

DSMC 法による超音速自由噴流の数値計算

寺本 進*

長島 利夫†

Monte Carlo Simulation of Supersonic Free Jet

by

Susumu TERAMOTO

Graduate school, University of Tokyo

Toshio NAGASHIMA

Department of Aeronautics and Astronautics, University of Tokyo

ABSTRACT

Numerical solutions of Direct Simulation Monte Carlo (DSMC) method are obtained for axisymmetric supersonic free jet in the transition region ($Kn_\infty \sim 0.1$). The effects of parameters such as the number density of simulation particles and cell division upon the solution are examined, and pitot pressure calculated from the numerical solution is compared with the experimental data obtained by Askenas and Sherman.

1 はじめに

流れ場において分子の平均自由行程が代表長さに対して有限な値となる希薄な流れや微細な流れでは、連続流とは異なった希薄流特有の現象が発生する。このうち $Kn \sim O(10)$ 程度の流れでは分子同士の衝突を無視した自由分子流としての取扱いがなされるが、 $Kn \sim O(0.1)$ 付近の遷移領域では分子間衝突をも考慮する必要があり、流体を構成する分子の動きを直接追跡する直接シミュレーションモンテカルロ法 (DSMC 法) はそのような流れを解析する唯一の手段であるといえる。

しかし DSMC 法ではセルサイズが平均自由行程で、タイムステップが分子の平均衝突時間で制限されているために Kn 数の低下とともに計算量は急速に増大し、2次元計算では $(1/Kn)^3$ 、3次元計算や軸対称計算では $(1/Kn)^4$ に比例した計

算量になる。近年、計算機の能力の進歩や Null-Collision 法 [1]、VSS 分子モデル [2] の登場により効率のかつ高精度なシミュレーションが可能になってきているが、依然として低 Kn 数 (0.01 ~ 0.001) の解析をパラメトリックに行うのは計算量の面から困難であり、DSMC 法が現実的にどの程度の Kn 数にまで適用できるのか検討する必要がある。

本報告では、遷移領域での超音速自由噴流を対象として、まず粒子数などの計算パラメーターの計算結果に与える影響を調べ、さらに DSMC 法と既存の実験との比較を行った。

2 計算対象と数値解析手法

2.1 計算対象

計算対象は、いわゆる超音速自由噴流である。自由噴流は連続流領域ではよく知られているよう

*東京大学大学院

†東京大学工学部航空宇宙工学科

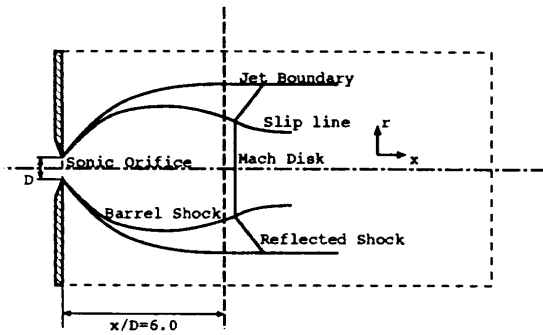
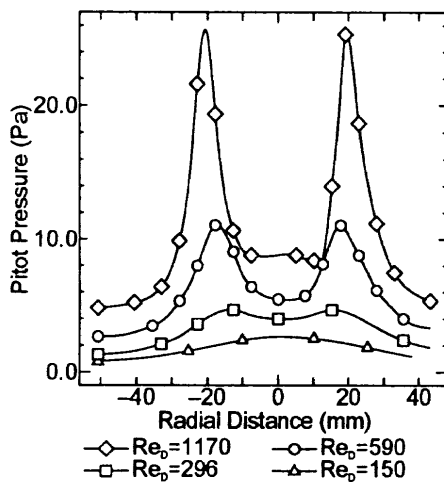


図 1:

図 2: 半径方向ピトー圧分布 ($X/D = 6.0$)
実験値 (Ashkenas and Sherman)

に図 1 に示すようなバレルショックやマッハディスクで特徴付けられる流れ場であるが、希薄な自由分子流の場合にはショック構造を持たずにオリフィスから単純に広がる膨張流となる。Ashkenas and Sherman[3] は連続流領域の $Re_D = 1170$ から自由分子流に近い $Re_D = 75$ の範囲で、圧力比 100 の自由噴流について $X/D = 6.0$ の位置での半径方向のピトー圧分布を計測している。(図 2) Re 数が下がり、希薄性が強くなるに従ってバレルショック直外側のピトー圧のピークが次第に低くなり、ついにはショック構造が消えてピークが無くなっていく様子がとらえられている。

本数値解析はこの実験に合わせ、全圧比 100 で $Re_D = 1170$ ($Kn_\infty = 0.0692$), $Re_D = 590$ ($Kn_\infty = 0.137$), $Re_D = 294$ ($Kn_\infty = 0.275$), $Re_D = 150$ ($Kn_\infty = 0.539$) の 4 通

りについて行った。全温は 298.15K 、作動気体は $79\%N_2$, $21\%O_2$ の混合気体とした。

2.2 数値解析手法

数値解析には 2 次元軸対象の DSMC 法を用い、衝突頻度の見積もりに Null-Collision 法、衝突過程のモデル化に VSS モデルをそれぞれ用いた。内部自由度モデルについては様々な議論があるところであるが、ここではオーソドックスな Borgnakke-Larsen モデルで回転自由度のみを考慮し、回転衝突数は 5.0 で固定した。

今回のように圧力比の高い自由噴流の数値解析では計算領域中に大きな密度分布があり、かつそれが刻々と変化する。そこで計算の各段階でセルあたりの粒子数 ΔN を最適な値に保つためにセル分割を 2 段階で行い、2 次セルを状況に応じて変化させる事に対応した。1 次セルは雰囲気平均自由行程程度のサイズで等間隔に分割し、粒子の集中している 1 次セルを次のような方法で 2 次セルに分割する。(図 3)

1. ΔN の最大値、最小値を設定する。
2. ΔN が最大値を超える 1 次セルを x, y どちらか長い方向で 2 等分し、粒子を分配する。
3. 分割の結果 ΔN が最小値を下回ったら隣のセルと結合する。
4. 分割された各セルについて 2. ~ 4. の手続きを再帰的に繰り返す

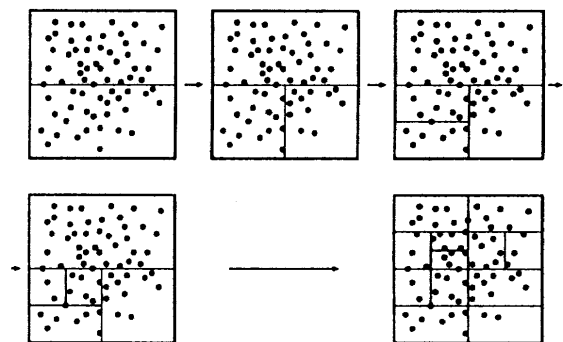


図 3: 2 次セル分割

この様にして分割した 2 次セルを衝突セルとし、データセルには 1 次セルをそのまま用いた。

一般的にこのようなセル分割は n 個の粒子を分割するのに $O(n \log n)$ 程度の計算量が必要になり、 $O(n)$ で済む通常の等間隔セル分割よりも低速である。特に、外側のセルの粒子数が多くなる軸対象計算では影響が大きい、最大値、最小値を適切に選べば全体としての計算量増加は最大でも 20% 程度で済む。

$Re_D = 590, 254, 150$ については計算領域を 40×150 の 1 次セルに分割して噴射孔半径は 1 次セル 4 セル分とし、 $Re_D = 1170$ の場合は 60×225 に分割して 6 セルを噴射孔にあてた。

タイムステップ Δt は雰囲気での平均衝突時間 τ_∞ の 10% とした。この値はオリフィスでの平均衝突時間の 6.05 倍にあたる。

このコードでの計算時間は、140MIPS の Unix WS を用いた場合 1particle-step あたり 1.3×10^{-5} sec.、ベクトル化されたコードで S-3800 (日立) を用いた場合 2.6×10^{-7} sec. であり、どちらでも 10^6 程度の粒子を用いたシミュレーションが可能である。

3 計算パラメータの決定

DSMC 法ではタイムステップ Δt は平均衝突時間 τ より十分小さい必要があり、またセルサイズ ΔL は平均自由行程 λ 程度か、より小さい必要があるとされている。基準となる τ, λ は計算領域中で最も厳しい値を採るのが望ましいが、今回の計算では雰囲気での τ, λ を基準としているために局所的にみれば噴射孔付近の数セルでは $\Delta t, \Delta L$ が τ, λ を超えている。またセルあたりの最小粒子数 ΔN_{min} も Null-Collision 法で必要とされている値ぎりぎりの値とした。このようなパラメータ設定が計算結果に悪影響を与えていない事を確認するために $Re_D = 590$ の場合について各パラメータを数通りずつ変化させて計算を行った。

3.1 粒子数

Null-Collision 法では、正確な衝突頻度評価に必要なセルあたりの最小平均粒子数 ΔN_{min} は 1 個/セル このことから必要な ΔN_{min} が 1 程度である事以下であるとされている。

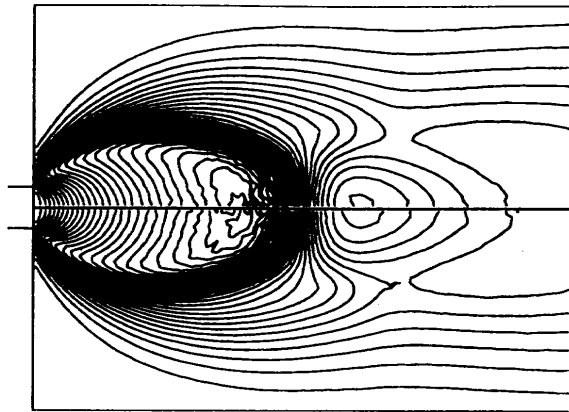


図 4: マッハ数分布 ($\Delta M = 0.2$)
上: $\Delta N_{min} \sim 0.5$ 下: $\Delta N_{min} \sim 2.0$

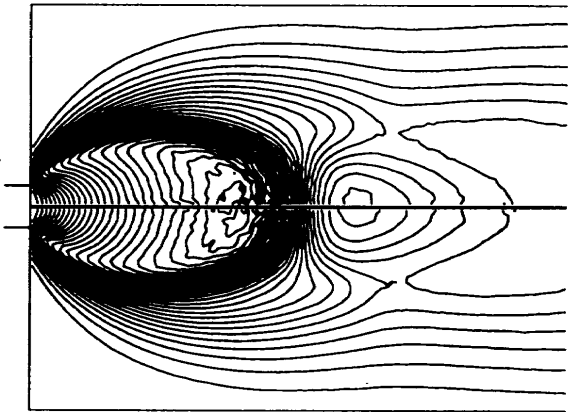


図 5: マッハ数分布 ($\Delta M = 0.2$)
上: $\Delta N_{min} \sim 1.0$ 下: $\Delta N_{min} \sim 2.0$

しかし今回のような混合気体の急激な膨張流でも 1 個/セルで十分であるかは明かでない。

2 次元軸対象計算では最内側のセルでセル体積が最小になり、またマッハディスク直前で密度が最小になるので、セルあたりの粒子数が最小になるのは中心軸上、マッハディスク直前のセルである。1 次セルを 40×150 に分割すると、総粒子数 $N \sim 3 \times 10^5$ では $\Delta N_{min} \sim 0.5$ 、 $N \sim 1.2 \times 10^6$ では $\Delta N_{min} \sim 2.0$ になる。

図 4,5 に総粒子数を変えて行った計算結果を示す。 $\Delta N_{min} \sim 1$ と 2 (図 5) ではほとんど違いはないが、 $\Delta N_{min} \sim 0.5$ と 2 (図 4) では ΔN が 1 を下回る中心軸付近を中心に両者に違いが生じる。

このことから必要な ΔN_{min} が 1 程度である事が確かめられた。

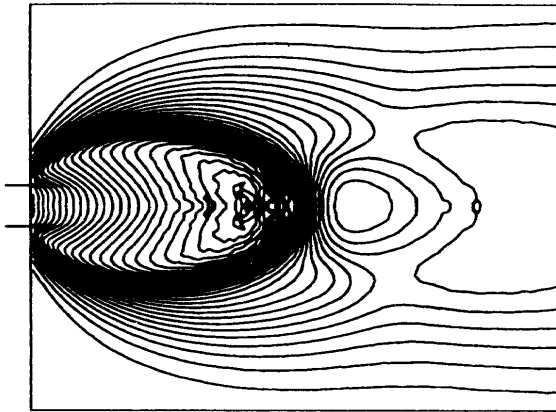


図 6: マッハ数分布 ($\Delta M = 0.2$)
(2次セル分割なし)

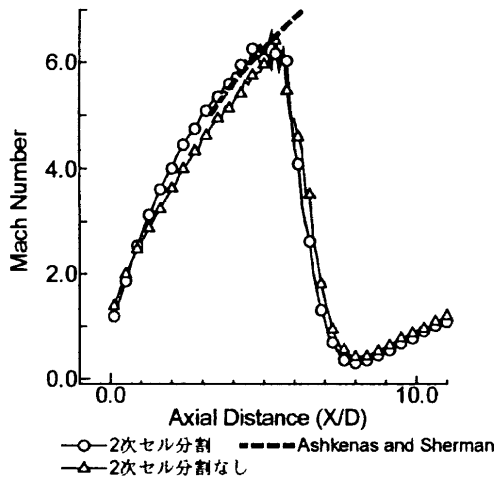


図 7: 中心軸上マッハ数分布

3.2 セル分割

図 6 に 2 次セル分割をせずに、等間隔分割の 1 次セルをそのまま衝突セルとした場合の等マッハ線図を示す。この計算では ΔL は噴射孔での平均自由行程 λ_D の約 60 倍となっているが、この様にセルサイズを平均自由行程よりはるかに大きくすると、本来は数回の衝突を経て輸送されるべき運動量が 1 回の衝突で輸送され、粘性が過大に評価される。その影響で噴射孔付近で等マッハ線が不自然に平滑化され、また中心線上のマッハ数分布 (図 7) も ref.[3] の経験式からずれている。

一方、2 次セル分割を行った場合には噴射孔直後の 1 次セルは、 $N \sim 3 \times 10^5$ の場合で平均 8 ~ 16 程度、 $N \sim 1.2 \times 10^6$ の場合で 16 ~ 33 程度の

2 次セルに分割されるが、図 4 では噴射孔付近に 2 次セル分割数の違いによる差は見られない。

このことから、今回のように計算領域中で平均自由行程が大きく異なり、等間隔のセルでは不十分な場合でも、比較的簡単な 2 次セル分割で十分対応できると言える。

この他、 Δt を噴射孔での平均衝突間隔 τ_D の 60%、 τ_∞ の 1/100 にとった計算も行ったが、 $\Delta t = 0.1\tau_\infty$ の場合と違いはみられなかった。

また、内部自由度モデルの回転衝突数を変化させた場合も、マッハディスク背後を除いてピトー圧分布等に違いは生じなかった。

4 解析結果

図 8 に各 Re 数での等マッハ線図を示す。 $Re_D = 1170$ や 590 では連続流に近い流れで、バレルショック、マッハディスクや反射衝撃波等のショックがはっきりと識別でき、それらの位置や中心線上のマッハ数なども様々な実験とよく一致している。さらに、そこから Re 数を下げていった場合に希薄流としての傾向が強くなっていく様子も捕らえられている。

希薄性の影響は、膨張が進む下流側から順番に顕著になる。まず垂直衝撃波背後のスリップ・ラインがぼやけ、下流での亜音速領域が消失していく。続いて垂直衝撃波からバレルショック下流部分、 $X/D = 6.0$ 付近の衝撃波が不明確になり、ピトー圧のピークも見られなくなる。最後に噴射孔近傍でも衝撃波がぼやけ、この時点では下流部分では単調に膨張していく流れになっている。

一方、 $X/D = 6.0$ のピトー圧分布を実験と比較すると、 $Re_D = 1170$ の場合には比較的よく一致するものの、 Re 数が下がるに従って計算結果が実験値よりも低くなっていく (図 9)。

このズレについてはさらに検討が必要であるが、ズレを生む一つの要因としてピトー圧計測に及ぼす希薄性の影響が上げられる。

Boyd はその論文 [4] の中で希薄流中のピトー圧計測について次のような補正式を用いている。

静圧、マッハ数から垂直衝撃波を仮定して計算

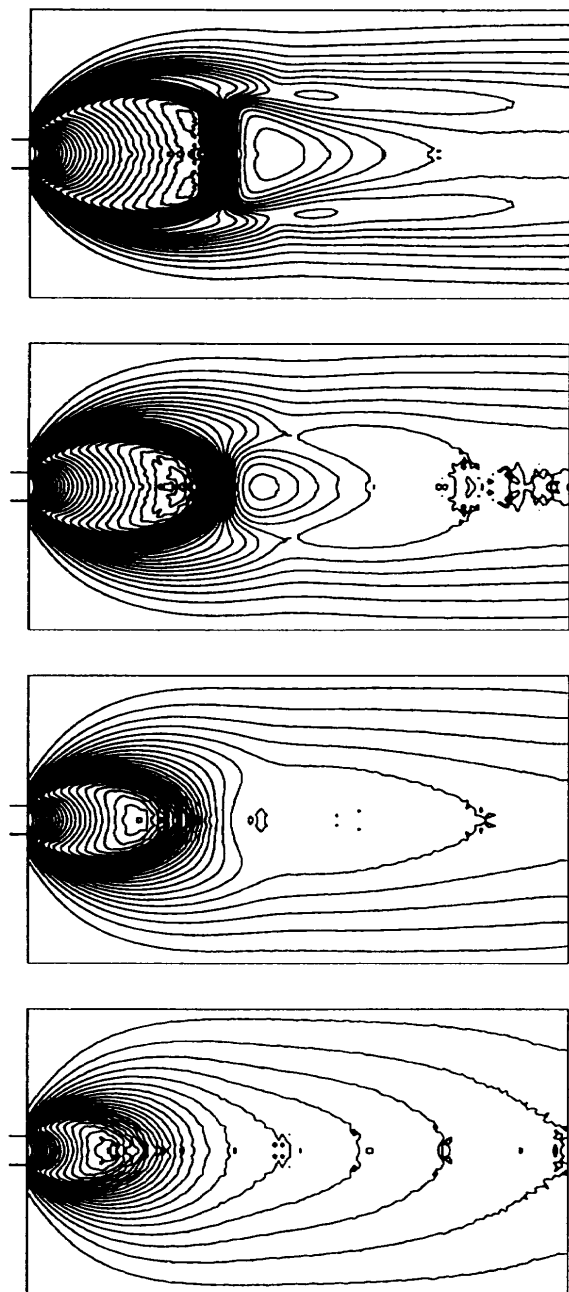


図 8: マッハ数分布 ($\Delta M = 0.2$)
上から $Re_D = 1170, 590, 294, 150$

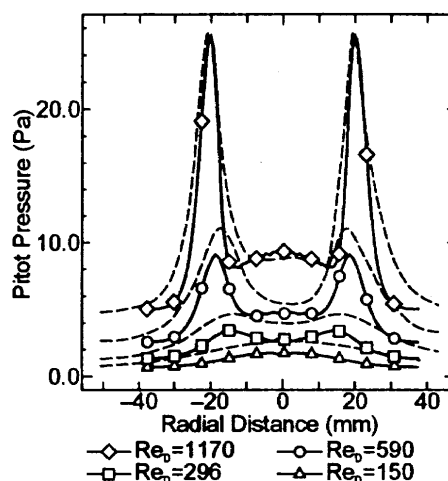


図 9: 半径方向ピトー圧分布 ($X/D = 6.0$)
DSMC (実線), 実験値 (破線)

される全圧を P_{0i} 、実際に計測されるピトー圧を P_{0m} とすると、超音速で $Re_p < 5.6$ の場合

$$\log\left(\frac{P_{0m}}{P_{0i}}\right) = 0.089 - 0.120 \log(Re_p)$$

ただし、 Re_p はプローブのレイノルズ数で、プローブ径を D_p として $Re_p = \frac{\rho_\infty U_\infty D_p}{\mu}$

$D_p = 2\text{mm} \sim 5\text{mm}$ とすると、 $Re_D = 590$ の例では中心線上、 $X/D = 6.0$ では $Re_p \sim 1$ で、 $\frac{P_{0m}}{P_{0i}} \sim 1.2$ となる。

$Re_D = 590$ の DSMC 法による計算結果についてこの補正式を逆に適用した結果を図 10 に示す。 D_p が明らかでない以上厳密な補正はできないが、ズレの大部分は説明できることが分かる。

5 まとめ

遷移領域の超音速自由噴流の数値解析を行い、必要な最小粒子数が 1 程度である事、また計算領域内の一部に密度の高い領域がある場合でも簡単な 2 次セル分割を行う事で十分正確な計算が行える。

計算結果と実験とは $Re_D = 1170$ の場合にはよく一致し、そのほかの場合のズレも合理的に説明可能である。

計算量の増大する 2 次元軸対象計算でも DSMC 法は、 $Kn \sim 0.1$ 程度まで実用的に適用し得るこ

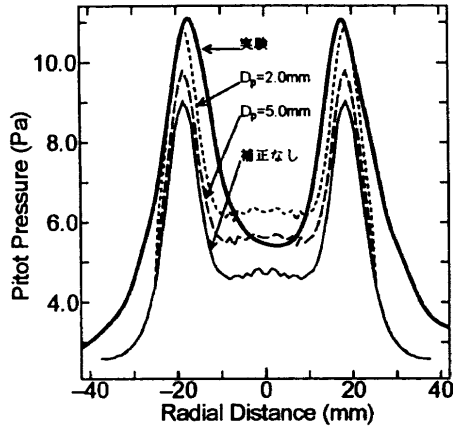


図 10: 半径方向ピトー圧分布 ($X/D = 6.0$)

DSMC, $Re_D = 590$ に対する補正值

とが確かめられた。

今後は NS 方程式により同様な計算を行い、DSMC 法と比較したい。

参考文献

- [1] K.Koura, "Null-collision technique in direct-simulation Monte Carlo method", *Phys.Fluids* **29**, 3509 (1986)
- [2] K.Koura and H.Matsumoto, "Variable soft sphere molecular model for inverse-power-law or Lennard-Jones potential", *Phys.Fluids* **A3**, 2459 (1991)
- [3] H.Ashkenas and F.S.Sherman, "The Structure and Utilization of Supersonic Free Jets in Low Density Wind Tunnels", *Rarefied Gas Dynamics Vol II*, 85 (1966)
- [4] I.D.Boyd, "Experimental and Numerical Investigation of Low-Density Nozzle and Plume Flows of Nitrogen", *AIAA J.* Vol. **30**, 2453 (1992)