

古浦勝久 (航空宇宙技術研究所)

## Molecular Models for Monte Carlo Simulation of Rarefied Real Gases

by

Katsuhisa Koura (National Aerospace Laboratory)

## ABSTRACT

The molecular models developed recently for use in the Monte Carlo simulation of rarefied real gases are briefly discussed.

## 1. はじめに

希薄実在気体モンテカルロ・シミュレーションのための高精度・高効率分子モデルの開発研究が精力的に進められているが、多くの研究はBorgnakke-Larsenに始まる現象論的モデルの拡張である。しかし、これらの現象論的モデルは分子特性との関係が不明な現象論的パラメータを含み、その値は問題ごとに異なる可能性がある。さらに、全衝突断面積をVariable Hard Sphere (VHS)モデル等の既知衝突断面積であると仮定し、弾性・非弾性衝突、化学反応等の各分子衝突過程はsteric factorと称する確率によって生起するとされる。このため、確率や確率の和が1を越える等の困難が生じる。

著者等はミクロな分子特性パラメータを用いた分子(衝突断面積)モデルの開発研究を進めている。全衝突断面積は各分子衝突過程に対する衝突断面積の和で与えられる。現在までに開発した衝突断面積モデルは文献1)-3)に詳述してあるので、本報告ではそれらの概略を述べる。なお、これらの断面積を用いた希薄実在気体モンテカルロ・シミュレーションのためにNull-Collision

Technique<sup>4)</sup>を改良したImproved Null-Collision Techniqueと原子の再結合シミュレーションのために導入したNull-Molecule概念が文献3)に記述されている。

## 2. 分子モデル

弾性衝突モデル<sup>1)</sup>

実在気体の粘性及び拡散係数の両者を良い精度で近似する計算効率の高いVariable Soft Sphere (VSS)モデルを開発した。VSSモデルは混合気体のシミュレーションにおいてVHSモデルよりも優れているが、両者とも速度分布関数の精度において不十分である。

回転非弾性衝突モデル<sup>2)</sup>

分子の衝突前後の回転状態の無相関の仮定、微視的詳細の釣り合い、Parkerのエネルギー利得関数等を用いてStatistical Inelastic Cross Section (SICS)モデルを開発した。SICSモデルは現象論的モデルにおける巨視的・微視的回転衝突数の混同等を解明し、窒素分子衝撃波中で測定された二極性回転分布等を良く再現するが、初期回転緩和が実験結果と比較して速すぎる難点がある。

振動非弾性衝突モデル<sup>3)</sup>

半古典的ITFITS振動遷移確率とLine-of-Centers Cross Section (LCCS)を微視的詳細の釣り合いを満たすように組合わせたITFITS-LCCSモデルを開発した。低温においてMillikan-Whiteの振動緩和時間の半経験式と良い精度で一致するように立体因子とポテンシャル・パラメータを決定する。ITFITS-LCCSモデルの高温での振動緩和時間はParkの予想と一致して温度の上昇に伴う増大を示す。調和振動子モデルを用いているので、非調和振動の影響を吟味する必要がある。

解離モデル<sup>3)</sup>

Weak-Vibrational-Bias (WVB)解離確率とLCCSを組合わせたWVB-LCCSモデルを開発した。(非平衡)解離速度定数の実験値と良い精度で一致するように立体因子とWVBパラメータを決定する。WVB-LCCSモデルによって求められた解離誘導時間は実験結果と良い一致を示す。調和振動子モデルを用いているので、非調和振動の影響を吟味する必要がある。

再結合モデル<sup>3)</sup>

三体再結合反応をOrbiting Pair (OP)の生成と安定化の二段階二体衝突で記述するTwo-Step Binary Collision (TSBC)モデルを開発した。OPの生成断面積は質量作用の法則から、また、OPの安定化断面積は解離断面積との微視的詳細の釣り合いから決定する。TSBCモデルは適合パラメータを含まないが、電子的励起を考慮していない。

## 参考文献

- 1) K. Koura et al., Phys. Fluids A3, 2459 (1991); A4, 1083 (1992); AIAA Prog. Astronaut. Aeronaut. 159, 459 (1994).

- 2) K. Koura, Phys. Fluids A4, 1782 (1992); A5, 778 (1993); AIAA Prog. Astronaut. Aeronaut. 158, 164 (1994).
- 3) K. Koura, Phys. Fluids 6, 3473 (1994).
- 4) K. Koura, Phys. Fluids 29, 3509 (1986); AIAA Prog. Astronaut. Aeronaut. 117, 25 (1989); Phys. Fluids A2, 1287 (1990).