

# ダイレクト・シミュレーション・モンテカルロ法による Knudsen層の数値シミュレーション

齋藤 定\* 古浦 勝久\*\*

## Numerical Simulation of the Knudsen Layer Dynamics Using the Direct Simulation Monte Carlo Method

by

Sadamu SAITO

*NEC Corporation*

Katsuhisa KOURA

*National Aerospace Laboratory*

### ABSTRACT

Numerical simulation of the Couette flow problem is carried out using the Direct Simulation Monte Carlo (DSMC) method. Velocity profiles in the Knudsen layer obtained using the DSMC method are compared with available analytical solutions of the simplified Boltzmann equation and experimental results. The comparison shows satisfactory agreement among the three when the speed of the walls is small. Then, it is demonstrated that the DSMC method is applicable to the dynamical simulation of gas, even when the speed of the flow is smaller than the typical molecular thermal speed.

### 1. 序 論

気体力学の解析において、コンピュータを用いた数値シミュレーションは理論解析や風洞実験とならぶ有力な手段となりつつある。周知のごとく気体は分子から構成されている。問題とする現象の代表的長さスケール( $L$ )が気体分子の平均自由行程( $\lambda$ )と比べて十分に大きい場合( $\lambda/L \ll 1$ )には気体の連続体近似がよい精度で成立つので Navier-Stokes 方程式を出発点とした解析を行うことができる。ところが、 $\lambda/L$ が0.1程度以上になると次第に気体の“粒子性”が顕著となり、連続体近似の妥当性は薄れていく。これは、(1)気圧

が低いために気体分子の平均自由行程が長くなっている場合、あるいは、(2)扱う問題の代表的長さスケールが小さい場合、においては気体を分子の集まりとみなした解析を行わなければならないことを意味する。

DSMC(Direct Simulation Monte Carlo)法は気体力学の粒子系解析の最も有力な手段の一つである。DSMC法は解析を行う領域内に置かれた多数のシミュレーション分子の移動および分子間衝突を繰り返すことにより気体力学を数値的にシミュレートしようとするものである。本研究では DSMC 法により固体境界平面の近傍における気体の流速分布を調べることを目的としている。

\* 日本電気株式会社

\*\* 航空宇宙技術研究所

## 2. 数値モデル

### 2.1 DSMC 法

本研究で用いた数値シミュレーション手法の DSMC法について簡単に述べることにする。DSMC 法における処理は図1に示したような手順で行われる。まず、数値シミュレーションで問題とする空間を与え、そこに多数のシミュレーション分子を配置する。これらのシミュレーション分子の並進運動および分子間衝突を繰り返すことにより時間が進められていく。時刻  $t$  における  $i$  番目のシミュレーション分子の位置を  $\vec{r}_i(t)$ 、速度を  $\vec{c}_i(t)$  とすると時刻  $t + \Delta t$  の位置は  $\vec{r}_i(t + \Delta t) = \vec{r}_i(t) + \Delta t \cdot \vec{c}_i(t)$  と与えられる。境界との衝突があった場合には(1)鏡面反射、(2)拡散反射、あるいは、(3)鏡面反射と拡散反射とを一定の割合で混用する、の3種のいずれかの条件が用いられる。分子間の衝突処理は物理空間を分割したセルごとに行われる。衝突処理のアルゴリズムとしては Null Collision 法 (NC法) (Koura, 1986)を用いる。NC法では、まず、現実の衝突に対応する  $S_{\text{real}} = g \sigma(g)$  に加え、衝突により速度が変化しない仮想的な衝突による寄与  $S_{\text{null}}$  を込みにした  $S_{\text{max}} = S_{\text{real}} + S_{\text{null}}$  (=定数) を用いて分子間衝突の頻度  $\nu = (nN/2) S_{\text{max}}$  を求める。ここで、 $g$  はセル内から選び出されたシミュレーション分子対の相対速度、 $\sigma(g)$  はシミュレーション分子

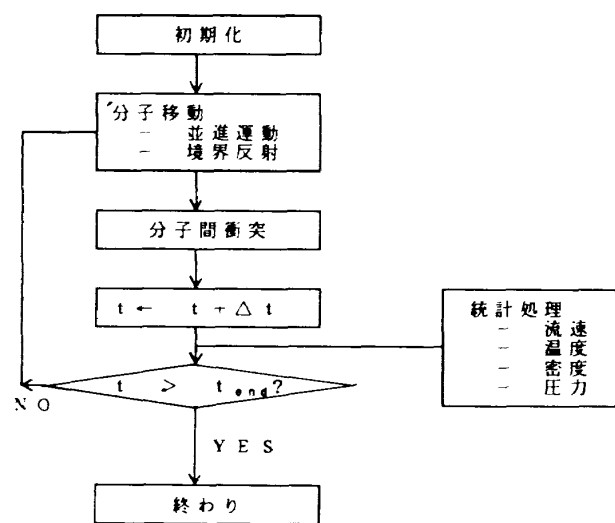


図1 DSMC法における計算処理の手順を示す流れ図。

の衝突断面積、 $n$ はセル内のシミュレーション分子の数密度、 $N$ はセル内の分子数をそれぞれ示す。 $S_{\text{real}} / S_{\text{max}} > R_f$ ならば分子間衝突による速度の変化を計算する。一方、 $S_{\text{real}} / S_{\text{max}} \leq R_f$ ならば衝突による速度の変化はないものとする。ここで、 $R_f$ は  $[0, 1)$  上の一様乱数を示す。このように、分子の移動と分子間衝突を分離して計算するためには時間ステップ  $\Delta t$  は  $\Delta t \ll \min(\tau_{\text{motion}}, \tau_{\text{collision}})$  でなければならない (Koura, 1970)。ここで  $\tau_{\text{motion}}$  および  $\tau_{\text{collision}}$  はそれぞれ分子のセル内での並進運動および衝突の代表的タイムスケールを示す。

### 2.2 Couette 流

図2に示したように  $z = z_B$  および  $z = z_T$  に距離  $H$  ( $=10\lambda$ ) を隔てて、温度  $T_w$  の無限  $xy$  平面があり、2平面間は空気で満たされている。これらの2平面は一定温度  $T_w$  に保たれつつそれぞれ  $x$  軸の正および負方向に一定の速さ  $U_w$  で動いている。このような平行移動する2平面間の流れは Couette 流と呼ばれる。2平面間の空間を図3のような体積  $\Delta V = \Delta x \Delta y \Delta z$  のセルに分割する。各セルにおいて  $x$  および  $y$  方向にはサイクリックであるものとする。 $z$  方向には  $H$  を100分割した ( $\Delta z = H/100 = 0.1\lambda$ )。境界平面ではシミュレーション分子は拡散反射をするものとする。初期には、シミュレーション分子は静止した標準状態に対応する Maxwell 分布をしている。

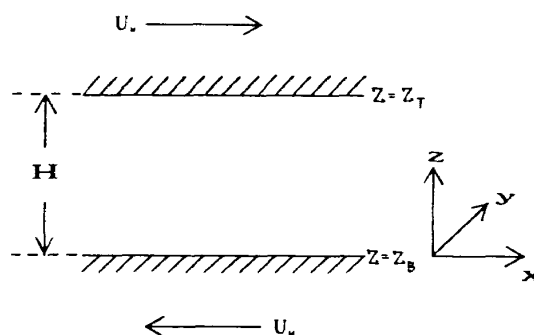


図2 Couette 流問題の設定を示す図。  
 $z$  方向に距離  $H$  を隔てて温度  $T_w$  の2枚の無限  $xy$  固体平面  $z = z_B$  および  $z = z_T$  がある。これら2平面は  $x$  方向に、互いに逆向きの一定速度  $U_w$  で移動している。

表1 ケースの設定

ケース名	$U_w / C_m$ (*)	$K_0$ (**)	$K_{TTL}$ (***)	N D A T A (****)
CASE_10.0	10.0	20	2000	15000
CASE_01.0	1.0	50	5000	45000
CASE_00.1	0.1	200	20000	915000

(\*) : most probable molecular thermal speed、 $C_m$ 、で規格化した平板境界面の移動速度

(\*\*) : 一つの空間セル当りのシミュレーション分子の平均個数

(\*\*\*) : 全シミュレーション分子数

(\*\*\*\*) : データの平均に用いた時間ステップの数

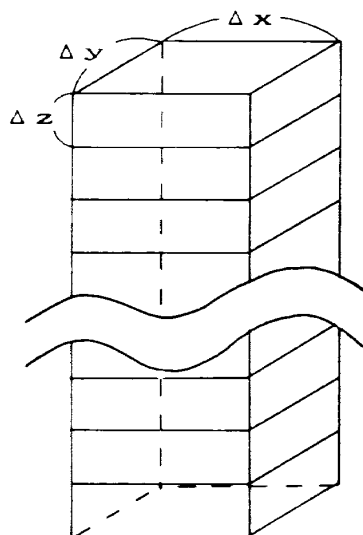


図3 2つの境界平面間の空間のセル分割を示す図。

### 2.3 ケースの設定

境界平面の移動速度 $U_w$ の大小による速度分布の変化を調べるため表1に示した3ケースの数値シミュレーションを行った。 $U_w$ が小さいほど流れの速さに対する分子の熱運動による揺らぎが相対的に大きくなるため、セル内の粒子数や平均処理に使用するデータのサンプル数を大きくし分散を小さくする必要がある。

### 3. 結果および議論

図4にCASE 10.0のシミュレーション結果を示

した。図4(a)は流速の $x$ 成分 $U$ が境界平面の距離とともに変化する様子を示したものである。 $U$ は2平面の中心付近ではほとんど直線であるが、下の境界平面付近で下に凸に、また、上の平面の付近で上に凸になっていることが読み取れる。この図を拡大したものが図5に示してある。実線は $z/\lambda=4$ から $z/\lambda=6$ の間のデータから最小2乗法により求められた直線である。 $U$ の速度分布が直線からずれているのは境界平面からの距離が $2\lambda$ の範囲内であり、特に距離 $\lambda$ の範囲内で直線からのずれが顕著となっている。このような固体境界平面からの距離が気体分子の平均自由行程程度の領域では気体の“粒子性”による効果が本質的な役割を果たしている。図4(b)および(c)はそれぞれ $y$ および $z$ 方向の流れの速度の $z$ プロファイルであるが、これらの図にあらわれているのは速度0を中心とする値のばらつきである。温度のプロファイルは図4(d)に示されているが、2平面の中間で温度の上昇は最大となりおよそ9200Kにも達する。この温度の上昇は、平面とシミュレーション分子の衝突により平面の並進運動の運動エネルギーが分子の運動エネルギーに変換されることによる。図4(e)で、シミュレーション分子の数密度は上下の境界平面からの距離がそれぞれ $\lambda$ の範囲内では増加しているが、この領域外ではほぼ一定の値となっている。図4(a)および図5にみられる上下境

## CASE 10

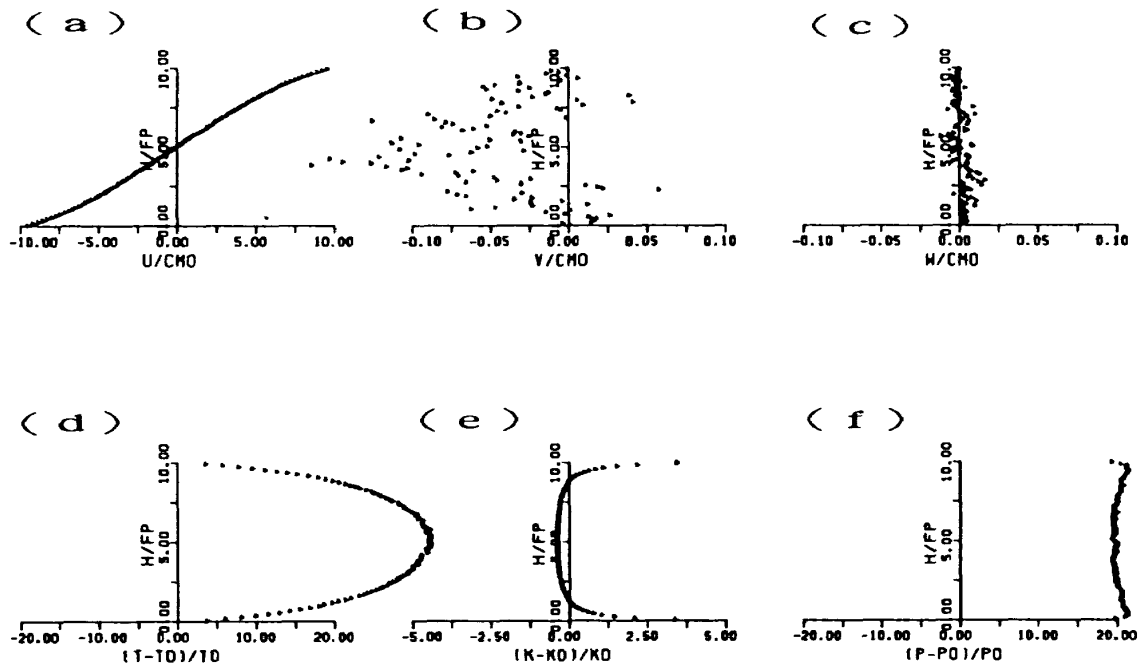


図4(a) CASE 10.0の流速の $x$ 成分が境界平面からの距離とともに変化するようすを示す図。横軸は分子の熱運動の代表的な速度、 $C_m$ で規格化された流速を、縦軸は気体分子の平均自由行程で規格化された下の境界平面からの距離をあらわす。

(b) 図4(a)と同様、ただし流速の $y$ 成分について。

(c) 図4(a)と同様、ただし流速の $z$ 成分について。

(d) 図4(a)と同様、ただし $(T-T_0)/T_0$ について。ここで $T$ は温度を、 $T_0(=273.16\text{K})$ は温度の基準値を示す。

(e) 図4(a)と同様、ただし $(K-K_0)/K_0$ について。ここで、 $K$ はセル内のシミュレーション分子数を、 $K_0$ はセル内のシミュレーション分子数の基準値を示す。

(f) 図4(a)と同様、ただし $(P-P_0)/P_0$ について。ここで、 $P$ は気圧を、 $P_0$ は気圧の基準値を示す。

界付近での $x$ 方向の速度分布の直線からのずれは、このような境界平面付近でのシミュレーション分子数の増大によるものと考えられる。気圧は温度の上昇のために全体的に高くなっているが各場所ではほぼ一定の値をとっている[図4(f)を参照]。

CASE 01.0およびCASE 00.1においても基本的にCASE 10.0と同様な傾向を示す結果が得られているが、 $x$ 方向の速度の直線からのずれの大きさははじめ温度、密度、気圧などの変化の大きさは全般的にCASE 10.0の場合よりもかなり小さくなっている。

次に、Knudsen層内の気体の流速の特徴について、本シミュレーションの結果を既存の実験デー

タ、ならびに Boltzmann 方程式の衝突項を簡略化し解析的に得られた解との比較を行うことにする。まず、問題を明確にするため、Knudsen 層についての説明をしておくことにする。 $z=0$ および $z=H$ に固体境界平面があり、それぞれ $x$ 方向に一定の速さ $\pm U_w$ で運動している。 $z=0$ の境界付近の流速の $x$ 成分のプロファイルをスキマティックに示したのが図6である。横軸は分子の熱運動の代表的速さ $C_m$ で規格化した $x$ 方向の流速を、縦軸は気体分子の平均自由行程で規格化した $z=0$ の境界からの距離を示す。境界平面からの距離が平均自由行程よりも十分大きい場所では流速は一定のシア $(dU/dz)_{z=x}$ をもち、ここでは Navier-

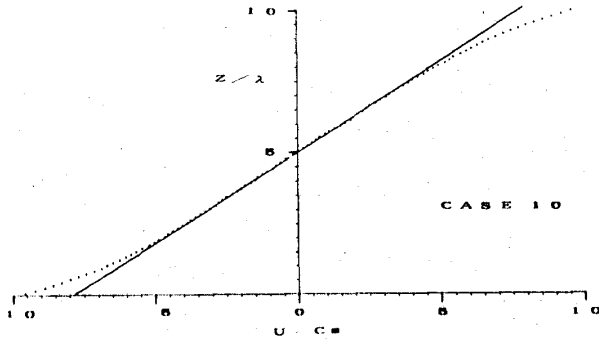


図5 CASE 10.0において流速の  $x$  成分が境界平面からの距離とともに変化するようすを示す図。横軸は気体分子の熱運動の代表的な速度  $C_m$  で規格化した流速を、縦軸は平均自由行程  $\lambda$  で規格化した下部の境界平面からの距離を示す。点は数値シミュレーションの結果を表わしている。実線は2つの境界平面の中心付近の20点を用い、最小2乗法により求められた直線を示す。

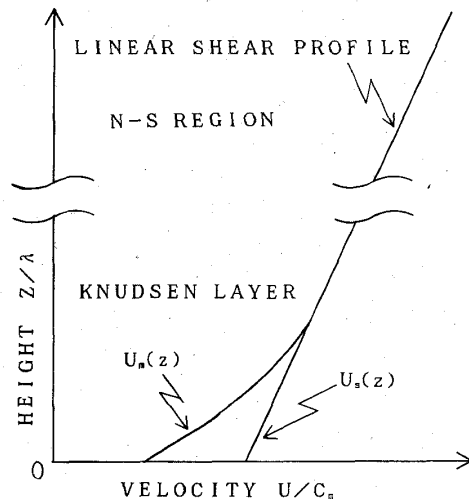


図6 固体境界平面付近の流速のプロファイルスキマティックを示す図。横軸は流速を、縦軸は境界平面からの距離を示す。境界平面から十分に離れた領域では流速は一定のシア  $(dU/dz)_{z=\infty}$  をもつ。一方、境界面の近傍では流速は  $U_m(z)$  で示されるような下に凸な曲線となる。直線  $U_s(z)$  は境界面から十分離れた場所の一定のシアをもつ速度プロファイル境界付近にまで外挿したものである。 $U_s(z)$  と  $U_m(z)$  の差を  $(dU/dz)_{z=\infty}$  で規格化したものを  $I(z)$  と定義する。

Stokes 方程式がよい近似となるので N-S region と呼ぶことにする。一方、境界面からの距離が平均自由行程程度の境界の近傍では流速のシアは一定ではなく、図6の  $U_m(z)$  で示されているように境界面に近づくとシアーは大きくなっていく。このような境界面の近傍の層は Knudsen 層と呼ばれている。ここで、Knudsen 層内の速度プロファイルの特徴をよりはっきりさせるために  $I(z)$  という量を導入する。 $I(z)$  は  $U_s(z)$  と  $U_m(z)$  との差を Knudsen 層外のシア  $(dU/dz)_{z=\infty}$  で規格化したものである。ここで、 $U_s(z)$  は Knudsen 層外の一定のシアをもつ速度プロファイル Knudsen 層内に外挿したものである。以下では、流速  $U$  をそのまま使うかわりに、いま定義をした  $I(z)$  を用いて議論をすることにする。

本数値シミュレーションの結果、既存の実験結果および Boltzmann 方程式の衝突項を簡略化し解析的に得られた解のそれぞれについて、 $I(z)$  と  $z/\lambda$  との対応関係が図7に示されている。図中で実線は Boltzmann 方程式の BGK 近似モデルに基づく解析結果を、破線は Boltzmann 方程式の hard sphere gas モデルによる解析結果をそれぞれ示す (Loyalka and Hickey, 1989)。 $\times$ 、 $\triangle$  および  $\circ$  は

実験結果を示している (Reynolds et al., 1974)。また、本数値シミュレーションの結果は  $\blacksquare$  (CASE 10.0,  $U_w/C_m=10$ )、 $\bullet$  (CASE 01.0,  $U_w/C_m=1$ ) および  $\blacktriangle$  (CASE 00.1,  $U_w/C_m=0.1$ ) で示してある。ここで、実験結果および解析的に求められた曲線は境界面の移動速度  $U_w$  が分子の熱運動の代表的速度、 $C_m$  と比較して十分に小さい ( $U_w \ll C_m$ ) 場合に対応している。すなわち、数値シミュレーションを行った3ケースのうちでは境界面の移動速度の小さい CASE 00.1 が解析解および実験結果を得た状況に最も近いことになる。CASE 10.0 および CASE 01.0 のような境界面の移動速度が、分子の熱運動の代表的速度と同程度あるいはそれよりも大きい場合には解析的手法は使えず、ここで使っている DSMC 法が有力な手段となる。 $U_w/C_m=0.1$  の CASE 00.1 では、破線で示される Boltzmann 方程式の hard sphere gas モデルによる解析

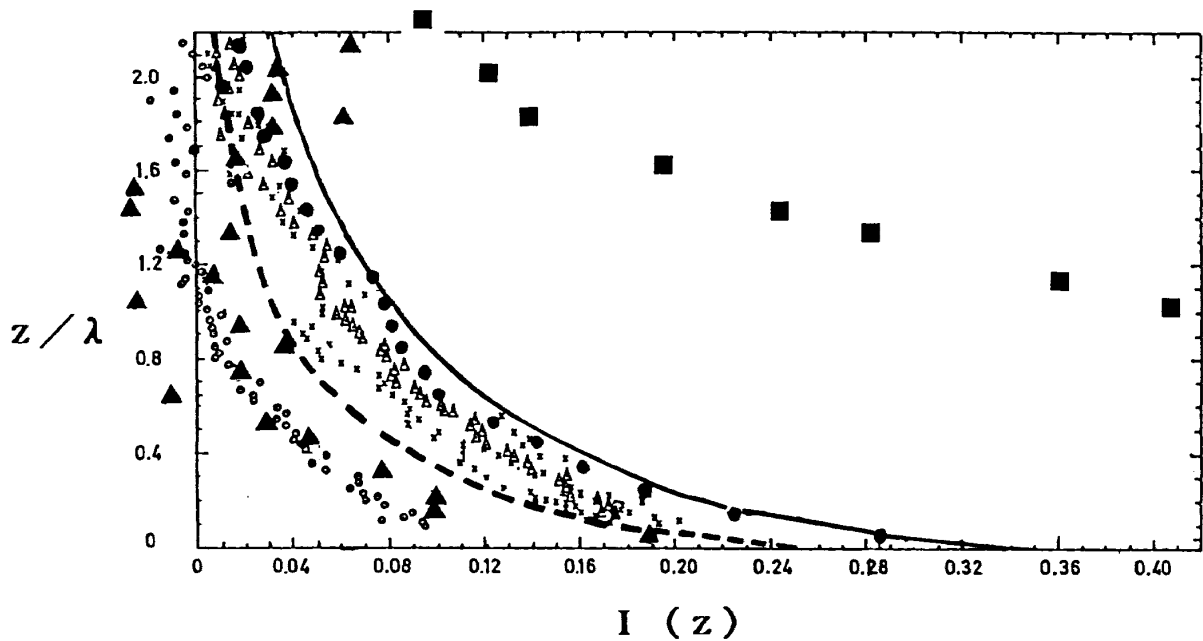


図7  $I(z)$ が境界平面からの距離とともに変化するようすを示す図。横軸は $I(z)$ を、縦軸は平均自由行程で規格化された境界平面からの距離を示す。詳細は本文を参照。

解や○で示される実験結果に近い値をとっている。しかしながら、シミュレーションで用いている分子数またはデータの平均に用いているデータ数がまだ十分でないためCASE 10.0やCASE 01.0の結果と比べると結果のばらつきが大きい。このように、シミュレーション結果のばらつきによる不確実性は残っているものの、本数値シミュレーション結果は Boltzmann 方程式の近似解析解や実験結果とよい対応のあることが示された。なお、CASE 00.1の結果は Test Particle Monte Carlo法(Gorelov and Kogan, 1968)や DSMC法(Bird, 1977)によるシミュレーションの結果ともよい対応を示す。

#### 4. 結 論

DSMC法により Couette 流の数値シミュレーションを行った。境界面からの距離が平均自由行程程度の Knudsen 層内の速度プロファイルにつき、境界面の移動速度が分子の熱運動の代表的長さに比べて小さい場合の本数値シミュレーション結果と、Boltzmann 方程式の近似解析解および実験結果との比較をしたところ、これらはよい対応を示すという結果を得、超音速や遷音速のみならず亜音速の気流の解析にも DSMC法が有効であること

が確認された。

#### 5. 謝 辞

本研究を行う上で助力をいただいた航空宇宙技術研究所数理解析部の三好部長、日本電気(株)C & C情報研究所情報基礎研究部の中村部長、岡本課長および速水主任、同所応用システム研究部の永井部長に感謝の意を表します。

#### 6. 引用文献

- G.A. Bird, Prog. Astronaut. Aeronaut, **51**, 323-333 (1977).
- S.L. Gorelov and M.N. Kogan, Fluid Dyn., **3**, 96-98 (1968).
- K. Koura, Phys. Fluids, **13**, 1457-1466 (1970).
- K. Koura, Phys. Fluids, **29**, 3509-3511 (1986).
- S.K. Loyalka and A. Hickey, Phys. Fluids, **A1**, 612-614 (1989).
- M.A. Reynolds, J.J. Smolderen, and J.F. Wendt, in Rarefield Gas Dynamics, edited by M. Becker and M. Fiebig (DFVLR, Prozedur, Germany), **1**, p. A-21 (1974).