

## Variable Soft Sphere Molecular Model in the Monte Carlo Simulation of Air Species

by

Katsuhisa KOURA, Hiroaki Matsumoto, and Mikinari TAKAHIRA

Aerodynamics Division, National Aerospace Laboratory

## ABSTRACT

The variable soft sphere (VSS) molecular model is developed so that both the viscosity and diffusion coefficients are consistent with those for any intermolecular potential. The values of the VSS cross-section parameters are listed for air species together with the viscosity coefficients, which may be required in the evaluation of the Knudsen number. The VSS model is applied to the "rarefied gas numerical wind tunnel (RGNWT)" and some results obtained using the RGNWT are presented for the flowfield around the H-II orbiting plane (HOPE).

## 1. 緒言

実在気体を良い精度で近似する計算効率の高い実在気体分子モデルの開発が重要な研究課題となっている。従来、弾性衝突分子モデルとして広く用いられてきた可変性剛体球(VHS)モデルは実在気体の粘性(または拡散)係数と適合するように決められるため、拡散現象が重要な混合気体では不適当なモデルとなる<sup>1)</sup>。最近、我々は任意の分子間ポテンシャルに対する粘性及び拡散係数の両者と一致する可変性軟球(VSS)モデルを提案し、その有効性を確認した<sup>2)</sup>。また、空気分子に対するVSSパラメータを広い温度範囲(20-15000 K)にわたって決定し<sup>3)</sup>、擬衝突直接シミュレーション・モンテカルロ(NC-DSMC)法<sup>4)</sup>を用いた「希薄気体数値風洞」に適用したので報告する。

## 2. VSS分子モデル

CubleyとMason<sup>5)</sup>によって高温の空気分子(300-15000 K)に対して求められた粘性及び拡散輸送積分から得られるVSS分子モデルの粘性( $\sigma_n$ )及び拡散( $\sigma_D$ )断面積( $\text{\AA}^2$ )は

$$\sigma_n(\varepsilon) = C_n(\varepsilon/k)^{-\omega_n}, \quad (1)$$

$$\sigma_D(\varepsilon) = C_D(\varepsilon/k)^{-\omega_D}, \quad (2)$$

で与えられる<sup>3)</sup>。ここに、 $\varepsilon$ は相対エネルギー、 $k$ はボルツマン定数であり、空気分子に対するVSSパラメータ $C_n$ 、 $C_D$ 、 $\omega_n$ 及び $\omega_D$ の値を表1に示してある。なお、一部の希ガス(\*印)に対してはMaitlandとSmith<sup>6)</sup>の粘性係数と300 Kにおいて一致するように修正を加えた。(1)式に対する粘性係数( $\mu \text{ Pa} \cdot \text{s}$ )

$$\eta = \Lambda T^s \quad (3)$$

のパラメータ $\Lambda$ と $s$ の値も表1に示した。

VSS分子モデルの全衝突断面積 $\sigma_t(\text{\AA}^2)$ と偏角余弦( $\cos \chi$ )指数 $\alpha$ は粘性及び拡散断面積を用いて次式で与えられる<sup>3)</sup>。

$$\sigma_t = [\sigma_D(\varepsilon)/2][2\sigma_D(\varepsilon) + \sigma_n(\varepsilon)] / [2\sigma_D(\varepsilon) - \sigma_n(\varepsilon)], \quad (4)$$

$$\alpha = 2\sigma_n(\varepsilon) / [2\sigma_D(\varepsilon) - \sigma_n(\varepsilon)]. \quad (5)$$

これらは、また、次式の指数関数で良く近似される。

$$\sigma_t = C(\varepsilon/k)^{-\omega}, \quad (6)$$

$$\alpha = C_\alpha(\varepsilon/k)^{-\omega_\alpha}. \quad (7)$$

空気分子に対するVSSパラメータ $C$ 、 $C_\alpha$ 、 $\omega$ 及び $\omega_\alpha$ の値を表1に示す。

MaitlandとSmith<sup>6)</sup>によって評価された粘性係数に適合するように決定された指数型ポテンシャルに対するVSS分子モデルの全衝突断面積 $\sigma_t(\text{\AA}^2)$

\* 航空宇宙技術研究所

\*\*大興電子通信株式会社

$$\sigma_t = C(\varepsilon/k)^{-\omega} \quad (8)$$

のパラメータ $C$ と $\omega$ 及び偏角余弦指数 $\alpha$ の(一定)値を低温度(20-300 K)及び高温度(300-2000 K)範囲において表2に示す。粘性係数( $\mu \text{ Pa} \cdot \text{s}$ )

$$\eta = AT^s \quad (9)$$

のパラメータ $A$ と $s$ の値も示してある。

図1-6に高温度範囲(300-15000K)における $N_2$ ,  $O_2$ , 及び $NO$ 分子の粘性( $\eta$ )及び拡散( $D$ )係数の比較を示す。Boushehri等<sup>7)</sup>のデータは膨大な実験値・理論値を整理したもので信頼性が高く、これに適合するように決定したVSSパラメータ<sup>8)</sup>に対応する粘性・拡散係数も示してある。なお、従来よく使用されたSutherlandの公式<sup>9)</sup>も比較のために示した(300 KでBoushehri等の値に適合させてある)。 $N_2$ と $O_2$ 分子では1000 K以上でかなりのずれが見られる。

$N_2$ 分子に対するVSS分子モデルを用いた「希薄気体数値風洞」によって求められた冷温拡散壁を有するHOPE回りの密度分布と温度分布を図7と図8に示す。一様流クヌーセン数 $Kn_w=1$ の希薄大気に速度比 $S_w=25$ 、迎角 $40^\circ$ で再突入する場合であり、図中の数値は一様流値で割った値を示す。

#### 参考文献

- 1) K. Koura, H. Matsumoto, and T. Shimada, Phys. Fluids A3, 1835 (1991).
- 2) K. Koura and H. Matsumoto, Phys. Fluids A3, 2459 (1991).
- 3) K. Koura and H. Matsumoto, Phys. Fluids A4, 1083 (1992).
- 4) K. Koura, Phys. Fluids 29, 3509 (1986); AIAA Prog. Astronaut. Aeronaut. 117, 25 (1989); Phys. Fluids A2, 1287 (1990).
- 5) S.J. Cubley and E.A. Mason, Phys. Fluids 18, 1109 (1975).
- 6) G.C. Maitland and E.B. Smith, J. Chem. Eng. Data, 17, 150 (1972).
- 7) A. Boushehri, J. Bzowski, J. Kestin, and E.A. Mason, J. Phys. Chem. Ref. Data, 16, 445 (1987).
- 8) K. Koura, H. Matsumoto, and M. Takahira, Prog. Astronaut. Aeronaut. (to be published)
- 9) S. Chapman and T.G. Cowling, The Mathematical Theory of Non-uniform Gases, 3rd ed. (Cambridge U.P., London, 1970).

Table 1 List of the VSS parameters for the diffusion, viscosity, and total cross sections, the deflection-cosine exponent, and the viscosity coefficient determined from the transport collision integrals (Ref.5) in the high temperature range 300-15000 K. The values for some rare gases(\*) are adjusted so that the viscosity coefficient agrees with the recommended value (Ref.6) at 300 K.

Species	$\sigma_D (\text{\AA}^2)$		$\sigma_\eta (\text{\AA}^2)$		$\sigma_t (\text{\AA}^2)$		$\alpha$		$\eta (\mu\text{Pa}\cdot\text{s})$	
	$\omega_D$	$C_D$	$\omega_\eta$	$C_\eta$	$\omega$	$C$	$\omega_\alpha$	$C_\alpha$	s	A
N <sub>2</sub> -N <sub>2</sub>	0.274	241.4	0.231	142.5	0.235	216.1	0.0702	0.820	0.731	0.275
N <sub>2</sub> -O <sub>2</sub>	0.252	199.2	0.222	128.6	0.225	192.0	0.0491	0.943	0.722	0.312
O <sub>2</sub> -O <sub>2</sub>	0.224	160.6	0.198	103.9	0.201	155.6	0.0419	0.949	0.698	0.388
N <sub>2</sub> -NO	0.263	219.1	0.227	135.5	0.230	203.8	0.0588	0.882	0.727	0.293
O <sub>2</sub> -NO	0.238	179.1	0.210	115.7	0.213	173.1	0.0455	0.945	0.710	0.348
NO-NO	0.250	198.1	0.218	125.0	0.221	187.6	0.0521	0.911	0.718	0.320
N-N <sub>2</sub>	0.295	215.4	0.276	165.4	0.275	240.3	0.0334	1.239	0.776	0.240
N-O <sub>2</sub>	0.234	125.9	0.221	95.8	0.221	139.9	0.0221	1.225	0.721	0.338
O-N <sub>2</sub>	0.254	150.1	0.239	114.6	0.239	167.1	0.0258	1.231	0.739	0.295
O-O <sub>2</sub>	0.211	103.7	0.199	78.5	0.199	114.7	0.0202	1.216	0.699	0.420
N-NO	0.260	163.1	0.244	124.6	0.244	181.5	0.0277	1.231	0.744	0.264
O-NO	0.230	122.0	0.217	92.7	0.217	135.4	0.0221	1.222	0.717	0.359
N-N	0.357	274.3	0.335	212.9	0.328	306.8	0.0435	1.495	0.835	0.147
O-O	0.239	96.2	0.225	73.3	0.225	106.9	0.0239	1.227	0.725	0.402
N-O	0.286	146.6	0.269	112.4	0.268	163.6	0.0296	1.238	0.769	0.267
Ar-Ar*	0.200	112.9	0.190	95.3	0.189	138.6	0.0181	1.458	0.690	0.468
Ar-N <sub>2</sub>	0.229	157.4	0.216	119.7	0.216	174.8	0.0221	1.224	0.716	0.349
Ar-O <sub>2</sub>	0.186	106.1	0.176	79.9	0.176	116.9	0.0167	1.206	0.676	0.518
Ar-N	0.257	154.0	0.241	117.6	0.241	171.3	0.0276	1.231	0.741	0.291
Ar-O	0.218	103.5	0.206	78.5	0.206	114.7	0.0203	1.219	0.706	0.438
He-He	0.282	82.0	0.265	62.9	0.264	91.5	0.0296	1.239	0.765	0.246
He-Ar	0.215	82.2	0.203	62.3	0.203	91.0	0.0221	1.224	0.703	0.311
Ne-Ne	0.196	65.7	0.186	49.6	0.186	72.6	0.0167	1.211	0.686	0.636
Kr-Kr*	0.143	84.1	0.137	73.7	0.136	107.6	0.0110	1.559	0.637	0.823
Xe-Xe*	0.125	100.6	0.119	81.2	0.119	118.3	0.0103	1.353	0.619	0.913

Table 2 Same as Table 1; from the viscosity coefficient (Ref.6) in the low ( 20-300 K ) or high ( 300-2000 K ) temperature range.

Species	T = 20 - 300 K					T = 300 - 2000 K				
	$\sigma_t (\text{\AA}^2)$		$\alpha$	$\eta (\mu\text{Pa}\cdot\text{s})$		$\sigma_t (\text{\AA}^2)$		$\alpha$	$\eta (\mu\text{Pa}\cdot\text{s})$	
	$\omega$	$C$		s	A	$\omega$	$C$		s	A
N <sub>2</sub>	0.359	499.5	1.784	0.859	0.135	0.172	134.4	1.362	0.672	0.397
O <sub>2</sub>	0.415	678.4	1.920	0.915	0.114	0.203	153.0	1.429	0.763	0.386
Air	0.398	635.8	1.878	0.898	0.113	0.232	203.7	1.492	0.732	0.285
H <sub>2</sub>	0.270	140.1	1.578	0.770	0.115	0.188	82.5	1.396	0.688	0.177
CO <sub>2</sub>	0.452	1454.8	2.014	0.952	0.0656	0.287	434.6	1.616	0.787	0.177
CH <sub>4</sub>	0.443	1089.0	1.991	0.943	0.0552	0.246	272.9	1.524	0.746	0.162
He	0.166	44.9	1.349	0.666	0.446	0.204	58.6	1.431	0.704	0.357
Ne	0.229	96.0	1.486	0.729	0.504	0.160	60.0	1.336	0.660	0.743
Ar	0.389	586.4	1.856	0.889	0.143	0.201	151.9	1.425	0.701	0.434
Kr	0.466	1285.4	2.050	0.966	0.104	0.233	239.9	1.495	0.733	0.414
Xe	0.481	1988.4	2.088	0.981	0.0861	0.302	537.9	1.651	0.802	0.252

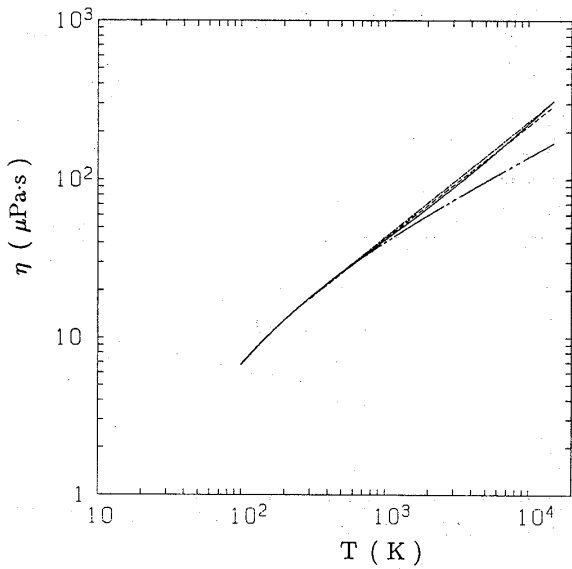


Fig.1 Viscosity coefficient of  $N_2$  for the VSS parameters determined from the collision integrals (---, Ref.5) as compared with that for the correlation functional (---, Ref.7) in the high temperature range 300-15000K. The viscosity coefficient for the VSS parameters determined from the correlation functional (---, Ref.7) and the Sutherland formula (----) are also presented.

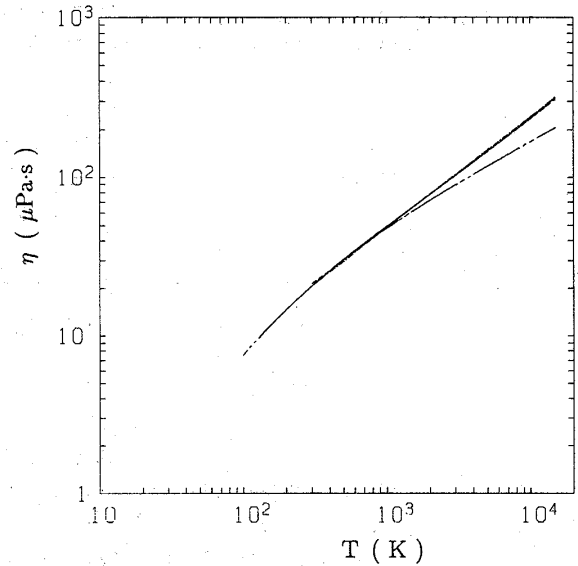


Fig.3 Same as Fig.1; viscosity coefficient;  $O_2$ .

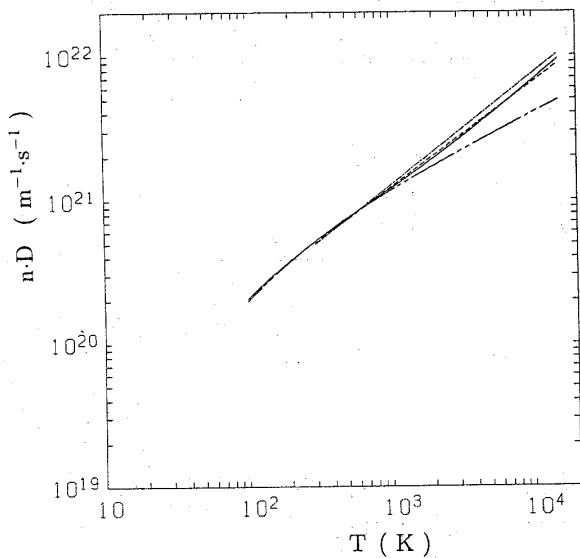


Fig.2 Same as Fig.1; diffusion coefficient;  $N_2$ .

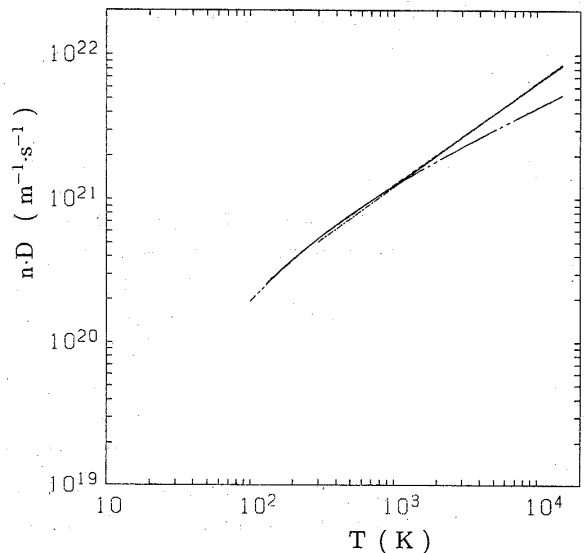


Fig.4 Same as Fig.1; diffusion coefficient;  $O_2$ .

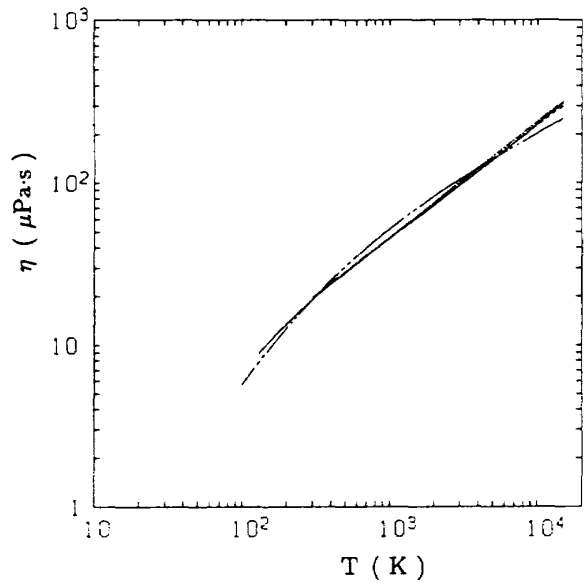


Fig.5 Same as Fig.1; viscosity coefficient; NO.

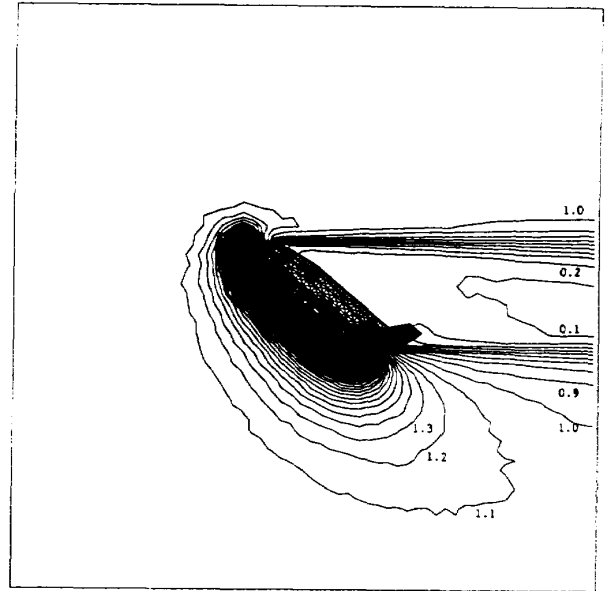


Fig.7 Number density contour (increment 0.1) in the plane of symmetry of the HOPE.

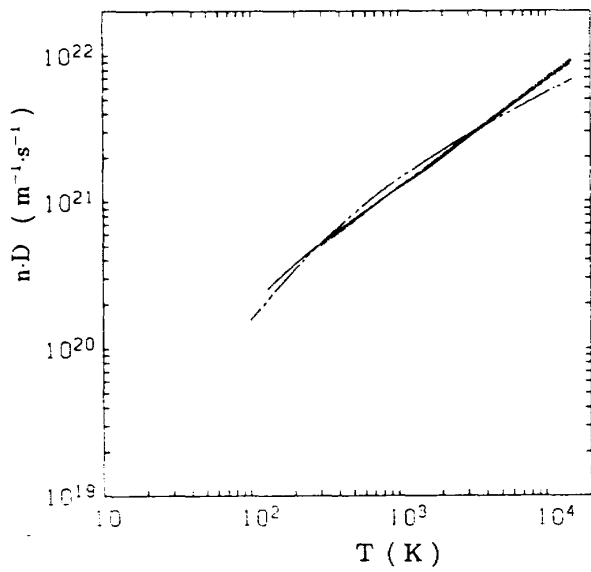


Fig.6 Same as Fig.1; diffusion coefficient; NO.

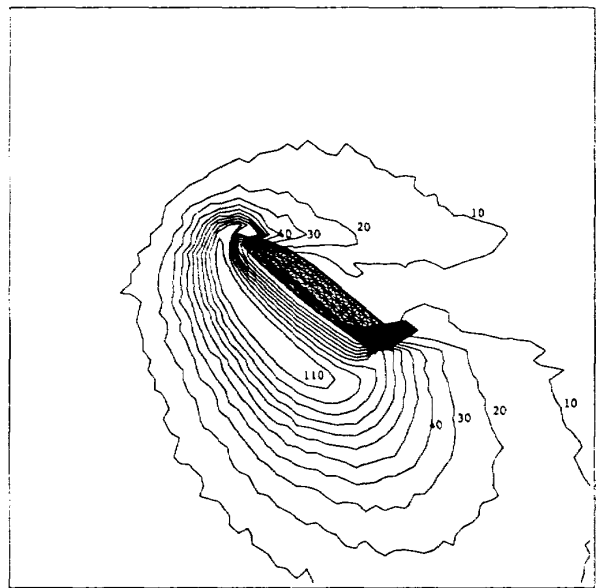


Fig.8 Translational temperature contour (increment 10) in the plane of symmetry of the HOPE.

