

モンテカルロ法による極超音速流の解析

真鍋 圭司* 中村 弘明** 西尾 正富*

Monte Carlo Simulation of Hypersonic Flow

Keiji MANABE* Hiroaki NAKAMURA** Masatomi NISHIO*

ABSTRACT

Hypersonic flow field around the re-entry capsule is analyzed by Monte Carlo Simulation. The formulation for analyzing rarefied gas flow based on statistical theory is described. This method uses random number, and dynamics of molecular is simulated considering collision and reflection. The two dimensional capsule model is made by using Finite Element mesh, and hypersonic flow field of Mach 10 is calculated. The density and velocity field around the capsule model are calculated, and the shock wave is obtained as the density concentrated filed. This Monte Carlo method is considered to be effective for simulating hypersonic flow field, although some problems are remained.

キーワード: モンテカルロシミュレーション, 極超音速流, 衝撃波

Keywords: Monte Carlo Simulation, Hypersonic flow, Shock wave

1. まえがき

極超音速流の詳細を理解することは、航空宇宙工学の発展において非常に重要である。近年、計算機の発展に伴ってCFD (Computational Fluid Dynamics) によるアプローチが有効となり、主として差分法により解析されてきた。著者らは有限要素法による衝撃波を含む圧縮性流れの解析法を提案し、再突入カプセル周りの流れの計算を行い、放電発光法による実験値と比較、検討した[1]。

差分法や有限要素法で解く支配方程式は、連続体力学に基づくものである。一方、気体分子の挙動が支配的となる希薄流の解析では、連続体近似ができなくなるため、分子の動きを確率的に計算するモンテカルロ法[2]が有力となる。本報告ではモンテカルロ法を用い、再突入カプセル周りの極超音速流の計算を試みた。

2. モンテカルロ法の概要

2.1 希薄流れの基礎式

希薄気体の流れは、ボルツマン方程式で記述され

る。モンテカルロ法は、ボルツマン方程式を、確率的に取り扱うことによって流れ場を求める手法である。まず、その概要について述べる。

気体の速度分布関数を f とする。平衡状態においては、 f は次のマクスウェル分布に従う。

$$f(\mathbf{c}) = \frac{1}{(2\pi RT)^{3/2}} \exp\left[-\frac{(\mathbf{c}-\mathbf{V})^2}{2RT}\right] \dots \dots (1)$$

R は気体定数、 T は温度、 \mathbf{c} は速度ベクトル、 \mathbf{V} は平均速度ベクトルである。 $f d\mathbf{c}$ は1つの分子が速度 $\mathbf{c} \sim \mathbf{c}+d\mathbf{c}$ の間の値を持つ確率であり、 f は確率密度関数の意味を持つ。ボルツマン方程式は f の分布を定める方程式であるが、分子の衝突などを含み複雑である。モンテカルロ法はこれを確率的に解く手法である。

次に、分子の流入や、壁における乱反射を確率的に取り扱うために、巨視的に一様流を考える。 x 方向のみに速度を持つ巨視的な一様流の場合、この速度分布関数 f^* は次のような各方向確率密度関数の積で表される。

$$f^* = f_{x_x} \cdot f_y \cdot f_z \dots \dots (2)$$

ここで、

*機械システム工学科

**大学院設計生産工学専攻

$$\begin{cases} f_{xx} = \frac{c_x}{RT} \frac{1}{K(V_x/\sqrt{2RT})} \exp\left[-\frac{(c_x - V_x)^2}{2RT}\right] \\ f_y = \frac{1}{\sqrt{2\pi RT}} \exp\left[-\frac{c_y^2}{2RT}\right] \\ f_z = \frac{1}{\sqrt{2\pi RT}} \exp\left[-\frac{c_z^2}{2RT}\right] \end{cases} \dots (3)$$

ここで、関数 $K(x)$, $\text{erf}(x)$ は次式で定義される。

$$K(x) = \exp(-x^2) + \sqrt{\pi}x[1 + \text{erf}(x)] \dots (4)$$

$$\text{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x \exp(-t^2) dt \dots (5)$$

2.2 乱数による速度場の計算

モンテカルロシミュレーションでは、各サンプル分子の速度を乱数を用いて発生させる。次の各事項について、速度を与える方法[2]をまとめておく。

いま、連続的に発生させる乱数において、 i 番目に発生した乱数を U_i で表す。

(a) マクスウェル分布

マクスウェル分布に従う速度は、乱数 U_i を用いて次式で発生させる。

$$\begin{cases} c_x = \sqrt{-2RT \ln U_1} \cos(2\pi U_2) \\ c_y = \sqrt{-2RT \ln U_1} \sin(2\pi U_2) \\ c_z = \sqrt{-2RT \ln U_3} \cos(2\pi U_4) \end{cases} \dots (6)$$

(b) 壁面における乱反射

物体壁面において、気体分子は反射される。ここでは、 y 方向に進んでいた分子が壁で乱反射し、 y の負の方向に進む場合、次式となる。

$$\begin{cases} c_y = \sqrt{-2RT_w \ln U_1} \\ c_x = \sqrt{-2RT_w \ln U_2} \cos(2\pi U_3) \\ c_z = \sqrt{-2RT_w \ln U_2} \sin(2\pi U_3) \end{cases} \dots (7)$$

ここで、 T_w は壁の温度である。

(c) 分子の流入

分子の流入は棄却法により計算できる。まず、流入分

子のサンプル数 N_{in} を求める。

次に、 N_{in} 個のサンプル分子について、以下の手順を行う。

① 乱数 U_1, U_2 を発生させ、次式により c_y, c_z を計算する。

$$\begin{aligned} c_y &= \sqrt{-2RT \ln U_1} \cos(2\pi U_2) \\ c_z &= \sqrt{-2RT \ln U_1} \sin(2\pi U_2) \end{aligned} \dots (8)$$

② 乱数 U を発生させ、 c_x を次式で計算する。

$$c_x = U c_\infty \dots (9)$$

③ 乱数 U を発生させ、

$$U < \frac{f_{xx}}{f_{\max}} \dots (10)$$

であるならば、③の c_x を採用する。

そうでない場合、②に戻る。

なお、上で計算された速度を持つ流入分子には、乱数を用いて座標を与える。

(d) 分子間の衝突の取り扱い

分子間の衝突は南部によって提案された最大衝突数法[2]によって計算した。計算の概略は次のとおりである。

1つのセルの中で、最大衝突数 N_{\max} を計算し、整数化する。以下の①～③の処理を N_{\max} 回繰り返す。

① 2つの分子 l, n を選ぶ

② 相対速度 \mathbf{g} , およびその大きさ g を計算する。

$$\mathbf{g} = \mathbf{c}_n - \mathbf{c}_l \dots (11)$$

$$g = \sqrt{\mathbf{g} \cdot \mathbf{g}} \dots (12)$$

③ 乱数 U を発生させ、

$$U \leq \frac{g}{g_{\max}} \dots (13)$$

のとき、次の計算を行う。

$$\cos \theta = 1 - 2U_1$$

$$\sin \theta = \sqrt{1 - \cos^2 \theta}$$

$$\psi = 2\pi U_2$$

$$\mathbf{R} = \begin{Bmatrix} R_x \\ R_y \\ R_z \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \sin \theta \cos \psi \\ \sin \theta \sin \psi \\ \cos \theta \end{Bmatrix} \quad \dots (14)$$

これらを用いて衝突後の速度を次式で計算する。

$$\mathbf{c}'_l = \frac{1}{2}(\mathbf{c}_l + \mathbf{c}_n - g\mathbf{R}) \quad \dots (15)$$

$$\mathbf{c}'_n = \frac{1}{2}(\mathbf{c}_l + \mathbf{c}_n + g\mathbf{R}) \quad \dots (16)$$

2.3 計算の無次元化

計算は無次元で行った。代表長さを L とし、長さ L で無次元化する。また、速度は $\sqrt{2RT_0}$ 、時間は $L/\sqrt{2RT_0}$ で無次元化する。

3. カプセル周りの流れのシミュレーション

3.1 計算モデル

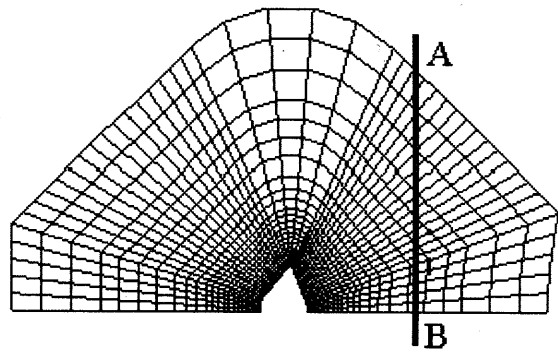
図1に計算モデルを示す。MESUR カプセルの形状を有したモデルであり、これは Dogra ら[3] が計算例を示したものである。カプセルは本来、軸対称形をした形状であるが、研究の第一段階として2次元平面モデルを解析した。このカプセルの周りの空間を、四角形のセルによって分割している。図1において、(a)が全体図であり、(b)にカプセル部分を拡大して示す。このセル分割は、有限要素法の計算で用いた計算メッシュをそのまま使用した。

今回、この有限要素メッシュモデルにおいて、サンプル分子がどの要素に属するか、また、サンプル分子が移動するとき、どこの要素に移るかを汎用的に計算するプログラムを新たに作成した。これによって、モンテカルロ計算を効率よく、汎用的に行うことができる。

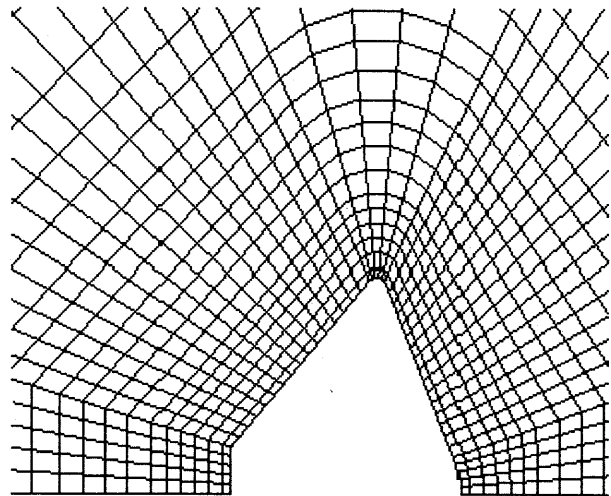
図1は、節点数 1152、要素数 1081 のモデルである。図中 AB で示した部分を代表名長さ L とし、そこから分子が流入するものとした。上流の一樣流の単位面積 $L \times L$ に含まれるのサンプル分子数 $N=3000$ として流入させた。

計算条件は、クヌーセン数 $Kn=2.5 \times 10^{-3}$ とし、一樣流の流速はマッハ 1.0 である。また気体は単原子気体、すなわち比熱比 $\gamma=5/3$ とした。

時間増分 Δt は、平均自由時間に基づいて決定する。平均自由時間 τ は、平均自由行程 λ を平均速度



(a) 全体モデル



(b) 拡大図

図1 カプセル周りのセルモデル

で除して求める。すなわち、

$$\tau = \frac{\lambda}{\sqrt{8RT/\pi}} \quad \dots (17)$$

これを、クヌーセン数の定義 $Kn = \lambda/L$ を用いて表すと次のようになる。

$$\tau = \frac{\sqrt{\pi}}{\sqrt{8RT}} Kn \cdot L \quad \dots (18)$$

これを無次元化し、次に示す式により時間増分 Δt を決定する。

$$\Delta t = \alpha \sqrt{\pi} Kn \quad \dots (19)$$

ここで、 $\alpha=0.01$ とした。

さらに、 Δt には、1ステップにサンプル分子が進む距離が、セルの長さの最小値以下という条件(クーラン条件)の制限も加える。今回の計算はこの時間増分で 20000 ステップ行った。

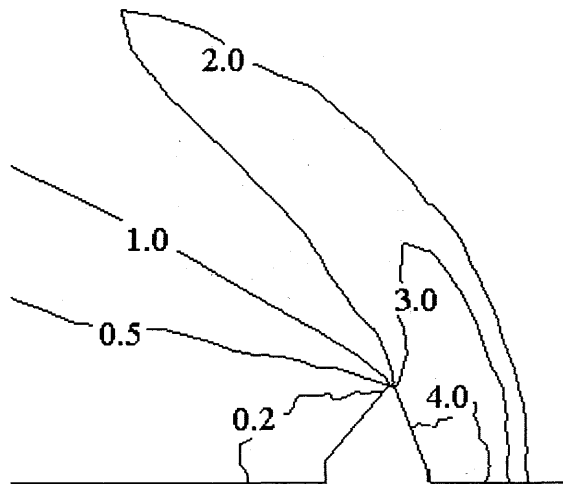


図2 密度分布 ρ/ρ_∞

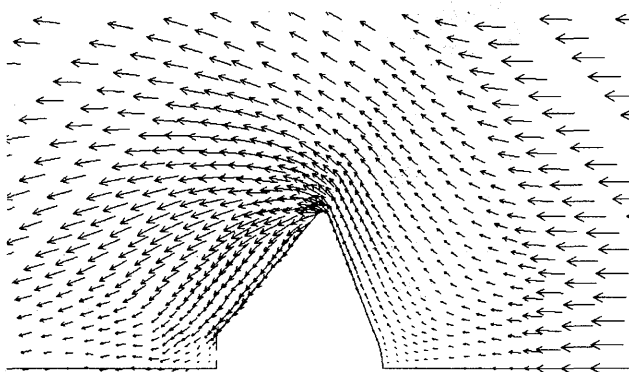


図3 速度分布

さらに、式(9)の $c_\infty = U + 2.5$ 、衝突計算に使用する $g_{\max} = 5/\sqrt{2}$ とした。

計算の初期は真空状態とし、分子を流入させ、2000ステップを越えてから、5ステップごとに計算データを採取した。

3.2 計算結果および考察

図2に、計算で得られた密度分布を示す。カプセル前方にやや、密度の集中した部分があり、これが衝撃波に対応する。軸対称の計算と比較して、衝撃波離脱距離は大き目に計算されている。

図3に速度ベクトルを示す。カプセル周りに衝撃波を伴う流れの傾向が現れている。すなわち、密度分布の衝撃波に対応する部分には、速度ベクトルが急変する部分が認められる。また、カプセル後方には渦が生ずると考えられるが、本計算ではその渦は捕らえることが出来なかった。モンテカルロシミュレーションでは、衝突計算のためセルの大きさは平均自由行程以下にする必要があるが、この計算ではセルが大き過ぎたためと考えられる。セルを大きく

するには、非常に密度の薄い希薄気体を対象としなければならなくなり、実験との比較などはまだ行えない状況である。さらに、プログラムの3次元化なども課題として残る。

4. あとがき

モンテカルロシミュレーションを効率よく行うため、有限要素法の計算に使用した計算メッシュを、モンテカルロ計算のセルに利用し、サンプル分子の動きをメッシュ内に捕らえるプログラムを作成した。

モンテカルロ法により極超音速流れの計算を行った。衝撃波に対応した密度の集中部分や、速度ベクトルが計算された。解決すべき問題は残されているものの、モンテカルロシミュレーションは、気体分子の挙動を直接考慮するため、再突入カプセル周りの流れの解析などに有効と考えられる。

参考文献

- [1] 西尾正富, 真鍋圭司, 中村弘明, 瀬崎新士: 超音速/極超音速流れの新しい計算手法, 日本航空宇宙学会論文集, Vol.51, No.599, pp.683-689, (2003).
- [2] 南部健一: ボルツマン方程式の確率解法, 保原充, 大宮司久明編著, 数値流体力学, 東京大学出版会, pp.287-324 (1992).
- [3] V.K. Dogra, J.N. Moss, R.G. Wilmoth, J.C. Taylor and H.A. Hassan: Effect of Chemistry on Blunt-Body Wake Structure, AIAA Journal, Vol.33, No.3, (1995).