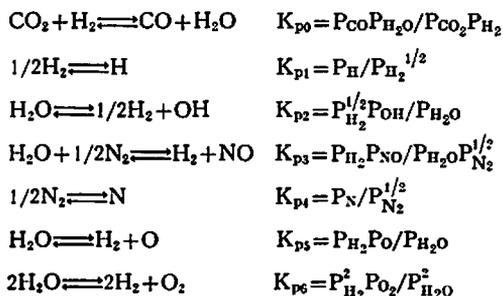


コンピューターによる推進薬の比推力計算

滝塚道則*, 荒木正任*, 鬼頭和敏*

1. まえがき

ロケット推進薬において燃焼性能、特に比推力を予め知ることはロケットの設計において非常に重要な事である。理論比推力の計算法として燃焼室と出口面とのエンタルピー差から求める方法¹⁾もあるが本報告では燃焼温度、比熱比、ガス分子量を求めそれから算出する方法をとつた。すなわち、ある与えられた圧力における燃焼生成物組成および燃焼温度を求める事である。これは一般的に質量保存式、エネルギー保存式、状態方程式および化学平衡式の連立方程式を解くことにより得られる。ここで C, H, O, N, Cl, Al 系より成るロケット推進薬について Cl はすべて HCl に Al はすべて Al₂O₃ になるものとすれば C, H, O, N, より成るガス反応を考えればよい。この時温度範囲が 2000°K~4000°K にあるものとすれば生成ガスは CO₂, CO, H₂O, H₂, N₂, O₂, O, H, N, OH, NO の 11 種類と考えられる。従つて平衡式としては下記の 7 式を考えればよい。



2. 計算法

推進薬 1 kg 当たりの各原子数 N_C, N_H, N_O, N_N, N_{Cl} (HCl), N_s (Al₂O₃), および 1 kg 当たりの生成熱 -ΔH_f を求める。次に温度を仮定して生成ガス組成を決定するのであるが、ここで圧力平衡定数 K_p をモル濃度平衡定数に変換する必要がある。

$$K = K_p(n_0/P_c)^{di} \quad (1)$$

n₀ は全ガスモル数、P_c は全圧力すなわち与えられた燃焼圧力、di は各平衡式における生成系と原系と

のガスモル数の差である。従つて n₀ が仮定されなければならないがそれは次式による²⁾。

N_O > 1/2N_H + N_C のとき

$$n_0 = 1/2N_C + 1/4N_H + 1/2N_N + 1/2N_O + N_O$$

N_C ≤ N_O ≤ N_C + 1/2N_H のとき

$$n_0 = N_C + 1/2N_H + 1/2N_N + N_O$$

温度 T を仮定して K を求め、下記の化学平衡式および質量保存式によりある温度 T におけるガス組成を求める。

$$K_0 \cdot n_{\text{CO}_2} \cdot n_{\text{H}_2} = n_{\text{CO}} \cdot n_{\text{H}_2\text{O}} \quad (2)$$

$$K_1 \cdot n_{\text{H}_2}^{1/2} = n_{\text{H}} \quad (3)$$

$$K_2 \cdot n_{\text{H}_2\text{O}} = n_{\text{H}_2}^{1/2} \cdot n_{\text{OH}} \quad (4)$$

$$K_3 \cdot n_{\text{H}_2\text{O}} \cdot n_{\text{N}_2}^{1/2} = n_{\text{H}_2} n_{\text{NO}} \quad (5)$$

$$K_4 \cdot n_{\text{N}_2}^{1/2} = n_{\text{N}} \quad (6)$$

$$K_5 \cdot n_{\text{H}_2\text{O}} = n_{\text{H}_2} \cdot n_{\text{O}} \quad (7)$$

$$K_6 \cdot n_{\text{H}_2\text{O}}^2 = n_{\text{H}_2}^2 \cdot n_{\text{O}_2} \quad (8)$$

$$N_C = n_{\text{CO}_2} + n_{\text{CO}} \quad (9)$$

$$N_H = 2n_{\text{H}_2\text{O}} + 2n_{\text{H}_2} + n_{\text{H}} + n_{\text{OH}} \quad (10)$$

$$N_O = 2n_{\text{CO}_2} + n_{\text{CO}} + n_{\text{H}_2\text{O}} + n_{\text{OH}} + n_{\text{NO}} + 2n_{\text{O}_2} + n_{\text{O}} \quad (11)$$

$$N_N = 2n_{\text{N}_2} + n_{\text{N}} + n_{\text{NO}} \quad (12)$$

ここでモル濃度平衡定数 K は (1) 式において n₀/P_c = d とおくことにより各々次のように表わされる。

$$K_0 = K_{p0}$$

$$K_1 = K_{p1}d^{1/2}$$

$$K_2 = K_{p2}d^{1/2}$$

$$K_3 = K_{p3}d^{1/2}$$

$$K_4 = K_{p4}d^{1/2}$$

$$K_5 = K_{p5}d$$

$$K_6 = K_{p6}d$$

(2) 式~(12) 式を K₀ × (N_C - n_{CO}) / n_{CO} = t と置いて解くことにより N_O = f(K, t) とできる。t を仮定して算出した N_O と実際の N_O を比較することにより t を決定し、各生成ガスモル数 n_i を求め得る。次

昭和44年5月15日受理

• 日本油脂株式会社豊島工場 愛知県知多郡武豊町字西門82

に燃焼温度 T は断熱火炎温度 T_c として下記の条件で規定される。

$$(-\Delta H_f)_p - (-\Delta H_f)_r = \sum n_i \int_{298.16}^{T_c} C_{pi} dT \quad (13)$$

ここで $(-\Delta H_f)_p$ は推進薬の 298.16°K における 1 kg 当たりの生成熱、 $(-\Delta H_f)_r$ は全生成系の 298.16°K における 1 kg 当たりの生成熱、 $\sum n_i \int_{298.16}^{T_c} C_{pi} dT$ は全生成系の 298.16°K から T_c °K までの 1 kg 当たりのエンタルピー変化である。(13) 式が成立するまで試行錯誤をくり返し真の温度 T を求める。

こうして T および n_g を求めた上で下式により比熱比 γ を求める。

$$\gamma = \frac{\sum n_i C_{pi}}{\sum n_i C_{vi}}$$

ここで C_{pi} 、 C_{vi} は各々ガス生成物の定圧比熱および定容比熱である。次に下式により液体、固体生成物の重量分率 ϵ を求めると、

$$\epsilon = \frac{\sum M_i n_{li}}{1000}$$

ただし M_i 、 n_{li} は液体、固体生成物の分子量および生成モル数。

平均ガス分子量 M_g は次式で表わされる。

$$M_g = 1000(1 - \epsilon) / n_g$$

以上の T 、 M_g 、 γ を用いることにより理論比推力は次のように表わすことができる。

$$I_{sp} = \sqrt{1 - \epsilon} \sqrt{\frac{2\gamma}{g(\gamma - 1)} \cdot \frac{R_0 T}{M_g} \cdot \left[1 - \left(\frac{P_e}{P_c} \right)^{\frac{\gamma - 1}{\gamma}} \right]}$$

ここで g : 重力加速度 R_0 : 一般ガス定数

P_e : ノズル出口圧力 P_c : 燃焼室圧力

3. コンピュータープログラム

前節で行なつた計算法を次のような HIPAC 103 コンピュータープログラムに組んだ。

‡ No. 18

DIMENSION D1(9), D7(9), D8(9), D9(9), ↓
DA(9), X7(9), X8(9), X9(9), ↓
X10(9), Z1(13), TT(20)

DIMENSION Z2(13), Z3(13), Z4(13), S(13), ↓
V(11), Y1(11), Y2(11), Y3(11), ↓
Y4(11), H(13)

READ 1, (D7(1), D8(1), D9(1), DA(1), I ↓
= 1, 7), (X7(1), X8(1), X9(1),
X10(1), I=1, 5)

READ 1, (Z1(1), Z2(1), Z3(1), Z4(1), I=1, 13), ↓
(Y1(1), Y2(1), Y3(1), Y4(1), I=1, 11)

STOP

READ 0, L, LL

99 READ 1, B1, B2, B3, B4, B5, B6, Q1

TYPE 5

DO 10 I=L, LL

P=10 * I

IF (B3-B1-B2/2.) 61, 61, 60

60 G=B1/2. +B2/4. +B3/2. +B4/2. +B5

GO TO 62

61 G=B1+B2/2. +B4/2. +B5

62 DO 20 J=1, 100

IF (L-I) 230, 24, 24

24 T=3490-100 * J

GO TO 25

230 T=TT(I-1)

25 T1=0.1

21 T=T+9.

22 T=T+1.

78 D=G/P

SQ=SQRTF(D)

DO 80 KK=1, 2

80 D1(KK)=(D7(KK) * T * 1. E6-D8(KK) ↓
* T ** 2 * 1. E3+D9(KK) * T ** 3)/1. E9 ↓
-DA(KK)

IF (T-3000.) 65, 65, 66

65 DO 810 KK=3, 7

810 D1(KK)=(D7(KK) * T * 1. E6-D8(KK) * ↓
T ** 2 * 1. E3+D9(KK) * T ** 3)/1. E9 ↓
-DA(KK)

GO TO 31

66 DO 820 KJ=1, 5

KK=KJ+2

820 D1(KK)=(X7(KJ) * T * 1. E6 ↓
-X8(KJ) * T ** 2 * 1. E3 ↓
+X9(KJ) * T ** 3)/1. E9 ↓
-X10(KJ)

31 E1=(SQRTF((D1(4) * SQ * T1 ↓
+D1(5) * SQ) ** 2+8. * B4) ↓
-D1(4) * SQ * T1 ↓
-D1(5) * SQ) * 0.25

E2=(SQRTF((D1(2) * SQ ↓
+D1(3) * SQ * T1) ** 2 ↓
+8. * (1. +T1) * B2)-D1(2) * SQ ↓
-D1(3) * SQ * T1)/(4. * (1. +T1))

E3=T1 * (D1(6) * D+(D1(3) * SQ+E2) ↓
* E2+D1(4) * SQ * E1 ↓
+2. * D1(7) * D * T1) ↓
-D1(1) * B1/(T1+D1(1))+2. * B1

BB=B3-E3

IF (ABS(BB/B3)-0.005) 71, 71, 70

```

70 IF (BB) 72, 72, 300
72 T1=T1-0.01
   GO TO 31
300 T1=T1+0.1
   GO TO 31
71 G1=T1 * ((E2+D1(3) * SQ) * E2 ↓
   +D1(7) * D * T1+D1(6) * D ↓
   +D1(4) * SQ * E1) ↓
   +(D1(5) * SQ+E1) * E1 ↓
   +(D1(2) * SQ+E2) * E2+B1+B5
   IF (ABSF((G-G1)/G)-0.005) 73, 73, 74
74 IF (G-G1) 75, 75, 76
75 T1=T1-0.01
   G=G1
   GO TO 78
76 T1=T1+0.01
   G=G1
   GO TO 78
73 S(1)=E2 ** 2
   S(2)=B1 * D1(1)/(D1(1)+T1)
   S(3)=B1-S(2)
   S(4)=T1 * S(1)
   S(5)=E1 ** 2
   S(6)=D1(2) * SQ * E2
   S(7)=D1(5) * SQ * E1
   S(8)=D1(7) * D * T1 ** 2
   S(9)=D1(6) * D * T1
   S(10)=D1(4) * SQ * T1 * E1
   S(11)=D1(3) * SQ * T1 * E2
   S(12)=B5
   S(13)=S(6)
   Q2=26.84 * S(2)+94.45 * S(3) ↓
   +57.8 * S(4)-51.9 * S(6)-85.1 * S(7) ↓
   -59.1 * S(9)-21.6 * S(10) ↓
   +5.93 * S(11)+21.89 * B5+380.8 * B6
   DO 85 KK=1, 13
85 H(KK)=((Z1(KK) * T * 1.E6 ↓
   +Z2(KK) * T ** 2 * 1.E3 ↓
   +Z3(KK) * T ** 3/1.E9 ↓
   -Z4(KK)) * S(KK)
   Q3=0.
   DO 86 KK=1, 13
86 Q3=Q3+H(KK)
   Q4=Q2-Q1-Q3
   IF(ABSF(Q4/Q3)-0.005) 82, 82, 81
81 IF(ABSF(Q4/Q3)-0.01) 23, 23, 83
83 IF (Q4) 20, 21, 21

```

```

23 IF (Q4) 84, 22, 22
84 T=T-2.
   GO TO 22
20 CONTINUE
82 S(6)=S(7)
   S(7)=S(8)
   S(8)=S(9)
   S(9)=S(10)
   S(10)=S(11)
   S(11)=B5
   DO 90 KK=1, 11
90 V(KK)=((Y1(KK) * T * 1.E6 ↓
   +Y2(KK) * T ** 2 * 1.E3 ↓
   +Y3(KK) * T ** 3)/1.E9 ↓
   -Y4(KK)) * S(KK)
   Q5=0.
   DO 91 KK=1, 11
91 Q5=Q5+V(KK)
   R=1./(1.-1.987 * E3/(Q5+4.968 * S(6)))
   TT(I)=T
   SS=0.10196 * B6
   U=(1.-SS) * 1000./G1
   W=SQRTF(R/(R-1.)) * 169.68 * ↓
   (1.-(1./P) ** ((R-1.)/R)) * T * ↓
   (1.-SS)/U
   TYPE3,P,T,W,R,Q3,SS,U,G1,(S(KK),KK ↓
   =1,11),S(13)
3 FORMAT(F5.,F7.,F7.1,F7.3,F7.,F7.3, ↓
2F7.2,F8.2,F6.2,F5.2,F6.2,3F5.2,F6.2,4F5.2)
10 CONTINUE
   TYPE 4
4 FORMAT(////)
5 FORMAT(2X,HP,5X,HT,5X3HISP,5X,H7 ↓
6X,HQ,6X,He,6X,2HMg,5X,2HNg,6X, ↓
2HH2,5X,2HCO,2X,3HCO2,3X,3HH2O3X, ↓
2HN2,3X,HN,4X,2HO2,4X,HO,4X, ↓
2HNO,3X,2HOH,2X,3HHCL,3X,HH/)
   GO TO 99
   END

```

ここで N_C , N_H , N_O , N_N , N_G , N_S および $(-dH_f)_p$ は各々 B_1 , B_2 , B_3 , B_4 , B_5 , B_6 および Q_1 としてインプットされる。また、圧力平衡定数 K_p , 生成系物質のエンタルピー変化および定圧比熱 C_p は、 $D_1(KK)$, $H(KK)$, $V(KK)$ のような温度に関する3次式として表わしそれらの係数をインプットする。このプログラムから求め得るのは任意の 10kg/cm^2 間隔の圧力における燃焼温度 T ($^{\circ}\text{K}$), 比推力 I_{sp}

(sec), 比熱比 γ , 燃焼熱 Q (Kcal/kg), アルミナ (Al_2O_3) の重量分率 ϵ , 平均ガス分子量 M_g (g/mol), 全生成ガスモル数 n_g (mol/kg) および CO_2 , CO , H_2O , H_2 , N_2 , O_2 , O , H , N , OH , NO , HCl の各生成ガスモル数 n_i (mol/kg) である。

4. 計算例

計算例として現在もつとも広く使用されているブタジエン系コンポジット推進薬をとる。そのバインダー分は分子式 $C_{335}H_{1330}O_{232}N_{33}$ (分子量 5223) をもつものとする。生成熱 ($-\Delta H_f$)_p は 437 Kcal/kg となり, 1 kg 当たりの原子数は次のようになる。

C	68.47
H	101.5
O	4.283
N	0.638

このバインダー分および過塩素酸アンモン, アルミニウムの3成分からなるコンポジット推進薬について表1に示すような組成を考える。

表1 ブタジエン系推進薬の組成

組成番号	バインダー分	過塩素酸アンモン	Al
A-1	18	77	5
A-2	16	79	5
A-3	18	74.5	7.5
A-4	18	72	10

(重量%)

ここで組成番号 A-1 のものについて諸燃焼特性値を

表2 A-1 の諸燃焼特性値

P_c (kg/cm ²)	T (°K)	I_{sp} (sec)	γ (-)	Q (Kcal/kg)	ϵ (-)	M_g (g/mol)	n_g (mol/kg)
30	2753	225.5	1.140	904	0.095	23.13	39.15
40	2786	234.2	1.140	910	0.095	23.16	39.10
50	2805	240.5	1.139	913	0.095	23.17	39.07
60	2819	245.3	1.139	915	0.095	23.19	39.05
70	2829	249.2	1.139	917	0.095	23.20	39.03
80	2839	252.6	1.139	919	0.095	23.21	39.02
90	2849	255.5	1.139	921	0.095	23.22	39.00
100	2859	258.2	1.139	924	0.095	23.22	38.99
110	2869	260.6	1.139	927	0.095	23.22	38.99
120	2879	262.9	1.139	930	0.095	23.23	38.98
130	2882	264.6	1.138	930	0.095	23.23	38.97
140	2885	266.2	1.138	931	0.095	23.24	38.97
150	2888	267.7	1.138	931	0.095	23.24	38.96

コンピューター計算により求めてみる。推進薬 1 kg 当たりの原子数および生成熱は次のようである。

N_C	12.33
N_H	37.91
N_O	24.16
N_N	6.668
N_G	6.553 (HCl)
N_S	0.927 (Al_2O_3)
$(-\Delta H_f)_p$	590.7 Kcal/kg

このデータをコンピューターに入れ, 圧力を 30 kg/cm² から 150 kg/cm² の範囲で 10 kg/cm² 間隔に求めた諸特性値の計算結果が表2, 表3である。(ただし

表3 A-1 の生成ガスモル数 n_i (mol/kg)

P_c (kg/cm ²)	n_{H_2}	n_{CO}	n_{CO_2}	n_{H_2O}	n_{N_2}	n_N	n_{O_2}	n_O	n_{NO}	n_{OH}	n_{HCl}	n_H
30	8.55	10.58	1.75	10.08	0.92	0	0	0	0	0.07	6.55	0.58
40	8.57	10.60	1.73	10.11	0.92	0	0	0	0	0.07	6.55	0.48
50	8.58	10.61	1.72	10.13	0.92	0	0	0	0	0.07	6.55	0.42
60	8.59	10.61	1.72	10.14	0.92	0	0	0	0	0.07	6.55	0.38
70	8.60	10.62	1.71	10.15	0.92	0	0	0	0	0.07	6.55	0.35
80	8.60	10.62	1.71	10.15	0.92	0	0	0	0	0.07	6.55	0.32
90	8.61	10.63	1.70	10.16	0.92	0	0	0	0	0.07	6.55	0.30
100	8.61	10.63	1.70	10.16	0.92	0	0	0	0	0.06	6.55	0.28
110	8.62	10.64	1.69	10.17	0.92	0	0	0	0	0.06	6.55	0.27
120	8.62	10.64	1.69	10.17	0.92	0	0	0	0	0.06	6.55	0.26
130	8.62	10.64	1.69	10.17	0.92	0	0	0	0	0.06	6.55	0.25
140	8.62	10.64	1.69	10.18	0.92	0	0	0	0	0.06	6.55	0.24
150	8.63	10.65	1.68	10.18	0.92	0	0	0	0	0.06	6.55	0.23

表 4 プタジエン系推進薬の諸燃焼特性値

特性値	P_c (kg/cm ²)	A-1	A-2	A-3	A-4
T (°K)	50	2805	3033	2988	3133
	70	2829	3053	3018	3158
	100	2859	3083	3048	3188
I_{sp} (sec)	50	240.5	243.6	248.5	254.9
	70	249.2	252.1	257.8	264.4
	100	258.2	261.0	267.2	274.0
γ (-)	50	1.139	1.144	1.129	1.120
	70	1.139	1.144	1.129	1.119
	100	1.139	1.144	1.129	1.119
Q (Kcal/kg)	50	913	981	958	1000
	70	917	985	966	1003
	100	924	994	974	1009
ϵ (-)	-	0.095	0.095	0.142	0.189
	50	23.17	24.25	22.22	21.21
	70	23.20	24.28	22.25	21.24
n_g (mol/kg)	50	39.07	37.33	38.63	38.23
	70	39.03	37.30	38.57	38.18
	100	38.99	37.27	38.55	38.14

$P_c = 1 \text{ kg/cm}^2$ とする.)

更にA-1からA-4までの4組成について $P_c = 50, 70, 100 \text{ kg/cm}^2$ における各諸燃焼特性値をまとめたものが表4である。

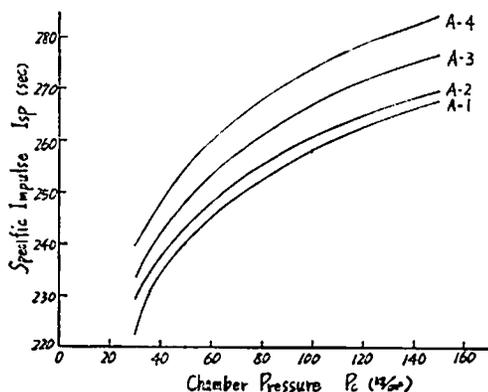


Fig. 1 Variation of the specific impulse I_{sp} as a function of the chamber pressure P_c .

また比推力 I_{sp} , 燃焼温度 T , 平均ガス分子量 M_g の燃焼室圧力 P_c による変化をプロットしたものが各々 Fig. 1, Fig. 2, Fig. 3 である。

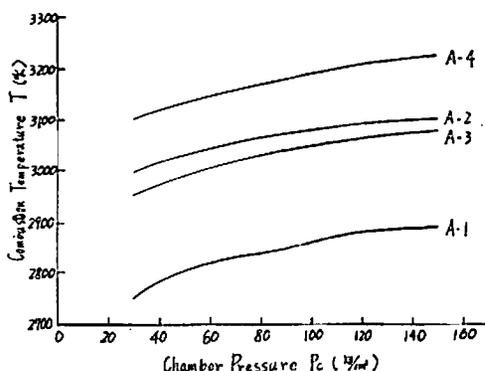


Fig. 2 Variation of the combustion temperature T as a function of the chamber pressure P_c .

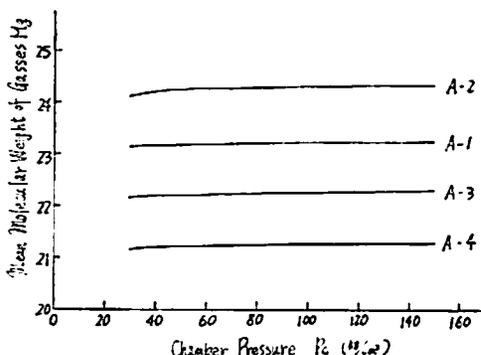


Fig. 3 Variation of the mean molecular weight of gasses M_g as a function of the chamber pressure P_c .

5. まとめ

(1) 本報告は C, H, O, N, Cl, Al 系よりなる推進薬のコンピューターによる諸燃焼特性値, 特に比推力の算出法を述べたものであり, 文中の計算例ではプタジエン系推進薬について行なつたが, 一般にバインダーとして C, H, O, N 系のポリマー, 酸化剤として過塩素酸アンモン, 金属燃料として Al を用いるすべてのコンポジット推進薬にこの方法を適用できる。

(2) 本報告に使用した圧力平衡定数の温度に関する3次式は C. Napoly らの数値表²⁾から, 生成系物質のエンタルピー変化および定圧比熱の温度に関する3次式は JANAF の数値表³⁾からの値を用いて最小2乗法により求めた。これらの3次式が成立する温度範囲は 2000°K から 4000°K までである。

(3) 比推力計算にあつては次の仮定を設けた。反応は熱力学的に断熱平衡であり, ノズル内においては完全ガス則に従う燃焼ガスが一次元, 定常, 等エン

トロピ一の凍結フローを行なう。そして液体、固体生成物が存在することによる比推力の低下は、M. Barrère らの修正係数 σ を用いる簡便法³⁾によりなされた。従つて Al の多い組成においては σ を正規に求めた値に比べてある程度のずれが生ずるであろう。

(4) Fig. 2, Fig. 3, 表4から明らかなように、 P_c に対する T の変動に対し M_0 の変動は小である。また γ はほとんど変化はしない。従つて圧力に対する比推力の変化にもつとも効いているのは燃焼温度である。

(5) 現在までに発表されてきたいかなる計算法にせよある程度の試行錯誤法を含むので、手計算で行なうには時間がかかりすぎる。本報告のプログラムはそれを解決するためにたてたものであり、本質的には手計算的手法に則つて構成されている。従つて今後の課題としてよりコンピューターに適したプログラミングを行なう事およびより詳細な燃焼特性値計算法をプログラムすることがあげられる。またこのプログラムを利

用することにより K. Klager らの行なつたような組成と比推力の関連図¹⁾を求め得るのも一つの利点であろう。

文 献

- 1) K. Klager, et al., "Mechanics and Chemistry of Solid Propellants", Pergamon Press, London, 1967, p. 53
- 2) S. S. Penner, "Chemistry Problems in Jet Propulsion", Pergamon Press, London, 1957, p. 148
- 3) C. Napoly, et al., "Évaluation des Performance Théoriques des Propergols", Mémorial des Poudres, 43, 1961, p. 295
- 4) JANAF, Thermochemical Tables, PB 168370 Aug., 1965
- 5) M. Barrère, et al., "Rocket Propulsion", Elsevier Publishing, Amsterdam, 1960, p. 107

HIPAC 103 Computation of Specific Impulse of Rocket Propellants

by M. Takizuka, M. Araki and K. Kito

This report offers a HIPAC 103 computer program for computation of performance, especially specific impulse, of the rocket propellant containing C, H, O, N, Cl and Al. This program was applied to the polybutadiene propellant as the examples. Using these results, the effect of the combustion temperature, the mean molecular weight of gasses and the specific heat ratio on the specific impulse was discussed. This program is found to be useful to obtain the relation between the specific impulse and the propellant formulation.

(Nippon Oils & Fats Co., Ltd., Taketoyo Plant, Aichi)