DSMC 法における非弾性衝突モデルの輸送係数特性* (第2報, Parker の Rotational Energy Gain Function の改良)

松 本 裕 昭*¹

Transport Coefficients of Inelastic Collision Model in the Direct Simulation Monte Carlo Method (2nd Report, Modification of Parker's Energy Gain Function)

Hiroaki MATSUMOTO*²

*² Division of Systems Research, Yokohama National University,
79-5 Tokiwadai, Hodogaya, Yokohama shi, Kanagawa, 240 8501 Japan

The rotational energy gain function for inelastic collision models in the Monte Carlo simulation of rarefied gas flow is calculated by the Monte Carlo integration technique with the classical trajectory calculation (CTC) of diatomic molecule. The rotational energy gain function presented in this study is combined with the statistical inelastic cross section (SICS) model and then applied to the evaluation of transport coefficients of nitrogen gas using the Wang Chang Uhlenbeck (WCU) theory, and the comparative simulation of nitrogen normal shock wave structure among the present energy gain function, Parker's energy gain function, and experimental data. This study demonstrated that the transport coefficients and shock wave structures of present energy gain function are in better agreement with those of experimental results than Parker's energy gain function.

Key Words: Rotationally Inelastic Collision, Rotational Energy Gain Function, Diatomic Molecules, Transport Coefficients, Monte Carlo Simulation, Shock Wave Structure

1. はじめに

希薄気体流れのモンテカルロシミュレーション⁽¹⁾において、実在気体の挙動を現実的に効率良く解析するためには、分子間衝突を精度良く簡易にモデル化することが重要であると考えられる。分子間の弾性衝突は、散乱則が単純であるため、気体の輸送係数に深く関係する輸送断面積を、衝突断面積と散乱則に還元する簡易散乱モデル⁽²⁾⁽³⁾⁽⁴⁾が提案されており、モデルの特性と有効性が検証されてきている。一方、二原子分子や多原子分子間の衝突は、内部自由度が増えるため、その衝突機構が非常に複雑になる。分子動力学(MD)法またはclassical trajectory (CT) 計算を用いて二原子分子間の衝突を直接解析する技法と直接シミュレーションモンテカルロ(DSMC)法を組み合わせた計算手法⁽⁵⁾が提案されているが、計算負荷が非常に大きく、必ずしも効率적ではない。工学的な応用面からすると、Borgnakke - Larsen (BL)モデル⁽⁶⁾に代表されるような現象論的なモデルや、遷移断面積を統計的に与える

Statistical Inelastic Cross Section (SICS)モデル⁽⁷⁾、MD法により計算した衝突後のエネルギーの遷移確率をモデル化したDynamic Molecular Collision (DMC)モデル⁽⁸⁾等の簡易なモデルの使用が望ましいと思われる。これらのモデルのうち、BLならびにSICSモデルでは、非弾性衝突の確率や断面積を表現する、衝突エネルギーに関する関数が必要となる。二原子分子の回転モードについては、通常 Parker の回転衝突数(回転緩和時間)に関する近似理論⁽⁹⁾が多く用いられている。またBLおよびSICSモデルでは、拡散係数と粘性係数は弾性衝突モデルと同一と仮定している。前報⁽¹⁰⁾において、Parkerの近似理論を取り入れたSICSモデルの輸送係数特性について詳細に検討し、拡散係数と粘性係数は弾性衝突モデルと必ずしも一致せず、特に低い温度で差異が大きくなることを明らかにした。この原因として、衝突エネルギーの小さい領域では、Parkerの近似理論を用いた非弾性衝突の断面積が、非常に大きくなるため、回転エネルギーの緩和を過大評価する点にあることを示し、Parkerの近似理論を改良する必要性のあることを指摘した。本研究では、CT計算により、Parkerの近似理論に表れる、rotational energy

* 原稿受付 2004年12月20日。

¹ 正員、横浜国立大学大学院工学研究院(〒240 8501 横浜市保土ヶ谷区常盤台79-5)。
E-mail: matsuo@ynu.ac.jp

gain function を求め、回転非弾性衝突数の特性について検討した。

2. 回転衝突数と Parker の Energy gain function

二原子分子の回転エネルギーの緩和特性は、次式で定義される回転衝突数 Z_R により表現される。

$$Z_R = \frac{\tau_c}{\tau_R} \quad (1)$$

ここに τ_c は、弾性衝突の平均衝突時間を表し、衝突頻度 ν_c の逆数として次式のように定義される。

$$\frac{1}{\tau_c} = \nu_c = n \int_0^\infty \int_0^{2\pi} \int_0^\infty g f_g b db d\varepsilon dg \quad (2)$$

ただし n , b , ε , g , f_g は、それぞれ数密度、分子の重心間の衝突径数、散乱の方位角、相対速度、相対速度に関する速度分布関数を表す。また τ_R は、回転緩和時間を表し、Parker はマクロな回転エネルギーの時間変化率 dE_R/dt を用いて、次式のように定義している⁹⁾。

$$\tau_R = \frac{kT}{(dE_R/dt)} \quad (3)$$

ここに、 k は Boltzmann 定数、 T は温度を表す。また、 dE_R/dt は、初期に並進エネルギーだけ (回転エネルギーがゼロ) を与えた二原子分子の衝突において、衝突後に得られる分子 1 個あたりの回転エネルギー ΔE_R の単位時間、単位体積あたりの平均値として次式のように与えられている。

$$\frac{dE_R}{dt} = n \int_0^\infty \int_0^{2\pi} \int_0^\infty g \Delta E_R f_g b db d\varepsilon dg \quad (4)$$

弾性衝突を直径 d の剛体球と仮定し、気体が平衡状態にあるとして、(4) 式を並進エネルギー $E_{tr} = \mu g^2/2$ (μ : 衝突分子の換算質量) に関する積分式に変換すると、回転衝突数 Z_R は次式ようになる。

$$\frac{1}{Z_R} = \frac{1}{(kT)^3} \int_0^\infty Z E_{tr} \exp(-E_{tr}/kT) dE_{tr} \quad (5)$$

$$Z = \frac{1}{\pi d^2} \int_0^{2\pi} \int_0^\infty \Delta E_R b db d\varepsilon \quad (6)$$

Parker は、分子間に経験的なポテンシャルを用いて ΔE_R を近似的に求め、(6) 式を計算し、いわゆる Parker の energy gain function を導出している。

$$Z_{Parker} = \left[\frac{E_{tr}}{2} + \frac{2\pi\sqrt{E_{tr}E^*}}{3} + \left(\frac{\pi^2}{4} + 2 \right) E^* \right] / Z_R^\infty \quad (7)$$

ここに E^* ; Z_R^∞ は、気体の種類により決まるパラメータである。

3. Energy gain function の Monte Carlo 積分

本研究では、(6) 式の energy gain function を二原子分子の CT 計算を用いて、Monte Carlo 積分することにより求める。 ε については対称性を仮定して積分を行い、 $b_{\max}$ より大きな衝突径数 (微小角散乱) を cutoff すると、(6) 式は以下のような Monte Carlo 積分式に変形できる。

$$\begin{aligned} Z &= \frac{1}{d^2} \int_0^{b_{\max}} b^2 \Delta E_R \frac{2b}{b_{\max}^2} db \\ &\approx \frac{b_{\max}^2}{d^2 M} \sum_{i=1}^M (\Delta E_R)_i \\ &= Z_{MC} \end{aligned} \quad (8)$$

ここに M は、試行回数を示す。(8) 式は、衝突径数 b に関する確率密度関数 $2b/b_{\max}^2$ に従って選んだ b について二原子分子の運動を解析し、 ΔE_R を求めるといって試行を数多く行い、得られた ΔE_R の平均を求めることで積分値が算出できることを示している。

二原子分子の運動は、相互に粒子間力が働く 4 個の粒子の運動として扱う。ただし、分子を構成する二原子の運動には、原子間距離を一定とする拘束条件を付加する。各粒子の運動は、次式により記述される。

$$m_i \frac{d^2 \mathbf{r}_i}{dt^2} = - \sum_j \nabla_i \phi_{ij} + \sum_j \lambda_j \frac{\partial h_j}{\partial \mathbf{r}_i} \quad (9)$$

ここに m_i , $\mathbf{r}_i$ は、それぞれ粒子 i の質量、空間座標を表し、 ϕ_{ij} は粒子 i, j 間の粒子間ポテンシャル、 ∇_i は $\mathbf{r}_i$ に関する微分演算子を表す。 h_j は粒子 i に対する拘束条件に関する項で、粒子 i, j 間に拘束がある場合、次式のように与えられる。

$$h_j = (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)^2 - r_e^2 = 0 \quad (10)$$

ただし, r_e は, 二原子分子における原子間距離である. また λ_j は, Lagrange の未定係数で, 時間発展後にも拘束条件を満たすように決める. 本研究では, 粒子間ポテンシャルに, Diatomic Lennard - Jones (D - LJ) ポテンシャル⁽¹⁾を用いる.

$$\phi(r_{ij}) = \sum_j \epsilon_{LJ} \left[\left(\frac{r_{ij}}{d_{LJ}} \right)^{-12} - \left(\frac{r_{ij}}{d_{LJ}} \right)^{-6} \right] \quad (11)$$

各粒子の軌道は, 初期位置ベクトルおよび速度ベクトルを与え, (9) 式を RATTLE 法⁽²⁾により計算することで求める. 各粒子の初期位置ベクトル $\mathbf{r}_i$ および速度ベクトル $\mathbf{u}_i$ は, 次式で与えられる. ただし, 粒子 1, 2 ならびに 3, 4 がそれぞれ分子を構成するとしている.

$$\mathbf{r}_1 = -\frac{m_{34}}{M} \frac{\mathbf{g}}{|\mathbf{g}|} r_0 + \frac{b}{2} \mathbf{e}_0 + \frac{m_1}{m_{12}} \frac{\mathbf{r}_e}{2} \frac{\mathbf{r}_{12}}{|\mathbf{r}_{12}|} \quad (12)$$

$$\mathbf{r}_2 = -\frac{m_{34}}{M} \frac{\mathbf{g}}{|\mathbf{g}|} r_0 + \frac{b}{2} \mathbf{e}_0 - \frac{m_2}{m_{12}} \frac{\mathbf{r}_e}{2} \frac{\mathbf{r}_{12}}{|\mathbf{r}_{12}|} \quad (13)$$

$$\mathbf{r}_3 = \frac{m_{12}}{M} \frac{\mathbf{g}}{|\mathbf{g}|} r_0 - \frac{b}{2} \mathbf{e}_0 + \frac{m_3}{m_{34}} \frac{\mathbf{r}_e}{2} \frac{\mathbf{r}_{34}}{|\mathbf{r}_{34}|} \quad (14)$$

$$\mathbf{r}_4 = \frac{m_{12}}{M} \frac{\mathbf{g}}{|\mathbf{g}|} r_0 - \frac{b}{2} \mathbf{e}_0 - \frac{m_4}{m_{34}} \frac{\mathbf{r}_e}{2} \frac{\mathbf{r}_{34}}{|\mathbf{r}_{34}|} \quad (15)$$

$$\mathbf{u}_1 = \mathbf{u}_2 = \frac{m_{34}}{M} \mathbf{g}, \quad \mathbf{u}_3 = \mathbf{u}_4 = \frac{m_{12}}{M} \mathbf{g} \quad (16)$$

$$M = \sum_i m_i, \quad m_{ij} = m_i + m_j, \quad \mathbf{r}_{ij} = \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j \quad (17)$$

$$\mathbf{g} = \left(\frac{2E_v}{\mu} \right)^{1/2} \mathbf{e}, \quad (18)$$

ここに $\mathbf{e}$ は, 任意の方向を持つ単位ベクトルを表し, $\mathbf{e}_0$ は $\mathbf{g}$ に垂直な単位ベクトルを表す. また r_0 は, 衝突分子の初期分子間距離で, D - LJ ポテンシャルの値が十分小さくなるように選ぶ. b は, (8) 式の確率密度関数より次式のように与えられる.

$$b = b_{\max} \sqrt{R_{nd}} \quad (19)$$

ここに R_{nd} は, [0,1] の一様乱数である. また $b_{\max}$ は, 単原子分子の衝突における cutoff angle $\chi_{\min}$ と最大衝突径数 $(b_{\max})_{el}$ の関係から, 次式のように与える⁽⁵⁾.

$$b_{\max} = (b_{\max})_{el} + r_e \quad (20)$$

$$(b_{\max})_{el} = \max \left[\left(\frac{16\pi}{\chi_{\min}} \frac{\epsilon_{LJ}}{E_{tr}} \right)^{1/6}, \left(\frac{32\pi}{\chi_{\min}} \frac{\epsilon_{LJ}}{E_{tr}} \right)^{1/12} \right] d_{LJ} \quad (21)$$

r_0 については, 文献(5)を参考に次式のように与える.

$$r_0 = \max(5d_{LJ}, 2b_{\max}) \quad (22)$$

ΔE_R は, 初期に与えた総エネルギーと, 分子間の重心距離が $2r_0$ 以上離れた状態における, 二分子の相対速度に対する並進エネルギーとの差の半分として与える.

4. 計算結果

図1に窒素気体について, 衝突エネルギー比 E_{tr}/ϵ_{LJ} と, Monte Carlo 積分により得られた energy gain function Z_{MC}/ϵ_{LJ} の関係を両対数にして示す. Monte Carlo 積分の試行回数は各衝突エネルギー比について, $M=1024$ 回とした. 窒素気体の D - LJ ポテンシャルのパラメータ⁽¹⁾は, $\epsilon_{LJ}/k = 91.5$ K, $d_{LJ} = 3.681$ Å とし, 原子間距離ならびに原子量は, それぞれ $r_e = 1.094$ Å, $m = 14.00674$ au とした. また(9)式は, 代表長さ d_{ij} , 代表速度 $c_0 = (\epsilon_{LJ}/m)^{1/2}$ を用いて無次元化して計算を行い, 計算に用いた無次元時間刻み並びに cutoff angle は, それぞれ $(t \cdot c_0/d_{LJ}) = 10^{-6}$, $\chi_{\min} = 0.1^\circ$ とした. 図中一点鎖線は, (7)式の Parker の energy gain function Z_{Parker}/ϵ_{LJ} を表し, 窒素に対して $E^*/k = 79.8$ K, $Z_{R^*} = 21.0$ としている. また実線は, $\log(Z_{MC}/\epsilon_{LJ})$ を $\log(E_{tr}/\epsilon_{LJ})$ の二次関数と仮定して最小二乗近似により求めた曲線を表し, 次式のように与えられる.

$$\log \left(Z_{MC_LSQ} / \epsilon_{LJ} \right) = \sum_{i=0}^2 a_i \cdot \log^i \left(E_{tr} / \epsilon_{LJ} \right) \quad (23)$$

$$a_0 = -1.720, a_1 = 0.6338, a_2 = 0.002001$$

Fig. 1 Rotational energy gain function for nitrogen as a function of translational energy.

図に示すように、衝突エネルギー比 $E_{tr}/\epsilon_{LJ} \geq 10$ K の領域で、 Z_{MC}/ϵ_{LJ} は、 Z_{Parker}/ϵ_{LJ} より多少大きい値となっているが、いずれも衝突エネルギーに対してほぼ同様の勾配を示していることがわかる。一方、 $E_{tr}/\epsilon_{LJ} \leq 10$ K の領域では、衝突エネルギーに対して Z_{MC}/ϵ_{LJ} は、 $E_{tr}/\epsilon_{LJ} \geq 10$ K の領域とほぼ同様の勾配となっているのに対し、 Z_{Parker}/ϵ_{LJ} は、 $E_{tr}/\epsilon_{LJ} \sim 10$ K 付近から勾配が大きく変わり、 E_{tr}/ϵ_{LJ} が減少するにつれて、ほぼ一定の値に収束する傾向にあることがわかる。

5. Energy gain function の性能

4節で得られた energy gain function を最小二乗近似して得られた窒素ガスに関する Z_{MC_LSQ} を SICS モデルに適用し、輸送係数特性並びに、衝撃波の内部構造特性について検討を行った。

5.1 輸送係数特性 Wang・Chang・Uhlenbeck (WCU) の理論⁽¹³⁾⁽¹⁴⁾⁽¹⁶⁾⁽¹⁷⁾を用いて、輸送係数を評価する。WCU 理論による拡散係数、粘性係数、並びに熱伝導係数の第一次近似は、次式のように与えられる。

$$\frac{1}{[D]_1} = \frac{4\rho}{3kT} d_{00} \quad (24)$$

$$\frac{1}{[\eta]_1} = \frac{2}{5kT} \left(a_{11}' - \frac{2}{3}a \right) d_{00} \quad (25)$$

$$\frac{1}{[\lambda]_1} = \frac{8m}{3kT} \frac{a_{11} - 25a/4}{25a_{22} + 50a + 4a_{11}} \quad (26)$$

$$d_{00} = \left(\frac{kT}{\pi m} \right)^{1/2} \int \exp(-\gamma^2 - \tilde{E}_{R1} - \tilde{E}_{R2}) \times (\gamma^2 - 2\gamma\gamma' \cos \chi + \gamma'^2) \times \gamma b db d\epsilon d\tilde{E}_{R1} d\tilde{E}_{R2} d\gamma \quad (27)$$

$$a = \left(\frac{kT}{\pi m} \right)^{1/2} \int \exp(-\gamma^2 - \tilde{E}_{R1} - \tilde{E}_{R2}) \times \Delta \tilde{E}^2 \gamma b db d\epsilon d\tilde{E}_{R1} d\tilde{E}_{R2} d\gamma \quad (28)$$

$$a_{11}' = 2 \left(\frac{kT}{\pi m} \right)^{1/2} \int \exp(-\gamma^2 - \tilde{E}_{R1} - \tilde{E}_{R2}) \times (\gamma^4 - 2\gamma^2 \gamma'^2 \cos^2 \chi + \gamma'^4) \times \gamma b db d\epsilon d\tilde{E}_{R1} d\tilde{E}_{R2} d\gamma \quad (29)$$

$$a_{22}' = \left(\frac{kT}{\pi m} \right)^{1/2} \int \exp(-\gamma^2 - \tilde{E}_{R1} - \tilde{E}_{R2}) \times \left[\gamma^2 (\tilde{E}_{R1} - \tilde{E}_{R2})^2 - 2\gamma\gamma' \cos \chi (\tilde{E}_{R1} - \tilde{E}_{R2}) (\tilde{E}_{R1}' - \tilde{E}_{R2}') + \gamma'^2 (\tilde{E}_{R1}' - \tilde{E}_{R2}')^2 \right] \gamma b db d\epsilon d\tilde{E}_{R1} d\tilde{E}_{R2} \quad (30)$$

$$\gamma^2 = \frac{\mu g^2}{2kT}, \quad \tilde{E}_{Ri} = \frac{E_{Ri}}{kT} \quad (i=1,2) \quad (31)$$

$$\Delta \tilde{E} = \tilde{E}_{R1}' + \tilde{E}_{R2}' - \tilde{E}_{R1} - \tilde{E}_{R2} \quad (32)$$

ここに ρ は、密度を表す。また E_{Ri} ($i=1,2$) は、衝突分子の回転エネルギーを表し、 $'$ は衝突後の状態を表す。本研究では、(24) 式～(26) 式の輸送係数を 4 節と同様に、Monte Carlo 積分を行うことにより計算する。ただし分子間衝突には、reduced impact parameter⁽¹⁰⁾を導入した inverse power law potential 型の VSS モデル並びに SICS モデルを適用する。VSS モデルの衝突断面積 $c E_{tr}^{-\omega}$ [$\text{\AA}^2$] におけるパラメータは、文献 (3) より 300K 以下の温度で $(c, \omega) = (499.5, 0.359)$ 、300K 以上の温度では $(c, \omega) = (229.4, 0.238)$ とした。Monte Carlo 積分の試行回数は、一つの温度について 10^7 オーダーとしている。表 1 および表 2 に、拡散係数について Chapman・Enskog 理論との比較を示す。表より低温度領域では、 Z_{MC_LSQ} を適用したモデルの拡散係

数は, Z_{Parker} を用いたモデルの拡散係数よりも, 値が大きくなり, CE 理論の値に近づいていることがわかる. これは, 低温度領域では, 衝突エネルギーの小さい分子間衝突が多くなるため, $Z_{\text{MC-LSQ}}$ を用いたモデルの非弾性衝突の断面積が, Z_{Parker} を用いたモデルの断面積より小さくなり, 有効な衝突回数が少なくなっていることによると考えられる. しかし, $T = 10 \text{ K}$ では CE 理論に比べ, まだ 13% 程度値が小さくなっており, energy gain function の改良が更に必要であると思われる. 一方, 常温から高温領域については, $Z_{\text{MC-LSQ}}$ を用いたモデルの拡散係数の方が Z_{Parker} を用いたモデルより若干小さくなっており, CE 理論からの差異も大きいことがわかる. これは図 1 に示すように, 衝突エネルギーの大きな領域では $Z_{\text{MC-LSQ}}$ が Z_{Parker} より大きくなっているため, 有効な衝突回数が多くなっていることに起因すると考えられる. しかし, CE との差異は 1% 未満と小さいことから, 良好に一致した結果が得られていると考えられる. 図 2 に, $Z_{\text{MC-LSQ}}$ 並びに Z_{Parker} を用いたモデルの粘性係数を, 推奨値¹⁷⁾並びに CE 理論と比較したものを示す. また図 3 に, 熱伝導係数について, 計算結果と推奨値¹⁸⁾並びに CE 理論の Eucken による補正值 (EC) との比較を示す. 図より, $Z_{\text{MC-LSQ}}$ を用いたモデルの粘性係数および熱伝導係数は, Z_{Parker} を用いたモデルよりも $T = 10 \text{ K}$ で CE 理論並びに EC にそれぞれ近づいている他, 常温～高温領域では, 理論値並びに推奨値を良く再現していることがわかる.

TABLE I. Comparison of diffusion coefficient between Chapman-Enskog solution of the first order approximation (CE), SICS models for nitrogen with Z_{Parker} and $Z_{\text{MC-LSQ}}$ at gas temperatures $T = 10 \text{ K}$, 50 K , 100 K , and 300 K

T [K]	$(\rho[D]_1)_{\text{CE}}$ [$\mu\text{kg/m}\cdot\text{s}$]	$(\rho[D]_1)_{\text{Parker}}$ [$\mu\text{kg/m}\cdot\text{s}$]	$(\rho[D]_1)_{\text{MC-LSQ}}$ [$\mu\text{kg/m}\cdot\text{s}$]
10	1.455	1.101	1.265
50	5.797	5.564	5.634
100	10.515	10.269	10.288
300	27.019	26.747	26.635

TABLE II. Comparison of diffusion coefficient between Chapman-Enskog solution of the first order approximation (CE), SICS models for nitrogen with Z_{Parker} and $Z_{\text{MC-LSQ}}$ at gas temperatures $T = 300 \text{ K}$, 500 K , 1000 K , and 1500 K .

T [K]	$(\rho[D]_1)_{\text{CE}}$ [$\mu\text{kg/m}\cdot\text{s}$]	$(\rho[D]_1)_{\text{Parker}}$ [$\mu\text{kg/m}\cdot\text{s}$]	$(\rho[D]_1)_{\text{MC-LSQ}}$ [$\mu\text{kg/m}\cdot\text{s}$]
300	24.626	24.509	24.445
500	35.902	35.860	35.779
1000	59.880	59.902	59.915
1500	80.768	80.599	80.400

5.2 衝撃波の内部構造解析 計算は, 1 次元の定常問題として扱い, 流れ方向に x 軸を取る. 計算領域を

Fig.2 Comparison of viscosity coefficient for nitrogen gas among the SICS model with $Z_{\text{MC-LSQ}}$, Z_{Parker} , and measured data.

Fig.3 Comparison of thermal conductivity coefficient for nitrogen gas among the SICS model with $Z_{\text{MC-LSQ}}$, Z_{Parker} , and measured data.

$-30 l_1 \leq x \leq 30 l_1$ とし, 等間隔の衝突セル及びデータセル $\Delta x = 0.1 l_1$ に分割する. ただし, l_1 は上流の代表長さで, 次式のように定義する.

$$l_1 = \frac{16}{5} \left(\frac{m}{2\pi k T_1} \right)^{1/2} \frac{\eta_1}{\rho_1} \quad (3.3)$$

ここに, η_1 は, 上流温度 T_1 における単原子分子の粘性係数である. 初期に厚さ 0 の衝撃波を原点 ($x = 0$) に設定する. すなわち, $x < 0$ の領域に上流の平衡状態から抽出した速度および回転エネルギーを割り当てた模擬分子を配置し, $0 < x$ の領域には下流の平衡状態から抽出した速度および回転エネルギーを割り当てた分子を配置する. 上流と下流には, Rankine-Hugoniot の関係を課す. 時間を Δt だけ進め, 各分子を移動させて, 計算領域から流出した分子は消去する. また, 境界からはそれぞれの平衡状態にある分子を流入させる. 各衝突セルで Δt 時間内に生じる分子間衝突

Fig. 4 (a) Comparison of shock wave structure between SICS with Z_{MC_LSQ} and experimental data for upstream Mach number $M_1=1.71$ and upstream temperature $T_1=196$ K.

Fig. 4 (b) Comparison of shock wave structure between SICS with Z_{Parker} and experimental data for upstream Mach number $M_1=1.71$ and upstream temperature $T_1=196$ K.

Fig. 5 (a) Same as Fig. 4 (a): $M_1=7.0$ and $T_1=28.3$ K

Fig. 5 (b) Same as Fig. 4 (b): $M_1=7.0$ and $T_1=28.3$ K

Fig. 6 (a) Same as Fig. 4 (a): $M_1=12.9$ and $T_1=9.15$ K.

Fig. 6 (b) Same as Fig. 4 (b): $M_1=12.9$ and $T_1=9.15$ K.

突を Null Collision 法⁹⁾を基礎として計算し、定常衝撃波が形成された後、流れ場を時間平均し、マクロな物理量を計算する。図4～6に上流のマッハ数および温度が $(M_1, T_1) = (1.71, 191 \text{ K})$, $(7.0, 28.3 \text{ K})$, $(12.9, 9.15 \text{ K})$ に対する衝撃波内の無次元数密度 $n^* = (n - n_1)/(n_2 - n_1)$ 、無次元並進温度 $T_{tr}^* = (T_{tr} - T_1)/(T_2 - T_1)$ 、無

次元回転温度 $T_R^* = (T_R - T_1)/(T_2 - T_1)$ の分布をそれぞれ示す。 n^* 、 T_{tr}^* 、 T_R^* の定義式中の添字2は衝撃波下流の平衡状態を表す。ただし各図において、(a)は Z_{MC_LSQ} を用いたモデルの結果を表し、(b)は Z_{Parker} を用いたモデルの結果を表す。また比較のため、数密度分布および回転温度分布の実験結果⁹⁾も示す。実験結

果の数密度分布並びに回転温度分布は、文献 20 の図 1 および表 1, 2, 並びに (1)(2) 式, (4)~(11) 式を用いて計算した。また、計算結果は、 x 軸に関して実験における無次元座標 x/L^* にスケール変換して表示している。ここに L^* は、実験で用いられている代表長さで、次式で定義されている。

$$L^* = \frac{\eta^*}{\rho u}, \quad \rho u = \text{const.} \quad (34)$$

ここに u は、衝撃波内の平均速度を表す。また、(34) 式の η^* は、音速点の温度 T_0 における窒素の粘性係数を表し、計算における η^* は、(25) 式を用いて推定している。計算に用いた無次元時間刻みは、 $\Delta(t \cdot c_m / l_1) = 10^{-4}$ とし、計算に用いた模擬分子数は、上流の平衡状態で 1 セル当たり平均 100 個とした。ここに c_m は上流温度における分子の最大確率熱速度である。図 4~6 の (a)(b) を比較すると、 Z_{MC_LSQ} を用いたモデル並びに Z_{Parker} を用いたモデルのいずれも、全てのマッハ数について、実験結果の数密度分布を良く再現していることがわかる。また回転温度分布は、 Z_{MC_LSQ} を用いたモデルの方が、 Z_{Parker} を用いたモデルよりも衝撃波の後半部で、実験結果に近づいていることがわかる。しかし、回転温度は、実験に比べ、依然として緩和が遅れており、厚い構造になっていることがわかる。これより、energy gain function を更に改良する必要があると考えられる。図 7~9 に、衝撃波内部における分子の回転エネルギー分布について、 Z_{MC_LSQ} を用いたモデルと実験結果の比較を示す。ただし図は、基底状態に存在する分子の割合 $y(0)$ と、 E_R に存在する分子の割合、 $y(E_R)$ との比、 $y(E_R)/y(0)$ の $\log$ プロットを示している。図中の直線 $BD(T_1)$ および $BD(T_2)$ は、上流および下流の平衡状態における Boltzmann 分布をそれぞれ表す。表示している衝撃波内の代表的な位置は、 T_R^* が実験と計算で一致する位置としている。図 7 に示すように、計算結果は、 $M_1=1.71$ の低マッハ数で実験結果を良く再現しており、 $\log[y(E_R)/y(0)]$ は直線分布の平衡状態となっていることがわかる。一方図 8, 9 に示すように、 $M_1=7.0, 12.9$ の高マッハ数では、 $\log[y(E_R)/y(0)]$ は高い非平衡状態を示す bimodal な分布形状となっており、実験結果を定性的には再現していることがわかる。しかし、 $M_1=7.0, 12.9$ のいずれの場合も回転エネルギーの小さな領域に存在する分子の割合が、実験結果よりも少ないことがわかる。すなわち、マクロな回転温度は同じでも、ミクロな分子の回転エネルギーの分布が計算と実験で異なることを示

Fig. 7 Rotational energy distribution for SiCS with Z_{MC_LSQ} model (symbols) through a Mach 1.71 nitrogen shock wave as compared with experimental (lines) distributions. $T^*=0.079$: $x/L^*=-7.1$ ($\circ$), $x/L^*=-6.6$ ($-$); $T^*=0.30$: $x/L^*=-2.9$ (Δ), $x/L^*=-2.5$ ($-$); $T^*=0.61$: $x/L^*=1.6$ ($\square$), $x/L^*=1.6$ ($-$)

Fig. 8 Same as Fig. 7: Mach 7.0. $T^*=0.075$: $x/L^*=-8.4$ ($\circ$), $x/L^*=-6.7$ ($-$); $T^*=0.41$: $x/L^*=-2.9$ (Δ), $x/L^*=-3.2$ ($-$); $T^*=0.710$: $x/L^*=-0.13$ ($\square$), $x/L^*=-0.82$ ($-$); $T^*=0.893$: $x/L^*=-1.6$ (∇), $x/L^*=-1.5$ ($-$)

Fig. 9 Same as Fig. 7: Mach 12.9. $T^*=0.146$: $x/L^*=-6.6$ ($\circ$), $x/L^*=-6.5$ ($-$); $T^*=0.293$: $x/L^*=-4.2$ (Δ), $x/L^*=-4.4$ ($-$); $T^*=0.532$: $x/L^*=-1.8$ ($\square$), $x/L^*=-2.2$ ($-$); $T^*=0.769$: $x/L^*=-0.62$ (∇), $x/L^*=-0.13$ ($-$)

しており、大きな非平衡状態が存在する領域では、衝突における回転モードと並進モードのエネルギー交換が、実現象と異なっていると考えられる。回転エネル

ギー分布等のミクロな物理量まで正確に表現するためには、衝突におけるエネルギーの分配則についても改良が必要になると考えられる。なお、図には示していないが、衝撃波内の分子の回転エネルギー分布の形状は、Parker の関数を用いたモデルもほとんど同様の傾向を示している。

6. まとめ

希薄気体流れのモンテカルロシミュレーションにおいて、二原子分子の非弾性衝突モデルに用いられる energy gain function を、classical trajectory 計算と Monte Carlo 積分を組み合わせることにより計算した。その結果、Monte Carlo 積分により得られた energy gain function は衝突エネルギーの小さい領域で、Parker の近似理論により得られた energy gain function よりも小さな値となることが確認された。Monte Carlo 積分により得られた energy gain function を SICS モデルに組み込み、Wang - Chang - Uhlenbeck の理論を用いて輸送係数特性を検討した。また、衝撃波の内部構造の解析にも適用して、モデルの性能を検討した。輸送係数については、低温度領域で、Parker の energy gain function を用いたモデルよりも理論値に近づくことが確認されたが、気体温度が 10 K の低温度では、理論値よりもまだ 1.3% 程度小さな値となることが確認された。衝撃波の内部構造解析では、衝撃波内の回転温度の構造が Parker の energy gain function を用いたモデルよりも多少、実験に近づくことが確認された。しかし、大きな非平衡状態が存在する領域では、回転温度の緩和は実験に比べてまだ遅れていることや、分子の回転エネルギーの分布が実験と異なることなどから、energy gain function、並びに衝突後における回転モードと並進モードのエネルギー分配則を更に改良する必要があると考えられる。

文献

- (1) Bird, G. A. *Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows*, Clarendon Press (1994).
- (2) Bird, G. A. *Prog. Astronaut. Aeronaut.* **74**, (1981), 239-255; Bird, G. A., *Phys. Fluids* **26**, (1983) 3222-3223.
- (3) Koura K. and Matsumoto, H., *Phys. Fluids* **A3**, (1991) 2459-2465.
- (4) Matsumoto, H., *Phys. Fluids* **14**, (2002) 4256-4265.
- (5) Koura, K., *Phys. Fluids* **9**, (1997) 3543-3549.
- (6) Borgnakke, C. and Larsen, P. S., *J. Comput. Phys.* **18**, (1975), 405-420.
- (7) Koura, K., *Phys. Fluids* **A4**, (1992), 1782-1788; Koura, K., *Phys. Fluids* **A5**, (1993), 778-780.
- (8) Tokumasu, T. and Matsumoto, Y., *Phys. Fluids* **11**, (1999), 1907-1920.
- (9) Parker, J. G., *Phys. Fluids* **2**, (1959), 449-1920.
- (10) 松本裕昭, 機論 B **70**, (2004), 1927-1932.
- (11) Maitland, G. F., Rigby, M., Smith, E. B., and Wakeham, W. A., *Intermolecular Forces*, Clarendon Press (1981).
- (12) Ryckaert, J.P., Cicotti, G., and Berendsen, H.J.C., *J. Comp. Phys.* **23**(1977), 327-341.
- (13) Chapman, S. and Cowling, T. G., *The Mathematical Theory of Non-Uniform Gases*, Cambridge Univ. Press, 3rd edition, (1976); 1st edition, (1939).
- (14) Hirschfelder, J. O., Curtiss, C. F. and Bird, R. B., *Molecular Theory of Gases and Liquids*, Wiley, (1963).
- (15) Loardi, J. A. and Mates, R. E., *Phys. Fluids* **13** (1970), 291-308.
- (16) Taxman, N., *Phys. Rev.*, **10**, (1958), 1235-1239.
- (17) Touloukian, Y. S., Saxena, S. C. and Hestermans, P., *Thermal Properties of Matter* vol. 11, IFI/PLENUM, (1975).
- (18) Touloukian, Y. S., Liley, E. P. and Hestermans, P., *Thermal Properties of Matter* vol. 3, IFI/PLENUM, (1970).
- (19) Koura, K., *Phys. Fluids*, **29** (1986), 3509-3511.
- (20) Robben, F. and Talbot, L., *Phys. Fluids*, **9** (1964), 653-662.