

極超音速希薄流における並進・回転エネルギーの微視的状态： 面分子干渉モデルの影響

Microscopic State of Translational and Rotational Energy in Hypersonic Rarefied Gas Flow : Effects of Gas-Surface Interaction Model

○ 坪井伸幸, 宇宙科学研究所宇宙輸送研究系, 神奈川県相模原市由野台 3-1-1, E-mail : tsuboi@flab.eng.isas.ac.jp
松本洋一郎, 東大大学院工学系研究科機械工学専攻, 東京都文京区本郷 7-3-1, E-mail : ymats@mech.t.u-tokyo.ac.jp
Nobuyuki TSUBOI, The Institute of Space and Astronautical Science, Yoshinodai 3-1-1, Sagami-hara, Kanagawa
Yoichiro MATSUMOTO, Mechanical Engineering, The University of Tokyo, Hongo 7-3-1, Bunkyo-ku, Tokyo 113-8656

A DSMC (direct simulation Monte Carlo) simulation using Dynamic Molecular Collision (DMC) model and Multi-Stage (MS) model based on Molecular Dynamics (MD) calculation is applied for solving the two-dimensional nonequilibrium hypersonic rarefied flow over a flat plate with angle of leading edge. Numerical results show that both translational and rotational energy distributions near the plate for all gas-surface models are significantly different from the Maxwell-Boltzmann distributions.

1. はじめに

近年, 国内外で宇宙往還機及び惑星探査機の開発が活発に推進されているが, その空力における重要な課題の 1 つとして, 再突入時の衝撃波/境界層干渉がある。その衝撃波/境界層干渉の代表的な現象の一つとして, 鋭い前縁を有する平板近傍で生じる粘性干渉が挙げられる。これは平板前縁で急激に発達する境界層と一様流の干渉と定義できる。平板前縁における流れ場の概要を図 1 に示す。連続体領域では, 境界層の急激な発達のため衝撃波と境界層が強く相互干渉する strong interaction 及び境界層の発達が穏やかであるため相互干渉が弱い weak interaction が平板前縁で現れるが, rarefaction parameter $\bar{V}(= M_\infty \sqrt{C/Re_x}) > 0.15$ ¹ であるような, 衝撃波と境界層が融合する領域における流れ場の構造及び並進温度と回転温度の非平衡現象はまだ十分に解明されていない。さらに, 希薄気体流れでは平均自由行程が代表長さに比較して大きくなるため, 面分子干渉の影響が無視できず, その影響を詳細に把握する必要がある。

希薄気体流れの解析には, DSMC(direct simulation Monte Carlo) 法が有効である^{2,3}。しかし, 2 原子分子気体に対して提案されているモデルは, 局所平衡を仮定した現象論的モデルのため, 非平衡な流れ場に対する適用には物理現象を正確に再現可能とは言えない。そして, 希薄気体流れにおいては面分子干渉の影響が大きい, 微視的見地からそれは定量的に評価されていない。

そこで, 本研究では, 徳増らによって提案された衝突モデルである DMC(Dynamic Molecular Collision) モデル⁴, 山西らによって提案された面分子干渉モデルである MS(Multi-Stage) モデル⁵を DSMC 法に適用した。そして, 希薄気体における極超音速非平衡流中の衝撃波/境界層干渉における様々な面分子干渉モデルの影響を微視

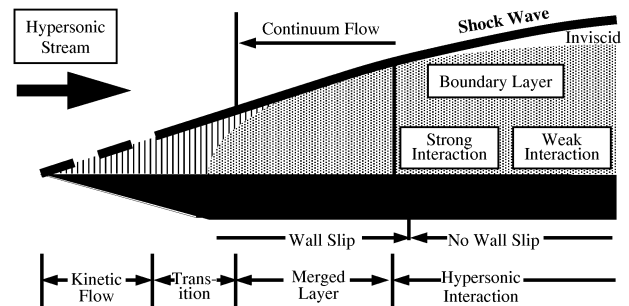


Fig. 1: Schematic of viscous interaction near a sharp leading edge.

的見地から明らかにすると共に, 本手法の有効性を示す。

2. 数値計算法

本研究で使用した 2 次元 DSMC 法は, 以下の節で述べる通り, 分子動力学法によって構築されたデータを基にしている。また, 分子衝突頻度の計算には, Null-Collision 法⁶を使用している。DSMC 計算手法の詳細は文献 7 を参照されたい。

2.1 2 原子分子衝突モデル

本研究では, 分子衝突の際, 様々なエネルギー状態を有する 2 原子分子の 2 体衝突を分子動力学法によりシミュレーションし, その結果得られた分子の衝突断面積及び衝突後のエネルギー分布に対するモデルを構築する DMC モデルを採用している。具体的には, まず様々な並進/回転エネルギー状態を有する 2 原子分子の 2 体衝突を分子動力学法により多数実施する。次に, 得られたデータをもとに, 衝突後のエネルギー分布を表す確率密度関数及び衝突断面積を取得し, テーブル化する。さらに DSMC 計算において, このテーブル化されたデータにより, 各

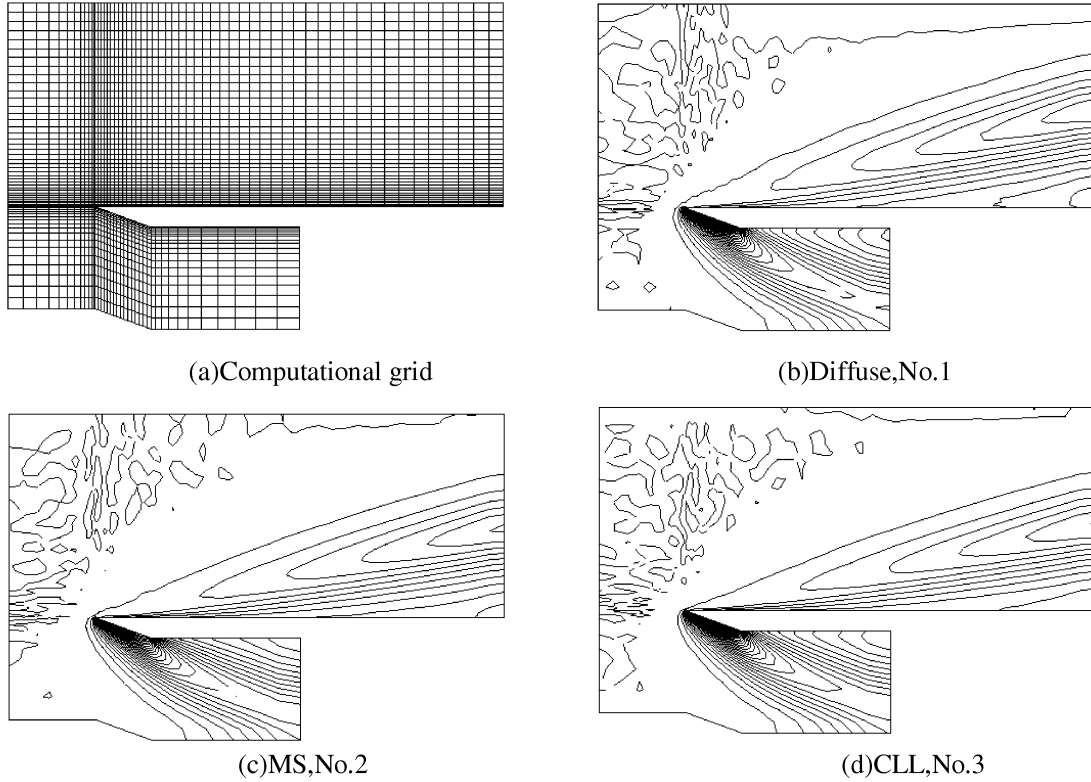


Fig. 2: Density contours over the plate for $M_\infty = 20.2$.

Tab. 1: Simulation conditions.

No.	1	2	3
Leading Edge angle[deg.]	20		
Mach number M_∞	20.2		
Working Gas	Nitrogen		
Stagnation pressure p_0 [Pa]	3.5×10^5		
Stagnation temperature T_0 [K]	1,100		
Freestream temperature T_∞ [K]	13.32		
Freestream pressure p_∞ [Pa]	0.06831		
Freestream velocity V_∞ [m/s]	1,503		
Reynolds number Re_∞ (based on $L=0.05$ [m], $2L$ =plate length)	566		
Wall temperature T_w [K]	290		
Knudsen number Kn_∞ (based on L)	0.047		
Wall boundary condition	Diffuse	MS	CLL
Accomm. coeff. $\alpha n / \alpha t / \alpha r$	—	—	1/0.986/1

セル内の分子衝突前のエネルギー状態から衝突後のエネルギー状態を算出する。なお、本手法の詳細は文献4を参照されたい。

2.2 面分子干渉モデル

平均自由行程が代表長さに比べて非常に小さい場合は面分子干渉の影響は非常に小さく、壁面近傍の流れは拡散反射、つまり完全適応により影響を受ける。この状態は、固体表面に入射した分子が表面に吸着し、表面温度の Maxwell-Boltzmann 分布に従って離脱する状態である。しかし、実際は表面に吸着しないで散乱する分子も

存在し、その存在確率は表面の材質と状態に大きく依存する。

本研究では、面分子干渉モデルとして (i) 拡散反射モデル (ii) Cercignani-Lampis-Lord (CLL) モデル⁸ (iii) Multi-Stage (MS) モデル⁵ の3種類を使用した。詳細は昨年度のシンポジウムの論文⁹を参照されたい。

3. 結果及び考察

計算条件は、Lengrand らが実験で実施した条件¹⁰を使用した。一様流中の平均自由行程が 1mm のオーダーとなるため、前縁形状の影響が無視できないことから、本研究では前縁形状の影響を考慮に入れて計算を実施した。計算格子は壁面近傍及び前縁近傍に集中させており、計算格子は図2に示すように、平板上面側に 58(流れ方向)×40(鉛直方向)、下面側に 40×18 である。

3.1 巨視的な状態量における壁面反射モデルの影響

Lengrand らが行った $M_\infty = 20.2$ の実験では、平板の材質は真鍮であり、密度計測及び平板上圧力計測ではそのまま、熱流束の計測では熱伝達を良くするために、グラファイト粉末を表面に塗布している¹¹。このことを考慮すると、空間密度及び平板上圧力の実験結果との比較の際には拡散反射モデル、熱流束の比較の際には MS モデルを使用した結果を使用するのが妥当と思われる。

図2に、様々な面分子干渉モデルを使用した場合の平板上の密度分布を示す。拡散反射、MS モデルには平板前縁で発生する衝撃波及びその背後の境界層の発達には

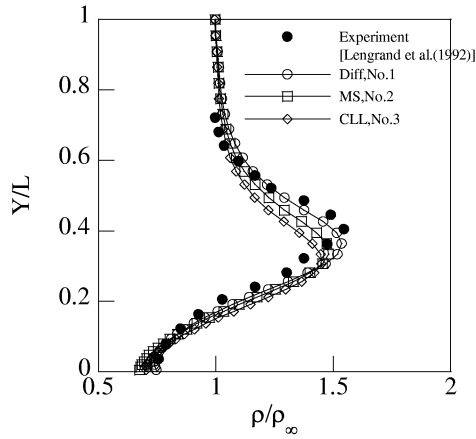


Fig. 3: Density profiles over the plate at $X/L=1.5$.

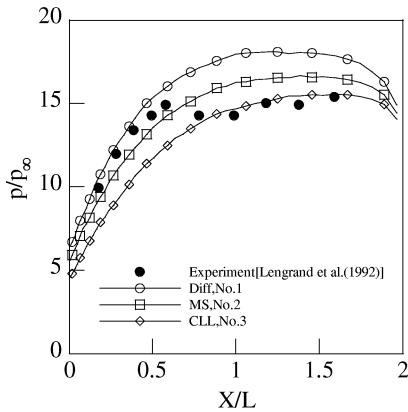


Fig. 4: Pressure distributions on the plate.

違いがほとんど見られないことが分かる。

図 3 に示す $X/L = 1.5$ における断面密度分布より、拡散反射が最も実験結果に近く、MS モデル、CLL モデルの順に実験結果より低くなっている。また、図 4 に示す平板上圧力分布からは、MS モデルは拡散反射と CLL モデルの中間の値を示している。実験結果は、前縁近傍では拡散反射、後縁近傍では CLL モデルの結果に近いことが分かる。ここで、DSMC 法で算出した壁面圧力は、壁面に衝突した分子の運動量変化を使用している。

図 5 に示す平板上熱流束分布より、前縁近傍では CLL モデルが最も低く、後縁近傍では MS モデルが最も低い値を示している。実験結果は概ね MS モデルの結果が示す分布に近いことが分かる。

これらの結果から分かることは、熱流束を計測した場合の平板上の流れは、極めて MS モデルが予測した結果に近いことがいえる。

図 6 に示す壁面摩擦係数の比較より、拡散反射の結果が最も大きいのが、MS モデルは最大値で 11% 程、CLL モデルは 14% 程低くなっている。

図 7 に平板上の並進及び回転温度分布を示す。前縁近傍では MS モデルは拡散反射モデル、CLL モデルの間の

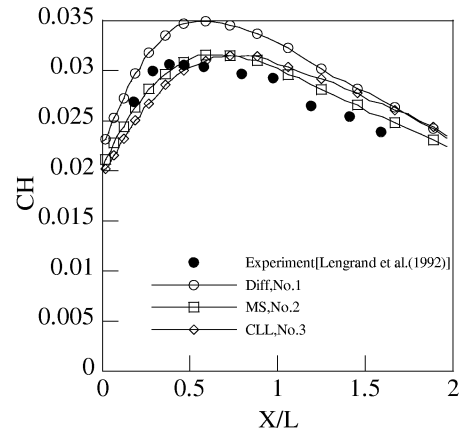


Fig. 5: Heat transfer rate distributions on the plate.

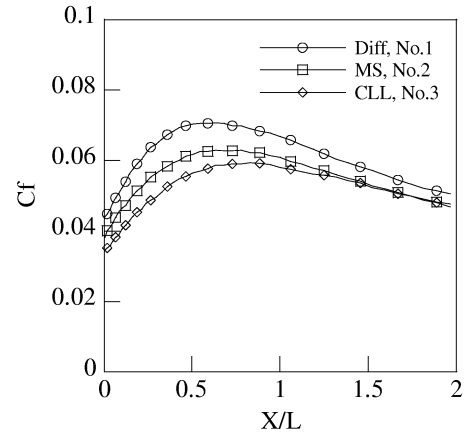


Fig. 6: Skin friction distributions on the plate.

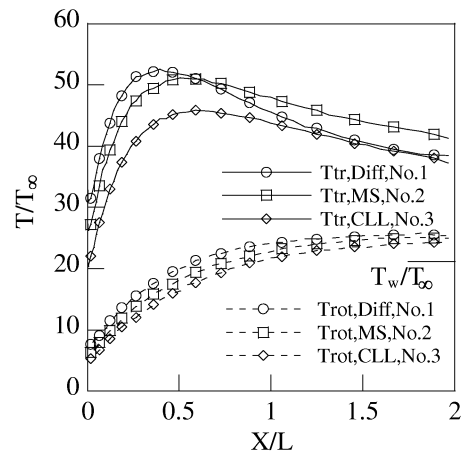


Fig. 7: Translational and rotational temperature distributions on the plate.

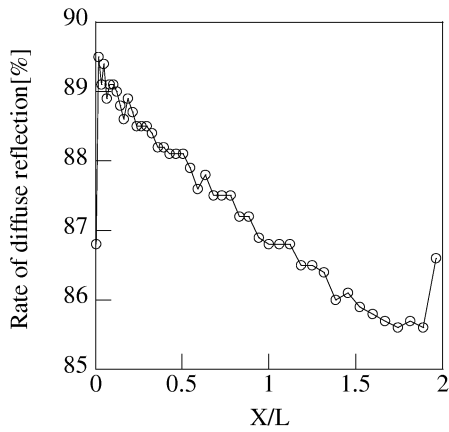


Fig. 8: Rate of diffuse reflection for Multistage model in No.2.

分布を示しているが、後縁ではMSモデルは他2モデルの結果より高い値を示している。平板上回転温度分布に関しては、拡散反射モデル、MSモデル、CLLモデルの順で低くなるものの、並進温度ほど際だった違いは見られない。いずれにしても、並進、回転温度は壁面温度 T_w より高い値であることから、壁面近傍では温度滑りが生じていることが分かる。

図8に、MSモデルを使用した場合の、壁面に衝突したすべての分子の全反射に対する拡散反射の割合を示す。MSモデルでは、(i) 衝突前の気体分子の並進エネルギー、全エネルギーがしきい値より小さく、衝突回数が10回以上の場合 (ii) 衝突後の気体分子の並進温度が壁面温度より低くなった場合や入射気体分子の平均並進温度が散乱気体分子の並進温度より低くなった場合 (気体-壁面間の熱平衡状態を得るため) の2つの場合に拡散反射を与える⁵。この結果より、前縁付近では拡散反射の割合が89%と高く、僅かではあるが前縁から離れるに従って、拡散反射の割合が低下することが分かる。この理由は、一様流の並進温度が約13Kと低いために並進エネルギーが低く、平板前縁で吸着する確率が上昇し、平板後縁では並進温度が上昇して吸着する確率が減少することが原因と考えられる。このことから、MSモデルを使用すると、拡散反射が支配的であるものの、前縁近傍では後縁よりも3%程度高くなることが言える。

密度分布に関しては拡散反射を使用した計算結果と実験結果はほぼ一致するといえる。しかし、圧力分布に関しては拡散反射を使用した計算結果は実験結果と前縁近傍のみ一致し、 $X/L > 0.5$ ではCLLモデルの結果が実験結果に近い値を示している。熱流束分布に関しては、MSモデルを使用した結果が最も実験結果に近い分布を示している。実際の実験状況を考慮すると、密度分布、圧力分布の比較の際には、拡散反射、熱流束分布の場合はMSモデルをDSMC法で使用することが最も妥当であると

考えられる。実験における圧力分布が不連続であることから、実験の圧力計測では精度等の面で問題があるものと考えられる。

3.2 拡散反射モデルを使用した場合の微視的な状態量

回転エネルギー分布は実験と数値計算の両面から研究が行われてきた。実験では、電子線蛍光法により、RobbenとTalbotによって次元垂直衝撃波中の回転エネルギー分布が計測された。彼らは、 $M_\infty = 7.0, 12.9$ の垂直次元衝撃波中で、non-Maxwell-Boltzmann (MB) 分布になると報告した¹²。Marrone, Ashkenasもまた、自由噴流中に回転エネルギーのnon-MB分布が存在することを示した^{13, 14}。数値解析では、BoydがDSMC法において回転エネルギー緩和を評価するためのモデルを構築し、Robbenらの実験結果と比較した。古浦は粒子の移動にはDSMC法を、衝突計算ではMD法を使用する方法を提案し、同様にRobbenらの実験結果と比較し、良好な一致を示した¹⁵。徳増らはMD法によりデータベースを構築し、DSMC法に適用するモデルを開発した⁴。そしてRobbenらの実験結果と比較し、回転エネルギーのnon-MB分布についても定量的な一致を示した。

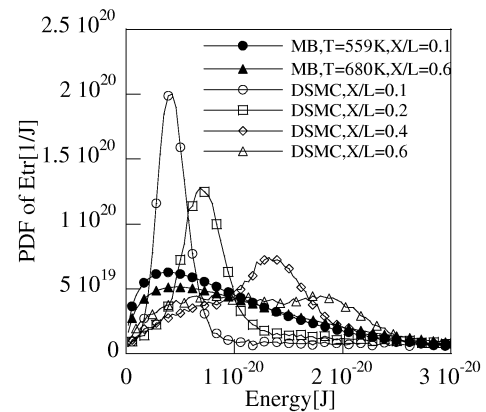


Fig. 9: Translational energy distributions on the plate ($0.1 \leq X/L \leq 0.6$).

以上の研究では、回転エネルギー分布に着目しているが、並進エネルギー分布に関しては実験で計測することが困難であるために評価されていない。そこで、まず拡散反射の場合の並進・回転エネルギー分布に関して詳細な検討及び評価を実施した。

図9,10にNo.1における平板近傍の各位置の並進エネルギー分布を示す。DSMC計算で得られた並進温度 T_{tr} を用いた場合の代表的なMB分布も示している。これらの対応する並進温度は図7に示されている。図9,10より、 $X/L = 0.1$ ではDSMC計算での並進エネルギーの確率密度は低準位でピークを有し、 X/L が増加するに従ってそのピークはより高い準位へ移動することが分かる。そして $X/L = 0.6$ ではピークが2つ存在し、その時の並進温度は図7より、オーバーシュート直後の位置での温

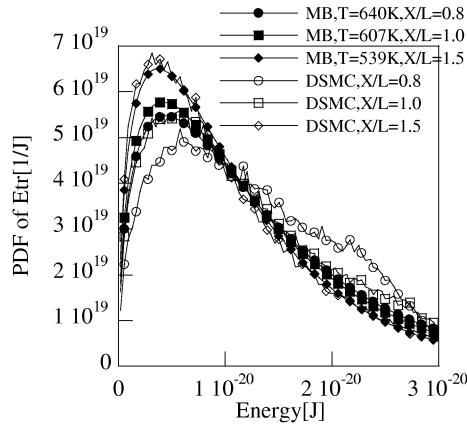


Fig. 10: Translational energy distributions on the plate($0.8 \leq X/L \leq 1.5$).

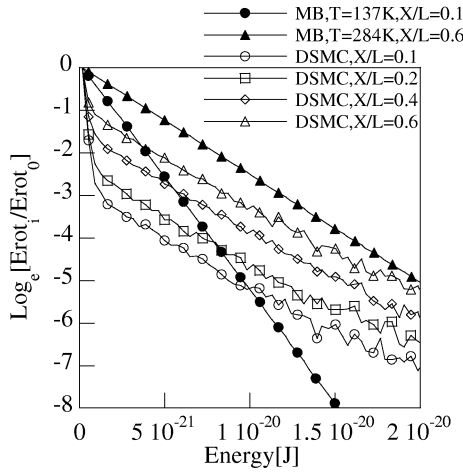


Fig. 11: Rotational energy distributions on the plate($0.1 \leq X/L \leq 0.6$).

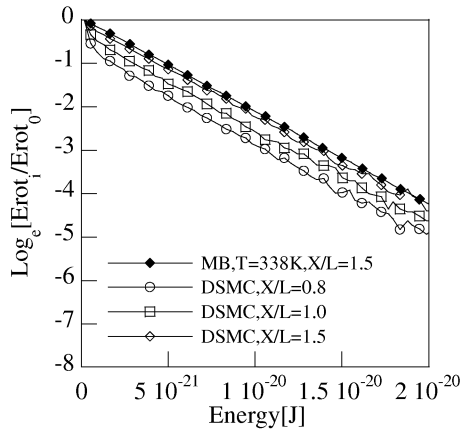


Fig. 12: Rotational energy distributions on the plate($0.8 \leq X/L \leq 1.5$).

度を示している。これらの分布は、MB 分布とは全く異なったものとなっていることが分かる。 $X/L \geq 0.8$ では並進エネルギー分布は MB 分布に近づき、 $X/L=1.5$ ではほぼ MB 分布となっていることが分かる。

図 11,12 に平板上の回転エネルギー分布を示す。分布はサンプルした最も低い回転エネルギー E_{rot_0} で規格化されている。これらの対応する平板上の回転温度分布は図 7 に示されている。並進エネルギーの場合と同様に、DSMC 計算で得られた回転温度 T_{rot} の場合の代表的な MB 分布も示している。これらの結果から、 $X/L=0.1$ における DSMC 計算での回転温度分布は特に低準位に確率密度が集中しており、また MB 分布とは全く異なっていることが分かる。 X/L が増加すると、相対的に高準位の確率密度が上昇する傾向が見られる。 $X/L = 1.5$ では、ほぼ MB 分布となっている様子が把握でき、エネルギー分布としては平衡状態になっていると考えられる。

以上の結果から、並進エネルギーと回転エネルギーの緩和が密接に関連している様子を詳細に把握できる。定性的には、まず低準位の並進エネルギーで確率密度のピークが急激に上昇し、次にそのピークが高準位に移動し、同時に低準位側で新たなピークが上昇し、平板後縁では最終的に平衡状態に達する。回転エネルギーに関しては低準位側で励起し、高準位側は並進エネルギーからエネルギーの移動を受けて徐々に励起し、最終的に平衡状態に達する。この様な緩和のプロセスが本結果より詳細に把握できる。

3.3 微視的な状態量における壁面反射モデルの影響

前節では、壁面反射モデルの影響を、巨視的な状態量に着目して比較した。その結果、並進温度と回転温度の非平衡には大きな変化が見られた。そして CLL モデルでは並進温度の最大値が他の 2 モデルに比較して小さく、回転温度に関しても緩和が他の 2 モデルに比較して最も遅いことが図 7 に示された。このことから、壁面近傍の気体分子の並進/回転エネルギーの分布には大きな違いが現れると予測できる。

図 13~15 に、壁面近傍の気体分子の並進エネルギー分布を示す。図中、参考として、拡散反射の場合に得られる並進温度に対応した Maxwell-Boltzmann (MB) 分布も示す。特に図 13 は、並進温度がほぼ最大値を有する位置である。図 13 では 3 モデルとも MB 分布とは大きく異なる分布を示していることが分かる。その中でも、特に CLL モデルの場合、 $E_{tr} = 1 \times 10^{-20}$ J 付近に最も分子が存在していることが示されている。これは、他の 2 モデルよりも低い並進エネルギーの位置にピークが存在していることを示している。図 14 に示すように、拡散反射の場合は MB 分布に近くなっているが、MS モデル、CLL モデル共に MB 分布とは異なる分布となっている。特に MS モデルや CLL モデルは $E_{tr} = 1.8 \times 10^{-20}$ J 付近で拡散反射よりも高い確率で分子が存在していることが分

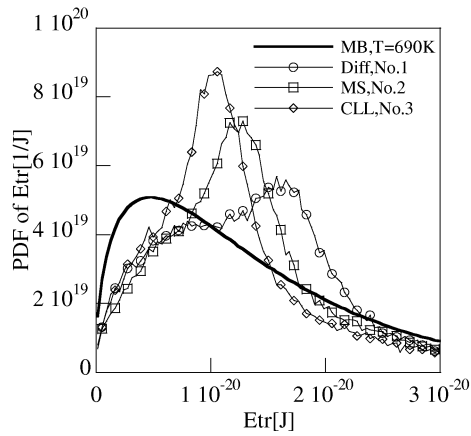


Fig. 13: Translational energy distributions at $X/L = 0.5$ on the plate.

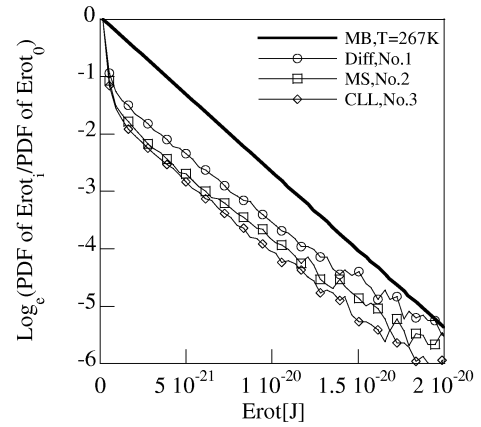


Fig. 16: Rotational energy distributions at $X/L = 0.5$ on the plate.

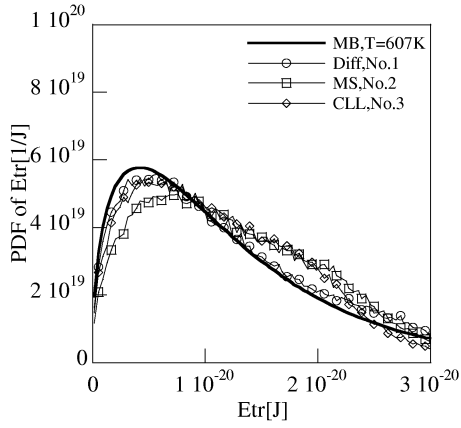


Fig. 14: Translational energy distributions at $X/L = 1.0$ on the plate.

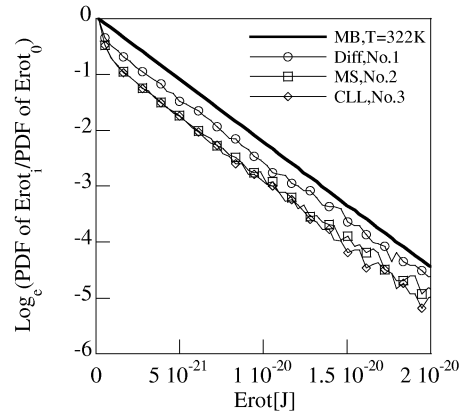


Fig. 17: Rotational energy distributions at $X/L = 1.0$ on the plate.

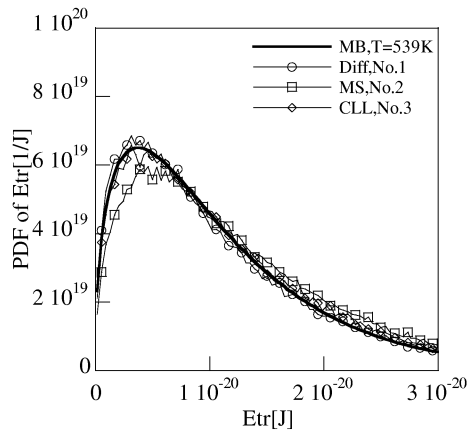


Fig. 15: Translational energy distributions at $X/L = 1.5$ on the plate.

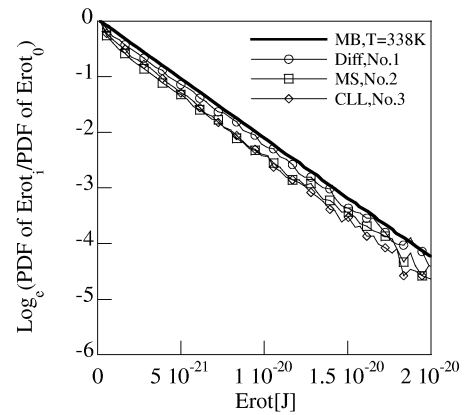


Fig. 18: Rotational energy distributions at $X/L = 1.5$ on the plate.

かる。図 15 では 3 モデルとも MB 分布に近い分布となっているが、MS モデルのみ他の 2 モデルと並進温度が異なるため、エネルギー分布が異なっていることが分かる。

次に、回転エネルギー分布について図 16~18 に示す。並進エネルギー分布の場合と同様に、拡散反射の場合に得られる回転温度に対応した MB 分布も示す。ここで、MB 分布は図中では直線で表される。図 16 では低い回転エネルギーを有する分子が多く存在していることが分かる。また、拡散反射は他の 2 モデルよりも高い回転エネルギーを有する分子が多いことが分かる。回転エネルギーのこのような非平衡な分布が存在することはこれまでによく知られており、Robben と Talbot らによって実験的に示された、1 次元垂直衝撃波中の分布¹²と定性的によく一致する。図 17 では、拡散反射はほぼ MB 分布に近い結果となっているが、他の 2 モデルではまだ MB 分布と異なる分布となっている。図 18 では僅かな違いが存在するものの、いずれも MB 分布に近い結果となっていることが示されている。

以上の結果からは、並進/回転温度の非平衡が極めて強い場合は、MB 分布とは大きく離れた特徴的な分布を示すことが分かる。それに対する壁面反射モデルの影響としては、拡散反射モデルが最も早く MB 分布に到達することが示され、MS モデルと CLL モデルの間には特に並進エネルギー分布に大きな違いが現れることが示された。

4. 終わりに

希薄気体における極超音速非平衡流中に置かれた平板上の衝撃波と境界層の干渉に対して面分子干渉の効果を考慮した 2 次元 DSMC 計算を実施し、以下の結論を得た。

- (1) ミクロスケールである分子の挙動を分子動力学法により解析し、この結果を基にして衝突モデル及び面分子干渉モデルを構築し、それを用いてマクロスケールである物体周りの流れ場を DSMC 法により解析する方法を確立した。その結果、非平衡な流れ場に対して合理的な解析が可能になり、2 次元 DSMC 計算を実験結果と比較することで有効性を確認した。
- (2) 2 次元 DSMC 解析における面分子干渉の影響に関しては、拡散反射よりも CLL モデル、MS モデルの方が鏡面反射成分の増加による平板上圧力、熱流束の最大値の低下が見られた。そして、MS モデル使用した結果が最も実験結果を再現可能であることを示した。さらに、壁面に衝突する分子の全反射に対する拡散反射の割合は、本条件では 86~89 %であり、前縁近傍では拡散反射の割合が高いことが示された。
- (3) 非平衡な流れ場において、微視的な状態量である並進/回転エネルギー分布を評価した。その結果、両エネルギー共に MB 分布と極めて異なった、特徴的な分布となることが明らかとなった。そして壁面反射モデルによって両エネルギー分布に大きな影響が出ることが示された。

謝辞

本研究は一部日本学術振興会科学研究費補助金を受けて実施したものであり、ここに感謝の意を表す。

参考文献

1. Stollery JL, Kumar D, Atcliffe PA, Theoretical and Experimental Methods in Hypersonic Flows, AGARD-CP-514 (1993), 5-1 - 5-10.
2. Bird, G.A., Molecular Gas Dynamics, Clarendon Press, Oxford (1976).
3. Nanbu, K., J Phys. Soc. Jpn. , Vol. 49(1990), 2042-2049.
4. Tokumasu, T. and Matsumoto Y., Phys. Fluids, Vol. 11, No.7(1999), 1907-1920.
5. Yamanishi, N. and Matsumoto, Y., Phys. Fluids, Vol.11, No.11(1999), 3540-3551.
6. Koura, K. , Phys. Fluids, 29 (1986), 3509-3511.
7. 坪井・山口・松本, 機論, 66-646,B(2000), 117-122.
8. Lord, R.G., Proceeding of the 16th International Symposium on Rarefied Gas Dynamics(1988), 1427-1433.
9. 坪井, 松本, 第 14 回数値流体力学シンポジウム講演論文集 (2000), 163(D10-5).
10. Lengrand, J.C. et al., 18th Int. Symp. on Rarefied Gas Dynamics (1992), 276-284.
11. Lengrand, J.C., private communication, 1999.
12. Robben, F. and Talbot, L., Phys. Fluids, Vol.9, No.4(1966), 653-662.
13. Marrone, P.V., Phys. Fluids, Vol.10, No.3(1967), 521-538.
14. Ashkenas, H., Phys. Fluids, Vol.10, No.12(1967), 2509-2520.
15. Koura, K., Phys. Fluids, Vol.9, No.11(1997), 3543-3549.