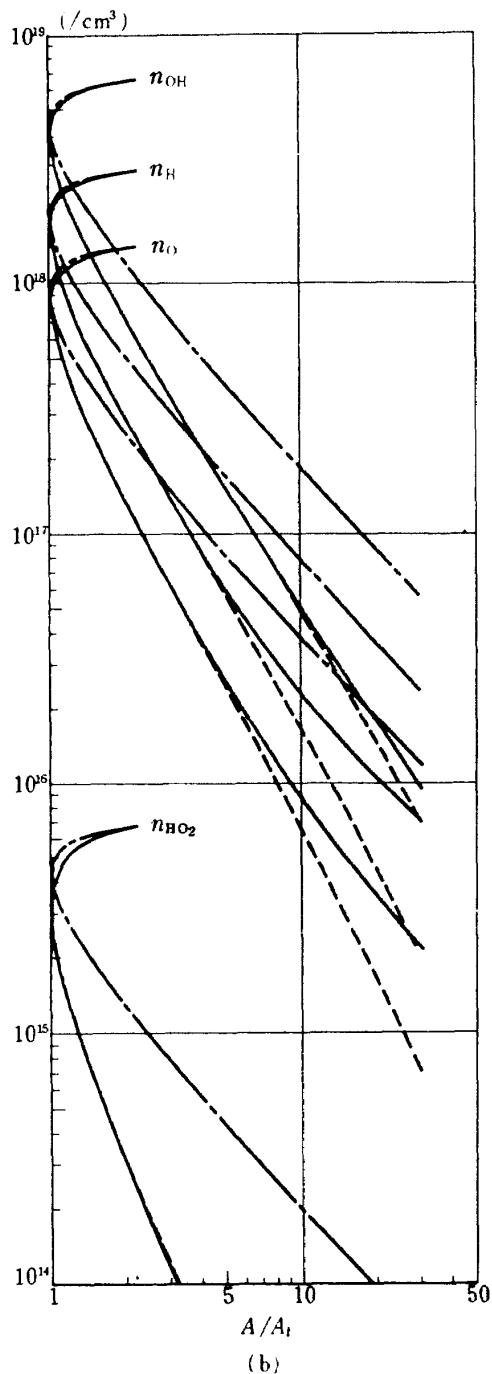
$$(a) \begin{aligned} n_{H_2,c} &= 8.55 \times 10^{18} \text{ /cm}^3, \\ n_{O_2,c} &= 2.63 \times 10^{18} \text{ /cm}^3, \\ n_{H_2O,c} &= 3.98 \times 10^{19} \text{ /cm}^3. \end{aligned}$$

3.2 ノズル出口における諸量

ノズル出口における圧力 p_e 、温度 T_e 、比推力 v_e/g 等に対する化学非平衡効果が実用上重要である。図 7～9 に燃焼圧力または O/F 比（酸素水素混合重量比）に対するこれらの値の変化の計算例を示す。 $O/F = 7.936$ の

場合が化学量論比に相当し、これ以下は水素過剰の場合である。 O/F 比が化学量論比をあまり越えない範囲では、燃焼圧力と O/F 比の増大と共に燃焼室温度も増大するので、それに応じて p_e や T_e も増大している。

図 9 の比推力は化学非平衡の場合であるが、平衡または



(b)

(b) H , O , OH , HO_2 の数密度。 $n_{H,c} = 2.82 \times 10^{18} / \text{cm}^3$, $n_{O,c} = 1.40 \times 10^{18} / \text{cm}^3$, $n_{OH,c} = 6.59 \times 10^{18} / \text{cm}^3$, $n_{HO_2,c} = 6.83 \times 10^{15} / \text{cm}^3$ 。

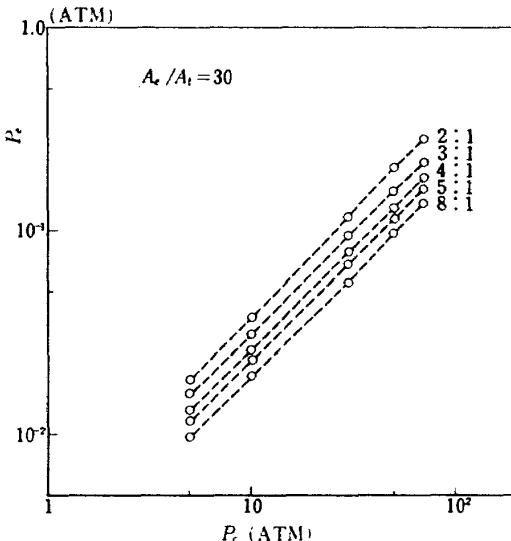


図 7 ノズル出口圧力の燃焼圧力 p_e および水素酸素初期混合モル比に対する変化。化学非平衡流。ノズル I。

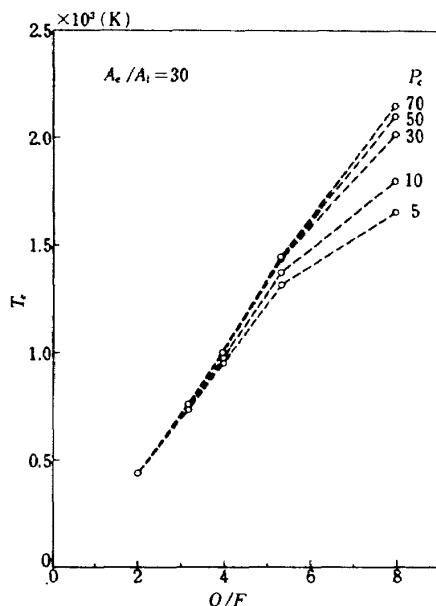


図 8 ノズル出口温度の p_e および O/F 比による変化。化学非平衡流。ノズル I。

凍結の場合でも、 O/F 比に対してゆるいピークをもつ変化をすることが知られている。燃焼温度 T_c は O/F 比と共に単調に増加し、また式(31)であたえられる $\gamma_f = \gamma_{f,c}$ は単調に減少するだけであるが、

$$v_m = \sqrt{2/(r_{f,c} - 1)} \cdot a_c, \quad a_c^2 = r_{f,c} \sum_j r_{j,c} k T_c \quad (34)$$

を O/F 比に対して計算すると比推力と同様なピークを示す。式(34)で示される v_m は閉じた燃焼室に小孔があけられた場合に真空中へ膨張する噴流の最大速度に相当する。

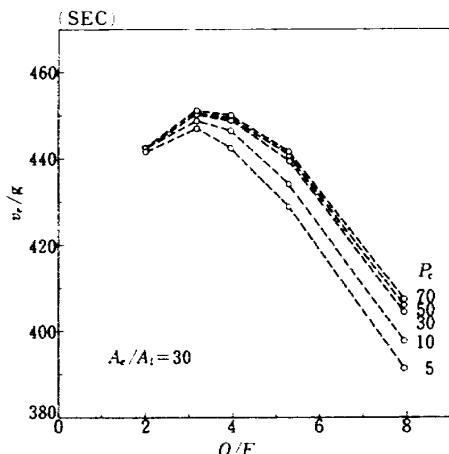


図9 比推力 $I_{SP} = v_e / g \cdot p_e$ および O/F 比による変化。化学非平衡流。ノズルI。

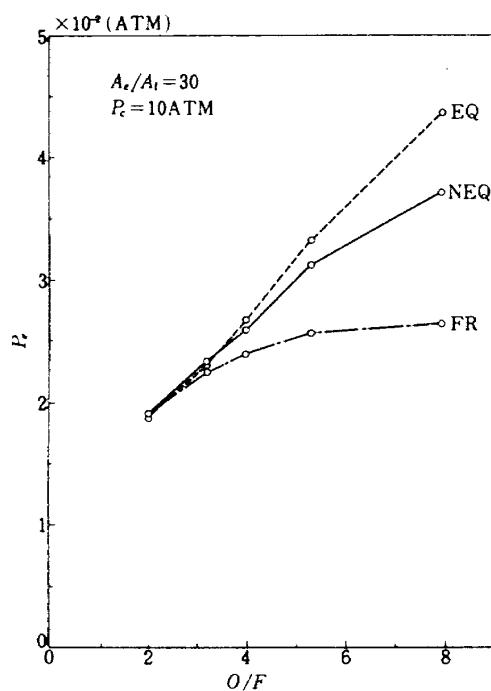


図10 ノズル出口圧力の O/F 比による変化。化学非平衡(NEQ), 化学平衡(EQ), 化学凍結(FR)の各場合の比較。化学非平衡の場合、出口圧力のノズルI, IIによる差異はほとんどない。

それ故 O/F 比に対する比推力のゆるいピークの成因は気体力学的なものではなく、燃焼の性質に付随するものであることがわかる。

ノズル出口における諸量に対する化学非平衡効果の程度を具体的に知るために、図10～12に燃焼圧力10気圧

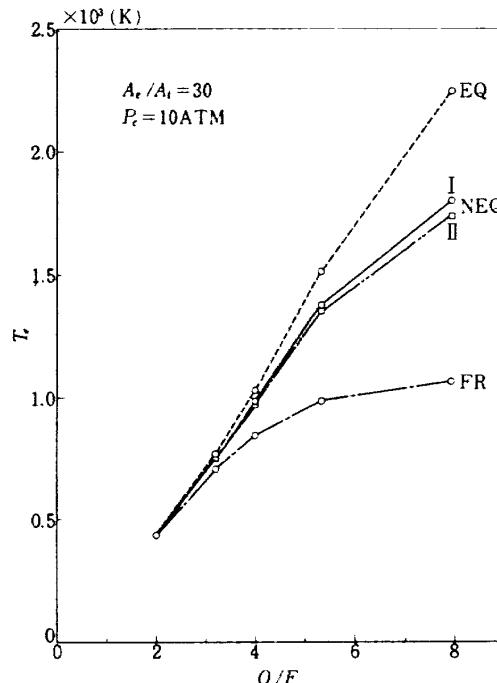


図11 ノズル出口温度の O/F 比による変化。図10の場合と同じ。I, IIは化学非平衡流でノズルI, IIによる差異(以下図15まで同様)。

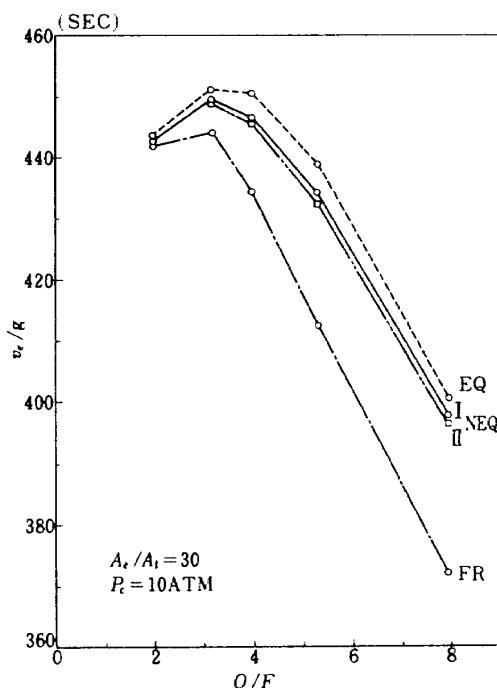


図12 比推力の O/F 比による変化。図10の場合と同じ。

の場合の圧力、温度、比推力の値の O/F 比に対する変化を、非平衡、平衡、凍結の各場合を比較して示す。各図で化学非平衡の場合のⅠ、Ⅱは次節で述べるノズル長さによる差異を示すものである。圧力、温度、比推力などのノズル出口における値は平衡流の場合に最大、凍結流の場合に最小となり、非平衡流では中間の値をとる。なお推力 F や $C_f = F/p_e A_t$ で定義される推力係数も同様な傾向を示す。また密度および流量は一般に平衡流の場合に最小、凍結流の場合に最大となる。

本報告では水素と酸素はいずれも燃焼室ですでに気体であるとした。液体酸素-気体水素の場合、比推力は O/F

比が小さくなると平衡流と凍結流の差はほとんどなくなるのであるが、現在の場合のように $O/F \approx 2$ でも両者にわずかの差が残るのは酸素を気体としたために断熱火炎温度が高く見積られ、化学反応性の効果がより強調されるためと考えられる。なお実際の燃焼室の温度の計算¹³⁾によると、液体酸素の気化のはげしくおこなわれる噴射面の近くで燃焼温度が低く、燃焼室出口に近づくにつれて上昇している。それ故より正確には断熱火炎温度ではなく、このような燃焼室内温度分布を考慮しつつ、燃焼室からノズル出口に至る一貫した計算をすべきであろう。

3.3 ノズルの長さによる差異

ノズル出口断面積比 A_e/A_t が一定の場合、長いノズルでゆっくり膨張させた方が、短かいノズルで急速に膨張させるよりも化学平衡状態を保ちやすいことが予想される。準一次元的計算の範囲内でこのような効果を調べるために図2に示すノズルⅠおよびⅡによる出口圧力 p_e 、温度 T_e 、比推力 v_e/g の差異の計算結果を図10～12（ O/F 比に対して）および図13～15（燃焼圧力に対して）に示す。これらの図から明らかのように長いノズルⅠの方がノズルⅡより平衡流の値により近いことがわかるが、その差はわずかである。

3.4 反応過程の多寡による差異

前節までの結果は表Iに示す合計24通りの反応過程に対するものである。酸素水素燃焼生成物の膨張流における反応機構の詳細は明らかでないので、生ずる可能性のある

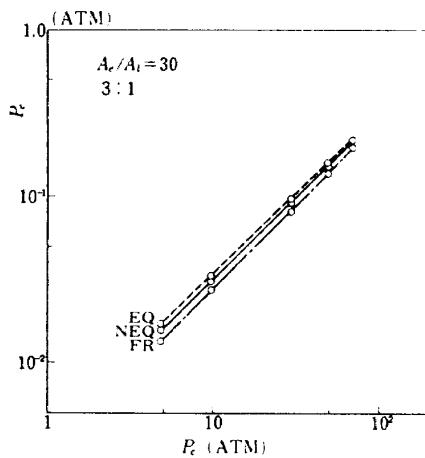


図13 ノズル出口圧力の燃焼圧力による変化。水素酸素初期混合モル比3:1の場合。化学非平衡、化学平衡、化学凍結の各場合の比較。化学非平衡の場合出口圧力のノズルⅠ、Ⅱによる差異はほとんどない。

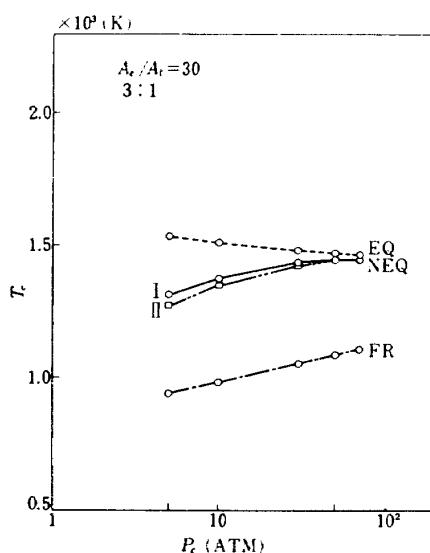


図14 ノズル出口温度の燃焼圧力による変化。図13の場合と同じ。

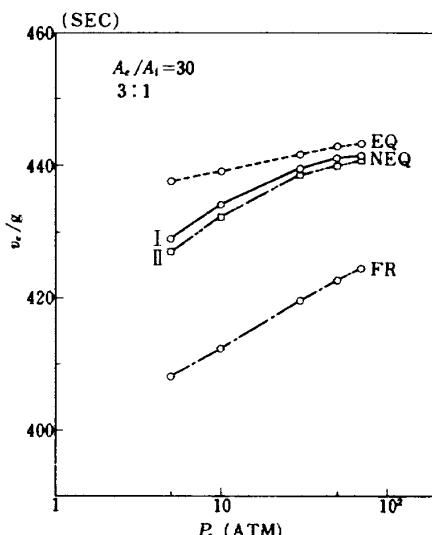
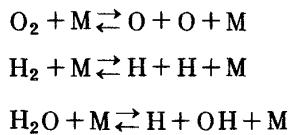


図15 比推力の燃焼圧力による変化。図13の場合と同じ。

過程で反応速度係数の既知のものはできる限り考慮する必要があろう。他方その様な過程の中には比較的速い過程が含まれ、それが数値計算に必要なステップのサイズを支配する（いわゆる *stiff* な過程）。本節では考慮すべき非平衡過程の多寡がノズル出口における諸量に及ぼす効果を調べ、最小限どの程度の反応過程を考慮すれば実用上十分であるかを明らかにする。

[I] 膨張過程で最も大きな気体力学的効果として現われるのは、再結合反応のような大吸熱反応が平衡から凍結に移行する場合と考えられる。それ故まず最も簡単な場合として下記の解離再結合反応のみを非平衡過程と考え、その他の過程は起らない（凍結）とした場合を[I]とする。



[II] 反応が持続するためには原子や遊離基の間での連鎖連絡、連鎖分岐反応が生ずると考える必要がある。Burwell 等¹⁾、および Vamos および Anderson⁴⁾ による計算には上記[I]の外に 6 つの交換反応が考慮されている。これらを[II]とする。

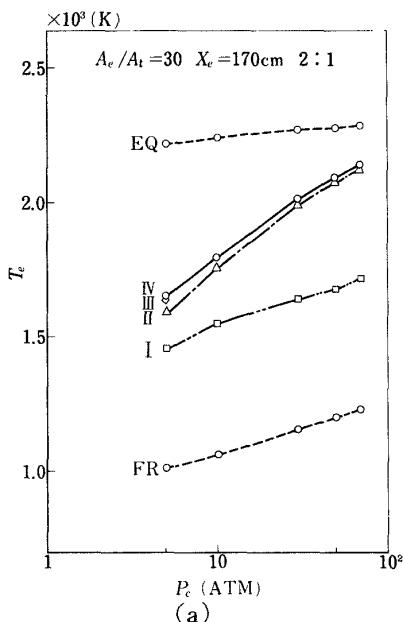
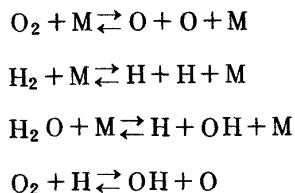
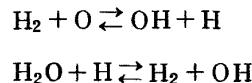
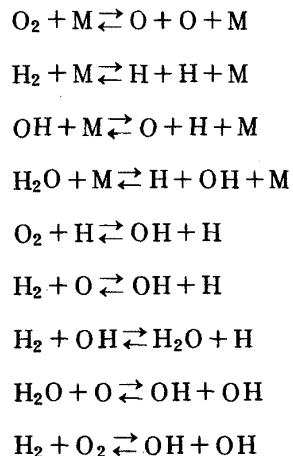


図 16 (a) 出口温度、(b) 比推力の燃焼圧力による変化。水素酸素初期混合モル比が 2 : 1 の場合。I ~ IV は化学非平衡の場合で、I ~ III は素反応のリストが [I] ~ [III] の場合、IV は表 I の場合。



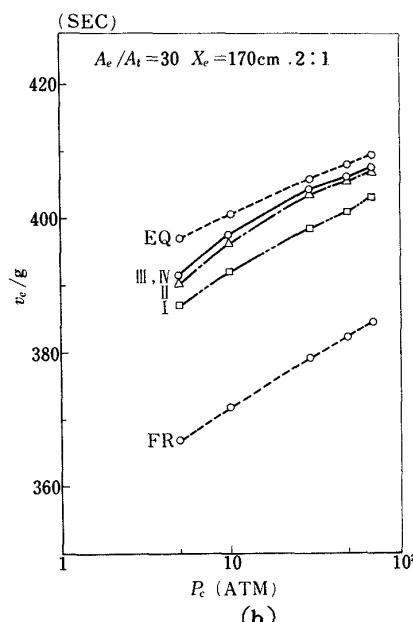
[III] Quan 等^{2,3)} は HO₂ を除いた 6 種の化学種の間で可能な解離再結合および二体交換反応として次のような順逆 18 通りをあげている。



[IV] 前節までの計算では上記[III]の場合に HO₂ の関与する解離再結合および交換反応を加え、合計 24 通りの非平衡過程を考慮した（表 I）。これを[IV]とする。

上記[I]～[III]においてはスロートより下流でこれ等以外のすべての過程は急に凍結すると仮定する。但し第三体 M としては O₂, H₂, O, H, OH, H₂O, HO₂ のすべてが関与すると考えた。

ノズル出口温度と比推力についての計算結果を図 16
(水素酸素初期混合モル比が 2 : 1 の場合)、図 17 (同



じく3:1の場合)に示す。図中のI~IVは前記の非平衡過程の系に対応する。これらの図から明らかのように、膨張過程では解離再結合反応だけでなく、[II]に示したようないくつかの交換反応の効果が寄与している。この効果は混合比が化学量論比に近い方が著しい。しかし素反応リスト[II]でもやや不十分であり、Quan等^{2,3)}の考えた[III]の場合は実用上さしつかえないことがわかる。すなわちHO₂の関与する非平衡過程はノズル流のような膨張過程では比推力等の巨視的な量にはほとんど寄与しない。このことは図6(b)に示すようにHO₂の粒子数の比率のわずかであることからも推定される。

なお燃焼室の状態からノズル出口までの諸量の数値計算に要したCPU時間は、例えばp_c=5気圧でステップサイズが一定の場合、[I]~[III]で約400~500秒、[N]で約600秒程度であった(FACOM-230-60使用)。本報告では計算に必要なステップサイズが、考慮した反応過程によりどう変化するかは検討しなかったが、[I]~[III]については、除去した反応過程の種類によってはステップサイズを多少粗くできると思われる所以、計算時間はさらに短縮できるであろう。

3.5 境界層厚さの見積り

非粘性のノズル流の解があたえられた場合に、その周辺の壁面と接する領域に生ずる境界層のおよその厚さを、例えば次式¹⁵⁾

$$\frac{\delta^*}{x} = \frac{0.0064 M_f^{1.25}}{(Re_x)^{0.14}} \quad (35)$$

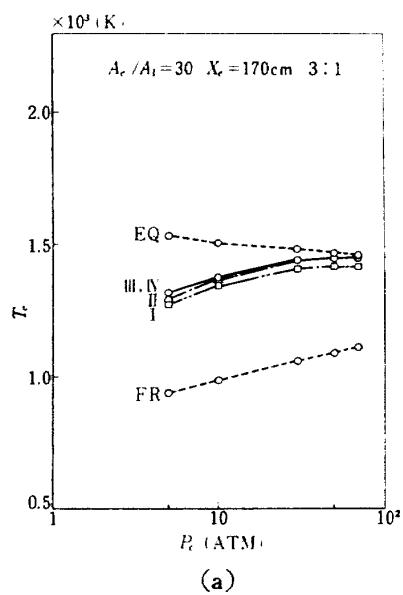
によって見積ることができる。ここで δ^* は境界層の排除厚、 M_f は式(10)のマッハ数、

$$Re_x = \rho v x / \mu$$

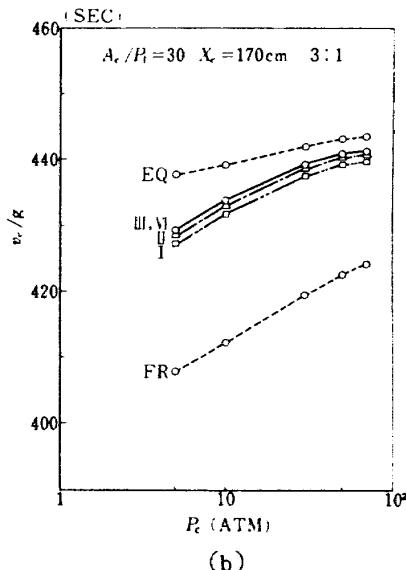
はレイノルズ数で μ は粘性係数である。燃焼生成物の μ の値を簡単に見積るために、ここでは気体が主としてH₂、O₂、H₂Oからなるとし、これらの粘性係数を μ_{O_2} 、 μ_{H_2} 、 μ_{H_2O} とし、次式¹⁶⁾

$$\mu = \sum_i \frac{X_i^2}{X_i^2 / \mu_i + 1.385 \sum_j (X_i X_j RT / p w_i D_{ij})} \quad (36)$$

により計算した。但し X_i はモル分率、 w_i は分子量、 D_{ij} は拡散係数、 i, j はO₂、H₂、H₂Oを意味し、Σはこれらについて和をとるものとする。 μ_i 、 D_{ij} に対する公式も文献¹⁶⁾のものを用いる。但し D_{ij} および μ_i はすべて無極性分子に対する公式で近似した。その際分子間ポテンシャルはLennard-Jones型で表わされると仮定したが、この仮定はH₂、O₂についてはほぼ満足される。H₂Oについては、分子間距離の一3乗に比例する永久双極子間のポテンシャルを無視したことと相当する。輸送係数の値を決定する衝突積分(φ 積分)の値の実験値¹⁷⁾は約1000°Cでは無極性分子に対する計算値より約30%



(a)



(b)

図17. 図16と同様で水素酸素初期混合モル比が3:1の場合

大きい。これが上記の無視したポテンシャルの効果と考えられる。これを無視した場合、(35)式の δ^* は数%大きくなる。

図18にノズル壁に沿っての δ^* の計算例を示す。 O/F 比5.2, $p_c = 35$ 気圧, $A_e/A_t = 177$, ノズルの形状はスロート上流下流共に式(32)のような x の三次式であたえられる場合で、 $x_e = 173.1\text{ cm}$ において $\delta^* = 1.6\text{ cm}$ となる。

図19にノズル出口における δ^* の燃焼圧力および水素酸素初期混合モル比による変化を示す。混合比が化学量論比に近づくにつれて(O/F 比の増大につれて), また p_c の増大につれて M_f が減少し, δ^* が小さくなる。またノズルIとIIではレイノルズ数の大きいIの方が δ^* が大きい。

4 あとがき

酸素水酸燃焼生成物の準一次元化学非平衡ノズル流について、化学種として O_2 , H_2 , O , H , OH , H_2O , HO_2 の7種類を考え、順逆方向最高24通りの非平衡過程を考慮して解析し、その気体力学的特性を調べた。結果を反応速度係数が無限大の化学平衡流および反応速度係数が0の化学凍結流の場合と比較した。化学種のエンタルピ、比熱、あるいは平衡定数などは分配関数から計算する方法を用い、数値表あるいは近似式等は用いなかった。なお燃焼室では水素だけでなく酸素も最初から気体であるとした。

主な結果を要約すると

(1) 流れの圧力、温度、流速等は最初化学平衡状態にあるが、スロート下流である程度膨張が進んでから化学非平衡効果が著しくなる。

(2) ノズル出口における圧力、温度、比推力は燃焼圧力の増大と共に増す。またノズル出口での圧力、温度は O/F 比の増大と共に増すが、比推力は O/F 比に対しゆるいピークを示す。このピークの成因は燃焼室における量 $v_m = [2/(r_{f,c} - 1)]^{1/2} a_c$ のピークに対応している。

(3) ノズル出口における圧力、温度、比推力、真空推力、推力係数等は化学平衡流で最大、化学凍結流で最小となり、非平衡流では一般にこれらの間にある。密度および流量は平衡流で最小、凍結流で最大となる。

(4) ノズル出口断面積比 A_e/A_t が一定の場合、長いノズルでゆっくり膨張させた方が平衡流の状態を保ちやすい

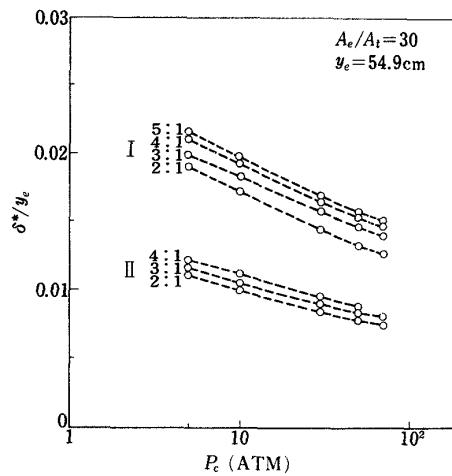


図19 ノズル出口における境界層排除厚の燃焼圧力および初期混合モル比による変化。化学非平衡流。I, IIはノズルI, IIによる差異。 y_e はノズル出口半径($\pi y_e^2 = A_e$)。

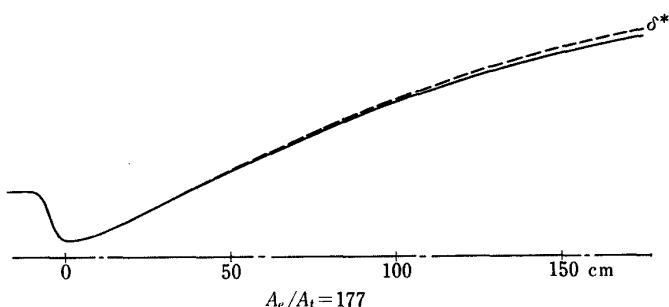


図18 ノズル壁に沿っての境界層排除厚の計算例。

$A_e = 176.6\text{ cm}^2$, $A_t = 7.85\text{ cm}^2$, $A_e/A_t = 177$,
 $x_e = -10\text{ cm}$, $x_e = 173.1\text{ cm}$ のノズル(スロート上流下流共 x の三次式)の場合。 $p_c = 35$ 気圧, $O/F = 5.2$ の化学非平衡流。

く、比推力がわずかながら増大する。

(5) 膨張流における化学非平衡過程には再結合反応のような大吸熱反応の外に、いくつかの二体交換反応が寄与している。Quan 等^{2,3)}による HO_2 を無視した反応系でも実用上は十分である。膨張流では HO_2 の粒子数の比率が小さく、巨視的諸量の変化に寄与しない。

(6) 非粘性領域の外側のノズル壁面上に生ずる境界層の排除厚さは O/F 比の増大、燃焼圧力の増大と共に減少す

る。

以上の結果は單一次元的計算の範囲内で得られたものであるが、今後の問題としては、軸対称流を特性曲線法により扱い、実用的により重要と考えられる逆ノズル問題への発展を考えるべきであろう。

本研究の全般にわたって、当所推進薬研究室（角田支所）官島博室長、毛呂明夫技官および鈴木和雄技官から有益な討論と教示を頂いた。これらの方々に感謝いたします。

付記(I) エンタルピ、比熱、平衡定数の計算

式(7a), (8a)の $h_j^*(T)$, $C_{pj}^*(T)$, 式(24)～(28)の平衡定数の計算。熱的完全気体について f_j を化学種 j の分配関数とし、エンタルビンを

$$h = \sum_j h_j$$

とすると

$$\begin{aligned} h_j &= \frac{1}{\rho V} [N_j k T^2 \frac{1}{f_j} \left(\frac{\partial f_j}{\partial T} \right)_V + p_j V] \\ &= r_j k T + r_j k T^2 \frac{1}{f_j} \frac{df_j}{dT} \equiv r_j h_j^*(T), \\ h_j^*(T) &= k T + \frac{k T^2}{f_j} \frac{df_j}{dT} \end{aligned} \quad (\text{A1})$$

となる。但し V は系の体積、 N_j は化学種 j の全粒子数である。以下ではエネルギーの原点として絶対0度で H_2 , O_2 の静止している状態をとることにすると、H, O等の基底状態はこれ等より解離エネルギーだけ高い状態にある。

分配関数は並進と内部自由度の各エネルギー単位に対する分配関数 f_j^{tr} , f_j^{in} の積で表わされる。

$$f_j = f_j^{tr} f_j^{in}, f_j^{tr} = V (2\pi M_j k T / \hbar^2)^{3/2} \quad (\text{A2})$$

但し M_j は化学種 j の粒子一ケの質量、 \hbar はPlanckの定数とする。 f_j^{in} はさらに振動、回転(分子のみ)と電子状態の各自由度に対する分配関数 f_j^v , f_j^r , f_j^{el} の積で近似的にあらわされる。

(I) 单原子气体 H, O

$$f_j^{in} = f_j^{el} = \sum_{n=0} g_n^j \exp(-T_{xn}^j / T), \quad (\text{A3})$$

但し g_n^j は単位 n の電子励起状態の統計的重率、 T_{xn} は励起エネルギー単位とする。これらの値を表Aに示す。

表 A*

j	n	g_n	T_x (K)
O	0	5	0.0
	1	3	228.1
	2	1	325.9
	3	5	22831.0
H	0	2	0.0
	1	8	118356.0

* C.E.Moore : Atomic Energy Levels Vol.1, NBS Circular 467 (1949) による。

(ii) 二原子分子 O_2 , H_2 , OH

分子振動の非調和性と回転の非剛性による補正を考慮する

$$f_j^{in} = \sum_{n=0} \frac{(1+G_n^j T)}{[1-\exp(-T_{vn}^j/T)]} \frac{T}{\sigma^j T_{rn}^j} \times g_n^j \exp(-T_{xn}^j/T) \quad (\text{A4})$$

但し T_{vn} , T_{rn} は分子振動および回転のエネルギー単位、 G_n はBetheの補正因子、 σ は分子のシンメトリー数である。これらの値を表Bに示す。

表 B**

j	n	g_n	T_{xn} (K)	T_{vn} (K)	T_{rn} (K)	G_n (/K)
O_2 ($\sigma=2$)	0	3	0.0	2239.1	2069	1.497×10^{-5}
	1	2	11341.0	2134.5	2040	1.717×10^{-5}
	2	1	18879.0	2121.2	2002	1.992×10^{-5}
H_2 ($\sigma=2$)	0	1	0.0	5984.7	85.32	3.568×10^{-5}
	1	1	131925.0	—	—	—
OH ($\sigma=1$)	0	4	0.0	5136.0	26.64	2.387×10^{-5}
	1	2	47025.0	—	—	—

** 主としてG.Hertzberg : Spectra of Diatomic Molecules (1950), Van Nostrand 巻末数值表による。

なお H_2 , OH については $n=1$ の項は極めて小さいので無視してある。 G_n の項も通常は無視しても大差ない。

(iii) 三原子分子 H_2O , HO_2

各振動モードは調和振動子とし、回転は剛体回転とする。

$$f_j^{in} = f_j^v f_j^r f_j^{el},$$

$$f_j^v = [1 - \exp(-T_{v1}^j / T)]^{-1} [1 - \exp(-T_{v2}^j / T)]^{-1} \times [1 - \exp(-T_{v3}^j / T)]^{-1}, \quad (\text{A5})$$

$$\begin{aligned} f_j^r &= \frac{\pi^{1/2}}{\sigma} \left(\frac{8\pi^2 A^j k T}{h^2} \right)^{1/2} \left(\frac{8\pi^2 B^j k T}{h^2} \right)^{1/2} \\ &\quad \times \left(\frac{8\pi^2 C^j k T}{h^2} \right)^{1/2} \\ &= \frac{\pi^{1/2}}{\sigma} \left(\frac{8\pi^2 k T}{h^2} \right)^{3/2} (A^j B^j C^j)^{1/2}, \end{aligned} \quad (\text{A6})$$

但し T_{v1} , T_{v2} , T_{v3} は異なる振動モードに対する分子振動の特性温度、 A , B , C は三つの慣性主軸のまわりの分子回転の慣性モーメントである。これらの値を表Cに示す。

表 C***

<i>j</i>	<i>n</i>	<i>g_n</i>	<i>T_{v1}</i> (K)	<i>T_{v2}</i> (K)	<i>T_{v3}</i> (K)	<i>ABC</i> (g ³ cm ⁶)
H ₂ O (σ=2)	0	1	5261.8	2294.3	5403.9	5.7658 × 10 ⁻¹²⁰
HO ₂ (σ=1)	0	2	1999.1	1584.1	4912.1	0.6424 × 10 ⁻¹¹⁷

*** 主として JANAF tables of thermochemical data (1965) Dow Chemical Co. による。

これらの値を用いて分配関数とその温度微分を計算することができる。 h_j^* , C_{pj}^* を具体的に書くと

$$h_O^* = \frac{5}{2} kT + \frac{kT^2}{f_O^e} \frac{df_O^e}{dT} + \Delta H_{O2}, \quad (A7)$$

$$C_{PO}^* = \frac{5}{2} k + \frac{2kT}{f_O^e} \frac{df_O^e}{dT} + \frac{kT^2}{f_O^e} \left[\frac{d^2 f_O^e}{dT^2} - \frac{1}{f_O^e} \left(\frac{df_O^e}{dT} \right)^2 \right], \quad (A8)$$

$$h_H^* = \frac{5}{2} kT + \frac{kT^2}{f_H^e} \frac{df_H^e}{dT} + \Delta H_{H2}, \quad (A9)$$

$$C_{PH}^* = \frac{5}{2} k + \frac{2kT}{f_H^e} \frac{df_H^e}{dT} + \frac{kT^2}{f_H^e} \left[\frac{d^2 f_H^e}{dT^2} - \frac{1}{f_H^e} \left(\frac{df_H^e}{dT} \right)^2 \right], \quad (A10)$$

$$h_{O2}^* = \frac{5}{2} kT + \frac{kT^2}{f_{O2}^{in}} \frac{df_{O2}^{in}}{dT}, \quad (A11)$$

$$C_{PO2}^* = \frac{5}{2} k + \frac{2kT}{f_{O2}^{in}} \frac{df_{O2}^{in}}{dT} + \frac{kT^2}{f_{O2}^{in}} \left[\frac{d^2 f_{O2}^{in}}{dT^2} - \frac{1}{f_{O2}^{in}} \left(\frac{df_{O2}^{in}}{dT} \right)^2 \right], \quad (A12)$$

$$h_{H2}^* = \frac{5}{2} kT + \frac{kT^2}{f_{H2}^{in}} \frac{df_{H2}^{in}}{dT}, \quad (A13)$$

$$C_{PH2}^* = \frac{5}{2} k + \frac{2kT}{f_{H2}^{in}} \frac{df_{H2}^{in}}{dT} + \frac{kT^2}{f_{H2}^{in}} \left[\frac{d^2 f_{H2}^{in}}{dT^2} - \frac{1}{f_{H2}^{in}} \left(\frac{df_{H2}^{in}}{dT} \right)^2 \right], \quad (A14)$$

$$h_{OH}^* = \frac{5}{2} kT + \frac{kT^2}{f_{OH}^{in}} \frac{df_{OH}^{in}}{dT} + \Delta H_{OH}, \quad (A15)$$

$$C_{POH}^* = \frac{5}{2} k + \frac{2kT}{f_{OH}^{in}} \frac{df_{OH}^{in}}{dT} + \frac{kT^2}{f_{OH}^{in}} \left[\frac{d^2 f_{OH}^{in}}{dT^2} - \frac{1}{f_{OH}^{in}} \left(\frac{df_{OH}^{in}}{dT} \right)^2 \right], \quad (A16)$$

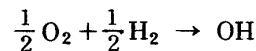
$$h_{H2O}^* = 4 kT + \sum_{i=1}^3 \frac{k T_{vi}^{H2O}}{\exp(T_{vi}^{H2O}/T) - 1} + \Delta H_{H2O}, \quad (A17)$$

$$C_{PH2O}^* = 4 k + \sum_{i=1}^3 \frac{k (T_{vi}^{H2O})^2}{T^2 [\exp(T_{vi}^{H2O}/T) - 1]^2} \exp(T_{vi}^{H2O}/T), \quad (A18)$$

$$h_{HO2}^* = 4 kT + \sum_{i=1}^3 \frac{k T_{vi}^{HO2}}{\exp(T_{vi}^{HO2}/T) - 1} + \Delta H_{HO2}, \quad (A19)$$

$$C_{PHO2}^* = 4 k + \sum_{i=1}^3 \frac{k (T_{vi}^{HO2})^2}{T^2 [\exp(T_{vi}^{HO2}/T) - 1]^2} \exp(T_{vi}^{HO2}/T), \quad (A20)$$

但し、 ΔH_j は絶対0度における化学種*j*の生成熱(heat of formation)で、OとHについてはそれぞれO₂, H₂の解離エネルギー D_{O2} , D_{H2} の1/2に等しい。OHについては



なる過程を考えると、 $\Delta H_{OH} = \frac{1}{2} (D_{O2} + D_{H2}) - D_{OH}$ をとればよいことがわかる。ここで D_{OH} は OH → O + H の解離エネルギーで $D_{OH} = 100.4$ kcal/mol とする。H₂Oについても同様に考えて

$$\begin{aligned} \Delta H_H &= 51.62 \text{ kcal/mol}, \\ \Delta H_O &= 58.58 \text{ "}, \\ \Delta H_{OH} &= 9.8 \text{ "}, \\ \Delta H_{H2O} &= -57.10 \text{ "}, \\ \Delta H_{HO2} &= 5.7 \text{ "}, \end{aligned}$$

とした。これらの値は H, O, OH, H₂Oについては主として G. Helzberg 上掲書, HO₂については JANAF 上掲表によった。なお式(A7), (A9)等に用いる場合には粒子一ヶ当たりの値に換算しておく。

圧力平衡定数は分圧 $p_j = n_j kT$ だから

$$K_{PH} = K_{nH} (kT)^{1/2}, \quad K_{nH} = n_H / n_{H2}^{1/2}, \quad (A21)$$

$$K_{PO} = K_{nO} (kT)^{1/2}, \quad K_{nO} = n_O / n_{O2}^{1/2}, \quad (A22)$$

$$K_{POH} = K_{nOH}, \quad K_{nOH} = n_{OH} / (n_{H2} n_{O2})^{1/2}, \quad (A23)$$

$$K_{PH2O} = K_{nH2O} (kT)^{-1/2}, \quad K_{nH2O} = n_{H2O} / n_{H2} n_{O2}^{1/2}, \quad (A24)$$

$$K_{PHO2} = K_{nHO2} (kT)^{-1/2}, \quad K_{nHO2} = n_{HO2} / n_{H2}^{1/2} n_{O2}. \quad (A25)$$

K_n は分配関数から計算することができる。

$$\frac{N_H^2}{N_{H2}} = V \left(\frac{2\pi kT}{h^2} \right)^{3/2} \left(\frac{M_H}{M_{H2}} \right)^{3/2} \frac{(f_H^e)^2}{f_{H2}^{in}} \exp(-2 \Delta H_{H2} / kT),$$

$$\frac{K_{nH}^2}{K_{nH2}} = \frac{n_H^2}{n_{H2}} = \left(\frac{\pi M_H kT}{h^2} \right)^{3/2} \frac{(f_H^e)^2}{f_{H2}^{in}} \exp(-2 \Delta H_{H2} / kT), \quad (A26)$$

但し $n = N/V$ である。同様にして

$$\frac{K_{nO}^2}{K_{nO2}} = \frac{n_O^2}{n_{O2}} = \left(\frac{\pi M_O kT}{h^2} \right)^{3/2} \frac{(f_O^e)^2}{f_{O2}^{in}} \exp(-2 \Delta H_{O2} / kT), \quad (A27)$$

$$K_{nOH}^2 = \frac{n_{OH}^2}{n_{H2} n_{O2}} = \left(\frac{M_{OH}}{M_{O2} M_{H2}} \right)^{3/2} \frac{(f_{OH}^{in})^2}{f_{O2}^{in} f_{H2}^{in}} \times \exp(-2 \Delta H_{OH} / kT), \quad (A28)$$

$$K_{nH2O}^2 = \frac{n_{H2O}^2}{n_{H2} n_{O2}} = \left(\frac{2\pi kT}{h^2} \right)^{-3/2} \left(\frac{M_{H2O}^2}{M_{H2}^2 M_{O2}} \right)^{3/2} \times \frac{(f_{H2O}^{in})^2}{(f_{H2}^{in})^2 f_{O2}^{in}} \exp(-2 \Delta H_{H2O} / kT), \quad (A29)$$

$$K_{nHO2}^2 = \frac{n_{HO2}^2}{n_{H2} n_{O2}} = \left(\frac{2\pi kT}{h^2} \right)^{-3/2} \left(\frac{M_{HO2}^2}{M_{H2}^2 M_{O2}^2} \right)^{3/2} \times \frac{(f_{HO2}^{in})^2}{f_{H2}^{in} (f_{O2}^{in})^2} \exp(-2 \Delta H_{HO2} / kT), \quad (A30)$$

これらの式による h^* , C_p^* , K_p 等の計算結果は常温から燃焼温度までの広い温度範囲で数値表と良く一致する。

付記(2) 出発値の計算

式(13)～(16)の $(dv/dx)_{eq}$ 等は $x = x_c + \Delta x/C$ において流れがまだ平衡状態を保っていると仮定することにより、化学平衡流の方程式系から計算することができる。

付記(1)の式(A21)～(A25)から

$$\begin{aligned} r_0^2 / r_{O2} &= K_{nO}^2 / \rho, \\ r_H^2 / r_{H2} &= K_{nH}^2 / \rho, \\ r_{OH}^2 / r_{H2} r_{O2} &= K_{nOH}^2, \\ r_{H2O}^2 / r_{H2} r_{O2} &= K_{nH2O}^2 \rho, \\ r_{HO2}^2 / r_{H2} r_{O2} &= K_{nHO2}^2 \rho. \end{aligned}$$

これらの微分および式(5), (6)の微分から

$$2d\gamma_O/r_O - d\gamma_{O2}/r_{O2} = -d\rho/\rho + a_1 dT/T, \quad (B1)$$

$$2d\gamma_H/r_H - d\gamma_{H2}/r_{H2} = -d\rho/\rho + a_2 dT/T, \quad (B2)$$

$$2d\gamma_{OH}/r_{OH} - d\gamma_{H2}/r_{H2} - d\gamma_{O2}/r_{O2} = a_3 dT/T, \quad (B3)$$

$$2d\gamma_{H2O}/r_{H2O} - 2d\gamma_{H2}/r_{H2} - d\gamma_{O2}/r_{O2} = d\rho/\rho + a_4 dT/T, \quad (B4)$$

$$2d\gamma_{HO2}/r_{HO2} - d\gamma_{H2}/r_{H2} - 2d\gamma_{O2}/r_{O2} = d\rho/\rho + a_5 dT/T, \quad (B5)$$

$$2d\gamma_{H2} + d\gamma_{OH} + d\gamma_H + 2d\gamma_{H2O} + d\gamma_{HO2} = 0, \quad (B6)$$

$$2d\gamma_{O2} + d\gamma_{OH} + d\gamma_O + d\gamma_{H2O} + 2d\gamma_{HO2} = 0, \quad (B7)$$

但し、

$$a_1 = (2T/K_{nO}) dK_{nO}/dT,$$

$$a_2 = (2T/K_{nH}) dK_{nH}/dT,$$

$$a_3 = (2T/K_{nOH}) dK_{nOH}/dT,$$

$$a_4 = (2T/K_{nH2O}) dK_{nH2O}/dT,$$

$$a_5 = (2T/K_{nHO2}) dK_{nHO2}/dT.$$

式(2), (3), (4) から

$$d\rho/\rho + dv/v + dA/A = 0, \quad (B8)$$

$$\rho v dv + dp = 0, \quad (B9)$$

$$v dv + dh = 0, \quad (B10)$$

状態方程式の微分(7a), (8a)から

$$dp = \sum \gamma_j k T d\rho + \rho \sum \gamma_j k dT + \rho k T \sum \gamma_j d\gamma_j, \quad (B11)$$

$$dh = \sum h_j^* d\gamma_j + \sum \gamma_j C_{pj}^* dT, \quad (B12)$$

式(B1)～(B12)をまとめて

$$\mathbf{B} d\mathbf{W} = \mathbf{C} \quad (B13)$$

と書くと、 \mathbf{W} , \mathbf{C} および \mathbf{B} は

$$\mathbf{W}^T = (\gamma_{O2}, \gamma_{H2}, \gamma_O, \gamma_H, \gamma_{OH}, \gamma_{H2O}, \gamma_{HO2}, T, v, \rho, p, h),$$

$$\mathbf{C}^T = (0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, -dA/A, 0, 0)$$

$$\mathbf{B} = \begin{bmatrix} 2, 0, 1, 0, 1, 1, 2, 0, 0, 0, 0, 0, 0 \\ 0, 2, 0, 1, 1, 2, 1, 0, 0, 0, 0, 0, 0 \\ -1/\gamma_{O2}, 0, 2/\gamma_O, 0, 0, 0, 0, -a_1/T, 0, 1/\rho, 0, 0 \\ 0, -1/\gamma_{H2}, 0, 2/\gamma_H, 0, 0, 0, -a_2/T, 0, 1/\rho, 0, 0 \\ -1/\gamma_{O2}, -1/\gamma_{H2}, 0, 0, 2/\gamma_{OH}, 0, 0, -a_3/T, 0, 0, 0, 0 \\ -1/\gamma_{O2}, -2/\gamma_{H2}, 0, 0, 0, 2/\gamma_{H2O}, 0, -a_4/T, 0, -1/\rho, 0, 0 \\ -2/\gamma_{O2}, -1/\gamma_{H2}, 0, 0, 0, 0, 2/\gamma_{HO2}, -a_5/T, 0, -1/\rho, 0, 0 \\ \rho k T, \rho k \sum \gamma_j, 0, k T \sum \gamma_j, -1, 0 \\ h_{O2}^*, h_{H2}^*, h_O^*, h_H^*, h_{OH}^*, h_{H2O}^*, h_{HO2}^*, \sum \gamma_j C_{pj}^*, 0, 0, 0, -1 \end{bmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1/v & 1/\rho & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & v & 0 & 1/\rho & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & v & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

これより例えば dv は式 (30) のように書くと

$$dv = -v dA / (1 - M_{eq}) A,$$

$$M_{eq} = v / a_{eq},$$

$$a_{eq} = (r_{eq} p / \rho)^{1/2},$$

$$r_{eq} = \rho D_3 / p (D_1 - \rho D_2)$$

となる。但し D_1, D_2, D_3 は r_s の関数で以下のようになる。

$$D_1 = k d_1,$$

$$D_2 = d_2 / \rho T,$$

$$D_3 = -k \sum_j r_j d_2 - k (d_3 - d_4 + d_5 - d_6),$$

$$d_1 = a_1 A_1 - a_2 A_2 + a_3 A_3 - a_4 A_4 + a_5 A_5 + \sum_j r_j A_6,$$

$$d_2 = a_1 B_1 - a_2 B_2 + a_3 B_3 - a_4 B_4 + a_5 B_5 + \sum_j r_j T C_{pj}^* A_6,$$

$$d_3 = a_1 C_1 - a_2 C_2 + a_3 C_3 - a_4 C_4 - \sum_j r_j B_5 + \sum_j r_j T C_{pj}^* A_5,$$

$$d_4 = a_1 D_1 - a_2 D_2 + a_3 D_3 - a_5 C_4 - \sum_j r_j B_4 + \sum_j r_j T C_{pj}^* A_4,$$

$$d_5 = a_1 E_1 - a_3 E_2 + a_4 D_2 - a_5 C_2 - \sum_j r_j B_2 + \sum_j r_j T C_{pj}^* A_2,$$

$$d_6 = a_2 E_1 - a_3 F_2 + a_4 D_1 - a_5 C_1 - \sum_j r_j B_1 + \sum_j r_j T C_{pj}^* A_1,$$

$$A_j = r_{02} A_{j1} - r_{H2} A_{j2} + r_0 A_{j3} - r_H A_{j4} + r_{0H} A_{j5} - r_{H20} A_{j6} \\ + r_{HO2} A_{j7}, \quad j = 1, \dots, 5$$

$$A_6 = -2 A_{51} + A_{52} + A_{57},$$

$$B_j = r_{02} h_{02}^* A_{j1} - r_{H2} h_{H2}^* A_{j2} + r_0 h_0^* A_{j3} - r_H h_H^* A_{j4} \\ + r_{0H} h_{0H}^* A_{j5} - r_{H20} h_{H20}^* A_{j6} + r_{HO2} h_{HO2}^* A_{j7}, \quad j = 1, \dots, 5$$

$$C_j = r_{02} h_{02}^* C_{j1} - r_{H2} h_{H2}^* C_{j2} + r_0 h_0^* C_{j3} - r_H h_H^* C_{j4} \\ + r_{0H} h_{0H}^* C_{j5} - r_{H20} h_{H20}^* C_{j6} + r_{HO2} h_{HO2}^* C_{j7}, \quad j = 1, \dots, 4$$

$$D_j = r_{02} h_{02}^* D_{j1} - r_{H2} h_{H2}^* D_{j2} + r_0 h_0^* D_{j3} - r_H h_H^* D_{j4} \\ + r_{0H} h_{0H}^* D_{j5} - r_{H20} h_{H20}^* D_{j6} + r_{HO2} h_{HO2}^* D_{j7}, \quad j = 1, \dots, 3$$

$$E_j = r_{02} h_{02}^* E_{j1} - r_{H2} h_{H2}^* E_{j2} + r_0 h_0^* E_{j3} - r_H h_H^* E_{j4} \\ + r_{0H} h_{0H}^* E_{j5} - r_{H20} h_{H20}^* E_{j6} + r_{HO2} h_{HO2}^* E_{j7}, \quad j = 1, 2$$

$$F_2 = r_{02} h_{02}^* F_{21} - r_{H2} h_{H2}^* F_{22} + r_0 h_0^* F_{23} - r_H h_H^* F_{24} \\ + r_{0H} h_{0H}^* F_{25} - r_{H20} h_{H20}^* F_{26} + r_{HO2} h_{HO2}^* F_{27}.$$

上式の $A_{11}, \dots, A_{57}, C_{11}, \dots, C_{47}, D_{11}, \dots, D_{37},$

$E_{11}, \dots, E_{27}, F_{21}, \dots, F_{27}$ は以下のようになる。

$$A_{11} = C_{111} + 2 C_{116},$$

$$A_{12} = 2 C_{111} + 2 C_{126},$$

$$A_{13} = 2 C_{112} - C_{122} + 2 C_{136},$$

$$A_{14} = 2 C_{113} - C_{123} + 2 C_{146},$$

$$A_{15} = 2 C_{114} - C_{124} + 2 C_{156},$$

$$A_{16} = 2 C_{115} - C_{125} + 2 C_{166},$$

$$A_{17} = 2 C_{116} - C_{126},$$

$$A_{21} = C_{211} + 2 C_{216},$$

$$A_{22} = 2 C_{211} + 2 C_{226},$$

$$A_{23} = 2 C_{212} - C_{222} + 2 C_{236},$$

$$A_{24} = 2 C_{213} - C_{223} + 2 C_{246},$$

$$A_{25} = 2 C_{214} - C_{224} + 2 C_{256},$$

$$A_{26} = 2 C_{215} - C_{225} + 2 C_{266},$$

$$A_{27} = 2 C_{216} - C_{226},$$

$$A_{31} = C_{311} + 2 C_{316},$$

$$A_{32} = 2 C_{311} + 2 C_{326},$$

$$A_{33} = 2 C_{312} - C_{322} + 2 C_{336},$$

$$A_{34} = 2 C_{313} - C_{323} + 2 C_{346},$$

$$A_{35} = 2 C_{314} - C_{324} + 2 C_{356},$$

$$A_{36} = 2 C_{315} - C_{325} + 2 C_{366},$$

$$A_{37} = 2 C_{316} - C_{326},$$

$$A_{41} = C_{411} + 2 C_{416},$$

$$A_{42} = 2 C_{411} + 2 C_{426},$$

$$A_{43} = 2 C_{412} - C_{422} + 2 C_{436},$$

$$A_{44} = 2 C_{413} - C_{423} + 2 C_{446},$$

$$A_{45} = 2 C_{414} - C_{424} + 2 C_{456},$$

$$A_{46} = 2 C_{415} - C_{425} + 2 C_{466},$$

$$A_{47} = 2 C_{416} - C_{426},$$

$$A_{51} = 2 C_{411} - 2 C_{415},$$

$$A_{52} = C_{411} - 2 C_{425},$$

$$A_{53} = C_{412} - 2 C_{422} - 2 C_{435},$$

$$A_{54} = C_{413} - 2 C_{423} - 2 C_{445},$$

$$\begin{aligned}
A_{56} &= C_{414} - 2C_{424} - 2C_{455}, \\
A_{56} &= C_{415} - 2C_{425}, \\
A_{57} &= C_{416} - 2C_{426} + 2C_{466}, \\
C_{11} &= -r_H C_{111} + r_O C_{112} - r_H C_{113} + r_O H C_{114} - r_H 2 O C_{115} + r_H 2 O 2 C_{116}, \\
C_{12} &= -r_O 2 C_{111} + r_O C_{122} - r_H C_{123} + r_O H C_{124} - r_H 2 O C_{125} + r_H 2 O 2 C_{126}, \\
C_{13} &= -r_O 2 C_{112} + r_H 2 C_{122} - r_H C_{133} + r_O H C_{134} - r_H 2 O C_{135} + r_H 2 O 2 C_{136}, \\
C_{14} &= -r_O 2 C_{113} + r_H 2 C_{123} - r_O C_{133} + r_O H C_{144} - r_H 2 O C_{145} + r_H 2 O 2 C_{146}, \\
C_{15} &= -r_O 2 C_{114} + r_H 2 C_{124} - r_O C_{134} + r_H C_{144} - r_H 2 O C_{155} + r_H 2 O 2 C_{156}, \\
C_{16} &= -r_O 2 C_{115} + r_H 2 C_{125} - r_O C_{135} + r_H C_{145} - r_O H C_{155} + r_H 2 O 2 C_{166}, \\
C_{17} &= -r_O 2 C_{116} + r_H 2 C_{126} - r_O C_{136} + r_H C_{146} - r_O H C_{156} + r_H 2 O 2 C_{166}, \\
C_{21} &= -r_H 2 C_{211} + r_O C_{212} - r_H C_{213} + r_O H C_{214} - r_H 2 O C_{215} + r_H 2 O 2 C_{216}, \\
C_{22} &= -r_O 2 C_{211} + r_O C_{222} - r_H C_{223} + r_O H C_{224} - r_H 2 O C_{225} + r_H 2 O 2 C_{226}, \\
C_{23} &= -r_O 2 C_{212} + r_H 2 C_{222} - r_H C_{233} + r_O H C_{234} - r_H 2 O C_{235} + r_H 2 O 2 C_{236}, \\
C_{24} &= -r_O 2 C_{213} + r_H 2 C_{223} - r_O C_{233} + r_O H C_{244} - r_H 2 O C_{245} + r_H 2 O 2 C_{246}, \\
C_{25} &= -r_O 2 C_{214} + r_H 2 C_{224} - r_O C_{234} + r_H C_{244} - r_H 2 O C_{255} + r_H 2 O 2 C_{256}, \\
C_{26} &= -r_O 2 C_{215} + r_H 2 C_{225} - r_O C_{235} + r_H C_{245} - r_O H C_{255} + r_H 2 O 2 C_{266}, \\
C_{27} &= -r_O 2 C_{216} + r_H 2 C_{226} - r_O C_{236} + r_H C_{246} - r_O H C_{256} + r_H 2 O 2 C_{266}, \\
C_{31} &= -r_H 2 C_{311} + r_O C_{312} - r_H C_{313} + r_O H C_{314} - r_H 2 O C_{315} + r_H 2 O 2 C_{316}, \\
C_{32} &= -r_O 2 C_{311} + r_O C_{322} - r_H C_{323} + r_O H C_{324} - r_H 2 O C_{325} + r_H 2 O 2 C_{326}, \\
C_{33} &= -r_O 2 C_{312} + r_H 2 C_{322} - r_H C_{333} + r_O H C_{334} - r_H 2 O C_{335} + r_H 2 O 2 C_{336}, \\
C_{34} &= -r_O 2 C_{313} + r_H 2 C_{323} - r_O C_{333} + r_O H C_{344} - r_H 2 O C_{345} + r_H 2 O 2 C_{346}, \\
C_{35} &= -r_O 2 C_{314} + r_H 2 C_{324} - r_O C_{334} + r_H C_{344} - r_H 2 O C_{355} + r_H 2 O 2 C_{356}, \\
C_{36} &= -r_O 2 C_{315} + r_H 2 C_{325} - r_O C_{335} + r_H C_{345} - r_O H C_{355} + r_H 2 O 2 C_{366}, \\
C_{37} &= -r_O 2 C_{316} + r_H 2 C_{326} - r_O C_{336} + r_H C_{346} - r_O H C_{356} + r_H 2 O 2 C_{366}, \\
C_{41} &= -r_H 2 C_{411} + r_O C_{412} - r_H C_{413} + r_O H C_{414} - r_H 2 O C_{415} + r_H 2 O 2 C_{416}, \\
C_{42} &= -r_O 2 C_{411} + r_O C_{422} - r_H C_{423} + r_O H C_{424} - r_H 2 O C_{425} + r_H 2 O 2 C_{426}, \\
C_{43} &= -r_O 2 C_{412} + r_H 2 C_{422} - r_H C_{433} + r_O H C_{434} - r_H 2 O C_{435} + r_H 2 O 2 C_{436}, \\
C_{44} &= -r_O 2 C_{413} + r_H 2 C_{423} - r_O C_{433} + r_O H C_{444} - r_H 2 O C_{445} + r_H 2 O 2 C_{446}, \\
C_{45} &= -r_O 2 C_{414} + r_H 2 C_{424} - r_O C_{434} + r_H C_{444} - r_H 2 O C_{455} + r_H 2 O 2 C_{456}, \\
C_{46} &= -r_O 2 C_{415} + r_H 2 C_{425} - r_O C_{435} + r_H C_{445} - r_O H C_{455} + r_H 2 O 2 C_{466}, \\
C_{47} &= -r_O 2 C_{416} + r_H 2 C_{426} - r_O C_{436} + r_H C_{446} - r_O H C_{456} + r_H 2 O 2 C_{466}, \\
D_{11} &= -r_H 2 D_{111} + r_O D_{112} - r_H D_{113} + r_O H D_{114} - r_H 2 O D_{115} + r_H 2 O 2 D_{116}, \\
D_{12} &= -r_O 2 D_{111} + r_O D_{122} - r_H D_{123} + r_O H D_{124} - r_H 2 O D_{125} + r_H 2 O 2 D_{126}, \\
D_{13} &= -r_O 2 D_{112} + r_H 2 D_{122} - r_H D_{133} + r_O H D_{134} - r_H 2 O D_{135} + r_H 2 O 2 D_{136}, \\
D_{14} &= -r_O 2 D_{113} + r_H 2 D_{123} - r_O D_{133} + r_O H D_{144} - r_H 2 O D_{145} + r_H 2 O 2 D_{146}, \\
D_{15} &= -r_O 2 D_{114} + r_H 2 D_{124} - r_O D_{134} + r_H D_{144} - r_H 2 O D_{155} + r_H 2 O 2 D_{156}, \\
D_{16} &= -r_O 2 D_{115} + r_H 2 D_{125} - r_O D_{135} + r_H D_{145} - r_O H D_{155} + r_H 2 O 2 D_{166}.
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
C_{111} &= -8 \tau_0 \tau_{H02}, \\
C_{112} &= 4 \tau_{H02} (8 \tau_{H2} + 2 \tau_H + \tau_{OH} + 6 \tau_{H20}), \\
C_{113} &= -4 \tau_0 \tau_{H02}, \\
C_{114} &= 4 \tau_0 \tau_{H02}, \\
C_{115} &= -8 \tau_0 \tau_{H02}, \\
C_{116} &= -4 \tau_0 (4 \tau_{H2} + \tau_H + \tau_{OH} + 4 \tau_{H20}), \\
C_{122} &= 4 \tau_{H02} (-4 \tau_{O2} + \tau_{OH} + 3 \tau_{H20}), \\
C_{123} &= 0, \\
C_{124} &= 4 \tau_0 \tau_{H02}, \\
C_{125} &= -4 \tau_0 \tau_{H02}, \\
C_{126} &= -4 \tau_0 (2 \tau_{H20} + \tau_{OH}), \\
C_{133} &= 2 \tau_{H02} (4 \tau_{O2} - \tau_{OH} - 3 \tau_{H20}), \\
C_{134} &= -2 \tau_{H02} (4 \tau_{O2} + 8 \tau_{H2} + 2 \tau_H + 3 \tau_{H20}), \\
C_{135} &= 2 \tau_{H02} (8 \tau_{O2} + 8 \tau_{H2} + 2 \tau_H - \tau_{OH}), \\
C_{136} &= 2 ((4 \tau_{H2} + \tau_H - \tau_{OH})(4 \tau_{O2} + \tau_{OH} + \tau_{H20}) \\
&\quad + (8 \tau_{O2} + \tau_{OH})(\tau_{OH} + 2 \tau_{H20})), \\
C_{144} &= 2 \tau_0 \tau_{H02}, \\
C_{145} &= -2 \tau_0 \tau_{H02}, \\
C_{146} &= -2 \tau_0 (\tau_{OH} + 2 \tau_{H20}), \\
C_{155} &= -2 \tau_0 \tau_{H02}, \\
C_{156} &= -2 \tau_0 (4 \tau_{H2} + \tau_H + 2 \tau_{H20}), \\
C_{166} &= 2 \tau_0 (4 \tau_{H2} + \tau_H - \tau_{OH}), \\
C_{211} &= -16 \tau_H \tau_{H02}, \\
C_{212} &= 0, \\
C_{213} &= 4 \tau_{H02} (8 \tau_{H2} + \tau_{OH} + 6 \tau_{H20}), \\
C_{214} &= 8 \tau_H \tau_{H02}, \\
C_{215} &= -16 \tau_H \tau_{H02}, \\
C_{216} &= -4 \tau_H (\tau_{OH} + 2 \tau_{H20}), \\
C_{222} &= 8 \tau_H \tau_{H02}, \\
C_{223} &= -4 \tau_{H02} (4 \tau_{O2} + \tau_0 - \tau_{OH} - 3 \tau_{H20}), \\
C_{224} &= 8 \tau_H \tau_{H02}, \\
C_{225} &= -8 \tau_H \tau_{H02}, \\
C_{226} &= -4 \tau_H (4 \tau_{O2} + \tau_0 + \tau_{OH} + \tau_{H20}), \\
C_{233} &= 2 \tau_{H02} (8 \tau_{H2} + \tau_{OH} + 6 \tau_{H20}), \\
C_{234} &= 4 \tau_H \tau_{H02}, \\
C_{235} &= -8 \tau_H \tau_{H02}, \\
C_{236} &= -2 \tau_H (\tau_{OH} + 2 \tau_{H20}),
\end{aligned}
\begin{aligned}
C_{244} &= -2 \tau_{H02} (4 \tau_{O2} + 8 \tau_{H2} + \tau_0 + 3 \tau_{H20}), \\
C_{245} &= 2 \tau_{H02} (8 \tau_{O2} + 8 \tau_{H2} + 2 \tau_0 - \tau_{OH}), \\
C_{246} &= 2 ((8 \tau_{O2} + 2 \tau_0 + \tau_{OH})(4 \tau_{H2} + 2 \tau_{H20}) \\
&\quad - (4 \tau_{O2} + \tau_0 - \tau_{H20})(4 \tau_{H2} - \tau_{OH})), \\
C_{255} &= -4 \tau_H \tau_{H02}, \\
C_{256} &= 2 \tau_H (4 \tau_{O2} + \tau_0 - \tau_{H20}), \\
C_{266} &= -2 \tau_H (8 \tau_{O2} + 2 \tau_0 + \tau_{OH}), \\
C_{311} &= 8 \tau_{OH} \tau_{H02}, \\
C_{312} &= 0, \\
C_{313} &= 4 \tau_{OH} \tau_{H02}, \\
C_{314} &= 8 \tau_{H02} (4 \tau_{H2} + \tau_H + 3 \tau_{H20}), \\
C_{315} &= 8 \tau_{OH} \tau_{H02}, \\
C_{316} &= -4 \tau_{OH} (4 \tau_{H2} + \tau_H + 2 \tau_{H20}), \\
C_{322} &= -4 \tau_{OH} \tau_{H02}, \\
C_{323} &= 0, \\
C_{324} &= -4 \tau_{H02} (4 \tau_{O2} + \tau_0 - 3 \tau_{H20}), \\
C_{325} &= 8 \tau_{OH} \tau_{H02}, \\
C_{326} &= 4 \tau_{OH} (4 \tau_{O2} + \tau_0 - \tau_{H20}), \\
C_{333} &= 2 \tau_{OH} \tau_{H02}, \\
C_{334} &= 4 \tau_{H02} (4 \tau_{H2} + \tau_H + 3 \tau_{H20}), \\
C_{335} &= 4 \tau_{OH} \tau_{H02}, \\
C_{336} &= -2 \tau_{OH} (4 \tau_{H2} + \tau_H + 2 \tau_{H20}), \\
C_{344} &= -2 \tau_{H02} (4 \tau_{O2} + \tau_0 - 3 \tau_{H20}), \\
C_{345} &= 2 \tau_{OH} \tau_{H02}, \\
C_{346} &= 2 \tau_{OH} (4 \tau_{O2} + \tau_0 - \tau_{H20}), \\
C_{355} &= 4 \tau_{H02} (4 \tau_{O2} + 4 \tau_{H2} + \tau_0 + \tau_H), \\
C_{356} &= 2 ((4 \tau_{O2} + \tau_0 + \tau_{H20})(4 \tau_{H2} + \tau_H + 4 \tau_{H20}) - 4 \tau_{H20}^2), \\
C_{366} &= 2 \tau_{OH} (8 \tau_{O2} + 4 \tau_{H2} + 2 \tau_0 + \tau_H), \\
C_{411} &= -24 \tau_{H20} \tau_{H02}, \\
C_{412} &= 0, \\
C_{413} &= -12 \tau_{H20} \tau_{H02}, \\
C_{414} &= 12 \tau_{H20} \tau_{H02}, \\
C_{415} &= 4 \tau_{H02} (8 \tau_{H2} + 2 \tau_H + \tau_{OH}), \\
C_{416} &= 4 \tau_{H20} (4 \tau_{H2} + \tau_H - \tau_{OH}), \\
C_{422} &= 12 \tau_{H20} \tau_{H02}, \\
C_{423} &= 0, \\
C_{424} &= 12 \tau_{H20} \tau_{H02},
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
C_{425} &= -4 \tau_{HO2} (4 \tau_{O2} + \tau_O - \tau_{OH}) , \\
C_{426} &= -4 \tau_{H2O} (8 \tau_{O2} + 2 \tau_O + \tau_{OH}) , \\
C_{433} &= -6 \tau_{H2O} \tau_{HO2} , \\
C_{434} &= 6 \tau_{H2O} \tau_{HO2} , \\
C_{435} &= 2 \tau_{HO2} (8 \tau_{H2} + 2 \tau_H + \tau_{OH}) , \\
C_{436} &= 2 \tau_{H2O} (4 \tau_{H2} + \tau_H - \tau_{OH}) , \\
C_{444} &= 6 \tau_{H2O} \tau_{HO2} , \\
C_{445} &= -2 \tau_{HO2} (4 \tau_{O2} + \tau_O - \tau_{OH}) , \\
C_{446} &= -2 \tau_{H2O} (8 \tau_{O2} + 2 \tau_O + \tau_{OH}) , \\
C_{455} &= 2 \tau_{HO2} (4 \tau_{O2} + 8 \tau_{H2} + \tau_O + 2 \tau_H) , \\
C_{456} &= 2 \tau_{H2O} (8 \tau_{O2} + 4 \tau_{H2} + 2 \tau_O + \tau_H) , \\
C_{466} &= 2 ((4 \tau_{O2} + \tau_O + \tau_{OH})(4 \tau_{H2} + \tau_H + \tau_{OH}) - \tau_{OH}^2) , \\
D_{111} &= 16 \tau_O \tau_{H2O} , \\
D_{112} &= -4 \tau_{H2O} (4 \tau_{H2} + \tau_H - \tau_{OH} - 3 \tau_{HO2}) , \\
D_{113} &= 8 \tau_O \tau_{H2O} , \\
D_{114} &= -8 \tau_O \tau_{H2O} , \\
D_{115} &= -4 \tau_O (4 \tau_{H2} + \tau_H + \tau_{OH} + \tau_{HO2}) , \\
D_{116} &= -8 \tau_O \tau_{H2O} , \\
D_{122} &= 4 \tau_{H2O} (8 \tau_{O2} + \tau_{OH} + 6 \tau_{HO2}) , \\
D_{123} &= 0 , \\
D_{124} &= -8 \tau_O \tau_{H2O} , \\
D_{125} &= -4 \tau_O (\tau_{OH} + 2 \tau_{HO2}) , \\
D_{126} &= -16 \tau_O \tau_{H2O} , \\
D_{133} &= -2 \tau_{H2O} (8 \tau_{O2} + \tau_{OH} + 6 \tau_{HO2}) , \\
D_{134} &= 2 \tau_{H2O} (8 \tau_{O2} + 4 \tau_{H2} + \tau_H + 3 \tau_{HO2}) , \\
D_{135} &= 2 ((4 \tau_{O2} + \tau_{OH} + 4 \tau_{HO2})(4 \tau_{H2} + \tau_H - \tau_{HO2}) \\
&\quad + (4 \tau_{O2} + 2 \tau_{HO2})(\tau_{OH} + 2 \tau_{HO2})) , \\
D_{136} &= 2 \tau_{H2O} (8 \tau_{O2} + 8 \tau_{H2} + 2 \tau_H - \tau_{OH}) , \\
D_{144} &= -4 \tau_O \tau_{H2O} , \\
D_{145} &= -2 \tau_O (\tau_{OH} + 2 \tau_{HO2}) , \\
D_{146} &= -8 \tau_O \tau_{H2O} , \\
D_{155} &= -2 \tau_O (4 \tau_{H2} + \tau_H - \tau_{HO2}) , \\
D_{156} &= 4 \tau_O \tau_{H2O} , \\
D_{166} &= 2 \tau_O (8 \tau_{H2} + 2 \tau_H + \tau_{OH}) , \\
D_{211} &= 8 \tau_H \tau_{H2O} , \\
D_{212} &= 0 , \\
D_{213} &= -4 \tau_{H2O} (4 \tau_{H2} - \tau_{OH} - 3 \tau_{HO2}) , \\
D_{214} &= -4 \tau_H \tau_{H2O} , \\
D_{215} &= -4 \tau_H (\tau_{OH} + 2 \tau_{HO2}) , \\
D_{216} &= -4 \tau_H \tau_{H2O} , \\
D_{222} &= -4 \tau_H \tau_{H2O} , \\
D_{223} &= 4 \tau_{H2O} (8 \tau_{O2} + 2 \tau_O + \tau_{OH} + 6 \tau_{HO2}) , \\
D_{224} &= -4 \tau_H \tau_{H2O} , \\
D_{225} &= -4 \tau_H (4 \tau_{O2} + \tau_O + \tau_{OH} + 4 \tau_{HO2}) , \\
D_{226} &= -8 \tau_H \tau_{H2O} , \\
D_{233} &= -2 \tau_{H2O} (4 \tau_{H2} - \tau_{OH} - 3 \tau_{HO2}) , \\
D_{234} &= -2 \tau_H \tau_{H2O} , \\
D_{235} &= -2 \tau_H (\tau_{OH} + 2 \tau_{HO2}) , \\
D_{236} &= -2 \tau_H \tau_{HO2} , \\
D_{244} &= 2 \tau_{H2O} (8 \tau_{O2} + 4 \tau_{H2} + 2 \tau_O + 3 \tau_{HO2}) , \\
D_{245} &= 2 ((4 \tau_{O2} + \tau_O + 2 \tau_{HO2})(4 \tau_{H2} + \tau_{OH} + \tau_{HO2}) \\
&\quad + (4 \tau_{H2} - \tau_{HO2})(\tau_{OH} + 2 \tau_{HO2})) , \\
D_{246} &= 2 \tau_{H2O} (8 \tau_{O2} + 8 \tau_{H2} + 2 \tau_O - \tau_{OH}) , \\
D_{255} &= 2 \tau_H (4 \tau_{O2} + \tau_O + 2 \tau_{HO2}) , \\
D_{256} &= 2 \tau_H \tau_{H2O} , \\
D_{266} &= -2 \tau_H (4 \tau_{O2} + \tau_O - \tau_{OH}) , \\
D_{311} &= 8 \tau_{OH} \tau_{H2O} , \\
D_{312} &= 0 , \\
D_{313} &= 4 \tau_{OH} \tau_{H2O} , \\
D_{314} &= -4 \tau_{H2O} (4 \tau_{H2} + \tau_H - 3 \tau_{HO2}) , \\
D_{315} &= -4 \tau_{OH} (4 \tau_{H2} + \tau_H - \tau_{HO2}) , \\
D_{316} &= -4 \tau_{OH} \tau_{H2O} , \\
D_{322} &= -4 \tau_{OH} \tau_{H2O} , \\
D_{323} &= 0 , \\
D_{324} &= 8 \tau_{H2O} (4 \tau_{O2} + \tau_O + 3 \tau_{HO2}) , \\
D_{325} &= 4 \tau_{OH} (4 \tau_{O2} + \tau_O + 2 \tau_{HO2}) , \\
D_{326} &= -8 \tau_{OH} \tau_{H2O} , \\
D_{333} &= 2 \tau_{OH} \tau_{H2O} , \\
D_{334} &= -2 \tau_{H2O} (4 \tau_{H2} + \tau_H - 3 \tau_{HO2}) , \\
D_{335} &= -2 \tau_{OH} (4 \tau_{H2} + \tau_H - \tau_{HO2}) , \\
D_{336} &= -2 \tau_{OH} \tau_{H2O} , \\
D_{344} &= 4 \tau_{H2O} (4 \tau_{O2} + \tau_O + 3 \tau_{HO2}) , \\
D_{345} &= 2 \tau_{OH} (4 \tau_{O2} + \tau_O + 2 \tau_{HO2}) , \\
D_{346} &= -4 \tau_{OH} \tau_{H2O} ,
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
D_{355} &= 2 \left((\gamma_{O2} + \gamma_O) (\gamma_{H2} + \gamma_H + \gamma_{HO2}) \right. \\
&\quad \left. + 4 \gamma_{HO2} (\gamma_{H2} + \gamma_H) \right), \\
D_{356} &= 4 \gamma_{H2O} (\gamma_{O2} + 4 \gamma_{H2} + \gamma_O + \gamma_H), \\
D_{366} &= 2 \gamma_{OH} (\gamma_{O2} + 8 \gamma_{H2} + \gamma_O + 2 \gamma_H), \\
E_{111} &= 8 \gamma_O \gamma_H, \\
E_{112} &= 4 \gamma_H (\gamma_{OH} + 2 \gamma_{H2O} + 2 \gamma_{HO2}), \\
E_{113} &= -4 \gamma_O (\gamma_{H2} + \gamma_{OH} + 4 \gamma_{H2O} + \gamma_{HO2}), \\
E_{114} &= -4 \gamma_O \gamma_H, \\
E_{115} &= 8 \gamma_O \gamma_H, \\
E_{116} &= -4 \gamma_O \gamma_H, \\
E_{122} &= 4 \gamma_H (\gamma_{O2} + \gamma_{OH} + \gamma_{H2O} + 4 \gamma_{HO2}), \\
E_{123} &= -4 \gamma_O (\gamma_{OH} + 2 \gamma_{H2O} + 2 \gamma_{HO2}), \\
E_{124} &= -4 \gamma_O \gamma_H, \\
E_{125} &= 4 \gamma_O \gamma_H, \\
E_{126} &= -8 \gamma_O \gamma_H, \\
E_{133} &= 2 \left((\gamma_{O2} - \gamma_{H2O} + 2 \gamma_{HO2}) (8 \gamma_{H2} + \gamma_{OH} + 6 \gamma_{H2O}) \right. \\
&\quad \left. + (-4 \gamma_{O2} + \gamma_{OH} + 3 \gamma_{H2O}) (4 \gamma_{H2} + 2 \gamma_{H2O} - \gamma_{HO2}) \right), \\
E_{134} &= 2 \gamma_H (\gamma_{O2} - \gamma_{H2O} + 2 \gamma_{HO2}), \\
E_{135} &= -2 \gamma_H (8 \gamma_{O2} + \gamma_{OH} + 6 \gamma_{HO2}), \\
E_{136} &= -2 \gamma_H (-4 \gamma_{O2} + \gamma_{OH} + 3 \gamma_{H2O}), \\
E_{144} &= 2 \gamma_O (4 \gamma_{H2} + 2 \gamma_{H2O} - \gamma_{HO2}), \\
E_{145} &= 2 \gamma_O (-4 \gamma_{H2} + \gamma_{OH} + 3 \gamma_{HO2}), \\
E_{146} &= 2 \gamma_O (-4 \gamma_{H2} + \gamma_{OH} + 3 \gamma_{H2O}), \\
E_{155} &= 2 \gamma_O \gamma_H, \\
E_{156} &= 2 \gamma_O \gamma_H, \\
E_{166} &= -6 \gamma_O \gamma_H, \\
E_{211} &= -8 \gamma_H \gamma_{OH}, \\
E_{212} &= 0, \\
E_{213} &= 4 \gamma_{OH} (4 \gamma_{H2} + 2 \gamma_{H2O} - \gamma_{HO2}), \\
E_{214} &= -8 \gamma_H (\gamma_{H2O} + \gamma_{HO2}), \\
E_{215} &= -8 \gamma_H \gamma_{OH}, \\
E_{216} &= -4 \gamma_H \gamma_{OH}, \\
E_{222} &= 4 \gamma_H \gamma_{OH}, \\
E_{223} &= -4 \gamma_{OH} (4 \gamma_{O2} + \gamma_O - \gamma_{H2O} + 2 \gamma_{HO2}), \\
E_{224} &= -4 \gamma_H (4 \gamma_{O2} + \gamma_O + \gamma_{H2O} + 4 \gamma_{HO2}), \\
E_{225} &= -4 \gamma_H \gamma_{OH}, \\
E_{226} &= 8 \gamma_H \gamma_{OH}, \\
E_{233} &= 2 \gamma_{OH} (4 \gamma_{H2} + 2 \gamma_{H2O} - \gamma_{HO2}), \\
E_{234} &= -4 \gamma_H (\gamma_{H2O} + \gamma_{HO2}), \\
E_{235} &= -4 \gamma_H \gamma_{OH}, \\
E_{236} &= 2 \gamma_H \gamma_{OH}, \\
E_{244} &= 2 \left((\gamma_{O2} + \gamma_O - 3 \gamma_{H2O}) (4 \gamma_{H2} + 4 \gamma_{H2O} + \gamma_{HO2}) \right. \\
&\quad \left. + 4 (4 \gamma_{H2} + 3 \gamma_{H2O}) (\gamma_{H2O} + \gamma_{HO2}) \right), \\
E_{245} &= 2 \gamma_{OH} (8 \gamma_{O2} + 4 \gamma_{H2} + 2 \gamma_O + 3 \gamma_{HO2}), \\
E_{246} &= -2 \gamma_{OH} (4 \gamma_{O2} + 8 \gamma_{H2} + \gamma_O + 3 \gamma_{H2O}), \\
E_{255} &= 4 \gamma_H (4 \gamma_{O2} + \gamma_O + 3 \gamma_{H2O}), \\
E_{256} &= -2 \gamma_H (4 \gamma_{O2} + \gamma_O - 3 \gamma_{H2O}), \\
E_{266} &= 6 \gamma_H \gamma_{OH}, \\
F_{211} &= -8 \gamma_O \gamma_{OH}, \\
F_{212} &= 4 \gamma_{OH} (4 \gamma_{H2} + \gamma_H + \gamma_{H2O} - \gamma_{HO2}), \\
F_{213} &= -4 \gamma_O \gamma_{OH}, \\
F_{214} &= -4 \gamma_O (4 \gamma_{H2} + \gamma_H + 4 \gamma_{H2O} + \gamma_{HO2}), \\
F_{215} &= -8 \gamma_O \gamma_{OH}, \\
F_{216} &= 4 \gamma_O \gamma_{OH}, \\
F_{222} &= -4 \gamma_{OH} (4 \gamma_{O2} - \gamma_{H2O} + 2 \gamma_{HO2}), \\
F_{223} &= 0, \\
F_{224} &= -8 \gamma_O (\gamma_{H2O} + \gamma_{HO2}), \\
F_{225} &= -4 \gamma_O \gamma_{OH}, \\
F_{226} &= 8 \gamma_O \gamma_{OH}, \\
F_{233} &= 2 \gamma_{OH} (4 \gamma_{O2} - \gamma_{H2O} + 2 \gamma_{HO2}), \\
F_{234} &= 2 \left((\gamma_{O2} + \gamma_{H2O} + 4 \gamma_{HO2}) (4 \gamma_{H2} + \gamma_H - 3 \gamma_{HO2}) \right. \\
&\quad \left. + 4 (4 \gamma_{O2} + 3 \gamma_{HO2}) (\gamma_{H2O} + \gamma_{HO2}) \right), \\
F_{235} &= 2 \gamma_{OH} (8 \gamma_{O2} + 4 \gamma_{H2} + \gamma_H + 3 \gamma_{HO2}), \\
F_{236} &= -2 \gamma_{OH} (4 \gamma_{O2} + 8 \gamma_{H2} + 2 \gamma_H + 3 \gamma_{H2O}), \\
F_{244} &= -4 \gamma_O (\gamma_{H2O} + \gamma_{HO2}), \\
F_{245} &= -2 \gamma_O \gamma_{OH}, \\
F_{246} &= 4 \gamma_O \gamma_{OH}, \\
F_{255} &= -2 \gamma_O (4 \gamma_{H2} + \gamma_H - 3 \gamma_{HO2}), \\
F_{256} &= 4 \gamma_O (4 \gamma_{H2} + \gamma_H + 3 \gamma_{H2O}), \\
F_{266} &= 6 \gamma_O \gamma_{OH}.
\end{aligned}$$

付記(3) ノズル入口流速

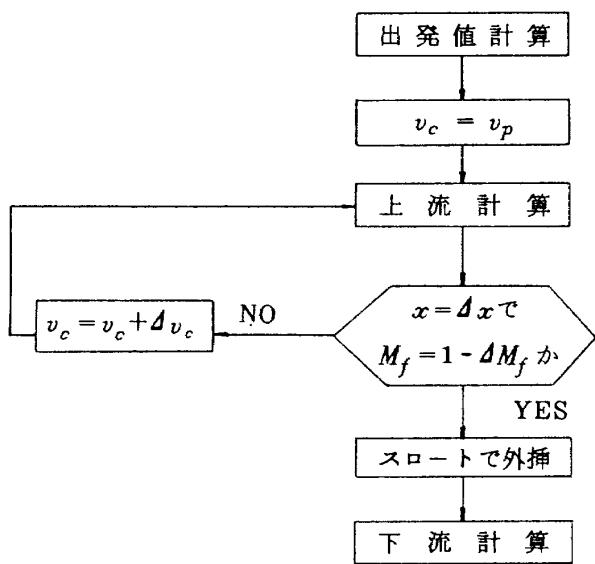
出発値をあたえると $x = x_c$ からスロートまで計算が進むが、式(13)の v_c が適当であればスロートの直後で $M_f = 1$ となる解が得られる。 v_c は前以てわからないので、最初完全凍結流を仮定して $v_c = v_p$

$$v_p = \left(\frac{2}{r_f + 1} \right)^{\frac{1}{2} + \frac{1}{r_f + 1}} a_c \frac{A_t}{A_c},$$

$$a_c = (r_f p_c / \rho_c)^{1/2},$$

$$r_f = \frac{3.5(r_{O_2,C} + r_{H_2,C} + r_{OH,C}) + 2.5(r_{O,C} + r_{H,C}) + 4(r_{H_2O,C} + r_{BO_2,C})}{2.5(r_{O_2,C} + r_{H_2,C} + r_{OH,C}) + 1.5(r_{O,C} + r_{H,C}) + 3(r_{H_2O,C} + r_{BO_2,C})}$$

をとり、下図のような計算手順で反復計算により v_c をわずかずつ増加させて正しい値を決定する。



上記の計算で Δx , Δv_c , ΔM_f は完全凍結流から類推される適当に小さな値、たとえば $\Delta x = -0.0001\text{cm}$, $\Delta v_c = 0.001v_p$, $\Delta M_f = 0.03$ 等とする。計算手順は文献13で水素酸素混合比と流量をあたえて p_c (の分布)を決

定する手順と同様であるが、現在の場合は混合比と p_c をあたえたので、流量したがって v_c が決定される。

水素と酸素の初期混合モル比を $m : 1$ とし

$$v_c = f \cdot v_p$$

とおくと $f \gtrsim 1.0$ であるが、燃焼室出口での断面積比 A_c/A_t があたえられれば、準一次元的計算ではノズルの形にあまり関係なく、混合比 m と p_c のみの関数となる。例えば化学平衡流の場合

$$f = A(m) \log p_c + B(m)$$

のような経験式であらわすことができる。スロート上流の断面積分布が式(32)であたえられ、 $A_c/A_t = 2.25$ である場合に上式の $A(m)$, $B(m)$ は

$$A(m) = (0.54918 + 2.3464m - 0.049925m^2) \times 10^{-3},$$

$$m \leq 4$$

$$= (8.7535 + 1.01098m - 0.22882m^2) \times 10^{-3},$$

$$m > 4$$

$$B(m) = 0.97653 - 0.010534m + 0.0024463m^2, m \leq 4$$

$$= 0.91069 + 0.018771m - 0.0007654m^2, m > 4$$

となる。予備的計算によりこのように v_c を決定しておけば、以後任意の混合比と燃焼圧力の場合につき計算することができる。

文 献

- 1) V.J.Sarli, W.G.Burwell, and T.F.Zupnik; Investigation of Nonequilibrium Flow Effects in High Expansion Rate Nozzles. NASA CR-54221(1964)
- W.G.Burwell, V.J.Sarli, and T.F.Zupnik; Applicability of Sudden-Freezing Criteria in Analysis of Chemically Complex Rocket Nozzle Expansions. AGARD CP.12 (1967) Vol. 2, 705-759
- 2) V.Quan ; Analytic Predictions of Delivered Specific Impulse. NASA CR-1123 (1968)
- 3) V.Quan, J.E.Melde, J.R.Kliegel, G.R. Nickerson, and H.M.Frey ; Kinetic Performance of Barrier-Cooled Rocket Nozzles. J.Spacecraft Vol. 5, No.10(1968)1137-1142
- 4) J.S.Vamos and J.D.Anderson, Jr ; Time-Dependent Analysis of Nonequilibrium Nozzle Flows with Complex Chemistry. AIAA Paper No.72-684(1972)
- 5) J.D.Hoffman ; A General Method for Determining Optimum Thrust Nozzle Contours for Chemically Reacting Gas Flows. AIAA Journal Vol. 5, No4 (1967)670-676
- 6) A.A.Taylor and J.D.Hoffman ; Design of Maximum Thrust Nozzles for Nonequilibrium, Chemically Reacting Flow. AIAA Paper No.73-1243(1973)
- 7) 松崎利一, 平林則明; 単原子気体および2原子分子気体の非平衡ノズル流 航技研報告 TR-397(1974)
- 8) W.C.Gardiner, Jr., K.Morinaga, D.L.Ripley, and T.Takeyama ; Transition from Branched-Chain Kinetics to Partial Equilibrium in the Combustion of Lean

- Hydrogen-Oxygen Mixtures in Shock Waves. J.Chem.Phys.Vol.48, No4 (1968)1665-1673
- 9) L.B.Anderson and J.W.Meyer ; High-Altitude Jet Plume Chemistry. Acta Astronautica Vol.1 No.3-4(1974)541-555
- 10) W.G.Browne, D.R.White, and G.R.Smookler ; A Study of the Chemical Kinetics of Shock Heated H₂/CO/O₂ Mixtures. General Electric TIS 68-C-236(1968)
- 11) D.L.Baulch, D.D.Drysdale, D.G.Horne, and A.C.Lloyd ; Evaluated Kinetic Data for High Temperature Reactions, Vol.I. Homogeneous Gas Phase Reactions of the H₂-O₂ System(1972) Butterworth, London
- 12) G.B.Skinner and G.H.Ringrose ; Ignition Delays of a Hydrogen-Oxygen-Argon Mixture at Relatively Low Temperatures. J.Chem.Phys.Vol.42, No.6 (1965)2190-2192
- 13) 八柳信之, 鈴木昭夫, 五味広美, 坂本博; 液体酸素・ガス水素ロケットの燃焼状態の計算 航技研報告 TR-472(1976)
- 14) K.N.C.Bray ; Chemical and Vibrational Nonequilibrium in Nozzle Flows. Nonequilibrium Flow, Part II, edited by P.P. Wegener(1970) Martin Dekker Inc., New York, pp.59-157
- 15) J.D.Lee ; Axisymmetric Nozzles for Hypersonic Flows, Ohio State Univ.Rep. No.TN(ALOSU)459-1(1959)
- 16) S.S.Penner ; Introduction to the Study of Chemical Reactions in Flow Systems (1955) Butterworth, London, pp.34-42
- 17) J.O.Hirschfelder, C.F.Curtiss, and R.B. Bird ; Molecular Theory of Gases and Liquids(1954) John Wiley and Sons, New York, p.624

航空宇宙技術研究所報告 508号

昭和 52 年 8 月 発行

発 行 所 航 空 宇 宙 技 術 研 究 所
東 京 都 調 布 市 深 大 寺 町 1880
電 話 武 蔵 野 三 鷹 (0422)47-5911(大 代 表) 182

印 刷 所 株 式 会 社 東 京 プ レ ス
東 京 都 板 橋 区 桜 川 2~27~12
