超音速ジェット of 三次元構造 (DSMC 計算の新衝突計算法)

3D Structure of a Supersonic Jet (New Intermolecular Collision Scheme of DSMC Method)

○正 宇佐美 勝 (三重大)

Masaru USAMI, Mie University, 1515 Kamihama-cho, Tsu 514-8507

Key Words: Rarefied Gas, DSMC, Intermolecular Collision, Supersonic Jet, Shock Wave

1. はじめに

DSMC 法⁽¹⁾は希薄気体流の解析法として開発されたが、計算機の発展に伴って、その適用範囲は、連続流状態まで広がる傾向にある。DSMC 法は、計算の発散といった不安定要素がなく、また、境界条件も比較的与え易い。一方、DSMC 法で最も問題となるのは、流れ場のセル分割を、平均自由行程と同程度で行う必要があるという点である。従来の衝突計算法では、同一セルに含まれる任意の分子 2 個は、その相対位置に関係なく衝突ペアとして選択されるため、セルを大きくすることはできない。もしセルを大きくできる計算法が確立したなら、セル数も分子数も少なくなり、DSMC 法の適用範囲は大きく広がる。本報告では、衝突する分子の位置に応じて分子速度の補正を行った上で分子間衝突を行うという算法で、セル長が大きくとも良好な結果を得る方法を考案した。

円形オリフィスから流出する超音速自由噴流^{(2)~(5)}は、近似的には軸対称と見なせるが、厳密には三次元的な不安定構造を持ち、これがジェット騒音や超音速混合に深く関与する。近年の報告^{(6)~(9)}によると、噴流境界が流れに沿って曲率をもつためテラー・ゲルトラ型不安定が発生し、軸に垂直な断面上で渦対が生ずると考えられている。そして、その渦対のために、その断面上で噴流を眺めると花びら模様が観測される。著者はこれまでに、有限体積法を用いた市販の流体解析ソフト CFD2000 を用いて、この花びら模様の観測を行っている(図 1)。今回は、上記の新衝突計算法をこの問題に適用し、円形オリフィスから流出するジェットの三次元歪み構造を DSMC 法で再現した。

2. 新衝突計算法

従来の衝突計算法では、セルが大きくなるとそれに比例して二つの衝突分子の位置は離れるため、シミュレーションが忠実に行われなくなる。本計算法は、衝突計算直前に一方の分子 P を、あたかも、もう一方の分子 Q の位置に移動させたかのように分子速度の補正を行う。いま、流れ場中の分子は、全て、ある温度と流れ速度を持つ局所平衡状態の速度分布関数(Maxwell 分布)に従うものと仮定する。分子 P の位置の分布関数を f_1 、分子 Q の位置の分布関数を f_2 とし、分子 P の速度が f_1 上の一点 A にあるものとしよう(図 2)。衝突計算に際して、この A 点を分布関数 f_2 上のどこかに移せばよいことになるが、最も自然な方法は、 f_1 上の A 点位置と f_2 上の位置が相対的に同じになるよう移動させることである(B 点)。この B 点位置を求める計算は簡単である。いま、 x 方向速度成分 u の分布関数について考えると、 f_1 と f_2 は次のよ

うに書ける。

$$f_1 = \frac{1}{\sqrt{2\pi RT_{x1}}} \exp \left\{ -\frac{(u_1 - U_1)^2}{2RT_{x1}} \right\} \quad (1)$$

$$f_2 = \frac{1}{\sqrt{2\pi RT_{x2}}} \exp \left\{ -\frac{(u_2 - U_2)^2}{2RT_{x2}} \right\} \quad (2)$$

ここで、 R は気体定数、 T_{x1}, T_{x2} および U_1, U_2 は、 x 方向温度および流速の x 成分である。 f_1 および f_2 をそれぞれ最大値で無次元化し、それらを等しいとおくと、

$$\frac{(u_1 - U_1)^2}{T_{x1}} = \frac{(u_2 - U_2)^2}{T_{x2}} \quad (3)$$

したがって、

$$u_2 = U_2 + (u_1 - U_1) \sqrt{T_{x2}/T_{x1}} \quad (4)$$

分子間衝突の計算は、この修正された速度 u_2 を用いて行い、得られた衝突後の速度 u_2^* (C 点) は、分子 P を元の位置に戻す操作のために、式 (5) を用いて再び修正される (D 点)。

$$u_1^* = U_1 + (u_2^* - U_2) \sqrt{T_{x1}/T_{x2}} \quad (5)$$

さて、式 (4)(5) を用いるためには分子 P と Q それぞれの位置における流速と温度のデータが必要である。したがって、最初は、従来の計算法でセル中心の流速と温度を仮に求めておかねばならない。セル内の任意位置における値は、隣り合うセル中心の値を直線で結び内挿(一部は外挿)で求める。DSMC 法の長い繰返し計算の中で、従来の方法による計算は最初の 1 回だけでよく、以降は、新衝突計算法によって流速と温度のデータが逐次更新される。なお、新衝突法の計算 1 回に要する時間は、従来の計算法より 10 ~ 20 % 増加する。

3. 結果

新衝突計算法を自由噴流の 3D 解析に適用する前に、1 次元垂直衝撃波および 2 次元正方空洞内の渦に適用し良好な結果を得た。さらに軸対称噴流に適用したところ、マッハディスク近傍の変化が激しい場所では、完全修正(100 %補正)はかえって流れ場に歪みを生じる結果となることが判明した。これらのことを踏まえ、今回の 3D 計算では、まずは、補正を本来の 50 %で行うこととした。50 %補正とは、セル中心から分子 P まで(あるいは Q まで)の距離を 50 %に減じてそれぞれの位置の温度と流速を算出する方法である。

クヌッセン数 Kn (上流よどみ点の平均自由行程 λ を円形オリフィスの直径 d で割算) を 3×10^{-5} 、圧力比を 50 とし、従来の計算法と新衝突計算法でそれぞれ結果を求め比較した。使

用したセルの数は約 1300 万個、分子数は約 4000 万個である。アルゴン単一気体を対象とし VHS 分子モデルを使用した。三次元計算であるため、流れ場の温度と速度のデータを記憶するメモリも膨大になる。従って、補正計算は流れ場の中で重要と思われる部分だけに限定し、記憶のための格子も衝突計算用セルよりさらに粗い間隔で作成した。図 3 は、円形オリフィスより下流の流れ場の密度等値線を $z = 0$ の x - y 断面で比較したもので、上図が従来の計算法、下図が新衝突計算法によるものである。等値線の描き方は、両図、全く同じ方法である。マッハディスク近傍や反射衝撃波近傍の等値線が、新衝突計算法の方がより密に表現されており、粗いセルを使うことで生じる密度変化の緩慢が解消されている。図 4 は、噴流中心軸に垂直な断面 ($x/d = 4.74$ および 5.8) で眺めた密度等値線の比較である。図 1 の連続流 CFD 計算の結果ほど鮮明には現れていないものの、密度の花びら模様は、新衝突計算法で求めた結果の方がよりはっきりと再現されている。なお、現在、補正 50 % をマッハディスク近傍のみに限定 (他は 100 % 補正) して、新衝突計算法によるシミュレーションを実行中である。

Fig. 1 Density profiles of the free jet by the continuum calculation (CFD2000)

Fig. 2 Modification of velocity in the new intermolecular collision scheme

Fig. 3 Density contours of the supersonic free jet

Fig. 4 Density contours in planes normal to the jet axis

文献

- (1) Bird, G.A., *Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows*, (1994), Clarendon.
- (2) 宇佐美・手島, 機論, **62**-598B (1996), pp. 2215-2222.
- (3) 宇佐美・手島, 機論, **64**-620B (1998), pp. 1112-1119.
- (4) 宇佐美・手島, 機論, **65**-630B (1999), pp. 444-450.
- (5) 宇佐美・手島, 機論, **68**-666B (2002), pp. 344-351.
- (6) Novopashin, S.A. and Perepelkin, A.L., *Physics Letters A*, **135**-4,5 (1989), pp. 290-293.
- (7) Krothapalli, A., Buzyna, G. and Lourenco, L., *Physics of Fluids A*, **3**-8 (1991), pp. 1848-1851.
- (8) Arnette, S.A., Samimy, M. and Elliott, G.S., *Physics of Fluids A*, **5**-1 (1993), pp. 187-202.
- (9) 手島, 第 29 回流体力学講演会講演集, (1997), pp. 297-300.