

状態方程式と輸送係数式の実流体物性との比較

秋村 友香*

Comparison with Actual Fluid Properties of the Equation of State
and a Transfer Coefficient Approximate Expression

Yuka Akimura*

本稿では、気体の状態方程式としてよく知られる理想気体式、van der Waals 式、Peng Robinson 式[1] および物性計算プログラム REFPROP[2]の物性値の比較を行った。また、定圧比熱、粘性、熱伝導率を温度多項式近似によって定式化し、REFPROP との比較を行った。状態方程式および温度多項式中のパラメータを産業界で使用頻度の高い 21 種類の物質に対してまとめ、そのうち、水素、メタン、二酸化炭素、水蒸気について物性値を図示し、状態方程式や温度多項式近似の適用性について検討を行った。

Key word: 流体解析、物性、状態方程式、理想気体、実在流体物性

1. はじめに

流体解析では、状態方程式、熱力学的物性値および輸送係数が重要なファクターである。状態方程式は、圧力、温度と密度の関係を表すものであり、圧力は流れ場と相互に影響合い、温度は主に外界との伝熱によって変化し、圧力や温度が状態方程式を通じて密度に影響する。粘性は流体の摩擦に影響し、熱伝導率は構造物への伝熱に影響する。物性の精度は流体解析の精度の大部分を占めるといえる。

管路系流体過渡解析ソフトウェア Advance/ FrontNet/Γ では、物性計算プログラム REFPROP を使用して作成した実在流体物性を数値参照することができるが、これとは別に、数値参照ではなく関数を仮定した状態方程式や物性を使用することができると、物性の拡張性や多成分混合ガス計算への応用性、また、計算時間の上でメリットがある。さらに、ソフトウェアの開発を進めていく上で2つの方法の相互チェックができることは大きなメリットである。

本稿では、関数を仮定する状態方程式の形として、よく知られている理想気体式をはじめ、

van der Waals 式、Peng Robinson 式の3つの関数を採用し、密度を REFPROP と比較し、特性を調べる。

燃焼反応や化学反応の解析ソフトウェアとして知られる CHEMKIN[3]では、比熱や粘性などの輸送係数の圧力依存性を無視し、温度多項式として近似するモデルを採用している。また、NASA の化学平衡反応計算(CEA)でも、温度多項式が採用されている[4]。本稿では、比熱、粘性、熱伝導率の温度多項式近似の関数系を採用し、REFPROP と比較する。

状態方程式および温度多項式の関数の中では複数のパラメータが必要であるが、産業界でよく使用される流体純物質 21 種類をピックアップしてまとめた。これらは Advance/ FrontNet/Γ の推奨パラメータとして使用可能である。

2. 関数を使用した物性の定式化

2.1. 状態方程式

ここでは、圧力が密度および温度に比例する関数形の状態方程式を3つに分類する。最も単純な形である「理想気体」、分子間力を考慮した「van der Waals」、および超臨界状態まで拡張した「Peng Robinson」の3つである。数式は以下となる[1]。

*アドバンスソフト株式会社 第3事業部

3rd Computational Science and Engineering Group, AdvanceSoft Corporation

① 理想気体の式

$$p = \rho RT \quad (1)$$

② van der Waals の式

$$p = \frac{\rho T}{1 - b\rho} R - a\rho^2 \quad (2)$$

③ Peng Robinson の式

$$p = \frac{\rho T}{1 - b\rho} R - a\rho^2 / (1 + 2b\rho - b^2\rho^2) \quad (3)$$

P は圧力[Pa-abs]、 T は温度[K]、 ρ は密度[kg/m³]である。 R は気体定数[J/kgK]であり、以下の関係があることに注意する。

$$R = \frac{R^*}{M} \quad (4)$$

ここで、 R^* は一般気体定数 8.3144598[J/mol K]、 M は気体の分子量[kg/mol]である。パラメータ a 、 b は以下のように表される。

$$a = a_c D(T)$$

$$a_c = 0.4572 (RT_c)^2 / P_c = \text{const.}$$

$$D^{0.5} = 1 + m \left[1 - (T/T_c)^{0.5} \right] = D(T) \quad (5)$$

$$m = 0.37464 + 1.54226 \omega - 0.26992 \omega^2 = m(\omega) = \text{const.}$$

$$b = 0.0778 RT_c / P_c = \text{const.}$$

T_c は臨界温度[K]、 P_c は臨界圧力[Pa-abs]を表す。 ω は偏心因子[-]と呼ばれ、次の式で定義される[5]。

$$\omega = -1 - \log_{10} (P_{sat07} / P_c) \quad (6)$$

ここで、 P_{sat07} は温度が $0.7 \times T_c$ のときのガスの飽和圧力[Pa-abs]である。偏心因子は分子の形状や極性を表現するパラメータである。これらのパラメータは 0 章にまとめる。

2.2. 比熱および比エンタルピー

特に気体領域では、比熱の圧力依存性は小さいと近似して温度のみの関数として扱われることが多い。ここでは文献[6]に従い、比熱を温度の 4 次の多項式で近似することとする。

$$\frac{C_p}{R} = a_0 + a_1 T + a_2 T^2 + a_3 T^3 + a_4 T^4 \quad (7)$$

ここで、単位は C_p [J/kgK]である。

比エンタルピー h [J/kg]は次のように表される。

$$\frac{h}{RT} = a_0 + a_1 \frac{T}{2} + a_2 \frac{T^2}{3} + a_3 \frac{T^3}{4} + a_4 \frac{T^4}{5} + \frac{b_1}{T} \quad (8)$$

ここでパラメータ $a_0 \sim a_4$ および b_1 は物質によって異なる。これらのパラメータは 0 章にまとめる。

一般に、比エンタルピーの基準は 0°C、1 気圧や 25°C、1 気圧に取られることが多く、文献[6][7]では 25°C を基準としている。 b_1 はエンタルピー基準に関するパラメータである。Advance/FrontNet/T では計算時間の関係で 0°C を基準とし、正の比エンタルピーを扱う。

2.3. 粘性、熱伝導率

前節と同様に文献[6]および[7]に従って粘性 μ と熱伝導率 κ を以下の関数形で表す。

$$\ln \mu = A \ln T + \frac{B}{T} + \frac{C}{T^2} + D \quad (9)$$

$$\ln \kappa = A \ln T + \frac{B}{T} + \frac{C}{T^2} + D \quad (10)$$

ここで、パラメータ $A \sim D$ は物質によって異なる。文献[6]および[7]では粘性の単位を[P]、熱伝導率の単位を[μW/cmK]としているが、本稿ではこれにそれぞれ 10^{-7} 、 10^{-4} を乗じて粘性は[Pas]、熱伝導率は[W/mK]の単位を使用する。パラメータ $A \sim D$ の具体的な数値は 0 章にまとめる。

3. モデル検証と REFPROP 物性との比較

文献[6][7]に載っている複数の純物質のパラメータのうち、実用的に使用頻度の高い 21 種類の純物質をピックアップした。21 種類の純物質名とそれらの臨界圧力および臨界温度を表 1 にまとめる。分子量などの詳細は表 2 に付録としてまとめた。本書ではこのうち、水素、メタン、二酸化炭素、水蒸気の 4 種類について、密度、比エンタルピー、粘性、熱伝導率を REFPROP と比較する。

表 1 21 種類の純物質の臨界圧力、臨界温度

日本語名	P _c [Pa-abs]	T _c [K]
アルゴン	4.863600E+06	1.507000E+02
メタン	4.600155E+06	1.906000E+02
一酸化炭素	3.495713E+06	1.329000E+02
二酸化炭素	7.376460E+06	3.041000E+02
エタン	4.883865E+06	3.055000E+02
エタノール	6.360000E+06	5.158000E+02
プロパン	4.245518E+06	3.698000E+02
ブタン _i	3.640000E+06	4.078000E+02
ブタン _n	3.796000E+06	4.251200E+02
水素	1.296960E+06	3.320000E+01
水蒸気	2.211925E+07	6.474000E+02
硫化水素	8.962900E+06	3.735300E+02
ヘリウム	2.275000E+05	5.200000E+00
アンモニア	1.128000E+07	4.056000E+02
一酸化窒素	6.480000E+06	1.801500E+02
窒素	3.394387E+06	1.262000E+02
亜酸化窒素	7.245000E+06	3.095700E+02
酸素	5.045985E+06	1.540000E+02
二酸化硫黄	7.900000E+06	4.300000E+02
硫黄	1.175000E+07	1.313100E+03
プロピレン	4.620420E+06	3.650000E+02

3.1 節に水素に対する計算結果をまとめた。図 1 は大気圧に対する密度を表している。他のモデルに比べ Peng Robinson 式が大きく外れていることが分かる。図 2 は 1MPa における密度を表す。4 本の線はほぼ一致した。図 3 は 10MPa における密度を表す。4 つのモデルはほぼ同様の振る舞いとなった。図 4 は定圧比熱である。多項式が大きくうねる傾向にあることが分かる。図 5 は粘性であり、多項式と REFPROP は一致した。図 6 は熱伝導率である。高温で多項式が REFPROP からずれる傾向にあることが確認できる。

3.2 節にメタンに対する計算結果をまとめた。図 7 は大気圧に対する密度、図 8 は 1MPa における密度である。4 つの線はほぼ一致している。図 9 は 10MPa における密度を表す。メタンの臨界圧力が 4.6MPa であり、これを超えているため、理想

気体、van der Waals 式、Peng Robinson 式に差が出ているが傾向は REFPROP と同様となった。図 10 は定圧比熱、図 11 は粘性、図 12 は熱伝導率であるが、多項式とそれぞれの REFPROP の傾向はほぼ等しくなった。

3.3 節に二酸化炭素に対する計算結果をまとめた。図 13 は大気圧に対する密度、図 14 は 1MPa における密度である。4 本の線はほぼ一致した。図 15 は 10MPa における密度を表す。二酸化炭素の臨界圧力は 7.4MPa であり、臨界温度付近で REFPROP は密度が大きくなっている。図 16 は定圧比熱、図 17 は粘性、図 18 は熱伝導率である。多項式は REFPROP(1atm, 1MPa) とほぼ一致した。REFPROP(10MPa) については臨界温度に近い部分について傾向が大きく外れている。

3.4 節に水蒸気に対する計算結果をまとめた。図 19 は大気圧に対する密度である。REFPROP では液体領域が示されている。気体の領域では 4 本の線はほぼ一致している。これは 1MPa の密度(図 20) に対しても同様の傾向である。圧力が 10MPa になると、図 21 に示すように、理想気体、van der Waals 式、Peng Robinson 式に差が出ている。図 22 は定圧比熱である。多項式は気体領域において REFPROP(1atm) と一致している。REFPROP(10MPa) は温度の臨界点付近で特異な振る舞いを示している。図 23 は粘性、図 24 は熱伝導率であるが、定圧比熱と同様に、多項式は気体領域において REFPROP とほぼ一致した。

3.1. 水素($P_c=1.3\text{MPa}$, $T_c=33\text{K}$)

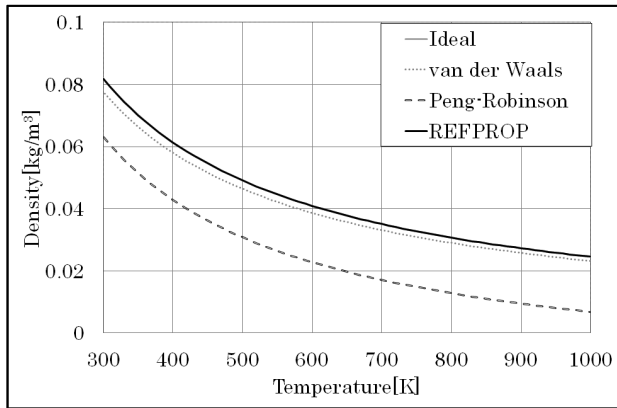


図 1 密度 (圧力=101325Pa-abs)

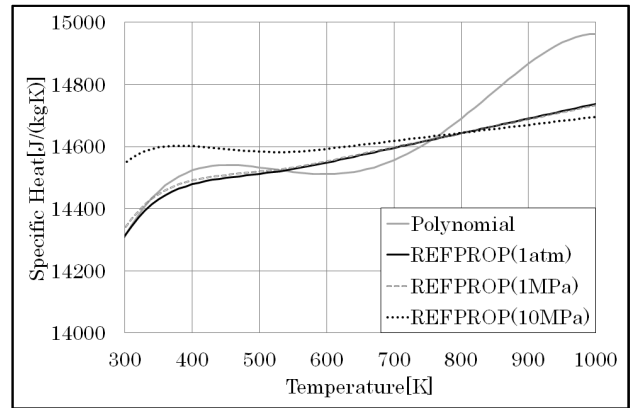


図 4 定圧比熱

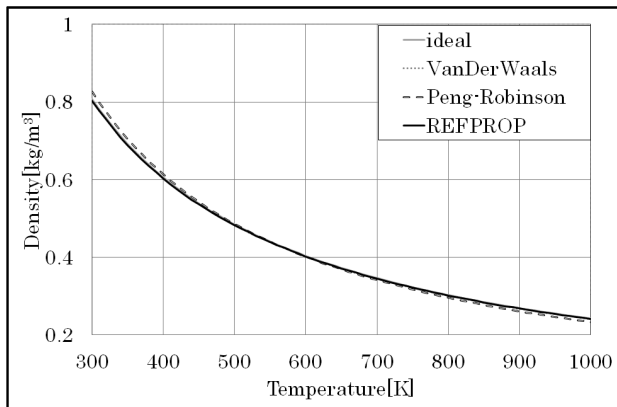


図 2 密度 (圧力=1MPa-abs)

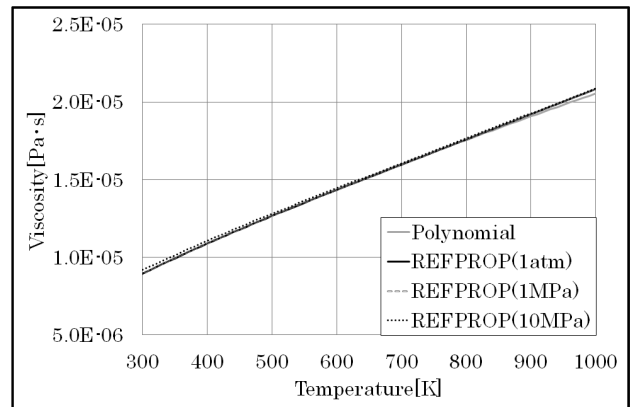


図 5 粘性

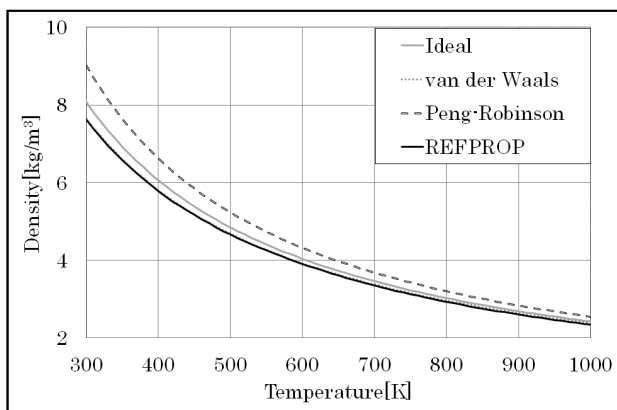


図 3 密度 (圧力=10MPa-abs)

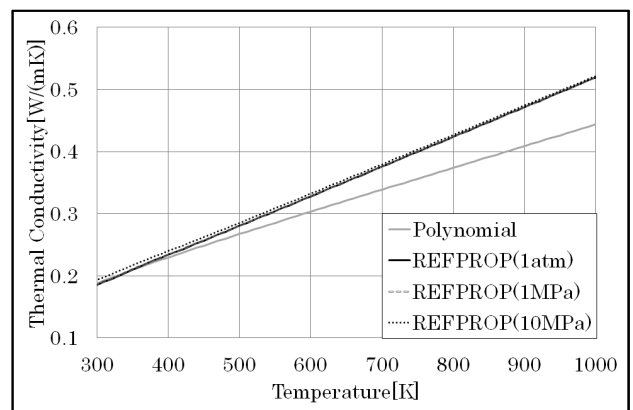


図 6 熱伝導率

3.2. メタン($P_c=4.6\text{MPa}$, $T_c=190\text{K}$)

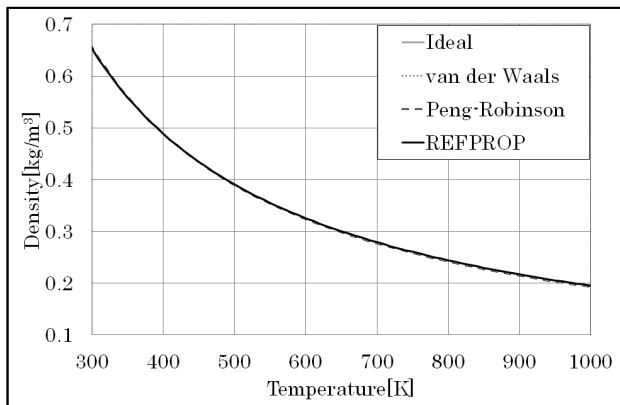


図 7 密度 (圧力=101325Pa-abs)

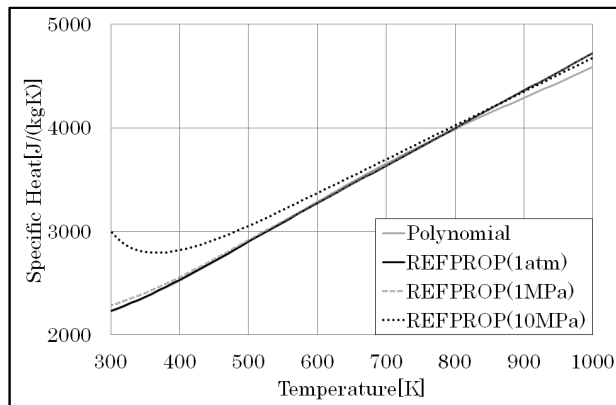


図 10 定圧比熱

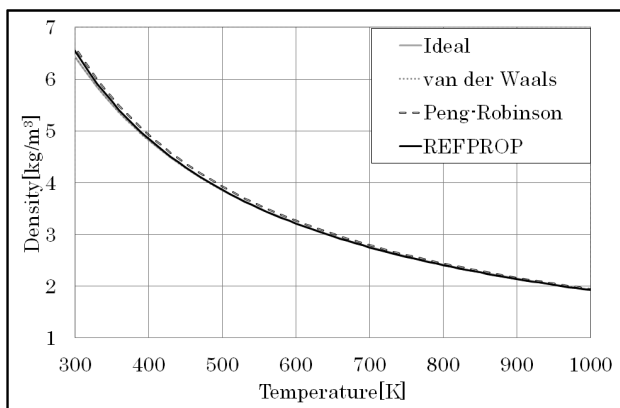


図 8 密度 (圧力=1MPa-abs)

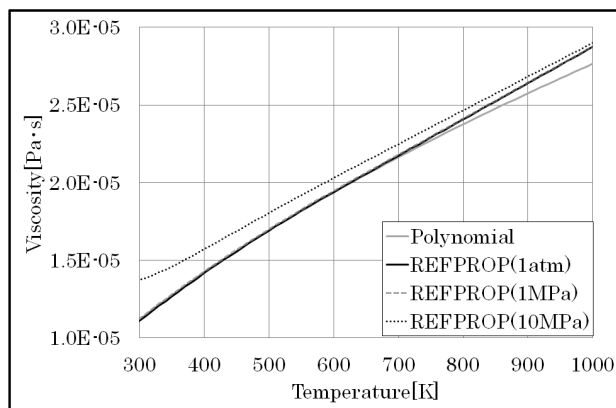


図 11 粘性

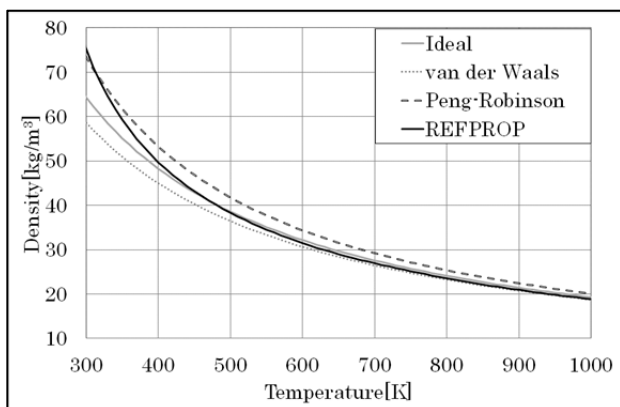


図 9 密度 (圧力=10MPa-abs)

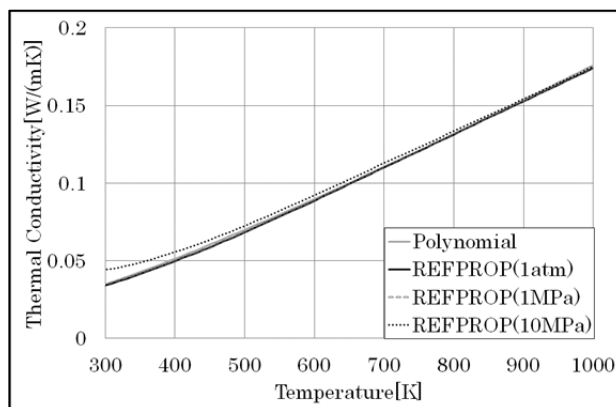


図 12 熱伝導率

3.3. 二酸化炭素($P_c=7.4\text{MPa}$, $T_c=304\text{K}$)

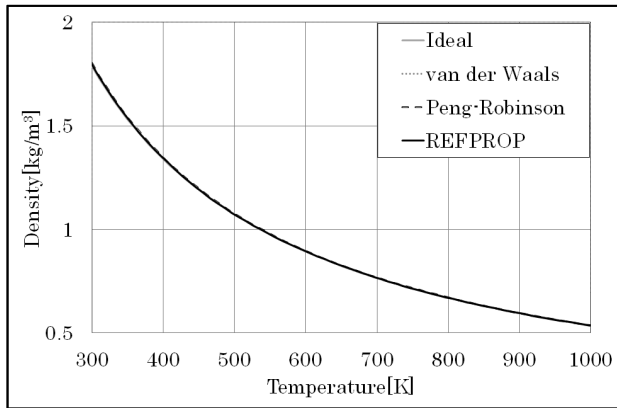


図 13 密度 (圧力=101325Pa-abs)

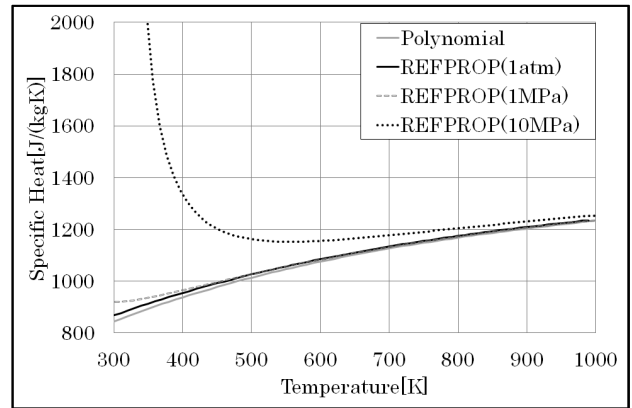


図 16 定圧比熱

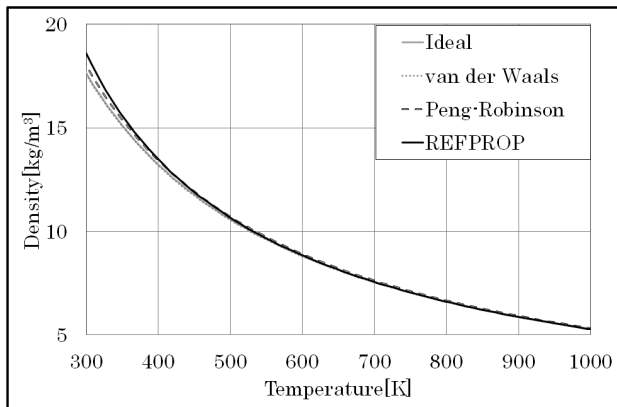


図 14 密度 (圧力=1MPa-abs)

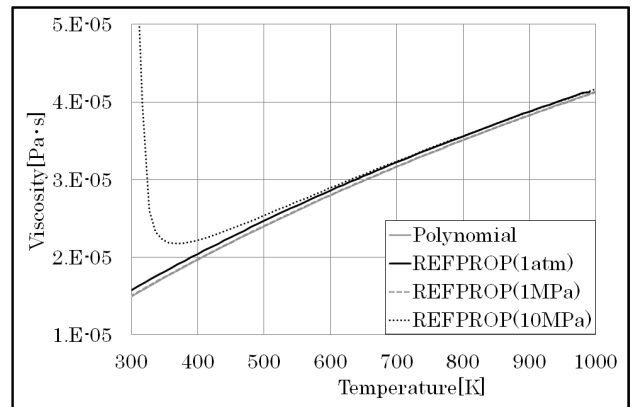


図 17 粘性

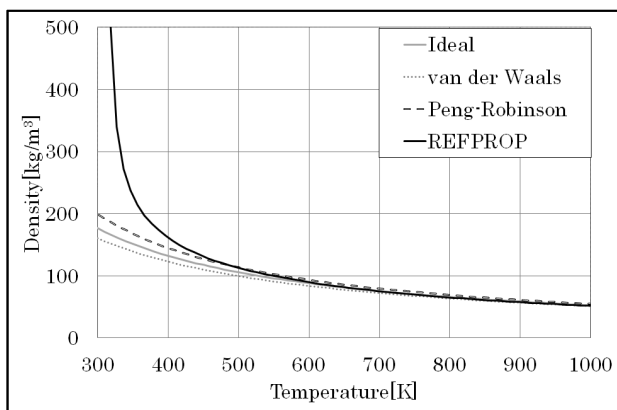


図 15 密度 (圧力=10MPa-abs)

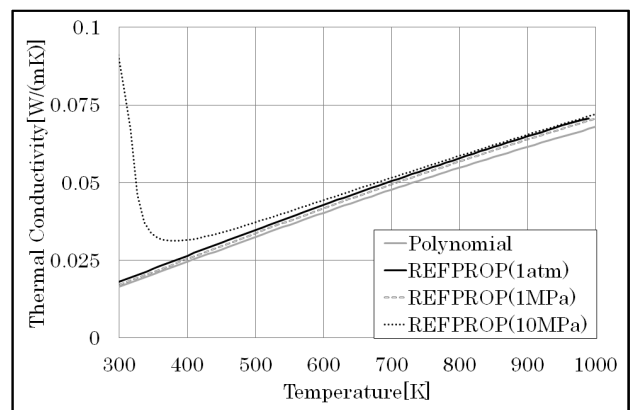


図 18 熱伝導率

3.4. 水蒸気($P_c=22\text{MPa}$, $T_c=647\text{K}$)

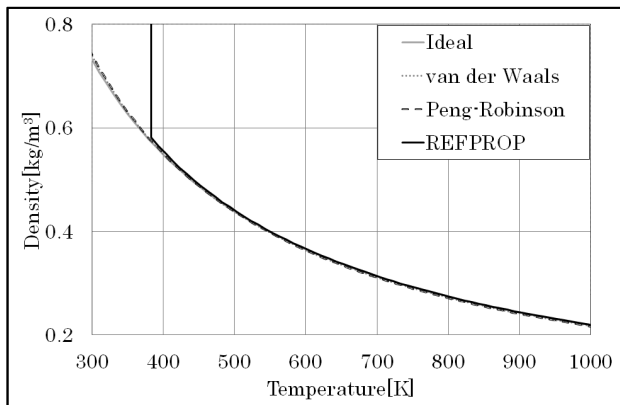


図 19 密度 (圧力=101325Pa-abs)

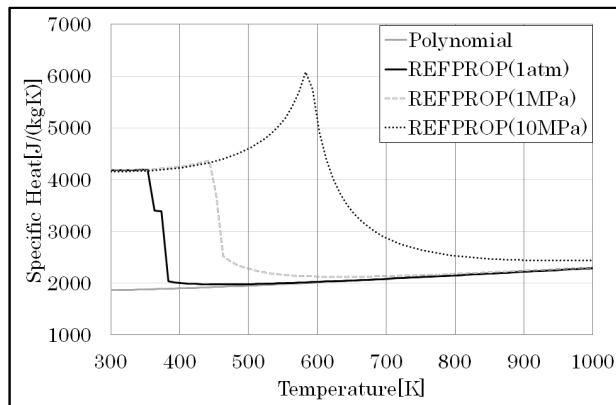


図 22 定圧比熱

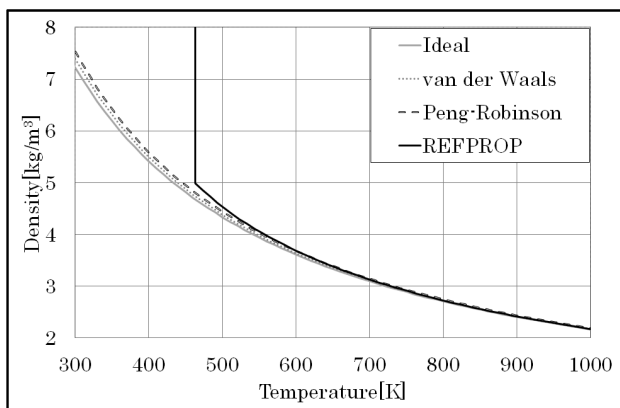


図 20 密度 (圧力=1MPa-abs)

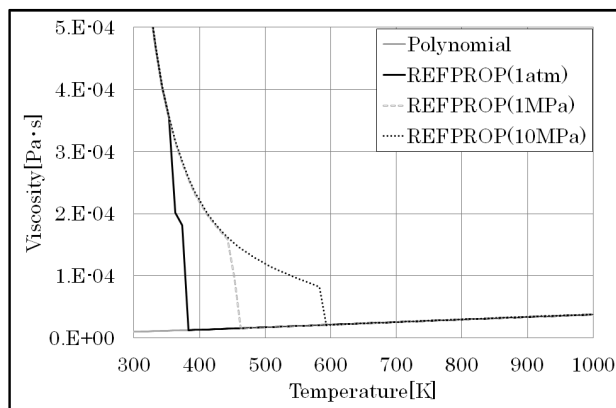


図 23 粘性

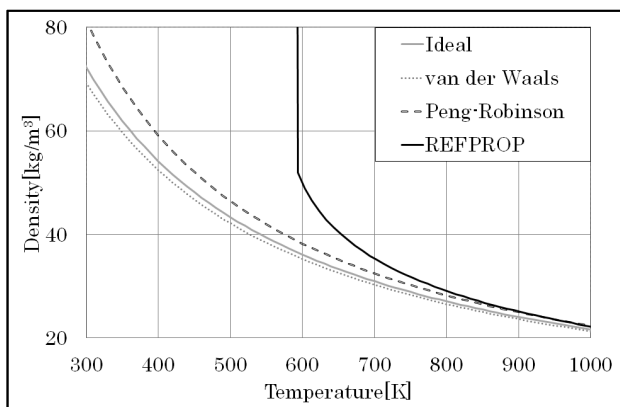


図 21 密度 (圧力=10MPa-abs)

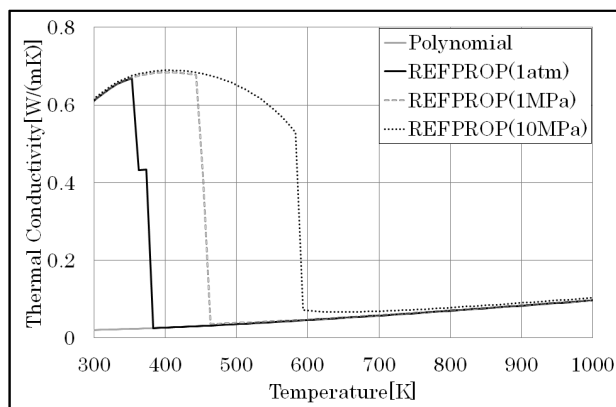


図 24 熱伝導率

4. まとめ

気体に関する3つの状態方程式のパラメータをまとめ、4種類の純物質について圧力、温度と密度の関係を調べ、REFPROPによる密度と比較した。テストした領域では3つの状態方程式による密度の差は小さく、似た傾向を示した。特に、メタンと二酸化炭素は、大気圧において密度がREFPROPの結果と良く一致した。水素の密度については理想気体式とREFPROPが一致し、Peng Robinson式がずれた結果となった。水蒸気の密度は3つの式ともREFPROPを僅かに下回る結果となった。Advance/FrontNet/Tのような汎用の流体解析ソフトウェアで使用する関数系としては、理想気体式で十分であることが確認された。

定圧比熱、粘性、熱伝導率については、低圧・高温で温度多項式がREFPROPをよく再現した。定圧比熱は水素では多項式が多少のうねりを見せており、計算安定性の意味では不安が残るが、それ以外では滑らかな結果を示した。水素はREFPROPを再現するようにパラメータを調整するのも1つの手段と考えられ、今後の検討課題である。粘性、熱伝導率はAdvance/FrontNet/Tで問題なく使用できる精度と判断できる。

本稿では、圧縮係数を1.0として検討を行ったが、実在流体物性を考慮する場合は実用的な圧縮係数モデルが必要であり、今後の課題である。本稿で検討した物性モデルを使って、今後Advance/FrontNet/Tによる多成分ガスの物性計算や燃焼計算モデルの組み込みなどの応用を進めていく。

参考文献

- [1] 大江修造著、物性水産法、データブック出版社 (2002)
- [2] REFPROP; https://www.nist.gov/srd/refprop__
- [3] CHEMKIN;
<http://www.ansys.com/products/fluids/ansys-chemkin-pro>
- [4] CEA;
<https://www.grc.nasa.gov/WWW/CEAWeb/>
- [5] Pitzer, K. S., J. Am. Chem. Soc., 77, 3427

(1955) : D. Z. Lippmann, R. F. Curl, C. M.

Huggins, and D. E. Peterson, *ibid.*, 3433 (1955)

- [6] Bonnie J. McBride, Sanford Gordon and Martin A. Reno, Coefficients for Calculating, Thermodynamic and Transport Properties of Individual Species, NASA, Technical Memorandum 4513, 1993.
- [7] Roger A. Svehla, Transport Coefficients for the NASA Lewis Chemical Equilibrium Program, NASA Technical Memorandum 4647, 1995.

※ 技術情報誌アドバンスシミュレーションは、アドバンスソフト株式会社 ホームページのシミュレーション図書館から、PDF ファイルがダウンロードできます。(ダウンロードしていただくには、アドバンス/シミュレーションフォーラム会員登録が必要です。)

付録 パラメータ一覧

表 2 状態方程式関連のパラメータ

日本語名	化学式	分子量[kg/mol]	P _c [Pa-abs]	T _c [K]	ω[-]
アルゴン	Ar	3.994800E-02	4.863600E+06	1.507000E+02	1.500000E-01
メタン	CH ₄	1.604300E-02	4.600155E+06	1.906000E+02	8.000000E-03
一酸化炭素	CO	2.801040E-02	3.495713E+06	1.329000E+02	4.500000E-02
二酸化炭素	CO ₂	4.400980E-02	7.376460E+06	3.041000E+02	2.250000E-01
エタン	C ₂ H ₆	3.007000E-02	4.883865E+06	3.055000E+02	9.700000E-02
エタノール	C ₂ H ₅ OH	4.606904E-02	6.360000E+06	5.158000E+02	6.350000E-01
プロパン	C ₃ H ₈	4.409700E-02	4.245518E+06	3.698000E+02	1.520000E-01
ブタン i	C ₄ H ₁₀ -iso	5.812300E-02	3.640000E+06	4.078000E+02	1.835200E-01
ブタン n	C ₄ H ₁₀ -n	5.812300E-02	3.796000E+06	4.251200E+02	2.001600E-01
水素	H ₂	2.015880E-03	1.296960E+06	3.320000E+01	-2.200000E-01
水蒸気	H ₂ O	1.801528E-02	2.211925E+07	6.474000E+02	3.080000E-01
硫化水素	H ₂ S	3.408188E-02	8.962900E+06	3.735300E+02	9.417000E-02
ヘリウム	He	4.002600E-03	2.275000E+05	5.200000E+00	-3.900300E-01
アンモニア	NH ₃	1.703056E-02	1.128000E+07	4.056000E+02	2.560000E-01
一酸化窒素	NO	3.000614E-02	6.480000E+06	1.801500E+02	5.829400E-01
窒素	N ₂	2.801350E-02	3.394387E+06	1.262000E+02	3.800000E-02
亜酸化窒素	N ₂ O	4.401288E-02	7.245000E+06	3.095700E+02	1.408900E-01
酸素	O ₂	3.199880E-02	5.045985E+06	1.540000E+02	2.000000E-02
二酸化硫黄	SO ₂	6.406480E-02	7.900000E+06	4.300000E+02	2.510000E-01
硫黄	S	3.206000E-02	1.175000E+07	1.313100E+03	2.463500E-01
プロピレン	C ₃ H ₆	4.208100E-02	4.620420E+06	3.650000E+02	1.480000E-01

文献[6]から引用した比熱の温度多項式の係数を表 3 に示す。ここで、表 3 は低温領域（概ね 200K～1000K、物質によって多少異なる）への適用となる。高温領域についてはページの都合上割愛した。

表 3 比熱の温度多項式のパラメータ（低温領域 200～1000K）

日本語名	a_0	a_1	a_2	a_3	a_4	b_1
アルゴン	2.500000E+00	0.000000E+00	0.000000E+00	0.000000E+00	0.000000E+00	-7.453750E+02
メタン	5.149879E+00	-1.367101E-02	4.918013E-05	-4.847440E-08	1.666944E-11	-1.024665E+04
一酸化炭素	3.579534E+00	-6.103537E-04	1.016814E-06	9.070059E-10	-9.044245E-13	-1.434409E+04
二酸化炭素	2.356813E+00	8.984130E-03	-7.122063E-06	2.457301E-09	-1.428855E-13	-4.837197E+04
エタン	1.539526E+00	1.504084E-02	6.684712E-06	-1.338295E-08	4.856140E-12	-1.124877E+04
エタノール	4.858696E+00	-3.740173E-03	6.955538E-05	-8.865480E-08	3.516883E-11	-2.999613E+04
プロパン	9.335538E-01	2.642458E-02	6.105973E-06	-2.197750E-08	9.514925E-12	-1.395852E+04
ブタン i	5.455902E-01	3.782532E-02	5.619780E-06	-3.057096E-08	1.405846E-11	-1.803405E+04
ブタン n	1.576415E+00	3.458972E-02	6.970161E-06	-2.816364E-08	1.237512E-11	-1.714700E+04
水素	2.344303E+00	7.980425E-03	-1.947792E-05	2.015697E-08	-7.376029E-12	-9.179241E+02
水蒸気	4.198635E+00	-2.036402E-03	6.520342E-06	-5.487927E-09	1.771968E-12	-3.029373E+04
硫化水素	4.119411E+00	-1.877160E-03	8.206604E-06	-7.059424E-09	2.140583E-12	-3.681929E+03
ヘリウム	2.500000E+00	0.000000E+00	0.000000E+00	0.000000E+00	0.000000E+00	-7.453750E+02
アンモニア	4.460752E+00	-5.687818E-03	2.114115E-05	-2.028500E-08	6.895006E-12	-6.707535E+03
一酸化窒素	4.218599E+00	-4.639881E-03	1.104430E-05	-9.340555E-09	2.805549E-12	9.845100E+03
窒素	3.531005E+00	-1.236610E-04	-5.029994E-07	2.435306E-09	-1.408812E-12	-1.046976E+03
亜酸化窒素	2.257150E+00	1.130473E-02	-1.367132E-05	9.681980E-09	-2.930718E-12	8.741775E+03
酸素	3.782456E+00	-2.996734E-03	9.847302E-06	-9.681295E-09	3.243728E-12	-1.063944E+03
二酸化硫黄	3.266534E+00	5.323790E-03	6.843755E-07	-5.281005E-09	2.559045E-12	-3.690815E+04
硫黄	2.317256E+00	4.780183E-03	-1.420827E-05	1.565695E-08	-5.965883E-12	3.250690E+04
プロピレン	3.834645E+00	3.290784E-03	5.052282E-05	-6.662514E-08	2.637076E-11	7.538383E+02

文献[7]から引用した比熱の温度多項式の係数を表 4 に示す。ここで表 4 は低温領域（概ね 200K～1000K、物質によって多少異なる）への適用となる。高温領域についてはページの都合上割愛した。

表 4 粘性の温度多項式のパラメータ（低温領域 200～1000K）

日本語名	A	B	C	D
アルゴン	6.120576E-01	-6.771435E+01	1.904066E+02	2.158827E+00
メタン	5.764362E-01	-9.370408E+01	8.699239E+02	1.733335E+00
一酸化炭素	6.252658E-01	-3.177965E+01	-1.640798E+03	1.745499E+00
二酸化炭素	5.113726E-01	-2.295132E+02	1.371068E+04	2.707554E+00
エタン	5.908935E-01	-1.399441E+02	2.986837E+03	1.598887E+00
エタノール	5.458603E-01	-3.138268E+02	2.608920E+04	2.107850E+00
プロパン	5.467965E-01	-1.769666E+02	7.785605E+03	1.800106E+00
ブタン i	5.283204E-01	-2.656368E+02	1.728507E+04	2.005569E+00
ブタン n	6.814161E-01	-2.541249E+02	2.231772E+04	1.022847E+00
水素	7.455318E-01	4.355511E+01	-3.257934E+03	1.355624E-01
水蒸気	5.001956E-01	-6.971280E+02	8.816389E+04	3.083651E+00
硫化水素	5.407852E-01	-3.030438E+02	2.407317E+04	2.495202E+00
ヘリウム	7.501594E-01	3.576324E+01	-2.212129E+03	9.212635E-01
アンモニア	5.665240E-01	-3.671808E+02	3.166384E+04	2.264744E+00
一酸化窒素	6.026203E-01	-6.201778E+01	-1.395452E+02	2.026833E+00
窒素	6.252658E-01	-3.177965E+01	-1.640798E+03	1.745499E+00
亜酸化窒素	5.895911E-01	-1.556518E+02	3.763043E+03	2.122385E+00
酸素	6.091618E-01	-5.224485E+01	-5.997401E+02	2.041080E+00
二酸化硫黄	5.315708E-01	-2.958987E+02	2.122484E+04	2.597555E+00
硫黄	1.027563E-01	-1.573098E+01	6.781405E+03	-1.686831E+00
プロピレン	5.264289E-01	-2.430449E+02	1.449000E+04	2.103665E+00

文献[7]から引用した比熱の温度多項式の係数を表 5 に示す。ここで表 5 は低温領域（概ね 200K～1000K、物質によって多少異なる）への適用となる。高温領域についてはページの都合上割愛した。

表 5 熱伝導率の温度多項式のパラメータ（低温領域 200～1000K）

日本語名	A	B	C	D
アルゴン	6.096893E-01	-7.089225E+01	5.842062E+02	1.933715E+00
メタン	1.023818E+00	-3.109237E+02	3.294431E+04	6.778744E-01
一酸化炭素	8.543944E-01	1.057322E+02	-1.234785E+04	4.779313E-01
二酸化炭素	4.805657E-01	-5.078672E+02	3.508881E+04	3.674779E+00
エタン	7.086749E-01	-6.301656E+02	5.095103E+04	2.950872E+00
エタノール	2.218544E-01	-1.225194E+03	1.171663E+05	6.557158E+00
プロパン	7.438889E-01	-5.591137E+02	3.629057E+04	2.461317E+00
ブタン i	6.747578E-01	-6.636160E+02	4.419691E+04	3.020669E+00
ブタン n	8.340439E-01	-6.402338E+02	4.914921E+04	1.978919E+00
水素	1.005946E+00	2.795126E+02	-2.979202E+04	1.199625E+00
水蒸気	1.096639E+00	-5.551343E+02	1.062341E+05	-2.466455E-01
硫化水素	9.944213E-01	-1.984938E+02	1.838094E+04	-1.994776E-01
ヘリウム	7.500783E-01	3.657799E+01	-2.363660E+03	2.976647E+00
アンモニア	1.749839E+00	2.919525E+02	-3.303374E+04	-5.094499E+00
一酸化窒素	9.502876E-01	7.666706E+01	-9.989476E+03	-6.277672E-03
窒素	8.543944E-01	1.057322E+02	-1.234785E+04	4.779313E-01
亜酸化窒素	6.516538E-01	-3.437306E+02	1.509040E+04	2.424236E+00
酸素	7.722917E-01	6.846321E+00	-5.893338E+03	1.221037E+00
二酸化硫黄	6.147655E-01	-5.640929E+02	4.958079E+04	2.394006E+00
硫黄	1.027564E+00	-1.573060E+01	6.781366E+03	-1.714699E+00
プロピレン	7.543450E-01	-5.681711E+02	3.970667E+04	2.357909E+00