

RAFAL - 3D 解析例 (6)

円筒ノズルから真空中へ噴出する噴流の分子数束角分布

• 計算内容

容器内に充填されたアルゴンガスが、容器壁面に設けられた直径 D 、長さ L の円筒ノズルから容器外部の完全真空中に噴出する希薄気体流を解析し、この噴流の分子数束角分布を求める。容器内のアルゴンガス圧力 p_{in} とノズル長 L を変化させて、分子数束角分布に対する影響を調べる(図1および表1参照)

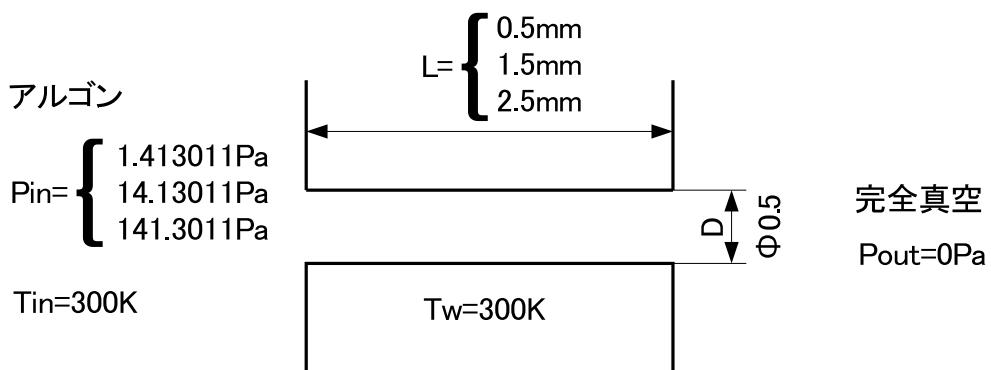


図1 円筒ノズルから真空中へ噴出する噴流

	$p_{in} = 1.413011\text{Pa}$ $K_n = 10$	$p_{in} = 14.13011\text{Pa}$ $K_n = 1$	$p_{in} = 141.3011\text{Pa}$ $K_n = 0.1$
$L = 0.5\text{mm} (L/D = 1)$	ケース1	ケース2	ケース3
$L = 1.5\text{mm} (L/D = 3)$	ケース4	ケース5	ケース6
$L = 2.5\text{mm} (L/D = 5)$	ケース7	ケース8	ケース9

表1 計算ケース

容器中のアルゴンガスの温度 T_{in} は $T_{in} = 300\text{K}$ 、ノズル壁面温度 T_W は $T_W = 300\text{K}$ とする。また、容器の寸法は十分大きく、気体の流出に伴う容器内のアルゴンガスの圧力および温度の変化は無視できるものとする。

表1中の K_n は、表1中の各ケースの圧力、温度におけるアルゴン分子の平均自由行程 λ と孔径 D とから定義されるクヌーセン数 $K_n = \lambda/D$ である。この平均自由行程 λ はア

ルゴン分子を剛体球として算出した場合のものである(後述の DSMC 計算に必要なパラメータの計算の項参照)。

• アルゴンガスの物性値

DSMC 解析に必要な物性値データを以下のように算定する。

$$1\text{mol の質量} \quad M = 0.039948 \quad (\text{kg/mol})$$

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

$$\text{単位質量当たり気体定数} \quad R = 208.1333 \quad (\text{J}/(\text{kgK}))$$

$$\text{全衝突断面積} \quad \sigma_T = 4.1455 \times 10^{-19} \quad (\text{m}^2)$$

全衝突断面積 σ_T は分子を剛体球分子と仮定した Chapman-Enskog の方法による

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

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

アルゴンガスの温度 $T = 293.15\text{K}$ における粘度 $\mu = 22.3 \times 10^{-6}\text{Pas}$ (理科年表 1989 年,p.448) を代入すれば

$$\sigma_T = \frac{1}{22.3 \times 10^{-6}} \sqrt{\frac{6.633526 \times 10^{-26} \times 1.380658 \times 10^{-23} \times 293.15}{\pi}} = 4.1455 \times 10^{-19} \quad (\text{m}^2)$$

を得る。分子直径 d は $d = \sqrt{\sigma_T/\pi} = 3.63 \times 10^{-10}\text{m}$ 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 に容器内のアルゴンガスの圧力 p_{in} , 温度 T_{in} を代入してケース 1,4,7 の場合

$$\lambda = \frac{1.380658 \times 10^{-23} \times 300}{\sqrt{2} \times 4.1455 \times 10^{-19} \times 1.413011} = 5 \times 10^{-3} \quad (\text{m})$$

ケース 2,5,8 の場合

$$\lambda = \frac{1.380658 \times 10^{-23} \times 300}{\sqrt{2} \times 4.1455 \times 10^{-19} \times 14.13011} = 5 \times 10^{-4} \quad (\text{m})$$

ケース 3,6,9 の場合

$$\lambda = \frac{1.380658 \times 10^{-23} \times 300}{\sqrt{2} \times 4.1455 \times 10^{-19} \times 141.3011} = 5 \times 10^{-5} \quad (\text{m})$$

となる。

(2) 平均自由時間 τ

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、容器内のアルゴンガス分子の平均速度で

$$\bar{c} = \sqrt{\frac{8RT_{in}}{\pi}} = \sqrt{\frac{8 \times 208.1333 \times 300}{\pi}} = 398.7507 \text{ (m/s)}$$

である。以上より平均自由時間 τ は、

ケース 1,4,7 の場合

$$\tau = \frac{5 \times 10^{-3}}{398.7507} = 1.253916 \times 10^{-5} \text{ (s)}$$

ケース 2,5,8 の場合

$$\tau = \frac{5 \times 10^{-4}}{398.7507} = 1.253916 \times 10^{-6} \text{ (s)}$$

ケース 3,6,9 の場合

$$\tau = \frac{5 \times 10^{-5}}{398.7507} = 1.253916 \times 10^{-7} \text{ (s)}$$

となる。

• DSMC 法シミュレーションモデル

円筒ノズル内部とノズル上下流近傍の流れを軸対称問題として解析する。

解析領域

図 2 に示す領域を解析領域とする。

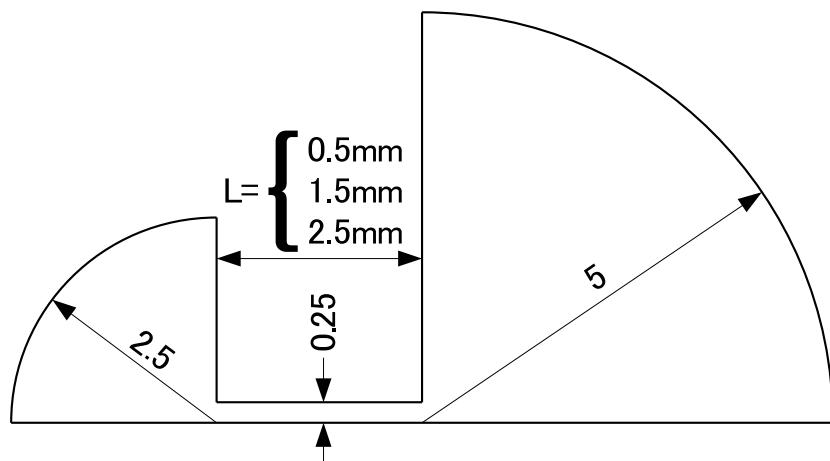
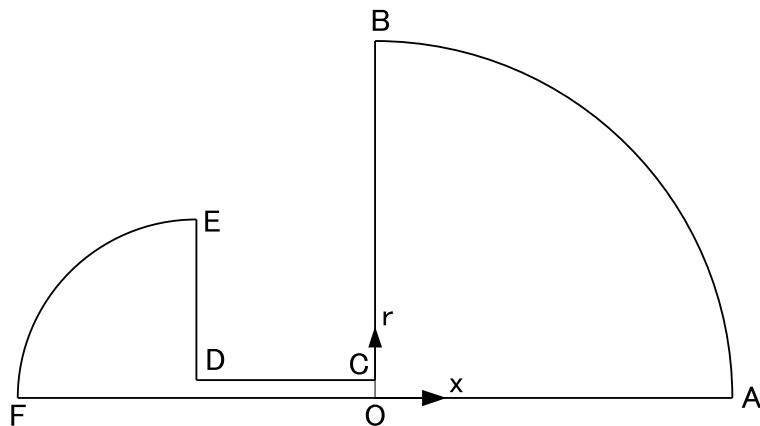


図 2 解析領域

解析領域のセル分割

ノズル出口面の開口円中心を原点 O , 中心軸方向に x 軸, 中心軸と垂直方向に r 軸をとった座標系を設定してセル分割する。このとき、ノズル上下流近傍を $0.05\text{mm} \times 0.05\text{mm}$ 程度の4辺形セルで分割する。このセル寸法はケース3,6,9の場合の平均自由行程と同程度の大きさである。



座標系の設定

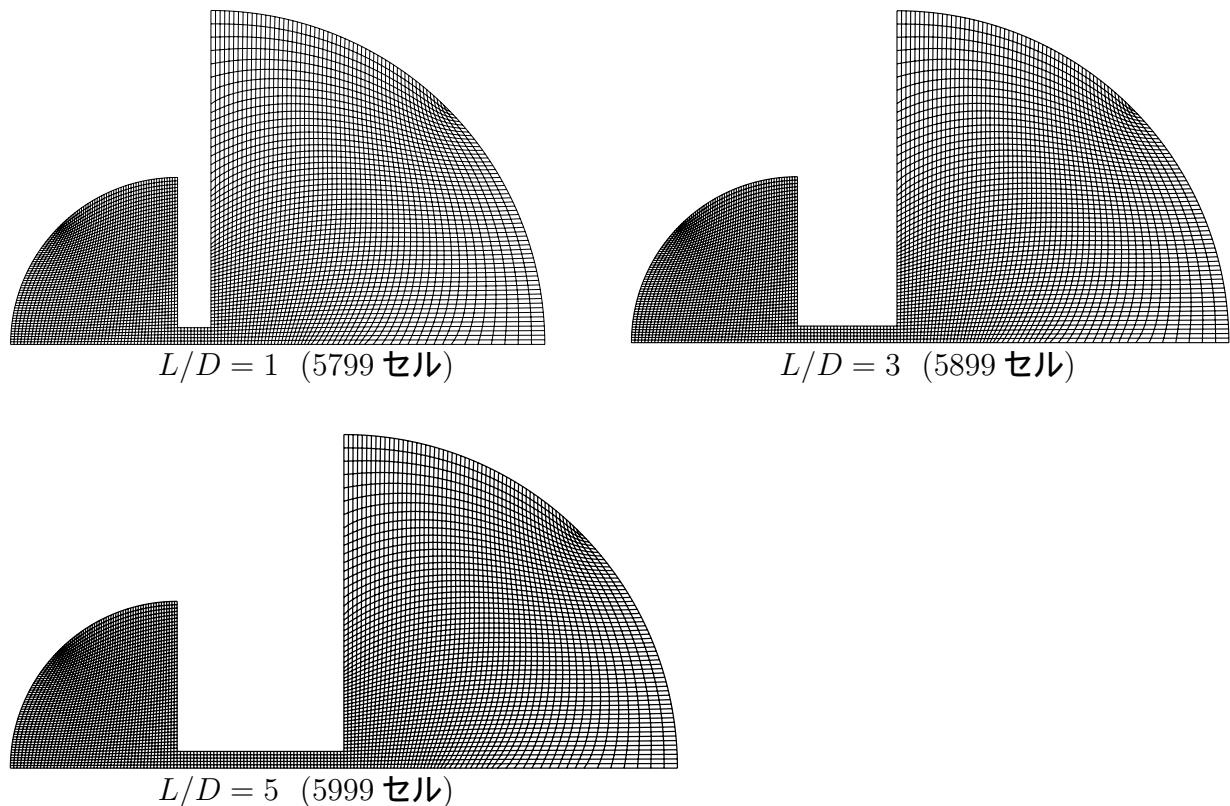


図3 解析領域のセル分割図

境界条件

(i) 円弧 AB 境界

付着率 1 の固体壁境界とする。この境界に付着した分子数に基づき噴流の分子数束角分布を算出する。

(ii) 線分 BCDE 境界

壁面温度 300K の拡散反射固体壁境界とする。

(iii) 円弧 EF 境界

マクロ流入速度ゼロの流入境界とする。流入気体の圧力, 温度は、それぞれ容器内のアルゴンガスの圧力 p_{in} , 温度 T_{in} とする。

(iv) 線分 FOA 境界

透過境界とする。

時間ステップ幅 Δt

上で求めた平均自由時間 τ を参照して、DSMC 法の時間ステップ幅 Δt をケース 1,4,7 の場合は $\Delta t = 2 \times 10^{-6}$ s、ケース 2,5,8 の場合は $\Delta t = 2 \times 10^{-7}$ s、ケース 3,6,9 の場合は $\Delta t = 2 \times 10^{-8}$ s とする。この Δt は各ケースの平均自由時間の 1/6 程度の時間である。

解析手順

以下の手順でシミュレーションする。

- (1) 解析領域内に分子を導入し、定常状態を達成させる。
- (2) 定常状態達成後、境界 AB に付着した分子数をカウントする。

• 分子数束角分布の算出

図 3 のように設定した座標系において、図 4 に示す天頂角 θ , 方位角 ϕ の方向にある微小立体角 $d\omega$ のなかに噴流分子が入る確率 $P(\theta, \phi; d\omega)$ は、 $P(\theta, \phi; d\omega) = f(\theta, \phi)d\omega$ と表される。この確率密度関数 $f(\theta, \phi)$ を分子数束角分布と呼ぶ。

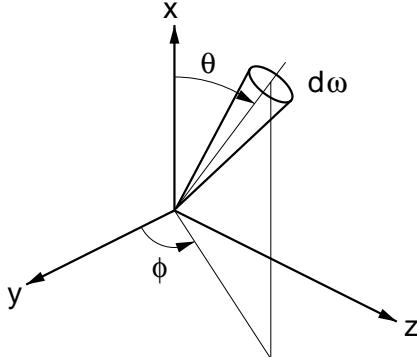


図 4 分子数束角分布

問題が軸対称の場合は、 f は θ のみの関数 $F(\theta)$ となり、天頂角 $\theta \sim \theta + d\theta$ のなかに噴流分子が入る確率 $P(\theta; d\theta)$ は、 $P(\theta; d\theta) = F(\theta) \sin \theta d\theta$ と表される。

分子数束角分布 $F(\theta)$ は、境界 AB に付着した分子数から以下のように求められる。

境界 AB は N_θ 等分されているとする。 $\Delta\theta = (\pi/2)/N_\theta$ 、 $\theta_i = (i - 1/2)\Delta\theta (i = 1, \dots, N_\theta)$ として天頂角 $(\theta_i - \Delta\theta/2, \theta_i + \Delta\theta/2)$ の区間にある境界に付着した分子数を N_i とする。 N を境界 AB に付着した全分子数 $N = \sum_{i=1}^{N_\theta} N_i$ とすれば、分子数束角分布は

$$F(\theta_i) = \frac{N_i/N}{\sin \theta_i \Delta\theta} \quad (i = 1, \dots, N_\theta)$$

と求められる。

図3のセル分割では境界 AB を 114 等分しているが、天頂角ゼロ付近の付着分子数(サンプル分子数)を大きくするため連続する 3 個の境界ごとに付着した分子数の和を N_i とした。このため $N_\theta = 114/3 = 38$, $\Delta\theta = 90/38 = 2.368421$ 度となる。

• 結果

(1) 前項の方法で算出した噴流の分子数束角分布を図5,6 に示す。角分布は $\theta=0$ の値で規格化する習慣に従って $F(\theta_i)/F(\theta_1)$ の値をプロットする。

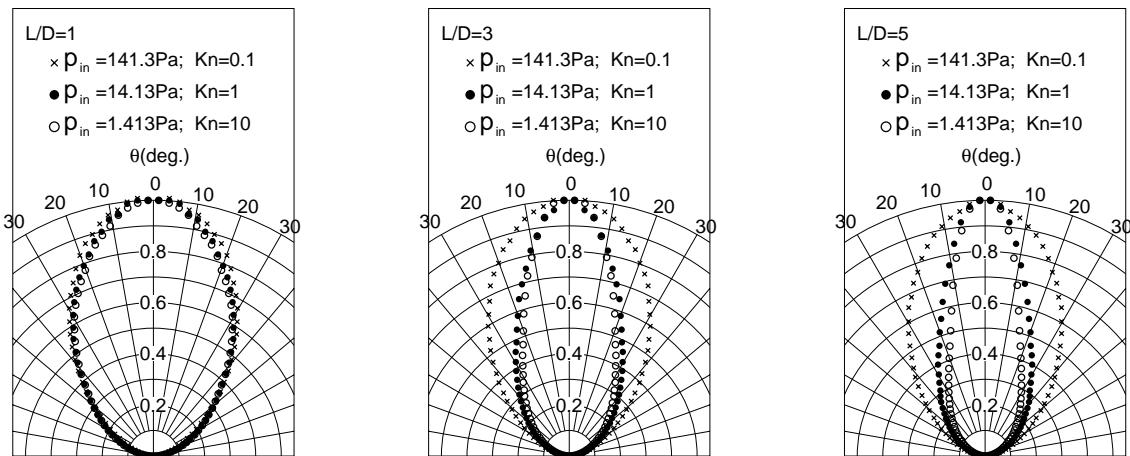


図5 圧力 p_{in} の分子数束角分布に対する影響

図5によれば、いずれのノズル長 L においてもノズル上流圧力 p_{in} が低くなるに従い角分布が鋭くなり (ノズルからの分子線がコリメートされるようになり)、そのなり具合はノズル長 L が大きくなるほど顕著となっている。

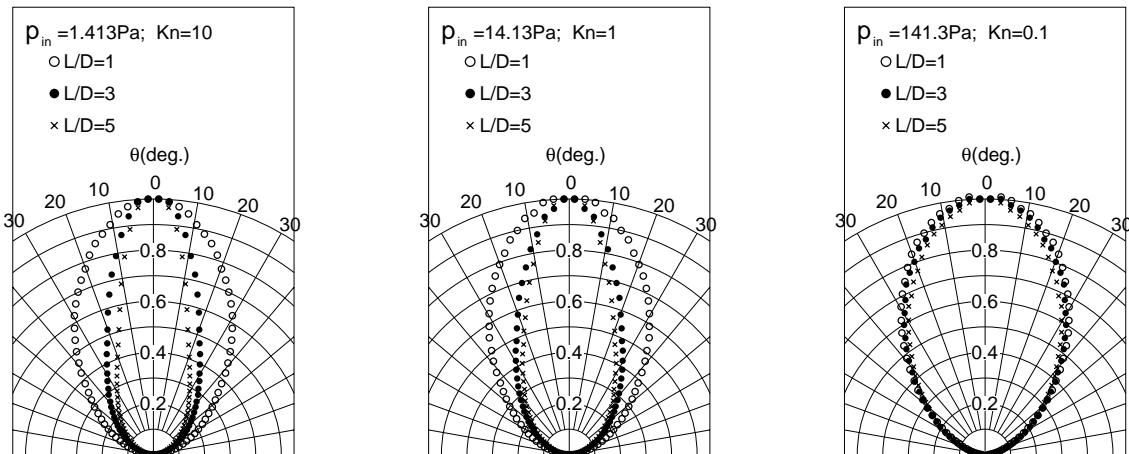
図 6 ノズル長 L の分子数束角分布に対する影響

図 6 によれば、いずれのノズル上流圧力 p_{in} においてもノズル長 L が長くなるに従い角分布が鋭くなり、そのなり具合はノズル上流圧力 p_{in} が低くなるほど顕著となっている。

図 5,6 を総合すると角分布は、ノズル上流圧力が低いほど、またノズル長が長いほど鋭くなり、ノズル上流圧力が高いほど、またノズル長が短いほど鈍くなる(コサイン則に近くなる)。また、ノズル上流圧力が高いほど角分布に対するノズル長の影響は小さくなり、ノズル長が短いほど角分布に対するノズル上流圧力の影響は小さくなる。

(2) 円弧境界 AB に付着した分子数は、ノズルからの流出量に相当する。この付着分子数から算出した流出流量とノズル長との関係を図 7 に、コンダクタンスとノズル長との関係を図 8 に示す。

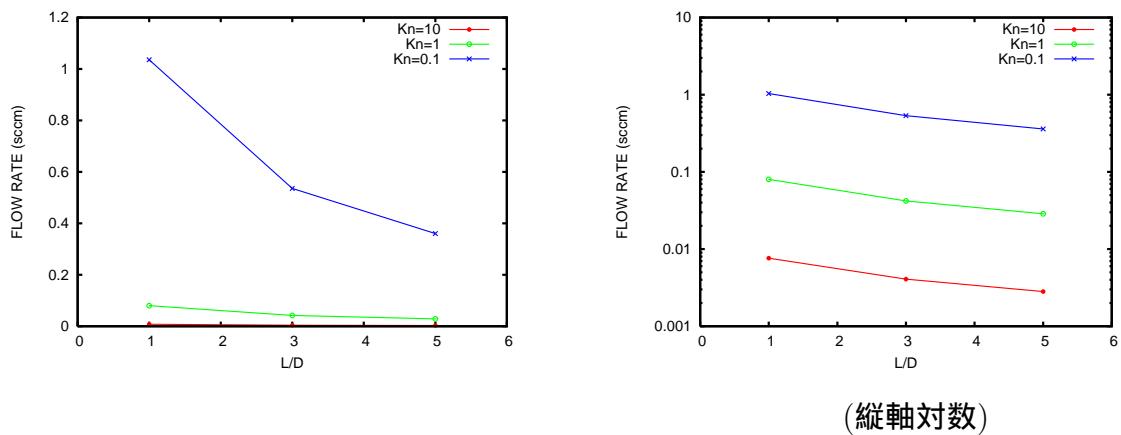


図 7 流出流量とノズル長の関係

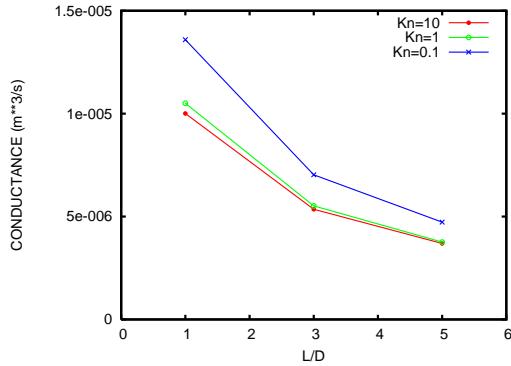


図 8 コンダクタンス (系温度 300K) とノズル長の関係

流出流量は、いずれのノズル上流圧力においてもノズル長が短くなるにつれ増加している。ノズル長が同一の場合は、クヌーセン数 K_n が 10 と 1 の場合は、ほぼ圧力に比例して増加しているが、 $K_n = 0.1$ と 1 の場合は圧力比以上に増加している。この傾向はコンダクタンスを見るとさらに明瞭になる。クヌーセン数 K_n が 10 と 1 の場合は、コンダクタンスは分子間衝突が少ないためほぼノズルの幾何学形状のみで定まり差が小さいのに對して、 $K_n = 0.1$ となると分子間衝突が多くなり、衝突によるノズル内分子を下流に押し流す効果によりコンダクタンスが前二者より大きくなっている。

• 分子モデルの検討

分子数束角分布は、分子間衝突における分子散乱の仕方に依存する。分子数束角分布に対する分子モデルの影響を検討するために 4 種の分子モデルで分子数束角分布を計算する。表 1 の計算ケースのうち分子衝突の影響が最も大きいノズル上流圧力 $p_{in} = 141.3011\text{Pa}$, $L/D = 5$ の場合につき計算する。

(i) 剛体球分子 (HS)

分子直径 d が $d = 3.63 \times 10^{-10}\text{m}$ (p.2 参照) である剛体球としたモデル。

(ii) 逆べきポテンシャル分子 (IPL)

分子間力のポテンシャル ϕ が

$$\phi(r) = \frac{a}{r^\alpha} \quad (a > 0, \alpha \geq 4)$$

であるモデル (r は分子間距離)。ポテンシャルの定数 α は文献 [1] によれば、アルゴンの場合 $\alpha = 6.35$ であるが、RAFAL-3D の仕様では逆べき指数として整数べきのみが指定可能なので、 $\alpha = 7$ とした。もう一つの定数 a は、Chapman-Enskog の方法から求められた [2]

$$\mu = \frac{5}{8} \sqrt{\frac{mkT}{\pi}} \left(\frac{2kT}{a\alpha} \right)^{2/\alpha} \frac{1}{\Gamma(4 - 2/\alpha) A_2(\alpha)}$$

を a について解いた

$$a = \frac{2kT}{\alpha} \left[\frac{5}{8} \sqrt{\frac{mkT}{\pi}} \frac{1}{\Gamma(4-2/\alpha) A_2(\alpha) \mu} \right]^{\alpha/2}$$

より求め

$$a = 2.824124 \times 10^{-87} \quad (\text{Nm}^8)$$

とした。

(iii) レナードジョーンズ (6-12) ポテンシャル分子 (LJ(6-12))

分子間力のポテンシャル $\phi(r)$ が、

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

であるモデル (r は分子間距離)。ポテンシャルの定数 ϵ, σ は文献 [3] の $\epsilon/k = 124\text{K}, \sigma = 3.418 \times 10^{-10}\text{m}$ とした。

(iv) 収縮剛体球分子 (VHS)

全衝突断面積 $\sigma_T(g)$ が

$$\sigma_T(g) = 4\pi A g^{-4/\alpha}$$

であり、衝突時の分子散乱が等方散乱であるモデル。

収縮剛体球分子気体の温度 T における粘度 μ は Chapman-Enskog の方法から求められ

$$\mu = \frac{15}{32\Gamma(4-2/\alpha)A} \left(\frac{mkT}{\pi} \right)^{1/2} \left(\frac{4kT}{m} \right)^{2/\alpha}$$

と表される [4]。この粘度の温度依存性は、逆べきポテンシャル分子の粘度の温度依存性と等しく $\mu \propto T^{1/2+2/\alpha}$ となる。逆べきポテンシャル分子で $\alpha = 7$ としたので、収縮剛体球分子でも $\alpha = 7$ とする。このとき温度依存性を $\mu \propto T^\omega$ と書いた場合の ω は、 $\omega = 0.5 + 2/7 = 0.78571$ となる。

もう一つのパラメータ A は上式を A について解いた

$$A = \frac{15}{32\Gamma(4-2/\alpha)\mu} \left(\frac{mkT}{\pi} \right)^{1/2} \left(\frac{4kT}{m} \right)^{2/\alpha}$$

から求め

$$A = 1.5861397 \times 10^{-18} \quad (\text{m}^2(\text{m}/\text{s})^{4/7})$$

とした。

分子モデルによる角分布の相違の比較を図 9 に示す。

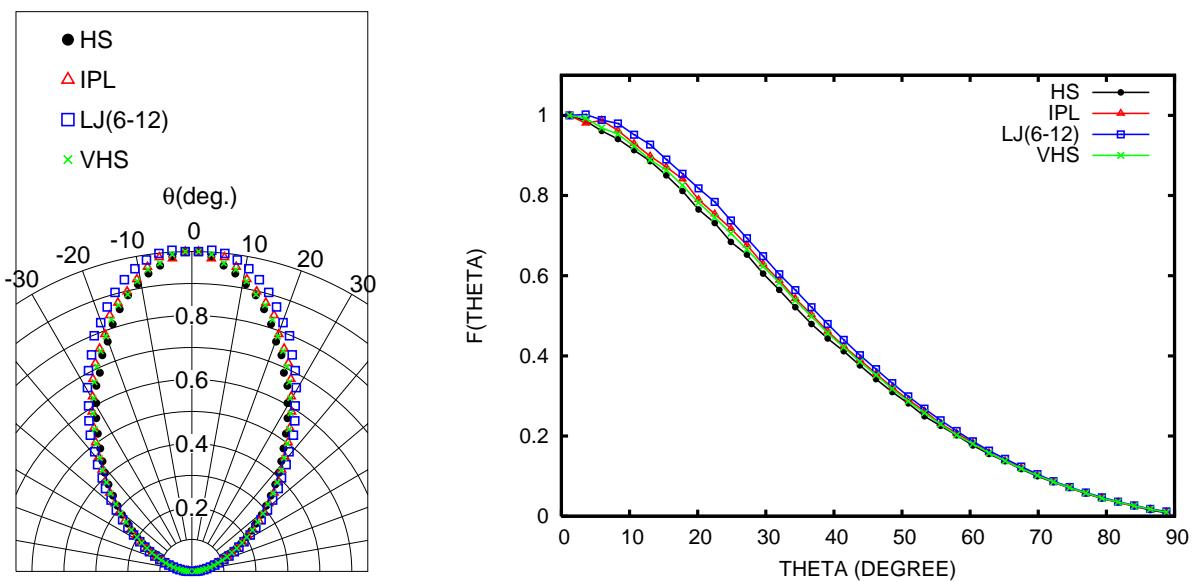


図 9 分子モデルによる角分布の相違の比較

HS,IPL,VHS 分子モデル間では全角度範囲で角分布の相違はほとんど見られない。これに対し LJ(6-12) 分子モデルでは、 θ が 50 度より小さい範囲で他の 3 モデルと若干の相違が見られる。

分子モデルによる流量の相違の比較を表 2 に示す。

分子モデル	流量 (sccm)
HS	0.360262
IPL	0.363909
VHS	0.360169
LJ(6-12)	0.365873

表 2 分子モデルによる流量の相違の比較

分子モデルによる流量の相違はほとんど見られない。

●参考文献

- [1]Chapman,S. and Cowling,T. : The Mathematical Theory of Non-Uniform Gases(Cambridge University Press,London,1953),p.223.
- [2]文献 [1],p.172.
- [3]Hirschfelder J.O.,Curtiss,C.F. and Bird,R.B. : Molecular Theory of Gases and Liquids

: John Wiley & Sons(1964),p.1110.

[4]Nanbu,K. : "Variable Hard-Sphere Model for Gas Mixture";Journal of the Physical Society of Japan,Vol.59,No.12(1990),pp.4331-4333.