

DSMC 法による星型断面を持つ超音速自由噴流の分子シミュレーション

Molecular Simulation of Supersonic Free Jets with Star-Shaped Cross Section by the DSMC Method

- 宇佐美 勝, 三重大工, 三重県津市上浜町 1515, usami@mach.mie-u.ac.jp
手島 光司, 京都教育大, 京都市伏見区深草藤森町 1, teshima@kyokyo-u.ac.jp
Masaru Usami, Mie University, 1515 Kamihama-cho, 514-8507 Tsu
Koji Teshima, Kyoto University of Education, Fushimi-ku, 612-0863 Kyoto

Supersonic free jets from an orifice with convex and concave corners are investigated in three-dimensional field by the DSMC method. The plumes develop faster from the concave corners of a hexagram orifice with symmetric cross section than those from the convex corners. The mechanism of the development is revealed through the observation of velocity vectors right behind the orifice. The directions of flow are also investigated in various cross sections of a jet. There is a complicated flow-field and several circulations of flow are observed. The variation of cross section of a star-shaped jet along the jet axis changes with the ratio of a stagnation pressure to a background pressure. In an asymmetric orifice, a plume from a concave corner is inclined to an adjacent plume and they are merged into a bigger plume.

1. 緒論

オリフィスあるいはノズルから流出する超音速希薄自由噴流は、真空装置への気体導入あるいは宇宙におけるロケット推進等で利用されるため、詳細な解析が望まれている。筆者らは、これまでに、直接シミュレーションモンテカルロ法 (DSMC 法)⁽¹⁾ を自由噴流の解析に適用し、マッハディスク (垂直衝撃波) やパレルショック (樽形衝撃波) を分子シミュレーションで再現することに成功している^(2,3)。さらに、平行流出する二つの噴流の干渉解析にもこの手法を適用し、DSMC 法が希薄噴流の解析に有効であることを示している⁽⁴⁾。さて、矩形孔のように軸対称形ではないオリフィスから流出する自由噴流の断面は、オリフィス断面とは異なる形状に発達することが知られている。手島は、凹凸の角をもつ多辺形断面のオリフィスから流出する自由噴流の構造をレーザー誘起蛍光法 (LIF 法) で可視化し、噴流断面の変化の様子を観測した⁽⁵⁾。このような噴流断面の変化は、気体混合の促進に利用可能であると思われる。噴流断面形状の変化のメカニズムは、噴流軸に垂直な面での気体の渦運動がその一因とも考えられているので、その詳細な解明には、三次元場における分子シミュレーションが最も適している。本研究は、複雑な断面形状 (六線星形形状) を持つオリフィスから流出する超音速希薄自由噴流を DSMC 法で解析したものである。三次元計算においては、流れ場を分割するセルの数が非常に多くなるため、セルあたりの分子数は小さな値に制限されて、極端な場合には、セルあたり 1 個あるいはそれ以下になってしまう。筆者らは、先の自由噴流の DSMC 計算において、セル中に存在する分子は、1 個あるいはそれを若干下回っても、計算に重大な影響を及ぼさないことを確認している。今回の計算では、セル内分子数の平均値は約 0.7 であり、必ずしも十分とは言えないが、DSMC 計算は有効に機能する。DSMC 計算により、星形のへこみ部分 (凹部) から流出した噴流の方が、星形の突起部分 (凸部) から出た噴流よりも半径方向に大きく広がるという、LIF 実験に一致する結果を再現することができた。このような噴流発達のメカニズムは、オリフィス直後の流れのベクトル図を描くことにより容易に明らかにできる。噴流軸に垂直な任意断面で流れのベクトル図を描くと、そこには非常に複雑な流れが観測され、渦対にも似た流れ模様も見ることができた。その複雑な流れ模様は、圧力比 (上流よどみ点圧力と背圧の比) によっても変化する。

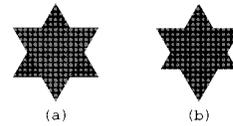


Fig. 1: Cross sections of orificers (a) and (b).

2. 計算条件

図 1 に、計算に用いた六線星形オリフィスの断面形状を示す。図 1 (a) は対称形であるが、図 1 (b) は上下に非対称となっている。計算は、主に、クヌッセン数の逆数 $1/Kn = 2500$ 、圧力比 $p_0/p_1 = 12.5, 50, 100$ について行った。ここで Kn は、上流よどみ点における平均自由行程 λ を、代表長さであるオリフィスの水力学的な等価直径 d で割算したものであり、 p_0 はよどみ点圧力、 p_1 は最下流での背圧である。DSMC 計算における流れ場は、オリフィスに対して上流側と下流側に分割されている。上流領域の典型的な大きさは、 $1.5d \times 1.5d \times 3d$ であり、下流領域の典型値は、 $19.8d \times 12.6d \times 12.6d$ である。分子モデルは、アルゴンに相当する VHS 分子⁽¹⁾ を用いた。粘性係数の温度指数 ω は、常温における値を用いている。噴流の温度は、膨張によって急激に減少するが、単一気体のシミュレーションでは ω を定数と見なしても問題は無い。分子間衝突計算法には Null-collision 法⁽⁶⁾ を用いた。この方法は、Bird の No-time-counter 法⁽¹⁾ と同様な計算法であり、最大衝突数法とも称される。なお、この衝突計算法に使われる最大衝突数の算出には、Bird のプログラムコード⁽¹⁾ にあるようなセル内分子数の平均値を用いるのではなく、セル内分子数の瞬時値を使用した。オリフィス壁面における分子衝突には拡散反射 (散乱反射) を仮定した。上流側境界から流入する分子 (上流境界で発生させる分子) の速度成分は、境界線に垂直に巨視的速度を持つ局所的平衡状態の速度分布関数から速度をサンプリングする方法で作成した。この巨視的速度は、上流側境界における流量が、オリフィス孔面で測定した流量および下流側境界で測定した流量にバランスするように調整される。一方、下流側境界から流入する分子の速度成分は、巨視的速度を持たない静止平衡状態の分布関数からサンプリングし、下流密度に対応する流入数だけ発

クの生じる位置までは、下流に進むほど等比級数状にセル辺を大きくし、密度減少に応じてセル体積を増加させるようにした。マッハディスクを越えてからは一定形状のセルにしている。

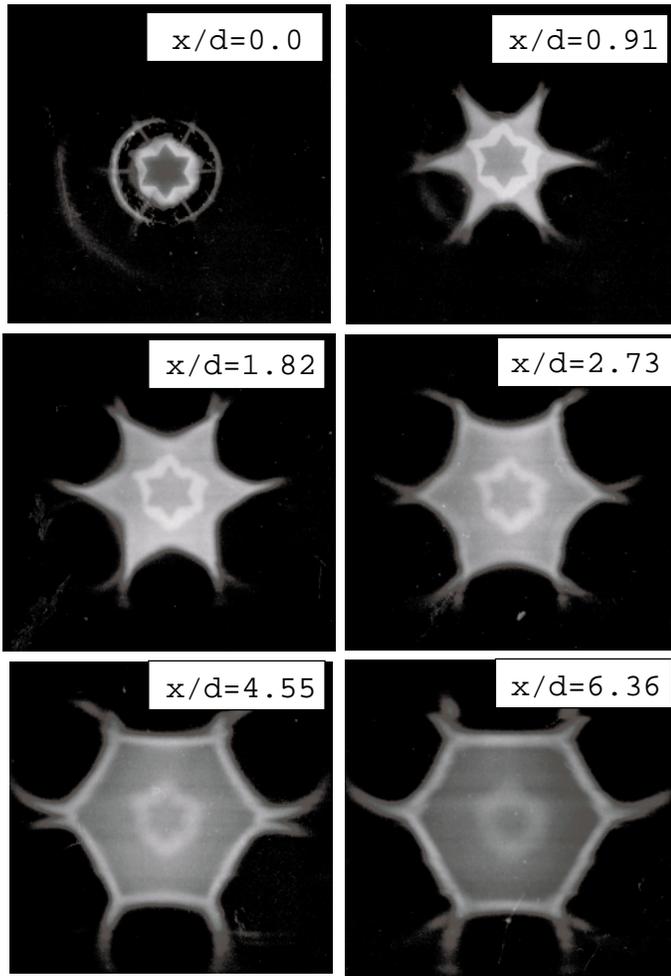


Fig. 2: Visualization using a laser induced fluorescence (LIF) technique. ($p_0/p_1 = 100$)

生させた。計算機内に同時に存在する分子数(総分子数)は約2000万個、セル総数は約3000万個である。先にも述べたようにセル内に存在する平均分子数は約0.7個となる。ここで、セルの中に平均で分子が1個あるいはそれ以下しかない場合、衝突相手が見つからないのではないかと疑問に答えておくことにする。例えば、時間平均でセルの中に1個しか分子がない場合、統計的変動により、ある場合にはセル内分子数がゼロとなる。平均で1を確保するためには、ときどきセル内分子数が2となる必要があるし、低い確率ながら3となる場合もあるであろう。セル内に2個以上の分子が存在するときに衝突が生じ、一見不十分のように見える分子数でも統計計算を行ってみると理論衝突数を満たすことが証明できる⁽³⁾。ただし、セル内分子数が極端に小さくなると(例えば0.1個)同じ分子同士が頻りに衝突するようになり、この場合、理論衝突数は満たしてもDSMC計算としては成り立たなくなる。三次元計算でセル数が多くなれば、有限容量の計算機を用いる限り、セル内分子数を小さくせざるを得ないので、セル内分子数1という値は、噴流計算における標準最小値という意味を持つことになる。なお、DSMC法は、本質的に非定常計算であり、定常状態を解析する場合もそれに到達するまでの非定常状態を計算する必要がある。セル内分子数を極力小さくすることは、この非定常計算の負荷を小さく抑えるという意味でも重要なことである。オリフィスより上流側のセルは同じ大きさの立方体であるが、下流側は、マッハディス

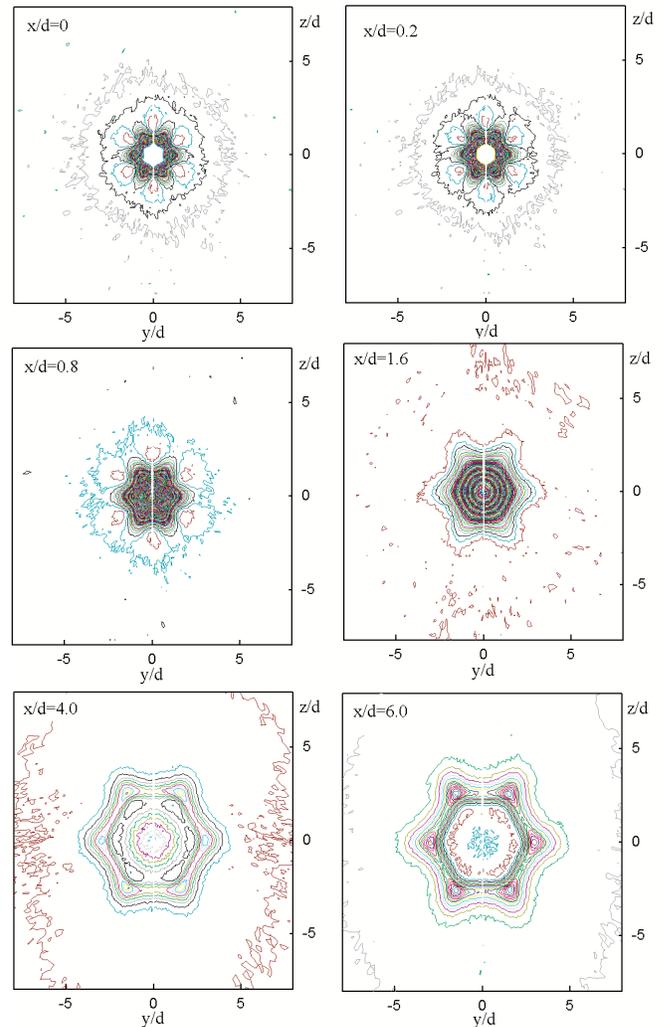


Fig. 3: Density contours obtained by the DSMC method. ($1/Kn = 2500$, $p_0/p_1 = 100$)

3. 結果および考察

まず、圧力比 $p_0/p_1 = 100$ において、実験とDSMC計算の比較を行った。図2に、LIF実験によって得られた結果を示す。オリフィスの等価直径は2.2mm、よどみ点圧力は100Torr、背圧は1Torrで、圧力比は100である。一方、図3は、 $1/Kn = 2500$ 、圧力比100の条件のDSMC計算で得られた密度分布の結果である。図2および図3は、共に、噴流軸に垂直な平面での分布形状を眺めたものである。オリフィス直後において、実験(図2)では、オリフィスの凹部分からの細い噴流が勢いよく成長しているのが見られる。一方、DSMC計算(図3)では、実験で見られるほど細くはないが、やはり凹部分から噴流の噴出しが生じており、オリフィスを出た直後に馬車の車輪のような密度分布を形造っている。下流へ進むにしたがって、実験では、噴流は尖った星型で成長していく、六角形の噴流となる。また、星型の先端と六角形の頂点からは細いジェットの噴出しが揺らいで生じている。一方、計算では星型あるいは六角形はできるものの、頂点は尖っておらず、頂点からの細いジェットの噴き出

しも見られない。この理由としては、DSMC 計算において、セル内分子数の少ないのを補うために、近隣のセルを集合させて平均化処理をしたことと、さらには、時間的にもある幅の時間を同一状態のものとしてサンプリングしたことが考えられる。すなわち、今回の DSMC 計算では、データを平均するためのセル幅と時間幅が大き過ぎて、実験のような微細構造が再現されなかったものと思われる。

図 4 は、DSMC 計算の密度分布を 3 次元グラフで表現して、変化の様子を眺めたものである。縦軸は、よどみ点の密度で無次元化して示している。 $x/d=3.0$ を超える付近から、六角形の頂点の密度が増加し始め、それとは逆に、噴流中心軸の密度が低下していく様子が見られる。図 5 はマッハ数分布を、また、図 6 は半径方向速度および円周方向速度を描いたものである。半径方向速度は、外側へ向かう方向を正にとり、円周速度は、反時計回りを正にとっている。いずれの速度も、よどみ点の温度における最大確率速度で無次元化している。オリフィス直後におけるマッハ数分布には、同一断面内で激しい変化が見られるが、 $x/d=1.6$ より下流では、比較的穏やかな分布に落ち着いている。一方、半径方向速度は、噴流の星型の腕の内部で速度極大値をとる傾向にある。また、星型噴流の周囲で負の値をとっていることから、周囲から気体を巻き込みながら星型を形成していることが分かる。このことは、後述の速度ベクトル線図でも明らかになる。なお、円周方向速度分布において、噴流の腕の根元において、その右側が反時計回り、左側が時計回りの流れとなっている。すなわち、噴流の周囲から巻き込まれた流れは、噴流腕の根元で、腕を成長させる方向に向きを変えている。このことも、後述のベクトル線図で明らかになる。

図 7 は、下流境界における背圧を倍とすることにより、圧力比を 50 にして求めた密度分布である。圧力比 100 に比べて、星型の腕の成長がより大きくなり、腕の根元の極大値の成長も著しくなる。図 8 は、圧力比 50 における LIF 実験の結果を示している。この場合、オリフィス凹部分から出た噴流の腕は、短時間に、隣の腕と引き合ったり離れたりして、両隣の腕の間で激しく揺れ動き、あたかも二本の噴流腕が生じているように見えている。図 9 は、圧力比 50 における DSMC 計算の結果の一部であるが、サンプルセルおよびサンプル時間をかなり細かく設定して求めた密度分布の一面 ($x/d=1.2$) である。この結果を得るためには相当の計算量を必要とし、それにもかかわらず満足できる結果とはなっていないが、辛うじて細いジェット噴き出しと、ジェットの腕の湾曲らしきものが観測できる。なお、図には示していないが、背圧をさらに増加させて、圧力比 12.5 とした計算も行ったが、逆に星型噴流の腕の成長は鈍くなった。このことから、腕の成長に、圧力比が及ぼす影響が大きいことが考えられる。したがって今後、さらに広範囲の圧力比に対する調査が必要である。

図 10 は、オリフィス直後およびオリフィスから $2d, 4d, 6d, 8d$ の位置における断面形状 (密度等値線) である。この結果は計算負荷を軽減するために右半分だけで計算したものであるが、全領域計算したものと全く同じ結果が得られた。小さな孔径の場所 (オリフィスの谷) から、噴流が大きく成長していくことが再現されている。図 11 は、オリフィス直後の流れの方向をベクトル線図で示したものである。星型孔から出た気体は、孔の輪郭線にほぼ垂直な方向に流れ出すため、反対方向から進んできた流れと中間位置で衝突し、そこで一体となって外側へ押し出されて、あたかも孔の谷の位置 (凹部分) から噴流が成長しているように見える。このように、オリフィス孔断面の山と谷とが逆になった形で、噴流断面は成長していく。

図 12 は、マッハディスクの生ずる直前の位置 ($x/d=6.5$) の噴流断面において、流れの方向 (方向のみ) を矢印で描いたものである。複雑な流れ場の中に、循環流が対をなして生じていることが確認できる。軸方向に大きな流速を持つ流れを、単に、一断面だけ眺めて特徴をつかむというのは、必ずしも十分なことではないが、一応、以下のように流れの様子をまとめることができる。すなわち、噴流のコアの部分では半径方向外向きの流れが生

じているのに対し、コアの外側では、まず、噴流の腕の部分は全体として外向き流れであり、腕と腕の間は内向き流れとなっている。しかし、腕の根元部分は内向き流れが生じている。腕の中的外向き流れは、腕の先端で左右に二つに分かれ、腕の外に出て内向きとなり、腕と腕との間の内向き流れに合流する。その内向き流れは、噴流のコア部に達する前に、一部が方向を変え、今度は、腕の中的外向き流れに合流する。このように、流れは全体として循環しており、腕の左右で渦対模様を呈している。

図 13 は、上下に非対称な孔 (b) から流出した噴流の、オリフィス直後およびオリフィスから $d, 2d, 4d, 6d, 8d$ の位置における断面形状を密度等値線で示したものである。星型が非対称となったことでオリフィス輪郭線の長い場所から出た流れが優勢になり、噴流は傾いて伸びる。さらにその噴流は、隣の噴流 (逆方向に傾斜して発達していく) と合体し、結果として、大きく成長することとなる。

図 14, 15 は、これまでの分子シミュレーションとは異なり、噴流を連続流体と見なし、有限体積法 (Adaptive research 社 CFD2000) で数値計算したものである。圧力比は 50 であるが、連続体としての性質を確保するために上流よどみ点の圧力は 10 気圧、背圧は、0.2 気圧としている。図 14 が密度分布、図 15 がマッハ数分布で、オリフィス面からの距離 $x/d=0.37$ の断面上的のものである。密度分布の図 14 では、星形オリフィスの孔の輪郭をはっきり見ることができるので、孔の谷の位置から噴流の腕が伸びている様子を確認することができる。また、マッハ数分布の図 15 では、腕の先端が、わずかに曲げられている様子も観察できる。この計算については、まだ、周囲境界条件など改善しなければならないところが多く、この結果だけからは、噴流の特性について議論することはできないが、今後、DSMC 計算と同時に押しすすめていくことにより、噴流形状の、よどみ点圧力に対する依存性など、より高度な解析が期待できるものと考えられる。

4. 結論

星形断面を持つオリフィスから流出する超音速噴流について、DSMC 法による解析を行い、以下のような結論を得た。

(1) 噴流の腕は、星形孔の凹部分から半径方向に急速に発達するが、凸部分からの広がりはそれほどでなく、結果として、噴流断面は、星形オリフィスの断面とは、逆転した形で形成される。

(2) 噴流の腕の発達の機構は、噴流軸に垂直な断面における流れのベクトル線図を描くことにより、解明することができる。

(3) DSMC 計算で得られた噴流断面形状は、LIF 可視化実験で得られた結果に矛盾するものではないが、六角形断面の頂点から伸びる細い噴流とその振動模様までは再現できなかった。

(4) 連続流体を仮定した計算でも、DSMC 計算および LIF 実験と同様な噴流の腕の発達を再現することができた。今後、分子シミュレーションと連続流体シミュレーションを比較して解析をすすめれば、より高度な噴流構造の解明が期待できる。

謝辞

有限体積法の計算を行うにあたっては、三重大学工学部プロセス解析研究室の加藤久喜君および小川哲男君の協力を得た。ここに感謝の意を表す。

参考文献

1. Bird, G. A., "Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows," (1994), Clarendon Press, Oxford.
2. 宇佐美, 手島, "オリフィス自由噴流に関する DSMC 計算 (DSMC 法による垂直衝撃波と樽形衝撃波の再現)," 日本機械学会論文集, 62-598B(1996), pp. 2215-2222.
3. 宇佐美, 手島, "DSMC 法による超音速自由噴流の分子シミュレーション," 日本機械学会論文集, 64-620B(1998), pp. 1112-1119.
4. 宇佐美, 手島, "平行流出する超音速噴流の相互干渉に関する三次元 DSMC 計算," 日本機械学会論文集,

65-630B(1999), pp. 444-450.

5. Teshima, K., "Characteristic of Supersonic Expansion from Polygonal Orifices with Convex and Concave Corners," *Rarefied Gas Dynamics*, Edited by R. Brun, et al., Sepadues-editions, **2**(1999), pp. 577-584.
6. Koura, K., "Null Collision Monte Carlo Method: Gas Mixtures with Internal Degrees of Freedom and Chemical Reactions," *Progress in Astronautics and Aeronautics*, **117**(1989), pp. 25-39.

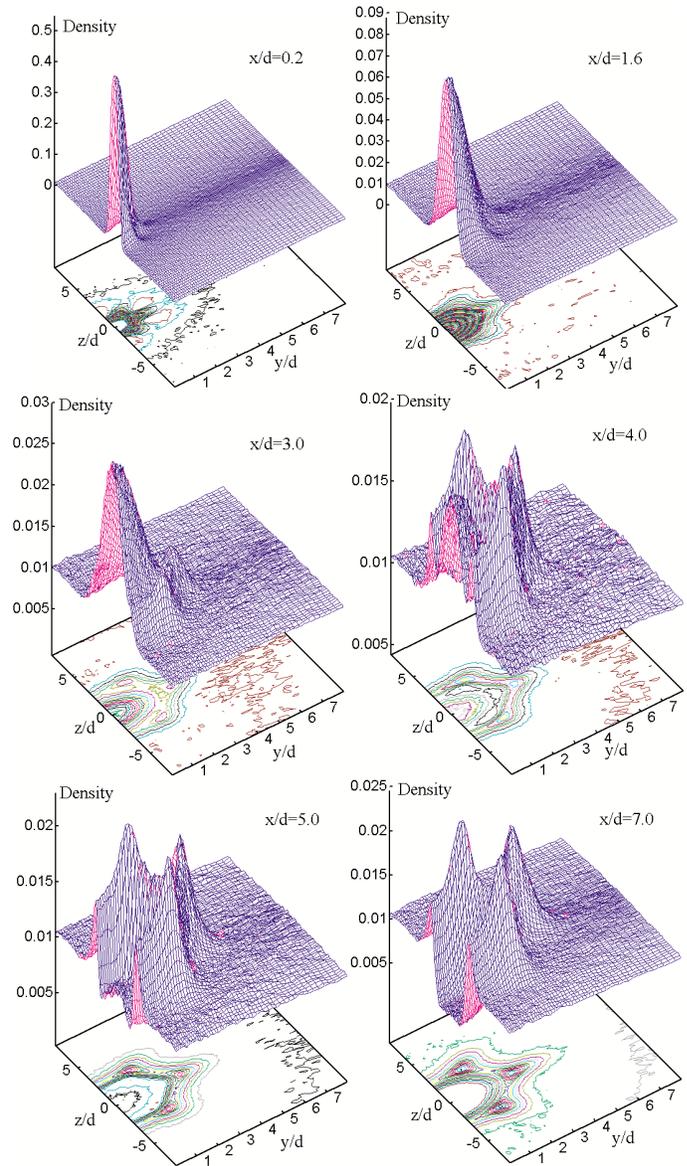


Fig. 4: Density profiles by the DSMC method in 3-dimensional graph. ($1/Kn = 2500$, $p_0/p_1 = 100$)

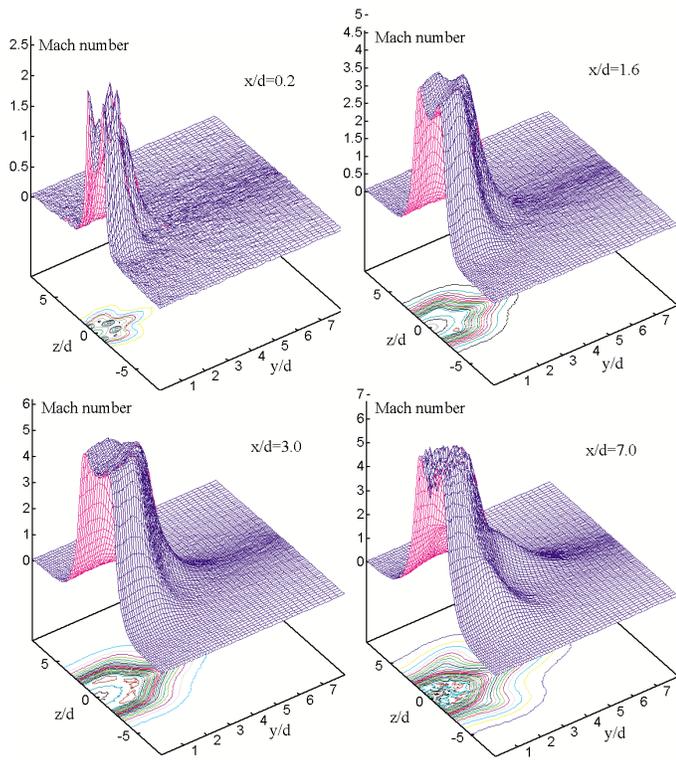


Fig. 5: Mach number profiles. ($1/Kn = 2500$, $p_0/p_1 = 100$)

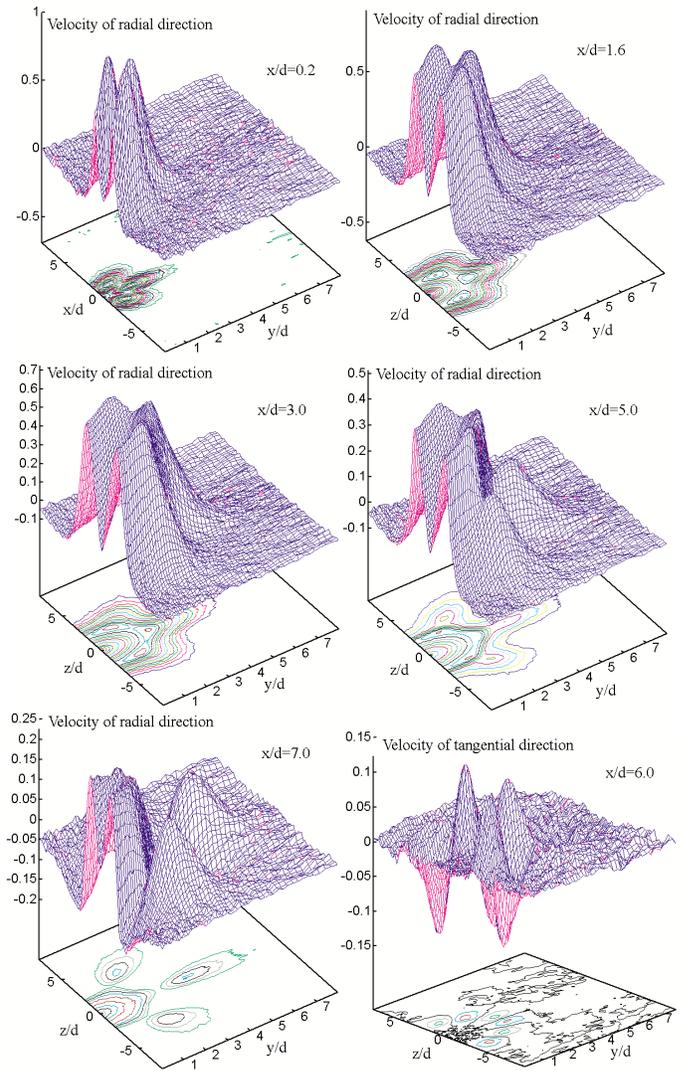


Fig. 6: Velocity profiles of radial direction, and velocity profiles of tangential direction. ($1/Kn = 2500$, $p_0/p_1 = 100$)

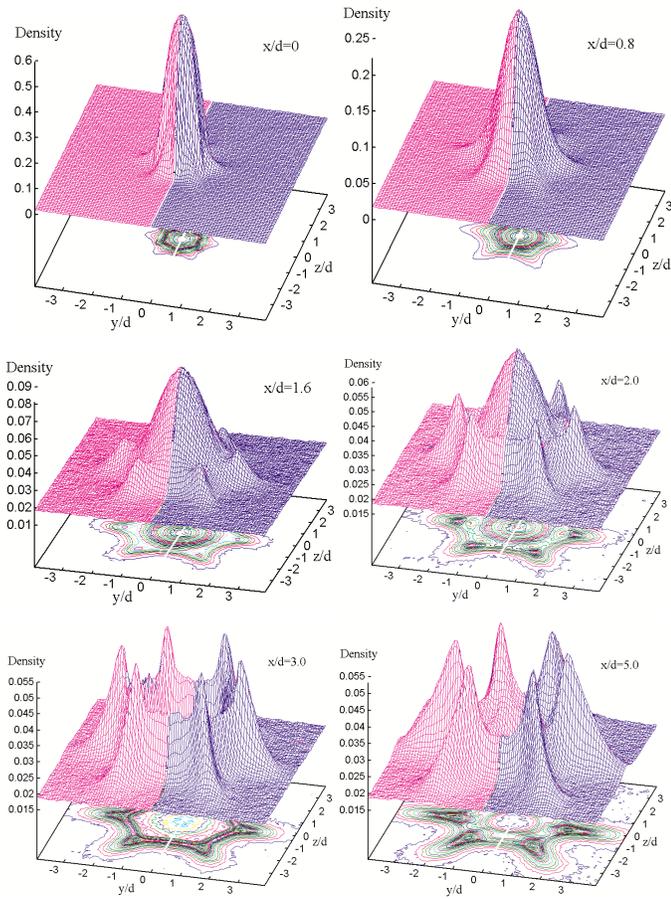


Fig. 7: Density profiles on various planes normal to the jet axis. ($1/Kn = 2500$, $p_0/p_1 = 50$)

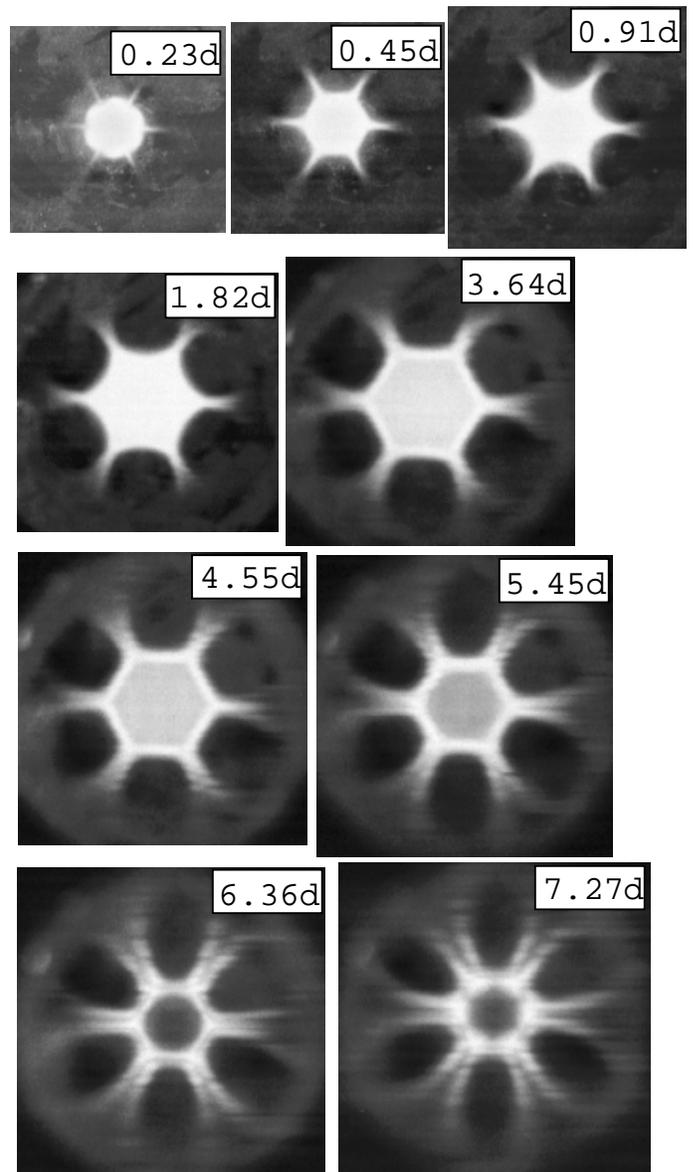


Fig. 8: Visualization using a laser induced fluorescence (LIF) technique. ($p_0/p_1 = 50$)

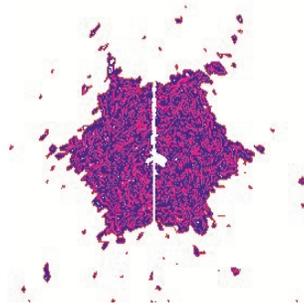


Fig. 9: Cross section of a jet obtained by the DSMC method in a very short time interval. ($p_0/p_1 = 50$)

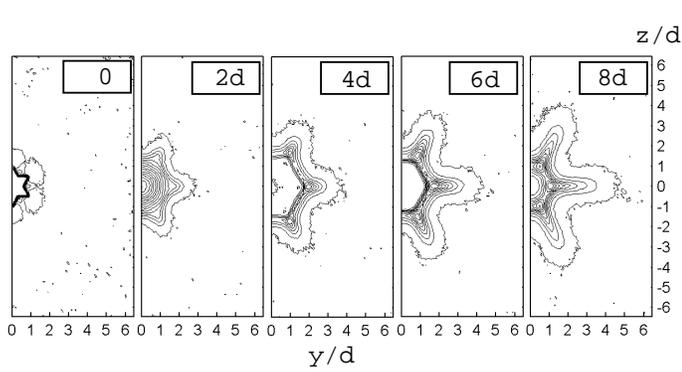


Fig. 10: Density contours in planes normal to the axis of jet from the orifice (a). ($1/Kn = 2500$, $p_0/p_1 = 50$)

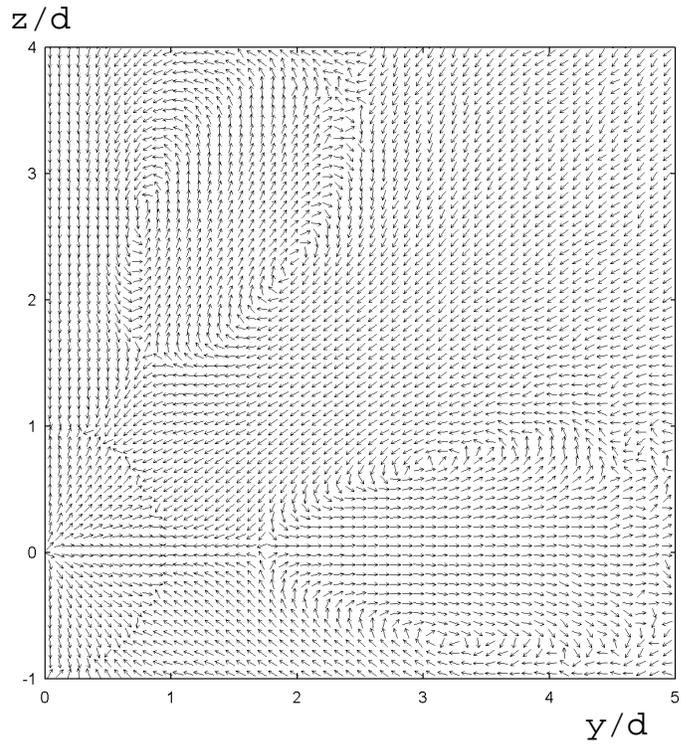


Fig. 12: Flow directions in a cross section of jet near the location of Mach disk. ($p_0/p_1 = 50$)

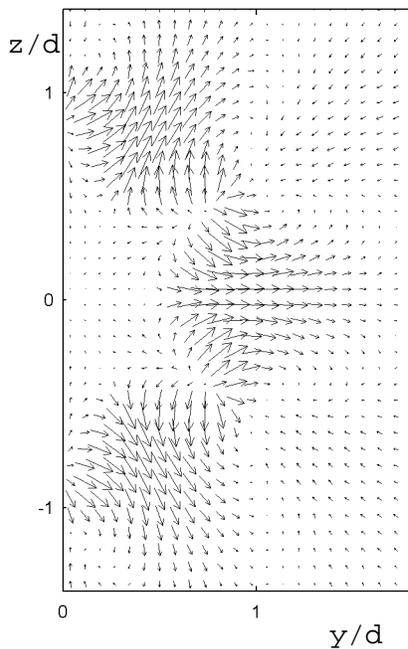


Fig. 11: Velocity vectors right behind the orifice (a). ($p_0/p_1 = 50$)

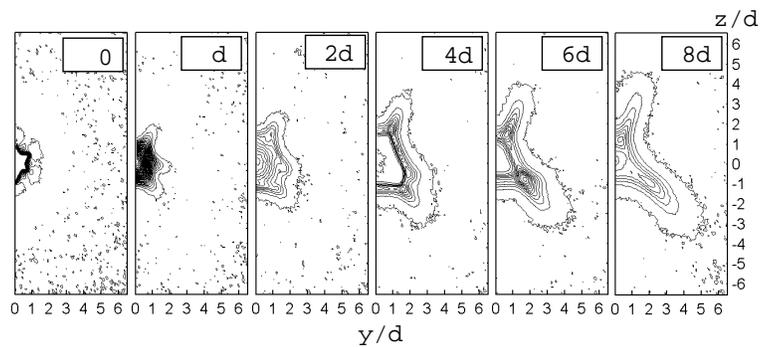


Fig. 13: Density contours in planes normal to the axis of jet from the orifice (b). ($p_0/p_1 = 50$)

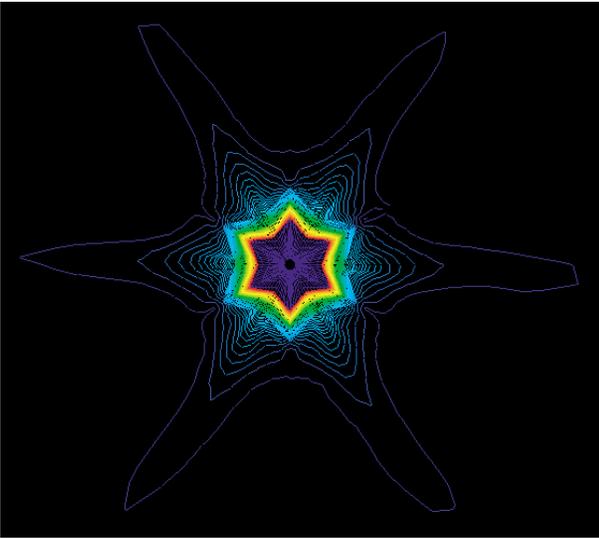


Fig. 14: Density contours obtained by the finite-volume method. ($p_0/p_1 = 50$)

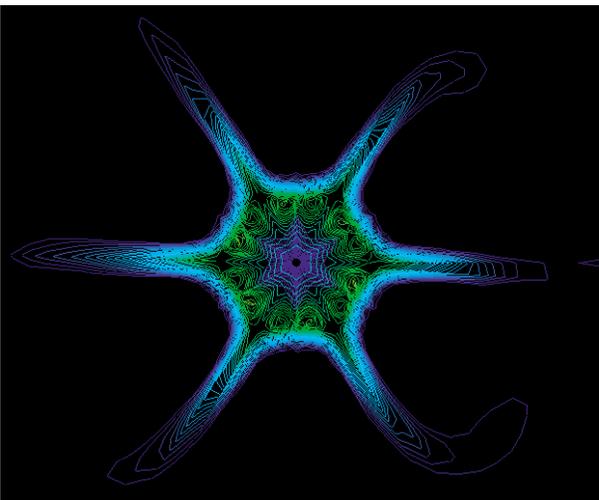


Fig. 15: Mach number contours obtained by the finite-volume method. ($p_0/p_1 = 50$)