

2022（令和4）年度 修士学位論文

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

A Proposal for Improving the Accuracy of
Hypersonic Flow Field Calculations
Using Spectral Fitting Approach

2023年3月3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

1250023 安部 翔太

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 衝撃波背後流れ場の数値計算	2
1.1.2 非平衡励起計算と反応速度定数	2
1.2 研究目的	3

第 2 章

数値計算法	5
2.1 理論輻射スペクトル計算法	5
2.1.1 束縛－束縛遷移	5
2.1.2 束縛－自由遷移	10
2.1.3 自由－自由遷移	11
2.1.4 輻射輸送方程式	12
2.1.5 輻射強度の算出	12
2.2 スペクトルフィッティング法	13

第 3 章

計算条件	19
3.1 計算対象	19
3.2 計算条件	22

第 4 章

反応速度定数の高精度化手法の提案	24
4.1.1 SCIROCCO スペクトルの同定	24
4.1.2 CFD による予測値を用いた計算スペクトルと実験スペクトルの比較	25
4.1.3 全密度と各温度でのスペクトルフィッティング	26
4.1.4 NO- γ の A2 Σ^+ , $v=0$ 密度でのフィッティング	28
4.1.5 NO- δ の C2 Π , $v=0$ 密度でのフィッティング	29
4.1.6 NO- δ の A 係数でのフィッティング	30
4.2 反応速度定数の高精度化への展望	33

第 5 章

結言	34
付録 A	35
レンズで集光する検査気体の体積の導出	35
参考文献	37
謝辞	39

第1章

緒言

1.1 研究背景

近年、JAXAのはやぶさ2（図1.1）やNASAのOSIRIS-REx [2]のように太陽系の起源や生命誕生の原材料の解明を目標とした小惑星へのサンプルリターンが行われている。はやぶさ2は2枚の太陽光パネルから電力を供給し、アンテナを用いて地球との通信を行い、約3億キロ離れた小惑星リュウグウへ向かった。到着後、タッチダウンを行いサンプラーホーンから放たれる弾丸により砕かれたリュウグウ表面のサンプルを採取した。長い旅路の末、探査により入手したサンプルをカプセルに密閉して地球大気圏に突入させるが、この時カプセルが探査機から分離される速度は非常に高速になる。減速することができないため秒速11kmを超える超軌道速度となる。

このような高速で大気圏に突入する際、カプセル前方には強い衝撃波が形成され、衝撃波背後の気体は非常に高温となり、カプセルは過酷な加熱環境に曝される。はやぶさカプセルを例にとると、淀み点総加熱率は $15\text{M}/\text{m}^2$ 以上 [3]となった。カプセルの熱防御システム(TPS: Thermal Protection System)にはアブレーション冷却法[4]が用いられる。カプセル突入面をアブレータと呼ばれる耐熱材で覆い、アブレータに含まれる樹脂が気化する際の吸熱効果と熱分解ガス層による保護、そして炭素層による耐熱、樹脂の熱伝導性の低さによりカプセル内部の温度上昇を防ぐ。打ち上げ前に遡ると、ロケットのペイロード増加は打ち上げコストに直結し、厳しい重量制限が設けられるため、みだりにアブレータを搭載することはできない。例えば、多目的有人宇宙船オリオンのカタログスペックをもとに概算すると、熱防御材の重量割合は全体の15%程度にも達する。もし仮により正確な流動解析が実現することで加熱率の予測誤差が5%減少したとするとおおよそ50kgのペイロード増量に相当する。

よって、TPSの設計の際に安全性とコスト低減の両立を図るには、加熱量のより正確な予測を行う必要があるため、再突入環境を模擬できる衝撃風洞やアーク加熱風洞による計測試験や、コンピュータを用いた数値計算による精度の高い流れ場の再現が求められる。

1.1.1 衝撃波背後流れ場の数値計算

大気圏突入時の衝撃波背後の流れ場は衝撃波加熱により、気体分子の内部エネルギーが増加し並進・回転・振動運動の各運動モードにエネルギー差が生じることで熱非平衡性が現れる。さらに分子の解離や原子の電離が起こり、化学種間の化学反応が活発化することで化学非平衡性が見られる。同時に、各化学種の励起状態間の遷移により輻射が起こる。特に、大気密度の低い80~100km程度の高高度下では、流れの代表時間と分子間の衝突、輻射の代表時間が同程度となるため、励起状態分布の非平衡性を考慮する必要がある。現在、大気圏突入時の流れ場の数値計算においては、1989年に提案されたParkの2温度モデル[5]が広く用いられている。しかし、各化学種の励起状態分布の計算は膨大な状態数を扱うことになり、当時の計算機では対応できなかった。Parkの2温度モデルは並進・回転温度と振動・電子励起温度から各化学種間の化学反応を計算することで化学組成の非平衡性を考慮しているが、分子間衝突や輻射による化学種ごとの励起状態分布の非平衡性は考慮されていない。しかし近年、計算機の能力の向上に伴い、励起状態分布計算の実装が現実的となった。

1.1.2 非平衡励起計算と反応速度定数

Parkの2温度モデルに代わる、励起状態分布の非平衡性を考慮した新たな非平衡モデルの構築が求められている。励起状態は振動、回転、電子励起状態で表すことができる。遷移や量子状態はNISTから得ることができる。例えば窒素原子であれば、電子励起状態のみ定義でき378状態あり、遷移は1028通りとなる。また窒素分子であれば電子励起状態で10状態、振動励起状態で121状態存在し、電子励起遷移は8、振動遷移は1621通りある。これらの遷移による励起状態分布は、各化学種の励起状態ごとの占有密度に対するレート方程式を解くことで計算できるが、レート方程式中に使用される反応速度定数には、実験適合パラメータが含まれることが多い。解離や電離などの化学反応における反応速度定数は数多くの実験が行われており、精度の高い信用できる値が得られているが、高励起遷移に関する反応速度定数は実験計測が困難で、現状では水素原子様の値[6]を近似値として参照している場合も多く、精度が低い。

そこで、反応速度定数の高精度化するために、分子運動を直接数値的に再現し、モンテ

カルロ的に分子間衝突を膨大な回数繰り返すことで、解離や再結合速度定数などを理論的に算出する準古典軌道法 (QCT; Quasi-classical trajectory) などの方法がとられている。A. J. Fangman, D. A. AndrienkoはQCTを用いて、 N_2 , O_2 , NO , N , O での励起状態ごとの空気熱化学モデルを発表した[7]。また、V. T. Baluckram, D. A. AndrienkoによってQCTと三重項ポテンシャルエネルギー面 (PES; Potential Energy Surface) による O_2 - O_2 における速度定数データベースが提案された[8]。E. Geistfeld, T. E. SchwartzentruberはQCTによって O の再結合反応速度定数を発表している[9]。

一方で、アーク風洞 (図1.2) や誘導プラズマ加熱風洞を用いて分光計測を行うことで取得できる実験スペクトルに対して、数値計算で算出した理論スペクトルを比較し、2つのスペクトル間で一致しなかった差分を反応速度定数の不整合と考えて修正を行うこともできる。スペクトル形状は気体の温度や組成に強く依存しているため観測された線スペクトルの波長から、どの励起状態からどの励起状態に遷移したかを特定することができる。また、そのスペクトルの強度から上準位側の占有密度を求めることも可能である。これらのことから、スペクトルフィッティングを用いて実験スペクトルと数値スペクトルが一致する時、流れ場中の励起分布を含めた組成及び反応速度定数を決定できる。スペクトルフィッティングの際の設計変数は熱化学非平衡、励起非平衡を考慮し、順を追って変更する必要がある。まず、熱化学非平衡を仮定し、各化学種の密度、温度を設計変数としてフィッティングを行う。この条件で一致しなかった場合、励起非平衡と考え線スペクトルの上準位の励起密度を設計変数としてフィッティングを行う。この条件でも一致しなかった場合、遷移確率であるEinsteinのA係数を設計変数としたフィッティングが必要となる。また、フィッティング手法には、励起遷移の数が膨大であることから多くの設計変数を必要とする上、複数年波長域での誤差も対象となるため多設計変数、多目的関数での最適化が可能なベイズ最適化などの手法の導入が有効であろう。

1.2 研究目的

本研究では、極超音速流れ場計算における反応速度定数の高精度化を行い、次世代の大気圏突入流れの解析手法構築に貢献する。アーク加熱風洞実験から得られた輻射スペクトルに、数値計算で求めたスペクトルをフィッティングすることで流れ場の励起密度、反応速度定数を推定する。また、実験スペクトルを用いた反応速度定数の高精度化への一連の

手法を提案する.

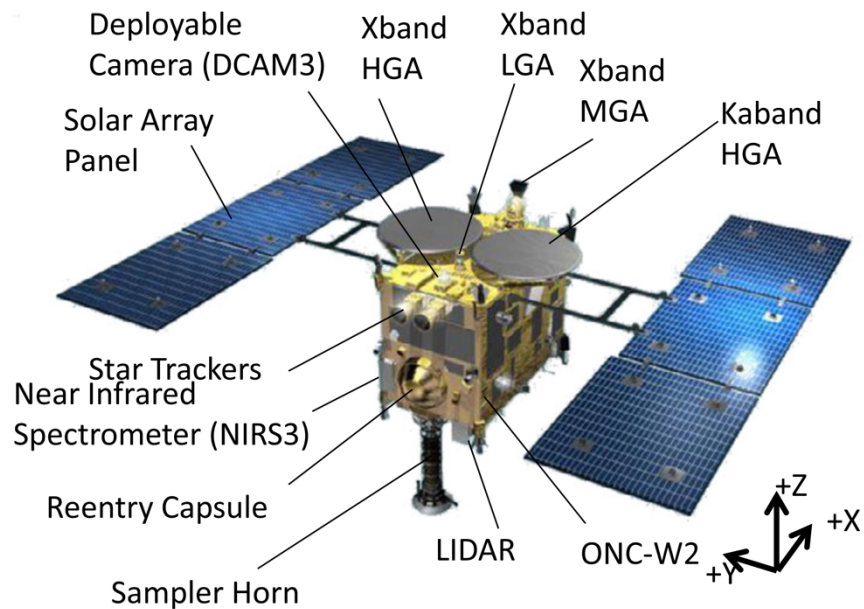


図1.1 はやぶさ 2 及び搭載観測機器 [1]

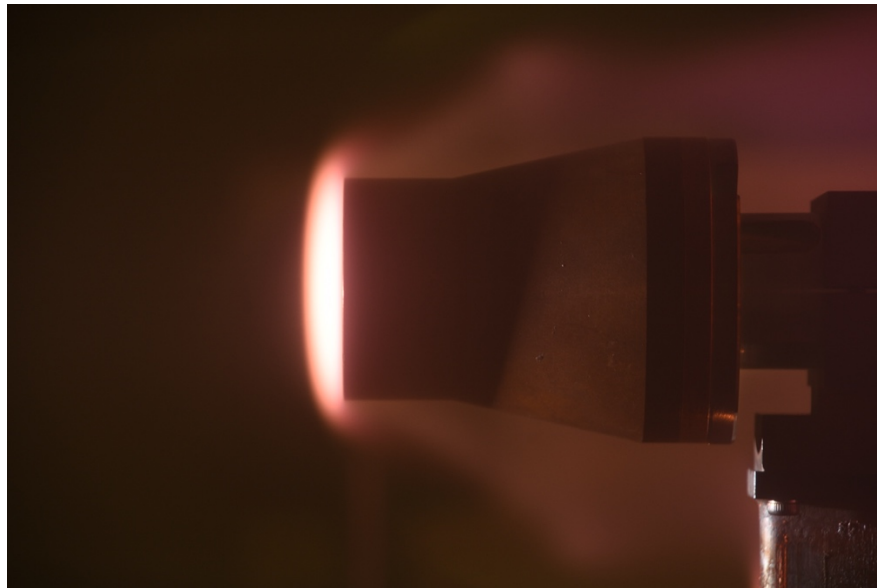


図 1.2 惑星大気突入環境模擬装置での供試体と衝撃波

第2章

数値計算法

本章では，理論スペクトルの計算法とスペクトルフィッティング法について説明する．理論スペクトル計算はLine-by-lineにて行い，輻射遷移は各化学種の束縛-束縛，束縛-自由，自由-自由遷移に分類する．スペクトルフィッティングは実験値と計算値の差を最小化することで行う．

2.1 理論輻射スペクトル計算法

理論輻射スペクトル計算にはLine-by-lineを用いる．実験計測により得られる輻射スペクトルは各化学種の膨大な数の遷移によるスペクトルの重ね合わせとして現れる．そのため数値的に輻射スペクトルを再現するには各遷移の物理現象に基づき，1つ1つのスペクトルを計算する必要がある．計算では各化学種の束縛-束縛，束縛-自由，自由-自由遷移に分類して考慮する．

2.1.1 束縛－束縛遷移

束縛－束縛遷移(Bound-bound transition，以降b-bと表記)は分子のある量子状態から別の量子状態への遷移を指す．とり得る量子状態のエネルギー準位は離散的であるため，遷移の際に線スペクトルを生じる．放射係数，吸収係数は以下の式で表される．

$$\epsilon_{b-b}(\lambda) = n_u \frac{hcA_{ul}}{4\pi\lambda_{ul}} \Phi(\lambda), \quad (2.1)$$

$$\kappa_{b-b}(\lambda) = \frac{h\lambda_{ul}}{c} (n_l B_{lu} - n_u B_{ul}) \Phi(\lambda). \quad (2.2)$$

ここで， n_u ， n_l は各化学種の数密度，添字 u ， l は遷移の上準位，下準位を表す．考慮する

化学種はN, N⁺, O, O⁺, O⁻, N₂, N₂⁺, NO, NO⁺, O₂, O₂⁺, CN, OH, NH とする. h はプランク定数, c は光速, A_{ul} , B_{lu} , B_{ul} はEinsteinのA係数, B係数, λ_{ul} はエネルギー準位差に相当する線中心波長, $\Phi(\lambda)$ は線スペクトルの広がりを示す分布関数を表す. A_{ul} , B_{lu} , λ_{ul} 及び考慮する遷移はNIST[10]記載の値を使用する. 原子種の数密度は局所熱平衡を仮定するとBoltzmann分布に従い, 以下の式で算出できる.

$$n_i = n_t \frac{g_i \exp\left(-\frac{E_i}{kT_e}\right)}{Q(T_e)}, \quad (2.3)$$

$$Q(T_e) = \sum g_i \exp\left(-\frac{E_i}{kT_e}\right). \quad (2.4)$$

ここで n_i , g_i , E_i はそれぞれ i 量子状態の数密度, 縮退度, エネルギー準位, n_t は原子の全数密度, k はボルツマン定数, T_e は電子温度, Q は分配関数を表す. 分子種の数密度も同様に以下の式で求める.

$$n_i = n_t \frac{g_i \exp\left[-\frac{E_e}{kT_e} - \frac{G(v)}{kT_v} - \frac{F(J)}{kT_r}\right]}{Q(T_e, T_v, T_r)}. \quad (2.5)$$

E_e , $G(v)$, $F(J)$ は電子, 振動, 回転エネルギーであり, T_e , T_v , T_r は電子励起, 振動励起, 回転温度である. i 量子状態は, 任意の e 電子励起にある, v 振動励起の r 回転励起状態を指定する. 線スペクトルの広がり以下フォークト分布関数で表す[11][12].

$$\begin{aligned} \Phi(\lambda) = A \left\{ (1-t) \exp(-2.772L^2) + \frac{t}{1+4L^2} \right. \\ \left. + 0.016(1-t)t \left[\exp(-0.4L^{2.25}) - \frac{10}{10+L^2} \right] \right\}. \end{aligned} \quad (2.6)$$

ここで,

$$A = \frac{1}{w_v (1.065 + 0.447t + 0.058t^2)}, \quad (2.7)$$

$$L = \frac{\lambda - \lambda_c}{w_v}, \quad (2.8)$$

$$t = \frac{w_L}{w_V}, \quad (2.9)$$

$$w_V = \frac{w_L}{2} + \sqrt{\left(\frac{w_L}{2}\right)^2 + w_G^2}, \quad (2.10)$$

となる． w_G ， w_L ， w_V はそれぞれガウス型，ローレンツ型，フォークト型での半値全幅を表す．広がり要因は自然(Natural)広がり，ドップラー(Doppler)広がり，圧力(Pressure)広がりについて考慮する．さらに圧力広がりには分子間衝突による広がり，原子においては共鳴(Resonance)広がり，ファンデルワールス(Van der Waals) 広がり，シュタルク (Stark)広がり を考慮する．自然広がり半値全幅は，近似的に，

$$\Delta\lambda_{Natural} = 1.18 \times 10^{-5}, \quad (2.11)$$

とする[13]．ドップラー広がり半値全幅は，

$$\Delta\lambda_{Doppler} = 2(\log 2)^{\frac{1}{2}} 1.18 \times 10^{-5}, \quad (2.12)$$

とする．分子の圧力広がり半値全幅は，

$$\Delta\lambda_{Molecule\ p.} = \frac{\lambda^2}{2\pi c} \left[\gamma + 6.74 \times 10^{10} \sigma_1 \sigma_2 \sqrt{\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \frac{p}{\sqrt{T}}} \right], \quad (2.13)$$

とする[13]． γ は圧力が極端に低い場合以外は無視できるため本研究では0とする． σ_1 ， σ_2 と M_1 ， M_2 はそれぞれ衝突可能性のある化学種の光学衝突半径，分子量を表す． p ， T は圧力，温度を表す．原子の圧力広がりである共鳴広がり，ファンデルワールス広がり，シュタルク広がりを以下に示す．共鳴広がり半値全幅はGriem[14]により，

$$\Delta\lambda_{Resonance} = \frac{3e^2}{16\pi^3 \epsilon_0 c^2 m_e} \lambda^2 \lambda_r f_r n_{ground}, \quad (2.14)$$

とする． λ_r ， f_r は共鳴遷移の中心波長と吸収振動子強度， n_{ground} は基底状態の数密度を表す．ファンデルワールス広がりには励起原子が励起状態の原子による干渉を受けることで生じる広がり，その半値全幅はGriem[14]，Konjevic[15]により，

$$\Delta\lambda_{Van\ del\ Waals} = 8.18 \times 10^{-12} \lambda^2 (\alpha e R^2)^{\frac{2}{5}} \left(\frac{T}{\mu}\right)^{\frac{3}{10}} N_a, \quad (2.15)$$

とする．ここで，

$$\alpha = \frac{9}{2} a_0^3 \left(\frac{3R_y}{4E_{EXC}} \right)^2, \quad (2.16)$$

$$R^2 = R_l^2 - R_u^2, \quad (2.17)$$

$$R_j^2 = \frac{n_j^2}{2 \left[5n_j^2 + 1 - 3 \frac{3l_j}{l_j + 1} \right]} - R_u^2, \quad (2.18)$$

$$\frac{1}{n_j^2} = \frac{I_p - E_j}{R_y}, \quad (2.19)$$

である． a_0 はボーア半径， R_y はリュドベリ数， I_p はイオン化エネルギー， n_j は有効主量子数， l_j は角運動量子数である． E_{EXC} は摂動子，つまり干渉する原子の第一励起準位のエネルギーを表す．この干渉はスペクトル線のシフトも引き起こす．そのシフトは長波長側へ起こり，その距離は，

$$d_{Van\ del\ Waals} = \frac{2}{3} w_{Van\ del\ Waals}, \quad (2.20)$$

で与えられる．シュタルク広がりには2つの要因に分けられ，一つはプラズマ中の電場により縮退が解けることにより生じる．電場中の原子の縮退が解けることで本来と異なる波長の電磁波を放出する．このことを静的シュタルク効果と呼ぶ．静的シュタルク効果による縮退の分離は電場が強くなるほど大きくなる．プラズマは全体として中性であり電場は生じないが，充分小さな領域で見れば電子やイオンの存在により様々な強さ，方向に電場が生じている．そのため電子密度が高くなると縮退が頻繁に生じ，電磁波を放出するためスペクトルが広がって見える．2つ目は遷移中に電子と多数回の衝突を受けることにより，原子波導関数が乱されることで広がりが生じる．このことを動的シュタルク効果と呼ぶ．シュ

タルク効果による線スペクトルの半値全幅とシフトはGriem[14]により評価されており，中性原子においては，

$$\Delta\lambda_{Stark} = 2w_0 \left[1 + 1.75\alpha \left(1 - 0.68 \times 10^5 n_e^{\frac{1}{6}} T^{-\frac{1}{2}} \right) \right] \left(\frac{n_e}{10^{22}} \right), \quad (2.21)$$

$$d_{Stark} = \left[\frac{d_0}{w_0} \pm 2 \times 10^{-10} \alpha \left(1 - 0.68 \times 10^5 n_e^{\frac{1}{6}} T^{-\frac{1}{2}} \right) n_e^{\frac{1}{4}} \right] w_0 \left(\frac{n_e}{10^{22}} \right), \quad (2.22)$$

であり，一価の正イオンでは，

$$\Delta\lambda_{Stark} = 2w_0 \left[1 + 1.75\alpha \left(1 - 1.1 \times 10^5 n_e^{\frac{1}{6}} T^{-\frac{1}{2}} \right) \right] \left(\frac{n_e}{10^{22}} \right), \quad (2.23)$$

$$d_{Stark} = \left[\frac{d_0}{w_0} \pm 2 \times 10^{-10} \alpha \left(1 - 1.1 \times 10^5 n_e^{\frac{1}{6}} T^{-\frac{1}{2}} \right) n_e^{\frac{1}{4}} \right] w_0 \left(\frac{n_e}{10^{22}} \right), \quad (2.24)$$

となる． w_0 ， d_0 ， α はシュタルクパラメータ[16]， n_e は電子数密度を表す．それぞれの広がりにはガウス型に関しては原子，分子共通で，

$$w_G = \Delta\lambda_{Doppler}, \quad (2.25)$$

とする．ローレンツ型に関して原子においては，

$$w_L = \Delta\lambda_{Natural} + \Delta\lambda_{Resonance} + \Delta\lambda_{Van\ del\ Waals} + \Delta\lambda_{Stark}, \quad (2.26)$$

とし，分子においては，

$$w_L = \Delta\lambda_{Natural} + \Delta\lambda_{Molecule\ p}. \quad (2.27)$$

とする．

2.1.2 束縛－自由遷移

束縛－自由遷移(Bound-Free transition, 以降b-fと表記) は原子や分子に束縛された電子や原子が電磁波を吸収して電離・解離する遷移を指し, その逆を自由－束縛(Free- Bound transition)と表す. また, 電磁波を吸収して電子を放出する遷移を光電離(photo-ionization), 原子を放出する遷移を光解離(photo-dissociation) と呼ぶ. 一方, 原子と電子が衝突して電子が束縛され, 電磁波が放出される遷移を再結合(recombination) と呼ぶ. 原子では光電離と再結合, 二原子分子では光電離, 光解離と再結合が生じ得る. 光電離, 再結合による放射係数, 吸収係数は以下のように表される[17].

$$\epsilon_{b-f}(\lambda) = \frac{hc}{4\pi\lambda} n_u n_e^{v_e} v_e \left| \frac{dv_e}{d\lambda} \right| \sigma_{ul}(\lambda), \quad (2.28)$$

$$\kappa_{b-f}(\lambda) = n_l \sigma_{lu}(\lambda) - \frac{\lambda^5}{2hc^2} \epsilon(\lambda). \quad (2.29)$$

σ は衝突断面積, v_e は電子の速度, n_u は電離した原子・分子の数密度, $n_e^{v_e}$ は速度 v_e を持つ電子の数密度, λ は波長を表す. 分子運動については平衡とみなして, $n_e^{v_e}$ をMaxwell分布により求める.

$$n_e^{v_e} = n_e 4\pi \left(\frac{m_e}{2\pi k T_e} \right)^{\frac{3}{2}} \exp \left(-\frac{m_e v_e^2}{2k T_e} \right) v_e^2. \quad (2.30)$$

m_e は電子の質量を表す. 分子の速度分布と光子のスペクトル分布は電離エネルギーと関連付けて, エネルギー保存則から,

$$v_e = \sqrt{\frac{2(h\nu - I_p)}{m_e}}, \quad (2.31)$$

となる.

2.1.3 自由－自由遷移

自由－自由遷移(Free-Free transition, 以降f-fと表記)による輻射は自由電子と原子や分子の電場ポテンシャルが干渉し, 自由電子が原子, 分子のクーロン場で曲げられる遷移を指す. 自由電子が運動エネルギーを失うことで電磁波を放出する. f-fの一価の正イオンについての放射係数, 吸収係数は以下のように表される.

$$\epsilon_{f-f}(\lambda) = \frac{2hc^2}{\lambda^5} n_X n_e \sigma_{ff}^{Z-1}(\lambda, T_e) \exp\left(-\frac{hc}{\lambda k T_e}\right), \quad (2.32)$$

$$\kappa(\lambda)_{f-f} = n_X n_e \sigma_{ff}^{Z-1}(\lambda, T_e) \left[1 - \exp\left(-\frac{hc}{\lambda k T_e}\right)\right]. \quad (2.33)$$

ここで, n_X は各分子種, 原子種の数密度, σ_{ff}^{Z-1} は吸収断面積でPeach[17]の論文値より与える. 一方, 中性原子のf-fの放射・吸収係数は,

$$\epsilon(\lambda) = \frac{32\pi^2}{3\sqrt{3}} \frac{Z^2 e^6 n_e n_X \exp\left(-\frac{hc}{\lambda k T_e}\right)}{(4\pi\epsilon_0)^3 e^2 (2\pi m_e)^{\frac{3}{2}} (k T_e)^{\frac{1}{2}} \lambda^2}, \quad (2.34)$$

$$\kappa(\lambda) = \epsilon(\lambda) \frac{\lambda^5}{2hc^2} \left[\exp\left(-\frac{hc}{\lambda k T_e}\right) - 1\right], \quad (2.35)$$

とする. e は電気素量, ϵ_0 は真空の誘電率を表す. Z^2 は有効電荷で,

$$Z^2(\lambda) = a\lambda^b, \quad (2.36)$$

と与える[19]. a , b はTaylor[19]の論文から表2.1.1に示す.

表2.1 中性粒子の有効電荷

Species	a	b
O	4.2102	-0.07
N	4.1102	-0.54
N ₂	2.1102	-0.75

2.1.4 輻射輸送方程式

検査気体の全放射係数と全吸収係数は2.1.1から2.1.3節より

$$\epsilon(\lambda) = \epsilon_{b-b}(\lambda) + \epsilon_{b-f}(\lambda) + \epsilon_{f-f}(\lambda), \quad (2.37)$$

$$\kappa(\lambda) = \kappa_{b-b}(\lambda) + \kappa_{b-f}(\lambda) + \kappa_{f-f}(\lambda), \quad (2.38)$$

となる．ある位置における検査気体から放出された発光は周囲の気体によって吸収され，また同時に放射を受けて空間的に輸送されていく．光の伝播方向を s 軸とすると，発光強度 $I_{cal}[\text{W}/\text{cm}^2 \cdot \text{nm} \cdot \text{str}]$ は次の輻射輸送方程式に従う．

$$\frac{dI_{cal}(\lambda)}{ds} = \epsilon(\lambda) - \kappa(\lambda)I_{cal}(\lambda). \quad (2.39)$$

高温気体の空間分布を解析可能な場合は上式により， $I_{cal}(\lambda)$ を求める．例えば大気圏突入カプセルの輻射加熱率は $I_{cal}(\lambda)$ の波長積分値となる．

2.1.5 輻射強度の算出

輻射輸送方程式(2.39)に関して，吸収係数 $\kappa(\lambda)$ が小さい(光学的に薄い)場合，空間輸送を解く必要がないため放射係数と光の伝播距離 Δs から強度 $I_{cal}(\lambda)$ を求めることができる．分光計測では発光源の光をレンズによって集光して光ファイバーを通すことで取得する．つまりレンズで集光することで発光体のうち注目したい検査気体の光を抽出する．よって伝播距離 Δs は検査気体とレンズ間との距離とする．次に $I_{cal}(\lambda)$ の立体角積分について示す．被写体距離を半径とした球の面積に対して，レンズの面積 S を見込んだ立体角は

$$\frac{S}{4\pi s^2},$$

と表せる．レンズの面積内で $I_{cal}(\lambda)$ は一樣とし，立体角を乗じることで輻射強度 $I_{cal}(\lambda)[\text{W}/\text{cm}^2 \cdot \text{nm}]$ を得る．

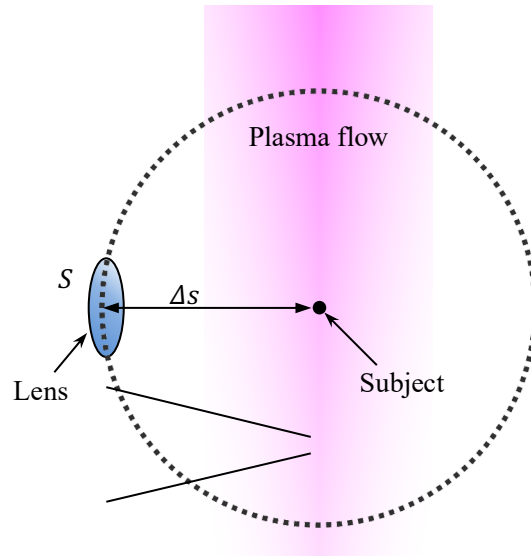


図2.1 単位変換の模式図

2.2 スペクトルフィッティング法

スペクトルフィッティングの流れを図2.2に示す．アーク加熱風洞や誘導プラズマ風洞などによって生成した高温気体に対して，分光計測を実施することで取得した，スペクトルの強度 $I_{exp}(\lambda)$ は原子，分子の内部励起状態に依存する．数値計算によるスペクトル $I_{cal}(\lambda)$ を実験の分光スペクトルに適合することで，実験時の気体の内部状態を推定することができる．スペクトルフィッティングは，化学種ごとの密度，温度，電子励起，振動励起状態の占有密度，EinsteinのA係数を設計変数とし，適当な初期値から変化させることで実験と計算スペクトルとの誤差を最小化する手法である．誤差評価は，

$$Er = \sum_i \left(\frac{I_{cal,n}(\lambda_i)}{I_{exp,n}(\lambda_i)} - 1 \right)^2, \quad (2.47)$$

で行った． $I_{cal,n}(\lambda_i)$ ， $I_{exp,n}(\lambda_i)$ は規格化された計算，実験スペクトルの i 波長点での強度を表す．複数の実験スペクトルや，波長域のデータがある場合はそれぞれを指定することもできる．スペクトルの規格化は，

$$I_{cal,n}(\lambda_i) = \frac{I_{cal}(\lambda_i)}{\sum_i I_{cal}(\lambda_i)}, \quad (2.48)$$

$$I_{exp,n}(\lambda_i) = \frac{I_{exp}(\lambda_i)}{\sum_i I_{exp}(\lambda_i)}, \quad (2.49)$$

とする．変化させる電子励起，振動励起状態の占有密度は，表2.2，2.3に示す各遷移における上準位側の占有密度とする．設計変数は対象とする気体の内部状態が熱化学非平衡，電子・振動励起非平衡であるかを考慮し，順を追って変更する必要がある．

まず，熱化学非平衡であるかを判断する．検査気体の圧力や温度から化学平衡組成計算コードCEA[21]等を用いて得られた平衡組成での理論スペクトルと実験値を比較する．この時スペクトルが一致した場合，検査気体は熱化学的に平衡状態と言え，一致しなかった場合は熱化学非平衡であるとわかる．

次に電子励起非平衡であるかどうかを判断する．各化学種の温度や全密度を設計変数としてフィッティングを行う．この温度は原子種では電子励起温度，分子種では回転，振動，電子励起温度とする．この時スペクトルが一致した場合，検査気体の電子励起状態は平衡であると言え，一致しなかった場合は電子励起非平衡とわかる．

次に，振動励起非平衡であるかを判断する．各化学種の電子励起準位密度を設計変数としてフィッティングを行う．電子励起準位の密度を変化させた場合，各バンドスペクトル全体の形状を維持したまま強度を変化させる．この時スペクトルが一致した場合，検査気体の振動励起状態は平衡であると言え，一致しなかった場合は振動励起非平衡とわかる．振動励起非平衡とわかった場合，振動励起密度を設計変数としたフィッティングを行う．振動励起密度を変化させた場合，各バンドスペクトルの形状を変化させる．

最後に，振動励起非平衡でフィッティングができなかった場合，Einstein係数を設計変数としたフィッティングを行い，Einstein係数の修正を行う．

誤差の最小化にはベイズ最適化ライブラリPHYSBO(optimization tool for PHYSics based on Bayesian Optimization)[22]を使用した．まず設計変数の探索空間 X を用意する．設計変数の次元を n とし，設計変数の組み合わせ数を m とすると，探索空間 X は m 行 n 列の行列で表せる．この際の探索空間はラテン超方格法(LHS: Latin Hypercube Sampling)[23]を使用した．LHSは図2.3に示す様にサンプリングすることで，ランダムサンプリングに比べ少ないサンプリング数で設計空間内を一樣にサンプリングすることができる．次に探索空間 X からラ

ンダムサンプリングをN回行い，設計変数 x の時の目的関数 y を計算することで学習データ $D = \{x_i, y_i\}_{(i=1, \dots, N)}$ を得る．この時の目的関数 y は式(2.47)の誤差関数 Er を用いる．学習データを用いてガウス過程を学習することで，サンプリングを行っていない探索候補に対する平均と分散を計算する．この平均と分散から獲得関数を計算し，目的関数を得ていない探索候補から獲得関数を最大化する設計変数を次の探索点として取得する．獲得関数は最大改善確率 (PI : Probability of Improvement)，もしくは最大期待改善率 (EI : Expected Improvement)を用いる．得られた次探索点での目的関数を計算しPHYSBOに読み込ませることでさらに次の探索点を得るというように，探索を繰り返すことで目的関数の最小化を行う．なおPHYSBOでは常に最大値の探索を行うため，最小化を行う場合は目的関数にマイナスを乗じることで行う．

表2.2 考慮する原子種の遷移数

Species	Number of Electronic states	Number of Transition
N	378	1082
N ⁺	192	709
O	610	842
O ⁺	282	857

表2.3 考慮する分子種の遷移

Species	Electronic states	Number of Vibrational states	Transition	Upper states	Lower states
N_2	$X^1\Sigma_g^+$	15	First Positive	$B^3\Pi_g$	$A^3\Sigma_u^+$
	$A^3\Sigma_u^+$	16	Second Positive	$C^3\Pi_u$	$B^3\Pi_g$
	$B^3\Pi_g$	21	Birge Hopfield 1	$b^1\Pi_u$	$X^1\Sigma_g^+$
	$C^3\Pi_u$	4	Birge Hopfield 2	$b'^1\Sigma_u$	$X^1\Sigma_g^+$
	$b^1\Pi_u$	19	Carroll Yoshino	$c'^{14}\Sigma_u^+$	$X^1\Sigma_g^+$
	$b'^1\Sigma_u$	28	Worley Jenkins	$c^{13}\Pi_u$	$X^1\Sigma_g^+$
	$c^{13}\Pi_u$	4	Worley	$o^{13}\Pi_u$	$X^1\Sigma_g^+$
	$c'^{14}\Sigma_u^+$	8	$e'-X$	$e'^1\Sigma_u^+$	$X^1\Sigma_g^+$
	$o^{13}\Pi_u$	4			
	$e'^1\Sigma_u^+$	2			
N_2^+	$X^2\Sigma_g^+$	21	Meinel	$A^2\Pi_u$	$X^2\Sigma_g^+$
	$A^2\Pi_u$	27	First Negative	$B^2\Sigma_u^+$	$X^2\Sigma_g^+$
	$B^2\Sigma_u^+$	19	Second Negative	$C^2\Sigma_u^+$	$X^2\Sigma_g^+$
	$C^2\Sigma_u^+$	6			
NO	$X^2\Pi$	35	Gamma	$A^2\Sigma^+$	$X^2\Pi$
	$A^2\Sigma^+$	10	Beta	$B^2\Pi$	$X^2\Pi$
	$B^2\Pi$	15	Delta	$C^2\Pi$	$X^2\Pi$
	$C^2\Pi$	8	Epsilon	$D^2\Sigma^+$	$X^2\Pi$
	$D^2\Sigma^+$	15	Beta'	$B'^2\Delta$	$X^2\Pi$
	$B'^2\Delta$	10			
	$F^2\Delta$	5			
O_2	$X^3\Sigma_g^-$	21	SchumannRunge	$B^3\Sigma_u^-$	$X^3\Sigma_g^-$

	$a^1\Delta_g$	20			
	$b^1\Sigma_g^+$	19			
	$A^3\Sigma_u^+$	8			
	$B^3\Sigma_u^-$	14			
O_2^+	$X^2\Pi_g$	23	First Negative	$b^4\Sigma_g^-$	$a^4\Pi$
	$a^4\Pi$	15	Second Negative	$A^2\Pi_u$	$X^2\Pi_g$
	$A^2\Pi_u$	25			
	$b^4\Sigma_g^-$	14			
CN	$X^2\Sigma^+$	40	Red	$A^2\Pi_l$	$X^2\Sigma^+$
	$A^2\Pi_l$	20	Violet	$B^2\Sigma^+$	$X^2\Sigma^+$
	$B^2\Sigma^+$	20			
OH	$X^2\Pi$	13	A-X	$A^2\Sigma^+$	$X^2\Pi$
	$A^2\Sigma^+$	8			
NH	$X^3\Sigma^-$	10	A-X	$A^3\Pi$	$X^3\Sigma^-$
	$A^3\Pi$	5			

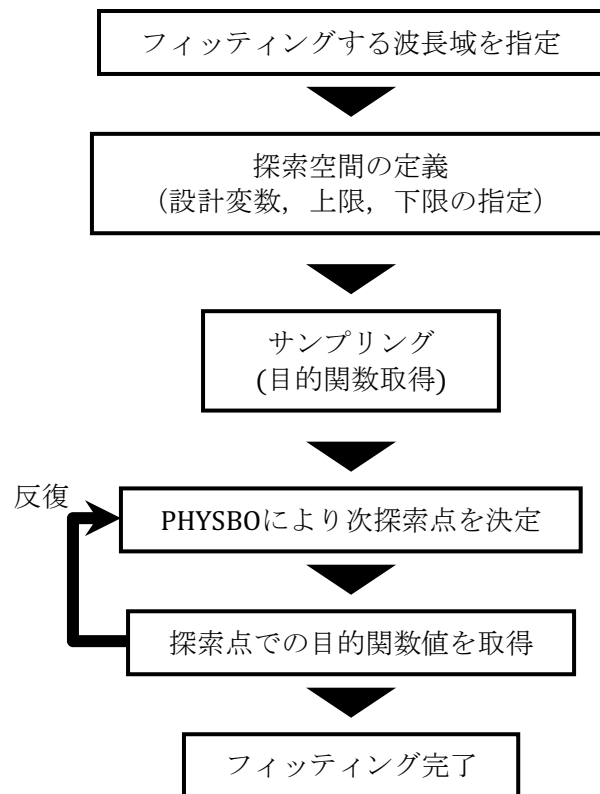


図2.2 スペクトルフィッティングの流れ

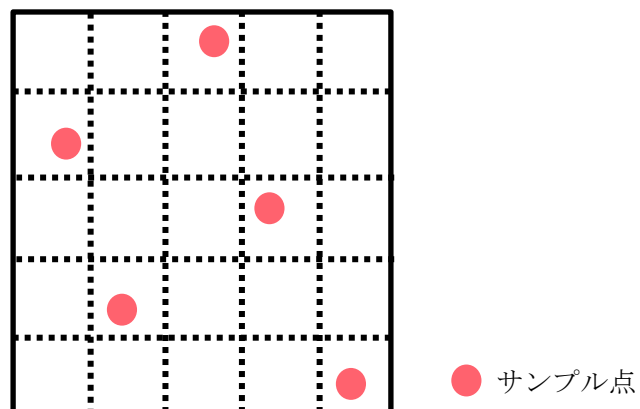


図2.3 2次元におけるLHSでのサンプリングの模式図

第3章

計算条件

本章では、スペクトルフィッティングの対象とした実験スペクトルについて、及びフィッティングにおける計算条件について示す。

3.1 計算対象

反応速度定数の高精度化を行うために必要となるスペクトルは、熱化学的、励起状態的に非平衡なプラズマ中の発光スペクトルである。また、スペクトルの計算には密度、温度といった初期値が必要となる。今回のフィッティングに用いる、これらの条件を満たした実験スペクトルとして、F. De Filippisと C. Purpuraによるアークジェットプラズマ風洞 SCIROCCOを用いた測定結果を使用する[24]。

SCIROCCOはイタリア航空宇宙センター（CIRA: Centro Italiano Ricerche Aerospaziali）が所有するアークプラズマ風洞である。その模式図を図3.1に示す。圧縮された作動気体（最大圧力16.7bar）は5.5mのアークヒーター（最大電力70MW）でエネルギーを供給されプラズマへと変化する。ラバールノズル（最大質量流量3.5[kg/s]）によりプラズマが加速されることで極超音速流れとなってテストチャンバー内に流入する。その際に生じたプラズマの発光スペクトルを分光装置により取得する。計測部の光学系を図3.2に示す。供試体は設置せず、試験気流の発光を計測している。まずテストチャンバーに取り付けられた観測窓を通して、UV-Nikkor対物レンズにより集光する。その光を光ファイバーで分光器、CCDカメラへと送ることで計測された。レンズにより集光する検査気体は290cm先の直径22cmの球体で表される。試験が行われた際の試験条件を表3.1に示す。

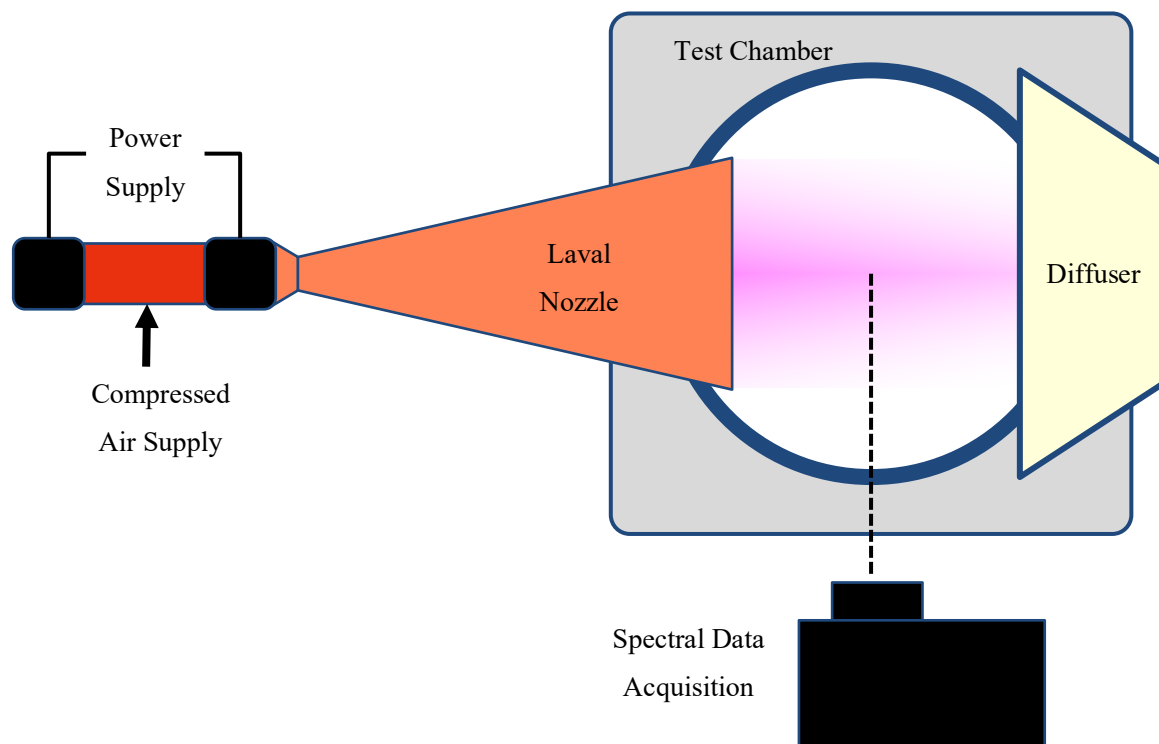


図3.1 SCIROCCOプラズマ風洞概略図[24]

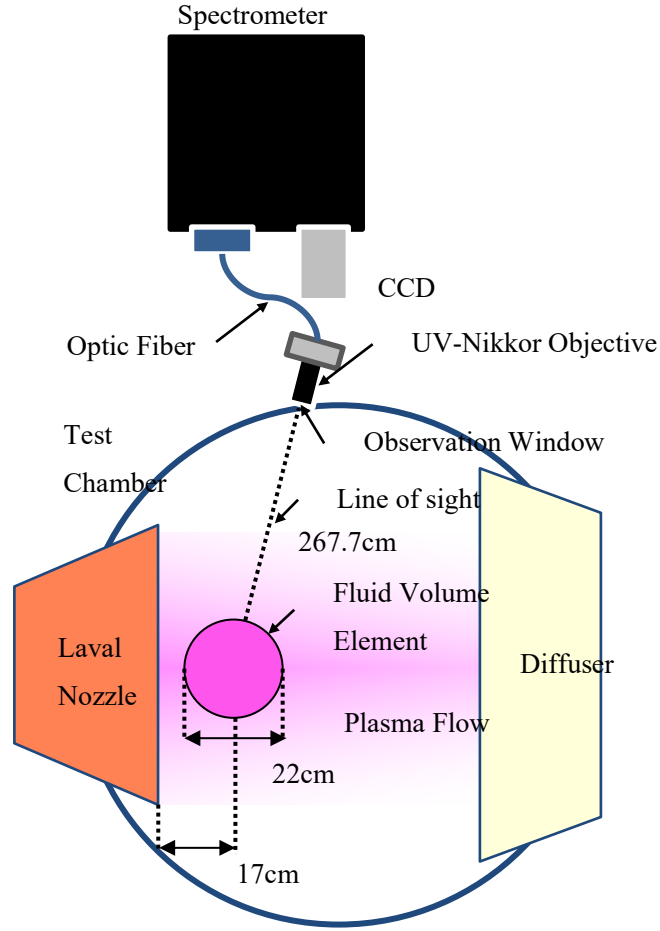


図3.2 光学系概略図[24]

表3.1 試験条件[24]

Parameter	Values
P_{total} [bar]	2.9 ± 0.1
P_{exit} [mbar]	0.388 ± 0.001
P_{static} [mbar]	13.4 ± 1.1
H_{total} [MJ/kg]	11.6 ± 0.8
M_{total} [kg/s]	0.495 ± 0.005
V [V]	6780 ± 200
I [A]	1720 ± 30
Power[MW]	11.66 ± 0.81

3.2 計算条件

フィッティングを行う際の初期の温度と組成は数値計算によって予測された値(表3.2)を用いる。スペクトル計算時の波長点数は、少ない場合スペクトルの解像度が下がりすべてのスペクトルを再現しきれないため、スペクトル形状の変化がなくなる際の点数とする。スペクトルの強度は各波長点での強度を全波長点での積分値で除することで規格化して表す。フィッティングの対象とする実験スペクトルを図3.3に示す。

表3.2 初期条件[24]

Chemical	Density[kg/m ³]	T _e [K]	T _e [K]	T _e [K]
e ⁻ [kg/m ³]	1.00E-15	2225	—	—
N[kg/m ³]	3.06E-06	2225	—	—
O[kg/m ³]	2.35E-05	2225	—	—
N ₂ [kg/m ³]	7.44E-05	2225	2225	498
NO[kg/m ³]	2.04E-09	2225	2225	498
O ₂ [kg/m ³]	7.84E-07	2225	2225	498

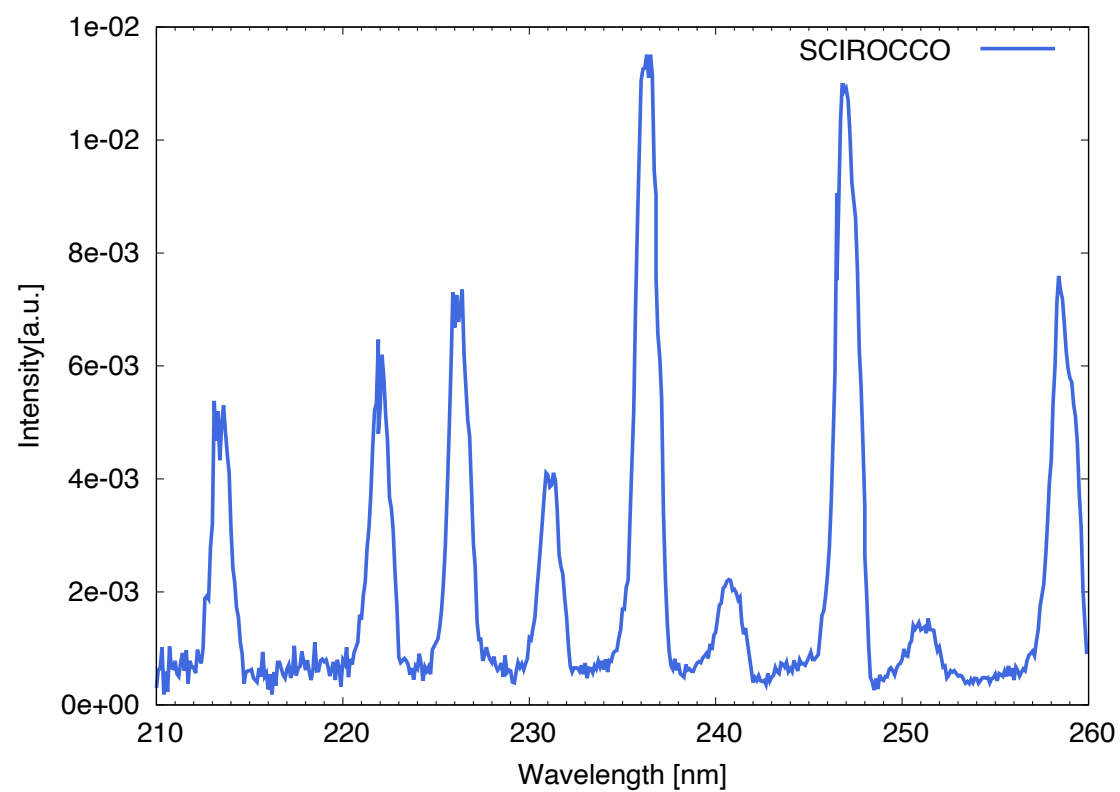


図3.3 SCIROCCO試験気流の発光スペクトル

第4章

反応速度定数の高精度化手法の提案

本章ではアークプラズマ風洞SCIROCCOで計測されたスペクトルに対するスペクトルフィッティングを行い，EinsteinのA係数の修正法を示す．

4.1.1 SCIROCCOスペクトルの同定

同定を行うことで，試験気流中のどの化学種のどの遷移による発光であるかを特定する．3.2節で示したSCIROCCOスペクトルの特徴的なスペクトルに対する同定結果を図4.1に示す．表れた化学種はNOのみとなり，表2.2に示したNOの分子バンドのうち δ ， γ であることがわかる．カッコ内は各バンドにおける振動励起準位を表しており，1つ目が上準位側，2つ目が下準位側を表している．NO- $\delta(0,3)$ を例にすると，化学種NOの電子励起準位 $C^2\Pi$ の振動励起準位の基底から，電子励起準位 $X^2\Pi$ の第3振動励起状態に遷移していることを示している．

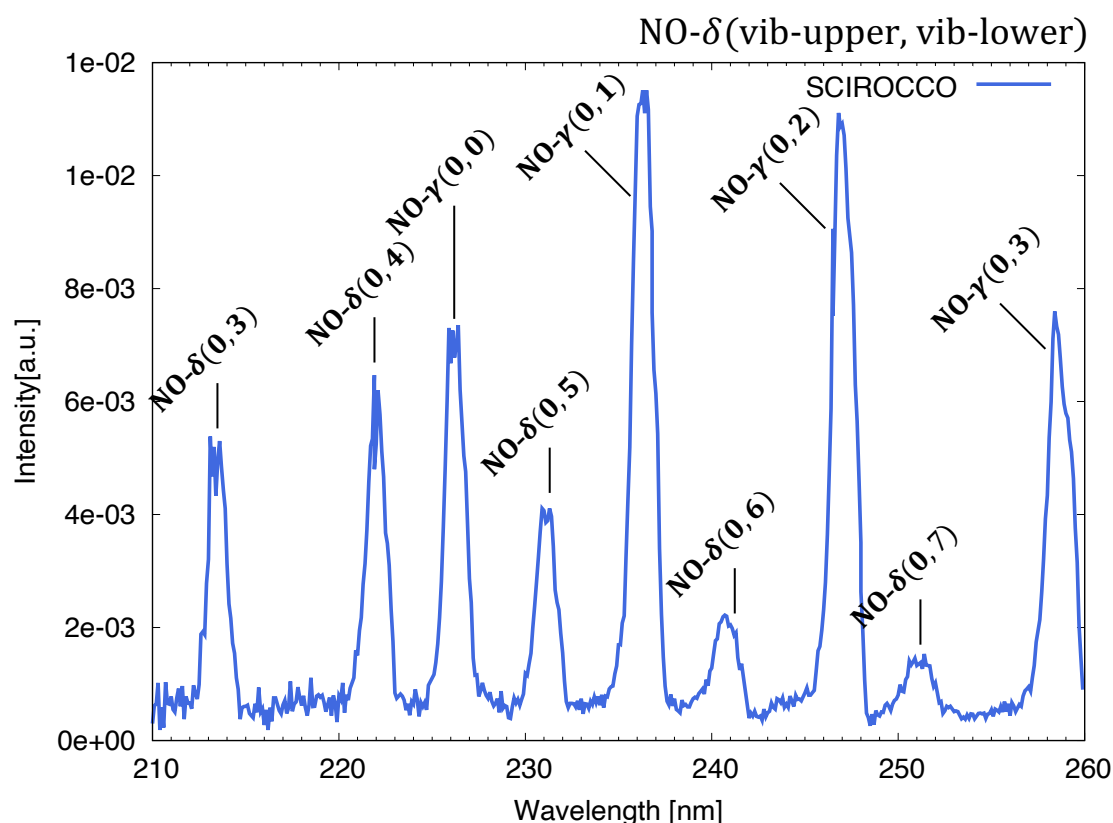


図4.1 SCIROCCOスペクトルの同定

4.1.2 CFDによる予測値を用いた計算スペクトルと実験スペクトルの比較

表3.2で示したCFDによる密度、温度の予測値を用いてスペクトル計算を行い、SCIROCCOスペクトルと比較を行った。その結果を図4.2に示す。計算値は実験値の線スペクトルの幅と一致するよう波長平均の処理をしている。NO- γ と δ が確認できるが、別のバンドスペクトルも多く見られる。そのため試験中の気流は予測値とは異なるとわかるため、まず全密度、各温度に対するフィッティングが必要である。

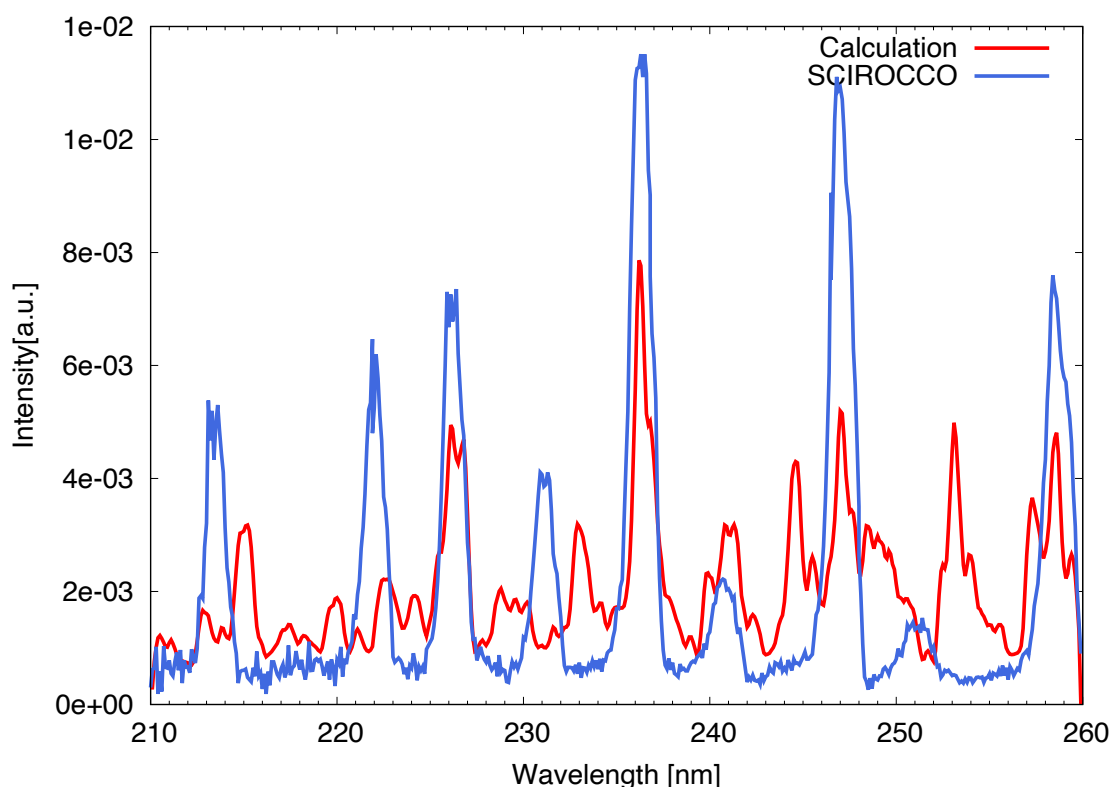


図4.2 CFD予測値による計算と実験スペクトルの比較

4.1.3 全密度と各温度でのスペクトルフィッティング

全密度と回転，振動，電子励起温度を設計変数としてスペクトルフィッティングを行った．化学種は4.1.1節の同定の結果からNOと電子のみとした．最適化パラメータの探索空間数，サンプル数，最適化回数，獲得関数を表4.1に示す．また，設計変数，及びそれらの最小値，最大値を表4.2の値を用いてフィッティングを行なった．

フィッティングの結果とSCIROCCOスペクトルとの比較を図4.3に示す．まず，NO- δ に関してはSCIROCCOに比べ非常に小さく，NO- γ に関しては過大となった．つまりNO- δ の上準位側の電子励起準位 $C^2\Pi$ とNO- γ の上準位側の電子励起準位 $A^2\Sigma^+$ の密度に差異があるとわかる．よって電子励起非平衡であるといえる．図4.1で示した注目しているスペクトルNO- δ の上準位側はどれも電子励起準位 $C^2\Pi$ の振動励起準位の基底であり，NO- γ の上準位側はどれも電子励起準位 $A^2\Sigma^+$ の振動励起準位の基底である．そのため電子励起準位の密度を

あげると別の振動励起準位の密度も増加することになり，注目している波長以外のスペクトル強度が大きくなる．よってSCIROCCOスペクトルとの誤差が大きくなるため， $A^2\Sigma^+$ と $C^2\Pi$ の振動励起準位密度を変更したフィッティングが必要となる．

表4.1 全密度と各温度のフィッティングの最適化パラメータ

探索空間数	10,000
サンプル数	300
最適化回数	50
獲得関数	EI

表4.2 全密度と各温度のフィッティングの設計変数

Design variables	Min	Max
ρ_e	1.0e-20	1.0e-4
$T_{el,e}$	400	10,000
ρ_{NO}	1.0e-20	1.0e-4
$T_{rot,NO}$	400	5000
$T_{vib,NO}$	400	5000
$T_{el,NO}$	400	5000

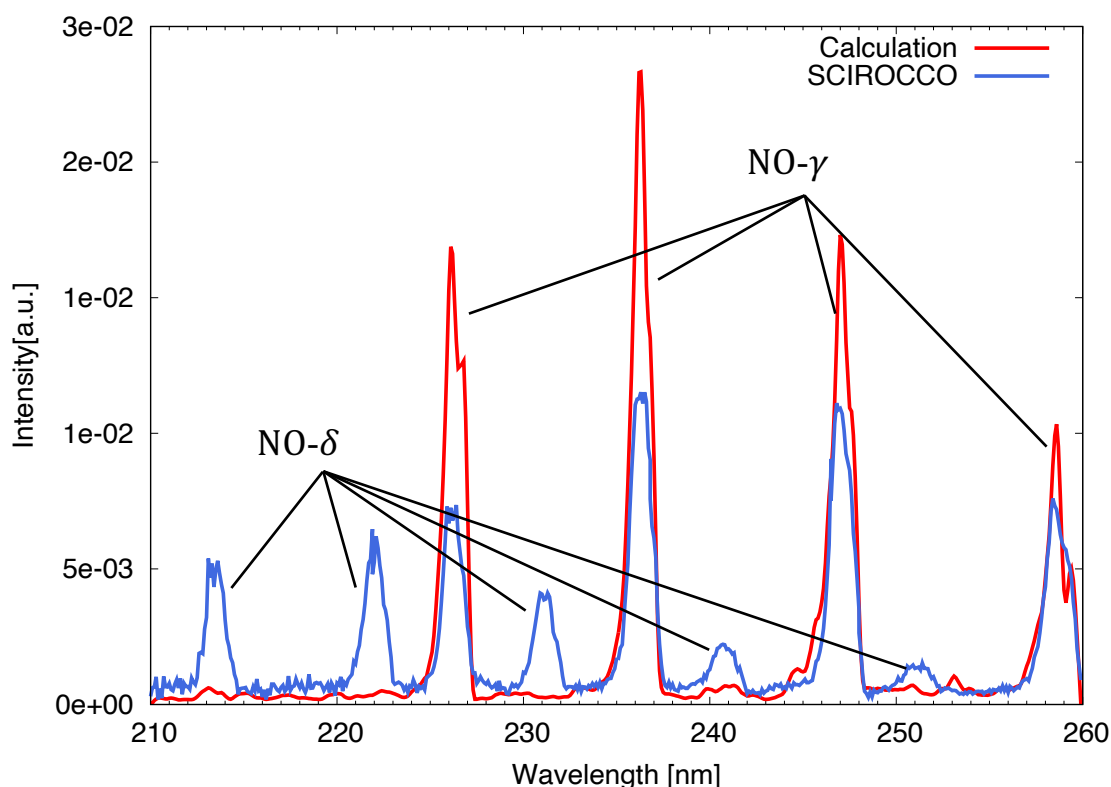


図4.3 全密度と各温度によるフィッティング結果とSCIROCCOスペクトルの比較

4.1.4 NO- γ の $A^2\Sigma^+, v = 0$ 密度でのフィッティング

NO- γ の上準位側である電子励起準位 $A^2\Sigma^+$ の振動励起準位 $v = 0$ の密度を設計変数としてフィッティングを行なった．その結果のSCIROCCOスペクトルとの比較を図4.4に示す． $A^2\Sigma^+, v = 0$ の密度を0.4倍にすることで誤差を最小化した．よってNO- γ に関してはスペクトルの一致を示せた．またこのことから振動励起非平衡の有効性がわかった．

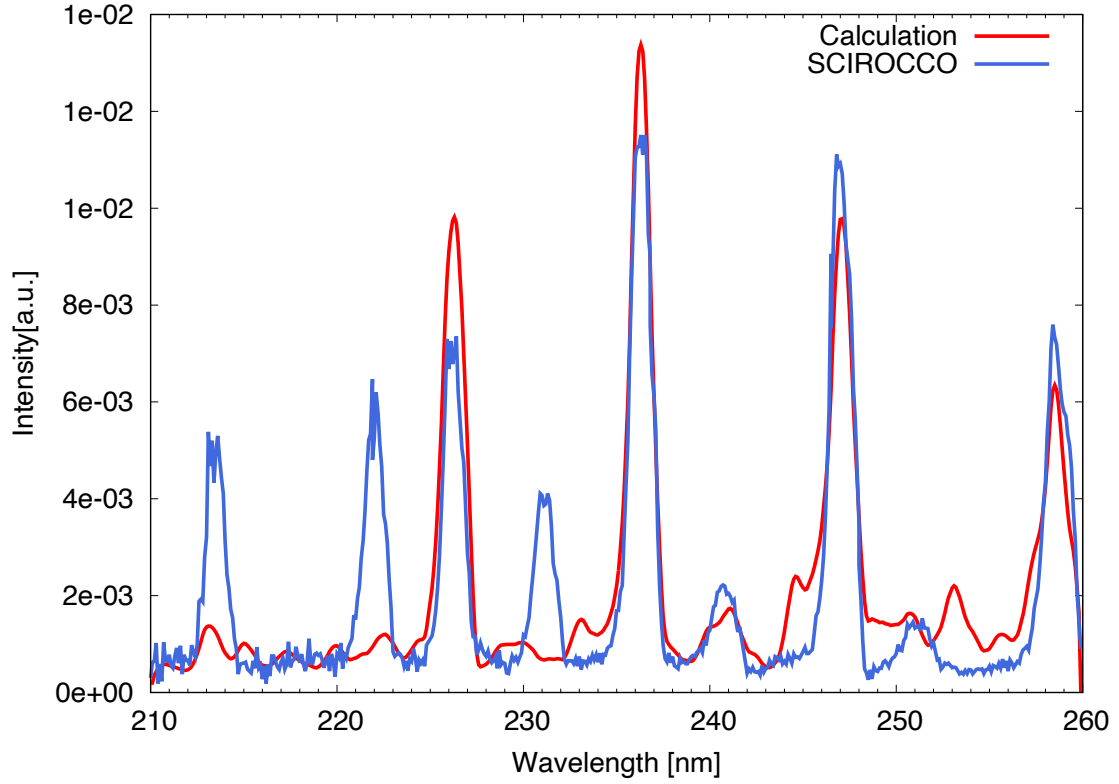


図4.4 NO- γ の $A^2\Sigma^+, v=0$ 密度のフィッティング結果とSCIROCCOとの比較

4.1.5 NO- δ の $C^2\Pi, v=0$ 密度でのフィッティング

NO- δ の上準位側である電子励起準位 $C^2\Pi$ の振動励起準位 $v=0$ の密度を設計変数としてフィッティングを行なった．その結果とSCIROCCOスペクトルとの比較を図4.5に示す．この際のNO- δ の $C^2\Pi, v=0$ の密度は50倍とした．NO- $\delta(0,3)$ とNO- $\delta(0,4)$ の上準位は共通であるため， $C^2\Pi, v=0$ の密度を変化させても比率は変化しない．スペクトルを一致させられないことがわかる．このことからEinsteinのA係数の修正が必要となる．

ここで，式(2.1)を再掲する．

$$\epsilon_{b-b}(\lambda) = n_u \frac{hcA_{ul}}{4\pi\lambda_{ul}} \Phi(\lambda). \quad (2.1)$$

式(2.1)からわかるようにスペクトルの強度は上準位数密度 n_u ，とEinsteinのA係数 A_{ul} に依存している．つまり， $C^2\Pi, v=0$ の密度の修正で一致しなかったことからEinsteinのA係数の修正が必要であるとわかる．

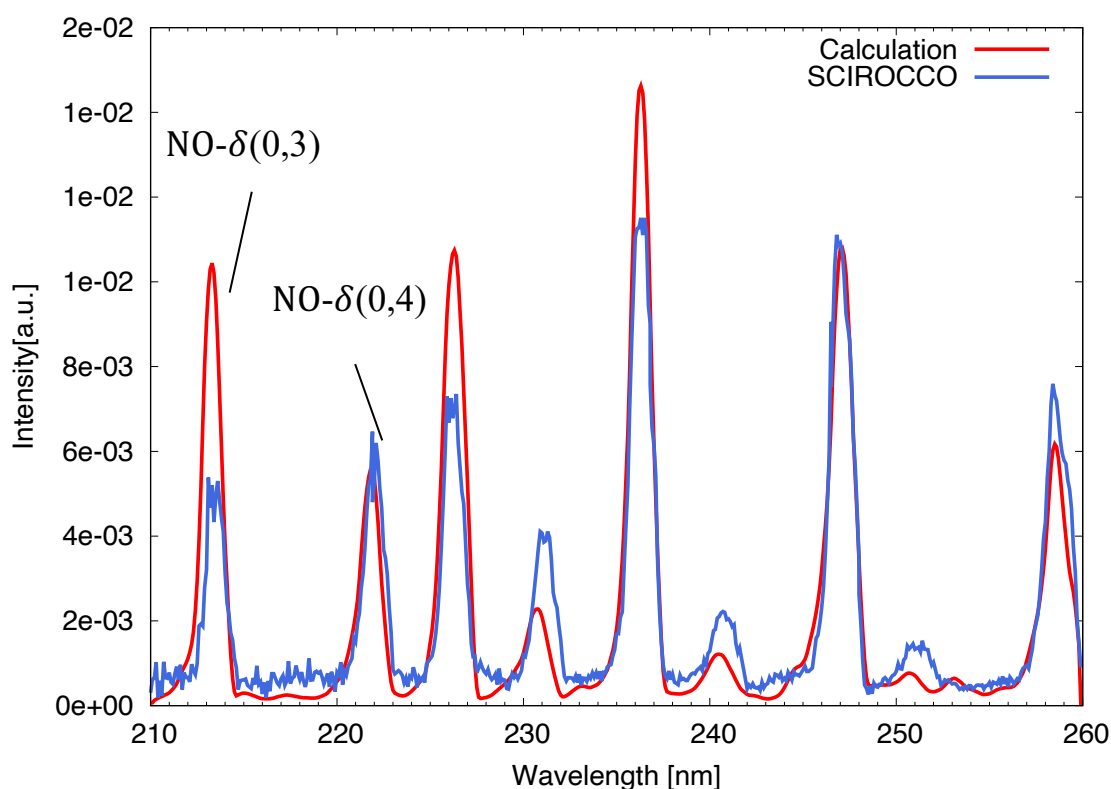


図4.5 NO- δ の $C^2\Pi, v=0$ 密度のフィッティング結果とSCIROCCOとの比較

4.1.6 NO- δ のA係数でのフィッティング

NO- δ のEinsteinのA係数を設計変数としたスペクトルフィッティングを行なった．各温度は4.3節での値とし，振動励起密度は4.1.4節，4.1.5節での値を用いた．最適化パラメータの探索空間数，サンプル数，最適化回数，獲得関数を表4.3に示す．また，設計変数，及びそれらの最小値，最大値を表4.4の値を用いてフィッティングを行なった．その結果とSCIROCCOスペクトルとの比較を図4.6に示す．A係数の修正によりNO- $\delta(0,3)$ ， $(0,4)$ ， $(0,5)$ ，

(0,6), (0,7)のスペクトルの一致を確認できた. その際のそれぞれのA係数の変化前と変化後の値を表4.5に示す. またこれらのことからEinsteinのA係数の修正が有効であるとわかった.

表4.3 EinsteinのA係数のフィッティングの最適化パラメータ

探索空間数	5000
サンプル数	300
最適化回数	50
獲得関数	EI

表4.4 全密度と各温度のフィッティングの設計変数

NO- δ	C ² Π vib	X ² Π vib	Einstein Coef.	
			min	max
	0	3	4.53E+05	2.26E+08
	0	4	2.40E+05	1.20E+08
	0	5	1.12E+05	5.59E+07
	0	6	4.68E+04	2.34E+07
	0	7	1.78E+04	8.91E+06

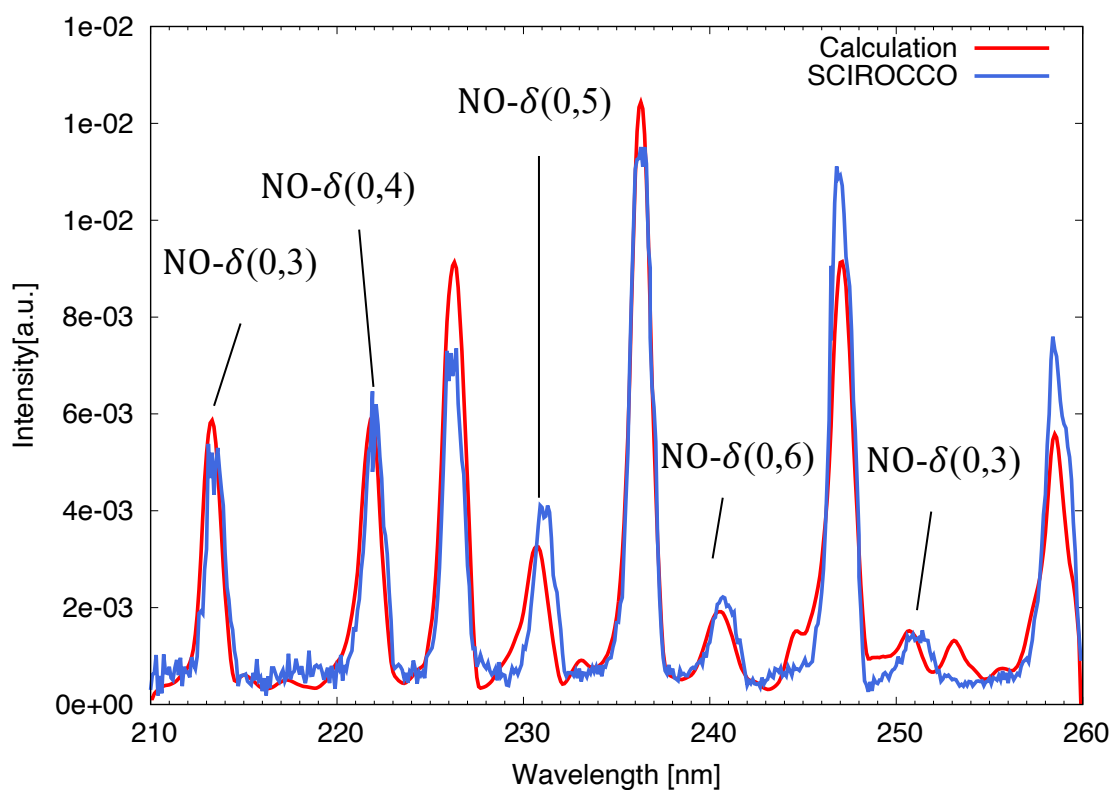


図4.6 NO- δ のA係数でのフィッティング結果とSCIROCCOとの比較

表4.5 フィッティング後のEinsteinのA係数

NO- δ	$C^2\Pi$	$X^2\Pi$	Einstein Coef.	
0	3	4.53E+06	→	5.88.E+07
0	4	2.40E+06	→	6.01.E+07
0	5	1.12E+06	→	3.74.E+07
0	6	4.68E+05	→	1.53.E+07
0	7	1.78E+05	→	8.03.E+06

4.2 反応速度定数の高精度化への展望

本研究ではSCIROCCO風洞のスペクトルからNO- γ の振動密度、NO- δ の210-260nmにおけるEinsteinのA係数の修正をおこなった。全密度、各温度によるフィッティングから化学的、熱的非平衡性を、電子励起、振動励起準位密度によるフィッティングから、電子励起、振動励起非平衡性を、さらにA係数によるフィッティングからA係数の修正をと段階的に反応速度定数の修正手法を提案した。ただし、2原子分子のA係数は分光定数(Dunham coefficient), Honl-London因子などを用いて計算されるが、これらの値は実験装置や計算機、計算手法の発展に伴い変遷している。例えば、NO- γ に関しては1988年にS. R. Langhoffらによって提案された振電遷移(Vibronic transition)のA係数[25]に比べ、C. O. Lauxらによって1992年に提案されたA係数[26]では最大で84%の差異がある。また、NOは自然に空気中に存在するN₂、O₂とは異なるため実験計測も困難になる。そのため、今回修正をおこなったNO- δ のA係数もRegina de Vivieらによって1988年に提案された値[27]から修正をしているため、科学進歩による変遷の範囲内であると考えらる。

また、1万Kを超えるような大気圏突入時流れではN₂が解離し、N原子となるためNの線スペクトルが多くなる。そのためNの反応速度定数の修正も重要である。A. M. Brandisらによって2018年に発表された、NASA, Ames Research Centerのアーク衝撃波管EASTを用いて流速10.74km/sで計測されたスペクトル[28]では、110-180nmの紫外域において電子励起平衡では再現できない値となった。この場合のNにおいても励起非平衡を考慮し、反応速度定数の修正を行う必要がある。本研究では励起密度を設計変数としてフィッティングを行なったが、修正後の励起密度を再現するよう、各遷移の反応速度定数を設計変数として励起遷移のレート方程式を解きフィッティングを行うことで衝突による解離や電離、励起に関する反応速度定数を修正することも可能である。

よって、今回は1例ではあるが、今回提案した手法を他の実験スペクトルに適用し、PHYSBOの多目的なベイズ最適化を用いることで、広い波長域における全ての化学種、遷移についても反応速度定数の高精度化が可能となる。

第5章

結言

本研究では、極超音速流れ場計算における反応速度定数の高精度化を行い、次世代の大気圏突入流れの解析手法構築への貢献を目指した。

今回は反応速度定数の修正の1例として、アーク加熱風洞SCIROCCOで取得されたスペクトルにしてフィッティングを行いNOの紫外域の電子、振動励起密度、EinsteinのA係数の修正を行なった。これを通して実験スペクトルを用いた反応速度定数の高精度化への一連の手法を提案した。

SCIROCCO風洞で計測されたスペクトルの210-260nmの波長域に対してスペクトル同定を行い、NOの δ , γ であることを示した。全密度、回転、振動、電子励起温度に対してスペクトルフィッティングを行い電子励起非平衡であるとわかった。さらに振動励起密度に対してスペクトルフィッティングを行ったところ、NO- γ の一致を確認でき、振動励起非平衡が有効であるとわかった。NO- δ は一致しなかったため、EinsteinのA係数の修正が必要であるとわかった。そこで、NO- δ の(0,3), (0,4), (0,5), (0,6), (0,7)のA係数の修正をおこなった。それにより、NO- δ に関しても一致を確認できた。よってNO- δ に対してはA係数の修正が有効であると示した。

本研究では1例のみでの修正となったため、今後はより多くの実験スペクトルを用いての修正を行い、反応速度定数の高精度化が必要である。また、その他の化学種、全ての遷移に対しても網羅的に行う必要がある。実験スペクトルに関してはJAXA相模原キャンパスの惑星大気突入環境模擬装置にて、本研究室の分光器Mechell5000を用いた分光計測を橋爪が行っている[29]。また、今回実装したベイズ最適化ライブラリPHYSBOは多目的な最適化が可能であるため、広波長域、複数データを用いての修正にこそ有用であるといえる。

付録 A

レンズで集光する検査気体の体積の導出

分光計測では発光源の光をレンズによって集光して光ファイバーを通すことで取得する。つまり図A.1のようにレンズで集光することで発光体のうち注目したい検査気体の光を抽出する。その際、観測したい位置で点光源等を用いてピント合わせをおこなうが、レンズには被写界深度があるため1点での光ではなく体積を持った検査気体の光の強度の平均として計測される。その検査気体の体積 V はレンズの被写界深度 D を用いて

$$V = \frac{4}{3}\pi D^3,$$

と表される。

被写界深度 D は前方被写界深度 D_f と後方被写界深度 D_b を用いて、

$$D = D_f + D_b$$

と表す。それぞれ、

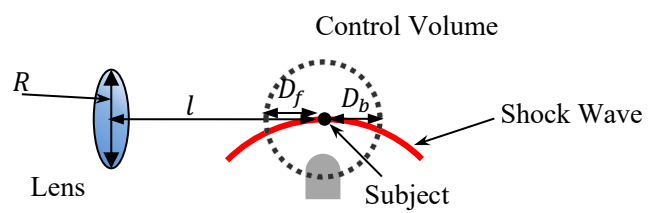
$$D_f = \frac{rF'l^2}{f^2 + rF'l}$$

$$D_b = \frac{rF'l^2}{f^2 - rF'l}$$

と定義される。 r は許容錯乱円径、 F' は絞り値、 l は被写体距離、 f はレンズの焦点距離を表す。許容錯乱円径はCCDカメラ等のイメージセンサーのピクセルサイズとなる。本研究室所有のCCDカメラAndor iKon-Mを例にとると13[μm]となる。絞り値 F' はF値とも呼ばれ、

$$F' = \frac{f}{R}, \quad (2.45)$$

となり， R はレンズ口径を表す．



図A.1 検査体積の模式図

参考文献

- [1] S. Watanabe, Y. Tsuda, M. Yoshikawa, S. Tanaka, T. Saiki, S. Nakazawa, “Hayabusa2 Mission Overview,” *Space Science Reviews* 208(1-4):1-14
- [2] “OSIRIS-REx Asteroid Sample Return Mission,” NASA, PRESS KIT, August 2016
- [3] 山田哲哉, 安部隆士, “「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その周辺,” *Journal of Plasma Fusion and Fusion Research*, Vol. 82, No. 6, 2006, pp. 368-374.
- [4] H. Kubota, K. Suzuki, and T. Watanuki, “Aerothermodynamics of Space Vehicles,” University of Tokyo Press, 2002.
- [5] C. Park, Nonequilibrium Hypersonic Aerothermodynamics, John Wiley and Sons Inc., New York, 1989.
- [6] H. W. Drawin, “Collision and transport cross sections,” Technical Report EUR-CEA-FC-383 revised. Fontenay-aux-Roses, 1967.
- [7] A. J. Fangman, and D. A. Andrienko, “A state-to-state and multi-temperature study of air thermochemistry,” AIAA paper 2021-0316, 2021.
- [8] V. T. Baluckram, and D. A. Andrienko, “First-principle simulation of vibrational activation and dissociation in oxygen shock flows,” AIAA paper 2021-0447, 2021.
- [9] E. C. Geistfeld, and T. E. Schwartzentruber, “Three-Body Collision Based Recombination Rate Constants from Quasi Classical Trajectory Calculations,” AIAA paper 2021-0808, 2021.
- [10] National Institute of Standards and Technology (NIST) Physics Laboratory, NIST Atomic Spectra Database Version 3. <http://physics.nist.gov/PhysRefData/ASD/> (2008)
- [11] J. O. Arnold, E. E. Whiting, and G. C. Lyle, “Line by line calculation of spectra from diatomic molecules and atoms assuming a Voigt line profile,” *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, Vol. 9, 1969, pp. 775-798.
- [12] I. H. Hutchinson, “Plasma Spectroscopy,” Cambridge university press, 2002.
- [13] S. S. Penner, “Quantitative Molecular Spectroscopy and Gas Emissivities,” Addison-Wesley Educational Publishers Inc, 1959.
- [14] H. R. Griem, “Plasma Spectroscopy,” McGraw-Hill Book Company, 1964.
- [15] N. Konjevic, “Plasma broadening and shifting of non-hydrogenic spectral lines: present status and applications,” *Physics Reports*, Vol. 316, Issue 6, August 1999, pp. 339-401.
- [16] 猿橋裕太, “Line-by-line法による理論輻射スペクトル計算,” 名古屋大学大学院修士論文 2007.
- [17] G. Peach, “Continuous absorption coefficients for non-hydrogenic atoms,” *Monthly Notices of*

the Royal Astronomical Society, Vol. 124, No. 5, 1962, pp.371-381.

[18] K. Fujita, and T. Abe, “Spradian, structured package for radiation analysis : Theory and application,” The Institute of Space and Astronautical Science, Report No. 669, September, 1997

[19] R. L. Taylor, and G. Caledonia, “Experimental Determination of the Cross-Sections for Neutral Bremsstrahlung,” *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, Vol. 9, No. 5, 1969, pp. 681-696.

[20] K. Fujita, M. Mizuno, K. Ishida and T. Ito, “Spectroscopic Flow Evaluation in Inductively Coupled Plasma Wind Tunnel,” *Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, Vol. 22, No. 4, 2008, pp. 485-494.

[21] S. Gordon, and B. J. McBride, “Computer Program for Calculation of Complex Chemical Equilibrium Compositions and Applications,” NASA Reference Publication 1311, 1994.

[22] Y. Motoyama, R. Tamura, K. Yoshimi, K. Terayama, T. Ueno and K. Tsuda, “Bayesian optimization package: PHYSBO,” *Computer Physics Communications* Volume 278, September 2022, 108405.

[23] M. D. McKay, R. J. Beckman and W. J. Conover, “A Comparison of Three Methods for Selecting Values of Input Variables in the Analysis of Output from a Computer Code,” *Technometrics* , May, 1979, Vol. 21, No. 2, pp. 239-245

[24] F. De Filippis and C. Purpura, “Chemical Species and Nonequilibrium Temperatures for Airflows in a Plasma Wind Tunnel,” *Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, Vol. 24, No. 2, April–June 2010.

[25] S. R. Langhoff, C. W. Bauschlicher Jr., and H. Partridge, “Theoretical Study of The NO γ System,” *Journal of Chemical Physics*, Vol. 89, No. 8, 1988, pp. 4909–4917.

[26] C.O. Laux and C. H. Kruger, “Arrays of radiative transition probabilities for the N2 first and second positive, NO beta and gamma, N2+ first negative, and O2 Schumann-Runge band systems,” *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, vol. 48, no. 1, July 1992, p. 9-24.

[27] 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, 1988, pp. 3028-3043.

[28] A. M. Brandis and B. A. Cruden, “Shock Tube Radiation Measurements in Nitrogen,” AIAA paper 2018-3457, 2018.

[29] 橋爪見奈, “大気圏突入環境を模擬した高温空気プラズマの発光分光計測,” 高知工科大学卒業論文 2022.

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 には研究を行う上での基礎知識から，文章の書き方や発表スライドの組み立てなど，あらゆる面において多大なる御指導，御支援を頂きました．特に毎週の宇宙組ミーティングでは，本の読み合わせや研究の相談に多くの時間を割いて頂きました．研究とは関係のない雑談の時間もありましたが楽しい時間を過ごすことができました．特に吉本興業所属の芸人，金属バットがM-1グランプリ2022において準決勝で姿を消してしまった際は，悲しみを共有させていただきました．心から深甚たる感謝の意を表します．

高知工科大学の野崎 理 教授 には様々な御指導と御意見を頂きました．特に全体報告会では発表の構成や行い方などの指導を頂きました．深く感謝いたします．

鳥取大学の酒井 武治 教授，葛山 浩 教授，坂本 憲一 助教には鳥取大学での風洞試験，JAXA相模原キャンパスでの風洞試験の際，実験において全くの初学者である私に懇切丁寧にご指導いただきました．深く感謝の意を示します．

航空エンジン超音速流研究室の超音速班の皆さまには研究やゼミ，ミーティングなどで様々なご支援をいただきました．浅井 友彰 君，岩田 雄太郎 君，久保田 佑弥 君，橋爪 見奈 君，磯部 拓海 君には普段から親しく接して頂き，楽しい研究室生活を送ることができました．同期の板谷 匠海 君，笠石 丈二 君にはおたがいに切磋琢磨すると同時に，くだらない話をしながら充実した研究生活を送ることができました．板谷 君とは同じ会社で働く同期としてこれからも共に頑張りましょう．笠石 君は会社の同期の方達とちゃんと仲良くしてください．皆様，深く感謝申し上げます．

最後に，充実した学生生活を何不自由なく送らせて頂きました両親，いつもそばで支えてくれた中島 星良 様には深く感謝申し上げます．