

RAFAL - 3D 解析例 (3)

熱 遷 移 現 象

● 計算内容

断面形状が1.5[m]×1.5[m]の正方形である紙面に垂直方向に無限に延びる2つの容器が図1に示すように、幅0.1[m]のスリットにより連結されている。

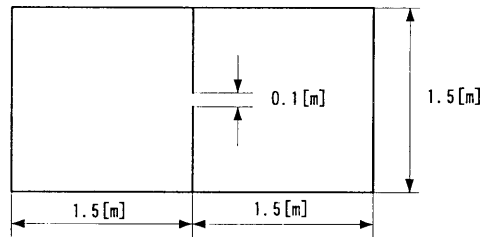


図1 スリットにより連結された2つの容器

この容器の壁面温度を $T_1 = 300[\text{K}]$ に保った状態で、容器内に圧力 p 、温度 $T = 300[\text{K}]$ の窒素ガスを導入する(図2参照)。その後容器を密閉し、右側容器の壁面温度を $T_2 = 600[\text{K}]$ に上昇させる(図3参照)。

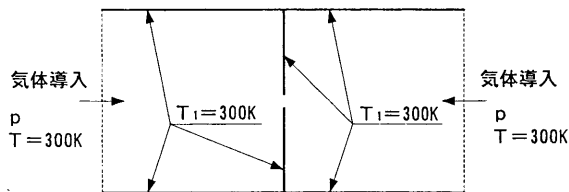


図2 容器への気体の導入

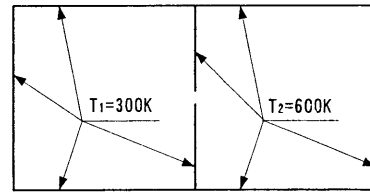


図3 右側容器壁面の温度上昇

右側容器の壁面温度上昇後十分時間が経過した状態を、導入窒素ガス圧力 p を以下の4通りに変化させて解析する。

ケース1	$p = 6.658675 \times 10^{-1} [\text{Pa}] , K_{n_0} = 0.1$
ケース2	$p = 6.658675 \times 10^{-2} [\text{Pa}] , K_{n_0} = 1$
ケース3	$p = 6.658675 \times 10^{-3} [\text{Pa}] , K_{n_0} = 10$
ケース4	$p = 6.658675 \times 10^{-4} [\text{Pa}] , K_{n_0} = 100$

K_{n_0} は、系の温度が一様に300[K]である初期状態における導入窒素ガス分子の平均自由行程 λ とスリット幅 $H = 0.1[\text{m}]$ により定義されるクヌーセン数 $K_{n_0} = \lambda/H$ である。

● 窒素ガスの物性値

DSMC 解析に必要な物性値データを以下のように算定する。

1[mol] の質量	$M = 0.02801348$	[kg/mol]
分子 1 個の質量	$m = 4.651751 \times 10^{-26}$	[kg]
単位質量当り気体定数	$R = 296.8039$	[J/kg·K]
全衝突断面積	$\sigma_T = 4.3985 \times 10^{-19}$	[m ²]

全衝突断面積 σ_T は分子を剛体球分子と仮定し、Chapmann-Enskog の公式

$$\sigma_T = \frac{1}{\mu} \sqrt{\frac{mkT}{\pi}}$$

から求めた。ここで、 k はボルツマン定数 $k = 1.380658 \times 10^{-23}$ [J/K] (CODATA 1986 年調整値)、 μ は温度 T における粘性係数である。

窒素ガスの温度 $T = 293.15$ [K]における粘性係数 $\mu = 17.6 \times 10^{-6}$ [Pa·s](理科年表 1989 年,p.448)を代入すれば

$$\sigma_T = \frac{1}{17.6 \times 10^{-6}} \sqrt{\frac{4.651751 \times 10^{-26} \times 1.380658 \times 10^{-23} \times 293.15}{\pi}} = 4.3985 \times 10^{-19} \quad [\text{m}^2]$$

を得る。分子直径 d は $d = 3.74 \times 10^{-10}$ [m]となる。

● DSMC 計算に必要なパラメータの計算

(1)平均自由行程 λ

剛体球分子の平均自由行程 λ は

$$\lambda = \frac{kT}{\sqrt{2}\sigma_T p}$$

より求められる。圧力 p , 温度 T に初期状態の窒素ガスの圧力, 温度を代入して

ケース 1 の場合

$$\lambda = \frac{1.380658 \times 10^{-23} \times 300}{\sqrt{2} \times 4.3985 \times 10^{-19} \times 0.6658675} = 0.01 \quad [\text{m}]$$

となる。同様にしてケース 2,3,4 の場合の平均自由行程 λ は、それぞれ $\lambda = 0.1$ [m], 1 [m], 10 [m]となる。

この平均自由行程 λ とスリット幅 $H = 0.1$ [m]により定義されるクヌーセン数 $K_{n0} = \lambda/H$ は 1 ページの表に示した値となる。流れの希薄度の分類によれば、ケース 1,2,3 は中間流領域、ケース 4 は自由分子流領域となる。

(2)平均自由時間 τ

DSMC 計算の時間ステップ幅は平均自由時間の数分の1に設定する必要がある。この時間ステップ幅設定のために平均自由時間を求める。

平均自由時間 τ は

$$\tau = \frac{\lambda}{\bar{c}}$$

で定義される。ここで、 \bar{c} は窒素ガス分子の平均速度で気体が平衡状態にある場合

$$\bar{c} = \sqrt{\frac{8RT}{\pi}}$$

である。

気体温度 T として平均自由時間が短くなる系の高温部の温度 600[K] 用いれば

$$\bar{c} = \sqrt{\frac{8 \times 296.8039 \times 600}{\pi}} = 673.4 \text{ [m/s]}$$

となる。

以上より平均自由時間 τ は、

ケース1の場合

$$\tau = \frac{0.01}{673.4} = 1.485 \times 10^{-5} \text{ [s]}$$

となる。同様にしてケース2,3,4の場合の平均自由時間 τ は、それぞれ $\tau = 1.485 \times 10^{-4}$ [s], 1.485×10^{-3} [s], 1.485×10^{-2} [s]となる。

• DSMC 法シミュレーションモデル

2次元問題として解析する。

解析領域

問題の対称性を考慮して、図4に示すスリット中心線より上側の領域を解析領域とする。

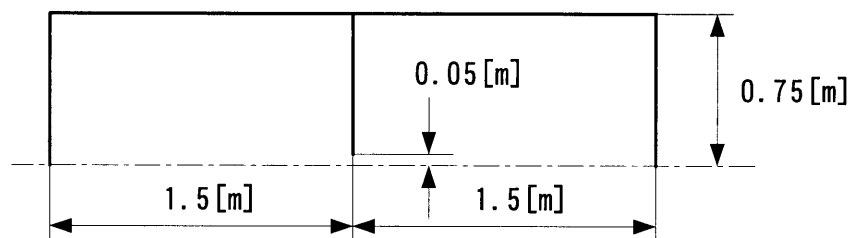


図4 解析領域

解析領域のセル分割

上に求めた平均自由行程を参照して図4の解析領域を、 $0.01[\text{m}] \times 0.01[\text{m}]$ の正方形セルで図5に示すようにセル分割する。このセル寸法はケース1の場合は平均自由行程と同程度の大きさに、ケース2,3,4の場合は平均自由行程より十分小さい大きさになる。

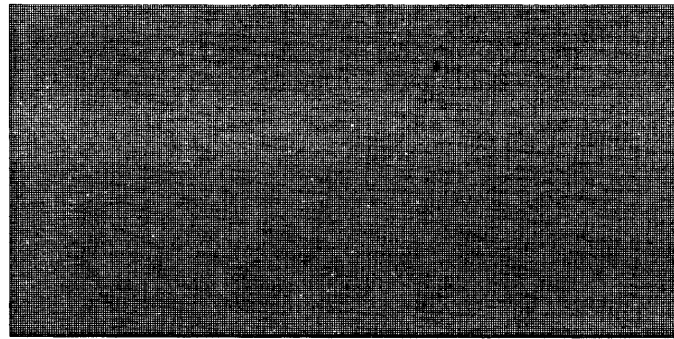


図5 解析領域のセル分割図

境界条件

・容器壁面は壁面温度 $300[\text{K}]$ または $600[\text{K}]$ の拡散反射固体壁境界とする。

時間ステップ幅 Δt

上で求めたケース1の平均自由時間 τ を参照して、ケース2,3,4の場合とも時間ステップ幅 Δt を $\Delta t = 10^{-5}[\text{s}]$ とする。この Δt はケース1の場合平均自由時間の $2/3$ 程度になり、ケース2,3,4の場合は平均自由時間より十分小さくなる。 Δt 時間の間に分子の平均速度 \bar{c} で移動する距離はセル寸法の $1/2$ 程度になる。

解析手順

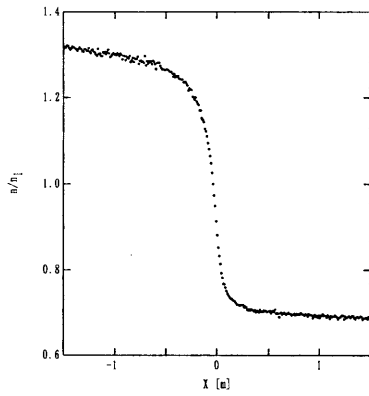
以下の手順でシミュレーションする。

- (1) 図2に示す点線の境界を流入境界として、解析領域内に分子を導入する。
- (2) 流入境界を固体壁境界に変更し、右側容器の壁面温度を $600[\text{K}]$ にして定常状態を達成させる。
- (3) マクロ量の時間平均をとる。セル内のシミュレーション用分子数が最も少ないセルで10万個程度になるまで行う。

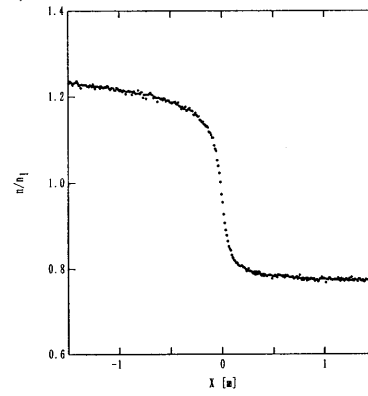
● 結果

中心線上(中心線に隣接するセル上)のマクロ量の分布を図6~8に示す。スリット位置を $x = 0$ としてある。

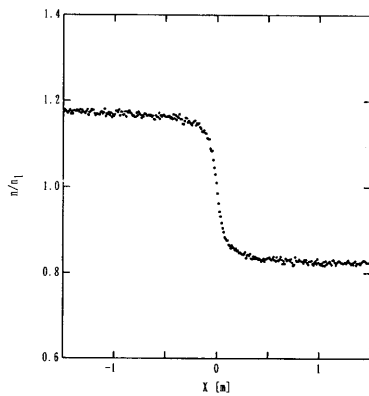
容器温度が一様に 300[K] である初期状態の分子数密度 n_1 で無次元化した数密度分布を図6に示す。



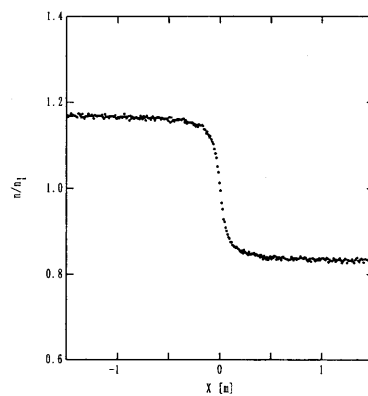
ケース 1($K_{n_0} = 0.1$)



ケース 2($K_{n_0} = 1$)



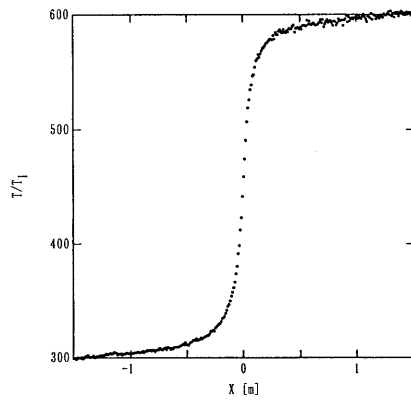
ケース 3($K_{n_0} = 10$)



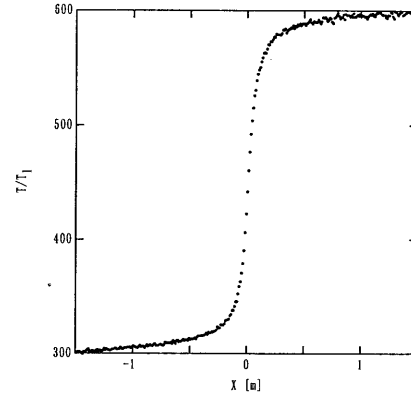
ケース 4($K_{n_0} = 100$)

図6 中心線上の数密度分布 ($x = 0$:スリット位置)

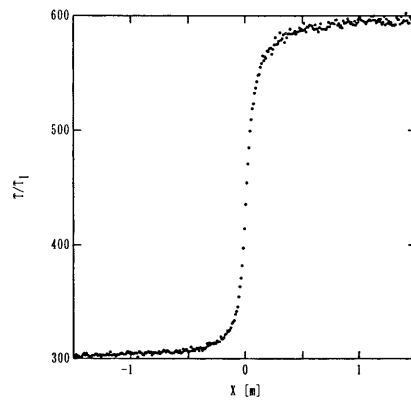
温度分布を図7に示す。



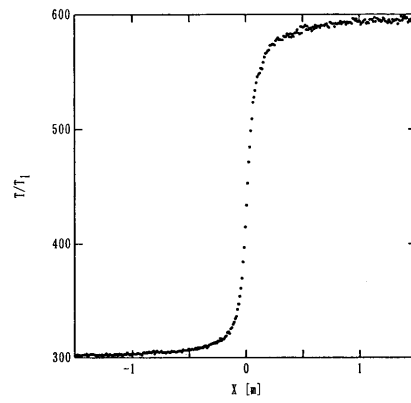
ケース1($K_{n_0} = 0.1$)



ケース2($K_{n_0} = 1$)



ケース3($K_{n_0} = 10$)



ケース4($K_{n_0} = 100$)

図7 中心線上の温度分布 ($x = 0$:スリット位置)

容器温度が一様に 300[K] である初期状態の圧力 p_1 で無次元化した圧力分布を図 8 に示す。

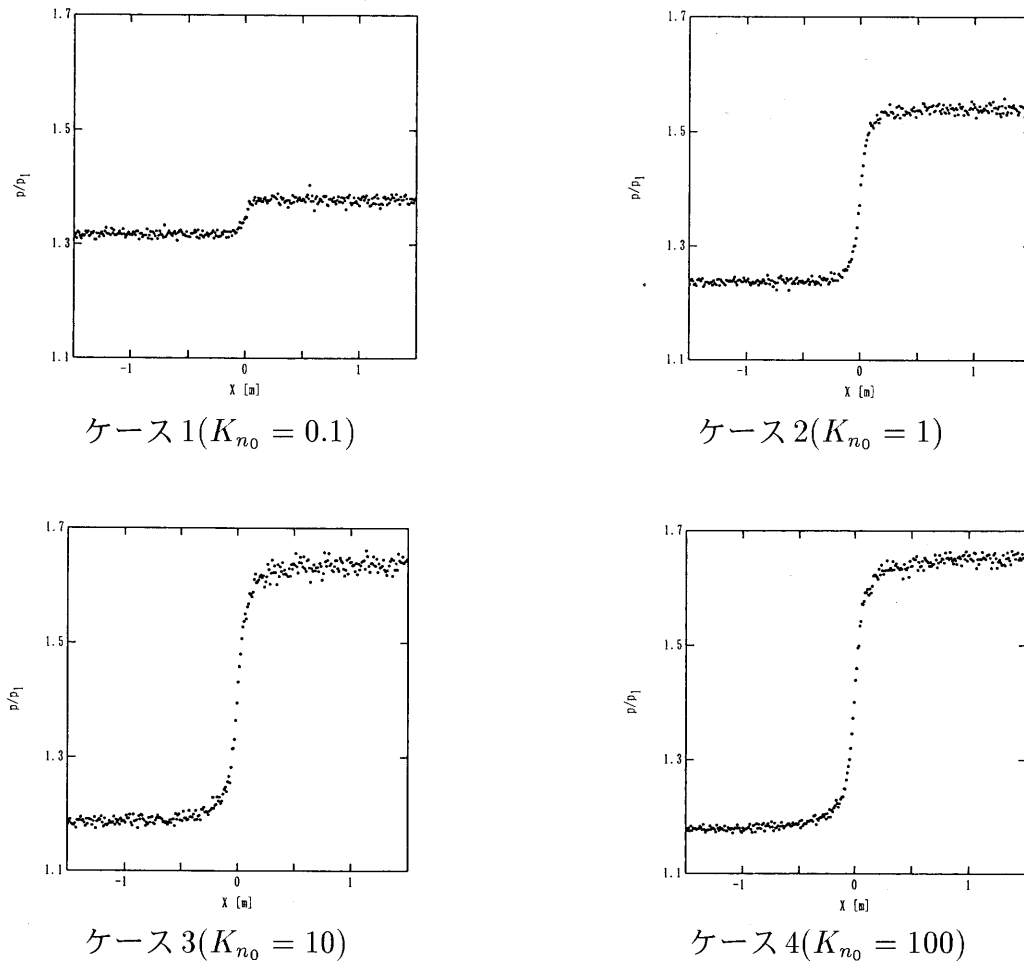


図 8 中心線上の圧力分布 ($x = 0$:スリット位置)

中心線上容器左端から 0.5[m] 内にある 50 個のセルの平均圧力 p_l 、同じく右端から 0.5[m] 内にある 50 個のセルの平均圧力 p_r および比 p_r/p_l を下表に示す。

	p_l [Pa]	p_r [Pa]	p_r/p_l
ケース 1, $K_{n_0} = 0.1$	0.8772	0.9177	1.046
ケース 2, $K_{n_0} = 1$	8.239×10^{-2}	10.25×10^{-2}	1.244
ケース 3, $K_{n_0} = 10$	7.899×10^{-3}	10.90×10^{-3}	1.380
ケース 4, $K_{n_0} = 100$	7.847×10^{-4}	11.00×10^{-4}	1.402

容器温度が一様に 300[K] である初期状態の片側容器内の分子数 N_1 で無次元化した左右容器内の分子数 N と右側容器壁温上昇後の経過時間 t との関係を図9に示す。

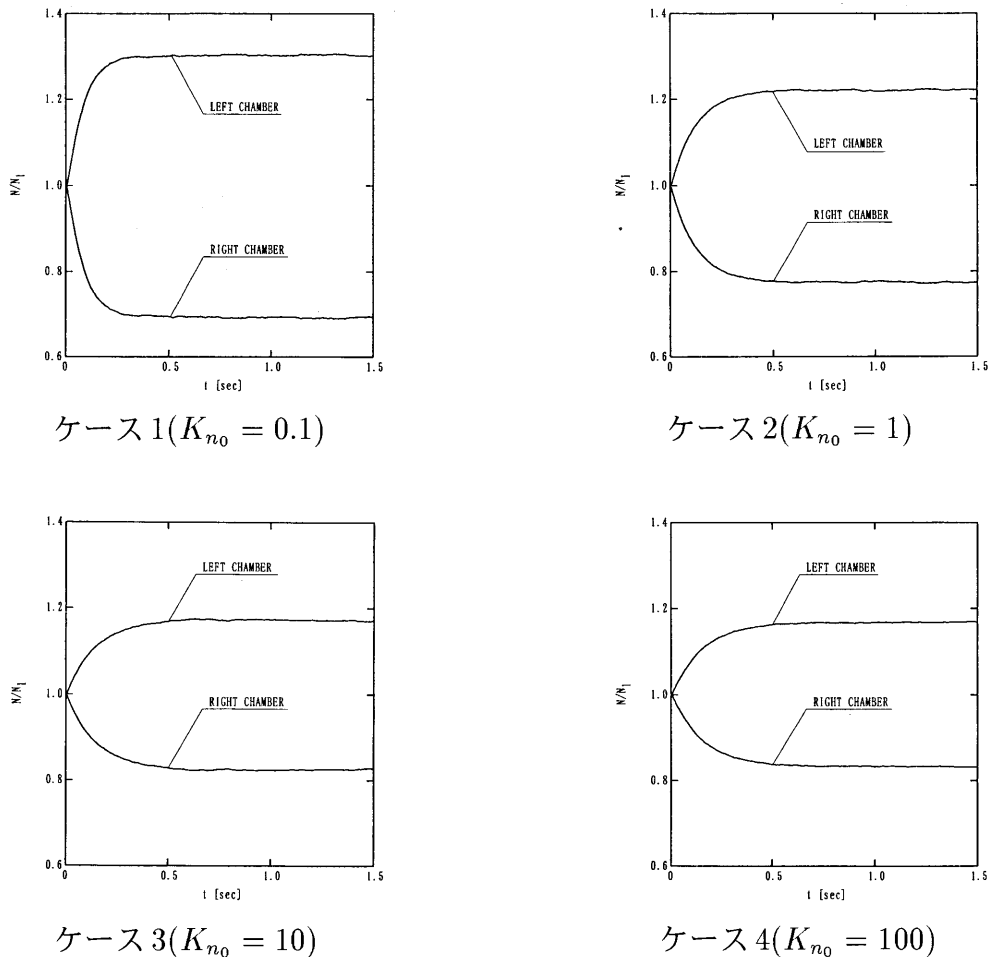


図9 容器内分子数 N と右側容器壁温上昇後経過時間 t との関係

● 検討

右側容器壁温の上昇により右側容器内の気体は加熱され膨張する。この加熱により系内の気体に温度分布が生じ、膨張に伴う右側容器内気体の左側容器内への移動により系内の気体に分子数密度に分布が生じる。

一方、圧力はクヌーセン数が十分小さく希薄気体効果が現れない場合は、系全体で一様な圧力となる。これに対しクヌーセン数が大きくなり希薄気体効果が現れる場合は、系内圧力は一定とならず高温容器内圧力が低温容器内圧力より大きくなる熱遷移現象が現れる。

本計算結果によれば、ケース1の初期状態のクヌーセン数 K_{n_0} が $K_{n_0} = 0.1$ の場合でも圧力分布は容器内で一様にならず熱遷移現象が現れている。 $K_{n_0} = 10$ 以上になると7ページの表

に示した圧力比 p_r/p_l は、自由分子流理論による圧力比 $p_r/p_l = \sqrt{T_2/T_1} = \sqrt{600/300} = 1.414$ とほぼ等しくなる。

図9によれば右側容器壁温上昇後の定常状態への達成時間は、クヌーセン数が小さい程短くなっている。これはクヌーセン数が小さい程分子間衝突の効果が大きくなり力学的平衡状態への緩和が促進されるためと思われる。