

希薄気体数値風洞：モンテカルロ・シミュレーション

古 浦 勝 久*

Rarefied Gas Numerical Wind Tunnel: Monte Carlo Simulation

Katsuhisa KOURA
National Aerospace Laboratory

ABSTRACT

The rarefied gas numerical wind tunnel is under investigation using the Monte Carlo simulation (MCS) in order to simulate the rarefied gas flow around high-altitude flight bodies and space stations; the collision frequency method (CF-MCS) developed by Koura and the time counter method (TC-MCS) developed by Bird in the direct simulation method are applied. Some CF-MCS results are compared with the rigorous (numerical) solutions of the Boltzmann equation. These results agree within the statistical error with the rigorous solutions; therefore the accuracy of the CF-MCS is sufficiently ascertained. Some problems in the development of the rarefied gas numerical wind tunnel are discussed.

1. まえがき

航技研におけるスーパー・コンピューターを用いた Numerical Simulator (NS) 計画の一環として、モンテカルロ・シミュレーションによる希薄気体数値風洞の開発を計画している。高層大気飛行物体の空力性能解析・設計，宇宙基地の環境解析・設計等に関するソフトウェアの開発である。最終目標は3次元任意形状物体まわりの希薄気流シミュレーションであるが，2次元凸形状物体に対するソフトウェアの開発から進めていきたい。モンテカルロ・シミュレーション¹⁾は直接シミュレーション法 (Direct Simulation Method) において筆者が創案した Collision Frequency (CF) 法を用いる。

2. モンテカルロ・シミュレーション

平衡状態にある気体分子が飛行物体等により擾乱を受けると，分子間衝突によって平衡状態への回復が行われる。分子密度が高く，分子間衝突による平衡状態への回復速度が大きい低高度大気飛行物体まわりの流れは平衡状態に十分近く，従って通常の連続流近似方程式である Navier-Stokes 方程式または平衡状態回復速度無限大に対応する Euler 方程式により記述される。しかし，分子密度の低い高層大気飛行物体まわりの分子流 (希薄気流) は平衡状態への回復速度が遅く，平衡状態からのずれの程度が大きい。分子気体の非平衡が大きくなると連続流近似が適用できなくなり，分子速度分布関数の時間的・空間的变化を記述する Boltzmann 方程式を解かなければならない。平衡状態からのずれの程度は，分子の平均自由行程 λ (1 個の分子が他の分子と衝突

* 航空宇宙技術研究所

する平均（擾乱伝達）距離：分子密度に逆比例する）の擾乱物体代表長 l に対する比である Knudsen 数 $K_n = \lambda/l$ によって推定できる。通常、 $K_n \geq 0.1$ において連続流近似が悪くなる。従って $l \sim 1\text{m}$ の物体の場合、高度 100km 以上 ($\lambda \geq 10\text{cm}$) において Navier-Stokes 方程式が適用できなくなり、 Boltzmann 方程式を解く必要が生じる。

時刻 t において物理空間座標 \mathbf{r} で速度 \mathbf{v} をもつ分子数を表わす速度分布関数 $f(\mathbf{v})$ の時間的・空間的变化は Boltzmann 方程式²⁾

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} + \mathbf{a} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{v}} \\ = \int [f(\mathbf{v}')f(\mathbf{v}'_1) - f(\mathbf{v})f(\mathbf{v}_1)] \\ \times g\sigma(g, \Omega) d\Omega d\mathbf{v}_1 \end{aligned} \quad (1)$$

で記述される。ここに、 \mathbf{a} は外力による加速度であり、右辺は 2 体分子衝突による $f(\mathbf{v})$ の変化を表わす衝突積分である。 $(\mathbf{v}, \mathbf{v}_1)$ は衝突前の、 $(\mathbf{v}', \mathbf{v}'_1)$ は衝突後の分子速度、 $g = |\mathbf{v} - \mathbf{v}_1|$ は相対速度、 $\sigma(g, \Omega)$ は衝突微分断面積、 Ω は散乱立体角である。非線型多重積分である衝突積分は通常の数値積分法による取り扱いが困難であるため、Boltzmann 方程式を通常の数値計算法で解くことは行われていない。右辺の衝突積分をモンテカルロ積分法で評価して左辺を差分法で解く方法が Nordsieck, Hicks, and Yen³⁾ により創案された。しかし、この方法は速度空間のセル分割による多大な記憶容量を必要とすること、および逐次近似法の収れんの問題のため有効な数値解法になっていない。

現在のところ、Boltzmann 方程式の数値解を求める有力な方法はモンテカルロ・シミュレーション (MCS)¹⁾ である。モンテカルロ法とは一般に決定論的および確率論的問題を無作為抽出法を用いて解く方法と定義されるが、von Neumann and Ulam により導入された“シミュレーション” (自然の模型を利用する方法) を用いたモンテカルロ法をモンテカルロ・シミュレーションと定義する。分子気体力学における MCS は、分子の振舞い〔(外力場での) 分子運動、分子衝突、物体との干渉〕を Boltzmann 方程式の基づく仮定 (分子無秩序の仮定、2 体分子衝突、分子衝突に

おける時間的・空間的広がり無視) を用いて確率的にシミュレートしたシミュレーション分子をコンピュータにより無作為抽出法を用いて追跡し、分子の統計的特性 (速度分布関数、密度、流速、温度等) を求める数値実験である。現存の MCS はテスト粒子法 (Test-Particle Method) と直接シミュレーション法 (Direct-Simulation Method) に大別される。

テスト粒子法は、直接的相互干渉のない少数 (1 個) のシミュレーション分子 (テスト粒子) を分子運動、既知の統計的特性をもつ場の分子 (フィールド粒子) との衝突、および物体との干渉を通して追跡し、テスト粒子の履歴の集積から分子の統計的特性を求め方法である。テスト粒子法は、テスト粒子とフィールド粒子が原理的に分離可能である線型問題に対して有効に適用されている。テスト粒子とフィールド粒子が原理的に分離できない非線型分子流においては、Haviland and Lavin⁴⁾ が逐次近似法を創案した。テスト粒子を分子運動、前逐次ステップの統計的特性をもつフィールド粒子との衝突、および物体との干渉を通して追跡し、テスト粒子の履歴の集積からテスト粒子の統計的特性を求め、これを次逐次ステップのフィールド粒子の統計的特性とする。テスト粒子の統計的特性がフィールド粒子のそれと許容範囲内で一致するまで逐次ステップを繰り返す。しかし、このテスト粒子法も、速度空間のセル分割による多大な記憶容量を必要とし、また逐次近似法による収れんの問題を含んでいる。これらの困難は、テスト粒子とフィールド粒子に分離する必要のない直接シミュレーション法により克服されている。

3. 直接シミュレーション法

直接シミュレーション法は、多数のシミュレーション分子を分子運動、分子衝突、および物体との干渉を通して時間ステップ Δt の間一斉に追跡することにより、時刻 t の速度分布関数から時刻 $t + \Delta t$ のそれを求める方法である。直接シミュレーション法と Boltzmann 方程式との関係を図 1 に示す。シミュレーション分子の振舞いは Boltzmann 方程式の物理的導出法における気体分子の振舞いと同等にシミュレートする。従って、シミュレーション分子の Δt

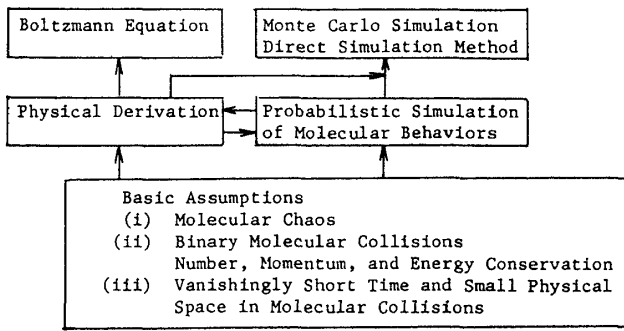


図1 直接シミュレーション法と Boltzmann 方程式との関係

時間の追跡によって求められる速度分布関数は、時間ステップ $\Delta t \rightarrow 0$ 、物理空間セル長 $\Delta x \rightarrow 0$ 、分子速度の最大値 $v_{max} \rightarrow \infty$ 、および物理空間セル内のシミュレーション分子数 $N \rightarrow \infty$ の極限において、Boltzmann 方程式の解と同等である。しかし実際の計算においては $\Delta t, \Delta x \gg 0$ および $v_{max}, N \ll \infty$ であるから、 $\Delta t, \Delta x \rightarrow 0$ および $v_{max}, N \rightarrow \infty$ に対する結果の取れんは注意深く調べる必要がある。

直接シミュレーション法の基本概念の確立と実用化は1970年代に完了した。Bird⁵⁾により創案された直接シミュレーション法において、分子の平均衝突時間 τ_c より十分小さい Δt に対して分子運動と分子衝突を分離して追跡する分離の仮定 (Assumption of Uncoupling) および分子衝突計算のための物理空間のセル分割が導入された (速度空間のセル分割は不要である)。各セルにおける Δt 時間の分子衝突数 n_c は衝突ペアから計算される時間増分 $\Delta t_p = (2/N)[ng\sigma(g)]^{-1}$ だけ進める Time Counter (TC) が Δt を越えるまでの衝突数とする。ここに、 n は分子数密度、 $\sigma(g)$ は衝突全断面積である。 $g \rightarrow 0$ の衝突ペアに対して、 $\Delta t_p \rightarrow \infty$ となることからわかるように、TC法は n_c を過少評価する傾向があるので注意を要する。Koura⁶⁾は物理空間のセル分割を独立に考案し、セル分割の導入は分離の仮定が成立するための新たな条件 $\Delta t \ll \tau_m$ をもたらすことを指摘した。ここに $\tau_m = \Delta x/v_c$ は分子運動特性時間、 v_c は特性分子速度である。外力場では、さらに $\Delta t \ll \tau_f$ が必要である。ここに、 $\tau_f = v_c/a_c$ は外力特性時間、 a_c は外力特性加速度である。条件 $\Delta t \ll \min(\tau_c, \tau_m, \tau_f)$ により、 Δt 時間の速度分布関数の変化は小さいから、各セルにおける Δt 時間の

分子衝突は独立かつ一様に起こると仮定できる。これを用いて、分子衝突頻度 ν を陽に計算する Collision Frequency (CF) 法が Koura⁶⁾により創案された。CF法では n_c を次のように決定する。各セルにおける時刻 t での全衝突頻度

$$\nu = (\Delta V/2) \int f(\mathbf{v}) f(\mathbf{v}_1) g \sigma(g) d\mathbf{v} d\mathbf{v}_1$$

をモンテカルロ積分法等で計算し、 Δt 時間一定と仮定する。ここに、 ΔV はセル体積である。従って、 Δt は $|\nu(t+\Delta t) - \nu(t)|/\nu(t) \ll 1$ を満たすように十分小さくとる必要がある。 n_c は決定論的に $n_c = \nu \Delta t$ または確率論的に $\sum_{k=1}^{n_c} (\Delta t_c)_k = \Delta t$ で与えられる。ここに Δt_c は分子衝突時間間隔であり、確率密度関数

$$p(\Delta t_c) = \nu \exp(-\nu \Delta t_c)$$

で指定される。CF法により離散的内部エネルギーをもつ半古典的分子モデルのシミュレーションが可能になり、回転・振動内部自由度、化学反応、輻射との干渉⁷⁾を伴う分子気体のシミュレーションに適用されている。また、CF法においては、 ν を陽に用いているから、BGK方程式等のモデル衝突項も容易に取り扱うことができる。

直接シミュレーション法における基本手続きは次の(i) - (iv)である。

- (i) 時刻 t の速度分布関数からシミュレーション分子に速度 \mathbf{v} および空間座標 \mathbf{r} を割り当てる。
- (ii) 分子運動による Δt 時間の座標移動 $\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r} + \mathbf{v}\Delta t$ を行う。境界 (物体) と干渉する場合には、境界条件に対応した処理を行う。
- (iii) 各セルにおける Δt 時間の分子衝突シミュレーションを行う。
- (iv) 各セルのシミュレーション分子の速度分布から時刻 $t + \Delta t$ の速度分布関数を求める。

分子運動および分子衝突を各々(ii)および(iii)で分離してシミュレート (分離の仮定) しているが、これは Boltzmann 方程式において、分子運動項 $[-\mathbf{v} \cdot \partial f / \partial \mathbf{r} : (1) \text{式左辺}]$ および分子衝突積分項 $[(1) \text{式右辺}]$ が分離して記述されていることに対応している。従って、時間ステップ Δt は条件 $\Delta t \ll \min(\tau_c, \tau_m)$ を満たす必要がある。(iii)における分子衝突シミュレーションの基本手続きは次の(a) -

(c)である。

(a) Δt 時間の分子衝突数 n_c の決定。TC法およびCF法による n_c の決定法はすでに述べた通りであるが、TC法においては n_c の過少評価、またCF法においては ν の計算時間を要する欠点がある。しかし、 ν の計算にモンテカルロ積分法を用いれば効率よく計算できるから、CF法における計算時間の増大は余り問題にならない。

(b) 衝突ペア (\mathbf{v}, \mathbf{v}_1)のシミュレーション分子 N からの抽出。衝突ペアの衝突頻度は $\nu_p = g\sigma(g)/4V$ で与えられるから、衝突ペアを確率密度関数 $p \propto g\sigma(g)$ によって抽出する。

(c) 衝突後の分子速度 ($\mathbf{v}', \mathbf{v}'_1$)の決定。衝突後の分子速度は確率密度関数 $p(\Omega) = \sigma(g, \Omega)/\sigma(g)$ から散乱立体角 Ω を指定し、運動量およびエネルギー保存から計算する。

TC法の詳細はBirdの本⁵⁾に、またCF法の詳細および流れ図はMatsuura編の本⁸⁾に記述されている。ここでは、BirdのTC法とKouraのCF法の確立過程を表1にまとめておく。

4. CF-MCSによる結果と厳密解との比較

Boltzmann方程式の厳密(数値)解が求められているいくつかの問題がある。シミュレーション法の正確さはこれらの厳密解と比較することによって検証できる。ここでは、CF-MCSによる結果と厳密解との比較を次の3例について示す。

4.1 Maxwell分子の速度分布緩和

Krook and Wu (KW)⁹⁾は一様等方性空間におけるMaxwell分子 [$\sigma(g, \Omega) = \kappa/g$]の速度分布関数 $P(v)$ の緩和に対する厳密な相似解を得た。KWの相似解を初期 ($t=0$)速度分布関数とし、等方性散乱 ($\kappa = \text{一定}$)の場合についてCF-MCSによって得られた結果(MCS)とKWの厳密解との比較を図2および表2に示す。図2に速度分布関数 $P \equiv P(v/v_0) [\int P d(v/v_0) = 1]$ の緩和を示す。ここに、分子速度 v および時間 t は各々 $v_0 = (2kT/m)^{1/2}$ および $t_0 = (4\pi n\kappa)^{-1}$ で無次元化してある。 T および n は気体温度および数密度、 m は分子質量、 k はBoltzmann定数である。MDはMaxwell分布であ

表1 直接シミュレーション法におけるTC法とCF法の確立過程

Direct Simulation Method	
TC-MCS (Bird)	CF-MCS (Koura)
1963 Collision Pair $p \propto g\sigma(g)$	
1965 Assumption of Uncoupling $\Delta t \ll \tau_c$	
1967 Cell Network in Physical Space	(1966) Cell Network in Physical Space $\Delta t \ll \text{Min}(\tau_c, \tau_m)$ Mixture
1968 Binary Mixture	1968
1970 Rough Sphere Model (Classical Model)	1970 External Force $\Delta t \ll \text{Min}(\tau_c, \tau_m, \tau_f)$
1971 Energy Sink Model (Phenomenological model) Gravitational Effect	
	1972 Semiclassical Model Internal Degrees of Freedom Chemical Reactions
	1975 Heat Bath
	1980 Interactions with Radiation

表2 Maxwell分子の速度分布緩和：Krook and Wuの厳密解との比較

v/v_0	t/t_0									
	0		1		3		5		∞	
	KW	MCS	KW	MCS	KW	MCS	KW	MCS	MD	
0.1	1.65	1.25 (-3)	1.35	1.45 (-2)	2.34	2.17 (-2)	2.69	2.80 (-2)	2.94 (-2)	
0.3	4.41	4.21 (-2)	1.05	1.02 (-1)	1.57	1.55 (-1)	1.76	1.82 (-1)	1.90 (-1)	
0.5	2.30	2.22 (-1)	3.10	3.05 (-1)	3.86	3.85 (-1)	4.15	4.17 (-1)	4.39 (-1)	
0.7	5.72	5.73 (-1)	5.98	5.98 (-1)	6.35	6.40 (-1)	6.55	6.55 (-1)	6.73 (-1)	
0.9	9.08	9.04 (-1)	8.51	8.45 (-1)	8.15	8.09 (-1)	8.08	7.97 (-1)	8.07 (-1)	
1.1	1.04	1.05	9.44	9.53 (-1)	8.59	8.69 (-1)	8.29	8.26 (-1)	8.10 (-1)	
1.3	9.15	9.18 (-1)	8.43	8.40 (-1)	7.63	7.60 (-1)	7.29	7.32 (-1)	7.01 (-1)	
1.5	6.43	6.51 (-1)	6.20	6.22 (-1)	5.80	5.75 (-1)	5.58	5.54 (-1)	5.35 (-1)	
1.7	3.68	3.68 (-1)	3.82	3.87 (-1)	3.81	3.82 (-1)	3.75	3.75 (-1)	3.64 (-1)	
1.9	1.75	1.69 (-1)	1.99	1.98 (-1)	2.18	2.18 (-1)	2.22	2.20 (-1)	2.22 (-1)	
2.1	6.99	7.22 (-2)	8.81	8.79 (-2)	1.09	1.09 (-1)	1.17	1.19 (-1)	1.23 (-1)	
2.3	2.35	2.14 (-2)	3.36	3.23 (-2)	4.76	4.70 (-2)	5.48	5.58 (-2)	6.13 (-2)	
2.5	6.75	7.50 (-3)	1.10	1.18 (-2)	1.83	2.00 (-2)	2.29	2.49 (-2)	2.79 (-2)	
2.7	1.65	2.45 (-3)	3.14	3.15 (-3)	6.24	6.05 (-3)	8.53	9.35 (-3)	1.16 (-2)	
2.9	3.47	4.00 (-4)	7.77	7.50 (-4)	1.88	1.85 (-3)	2.85	2.80 (-3)	4.39 (-3)	

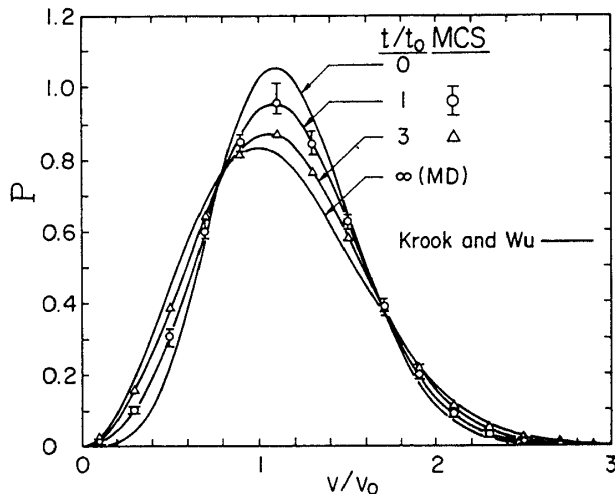


図2 Maxwell分子の速度分布緩和：Krook and Wuの厳密解との比較

る。シミュレーション分子数は $N = 10^4$ であり、I は CF-MCS による 10 個の独立なデータの変動範囲を示し、(○, △) は 10 個のデータの平均値である。CF-MCS による結果は KW の厳密解とよい一致を示している。CF-MCS によって得られる P は厳密には速度幅 $\Delta v/v_0 (= 0.2)$ における P の平均値

$$\bar{P}(v/v_0) = \int_{v/v_0 - 0.5(\Delta v/v_0)}^{v/v_0 + 0.5(\Delta v/v_0)} P d(v/v_0) / (\Delta v/v_0)$$

であるから、CF-MCS による \bar{P} の 10 個のデータの平均値 (MCS) と KW の \bar{P} の厳密値との比較を表 2 に示す。速度分布の端 $v/v_0 = 0.1$ および $v/v_0 \geq 2.5$ では、シミュレーション粒子数の減少のため MCS

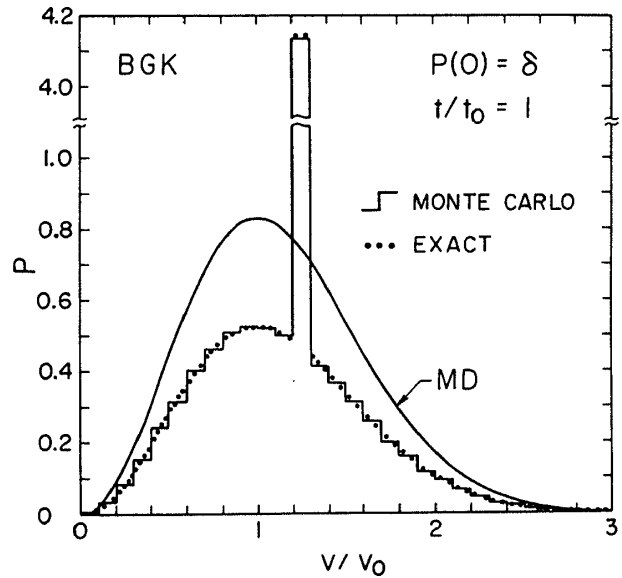


図3 BGK方程式による速度分布緩和：厳密解との比較

値は KW 値から約 10% のずれを示す。速度分布の中心部 $0.3 \leq v/v_0 \leq 2.3$ では、MCS 値は 1 ~ 3% の統計的誤差範囲で KW 値と一致する。

4.2 BGK方程式による速度分布緩和

一様等方性空間における分子の速度分布緩和を記述する BGK 方程式

$$\partial P / \partial t = \nu_c (P_{MD} - P)$$

の厳密解は、衝突頻度 $\nu_c = \text{一定}$ の場合、

$$(P - P_{MD}) / [P(0) - P_{MD}] = \exp(-\nu_c t)$$

で与えられる。ここに、 P_{MD} および $P(0)$ は Maxwell および初期速度分布関数である。BGK 方程式に対

するCF-MCSの基本手続きは文献1)に記述してある。図3に初期 δ 関数分布 $P(0) = \delta(v/v_0 - v_1/v_0)$ に対するCF-MCSの結果(MONTE CARLO)と厳密解(EXACT)との比較を時刻 $t/t_0 = 1$ において示す。ここに、 $v_0 = (2kT/m)^{1/2}$, $v_1 = (3kT/m)^{1/2}$, および $t_0 = 1/\nu_c$ である。 P は速度幅 $\Delta v/v_0 = 0.1$ における平均値であり、厳密解における初期分布は $P(0) \approx 1/0.1 = 10$ で近似する。CF-MCSによる結果は厳密解とよい一致を示している。

4.3 希ガス中における亜励起電子の熱電子化過程

CF-MCSは熱浴分子中の微少成分分子のシミュレーションにも適用できるので¹⁰⁾分子気体中における亜励起電子の熱電子化過程のシミュレーションを行った。¹¹⁻¹³⁾最近、希ガス中における亜励起電子のエネルギー(電子温度)減衰および電子速度分布緩和に対する(厳密な)数値解がShizgal¹⁴⁾およびShizgal and McMahon(SM)¹⁵⁾によりDiscrete Ordinate法を用いて得られた。SMと同様な運動量移行断面積を用いて得られたCF-MCSによる結果(MCS)とSMの数値解との比較を図4および図5に示す。気体温度 $T = 290.1\text{K}$ のHe, Ne, Ar, Kr, およびXe中における初期電子温度 $T_e(0)/T = u_0^2$ の初期 δ 関数速度分布に対する電子温度 T_e の減衰を

図4に示す。ここに、時間 t は電子エネルギー緩和時間 $t_0 = [(m/M)n\sigma_0(8kT/\pi m)^{1/2}]^{-1}(\sigma_0 = 1\text{\AA}^2)$ で無次元化してあり、 β は縮尺率である。 m および M は各々電子および原子質量、 n は気体数密度である。CF-MCSによる結果(MCS)はSMの(厳密な)数値解と統計的誤差の範囲内(シミュレーション電子数 $N = 10^4$ に対して数%程度)でのよい一致を示す。Ar気体中における初期 δ 関数速度分布に対する電子速度分布 $f^{(0)}[\int f^{(0)}d(v/v_{th}) = 1]$ の緩和を図5に示す。ここに、電子速度 v は熱電子速度 $v_{th} = (3kT/m)^{1/2}$ で無次元化してある。CF-MCSにより得られる $f^{(0)}$ は速度幅 $\Delta v/v_0 = 0.2$ ($v_0 = (2k \times T_e/m)^{1/2}$)における平均値 $\bar{f}^{(0)}$ であるから、 $t/t_0 < 0.6$ での細部にわたる比較においては $\Delta v/v_0$ をさらに小さくする必要があり、 $t/t_0 \geq 0.6$ においては、 $f^{(0)}$ と $\bar{f}^{(0)}$ との差は統計的誤差の範囲内であり、CF-MCSによる結果はSMの(厳密な)数値解と統計的誤差の範囲内での一致を示している。

CF-MCSによる結果とBoltzmann方程式の厳密解との比較は以上の3例の他にもいくつか行われているが、いずれも統計的誤差の範囲内での一致を示している。従って、CF-MCSによる結果の正確さは十分に検証されている。

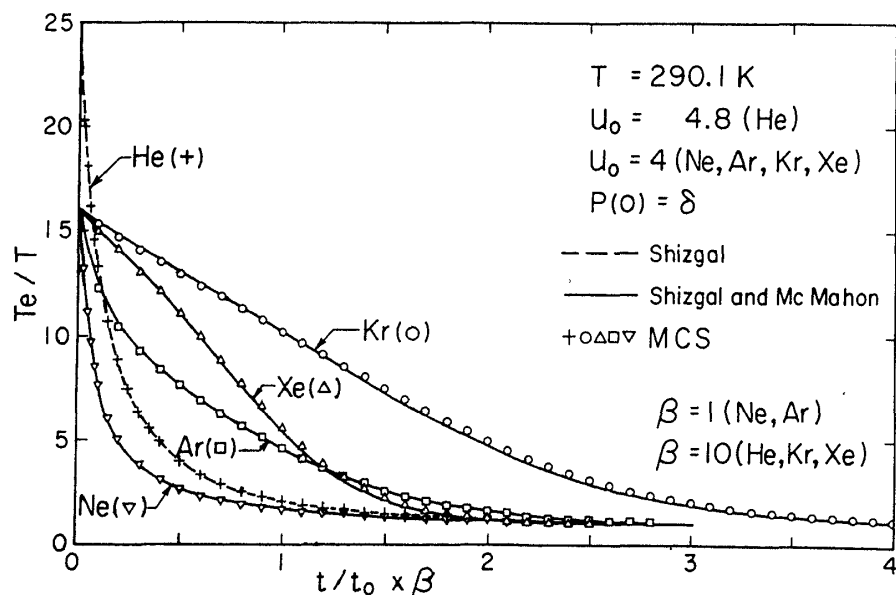


図4 希ガス中における亜励起電子の電子温度減衰：Shizgal and McMahonの厳密(数値)解との比較

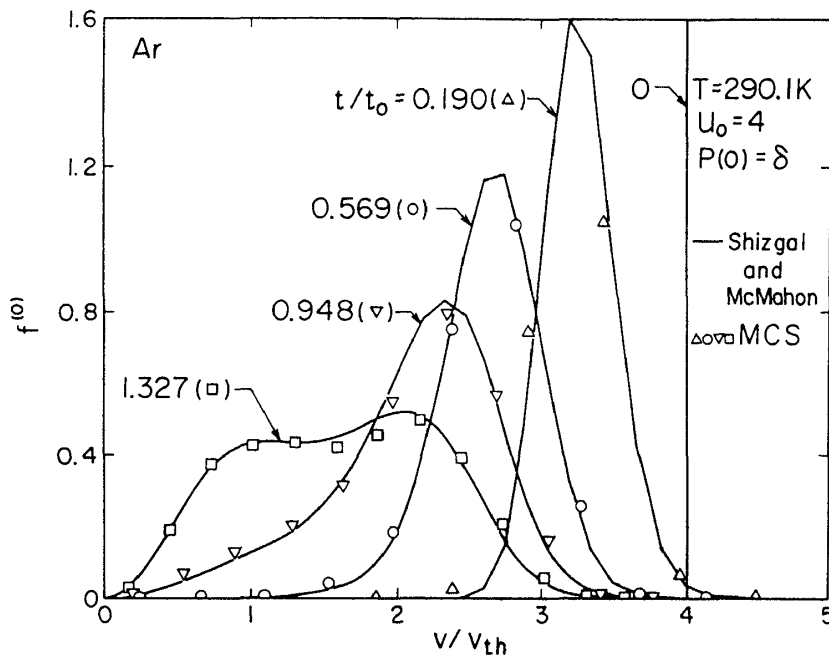


図5 アルゴン気体中における垂励起電子の速度分布緩和：Shizgal and McMahon の厳密（数値）解との比較

5. 希薄気体数値風洞

高層大気飛行物体まわりの希薄気流シミュレーションを行うための希薄気体数値風洞の開発はコンピュータの発展に強く依存している。コンピュータの計算速度はもちろんであるが、主記憶容量もCF-MCSに対する大きな制約となる。CF-MCSに必要な記憶容量は、物理空間の次元数を D とすれば、内部自由度のないシミュレーション分子1個当り空間座標 D および分子速度 3 の $(D+3)W$ であり、物理空間セル数 $N_c \sim (10^2)^D$ および各セル当りのシミュレーション分子数 $N \sim 10^2$ として、およそ $(D+3)N_c N \sim (D+3)10^{2(D+1)}W$ となる。従って、2次元物体の場合、5MW～25MB、3次元物体の場合、600MW～3GBの記憶容量が必要である。現存のコンピュータでは、複雑な形状をもつ2次元物体および3次元物体のシミュレーションは困難である。単純形状の2次元物体の場合でも、 K_n が小さくなると多大な N_c が必要となり、 K_n の下限もコンピュータの主記憶容量によって制約される。図6にCF-MCSによって得られたMach数10の一樣流中に迎角0で挿入された平板先端付近の数密度 n 、流速 u_x 、および温度 T の分布を示す。¹⁶⁾ $n_\infty, U_\infty,$

および T_∞ は各々一樣流の数密度、流速、および温度である。分子はMaxwell分子、平板は温度 T_∞ の完全拡散反射の場合である。 x は平板先端を原点とする一樣流方向座標であり、 y は平板上を原点とする x に垂直な方向座標である。 y 方向分布は一樣流の平均自由行程 λ_∞ 以下のスケールで変動しているから、 y 方向の物理空間セル幅 Δy は λ_∞ 以下にとる必要がある。計算領域の大きさ y_c は物体の大きさ l より大きくとる必要があるから、 y 方向のセル数は $y_c/\Delta y \geq l/\lambda_\infty = 1/K_n$ となる。 $y_c/\Delta y \sim 10^2$ として、 $K_n \geq 0.01$ が下限である。なお、Huang and Hwang¹⁷⁾のDiscrete Ordinate法によるBGK方程式の解との比較では、平板近傍での不一致がみられる。

希薄気流シミュレーションは1970年代に主にTC-MCSを用いて行われ、3次元物体¹⁸⁾、 K_n の小さい2次元物体($K_n \sim 0.0025$)¹⁹⁾等のシミュレーションも試みられた。しかし、 N_c が小さくおさえられていること等のため、実験値との一致は必ずしも良好ではない。分子間力(衝突断面積)および分子と物体表面干渉における不確定さも実験値との不一致の重要な原因である。また、高エンタルピー流では、分子の回転・振動緩和、分子の解離等の化学反応、分子の電子的励起、さらに電離等の複雑な過程が生じ

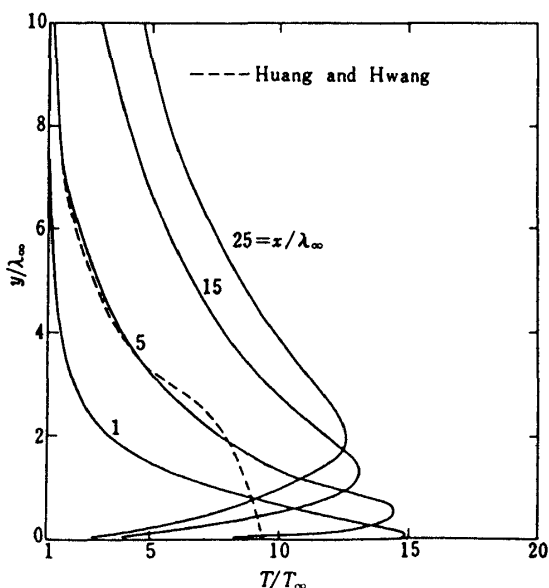
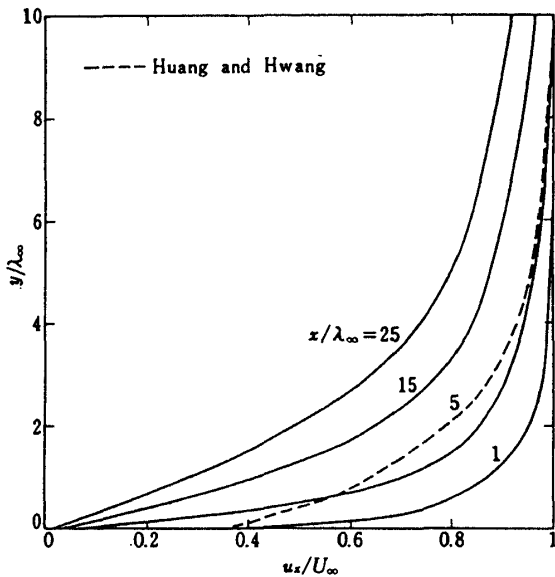
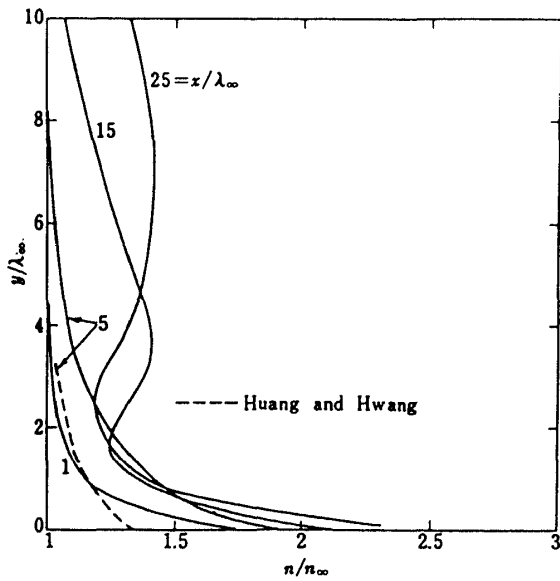


図6 極超音速流中における平板先端付近の
数密度・流速・温度分布

るため、シミュレーションは容易ではない。CF-MCSによる希薄気体数値風洞の開発においてもこれらの困難は避けられない。1980年代後半におけるコンピュータの発展を期待するとともに、上述の困難を克服することが必要である。

謝 辞

本研究の遂行に多大な関心を示された三好甫計算センター長（航空宇宙技術研究所）には温かい協力・援助を得たことをここに記して、深く感謝の意を表します。また、津田尚一（空気力学第一部）および斎藤月代（FHL）両氏はソフトウェア編成に協力されたことを付記したい。

参 考 文 献

- 1) 古浦勝久, ながれ 2, 127(1983). (解説)
- 2) S. Chapman and T.G. Cowling, *The Mathematical Theory of Non-Uniform Gases* (Cambridge Univ., London, 1939).
- 3) A. Nordsieck and B.L. Hicks, *Rarefied Gas Dynamics*, edited by C.L. Brundin (Academic, New York, 1967), Vol. I, p. 695; S.-M. Yen and B.L. Hicks, *ibid.*, Vol. I, p. 785.
- 4) J.K. Haviland and M.L. Lavin, *Phys. Fluids* 5, 1399 (1962).
- 5) G.A. Bird, *Molecular Gas Dynamics* (Oxford Univ., London, 1976).
- 6) K. Koura, *Phys. Fluids* 13, 1457 (1970); Dr. Thesis, Univ. of Tokyo, Tokyo, 1969.
- 7) K. Koura, *J. Chem. Phys.* 72, 268 (1980).
- 8) K. Koura, *Hot Atom Chemistry*, edited by T. Matsuura (Kodansha, Tokyo, 1984), p. 180.
- 9) M. Krook and T.T. Wu, *Phys. Fluids* 20, 1589 (1977).
- 10) K. Koura, *J. Chem. Phys.* 63, 3302 (1975).
- 11) K. Koura, *J. Chem. Phys.* 79, 3367 (1983).
- 12) K. Koura, *J. Chem. Phys.* 80, 5799 (1984).
- 13) K. Koura, *J. Chem. Phys.* 81, 303 (1984).
- 14) B. Shizgal, *Chem. Phys. Lett.* 100, 41 (1983).

- 15) B. Shizgal and D.R.A. McMahon, *J. Phys. Chem.* **88**, 4854 (1984).
- 16) K. Koura, NAL TR-289T (1972); *Proc. Tenth Int. Symp. Space Technology and Science*, edited by S. Kobayashi (AGNE, Tokyo, 1973), p. 409.
- 17) A.B. Huang and P.F. Hwang, IAF Paper, No. RE63 (1968).
- 18) G.A. Bird, *Rarefied Gas Dynamics*, edited by R. Campargue (Commissariat à l'Energie Atomique, Paris, 1979), Vol. I, p. 365.
- 19) C.L. Merkle, H.W. Behrens, and R.D. Hughes, *Rarefied Gas Dynamics*, edited by S.S. Fisher (AIAA, New York, 1981), Part I, p. 256.

