

RAFAL - 3D 解析例 (5)

レナードジョーンズ (6-12) 分子による垂直衝撃波の解析

● 計算内容

静止アルゴンガス中を進行する垂直衝撃波の実験 [1] に対応する DSMC 計算を行い結果を比較する。

文献 [1] では、温度 $T_1 = 300\text{K}$ 、圧力 $p_1 = 0.133322\text{Pa}$ の静止アルゴンガス中をマッハ数 $M_s = 2.8$ で進行する衝撃波の密度分布を電子ビーム法により求めている。

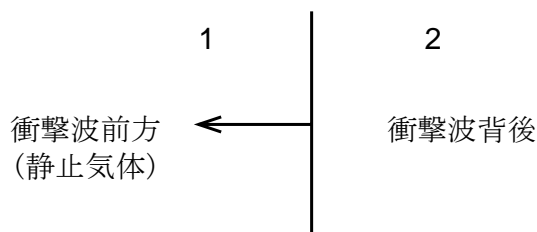


図 1 静止気体中を進行する衝撃波

衝撃波前後の状態はランキンユゴニオの関係から以下ようになる。

衝撃波前方		衝撃波背後	
圧力	$p_1=0.133322\text{Pa}$	圧力	$p_2=1.273225\text{Pa}$
温度	$T_1=300\text{K}$	温度	$T_2=990.3252\text{K}$
数密度	$n_1=3.218803 \times 10^{19}\text{m}^{-3}$	数密度	$n_2=9.309830 \times 10^{19}\text{m}^{-3}$
密度	$\rho_1=2.135201 \times 10^{-6}\text{kg/m}^3$	密度	$\rho_2=6.175700 \times 10^{-6}\text{kg/m}^3$
流速	$V_1=0\text{m/s}$	流速	$V_2=591.0376\text{m/s}$
音速	$a_1=322.5936\text{m/s}$	音速	$a_2=586.1167\text{m/s}$
流速マッハ数	$M_1=0$	流速マッハ数	$M_2=1.00839$

衝撃波の進行速度 V_s は、 $V_s = a_1 M_s = 322.5936 \times 2.8 = 903.2621\text{m/s}$ となる。

● DSMC 計算に必要なアルゴンガスの物性値

1mol の質量 $M = 0.039948$ (kg/mol)

分子 1 個の質量 $m = 6.633526 \times 10^{-26}$ (kg)

単位質量当り気体定数 $R = 208.1333$ (J/(kgK))

比熱比 $\gamma=1.666667$

分子間力ポテンシャル $\phi(r)$ は、レナードジョーンズ (6-12) ポテンシャル

$$\phi(r) = 4\epsilon \left\{ \left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right\} \quad (\text{J})$$

とする。ここで、 r は分子間距離 (m)、ポテンシャルの定数 ϵ , σ は文献 [2] の $\epsilon/k = 124\text{K}$, $\sigma = 3.418 \times 10^{-10}\text{m}$ とした。 k はボルツマン定数である。

● DSMC 計算の入力データ設定に必要な諸量の計算

(1) 平均自由行程 λ

分子間力ポテンシャルがレナードジョーンズ (6-12) ポテンシャルの場合、相互作用する (衝突する) 分子の衝突径数がポテンシャルのパラメータ σ (ポテンシャルの値がゼロとなる分子間距離 r の値) の 4 倍以上になると、相対速度が極端に小さい場合を除き偏向角が非常に小さくなる。これより、 σ の 4 倍を半径 (8 倍を直径) とする剛体球分子の全衝突断面積をレナードジョーンズ (6-12) 分子の全衝突断面積 σ_T とする。すなわち

$$\sigma_T = \pi(8\sigma)^2 = \pi \times (8 \times 3.418 \times 10^{-10})^2 = 2.348951 \times 10^{-17} \quad (\text{m}^2)$$

とする。(なお、ここで求めた σ_T は DSMC 計算の時間ステップ幅設定のためのもので、気体運動論でいう微分断面積を散乱角に関して積分した分子相対速度の関数である全衝突断面積とは異なるものである。)

剛体球分子の平均自由行程 λ は

$$\lambda = \frac{1}{\sqrt{2}\sigma_T n}$$

より求められる。ここで、 σ_T は剛体球分子の全衝突断面積、 n は分子数密度である。上で求めた σ_T と衝撃波背後の数密度 n_2 を n に代入して

$$\lambda = \frac{1}{\sqrt{2} \times 2.348951 \times 10^{-17} \times 9.309830 \times 10^{19}} = 3.233347 \times 10^{-4} \quad (\text{m})$$

を得る。

(2) 平均自由時間 τ_f

平均自由時間 τ_f は

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

で定義される。ここで \bar{c} はアルゴンガス分子の平均速度で、

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

と表される。

気体温度 T として衝撃波背後の温度 $T_2 = 990.3252\text{K}$ を代入して

$$\bar{c} = \sqrt{\frac{8 \times 208.1333 \times 990.3252}{\pi}} = 724.4856 \quad (\text{m/s})$$

を得る。

以上より、平均自由時間 τ_f は

$$\tau_f = \frac{\lambda}{\bar{c}} = \frac{3.233347 \times 10^{-4}}{724.4856} = 4.462618 \times 10^{-7} \quad (\text{s})$$

となる。

●DSMC 計算モデルの設定

2次元非定常問題として解析する。

解析領域とセル分割

図2に示す x 方向幅 1.5m、 y 方向幅 0.005m の領域を解析領域とする。この解析領域を x 方向 750 等分割、 y 方向 1 分割した 750 個の $2\text{mm} \times 5\text{mm}$ のセルに分割する。

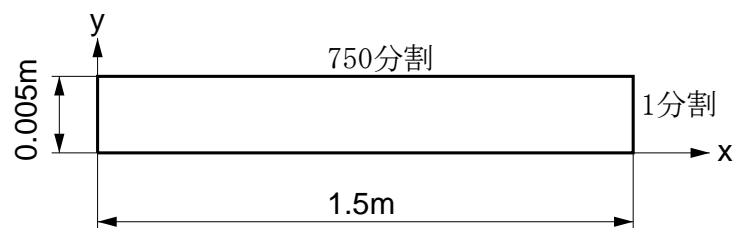


図2 解析領域

解析手順と境界条件

(過程 I) 図2の解析領域を衝撃波前方状態とするために、静止アルゴンガス条件の気体を解析領域に導入するシミュレーションをする。この過程の境界条件を図3に示す。

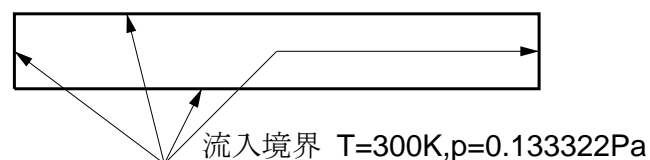


図3 過程 I の境界条件

(過程 II) 図2の解析領域の右端から衝撃波が進入して左側に進行する過程をシミュレーションをする。この過程の境界条件を図4に示す。

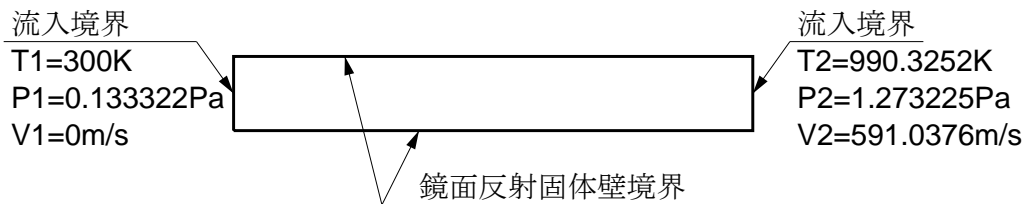


図4 過程IIの境界条件

時間ステップ幅 Δt

$\Delta t = 6 \times 10^{-8}$ s とする。これは、上で求めた平均自由時間 τ_f の約 1/7.4、分子平均速度 $\bar{c} = 724.4856$ m/s でセル x 方向幅 0.002m を進む時間の約 1/4.6 の時間である。

シミュレーション用分子数

シミュレーション用分子数は、衝撃波前方のセル 1 個当たり 100 個程度となるように設定した。

計算手順

以下の手順で計算する。

(過程 I) 解析領域内に分子を導入するシミュレーション。(1 から 5000 ステップまで、実時間で 0.0003s 間計算する。)

(過程 II) 衝撃波の進行過程を追跡するシミュレーション。(5001 から 25000 ステップまで、実時間で 0.0012s 間 (衝撃波が約 1.08m 進行する時間) 計算する。)

(集団平均) 過程 I,II を 120 回繰り返して集団平均をとりマクロ量のゆらぎを抑制する。

● 結果

25000 ステップにおける x 方向の密度分布を実験 [1] と比較した結果を図 5 に示す。密度 ρ は、衝撃波前後の密度 ρ_1, ρ_2 により

$$\rho' = \frac{\rho - \rho_1}{\rho_2 - \rho_1}$$

と無次元化してある。また x 方向距離は $\rho' = 0.5$ となる位置を原点として、文献 [1] 記載の衝撃波前方における分子の平均自由行程 $\lambda_1 = 0.0549$ m で $x' = x/\lambda_1$ と無次元化してある。

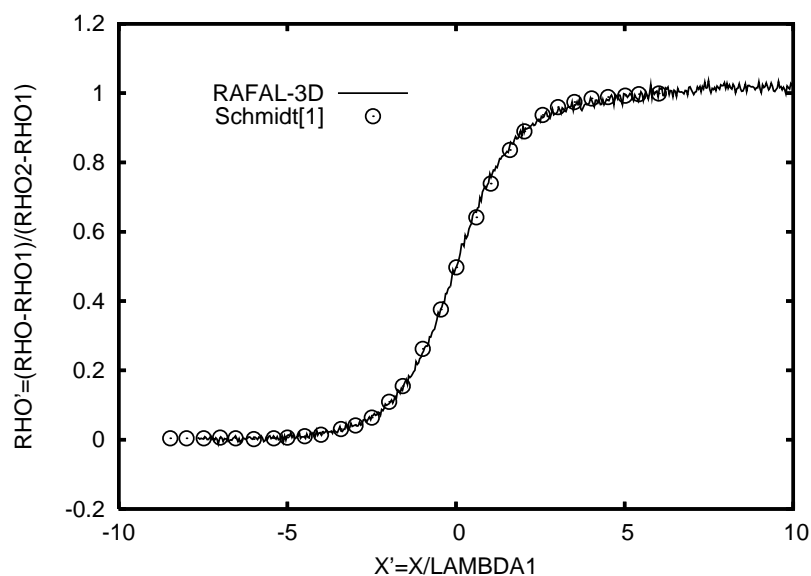


図5 衝撃波内部の密度分布

DSMC 計算結果と実験結果はよく一致している。

- 計算時間について

HP Compaq 製 dc7100SFF(pentium IV 3.6GHz) 計算機で、過程 I の計算に 111s, 過程 II の計算に 939s を要した。

- 参考文献

[1]Schmidt,B.: Electron beam density measurements in shock waves in argon : Journal of Fluid Mechanics Vol.39,part 2(1969),pp.361-373.

[2]Hirschfelder J.O.,Curtiss,C.F. and Bird,R.B. : Molecular theory of Gases and Liquids : John wiley & sons(1964),p.1110.

レナードジョーンズ (6-12) ポテンシャル分子について (アルゴンの場合)

- レナードジョーンズ (6-12) ポテンシャル
分子間力のポテンシャル $\phi(r)$ を、

$$\phi(r) = 4\epsilon \left\{ \left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right\} \quad (\text{J})$$

としたものをレナードジョーンズ (6-12) ポテンシャルという (r は分子間距離)。

図 1 に示すように、このポテンシャルは $r = \sigma$ でゼロとなり、 $r_0 = 2^{1/6}\sigma = 1.122462\sigma$ で最小値 $-\epsilon$ となる。

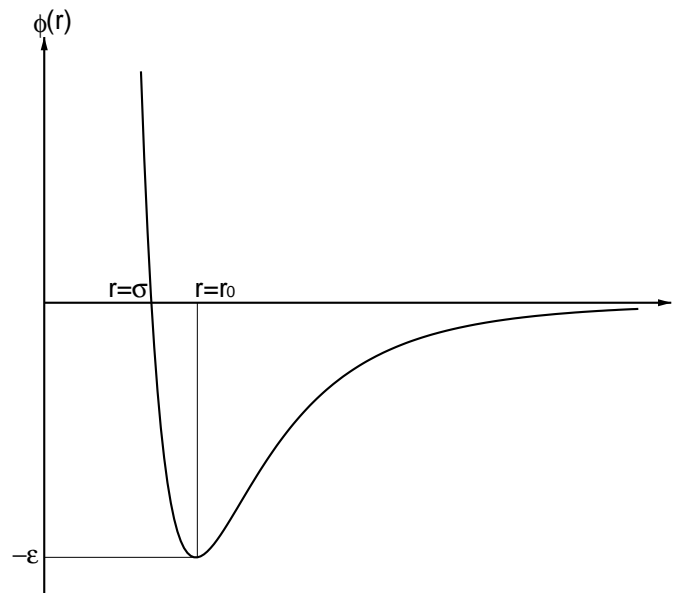


図 1 レナードジョーンズ (6-12) ポテンシャル曲線

分子間力 $F(r)$ は、 $\phi(r)$ を微分して

$$F(r) = -\frac{\partial\phi}{\partial r} = \frac{24\epsilon}{r} \left\{ 2 \left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right\} \quad (\text{N})$$

となる。

ポテンシャルの定数 ϵ, σ は文献 [1] 等に記載があり、アルゴンの場合 $\epsilon/k = 124\text{K}$, $\sigma = 3.418 \times 10^{-10}\text{m}$ である。 k はボルツマン定数である。

アルゴンのポテンシャルと分子間力の分子間距離に対する関係を図 2,3 に示す。

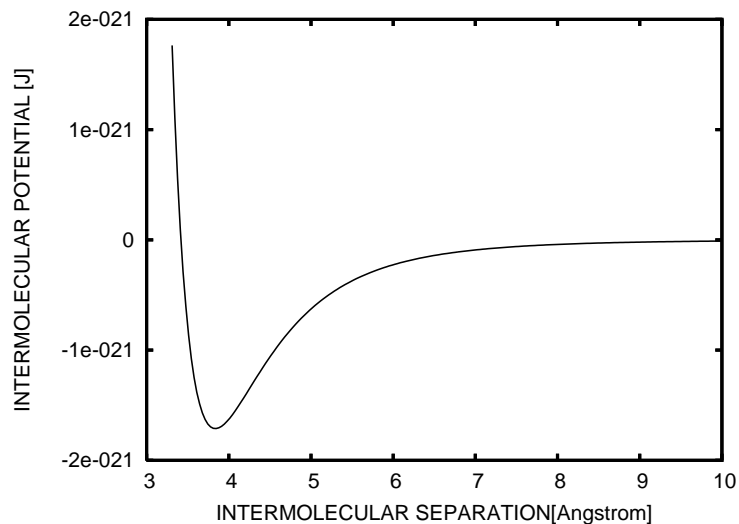


図2 レナードジョーンズ (6-12) ポテンシャル (アルゴン)

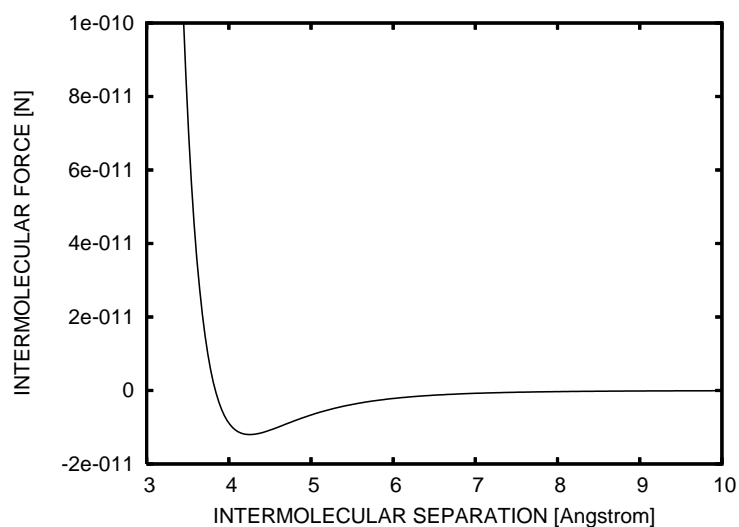


図3 レナードジョーンズ (6-12) ポテンシャル分子間力 (アルゴン)

- 衝突時の分子運動軌跡

レナードジョーンズ (6-12) ポテンシャル分子間力により相互作用する (衝突する) 一方の分子に対する他方の分子の相対運動の軌跡を、相対速度 g を変化させてプロットした結果を図4に示す。

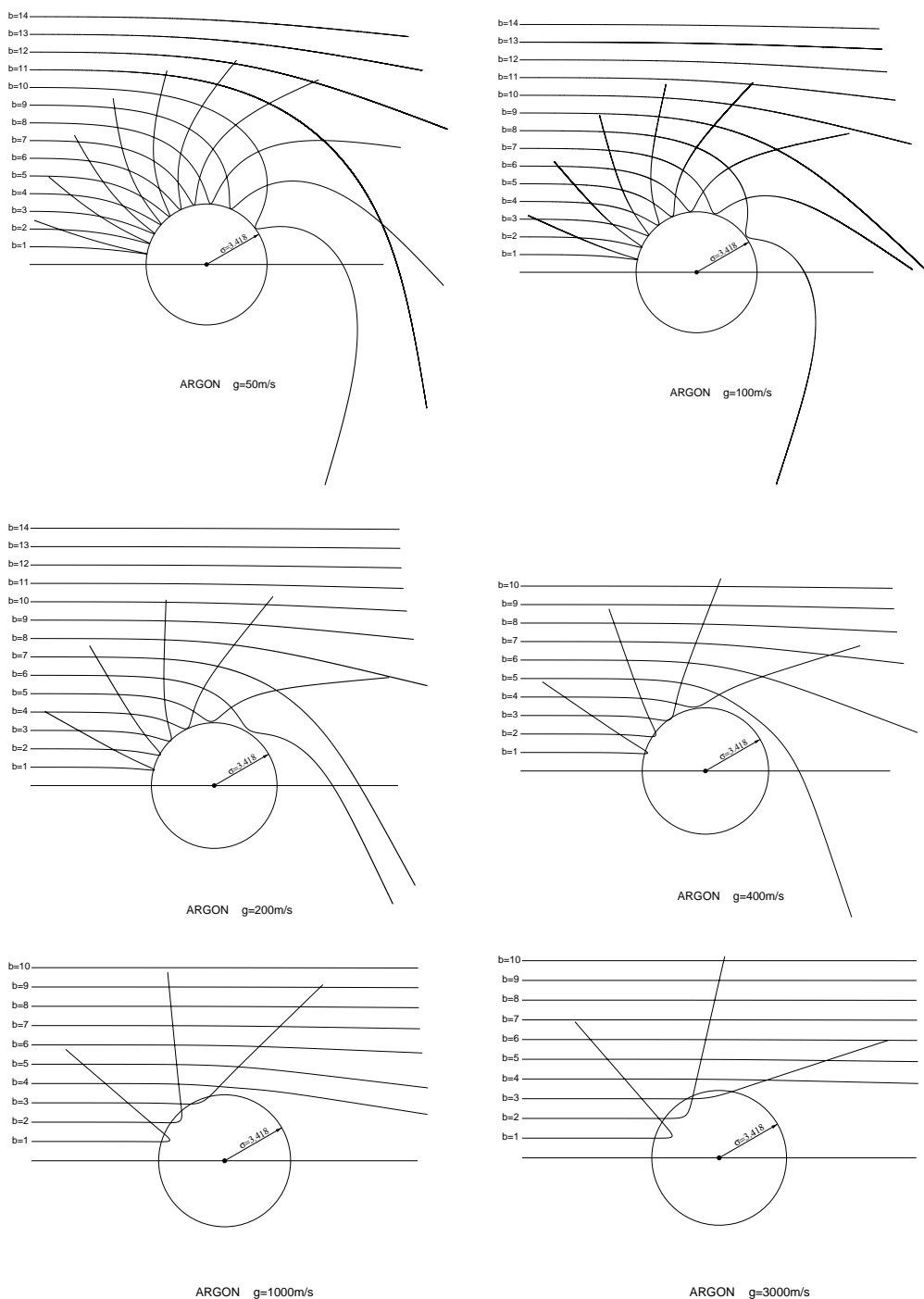


図4 分子間力ポテンシャルがレナードジョーンズ (6-12) ポテンシャルである分子の標的分子に対する衝突分子の軌跡 (g は相対速度、 b は衝突径数 (単位 Angstrom))

● 衝突時の偏向角

分子間力ポテンシャルがレナードジョーンズ (6-12) ポテンシャルである分子の散乱後の偏向角 χ は積分

$$\chi = \chi(b, g) = \pi - 2 \int_{r_m}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{2}{\mu g^2} \phi(r) - \frac{b^2}{r^2}}} \frac{b}{r^2} dr$$

$$= \pi - 2 \int_{r_m}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{8\epsilon}{\mu g^2} \left\{ \left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right\} - \frac{b^2}{r^2}}} \frac{b}{r^2} dr$$

により求められる。ここで、 b は衝突径数、 g は分子の相対速度、 μ は換算質量である。

積分の下限 r_m は被積分関数の根号内の関数をゼロと置いた方程式

$$1 - \frac{8\epsilon}{\mu g^2} \left\{ \left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right\} - \frac{b^2}{r^2} = 0$$

の実の正値最小解である。従って、この積分は下限 r_m で特異性を持ち広義積分になる。

特に r_m が重解となる場合は、積分は発散する。この積分の発散は orbiting に対応する。

図5に相対速度 g をパラメータとした偏向角 χ と衝突径数 b の関係を示す。図中丸印は軌道計算により求めた偏向角 (図4の軌道計算打ち切り位置における衝突分子の運動方向) である。

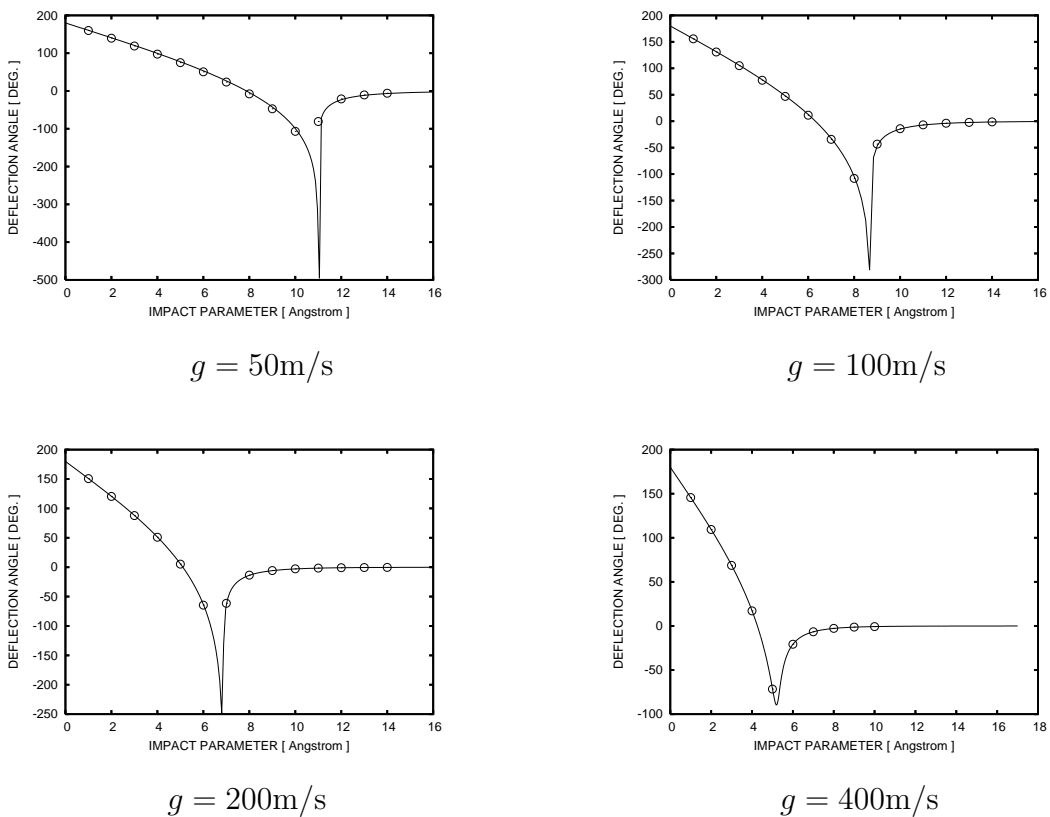


図5-1 偏向角と衝突径数の関係 (g は相対速度 ; 丸印は軌道計算による値)

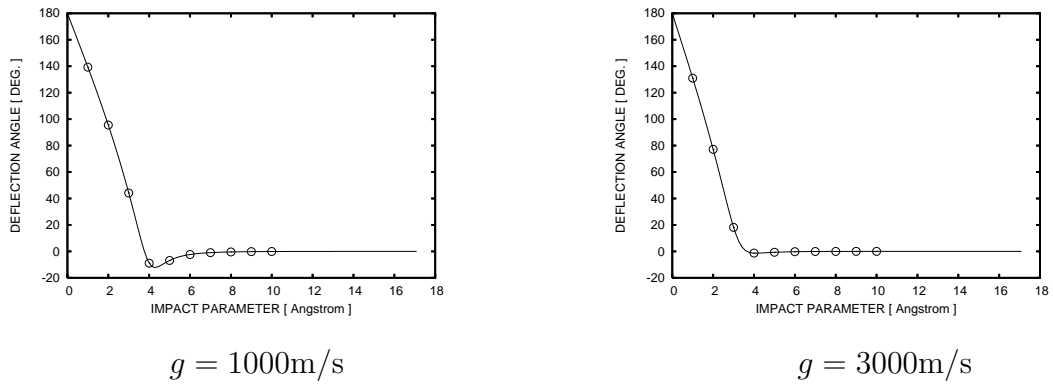


図 5-2 偏向角と衝突径数の関係 (g は相対速度 ; 丸印は軌道計算による値)

● 参考文献

[1]Hirschfelder J.O.,Curtiss,C.F. and Bird,R.B. : Molecular theory of Gases and Liquids
: John wiley & sons(1964),p.1110.