

CO₂ ガスダイナミックレーザーの
性能に関する数値的研究

溝 淵 泰 寛

①

博士論文

CO₂ガスダイナミックレーザーの
性能に関する数値的研究

平成6年12月20日

指導教官 久保田弘敏 教授
27097 溝渕泰寛

目次

1 序論	1
1.1 はじめに	1
1.2 CO ₂ ガスダイナミックレーザーの原理	2
1.3 従来の数値的研究の概要	3
1.4 本研究の目的	6
1.5 本論文の概要	7
2 物理モデル	9
2.1 流体のモデル化	9
2.1.1 熱的モデル	10
2.1.2 微小信号利得係数	12
2.1.3 乱流モデル	16
2.2 光共振器系のモデル化	20
2.2.1 発振波長	21
2.2.2 光の伝播	21
2.2.3 光学鏡での反射及び透過	22
2.2.4 流体と光の間のエネルギー移動	22
3 支配方程式	25
3.1 流体の支配方程式	25
3.1.1 直交座標系	25
3.1.2 一般曲線座標系	27
3.1.3 無次元化	30
3.2 平面波伝播の支配方程式	30
3.2.1 伝播方程式	30

3.2.2	一般曲線座標系	31
4	計算方法	33
4.1	流体	33
4.1.1	空間の離散化	34
4.1.2	時間積分	39
4.1.3	境界条件	45
4.2	光の伝播	47
4.2.1	伝播方向の積分	47
4.2.2	共振条件	50
4.2.3	境界条件	50
5	予備計算	52
5.1	ノズル内流れの計算	52
5.1.1	計算条件	52
5.1.2	計算格子	53
5.1.3	結果および考察	53
5.2	真空中の光の伝播	55
5.2.1	計算領域および計算格子	57
5.2.2	結果および考察	57
5.3	まとめ	58
6	レーザー出力計算	60
6.1	計算モデル	60
6.2	計算条件	61
6.2.1	ノズル形状および貯気槽条件	61
6.2.2	共振器仕様	61
6.2.3	計算格子	61
6.3	結果および考察	61
6.3.1	凹面鏡焦点距離 0.5m の場合	61
6.3.2	凹面鏡焦点距離 4.0m の場合	64
6.4	まとめ	65

7	パラメトリックスタディー	66
7.1	貯気槽条件に対する出力特性	66
7.1.1	貯気槽圧力に対する出力特性	66
7.1.2	貯気槽温度および流体組成に対する出力特性	67
7.2	共振器仕様に対する出力特性	69
7.2.1	凹面鏡の焦点距離に対する出力特性	69
7.2.2	ノズル幅に対する出力特性	70
7.3	まとめ	70
8	結論	72
A	分子振動緩和方程式の導出	82
A.1	T-V 遷移	82
A.2	分子間 V-V 遷移	84
A.3	分子内 V-V 遷移	86
B	振動緩和時間	89

記号表

記号

C_i	:	i 種気体の質量分率
e	:	内部エネルギー
e_i^{vib}	:	振動モード i の単位質量当りの振動エネルギー
E	:	全エネルギー
f	:	凹面鏡焦点距離
G_0	:	微小信号利得係数
h	:	プランク定数
I	:	輻射強度
I	:	分子の回転能率
k	:	ボルツマン定数
k_w	:	波数
k_t	:	乱れエネルギー
K	:	Gladstone - Dale 定数
L	:	ノズル膨張距離
L_{cv}	:	光路長 (キャビティー幅)
L_e^{vib}	:	振動エネルギーのルイス数
L_w	:	ノズル幅
m_i	:	i 種分子の質量

M	:	衝突第3体
M_i	:	i 種分子の分子量
n	:	屈折率
$N_{i,l}$:	振動モード i のエネルギー準位が l である分子の数密度
$N_{i,l}^{j,r}$:	振動モード i のエネルギー準位が l , 振動モード j のエネルギー準位が r である分子の数密度
N_{ijk}	:	ν_1 モードのエネルギー準位が i , ν_2 モードのエネルギー準位が j , ν_3 モードのエネルギー準位が k である CO_2 分子の数密度
N_F	:	フレネル数
N_{ph}	:	光子の数密度
p	:	圧力
P	:	レーザー出力
Pr	:	プラントル数
Pr^{vib}	:	振動エネルギーのプラントル数
Pr_t	:	乱流プラントル数
r	:	反射鏡反射率
R	:	混合気体の気体定数
Re	:	レイノルズ数
R_i	:	i 種気体の気体定数
T	:	並進温度
T_i^{vib}	:	振動モード i の振動温度
u_i	:	x_i 方向の速度
U_{ξ_i}	:	ξ_i 方向の反変速度
x_i	:	直交座標
X_i	:	i 種気体の体積分率
ε	:	エネルギー散逸率
κ	:	分子熱伝導率
κ_t	:	乱流熱伝導率

λ	:	発振波長
μ	:	分子粘性係数
μ_t	:	渦粘性係数
$\nu_1, \nu_2, \nu_3, \nu_N$:	CO ₂ の対称伸縮, 曲げ, 非対称伸縮, N ₂ の伸縮の振動モード 及びそのエネルギー振動数
Ψ	:	複素振幅
ψ	:	変換された複素振幅
ρ	:	密度
ξ_i	:	一般曲線座標
θ_i	:	振動モード i の振動特性温度
τ_{i-j}	:	振動モード i と振動モードまたは分子 j の間の緩和時間

添字

1, 2, 3, N, tr	:	$\nu_1, \nu_2, \nu_3, \nu_N$ の振動モード, 並進モード
12	:	ν_1 モードと ν_2 モードを一つにした振動モード
eq	:	平衡値
c	:	貯気槽状態
CO ₂	:	CO ₂
N ₂	:	N ₂
H ₂ O	:	H ₂ O

第 1 章

序論

1.1 はじめに

惑星探査機や AOTV (Aeroassisted Orbital Transfer Vehicle) の大気圏突入時における空力加熱では対流加熱よりも輻射加熱が卓越し、その輻射加熱量は木星探査機で数十 kW/cm^2 にも及ぶと考えられている。従って、それらの飛行体の実現には輻射加熱に対する熱防御系の研究開発が必要となる。そのためには過酷な輻射加熱場を再現した試験を行わなければならないが、飛行試験を行なうのは非常に困難なので地上試験に頼ることになる。地上試験では供試体に能動的に輻射熱を与えなければならないので、大出力を連続して得られる輻射加熱源が必要となる。東京大学工学部航空宇宙工学科では、その加熱源として燃焼駆動式 CO_2 ガスダイナミックレーザー (CO_2GDL) の使用を考え研究開発を進めている [1]。

CO_2GDL とは高温に振動励起された CO_2 , N_2 , H_2O の混合気体を超音速ノズルによって急冷却することにより CO_2 の振動モード間に数密度反転が生じることを利用し、 CO_2 の振動エネルギーを輻射エネルギーに変換する装置である。 CO_2GDL の特徴は他の CO_2 レーザーに比べ大出力が得られることであり燃焼駆動式 CO_2GDL では燃焼によって連続して作動流体を供給できるので大出力を連続発振する可能性がある。

急冷却または急加熱による数密度反転の可能性は 1963 年、Basov と Oraevskii [2] によって示された。この理論を 1966 年、Kantrowitz らが CO_2 に適用し実現された CO_2GDL は Gerry [3] により連続発振で 60kW の出力を得るまでに発展している。東京大学工学部航空宇宙工学科でも 1993 年、燃焼駆動式の CO_2GDL により連続発振に成功している [4]。

この CO_2GDL が本研究の対象であり、その性能を数値計算によって研究することが本論文の主題である。

1.2 CO₂ガスダイナミックレーザーの原理

一般に気体分子を高温に加熱すると、並進、回転、振動、の順に分子運動が活発になる。さらに加熱すると解離、電離が生じる。逆に冷却すると分子運動は失活する。どちらの場合も十分時間がたてば、その温度における平衡状態に達する。平衡状態に達するまでの時間を緩和時間という。緩和時間は分子運動のモードによって異なる。

平衡状態においては分子の数密度はエネルギー準位が高いほど数密度が指数関数的に小さくなるボルツマン分布に従う。しかし何らかの方法で急激に別のエネルギー状態に移行させた場合、つぎの平衡状態に至る途中過程において、あるエネルギー準位の数密度が、それよりも低いエネルギー準位の数密度よりも大きいという状態が生じる。この状態を数密度反転という。数密度反転を起こした気体は光の吸収よりも誘導放出が上回り、レーザー媒質となり得る。この数密度反転状態を高温に振動励起されたCO₂を超音速ノズルによって急冷却することによって得るのがCO₂GDLである。従って、CO₂GDLでは超音速ノズルによっていかに急冷却を行なうかが重要となる。

CO₂には対称伸縮(ν_1)、曲げ(ν_2)、非対称伸縮(ν_3)、の3つの振動モードがある(図1.2)。なお、曲げのモードは2つの振動モード(例えば、紙面上での曲げと紙面に垂直な曲げの2種類)が縮退している。これらのエネルギー準位を図示すると図1.3のようになる。高温に加熱されると、これらの振動モードはそれぞれ励起される。この高温に振動励起された作動流体を急冷却すると、それぞれの振動モードは有限の緩和時間で平衡状態に向かう。CO₂(ν_3)の緩和時間は他の2つの振動モードの緩和時間よりも極端に長い。そのためCO₂(ν_3)とその他の振動モードの間に数密度反転が起きる。そこに、振動モード間のエネルギー差に相当する波長の光を入射すると、入射光に刺激されて誘導放出が起こり、光の強度が増幅する。CO₂(ν_3)からCO₂(ν_1)へのエネルギー遷移に対応するレーザー波長は10.6 μm であり、CO₂(ν_3)からCO₂(ν_2)へのエネルギー遷移に対応するレーザー波長は9.6 μm である。

CO₂(ν_3)とその他2つの振動モードとの間の数密度反転を効率的に起こすにはN₂とH₂O(またはHe)を混合すると良いことが分かっている。CO₂(ν_1)及びCO₂(ν_2)の振動モードはH₂Oとの衝突により振動エネルギーを失うために更に緩和時間が短くなる。CO₂(ν_3)はN₂の振動モードN₂(ν_N)と近共鳴を起こしN₂(ν_N)から振動エネルギーを供給され緩和時間が更に長くなる。この結果、CO₂(ν_1)とCO₂(ν_2)の数密度は更に急激に減少し、逆にCO₂(ν_3)の数密度の減少は更に緩慢になり、数密度反転の度合いが大きくなる訳である。

数密度反転を起こしレーザー媒質となった流体の中を何らかの光学的装置を用いて光を往復させると増幅されたレーザー光が装置外部に取り出される。主な光学的装置として増幅器 (amplifier) と光共振器 (resonator) がある。増幅器とはレーザー媒質となった流体にレーザー光を入射し鏡を用いて数回往復させ増幅したレーザー光を取り出す装置である。増幅器の特徴は入射光を操作する事によってレーザー出力を調整できる点である。一方、光共振器とはレーザー媒質内で自然放出された光を2枚の反射鏡の間で共振増幅させその一部をレーザー出力として取り出すものである。光共振器はファブリ・ペロー干渉計と呼ばれる2枚の平面な反射鏡が平行に置かれたものがその始まりである。その後、種々の形状のファブリ・ペロー型共振器が考案されているが、それらは安定共振器と不安定共振器の2種類の形態に大別される。安定共振器とは凹面鏡を用いた光共振器であり、いったん光軸から外れた光が再び軸に戻って来るため、光が共振器外部に漏れず損失が少ないという特徴がある。これに対し不安定共振器とは平面鏡や凸面鏡を用いた共振器であり、いったん光軸からずれた光は外側に外れて行いくが、安定共振器よりも単一のレーザー発振モードが得やすいという特徴がある。

現在、東京大学工学部航空宇宙工学科のCO₂GDL装置では、ベンゼン (C₆H₆)/酸素 (O₂) の燃焼によりCO₂とH₂Oを得た所にN₂を投入し作動流体を得ている。この作動流体を2次元超音速ノズルで急冷却し、安定共振器を用いてレーザー抽出を行っている。利用するレーザー遷移はCO₂(ν_3)からCO₂(ν_1)へのエネルギー遷移でありレーザーの発振波長は10.6 μ mである。流体の組成としてはCO₂が10%に対してN₂を80~90%を投入している。これはCO₂(ν_3)へのエネルギーの供給源としてのN₂の役割が大きいことを考慮してのことである。また、超音速ノズルとしては膨張比20のノズルを用い作動流体の冷却を迅速に行なっている。

1.3 従来の数値的研究の概要

装置開発に伴って数値的研究も古くから盛んに行われているが、それらは、おおよそ2段階に分けられる。第1段階は分子振動の緩和を伴う超音速ノズル内の流れ場の解析であり、第2段階はレーザー媒質となった流体から取り出される輻射エネルギー (レーザー出力) の計算である。

第1段階の超音速ノズル内の流れ場の解析では作動流体の微小信号利得係数が求められる。微小信号利得係数とは流体内部での輻射強度の増幅率であり、流体がレーザー媒質として

どの程度の質を有しているかを表す係数である。ここでは分子振動の緩和過程をどの様にモデル化するかという問題、また分子振動の特性時間が流れ場の特性時間と比べて非常に短いために生じる数値計算上の問題を解決する必要がある。CO₂-N₂系の分子振動緩和のモデルについては単純なものから複雑なものまで様々なモデルが提案されており、Anderson[5]、Lee[7]、Munjee[8]、Maeno[9]らによって導かれている。CO₂GDLは振動モード間の数密度反転を利用するので、これらのモデルは各振動モード内には調和振動子と局所平衡の仮定することによって問題を単純化している。計算の対象としているCO₂GDLの全温が比較的低く分子の解離を考慮する必要が無い場合は、これらの仮定は妥当であり、全振動準位についての振動緩和過程を各振動モードの最低準位のみを扱うことで記述することができるという利点がある。モデルを導入することによって振動緩和過程をある程度定式化することができるが最終的にはモード間のエネルギーの遷移速度が未知量として残る。従って、その他の解析または実験によって求める必要があるが、それらのデータはTaylorとBitterman[10]により実験的に詳細まで調べられている。数値計算上の問題について言えば近年の数値流体力学の実験的発展、特に実在気体効果を含んだ流れに対する数値計算方法の進歩により、ほぼ克服されたと言って良い。

超音速ノズル内の流れ場の計算は数多く行われている。Anderson[5]は簡単な振動緩和モデルを用いて準1次元流れを解き、微小信号利得係数を計算した。綿貫ら[11]はAndersonのモデルを用いて準1次元流れを解き、ノズル開口比の影響を調べている。Wadaら[12]はAndersonのモデルを用いて非粘性2次元流れを解き、膨張比が小さいノズル形状に対する微小信号利得係数特性を計算している。Tatsumi[13]らには不純物が微小信号利得係数に及ぼす影響を準1次元計算によって調べている。Mizobuchi[14]らにはMaenoのモデルを用いて2次元粘性流れを解くことにより、ノズル形状の影響を調べている。またChakravarty[15]らには2次元で、Zeitounら[16]は準2次元で、後混合型のCO₂GDLに対して粘性計算を行っている。

第2段階のレーザー出力の計算には大別して2種類ある。

1つめはLeeら[6]に代表される最大有効出力(Maximum Available Power)の推算である。この方法は光学系の計算を行わずに流れ場からレーザー出力の概算する方法である。具体的には数密度反転分の振動エネルギーに効率を掛けることによって出力を推算するものでレーザー出力 P は

$$P = \eta_{cav} \dot{m} (e_3^{vib} - e_3^{vib})_{G_0=0} \quad (1.1)$$

と与えられる。ここに \dot{m} は流量、 e_3^{vib} は $\text{CO}_2(\nu_3)$ の単位質量当たりの振動エネルギー、 $e_3^{vib}|_{G_0=0}$ は数密度反転を 0 とする振動エネルギーである。 η_{cav} は効率であり、この効率を調整することによって出力特性を見積もれる可能性はある。しかし、この効率は経験的にしか求められないうえ、推算式がレーザー発振が分子振動緩和に及ぼす影響を考慮していないので理論的な裏付けに乏しく、簡便な経験式といった程度である。

もう 1 つは光学系の計算を行なってレーザー出力を計算する方法である。この方法では流れ場の計算に加えて光共振器の鏡の間を往復する光の伝播および増幅といった光学系の計算を取り扱わなければならない。従って、流れ場、分子振動緩和、輻射を同時に解くことになる。流体と光との間のエネルギーのやり取り、光の反射、透過、回折、散乱等をいかにモデル化するかという問題が存在する。

光学系の計算まで行いレーザー出力を計算した例は少ない。Lee [7]、山口 [17] らは簡単な輻射方程式

$$\frac{\partial I}{\partial t} = cI(G - G_t) \quad (1.2)$$

と、輻射項を加えた準 1 次元流れを解くことによりレーザー出力を計算している。 I は輻射強度、 c は光速、 G はレーザー媒質の増幅率、 G_t は光路長と鏡の反射率から決まる増幅率のしきい値である。この方法は輻射方程式を解いている点、レーザー発振が分子振動緩和に及ぼす影響を考慮している点で前述の最大有効出力の概算よりもかなり進んだ計算方法といえる。しかしながら、この方法の問題点は、準 1 次元流れである事はもちろん、輻射方程式に光が回折する効果が含まれていないため共振器上流端でレーザー強度が不連続に増加するという点である。この非物理的な現象を回避するために光共振器端に損失を仮定し G_t を適当に修正しなければならない。

光共振器内の光の伝播を理論的取扱ったものとしては Li ら [18] の研究が先駆的である。彼らは光共振器内のレーザー光を平面波として扱い、平面波が波動方程式に従って伝播すること、またその解析解がエルミート・ガウス関数で表されることを用いて真空の共振器内の光の伝播を理論的に解析している。この方法では光の波の性質を取り入れているので光が回折する効果を考慮できるうえに、光共振器の鏡での光の反射を理論的に取り扱うことができ経験的・人為的なモデル化を殆どすることなく共振器内の輻射強度分布を求めることができる。

Li らの理論を発展させレーザー媒質内の光の伝播を扱った例としては、Siegman らがレー

ザ-媒質内の伝播をエルミート・ガウス展開 [19], 波数空間展開 [20] により GDL の出力計算を行っている。Rensch[21] は伝播方程式を差分法で解くことによってレーザー出力を計算している。しかし、これらの計算は流体の計算が不十分でまた光の流体のカップリングも十分とはいえない。

このように超音速ノズル流系と光共振器系を共に理論的に扱い、相互関係を考慮した形で CO₂GDL のレーザー出力計算をした例はない。

1.4 本研究の目的

前節で述べたように、CO₂GDL の性能に関する数値的な研究においては超音速ノズル内の流れ場を数値的に解き微小信号利得係数を予測したものが主であり、その解析方法もほぼ完成されている。これに対しレーザー出力の解析は十分にはなされていない。

数値的研究の役割は装置開発に対して設計指針を与えることである。微小信号利得係数を予測することによってもある程度は指針を与えることができるが、作動条件に対するレーザー出力の特性と微小信号利得係数の特性は必ずしも一致せず [4], やはりレーザー出力を予測することで指針を与えることが望ましい。本研究は前節で述べた問題点を克服し、CO₂GDL のレーザー出力を予測し、レーザー出力をもって装置開発に設計指針を与えるものである。

本研究の目的は次の 2 点である。

1. CO₂GDL のレーザー出力を推算できる計算コードの開発

CO₂GDL のレーザー出力の推算のためには 2 つの要素が必要である。まず 1 つは超音速ノズル内の分子振動非平衡流れを数値的に解くことであり、もう 1 つは光共振器内の光の伝播および増幅を数値的に解くことである。この 2 つの要素各々が安定にかつ正確に解けて初めて、2 つを組み合わせるレーザー出力の計算が可能となる。そこで計算コードの開発は 2 段階となり、第 1 段階は各々の計算コードの開発、第 2 段階は 2 つの計算コードの統合となる。

超音速ノズル内の分子振動非平衡流れの数値解析では支配方程式として既存の乱流モデルを組み込んだレイノルズ平均 3 次元ナビエ・ストークス方程式に振動緩和方程式を組み込んだ方程式を用いる。計算方法としては差分法を用い、非定常問題の時間発展的な漸近解として定常解を求める。具体的な方法としては対流項の差分に Roe の近

似リーマン解法に基づいた高精度 TVD (Total Variation Diminishing) スキームを用い空間の解像度を高め、時間方向の積分には陰的な解法を用いて収束性を高める。

光共振器内の光の伝播の数値解析では光の伝播を平面波の伝播として扱い、伝播方程式には波動方程式を基に、光の回折、増幅、屈折の影響を考慮した方程式を用いる。この方程式を流体の計算と同じく差分法により離散化して光の伝播方向に積分し、光共振器内で共振する解が得られるまで繰り返し計算を行う。

以上の2つの計算を組み合わせ、流体と光が互いに与える影響をそれぞれの支配方程式に組み込むことによってレーザー出力を計算することができる。このようにして開発した計算コードを用いて実験装置に対するレーザー出力計算を行ない、実験結果と比較することによって計算モデルおよび計算方法の妥当性を確認する。

2. 装置作動条件に対するレーザー出力特性推算

レーザー出力は貯気槽状態状態、光共振器の仕様といった装置の作動条件に大きく影響されると考えられる。それらに対する出力特性を推算し装置開発に指針を与えることを目的とする。

1.5 本論文の概要

第1章は導入部で本研究の目的を明らかにする。

第2章では計算に用いた物理モデルについて説明している。すなわち超音速ノズル内の流体、光共振器内の光、流体と光の相互干渉といった物理現象を計算に取り込むために必要なモデルについて述べる。

第3章では第2章で述べた物理モデルを定式化した支配方程式について説明する。また実際の計算に用いる一般曲線座標系、無次元化の導入についても述べる。

第4章では第3章で示した支配方程式の数値計算方法について説明する。具体的には支配方程式の離散化の手法、境界条件などについて述べる。

第5章では超音速ノズル内の流れと光共振器内の光の伝播をそれぞれ別々に解き、実験または理論と比較することにより、それぞれの物理モデルおよび計算方法の妥当性の確認を行う。

第 2 章

物理モデル

CO₂GDL の出力を計算するためには、超音速ノズル内の分子振動非平衡流れとその中で
の光の進行・増幅を、流体と光の相互干渉を考慮しつつ取り扱わなければならない。本章では
これらの物理現象を数値計算に取り込むために用いたモデルについて説明する。

超音速ノズル内の流れ場を解析するためには、全体的な流れ場と同時に振動エネルギー
の遷移過程を数値的に解かなければならない。そのためには、ある程度振動緩和過程に仮定
を用いて問題を単純化する必要がある。また粘性流れを解くためには乱流をどう扱うかとい
う問題も生じる。

流体内での光の挙動についていえば、自然放出された光は光共振器の光学鏡の間を往復
する間に誘導放出により増幅され、半透過鏡から取り出される。その出力は半透過鏡全面で
得られるのではなく光学鏡の形状、鏡間の距離等によって決まる分布を持つ。これらの影響
を考慮できるように光共振器系をモデル化しなければならない。

さらに誘導放出によって光のエネルギーが増幅する分、流体のエネルギーが減少し、また
その際レーザー遷移により CO₂(ν_3) から CO₂(ν_1) へエネルギーが移動する、といった光が
流体に及ぼす影響もモデル化する必要がある。

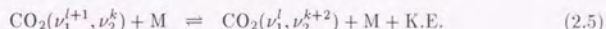
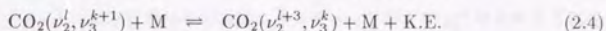
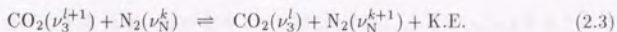
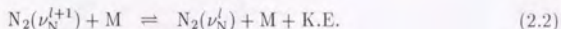
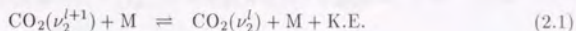
2.1 流体のモデル化

東京大学航空宇宙工学科の GDL 実験機の超音速ノズルは 2 次元ノズルであるが、レー
ザー光が往復する方向が 3 つめの次元なので、レーザーの輻射強度がその方向に変化すると
流れ場はもはや 2 次元的ではなく、3 次元流れとして扱わなければならない。そこで流
れは 3 次元圧縮性粘性流れとする。作動流体は CO₂, N₂, H₂O の混合気体とし、流体の全温

度が 1000K 程度と比較的低いので化学反応の影響は無視する。

2.1.1 熱的モデル

並進運動と回転運動は平衡とする。分子振動は CO_2 の対称伸縮 (ν_1), 曲げ (ν_2), 非対称伸縮 (ν_3), N_2 の伸縮 (ν_N) の 4 つの振動モードを考慮する。 H_2O にも CO_2 と同じく 3 種類の振動モードが存在するが、その影響は衝突第 3 体としての役割と比べて非常に小さい [10] ので考慮しない。分子衝突による振動準位間のエネルギーの遷移としては以下のものを考える。なお M は衝突第 3 体を表し $\text{CO}_2, \text{N}_2, \text{H}_2\text{O}$ である。また ν の上付き添え字 l, k はエネルギー準位を表している。



これらの振動モードおよびエネルギー遷移に関して以下の仮定をする。

- (1) 各振動モード内にはボルツマン分布と局所平衡を仮定する。すなわち、各振動モードのエネルギー準位は一定の間隔で無限に存在し、その数密度は振動温度で決まるボルツマン分布に従ものとする。
- (2) (2.5) のエネルギー遷移は非常に速く、 $\text{CO}_2(\nu_1)$ と $\text{CO}_2(\nu_2)$ はフェルミ共鳴と呼ばれる共鳴状態にある。そこでこの 2 つをまとめて 1 つの振動モード $\text{CO}_2(\nu_{12})$ として扱う。
- (3) 誘導放出によるエネルギー遷移は 2.2.1 で述べるように $\text{CO}_2(\nu_1^0, \nu_2^0, \nu_3^0)$ と $\text{CO}_2(\nu_1^l, \nu_2^0, \nu_3^0)$ の間の遷移のみを取り扱う。

これらの仮定により、GDL の超音速ノズル内の流れを解くために必要な振動モードおよびエネルギー遷移過程は図 2.1 のように単純化され、これを数値的に扱うために必要な、振動エネルギー、数密度、振動緩和方程式は以下のように得られる。

振動エネルギー

2 原子分子気体の振動モード i の単位質量当りの振動エネルギー e_i^{vib} は一般に次式で与えられる [22].

$$e_i^{vib} = \frac{\theta_i R_i}{\exp(\theta_i/T_i^{vib}) - 1} \quad (2.6)$$

ここに, θ_i および T_i^{vib} は振動モード i の振動特性温度および振動温度であり, R_i は i 種気体の気体定数である. なお, 振動モード i の振動特性温度 θ_i は

$$\theta_i = \frac{h\nu_i}{k} \quad (2.7)$$

と与えられる [22]. これに従えば $N_2(\nu_{N_2})$ の単位質量当りの振動エネルギー e_N^{vib} は

$$e_N^{vib} = \frac{\theta_N R_{N_2}}{\exp(\theta_N/T_N^{vib}) - 1} \quad (2.8)$$

と得られる. CO_2 分子にも式 (2.6) が成り立つとすれば [5], $CO_2(\nu_1)$ と $CO_2(\nu_2)$ をまとめた $CO_2(\nu_{12})$ および $CO_2(\nu_3)$ の単位質量当りの振動エネルギー e_{12}^{vib} および e_3^{vib} は次のように得られる.

$$e_{12}^{vib} = \frac{\theta_1 R_{CO_2}}{\exp(\theta_1/T_{12}^{vib}) - 1} + \frac{2\theta_2 R_{CO_2}}{\exp(\theta_2/T_{12}^{vib}) - 1} \quad (2.9)$$

$$e_3^{vib} = \frac{\theta_3 R_{CO_2}}{\exp(\theta_3/T_3^{vib}) - 1} \quad (2.10)$$

$CO_2(\nu_1)$, $CO_2(\nu_2)$, $CO_2(\nu_3)$, $N_2(\nu_N)$ の振動特性温度, θ_1 , θ_2 , θ_3 , θ_N の値は以下の通り [5].

$$\theta_1 = 1999 \text{ [K]}$$

$$\theta_2 = 960 \text{ [K]}$$

$$\theta_3 = 3383 \text{ [K]}$$

$$\theta_N = 3357 \text{ [K]}$$

数密度

振動モード i のエネルギー準位が l である CO_2 分子の数密度 $N_{i,l}$ は次のように得られる [22].

$$N_{i,l} = N_{CO_2} \exp\left(-\frac{l\theta_i}{T_i^{vib}}\right) / Q \quad (2.11)$$

ここに、 Q は分配関数であり

$$Q = \left[1 - \exp\left(-\frac{\theta_i}{T_i^{vib}}\right) \right]^{-1} \quad (2.12)$$

である。

振動緩和方程式

振動モード間のエネルギー遷移過程を記述する振動緩和方程式は次のように導かれる [9].

$$\frac{de_{12}^{vib}}{dt} = -\Delta e_2^{vib} + \frac{3\theta_2}{\theta_3} \Delta e_{32}^{vib} \quad (2.13)$$

$$\frac{de_3^{vib}}{dt} = -\Delta e_{32}^{vib} + \Delta e_{3N}^{vib} \quad (2.14)$$

$$\frac{de_N^{vib}}{dt} = -\Delta e_N^{vib} + \frac{C_{CO_2}\theta_N}{C_{N_2}\theta_3} \Delta e_{3N}^{vib} \quad (2.15)$$

ただし

$$\begin{aligned} \Delta e_2^{vib} &= \frac{2}{\tau_{2-tr}} \left\{ e_2^{vib} - \frac{R_{CO_2}\theta_2}{\exp(\theta_2/T) - 1} \right\} \\ \Delta e_N^{vib} &= \frac{1}{\tau_{N-tr}} \left\{ e_N^{vib} - \frac{R_{N_2}\theta_{N_2}}{\exp(\theta_N/T) - 1} \right\} \\ \Delta e_{32}^{vib} &= \frac{2}{\tau_{3-2}} \left\{ \left(\frac{e_2^{vib}}{R_{CO_2}\theta_2} + 1 \right)^3 e_3^{vib} \right. \\ &\quad \left. - (e_3^{vib} + R_{CO_2}\theta_3) \left(\frac{e_2^{vib}}{R_{CO_2}\theta_2} \right)^3 \exp\left(\frac{3\theta_2 - \theta_3}{T}\right) \right\} \\ \Delta e_{3N}^{vib} &= \frac{1}{\tau_{3-N}} \left\{ (e_3^{vib} + R_{CO_2}\theta_3) \frac{e_N^{vib}}{R_{N_2}\theta_N} \exp\left(\frac{\theta_N - \theta_3}{T}\right) \right. \\ &\quad \left. - \left(\frac{e_N^{vib}}{R_{N_2}\theta_N} + 1 \right) e_3^{vib} \right\} \end{aligned}$$

であり τ_{i-j} は振動モード i と j の間の緩和時間である。

2.1.2 微小信号利得係数

微小信号利得係数の意味

いま、厚さ dy のレーザー媒質を考える。このレーザー媒質を輻射強度 I_ν の光子が通過した後の輻射強度を $I_\nu + dI_\nu$ とする時 (図 2.2), 振動数 ν における単位振動数当りの微小信号利得係数 $G_{0\nu}$ は次の式で定義される。

$$\frac{(dI)_\nu}{I_\nu} = G_{0\nu} dy \quad (2.16)$$

輻射強度の変化は自然放出, 誘導放出, 吸収で表される。この輻射強度の変化がエネルギーレベル 2 からエネルギーレベル 1 へのエネルギー遷移によるものとする, 次の式が成り立つ。

$$(dI)_\nu = [(A_{21})_\nu N_2 + (B_{21})_\nu I_\nu N_2 - (B_{12})_\nu I_\nu N_1] h\nu dy \quad (2.17)$$

ここに, $(A_{21})_\nu$ は Einstein の自然放出係数と呼ばれ, 単位秒, 単位粒子, 単位振動数当りの自然放出によってエネルギーレベル 2 からエネルギーレベル 1 へ遷移する個数を表す。また $(B_{21})_\nu$ は Einstein の誘導放出係数と呼ばれ $(B_{21})_\nu I_\nu$ は単位秒, 単位粒子, 単位振動数当りの誘導放出によってエネルギーレベル 2 からエネルギーレベル 1 へ遷移する個数を表す。さらに $(B_{12})_\nu$ は Einstein の吸収係数と呼ばれ, $(B_{12})_\nu I_\nu$ は単位秒, 単位粒子, 単位振動数当りの吸収によってエネルギーレベル 1 からエネルギーレベル 2 へ遷移する個数を表す。

分子レーザーの赤外線波長に対して, 自然放出は無視し得え, また一般に, 縮退係数 g を用いて

$$(B_{21})_\nu I_\nu = \left(\frac{g_2}{g_1}\right) (B_{12})_\nu I_\nu \quad (2.18)$$

が成り立つので, 式 (2.17) は次式となる。

$$\frac{(dI)_\nu}{I_\nu} = (B_{12})_\nu \left(\frac{g_2}{g_1} N_2 - N_1\right) h\nu dy \quad (2.19)$$

式 (2.16) に式 (2.19) を代入し $(A_{21})_\nu = \frac{8\pi h\nu^3}{c^2} (B_{12})_\nu$ という関係を用い全振動数について積分する。

$$\begin{aligned} \int_\nu G_{0\nu} d\nu &= \int_\nu \{-h\nu(B_{12})_\nu\} \left(N_1 - \frac{g_2}{g_1} N_2\right) d\nu \\ &= \int_\nu \frac{c^2}{8\pi\nu^2} (A_{21})_\nu \left(\frac{g_2}{g_1} N_2 - N_1\right) d\nu \end{aligned} \quad (2.20)$$

振動数 ν に対する $G_{0\nu}$ の分布は知られており

$$G_{0\nu} = g(\nu) \int_\nu G_{0\nu} d\nu \quad (2.21)$$

$$g(\nu) = \frac{\Delta\nu}{2\pi (\nu - \nu_0)^2 + (\Delta\nu/2)^2} \quad (2.22)$$

となる。ここに ν_0 は $G_{0\nu}$ を最大とする振動数であり、 $\Delta\nu$ は $g(\nu_0 \pm \frac{\Delta\nu}{2}) = \frac{g(\nu_0)}{2}$ とする
 ような周波数幅である。 $g(\nu)$ は ν_0 で鋭いピークをもつ分布なので式 (2.20) の積分中の ν は
 積分区間中一定値 ν_0 とすることができる。また $\Delta\nu$ は分子振動数 Z を用いて

$$\Delta\nu = \frac{Z}{\pi} \quad (2.23)$$

と表すことができ、更に自然放射寿命 $\tau_{12} \left(= \frac{1}{\int_{\nu} A_{21}} \right)$ を用いると式 (2.21) から 発振波長
 $\lambda = \frac{c}{\nu_0}$ に対する微小信号利得係数 G_0 は次の通り求められる [5].

$$G_0 = \frac{\lambda^2}{4\pi Z \tau_{12}} \left(\frac{g_2}{g_1} N_2 - N_1 \right) \quad (2.24)$$

この式は微小信号利得係数が数密度反転の度合を表すことを示している。

10.6 μm レーザ遷移に対する微小信号利得係数

レーザー遷移は単に CO_2 の振動モード間で起こるのではなく、それに付随する回転準位
 の間で起こる。従って、微小信号利得係数を求めるために必要な数密度は振動準位の数密度
 ではなく、その振動準位にあり、かつある回転準位にある分子の数密度でなければならない。

剛体回転子の仮定のもとに、振動準位 i , 回転準位 l にある分子の数密度は次式のように
 書ける。

$$N_i^l = N_i \frac{g^l \exp\left(-\frac{\epsilon^l}{kT^{\text{rot}}}\right)}{Q^r} \quad (2.25)$$

ここに、 ϵ^l は回転準位 l の回転エネルギー、 Q^r は回転の分配関数であり

$$\epsilon^l = \frac{h^2}{8\pi^2 I} \quad (2.26)$$

$$Q^r = \frac{1}{\sigma_s} \sum_{l=0}^{\infty} g^l \exp\left[-\frac{l(l+1)\theta^{\text{rot}}}{T^{\text{rot}}}\right] \quad (2.27)$$

で与えられる。また g^l は縮退度であり次式で表される。

$$g^l = 2l + 1 \quad (2.28)$$

なお、 I は分子の慣性モーメント、 σ_s は対称数、 θ^{rot} は回転特性温度である。

回転運動は平衡状態に達しているという仮定のもと、

$$T^{rot} = T \quad (2.29)$$

と書ける。また常温では、

$$T \gg \theta^{rot} \quad (2.30)$$

なので、回転の分配関数は近似的に次式となる [22].

$$Q^{rot} = \frac{1}{\sigma_s} \left(\frac{T}{\theta^{rot}} \right) \quad (2.31)$$

これらを用いると式 (2.24) は、

$$G_0 = \frac{\lambda^2}{4\pi Z \tau_{12}} \left(\frac{g_2}{g_1} \sigma_s N_2 \theta^{rot} \frac{g^{l_2} \exp\left(-\frac{\epsilon^{l_2}}{kT}\right)}{T} - \sigma_s N_1 \theta^{rot} \frac{g^{l_1} \exp\left(-\frac{\epsilon^{l_1}}{kT}\right)}{T} \right) \quad (2.32)$$

となる。

量子力学的要請から振動-回転遷移は下位準位の回転量子数 l が偶数でかつ $\Delta l = \pm 1$ の場合のみ遷移可能である。 l が 1 増える遷移を P 枝 (P Branch) 遷移, 1 減る遷移を R 枝 (R Branch) 遷移という。CO₂($\nu_1^0, \nu_2^0, \nu_3^1$) から CO₂($\nu_1^1, \nu_2^0, \nu_3^0$) へのレーザー遷移は CO₂(ν_3) の回転準位 19 から CO₂(ν_1) の回転準位 20 への遷移 P(20) が支配的である [5].

P(20) の遷移に対して、微小信号利得係数は近似的に次式で与えられる [5].

$$G_0 = \frac{\lambda^2}{4\pi \tau_{12} Z} (N_{001} - N_{100}) \frac{45.6}{T} \exp\left(-\frac{234}{T}\right) \quad (2.33)$$

ここに N_{100}, N_{001} は、それぞれ CO₂($\nu_1^1, \nu_2^0, \nu_3^0$), CO₂($\nu_1^0, \nu_2^0, \nu_3^1$) の数密度であり

$$N_{100} = N_{\text{CO}_2} \exp\left(-\frac{\theta_1}{T_{12}^{vib}}\right) / Q \quad (2.34)$$

$$N_{001} = N_{\text{CO}_2} \exp\left(-\frac{\theta_3}{T_3^{vib}}\right) / Q \quad (2.35)$$

であり、分配関数 Q は CO₂(ν_2) の縮退度が 2 であることを考慮すれば、

$$Q = \left[1 - \exp\left(-\frac{\theta_1}{T_1^{vib}}\right) \right]^{-1} \left[1 - \exp\left(-\frac{\theta_2}{T_2^{vib}}\right) \right]^{-2} \left[1 - \exp\left(-\frac{\theta_3}{T_3^{vib}}\right) \right]^{-1} \quad (2.36)$$

である。

λ はレーザー光の波長, τ_{12} は自然輻射寿命で Gerry と Leonard[3] によれば

$$\lambda = 10.6[\mu\text{m}] \quad (2.37)$$

$$\tau_{12} = 5.38[\text{sec}] \quad (2.38)$$

である。また分子衝突振動数 Z は次式で与えられる。

$$Z = \sum_i N_i \sigma_i V_{\text{CO}_2-i} \quad (2.39)$$

ここに, V_{CO_2-i} は CO_2 分子と衝突第 3 体 i との相対速度であり, 普遍気体定数 R , 並進温度 T および CO_2 の分子量 M_{CO_2} と衝突第 3 体 i の分子量 M_i を用いて次式で与えられる。

$$V_{\text{CO}_2-i} = \frac{8RT}{\pi} \left[\frac{M_{\text{CO}_2} + M_i}{M_{\text{CO}_2} M_i} \right]^{\frac{1}{2}} \quad (2.40)$$

また, σ_i は気体 i の衝突断面積で, それぞれの値は次の通り [5].

$$\begin{aligned} \sigma_{\text{CO}_2} &= 1.30 \times 10^{-14} \quad [\text{cm}^2] \\ \sigma_{\text{N}_2} &= 0.87 \times 10^{-14} \quad [\text{cm}^2] \\ \sigma_{\text{H}_2\text{O}} &= 0.38 \times 10^{-14} \quad [\text{cm}^2] \end{aligned} \quad (2.41)$$

2.1.3 乱流モデル

実際の流れは多数の非定常解 (乱流) の集合体であると考えられるが, 乱流の微小な振動を捕らえるためには $Re^{\frac{2}{3}}$ 程度の格子点が必要であるといわれており, 現段階ではそれだけの大規模な計算は不可能である。そこで完全気体のナビエ・ストークス方程式を解く場合, 時間平均を施し時間平均ナビエ・ストークス方程式を解くことになる。

質量荷重平均

物理量 f の時間 t から $t + \Delta t$ までの時間平均量 \bar{f} は次式で定義される。

$$\bar{f} = \frac{1}{\Delta t} \int_t^{t+\Delta t} f dt \quad (2.42)$$

但し, Δt は乱れの変動周期に比べ十分大きく, 平均流の非定常周期に比べ十分小さい微小時間である。変動分を f' とすれば次の関係が成り立つ。

$$f = \bar{f} + f' \quad (2.43)$$

$$\overline{fg'} = 0 \quad (2.44)$$

$$\overline{f+g} = \overline{f} + \overline{g} \quad (2.45)$$

$$\overline{fg} = \overline{f}\overline{g} + \overline{f'g'} \quad (2.46)$$

圧縮性流れにレイノルズ平均を施すと $\overline{\rho'u'}$, $\overline{u'T'}$ という項が方程式に現れ複雑になるので、新しい平均として次の質量荷重平均を施す。

$$\bar{f} = \overline{\rho f} / \bar{\rho} \quad (2.47)$$

この平均化により ρ' が消去され、非圧縮流れと同じ形となる。新しい変動成分を f'' とすれば、

$$f = \bar{f} + f'' \quad (2.48)$$

であり、一般に、

$$\overline{f''} \neq 0 \quad (2.49)$$

$$\overline{\rho f''} = 0 \quad (2.50)$$

である。

この質量荷重平均を用いると、連続の式、ナビエ-ストークス方程式およびエネルギー保存の式は以下のように書ける。

$$\bar{\rho}_{,t} + (\bar{\rho}\bar{u}_j)_{,j} = 0 \quad (2.51)$$

$$(\bar{\rho}\bar{u}_i)_{,t} + (\bar{\rho}\bar{u}_j\bar{u}_j + \delta_{ij}\bar{p} - \bar{\tau}_{ij}^T)_{,j} = 0 \quad (2.52)$$

$$\bar{E}_{,t} + [(\bar{E} + \bar{p})\bar{u}_j - \bar{u}_i\bar{\tau}_{ij}^T + \bar{q}_j^T]_{,j} = 0 \quad (2.53)$$

但し、

$$\bar{\tau}_{ij}^T = \mu[(\bar{u}_{i,j} + \bar{u}_{j,i}) - \frac{2}{3}\delta_{ij}\bar{u}_{k,k}] - \overline{\rho u_i'' u_j''} \quad (2.54)$$

$$\bar{q}_j^T = -\kappa\bar{T}_{,j} + \overline{\rho u_i'' H_j''} \quad (2.55)$$

である。これらの方程式は付加項 $-\overline{\rho u_i'' u_j''}$, $\overline{\rho u_i'' H_j''}$ を除けば支配方程式は時間平均をとらない元の支配方程式と同じ形となることが分かる。これらの付加項を求めることは、いわゆる完結問題(closure problem)であり不可能である。そこで経験値等を用いて付加項をモデル化したものが乱流モデルである。

乱流モデルには大別して積分モデル、渦粘性モデル、応力モデルがある。このうち工学的に最もよく利用されているのは渦粘性モデルであり本研究でもこのモデルを用いる。渦粘性モデルでは Boussinesq の近似を用いレイノルズ応力 $-\overline{\rho u_i'' u_j''}$ を歪と関係付け、

$$-\overline{\rho u_i'' u_j''} = \mu_t \left[(u_{i,j} + u_{j,i}) - \frac{2}{3} \delta_{ij} u_{k,k} \right] - \frac{1}{3} \delta_{ij} \overline{\rho u_k'' u_k''} \quad (2.56)$$

同様に $\overline{\rho u_i'' H_j''}$ も温度勾配と関係付け、

$$\overline{\rho u_i'' H_j''} = -\kappa_t T_{,j} \quad (2.57)$$

とおく [23]。ここで、 κ_t は乱流熱伝導率であり、

$$\kappa_t = \frac{C_p \mu_t}{Pr_t} \quad (2.58)$$

と表される。なお Pr_t は乱流プラントル数であり、一般に定数として扱われている。本研究では 0.9 とした。従って、問題は渦粘性係数 μ_t を求めることに帰着される。

q- ω モデル

渦粘性係数 μ_t は乱れの長さスケールと速度スケールと関係付けられる。長さスケールと速度スケールを求めるために用いる輸送方程式の数によって、0 方程式モデル、1 方程式モデル、2 方程式モデルに分類される。モデルの比較は様々な状況に対して行われており、最も汎用性が高いと言われているのが 2 方程式モデルである [24]。

2 方程式モデルでは速度スケールと長さスケールそれぞれに対する 2 つの輸送方程式を解く。一般に速度スケールには $\sqrt{k_t}$ 、長さスケールには ε がとられる。 k_t は乱れエネルギー、 ε はエネルギー散逸率であり、

$$k_t = \frac{1}{2} \overline{u_i''^2} \quad (2.59)$$

$$\varepsilon = \frac{\mu}{\rho} \overline{u_{i,j}'' u_{j,i}''} \quad (2.60)$$

で表される。この時、渦粘性 μ_t は、

$$\mu_t = C_\mu \frac{\rho k_t^2}{\varepsilon} \quad (2.61)$$

で表される。

本論文では2方程式モデルの1つで、安定性、遷移を捕らえる機能に優れていると言われている Coakely の $q-\omega$ モデル [25] を用いる。Coakely の $q-\omega$ モデルでは次の変換により安定性を向上させている。

$$q = \sqrt{k_t} \quad (2.62)$$

$$\omega = \frac{\varepsilon}{k_t} \quad (2.63)$$

従って q と ω に対する2つの方程式を解くことになる。直交座標系で方程式を書くと次の通り。

$$\frac{\partial Q_t}{\partial t} + \frac{\partial F_{tx_i}}{\partial x_i} = \frac{\partial F_{vtx_i}}{\partial x_i} + H_t \quad (2.64)$$

ここに、

$$Q_t = \begin{pmatrix} \rho q \\ \rho \omega \end{pmatrix}, \quad F_{tx_i} = \begin{pmatrix} \rho u_i q \\ \rho u_i \omega \end{pmatrix},$$

$$F_{vtx_i} = \begin{pmatrix} \mu_q q_{,i} \\ \mu_\omega \omega_{,i} \end{pmatrix}, \quad H_t = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \left(C_\mu f_\mu \frac{S}{\omega^2} - \frac{2}{3} \frac{D}{\omega} - 1 \right) \rho \omega q \\ \left[C_{t1} \left(C_\mu \frac{S}{\omega^2} - \frac{2}{3} \frac{D}{\omega} \right) - C_{t2} \right] \rho \omega^2 \end{pmatrix}$$

である。ただし、

$$\mu_q = \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_q} \quad (2.65)$$

$$\mu_\omega = \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\omega} \quad (2.66)$$

$$\mu_t = C_\mu f_\mu \frac{\rho q^2}{\omega} \quad (2.67)$$

$$f_\mu = 1 - \exp\left(-0.0065 \frac{\rho q s}{\mu}\right) \quad (2.68)$$

$$S = (u_{i,j} + u_{j,i}) u_{i,j} - \frac{2}{3} D^2 \quad (2.69)$$

$$D = u_{k,k} \quad (2.70)$$

ここに s は壁からの距離である。その他係数は以下のように与えられる。

$$\sigma_q = 1.0, \quad \sigma_\omega = 1.3, \quad C_\mu = 0.09$$

$$C_{t1} = 0.405 f_\mu + 0.045, \quad C_{t2} = 0.92$$

2.2 光共振器系のモデル化

光共振器を用いてコヒーレントな光を得るためには、レーザー発振している領域で回折によるエネルギーの分配(クロス・カップリング)が十分でなければならない。この回折の効果の目安となるのがフレネル数である。フレネル数 N_F は光源の大きさを s 、光路長を L_{cv} 、光の波長を λ とした時、

$$N_F = \frac{s^2}{L_{cv}\lambda} \quad (2.71)$$

と定義され、フレネル数が小さいほど回折によるクロス・カップリングが活発となる。またクロス・カップリングが活発なほど単一モード発振しやすく、フレネル数が小さいほど単一モード発振を得やすいということもいえる [26]。

光共振器は 1.2 節で述べたように、安定共振器と不安定共振器の 2 つに大別される。安定共振器ではビーム径は凹面鏡の焦点距離、光路長、光の波長等によって決まり、その径が小さいほど位相が揃った単一モードのレーザー発振が得られる。一方、不安定共振器では光軸からずれた光は共振器外部に漏れていくが、光軸付近のフレネル数が 1 のオーダーになる小さな半径以内ではクロス・カップリングが十分で位相が揃い単一モードのレーザー発振が得られる [26]。

本研究で解析の対象とした東京大学工学部航空宇宙工学科の CO_2 GDL ではガスレーザーによく用いられる凹面鏡と平面鏡からなる安定共振器が使用されている。凹面鏡は全反射、平面鏡は半透過であり、共振器内で増幅したレーザー光は平面鏡から取り出される。得られるビーム半径 s は、全反射鏡の焦点距離 f 、光路長 L_{cv} を用いて

$$s = \sqrt[4]{\frac{fL_{cv}}{k_w^2} \left(2 - \frac{L_{cv}}{f}\right)} \quad (2.72)$$

と求められる [27]。ただし k_w は波数であり

$$k_w = \frac{2\pi}{\lambda} \quad (2.73)$$

である。一方このビーム半径を光源の大きさとしたフレネル数は

$$N_F = \frac{s^2}{L_{cv}\lambda} = \frac{1}{2\pi} \sqrt{2\frac{f}{L_{cv}} - 1} \quad (2.74)$$

と求まる。上記装置の全反射鏡の焦点距離 0.5m、光路長 0.28m を上式に代入すると、フレネル数は 0.255 となり 1 よりも小さく、単一モードのレーザー出力を得る条件を満たしている。

この光共振器から取り出されるレーザー出力を計算により求めるためには、媒質内の光の伝播および増幅、全反射鏡での反射、半透過鏡での反射および透過をモデル化する必要がある。

凹面-平面鏡からなる安定共振器では図 2.4 に示すように凹面鏡の効果により平面鏡での輻射強度分布は中心に集中したものとなり凹面鏡に向かうに従ってビーム径は太くなる。この現象は光を粒子として扱って捉えらえるのは非常に困難である。なぜなら、1 個 1 個の粒子の凹面鏡での反射を扱わなければならないからである。これに対し光の進行を波の伝播として扱うと波面の凹面鏡での反射を考えることで、その影響を考慮できる。そこで本研究では、Li[18] らの方法に従って光の進行を平面波の伝播として取り扱う。

2.2.1 発振波長

CO₂ のレーザー遷移による発振波長は様々であるが東京大学工学部航空宇宙工学科の CO₂GDL では発振波長が 10.6 μm であることが小倉 [4] によって確認されている。10.6 μm の波長は CO₂($\nu_1^0, \nu_2^0, \nu_3^0$) と CO₂($\nu_1^1, \nu_2^0, \nu_3^0$) の振動準位間のレーザー遷移に対応している。そこで、本研究ではレーザー遷移としてはこの遷移のみを扱い発振波長も 10.6 μm のみとする。

2.2.2 光の伝播

共振器内での光の伝播方向は 1 方向とする。光軸の方向を z 方向とすると、 $+z$ 方向に進行する光と $-z$ 方向に進行する光が存在している。そこでレーザーの輻射強度 I を $+z$ 方向の輻射強度 I^+ と $-z$ 方向の輻射強度 I^- に分けて考えるのが一般的な方法である [28]。

$$I = I^+ + I^- \quad (2.75)$$

光の進行を平面波の伝播で表す場合、平面波の複素振幅 (確率振幅) の大きさの自乗が光子の密度を表す。従って光の輻射強度は平面波の複素振幅 Ψ を用いて

$$I^\pm = ch\nu |\Psi^\pm|^2 \quad (2.76)$$

と表される。ただし、 c は光速、 h はプランク定数、 ν は光の振動である。

半透過鏡から出発し $+z$ の方向に進行した波を考えると、この波は全反射鏡で反射し向きを変え $-z$ 方向の進行波に変わる。数値計算を行なう場合このように方向が変化するのは取

扱いが厄介であるが、凹面鏡での反射が、同じ焦点距離を持つ薄肉凸レンズを通過することに置き換えられること [18] を用いると、平面波の共振器内での往復は

$$\rightarrow \text{半透過鏡} \rightarrow \text{媒質}^+ \rightarrow \text{全反射鏡} \rightarrow \text{媒質}^- (\text{鏡像}) \rightarrow \text{半透過鏡} \rightarrow$$

という $+z$ 方向の進行に置き換えられ (図 2.5) 数値計算が容易になる。輻射強度および複素振幅はそれぞれ、媒質⁺を通過するとき I^+ , Ψ^+ であり、媒質⁻を通過するとき I^- , Ψ^- である。

2.2.3 光学鏡での反射及び透過

前述の通り、凹面鏡での反射は薄肉凸レンズの透過と等価である。この系において光が薄肉凸レンズを通過する時、強度は変化せず位相だけが変化すると考える。レンズの焦点距離を f とするとき、その位相 ϕ はレンズ中心からの距離が R の位置で、

$$\Delta\phi = \frac{k_w}{2f} R^2 \quad (2.77)$$

だけ変化する [18]。すなわち

$$\Psi^- = \exp(i\Delta\phi)\Psi^+ \quad (2.78)$$

となる。

一方、半透過鏡で反射する時は位相は変化せず強度が減衰するものとする。すなわち、半透過鏡の反射率を r とする時、半透過鏡での複素振幅の変化は

$$\Psi^+ = \sqrt{r}\Psi^- \quad (2.79)$$

となる。

2.2.4 流体と光の間のエネルギー移動

レーザー発振時には微小信号利得が正の部分ではレーザー遷移によって流体の振動エネルギーが光のエネルギーに変換される。逆に利得が負の部分では光のエネルギーが流体に吸収される。ここでは、このような流体と光の間のエネルギーのやり取りを数値計算に取り込むためのモデル化について考える。

図 2.3 に示すような各辺が dx, dy, dz の直方体を考える。光の進行方向を $+z$ 方向とすると、微小距離 dz だけ進んだ時、 $+z$ 方向に進行する光子の数密度 N_{ph}^+ は誘導放出によって

$$dN_{ph}^+ = G_0 N_{ph}^+ dz \quad (2.80)$$

だけ増加する。単位時間あたり $c \cdot dx dy \cdot N_{ph}^+$ 個の光子が直方体の中に入って来るから、直方体内の流体は単位時間あたり

$$\Delta E_{box} = -G_0 h \nu c dx dy N_{ph}^+ dz \quad (2.81)$$

だけエネルギーを失うはずである。 ν は放出される光の振動数でレーザー遷移を起こすエネルギー準位のエネルギー差に相当し、

$$\nu = \nu_3 - \nu_1 - 2(l+1) \frac{h}{8\pi I} \quad (2.82)$$

である。 l は回転量子数、 h はプランク定数、 I は CO_2 の慣性能率であり、右辺第 3 項はエネルギー準位間の回転エネルギーの差を表している。この項は全体からみると非常に小さいので省略し本研究では

$$\nu = \nu_3 - \nu_1 \quad (2.83)$$

とした。

式 (2.81) より単位時間単位体積あたりに流体が失うエネルギー ΔE は

$$\Delta E = -G_0 h \nu c N_{ph}^+ \quad (2.84)$$

と書ける。 $-z$ 方向に進行する光も考慮し、輻射強度 $I^\pm = h\nu c N_{ph}^\pm$ を用いて書くと次式のようになる。

$$\Delta E = -G_0(I^+ + I^-) = -G_0 I \quad (2.85)$$

この時、レーザー遷移を起こした CO_2 の数 $N_{\text{CO}_2}^{\text{rad}}$ は

$$N_{\text{CO}_2}^{\text{rad}} = \frac{G_0 I}{h\nu} \quad (2.86)$$

であるから、レーザー遷移による $\text{CO}_2(\nu_3)$ の振動モードの単位時間単位質量あたりの振動エネルギーの変化量 Δe_3^{rad} は

$$\Delta e_3^{\text{rad}} = -\frac{N_{\text{CO}_2}^{\text{rad}}}{\rho_{\text{CO}_2}} h\nu_3$$

$$\begin{aligned}
 &= -\frac{1}{\rho C_{\text{CO}_2}} \frac{\nu_3}{\nu_3 - \nu_1} G_0 I \\
 &= -\frac{1}{\rho C_{\text{CO}_2}} \frac{\theta_3}{\theta_3 - \theta_1} G_0 I \quad (2.87)
 \end{aligned}$$

と与えられる. 一方 $\text{CO}_2(\nu_1)$ の振動モードの単位時間単位質量あたりの振動エネルギーの変化量 Δe_1^{rad} は

支配方程式

$$\begin{aligned}
 \Delta e_1^{\text{rad}} &= \frac{N_{\text{CO}_2}^{\text{rad}}}{\rho C_{\text{CO}_2}} h \nu_1 \\
 &= \frac{1}{\rho C_{\text{CO}_2}} \frac{\nu_1}{\nu_3 - \nu_1} G_0 I \\
 &= \frac{1}{\rho C_{\text{CO}_2}} \frac{\theta_1}{\theta_3 - \theta_1} G_0 I \quad (2.88)
 \end{aligned}$$

と得られる.

第 3 章

支配方程式

本研究では、数値計算方法として差分法を用いる。差分法では格子点によって物体を表現しなければならない。直交座標系では超音速ノズルのように曲面を持つ物体形状を格子点によって精度良く表現することが出来ない。これに対し、一般曲線座標系を用いれば、格子点を物体に沿って分布させることが出来るので物体を精度良く表現できる。従って、精度の良い数値計算結果を得るためには一般曲線座標系で記述された支配方程式を解くことが望ましい。また、支配方程式を有次元の形で解こうとすると、それぞれの変数のオーダーが異なる。オーダーの異なる変数どうしの演算は精度を落し易いので、支配方程式内の有次元量を代表的な値で無次元化し、変数のオーダーを同じにしなければならない。以下に一般座標の導入および無次元化について説明し、前章で述べたモデルに従って構築される流体の方程式および平面波の伝播方程式を、直交座標系および実際に計算で用いる一般曲線座標系について示す。

3.1 流体の支配方程式

3.1.1 直交座標系

レイノルズ平均 3 次元ナビエ・ストークス方程式に、 CO_2 と N_2 の分子振動緩和方程式及び $q-\omega$ 乱流モデルを組み込んだ支配方程式は直交座標系では以下のように書ける。

$$\frac{\partial Q}{\partial t} + \frac{\partial F_i}{\partial x_i} = \frac{\partial F_{vi}}{\partial x_i} + H_{vib} + H_{rad} + H_t \quad (3.1)$$

ここに、

$$Q = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u_1 \\ \rho u_2 \\ \rho u_3 \\ E \\ \rho q \\ \rho \omega \\ \rho e_{12}^{vib} \\ \rho e_3^{vib} \\ \rho e_N^{vib} \end{pmatrix}, \quad F_i = \begin{pmatrix} \rho u_i \\ \rho u_1 u_i + \delta_{i,1} \left(p + \frac{2}{3} \rho k_t \right) \\ \rho u_2 u_i + \delta_{i,2} \left(p + \frac{2}{3} \rho k_t \right) \\ \rho u_3 u_i + \delta_{i,3} \left(p + \frac{2}{3} \rho k_t \right) \\ \left(E + p + \frac{2}{3} \rho k_t \right) u_i \\ \rho q u_i \\ \rho \omega u_i \\ \rho e_{12}^{vib} u_i \\ \rho e_3^{vib} u_i \\ \rho e_N^{vib} u_i \end{pmatrix}, \quad F_{vi} = \begin{pmatrix} 0 \\ \tau_{1i} \\ \tau_{2i} \\ \tau_{3i} \\ (\tau_{ik} u_m + q_i) \\ \mu q_{i,j} \\ \mu_{\omega} \omega_{,i} \\ q_{12i}^{vib} \\ q_{3i}^{vib} \\ q_{Ni}^{vib} \end{pmatrix},$$

$$H_{vib} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \rho \left(-\Delta e_2^{vib} + \frac{3\theta_2}{\theta_3} \Delta e_{32}^{vib} \right) \\ \rho \left(-\Delta e_{32}^{vib} + \Delta e_{3N}^{vib} \right) \\ \rho \left(-\Delta e_N^{vib} + \frac{C_{CO_2} \theta_N}{C_{N_2} \theta_3} \Delta e_{3N}^{vib} \right) \end{pmatrix}, \quad H_t = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \frac{1}{2} \left(C_{\mu} f_{\mu} \frac{S}{\omega^2} - \frac{2}{3} \frac{D}{\omega} - 1 \right) \rho \omega q \\ \left[C_{t1} \left(C_{\mu} \frac{S}{\omega^2} - \frac{2}{3} \frac{D}{\omega} \right) - C_{t2} \right] \rho \omega^2 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix},$$

$$H_{rad} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ -G_0 I \\ 0 \\ 0 \\ \frac{\theta_1}{\theta_3 - \theta_1} \frac{G_0 I}{C_{CO_2}} \\ -\frac{\theta_2}{\theta_3 - \theta_1} \frac{G_0 I}{C_{CO_2}} \\ 0 \end{pmatrix},$$

E は単位体積あたりの全エネルギーであり次のように書ける。

$$E = e + \frac{1}{2} \rho (u_1^2 + u_2^2 + u_3^2) \quad (3.2)$$

なお e は単位体積あたりの内部エネルギーであり

$$e = \rho(C_v T + C_{\text{CO}_2} e_{12}^{\text{vib}} + C_{\text{CO}_2} e_3^{\text{vib}} + C_{\text{N}_2} e_{\text{N}}^{\text{vib}}) \quad (3.3)$$

である。 τ_{ij} は応力テンソルであり

$$\tau_{ij} = (\mu + \mu_t) \left(u_{i,j} + u_{j,i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} u_{m,m} \right) \quad (3.4)$$

と与えられる。 q_i は熱流束であり

$$q_i = \left(\kappa + \frac{\mu_t}{Pr_t} C_p \right) T_{,i} + \sum_l C_l q_{i,l}^{\text{vib}} \quad (3.5)$$

で与えられる。 $q_{i,l}^{\text{vib}}$ は振動エネルギーの拡散による熱流束であり

$$q_{i,l}^{\text{vib}} = \frac{L_{e,l}^{\text{vib}}}{Pr_l^{\text{vib}}} (\mu + \mu_t) e_{l,i}^{\text{vib}} \quad (3.6)$$

である。なお、 $(x_1, x_2, x_3) \equiv (x, y, z)$ 、 $(\xi_1, \xi_2, \xi_3) \equiv (\xi, \eta, \zeta)$ である。 C_v 、 C_p は並進運動と回転運動による定積比熱、及び定圧比熱、 C_l は振動モード l を持つ分子の質量分率である。 μ 、 κ は混合気体の分子粘性係数、分子熱伝達率係数であり Sutherland の法則によって求められる各流体成分の分子粘性係数、分子熱伝達係数から Wilke の方法 [29] を用いて算出する。 μ_t は渦粘性係数、 Pr_t は乱流プラントル数、 $k(=q^2)$ は乱流エネルギー、 $L_{e,l}^{\text{vib}}$ と Pr_l^{vib} はそれぞれ振動モード l のルイス数、プラントル数である。並進モードには完全気体の状態方程式

$$p = \rho RT \quad (3.7)$$

を適用する。

3.1.2 一般曲線座標系

直交座標系 (t, x, y, z) から一般曲線座標系 (τ, ξ, η, ζ) へ座標変換する。一般曲線座標系が直交座標系を用いて

$$\tau = t, \quad \xi = \xi(t, x, y, z), \quad \eta = \eta(t, x, y, z), \quad \zeta = \zeta(t, x, y, z) \quad (3.8)$$

と表されるとする。微分は連鎖法則により

$$\begin{pmatrix} \partial_t \\ \partial_x \\ \partial_y \\ \partial_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \xi_x & \eta_x & \zeta_x \\ 0 & \xi_y & \eta_y & \zeta_y \\ 0 & \xi_z & \eta_z & \zeta_z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \partial_\tau \\ \partial_\xi \\ \partial_\eta \\ \partial_\zeta \end{pmatrix} \quad (3.9)$$

と変換される。

$\xi_x, \xi_y, \xi_z, \eta_x, \eta_y, \eta_z, \zeta_x, \zeta_y, \zeta_z, \xi_t, \eta_t, \zeta_t$ は計量 (metrics) と呼ばれ、

$$\xi_x = J(y_\eta z_\zeta - y_\zeta z_\eta) \quad (3.10)$$

$$\xi_y = J(x_\zeta z_\eta - x_\eta z_\zeta) \quad (3.11)$$

$$\xi_z = J(x_\eta y_\zeta - x_\zeta y_\eta) \quad (3.12)$$

$$\eta_x = J(y_\zeta z_\xi - y_\xi z_\zeta) \quad (3.13)$$

$$\eta_y = J(x_\xi z_\zeta - x_\zeta z_\xi) \quad (3.14)$$

$$\eta_z = J(x_\zeta y_\xi - x_\xi y_\zeta) \quad (3.15)$$

$$\zeta_x = J(y_\xi z_\eta - y_\eta z_\xi) \quad (3.16)$$

$$\zeta_y = J(x_\eta z_\xi - x_\xi z_\eta) \quad (3.17)$$

$$\zeta_z = J(x_\xi y_\eta - x_\eta y_\xi) \quad (3.18)$$

$$\xi_t = J[x_\tau(y_\zeta z_\eta - y_\eta z_\zeta) + y_\tau(x_\eta z_\zeta - x_\zeta x_\eta) + z_\tau(x_\zeta y_\eta - x_\eta y_\zeta)] \quad (3.19)$$

$$\eta_t = J[x_\tau(y_\xi z_\zeta - y_\zeta z_\xi) + y_\tau(x_\zeta z_\xi - x_\xi x_\zeta) + z_\tau(x_\xi y_\zeta - x_\zeta y_\xi)] \quad (3.20)$$

$$\zeta_t = J[x_\tau(y_\eta z_\xi - y_\xi z_\eta) + y_\tau(x_\xi z_\eta - x_\eta x_\xi) + z_\tau(x_\eta y_\xi - x_\xi y_\eta)] \quad (3.21)$$

J は座標変換のヤコビアンであり、

$$J = \frac{\partial(\xi, \eta, \zeta)}{\partial(x, y, z)} = \frac{1}{x_\xi(y_\eta z_\zeta - y_\zeta z_\eta) - x_\eta(y_\zeta z_\xi - y_\xi z_\zeta) - x_\zeta(y_\xi z_\zeta - y_\zeta z_\xi)} \quad (3.22)$$

である。

以上の変換により一般座標系で支配方程式を書くとき以下の通り。

$$\frac{\partial Q}{\partial \tau} + \frac{\partial F_{\xi_i}}{\partial \xi_i} = \frac{\partial F_{v\xi_i}}{\partial \xi_i} + H_{vib} + H_{rad} + H_t \quad (3.23)$$

ここに,

$$\begin{aligned}
 Q = \frac{1}{J} \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u_1 \\ \rho u_2 \\ \rho u_3 \\ E \\ \rho q \\ \rho \omega \\ \rho e_{12}^{vib} \\ \rho e_3^{vib} \\ \rho e_N^{vib} \end{pmatrix}, \quad F_{\xi_i} = \frac{1}{J} \begin{pmatrix} \rho U_{\xi_i} \\ \rho u_1 U_{\xi_i} + \xi_{i,1} \left(p + \frac{2}{3} \rho k t \right) \\ \rho u_2 U_{\xi_i} + \xi_{i,2} \left(p + \frac{2}{3} \rho k t \right) \\ \rho u_3 U_{\xi_i} + \xi_{i,3} \left(p + \frac{2}{3} \rho k t \right) \\ (E + p + \frac{2}{3} \rho k t) U_{\xi_i} \\ \rho q U_{\xi_i} \\ \rho \omega U_{\xi_i} \\ \rho e_{12}^{vib} U_{\xi_i} \\ \rho e_3^{vib} U_{\xi_i} \\ \rho e_N^{vib} U_{\xi_i} \end{pmatrix}, \quad F_{v\xi_i} = \frac{1}{J} \begin{pmatrix} 0 \\ \xi_{i,j} \tau_{1j} \\ \xi_{i,j} \tau_{2j} \\ \xi_{i,j} \tau_{3j} \\ \xi_{i,j} (\tau_{jk} u_k + q_j) \\ \xi_{i,j} \mu_{\eta} q_{\eta} \\ \xi_{i,j} \mu_{\omega} \omega_{\eta} \\ \xi_{i,j} q_{12j}^{vib} \\ \xi_{i,j} q_{3j}^{vib} \\ \xi_{i,j} q_{Nj}^{vib} \end{pmatrix}, \\
 \\
 H_{vib} = \frac{1}{J} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \rho \left(-\Delta e_2^{vib} + \frac{3\theta_2}{\theta_3} \Delta e_{32}^{vib} \right) \\ \rho \left(-\Delta e_{32}^{vib} + \Delta e_{3N}^{vib} \right) \\ \rho \left(-\Delta e_N^{vib} + \frac{C_{CO_2} \theta_N}{C_{N_2} \theta_3} \Delta e_{3N}^{vib} \right) \end{pmatrix}, \quad H_t = \frac{1}{J} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \frac{1}{2} \left(C_{\mu} f_{\mu} \frac{S}{\omega^2} - \frac{2D}{3\omega} - 1 \right) \rho \omega q \\ \left[C_{t1} \left(C_{\mu} \frac{S}{\omega^2} - \frac{2D}{3\omega} \right) - C_{t2} \right] \rho \omega^2 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \\
 \\
 H_{rad} = \frac{1}{J} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ -G_0 I \\ 0 \\ 0 \\ \frac{\theta_1}{\theta_3 - \theta_1} \frac{G_0 I}{C_{CO_2}} \\ -\frac{\theta_2}{\theta_3 - \theta_1} \frac{G_0 I}{C_{CO_2}} \\ 0 \end{pmatrix},
 \end{aligned}$$

ここに, $(\)_{,i} \equiv \partial(\) / \partial x_i$ である. U_{ξ_i} は ξ_i 方向の反変速度で

$$U_{\xi_i} = \nabla \xi_i \cdot \mathbf{u} \quad (3.24)$$

である.

3.1.3 無次元化

無次元化に用いる基本的な量として次の4つを用いる。

長さ	: ノズル膨張距離	L
質量	: 貯気槽密度 \times (ノズル膨張距離) ³	$\rho_c L^3$
時間	: (ノズル膨張距離)/(貯気槽での音速)	L/a_c
温度	: 貯気槽温度	T_c

これらを用いて諸量は以下のように無次元化される。

$$\begin{aligned} \text{速度} &: a_c \equiv \sqrt{\gamma RT_c} \\ \text{圧力} &: \gamma \rho_c RT_c \equiv \gamma p_c \\ \text{密度} &: \rho_c \\ \text{エネルギー密度} &: \gamma \rho_c RT_c \\ \text{気体定数} &: \gamma R \end{aligned}$$

また、粘性係数については貯気槽での粘性係数 μ_c で無次元化する。

3.2 平面波伝播の支配方程式

3.2.1 伝播方程式

利得の無い媒質中では電磁波の複素振幅 $\Psi(t, x, y, z)$ は近似的に次の波動方程式に従う。

$$\left(\nabla^2 - \frac{n^2}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right) \Psi(t, x, y, z) = 0 \quad (3.25)$$

ただし c は真空での光速, k_w は波数である。 n は媒質の屈折率であり

$$n = 1 + K\rho \quad (3.26)$$

である。 K は Gladstone-Dale 定数で作動流体組成の値に質量分率によって重みをかけて混合気体に対する値を求めている。

いま平面波を仮定し z 方向を光の進行方向として

$$\Psi(t, x, y, z) = \psi(x, y, z) \exp(jck_w t - jk_w z) \quad (3.27)$$

とおく、ただし $j^2 = -1$ である。 z 方向の ψ の変化量が小さいとして $\partial^2/\partial z^2$ を省略し、
 $n^2 = (1 + K\rho)^2 \cong 1 + 2K\rho$ とすると、

$$\frac{\partial \psi}{\partial z} = -\frac{j}{2k_w} \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} \right) - jk_w K\rho \psi \quad (3.28)$$

となる。

ここで輻射強度の増幅を考える。利得 G_0 の定義は

$$\frac{\partial I}{\partial z} = G_0 I \quad (3.29)$$

であり、これを光子の密度 $|\Psi|^2$ を用いて表すと、

$$\frac{\partial |\Psi|^2}{\partial z} = G_0 |\Psi|^2 \quad (3.30)$$

すなわち

$$\frac{\partial |\psi|}{\partial z} = \frac{G_0}{2} |\psi| \quad (3.31)$$

誘導放出によって光の位相は変化しないので

$$\frac{\partial \psi}{\partial z} = \frac{G_0}{2} \psi \quad (3.32)$$

となる。この増幅の影響を重ね合わせるとレーザ媒質中の光の伝播は

$$\frac{\partial \psi}{\partial z} = -\frac{j}{2k_w} \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} \right) - jk_w K\rho \psi + \frac{G_0}{2} \psi \quad (3.33)$$

と近似できる。

3.2.2 一般曲線座標系

積分方向が z 方向であるので簡単のため計算格子は (x, y) 平面で作った 2 次元格子を z 方向に積み重ねたものとする。すなわち $\zeta_x = \zeta_y = 0$ である。従って座標変換は $z = \text{一定}$ の平面上で 2 次的に行う。

一般曲線座標系での支配方程式は以下の通り。

$$\frac{\partial q}{\partial \zeta} + \frac{1}{\zeta_z} \frac{\partial E}{\partial \xi} + \frac{1}{\zeta_z} \frac{\partial F}{\partial \eta} = -\frac{j}{2k_w \zeta_z} \left(\frac{\partial E_v}{\partial \xi} + \frac{\partial F_v}{\partial \eta} \right) - jk_w K\rho \frac{q}{\zeta_z} + \frac{G_0}{2} \frac{q}{\zeta_z} \quad (3.34)$$

ここに

$$\begin{aligned}q &= \frac{\psi}{J_2} \\E &= \frac{\xi_z}{J_2} \psi \\E_v &= \frac{\nabla_2 \xi \cdot \nabla_2 \xi}{J_2} \frac{\partial \psi}{\partial \xi} + \frac{\nabla_2 \xi \cdot \nabla_2 \eta}{J_2} \frac{\partial \psi}{\partial \eta} \\F &= \frac{\eta_z}{J_2} \psi \\F_v &= \frac{\nabla_2 \eta \cdot \nabla_2 \xi}{J_2} \frac{\partial \psi}{\partial \xi} + \frac{\nabla_2 \eta \cdot \nabla_2 \eta}{J_2} \frac{\partial \psi}{\partial \eta} \\J_2 &= \frac{1}{x_\xi y_\eta - x_\eta y_\xi}\end{aligned}$$

ただし $\nabla_2 = (\partial/\partial x, \partial/\partial y)$ である。

さらに, (x, y) 平面上の計算格子が z 方向に変化しないものとする。上式において $E = F = 0$ とすることができ一般曲線座標系での支配方程式は更に簡単化され

$$\frac{\partial q}{\partial \zeta} = -\frac{j}{2k_w \zeta_z} \left(\frac{\partial E_v}{\partial \xi} + \frac{\partial F_v}{\partial \eta} \right) - jk_w K \rho \frac{q}{\zeta_z} + \frac{G_0}{2} \frac{q}{\zeta_z} \quad (3.35)$$

となる。

第 4 章

計算方法

本研究では流体の方程式と光共振器内の光の伝播方程式を組み合わせることで、 CO_2 ガスダイナミックレーザーの出力を計算する。従ってそれぞれの方程式系について安定でかつ精度の高い計算方法を用いる必要がある。本章では2つの方程式系に適用した計算方法および境界条件について検討する。

計算の流れとしては、流体の方程式を解くことによって求められる流体の密度、微小信号利得係数を用いて光の伝播方程式を解き、光の伝播方程式を解いて求められる輻射強度を用いて流体の方程式を解く。この作業を両方の方程式系で満たすべき条件が得られるまで続ける。

4.1 流体

本研究では差分法を用いて支配方程式を空間方向、時間方向に離散化し、非定常問題の時間発展的な漸近解として定常解を求める。

空間の離散化において、対流項は TVD (Total Variation Diminishing) 数値流束で評価し、粘性項には2次精度の中心差分を用いる。時間方向の積分には各格子点でクーラン数を一定とする局所時間刻みと LU-ADI 法による陰的積分を用い解の収束性を向上させた。また、振動緩和や乱流モデルの生成項により計算が stiff になるので Point-Implicit 法を用いて緩和する。

4.1.1 空間の離散化

対流項は Roe の近似リーマン解法を基にした高精度の TVD 数値流束で評価する。また、粘性の影響はあらゆる方向伝播するので、粘性項には 2 次精度の中心差分を用いる。

Roe スキーム

非粘性流体の方程式

$$\frac{\partial Q}{\partial t} + \frac{\partial F}{\partial x} = 0 \quad (4.1)$$

を解く際、数値計算では、計算セル内で物理量が一定とするので、セル境界には不連続が生じる。従って、式 (4.1) を解くことは、各格子点においてリーマン問題を解くことに帰着する。

Roe[31] は式 (4.1) の解の代わりに式 (4.1) を線形化した方程式

$$\frac{\partial Q}{\partial t} + A \frac{\partial Q}{\partial x} = 0 \quad (4.2)$$

$$A = \frac{\partial F}{\partial Q} \quad (4.3)$$

において、近似リーマン問題を解いた解を用いることを提案した。この方法では風上差分 1 次精度数値流束は次式で与えられる。

$$\hat{F} = \frac{1}{2} [F_L + F_R - |\hat{A}|(Q_R - Q_L)] \quad (4.4)$$

$$|\hat{A}| = |\hat{T} \hat{\Lambda} \hat{T}^{-1}| \equiv \hat{T} |\hat{\Lambda}| \hat{T}^{-1} \quad (4.5)$$

$\hat{\cdot}$ はセル境界での値、 L は左側セルでの値、 R は右側セルでの値を表している。数値流束が保存則を満たし、不連続を捕らえるために持つべき性質 U として Roe は次の 3 条件を提案した。

1. $Q_L \rightarrow Q_R \rightarrow Q$, $\hat{A}(Q_L, Q_R) \rightarrow A(Q)$
2. $\hat{A}(Q_L, Q_R) \Delta Q = \Delta F$
3. \hat{A} が実固有値と固有ベクトルの完全な系を持つ

この条件を満たす平均化を Roe は完全気体について導いたが、一般の非平衡気体については Liu と Vinokur[32] により以下の通り導かれている。

$$\bar{u}_j = (u_{jL} + D u_{jR}) / (1 + D) \quad (4.6)$$

$$\bar{H} = (H_L + DH_R)/(1+D) \quad (4.7)$$

$$\bar{f} = (f_L + Df_R)/(1+D) \quad (4.8)$$

$$\bar{\rho} = \rho_L D \quad (4.9)$$

ここに

$$H \equiv (E + p')/\rho \quad (4.10)$$

$$D \equiv \sqrt{\rho_R/\rho_L} \quad (4.11)$$

f は非平衡量であり本研究の場合は $\rho q, \rho \omega, \rho e_{12}^{vi}, \rho e_{33}^{vi}, \rho e_N^{vi}$ であり,

$$p' \equiv p + \frac{2}{3}\rho k_t = p + \frac{2}{3}\rho q^2 \quad (4.12)$$

である。

ヤコビアン・マトリックスの対角化

Roeの方法による1次精度の数値流束を作るにはヤコビアン・マトリックス A を対角化し、固有値ベクトル Λ , 右固有ベクトル行列 T^{-1} , 左固有ベクトル T を得る必要がある。一般座標系で計算する場合、例えば ξ 方向のヤコビアン・マトリックスは

$$A = \frac{\partial \hat{F}_\xi}{\partial Q} \quad (4.13)$$

である。

Wadaらの方法[33]に従えば、このヤコビアン・マトリックスの Λ は

$$\Lambda = \text{diag}(U, U, U, U + |n|c, U - |n|c, U, U, U, U) \quad (4.14)$$

となる。ただし、

$$U = \mathbf{n} \cdot \mathbf{u} \quad (4.15)$$

$$\mathbf{n} = \frac{\nabla \xi}{J} \quad (4.16)$$

$$c^2 = \frac{\partial p'}{\partial \rho} + \frac{h}{\rho} \frac{\partial p'}{\partial \epsilon} + \sum \frac{f_i}{\rho} \frac{\partial p'}{\partial f_i} \quad (4.17)$$

である。

T^{-1} , T はベクトル Ψ との積の形で以下の通り得られる.

$$T^{-1}\Psi \equiv (G_1, G_2, G_3, \dots, G_{10})^t$$

$$\begin{aligned} G_1 &= c^2\psi_1 - aa \\ G_2 &= -(\mathbf{l} \cdot \mathbf{u})c\psi_1 + c(l_1\psi_2 + l_2\psi_3 + l_3\psi_4) \\ G_3 &= -(\mathbf{m} \cdot \mathbf{u})c\psi_1 + c(m_1\psi_2 + m_2\psi_3 + m_3\psi_4) \\ G_4 &= (aa + bb)/2 \\ G_5 &= (aa - bb)/2 \\ G_6 &= -q \cdot aa + c^2\psi_6 \\ G_7 &= -\omega \cdot aa + c^2\psi_7 \\ G_8 &= -e_{12}^{vib}aa + c^2\psi_8 \\ G_9 &= -e_3^{vib}aa + c^2\psi_9 \\ G_{10} &= -e_N^{vib}aa + c^2\psi_{10} \end{aligned} \tag{4.18}$$

$$T\Psi \equiv (G_1, G_2, G_3, \dots, G_{10})^t$$

$$\begin{aligned} G_1 &= \frac{1}{c^2}(\psi_1 + \psi_4 + \psi_5) \\ G_2 &= G_1u + \frac{1}{c}[l_1\psi_2 + m_1\psi_3 + \bar{n}_1(\psi_4 - \psi_5)] \\ G_3 &= G_1v + \frac{1}{c}[l_2\psi_2 + m_2\psi_3 + \bar{n}_2(\psi_4 - \psi_5)] \\ G_4 &= G_1w + \frac{1}{c}[l_3\psi_2 + m_3\psi_3 + \bar{n}_3(\psi_4 - \psi_5)] \\ G_5 &= \left[\frac{1}{2}u^2 - \frac{\partial p'/\partial \rho}{\partial p'/\partial e} \right] \frac{\psi_1}{c^2} \\ &\quad + \frac{1}{c}[(\mathbf{u} \cdot \mathbf{l})\psi_2 + (\mathbf{u} \cdot \mathbf{m})\psi_3 + (\mathbf{u} \cdot \bar{\mathbf{n}})(\psi_4 - \psi_5)] \\ &\quad + \frac{1}{c^2} \left(\frac{u^2}{2} + \frac{h}{\rho} \right) (\psi_4 + \psi_5) - \sum \frac{\partial p'/\partial f_i}{\partial p'/\partial e} \frac{\psi_{5+i}}{c^2} \\ G_6 &= \frac{q}{c^2}(\psi_4 + \psi_5) + \frac{\psi_6}{c^2} \\ G_7 &= \frac{\omega}{c^2}(\psi_4 + \psi_5) + \frac{\psi_7}{c^2} \end{aligned} \tag{4.19}$$

$$\begin{aligned}
 G_8 &= \frac{e_{12}^{vib}}{c^2}(\psi_4 + \psi_5) + \frac{\psi_8}{c^2} \\
 G_9 &= \frac{e_3^{vib}}{c^2}(\psi_4 + \psi_5) + \frac{\psi_9}{c^2} \\
 G_{10} &= \frac{e_N^{vib}}{c^2}(\psi_4 + \psi_5) + \frac{\psi_{10}}{c^2}
 \end{aligned}$$

ここに,

$$aa \equiv \left(\frac{\partial p'}{\partial e} \frac{u^2}{2} + \frac{\partial p'}{\partial \rho} \right) \psi_1 - \frac{\partial p'}{\partial e} (u\psi_2 + v\psi_3 + w\psi_4 - \psi_5) + \sum \frac{\partial p'}{\partial f_i} \psi_{5+i} \quad (4.20)$$

$$bb \equiv c \{ -(\bar{n} \cdot \mathbf{u})\psi_1 + \bar{n}_1\psi_2 + \bar{n}_2\psi_3 + \bar{n}_3\psi_4 \} \quad (4.21)$$

$$\bar{n} = \frac{\mathbf{n}}{|\mathbf{n}|} \quad (4.22)$$

であり, l, m は \mathbf{n} の相反ベクトルである.

TVD 条件

Neumann の線形方程式に対する安定条件にかわって, 非線形方程式に対する安定条件として考えられた条件が TVD 条件である. 1 次元双曲型方程式

$$\frac{\partial Q}{\partial t} + \frac{\partial F}{\partial x} = 0 \quad (4.23)$$

の変動量の総和 TV (Total Variation) を,

$$\begin{aligned}
 TV(Q^n) &= \sum |Q_{j+1} - Q_j| \\
 &= \sum |\Delta_{j+\frac{1}{2}} Q^n|
 \end{aligned} \quad (4.24)$$

と定義したとき,

$$TV(Q^{n+1}) \leq TV(Q^n) \quad (4.25)$$

であることを TVD (Total Variation Diminishing) であるという.

式 (4.23) を空間方向に差分化すると,

$$\frac{\partial Q_j}{\partial t} + \frac{\hat{F}_{j+\frac{1}{2}} - \hat{F}_{j-\frac{1}{2}}}{\Delta x} = 0 \quad (4.26)$$

ここに, \hat{F} は数値流束であり 3 点スキームでは,

$$\begin{aligned}
 \hat{F}_{j+\frac{1}{2}} &= \hat{F}(Q_j, Q_{j+1}) \\
 &= -C_{j+1}^- Q_{j+1} + C_j^+ Q_j
 \end{aligned} \quad (4.27)$$

と書けるので

$$\begin{aligned}\Delta \hat{F}_j &= \hat{F}_{j+\frac{1}{2}} - \hat{F}_{j-\frac{1}{2}} \\ &= -C_{j+\frac{1}{2}}^- \Delta_{j+\frac{1}{2}} Q + C_{j-\frac{1}{2}}^+ \Delta_{j-\frac{1}{2}} Q\end{aligned}\quad (4.28)$$

となる。ここに $\Delta_{j+\frac{1}{2}} Q = Q_{j+1} - Q_j$ である。いま時間方向に1次精度の前進差分をとる時、すなわち時間積分に1次精度の陽解法を用いる時、式(4.23)は、

$$Q_j^{n+1} - Q_j^n = -\lambda \Delta \hat{F}_j^n \quad (4.29)$$

と差分化される。ただし、

$$\lambda = \frac{\Delta t}{\Delta x} \quad (4.30)$$

である。

この時、TVDであるための条件は、

$$(1) \quad C_{j+\frac{1}{2}}^\pm \geq 0 \quad (4.31)$$

$$(2) \quad \lambda(C_{j+\frac{1}{2}}^- + C_{j+\frac{1}{2}}^+) \leq 1 \quad (4.32)$$

であることが証明されている [30]。このうち条件(2)は線形安定解析における CFL 条件 (Courant-Friedrichs-Lewy condition) に相当する。なお、Roeの方法によって得られた1次精度数値流束は $\lambda \leq 1$ で TVD 条件を満たす。

一方時間方向に1次精度の後退差分をとる時、すなわち時間積分に1次精度の陰解法を用いる場合、式(4.23)は

$$Q_j^{n+1} - Q_j^n = -\lambda \Delta \hat{F}_j^{n+1} \quad (4.33)$$

と差分化される。この場合は TVD であるためには条件(2)が除かれ、条件(1)のみが TVD 条件となる。

高精度数値流束

Roeの方法により得られた1次精度の数値流束を基に Chakravarthy-Osher[34]-Takakura [35]の方法によって高精度化された数値流束は以下の通り得られる。

$$F_{j+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2} [F_j + F_{j+1} - T_{j+\frac{1}{2}} (\Lambda_{j+\frac{1}{2}}^+ \sigma'_{j+\frac{1}{2}} + \Lambda_{j+\frac{1}{2}}^- \sigma'_{j+\frac{1}{2}})] \quad (4.34)$$

ここに,

$$\begin{aligned} \sigma'_{j+\frac{1}{2}}^+ &= \sigma_{j+\frac{1}{2}} \\ &\quad -\phi \left[\begin{array}{l} \min\text{mod}(\sigma_{j-\frac{1}{2}}^+, C_1 \sigma_{j+\frac{1}{2}}^+) \\ \min\text{mod}(\sigma_{j-\frac{1}{2}}^+, C_2 \sigma_{j+\frac{1}{2}}^+) \end{array} \right] \\ &\quad -(1-\phi) \left[\begin{array}{l} \min\text{mod}(\sigma_{j-\frac{1}{2}}^+, C_1 \sigma_{j+\frac{1}{2}}^+) \\ \min\text{mod}(\sigma_{j-\frac{1}{2}}^+, C_2 \sigma_{j+\frac{1}{2}}^+) \end{array} \right] \end{aligned} \quad (4.35)$$

$$\begin{aligned} \sigma'_{j+\frac{1}{2}}^- &= \sigma_{j+\frac{1}{2}} \\ &\quad -\phi \left[\begin{array}{l} \min\text{mod}(\sigma_{j+\frac{3}{2}}^-, C_1 \sigma_{j+\frac{1}{2}}^-) \\ \min\text{mod}(\sigma_{j+\frac{3}{2}}^-, C_2 \sigma_{j+\frac{1}{2}}^-) \end{array} \right] \\ &\quad -(1-\phi) \left[\begin{array}{l} \min\text{mod}(\sigma_{j+\frac{3}{2}}^-, C_1 \sigma_{j+\frac{1}{2}}^-) \\ \min\text{mod}(\sigma_{j+\frac{3}{2}}^-, C_2 \sigma_{j+\frac{1}{2}}^-) \end{array} \right] \end{aligned} \quad (4.36)$$

ただし,

$$\sigma_{j+\frac{1}{2}} = T_{j+\frac{1}{2}}^{-1} \Delta_{j+\frac{1}{2}} Q \quad (4.37)$$

$$\sigma_{j+\frac{1}{2}}^\pm = \frac{\sigma_{j+\frac{1}{2}} \pm |\sigma_{j+\frac{1}{2}}|}{2} \quad (4.38)$$

$\min\text{mod}(x, y)$ は高精度化された数値流束が TVD 条件 (1) を満たすための流束制限関数であり, x と y が異符号の時は 0 を与え, 同符号の場合は絶対値の小さい方を与える. 数式で表せば,

$$\min\text{mod}(x, y) = \text{sign}(x) \max\{0, \min\{|x|, y \cdot \text{sign}(x)\}\} \quad (4.39)$$

ϕ は風上差分の割合を表すパラメーター, C_1, C_2 は圧縮係数と呼ばれ, 本研究では $\phi = 1, C_1 = 2, C_2 = 0$ とした.

4.1.2 時間積分

時間方向の積分は局所時刻みと, 以下に示す Point-Implicit スキーム, LU-ADI スキームによる陰解法を組合せ, 収束性, 安定性を向上させた.

生成項の取り扱い

分子振動非平衡流れを含んだ流れの方程式を時間方向に積分する際, その時刻は対流項や粘性項の安定性から要求される制限以外にも分子振動の緩和時間が短いことによって制限される. 通常緩和時間が短いことによる制限の方が厳しく, そのため時刻みは非常

に小さくなり計算が進まなくなる。このような状態を stiff であるという。その stiffness を取り除くために Point-Implicit 法 [36] という生成項を陰的に扱う方法を用いる。

生成項 H_i を時間方向に線形化すれば、

$$H_i^{n+1} = H_i^n + \sum_j \left(\frac{\partial H_i^n}{\partial Q_j} \right) \Delta Q_j^n \quad (4.40)$$

ここに、

$$Q_i^n = Q_i^{n-1} + \Delta Q_i^n \quad (4.41)$$

従って、 H_i を陰的に扱ったことを、すなわち Point-Implicit を施したことを $\bar{\cdot}$ で表すと、

$$\Delta \bar{Q}_i^n = \Delta Q_i^n + \Delta t \sum_j \left(\frac{\partial H_i^n}{\partial Q_j} \right) \Delta \bar{Q}_j^n \quad (4.42)$$

$$\Delta \bar{Q} = S^{-1} \Delta Q \quad (4.43)$$

S はスケーリング・マトリックスと呼ばれ

$$S_{ij} = \begin{cases} 1 - \Delta t \frac{\partial H_i}{\partial Q_j} & (i = j) \\ -\Delta t \frac{\partial H_i}{\partial Q_j} & (i \neq j) \end{cases} \quad (4.44)$$

簡単な例として

$$\frac{dQ_r}{dt} = H_r = -\frac{Q_r}{\tau_r} \quad (4.45)$$

という緩和過程を 1 次元流れに組み込んだ場合を考える。

$$\frac{\partial Q}{\partial t} = -\frac{\partial F}{\partial x} + H \quad (4.46)$$

この時、スケーリング・マトリックスは

$$S = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ -\Delta t \frac{\partial H_r}{\partial Q_1} & -\Delta t \frac{\partial H_r}{\partial Q_2} & -\Delta t \frac{\partial H_r}{\partial Q_3} & 1 - \Delta t \frac{\partial H_r}{\partial Q_r} \end{pmatrix} \quad (4.47)$$

となる。ただし、 $H_r = Q_r/\tau_r$ 。式 (4.43) により、

$$\Delta \bar{Q}_r = \frac{\Delta t}{1 - \Delta t \frac{\partial H_r}{\partial Q_r}} \left(RHS_r + \sum_{j \neq r} \frac{\partial H_r}{\partial Q_j} \Delta Q_j \right) \quad (4.48)$$

となる。ただし RHS は方程式の右辺を表す。これから分かるように Q_r の時間刻み Δt_r は

$$\begin{aligned}\Delta t_r &= \frac{\Delta t}{1 - \Delta t \frac{\partial H_r}{\partial Q_r}} \\ &= \frac{\Delta t}{1 + \frac{\Delta t}{\tau_r}} \\ &\leq \min(\Delta t, \tau_r)\end{aligned}\quad (4.49)$$

となり非平衡量の時間刻みは常にその緩和時間よりも小さな値をとり、計算の安定性は緩和の特性時間と無関係となることが分かる。つまり Point-Implicit スキームは非平衡量の時間刻みを緩和の特性時間よりも小さく調整する機能があるといえる。この方法により分子振動緩和生成項による stiffness は概ね取り除くことが出来る。

乱流モデルの生成項もまた計算を stiff にする。 $-\frac{\partial H_i}{\partial Q_i}$ は生成項 H_i の特性時間の逆数を表しており、一般に現象は平衡状態に向かうので特性時間は正の値をとる。しかし乱流モデルの生成項の場合モデル化の問題により $-\frac{\partial H_i}{\partial Q_i}$ が負になる場合がある。(4.49) から特性時間が負となるような場合は Point-Implicit スキームはうまく機能しないことが分かる。そこで時間刻みを調整するというところに重点をおき

$$\Delta \tilde{Q}_i = \frac{RHS_i}{1 + \Delta t \left| \frac{\partial H_i}{\partial Q_i} \right|}\quad (4.50)$$

とすることにより、安定性を確保する。

輻射による生成項もまた計算を stiff にする。この生成項の取り扱い是最も厄介である。それは輻射強度は流体とは陽的には無関係であるため、計算が収束するまでの途中過程においては非物理的な大きな値をとる可能性があるからである。ところが式(2.24)から分かるように微小信号利得係数は振動準位の数密度に比例し

$$\frac{\partial G_0}{\partial N_{001}} > 0\quad (4.51)$$

$$\frac{\partial G_0}{\partial N_{100}} < 0\quad (4.52)$$

である。また本研究では振動モード内にボルツマン分布を仮定しているので

$$\frac{\partial N_{001}}{\partial \rho e^{v_3^2}} > 0\quad (4.53)$$

$$\frac{\partial N_{100}}{\partial \rho e^{v_{12}^2}} > 0\quad (4.54)$$

という関係が成り立つ。従って ρe_3^{vib} の式の生成項および ρe_{12}^{vib} の式の生成項

$$H_{rad}^{e_3^{vib}} = -\frac{1}{C_{CO_2}} \frac{\theta_3}{\theta_3 - \theta_1} G_0 I$$

$$H_{rad}^{e_{12}^{vib}} = \frac{1}{C_{CO_2}} \frac{\theta_1}{\theta_3 - \theta_1} G_0 I$$

は各々の保存量に対して

$$\frac{\partial H_{rad}^{e_3^{vib}}}{\partial \rho e_3^{vib}} < 0 \quad (4.55)$$

$$\frac{\partial H_{rad}^{e_{12}^{vib}}}{\partial \rho e_{12}^{vib}} < 0 \quad (4.56)$$

となり微小信号利得係数 G_0 を陰的に扱う事で安定性を向上させる事ができる。

陰解法

陽解法では時間積分の刻みは TVD 条件 (2)

$$\frac{\Delta t}{\Delta x} (C_{j+\frac{1}{2}}^- + C_{j+\frac{1}{2}}^+) \leq 1$$

によって制限される。特に最小格子幅が非常に小さい粘性計算では時間刻みが非常に小さくなる。従って、陰解法によって緩和する事が望ましい。

一般座標系 (τ, ξ, η, ζ) でのオイラー方程式

$$\partial_\tau Q + \partial_\xi E + \partial_\eta F + \partial_\zeta G = 0 \quad (4.57)$$

を時間方向に離散化し、対流項を陰的に扱うと

$$\frac{Q^{n+1} - Q^n}{\tau} + \partial_\xi E^{n+1} + \partial_\eta F^{n+1} + \partial_\zeta G^{n+1} = 0 \quad (4.58)$$

と書ける。ここで

$$E^{n+1} = E^n + \left(\frac{\partial E}{\partial Q}\right)^n (Q^{n+1} - Q^n) + o(\Delta\tau^2) \quad (4.59)$$

$$F^{n+1} = F^n + \left(\frac{\partial F}{\partial Q}\right)^n (Q^{n+1} - Q^n) + o(\Delta\tau^2) \quad (4.60)$$

$$G^{n+1} = G^n + \left(\frac{\partial G}{\partial Q}\right)^n (Q^{n+1} - Q^n) + o(\Delta\tau^2) \quad (4.61)$$

と線形化し,

$$\Delta Q^n = Q^{n+1} - Q^n \quad (4.62)$$

$$A = \frac{\partial E}{\partial Q} \quad (4.63)$$

$$B = \frac{\partial F}{\partial Q} \quad (4.64)$$

$$C = \frac{\partial G}{\partial Q} \quad (4.65)$$

$$h = \Delta\tau \quad (4.66)$$

とおけば,

$$[I + h(\partial_\xi A + \partial_\eta B + \partial_\zeta C)]\Delta Q = -h(\partial_\xi E + \partial_\eta F + \partial_\zeta G) \quad (4.67)$$

となる. これを近似因子化すると

$$[I + h\delta_\xi A][I + h\delta_\eta B][I + h\delta_\zeta C]\Delta Q = -h(\delta_\xi E + \delta_\eta F + \delta_\zeta G) \quad (4.68)$$

となる. A, B, C は対角化できるので,

$$A = T_\xi \Lambda_\xi T_\xi^{-1} \quad (4.69)$$

$$B = T_\eta \Lambda_\eta T_\eta^{-1} \quad (4.70)$$

$$C = T_\zeta \Lambda_\zeta T_\zeta^{-1} \quad (4.71)$$

と表すと, 例えば式 (4.68) の左辺第 1 因子は

$$\begin{aligned} [I + h\delta_\xi A] &= [I + h(\delta_\xi T_\xi \Lambda_\xi T_\xi^{-1})] \\ &= [I + hT_\xi \delta_\xi \Lambda_\xi T_\xi^{-1}] + h\delta_\xi T_\xi \Lambda_\xi T_\xi^{-1} \\ &= [I + hT_\xi \delta_\xi \Lambda_\xi T_\xi^{-1}] + o(h) \\ &= T_\xi [I + h\delta_\xi \Lambda_\xi] T_\xi^{-1} \end{aligned} \quad (4.72)$$

と近似化できる. これを用いると式 (4.68) は

$$T_\xi [I + h\delta_\xi \Lambda_\xi] T_\xi^{-1} T_\eta [I + h\delta_\eta \Lambda_\eta] T_\eta^{-1} T_\zeta [I + h\delta_\zeta \Lambda_\zeta] T_\zeta^{-1} \Delta Q = -h(\delta_\xi E + \delta_\eta F + \delta_\zeta G) \quad (4.73)$$

となり, ΔQ を求める作業は, スカラーの 3 重対角行列の反転となる [37]. ただし, この近似は式 (4.72) において $\Delta\tau$ のオーダーの誤差を生んでしまうため, 本研究の計算方法はこの時点で時間方向の精度を失ってしまうと考えなければならない.

粘性の影響は例えば ξ 方向には粘性項のヤコビアンマトリックスの最大の固有値

$$\nu_\xi = \frac{\kappa}{\rho C_v} (\xi_x^2 + \xi_y^2 + \xi_z^2) \quad (4.74)$$

の2階微分を式(4.72)の対角項に含め、

$$T_\xi [I + h(\delta_\xi \Lambda_\xi - \delta_{\xi\xi} \nu_\xi)] T_\xi^{-1} \quad (4.75)$$

とすることで考慮する。

次にObayashiらの方法[38]に従って式(4.75)の第2因子をLU分解する。いま

$$\delta_\xi \Lambda = \nabla_\xi \Lambda^+ + \Delta_\xi \Lambda^- \quad (4.76)$$

と1次風上差分をとると

$$\begin{aligned} [I + h(\delta_\xi \Lambda_\xi - \delta_{\xi\xi} \nu_\xi)] &= [I + h(\nabla_\xi \Lambda^+ + \Delta_\xi \Lambda^- - \delta_{\xi\xi} \nu_\xi I)] \\ &= [-h(\Lambda_{j-1}^+ + \nu_{j-1} I) + D_j - h(-\Lambda_{j+1}^- + \nu_{j+1} I)] \end{aligned} \quad (4.77)$$

と変形できる。ここに、

$$D_j = I + h(|\Lambda|_j + 2\nu_j I) \quad (4.78)$$

である。式(4.77)の右辺を以下のように下三角行列と上三角行列の積にLU分解すれば、

$$[D_j - h(\Lambda_{j-1}^+ + \nu_{j-1} I)] [I - D_j^{-1} h(-\Lambda_{j+1}^- + \nu_{j+1} I)] \quad (4.79)$$

ΔQ を求める作業はスカラーの掃引となり更に容易なものとなる。

最後に、 ΔQ を求めるには $T_{\xi_1}^{-1} T_{\xi_2}$ を知る必要がある。Wada[33]に従えば、

$$T_{\xi_1}^{-1} T_{\xi_2} \Psi \equiv (G_1, G_2, G_3, \dots, G_{10})^t$$

$$G_1 = \psi_1$$

$$G_2 = (\mathbf{l}_{\xi_1} \cdot \mathbf{l}_{\xi_2}) \psi_2 + (\mathbf{l}_{\xi_1} \cdot \mathbf{m}_{\xi_2}) \psi_3 + (\mathbf{l}_{\xi_1} \cdot \bar{\mathbf{n}}_{\xi_2}) (\psi_3 - \psi_4)$$

$$G_3 = (\mathbf{m}_{\xi_1} \cdot \mathbf{l}_{\xi_2}) \psi_2 + (\mathbf{m}_{\xi_1} \cdot \mathbf{m}_{\xi_2}) \psi_3 + (\mathbf{m}_{\xi_1} \cdot \bar{\mathbf{n}}_{\xi_2}) (\psi_3 - \psi_4)$$

$$G_4 = \frac{1}{2} [(\bar{\mathbf{n}}_{\xi_1} \cdot \mathbf{l}_{\xi_2}) \psi_2 + (\bar{\mathbf{n}}_{\xi_1} \cdot \mathbf{m}_{\xi_2}) \psi_3 + (1 + \bar{\mathbf{n}}_{\xi_1} \cdot \bar{\mathbf{n}}_{\xi_2}) \psi_4 + (1 - \bar{\mathbf{n}}_{\xi_1} \cdot \bar{\mathbf{n}}_{\xi_2}) \psi_5]$$

$$G_5 = \frac{1}{2} [(\bar{\mathbf{n}}_{\xi_1} \cdot \mathbf{l}_{\xi_2}) \psi_2 + (\bar{\mathbf{n}}_{\xi_1} \cdot \mathbf{m}_{\xi_2}) \psi_3 + (1 - \bar{\mathbf{n}}_{\xi_1} \cdot \bar{\mathbf{n}}_{\xi_2}) \psi_4 + (1 + \bar{\mathbf{n}}_{\xi_1} \cdot \bar{\mathbf{n}}_{\xi_2}) \psi_5] \quad (4.80)$$

$$G_6 = \psi_6$$

$$G_7 = \psi_7$$

$$G_8 = \psi_8$$

$$G_9 = \psi_9$$

$$G_{10} = \psi_{10}$$

ここに,

$$\bar{n}_{\xi_i} = \frac{\nabla \xi_i}{|\nabla \xi_i|} \quad (4.81)$$

であり, l_{ξ_1}, l_{ξ_2} は, それぞれ $\bar{n}_{\xi_1}, \bar{n}_{\xi_2}$ の相反ベクトルである.

4.1.3 境界条件

入口境界条件

ノズル入口では流速は十分に遅く流れは平衡状態に達しているものと考えられる. 入口条件としては平衡, 等エンタルピー, 等エントロピー条件を与える. エンタルピーは貯気槽状態に保たれるので次の式が成り立つ.

$$C_p T_c + \sum C_i e_i^{vib} = C_p T + \sum C_i e^{vib} + \frac{1}{2} u^2 \quad (4.82)$$

温度は上式を解くことにより求められる.

等エントロピーの条件により次式が成り立つ.

$$de = C_v dT + \sum C_i \frac{de_i^{vib}}{dT} dT \quad (4.83)$$

$$de + pdv = 0 \quad (4.84)$$

状態方程式 $p = \rho RT$ を用いると

$$\left(\frac{C_p}{R} + \frac{\sum C_i \frac{de_i^{vib}}{dT}}{R} \right) \frac{dT}{T} = \frac{dp}{p} \quad (4.85)$$

が成り立つ. これを積分すれば

$$\ln p = \frac{C_p}{R} \int \frac{dT}{T} + \int \sum \frac{C_i}{R} \frac{de_i^{vib}}{dT} \frac{dT}{T} + const.$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{C_p}{R} \ln T + \sum \frac{C_i}{R} \left[\frac{e_i^{vib}}{T} + \int \frac{e_i^{vib}}{T^2} dT \right] + const. \\
&= \frac{C_p}{R} \ln T + \sum \frac{C_i}{R} \left[\frac{e_i^{vib}}{T} - R_i \ln \left\{ 1 - \exp \left(-\frac{\theta_i}{T} \right) \right\} \right] + const. \quad (4.86)
\end{aligned}$$

となり、圧力 p は次式で与えられる。

$$p = p_c \left(\frac{T}{T_c} \right)^{\frac{\gamma}{\gamma-1}} \prod \left[\left\{ \frac{1 - \exp \left(-\frac{\theta_i}{T} \right)}{1 - \exp \left(-\frac{\theta_i}{T_c} \right)} \right\}^{-\frac{C_i R_i}{R}} \exp \left\{ \frac{C_i}{R} \left(\frac{e_i^{vib}}{T} - \frac{e_i^{vib,c}}{T_c} \right) \right\} \right] \quad (4.87)$$

速度は外挿し、密度は温度、圧力、状態方程式から求める。振動エネルギーには平衡値を与える。

乱流量にも境界条件を与える必要がある。 q については、入口では速度に1%の乱れがあるとして

$$q = \sqrt{u_1^2 + u_2^2 + u_3^2} \times 10^{-2} \quad (4.88)$$

とする。 ω については、慣例にしたがって渦粘性の無次元量が1となるように与える。

出口境界条件

超音速部分では流れ固有値 $u, u \pm c$ が全て正の値をとる。従って、対流による情報の下流から上流への伝播はない。また粘性による拡散によって情報はあらゆる方向に伝播するが、その影響はさほど大きなものではない。そこで、全ての物理量を内側から外挿する。

亜音速部分では固有値の1つが負となり、下流の情報が上流に伝わる。従って、何か1つ物理量を与える必要がある。本研究では静圧を固定する。

壁条件

粘性流れでは壁上では速度は0である。壁での熱の出入りは無いものとし断熱壁を仮定し、温度、振動エネルギーとも壁面での勾配がないものとする。乱流量については

$$q = 0 \quad (4.89)$$

$$\frac{\partial \omega}{\partial n} = 0 \quad (4.90)$$

ただし n は壁の法線ベクトルである。

対称条件

ノズルの形状は上下対称であるので対称条件を与え計算量を軽減する。対称線上で2次精度を保つために、対称線から外に2点を取り、その2点に対称条件を与える。

初期条件

初期条件では密度、圧力、速度には比熱比 1.4 の完全気体準 1 次元流れの解を与え、振動エネルギーには平衡値を与える。

4.2 光の伝播

光の伝播もまた流体の計算と同様に差分法を用いて計算する。本節ではその差分方法および満たすべき共振条件、境界条件について説明する。

4.2.1 伝播方向の積分

平面波の伝播方程式 (3.35) を解くためには、次の式が安定に精度良く解けなければならない。

$$\frac{\partial q}{\partial \zeta} = -ja \frac{\partial^2 q}{\partial \xi^2} \quad (4.91)$$

ここに a は実数である。

最も簡単な解法として、 ξ 方向の 2 階微分に通常の 2 次精度の中心差分を用い、 ζ 方向にオイラー前進差分を用いると、

$$q_i^{l+1} - q_i^l = -jh(q_{i+1}^l - 2q_i^l + q_{i-1}^l), \quad (4.92)$$

$$h = a \frac{\Delta \zeta}{\Delta \xi^2} \quad (4.93)$$

と離散化できる。ここで

$$q_i^l = r^{l\Delta\zeta} \exp(jk_m i \Delta \xi) \quad (4.94)$$

と置いてノイマンの安定解析を行う。なお、右辺の係数が $-jh$ でなく h の場合は良く知られるように $h < 1/2$ で安定である。

式(4.92)に式(4.94)を代入すると,

$$r^{(l+1)\Delta\xi} e^{jk_m i \Delta\xi} - r^{l\Delta\xi} e^{jk_m i \Delta\xi} = -jh(r^{l\Delta\xi} e^{jk_m(i+1)\Delta\xi} - 2r^{l\Delta\xi} e^{jk_m i \Delta\xi} + r^{l\Delta\xi} e^{jk_m(i-1)\Delta\xi}) \quad (4.95)$$

r について解くと,

$$r = 1 + j4h \sin^2 \frac{k_m \Delta\xi}{2} \quad (4.96)$$

であり,

$$|r| \geq 1 \quad (4.97)$$

なので, この方法は無条件不安定である事が分かる.

そこで, Runge-Kutta法を用いて, 精度を向上させる事により, 安定性を確保する事を試みる. m 階の Runge-Kutta法を用いると, 式(4.91)は次のように離散化される.

$$\begin{aligned} q_i^{(1)} - q_i^n &= -\alpha_1 jh(q_{i+1}^n - 2q_i^n + q_{i-1}^n) \\ q_i^{(2)} - q_i^n &= -\alpha_2 jh(q_{i+1}^{(1)} - 2q_i^{(1)} + q_{i-1}^{(1)}) \\ q_i^{(3)} - q_i^n &= -\alpha_3 jh(q_{i+1}^{(2)} - 2q_i^{(2)} + q_{i-1}^{(2)}) \\ &\vdots \\ q_i^{(m)} - q_i^n &= -\alpha_m jh(q_{i+1}^{(m-1)} - 2q_i^{(m-1)} + q_{i-1}^{(m-1)}) \\ q_i^{n+1} &= q_i^{(m)} \end{aligned} \quad (4.98)$$

ただし, α_k は次のように選ぶ事にする.

$$\alpha_1 = \frac{1}{m}, \quad \alpha_2 = \frac{1}{m-1}, \quad \dots, \quad \alpha_{m-1} = \frac{1}{2}, \quad \alpha_m = 1 \quad (4.99)$$

いま2階の Runge-Kutta法を考えると,

$$q_i^{n+1} - q_i^n = -jh(q_{i+1}^n - 2q_i^n + q_{i-1}^n) - \frac{h^2}{2}(q_{i+2}^n - 4q_{i+1}^n + 6q_i^n - 4q_{i-1}^n + q_{i-2}^n) \quad (4.100)$$

となる. ノイマンの安定解析をおこなうと,

$$r = 1 - 8h^2 \sin^4 \frac{k\Delta\xi}{2} + 4jh \sin^2 \frac{k\Delta\xi}{2} \quad (4.101)$$

であり,

$$|r|^2 = 1 + 64h^4 \sin^8 \frac{k\Delta\xi}{2} \geq 1 \quad (4.102)$$

なので、2階の Runge-Kutta 法もまた無条件不安定である事が分かる。

次に3階の Runge-Kutta 法について安定解析を行うと、

$$r = 1 - 8h^2 \sin^4 \frac{k\Delta\xi}{2} + 4jh \sin^2 \frac{k\Delta\xi}{2} - \frac{32}{3}jh^3 \sin^6 \frac{k\Delta\xi}{2} \quad (4.103)$$

$$|r|^2 = 1 + \left(\frac{32}{3}\right)^2 h^6 \sin^{12} \frac{k\Delta\xi}{2} - \frac{64}{3}h^4 \sin^8 \frac{k\Delta\xi}{2} \quad (4.104)$$

$|r| < 1$ であるためには、

$$h^2 < \frac{3}{16} \quad (4.105)$$

であればよいことが分かる。

4階の Runge-Kutta 法では、

$$r = 1 - 8h^2 \sin^4 \frac{k\Delta\xi}{2} + \frac{32}{3}h^4 \sin^8 \frac{k\Delta\xi}{2} + 4jh \sin^2 \frac{k\Delta\xi}{2} - \frac{32}{3}jh^3 \sin^6 \frac{k\Delta\xi}{2} \quad (4.106)$$

$$|r|^2 = 1 + \left(\frac{32}{3}\right)^2 h^8 \sin^{16} \frac{k\Delta\xi}{2} - \frac{1}{2} \left(\frac{32}{3}\right)^2 h^6 \sin^{12} \frac{k\Delta\xi}{2} \quad (4.107)$$

となり、

$$h^2 < \frac{1}{2} \quad (4.108)$$

で安定となる。

以上のことをふまえて、本論文では、 ξ, η 方向の2階微分には通常の2次精度の中心差分を用い、 ζ 方向には4階の Runge-Kutta 法を用い陽的に積分する方法を採用した。

右辺の

$$-jk\kappa\rho \frac{q}{\zeta_z}$$

の項は光の位相変化を表す項であり、位相平面上で同心円上を回転させる項なので振幅を変えてはいけない。ところが離散化してしまうと同心円上の回転を再現するのは非常に困難で、光のエネルギーを保存しない。そこで

$$\frac{\partial q}{\partial \zeta} = -\frac{j}{2k} \left(\frac{\partial E_v}{\partial \xi} + \frac{\partial F_v}{\partial \eta} \right) + \frac{G_0 q}{2 \zeta_z} \quad (4.109)$$

を先ずく方向に積分し、その後位相を $-\frac{k\kappa\rho}{\zeta_z}$ だけ回転させるという手法をとっている。

4.2.2 共振条件

共振状態では光共振器内に定常な輻射強度分布が存在する。従って、平面鏡から出発した光は光共振器内を往復した後、強度が半透過鏡の透過率分だけ増幅し、強度・位相の分布は元に戻らなければならない。位相については光の位相は伝播した距離に比例して全体的にシフトするので相対的な位相分布が元に戻るものとする。共振状態を求めることは、この条件を満たす平面鏡での複素振幅を求めることに帰着する。

n 往復目の平面鏡上での位相を ϕ^n とし、光共振器を往復して再び平面鏡に戻って来た時の光の位相を ϕ_r とすると (ただし、この位相は基準とする位置の位相から測った位相である。なお本研究ではこの基準点を鏡の中心としている。) $\phi^{n+1} = \phi_r$ であるが、このまま往復を繰り返しても $\phi^{n+1} = \phi^n$ という共振状態に至るのは困難である。そこで本研究では

$$\phi^{n+1} = \phi^n + \alpha(\phi_r - \phi^n) \quad (4.110)$$

という操作を繰り返すことにより往復後の位相分布が元に戻るような平面鏡上での複素振幅を求める。 α は 1 よりも小さい適当な正数で、共振状態に至ると $\phi_r = \phi^n = \phi^{n+1}$ なので式 (4.110) は正しい解を与える。

強度の条件については計算を繰り返す過程で流体との相互作用の結果満たされる。

4.2.3 境界条件

対称条件

流体の計算と同じくノズルの上下で対称条件を与え計算量を軽減する。ただし、この対称条件は奇数次の共振モードを削除してしまう。奇数次のモードは対称線を挟んで複素振幅の符号が変わるからである。しかし本研究の対象である光共振器系は主に 0 次モードのガウス分布が得られると予想し、この条件を適用する。

外側境界

計算領域の外側境界では複素振幅を 0 とする。

第 5 章

予備計算

本研究では流体の方程式と光の伝播方程式を解くことによって、CO₂GDL の出力計算を行うので、それぞれの方程式が安定にかつ正確に解けなければならない。

本章では流体に関しては超音速ノズル内の分子振動非平衡流れを解き実験結果と比較することにより、また光の伝播に関しては真空の光共振器内の光の伝播を数値的に解き解析解と比較することによって、モデル及び計算方法の妥当性を確認する。

5.1 ノズル内流れの計算

ここでは超音速ノズル内の分子振動非平衡流れを数値解析し流れ場の様子を把握する。また実験ではノズル壁面圧力の測定、カラーシュリーレン写真による流れの可視化、微小信号利得係数の測定が行われているので、これらと比較することにより計算の信頼性を確認する。

5.1.1 計算条件

ノズル形状

ノズル形状は図 5.1 に示す 2 次元形状をもつ、スロート部と膨張部の 2 つの円弧からなる円弧-円弧 (Circular-Circular: C.C.) ノズルで、スロート高さ 1mm、膨張比 20、スロート部半径 5mm、膨張部半径 47.1mm、膨張距離 30mm、幅 138mm である。

貯気槽条件

貯気槽条件は実験で実現されている条件に近いものとして以下の通りとした。

貯気槽温度 1200 K
貯気槽圧力 21 atm
作動流体組成比 (体積分率) $\text{CO}_2:\text{N}_2:\text{H}_2\text{O} = 10:85:5$

5.1.2 計算格子

計算格子は2次元格子をノズル幅方向に並べたものを用いている。2次元格子は格子間にバネ系を考え釣合式を解くことによって滑らかな分布を得るという代数的な方法 [41] によって作成する。

図 5.2 に計算格子を示す。格子点数は主流方向に 101 点、ノズル高さ方向に 45 点、ノズル幅方向に 79 点で総格子点数は 359055 点である。ノズルの上下に対称条件を用いているので実際には高さ方向の格子点はノズル半分に 43 点となっている。

壁付近の最小格子幅は側壁で無次元長さ 10^{-5} とし上下の壁では壁の高さに比例して最小格子幅が変わっているが最大で 10^{-5} となるようにしている。またレーザー出力計算のことも考えて光共振器位置辺に格子を集め間隔を 0.25mm としている。

5.1.3 結果および考察

全体的な流れ場について

図 5.3 はノズル内の圧力分布である。ノズル形状の膨張が終る辺りから圧縮波が発生し圧力が上昇していることが分かる。これは C. C. ノズルが単に2つの円弧をつなぎ合わせただけのノズルであり膨張後の波消しをしていないため流れが再圧縮されるためである。図 5.4 は密度分布である。この図からも圧縮波の発生が確認できる。またノズル側面には不連続面が生じており、圧力分布には見られなかったことから、せん断層と考えられる。これは圧縮波による圧力上昇により、図 5.5 に示すようにノズル側壁の境界層内にノズルの内側に向かう流れが生じ、この流れと主流との間に生じたせん断層である。しかしながら、このノズル側壁付近以外は流れ場はほぼ2次元のといえる。図 5.6 はマッハ数分布である。圧縮波上流ではマッハ数で 5 程度が得られている。通常の超音速風洞に用いられる特性曲線法によって設計されたノズルでは、流体の比熱比 1.33 (振動エネルギーが励起されているので分子運動の自由度が 1 増したとする) で膨張比 20 に対するマッハ数は 4.37 であることを考えると圧縮波上流ではかなりの過膨張状態となっていることが分かる。これは急冷却による数密度反転を利用する CO_2GDL にとっては有利な状況といえる。

図 5.7 上面は実験で撮影されたカラーシュリーレン写真で下面是図 5.4 の密度分布を光軸方向に積分した等値線図である。カラーシュリーレン写真は密度勾配による光の屈折によって圧縮領域で青、膨張領域で赤に変色するように設定している。カラーシュリーレン写真からもノズル内に圧縮波が発生していることがわかり、計算結果はその様子と良く一致していることが分かる。

図 5.8 は貯気槽圧力で無次元化した壁面圧力分布である。実験装置ではスロートから 30mm 後方の壁面で圧力を測定している [4]。実験で測定された圧力を図中に示しているが壁面圧力も良い一致を示している。

乱流の効果について

乱流の影響について言及すると、この計算ではその影響は殆ど見られなかった。図 5.16 は渦粘性 μ_t の分布である。図中には $\mu_t \geq 10$ の等値線を描いている。0 方程式モデルでは $\mu_t < 14$ の場合は層流として扱う [40] ことを考えると、等値線が描かれていない領域は層流と考えてよい。渦粘性はノズルスロートよりも上流の超音速領域では発達しているが、スロートを過ぎると急激に減衰している。また境界層では殆んど発達していないことが分かる。これは超音速ノズル内のレイノルズ数が 1m あたり 10^{-6} 程度と小さいためであると考えられる。しかし、本研究対象のように主流マッハ数が高い流れ場に対する乱流モデルの妥当性は定かではない。それは本研究で用いた圧縮性乱流モデルは「マッハ数が 5 以下ならば乱流基本構造は非圧縮流れに同じ」とい Morkovin の仮定の下に質量荷重平均を用いて圧縮性方程式から密度の変動を取り除いたものであるからである。本研究ではマッハ数が 5 を超えることは無く Morkovin の仮定は満たしているが、乱流が流れ場に及ぼす影響について更に詳しく知るためには、高マッハ数流れに対応した乱流モデルの開発が必要である。

温度場について

図 5.11 ノズル内の並進温度の分布である。並進温度は圧縮波に至るまでは急激に降下し、圧縮波によって上昇している。図 5.12 は $\text{CO}_2(\nu_{12})$ の振動温度の分布である。 $\text{CO}_2(\nu_{12})$ の振動温度は並進温度に追従しており、ほぼ平衡状態にあることが分かる。図 5.13 は $\text{CO}_2(\nu_3)$ の振動温度の分布、図 5.14 は $\text{N}_2(\nu_N)$ の振動温度の分布である。 $\text{N}_2(\nu_N)$ の振動温度の方がやや高めで、 $\text{CO}_2(\nu_3)$ へのエネルギーの供給の役割を果たしている。またこの 2 つの振動モード

はスロートから 10mm 程度の位置までは降下しているが、その後は殆んど変化しておらず凍結されていることが分かる。見通しを良くするためにノズルの中心線上の振動温度分布を示したのが図 5.15 である。図中 T は並進温度、 T_{12}^{vib} 、 T_3^{vib} 、 T_N^{vib} はそれぞれ $\text{CO}_2(\nu_{12})$ 、 $\text{CO}_2(\nu_3)$ 、 $\text{N}_2(\nu_N)$ の振動温度を表している。

図 5.9 は微小信号利得係数の分布であり、これを光が往復する方向に積分して 2 次的に示したのが図 5.10 である。実験装置では微弱な輻射強度 I_0 のレーザー光をノズル内に入射し増幅された出力光の強度 $I_0 + \Delta I_0$ を測定し

$$G_0 = \frac{1}{L_w} \ln \frac{I_0 + \Delta I_0}{I_0} \quad (5.1)$$

という関係式から微小信号利得係数を算出している。 L_w はノズル(媒質)の幅、 I_0 は入射光強度、 $I_0 + \Delta I_0$ は出力光強度である。従って実験と比較するには 2 次的に示したものが適当である。スロートから後方 30mm の位置での測定結果は約 0.5m^{-1} [4] である。これに対し計算で得られた利得は 0.8m^{-1} である。全体的な流れ場が良く一致しているのに微小信号利得係数をこのように高めに見積もる原因としては

- 振動緩和時間を含めた熱的モデルの問題
- 流体の組成に CO や O_2 等の不純物を含んでいないこと

等が考えられる。不純物の影響については Tatsumi [13] が数値的に研究しており、その影響は微小信号利得係数を減少させる方向に働く事が報告されている。

一方実験の側からいうと、微小信号利得係数にすると 30% 以上の差があるが、これを光の強度にするとレーザー媒質の幅 L が 138mm なので入射光の強度 1 に対し増幅された強度は微小信号利得係数 0.5m^{-1} で 1.07、 0.8m^{-1} で 1.12 でありその差は僅か 5% である。このように実験による微小信号利得係数の測定が困難なものである事も一因であると考えられる。

5.2 真空中の光の伝播

光共振器内の光の分布がエルミート・ガウス分布で表される事が Li ら [18] によって示されている。それらの分布はエルミート関数の次数 n に合わせて n 次の固有モードと呼ばれる。この光共振器の固有モードの中で最低次のモードで、基本モードとも呼ばれるものがガウス分布である。フレネル数が小さい安定共振器内ではこのガウス分布をもつ光の分布が得

られると考えられる。真空中を伝播するガウス波の複素ポテンシャルは z 方向を伝播方向として

$$\Psi(t, x, y, z) = \Psi_0 \exp(jck_w t - jk_w z) (s/w) \exp \left[-\frac{1}{2} P(x^2 + y^2) + j\varphi \right] \quad (5.2)$$

となる [27]. ここに

$$w = s \sqrt{1 + (z/k_w s^2)^2} \quad (5.3)$$

$$P = \frac{1}{w^2} + j \frac{k_w}{R} \quad (5.4)$$

$$R = z \left[1 + (k_w s^2 / z)^2 \right] \quad (5.5)$$

$$\varphi = \tan^{-1}(z/k_w s^2) \quad (5.6)$$

である。とくに w は輻射強度がビーム中心の $1/e$ となる位置のビーム中心からの距離で、本研究では、これをビーム半径と定義する。ガウス波にはビーム半径 w が最小となるビームウエストが必ず存在するので、上式ではビームウエストを $z = 0$ としている。

平面-凹面鏡からなる安定共振器では平面鏡がビームウエストになり共振条件より平面鏡でのビーム半径 ($s = w$) は

$$s = \sqrt{\frac{f L_{cv}}{k_w^2} \left(2 - \frac{L_{cv}}{f} \right)} \quad (5.7)$$

となる [27]. このビーム半径によるフレネル数は

$$N_F = \frac{s^2}{L_{cv} \lambda} = \frac{1}{2\pi} \sqrt{2 \frac{f}{L_{cv}} - 1} \quad (5.8)$$

と求まる。東京大学工学部航空宇宙工学科の CO_2 GDL 装置で用いられている安定共振器では全反射鏡の焦点距離 f は 0.5m, 光路長 L_{cv} は 0.28m であり、フレネル数 N_F は 0.255 となる。従って、クロスアップリングが十分に単一モード (ガウス分布) のレーザー出力が得られると予想される。

数値計算でも同じ様な分布が得られ、また伝播中に光の全エネルギー

$$I_{total}(z) = ch\nu \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} |\Psi|^2 dx dy \quad (5.9)$$

が保存されなければならない。

以下にこの共振器仕様に対する計算結果を示す。

5.2.1 計算領域および計算格子

光の伝播の計算において注意を払わなければならないことの一つに計算領域と格子間隔のバランスの問題がある。安定共振器で鏡の中心に集まった輻射強度分布が得られるのは凹面鏡の効果である。従って光共振器内の光の伝播の計算では、正確に凹面鏡での反射を取り入れることが重要である。本研究では凹面鏡での反射は式(2.77)で与えられる光の位相変化によって表される。再記すれば

$$\Delta\phi = \frac{k_w}{2f} R^2$$

である。いま格子間隔を δR とすると格子間での位相変化の差は

$$\delta\Delta\phi = \frac{k_w}{f} R\delta R \quad (5.10)$$

となる。この値が大きすぎると凹面鏡の影響を数値的に表現することはできない。極端な場合として $\delta\Delta\phi = \pi$ の場合を考えると位相平面上では π と $-\pi$ は同じなので反射鏡が凹面鏡なのか凸面鏡なのか区別さえつかない。また計算方法が差分法なので格子間の値の差が余りに大きいと数値的な発散により輻射強度が増幅することも考えられる。そこで本研究では $\delta\Delta\phi$ が $\pi/2$ を超えないように計算領域と格子間隔を設定する。ここでは計算領域を鏡の中心を中心とする1辺10mmの正方形とし計算格子は等間隔に 41×41 点とした。また光の伝播方向の格子点数は等間隔に30点としている。

なお、ここでの計算には対称条件を用いていない。

5.2.2 結果および考察

計算は Work Station HP715 でおこなった。初期条件としてはビーム径1mmのガウス分布を与え約100回の往復の後に共振状態が得られた。

図5.17は数値計算から求められた平面鏡および凹面鏡での輻射強度分布である。ただし、平面鏡中心での輻射強度で正規化している。実験装置の平面鏡上のビーム半径は式(5.7)に $f=0.5\text{m}$, $L_{cv}=0.28\text{m}$, $\lambda=10.6 \times 10^{-6}\text{m}$ を代入することにより0.870mmとなる。これに対し計算によって得られたビーム半径は0.88mmである。また凹面鏡でのビーム半径 w_{cm} は

$$w_{cm} = s\sqrt{\frac{2}{2 - L_{cv}/f}} \quad (5.11)$$

と得られ1.025mmであるのに対し計算によって得られた半径は1.02mmであり両者は良く一致している。

計算によって得られた共振器内のビーム半径の変化を図5.18に示す。平面鏡から凹面鏡までビームが徐々に太くなる様子が再現されている。

図5.19は半透過鏡での位相分布である。式(5.2)から分かるように平面鏡上でガウス波は平面となる(位相が揃う)。計算で得られた位相分布は計算領域の端付近以外ではほぼ平面である。特に鏡の中心から2.5mm程度の所までは全く平面となっている。計算領域の端付近で位相がずれる原因としては、外側境界で複素振幅を0としていること、境界近くでは複素振幅が非常に小さいことによる計算誤差の影響が考えられる。しかし図5.17の輻射強度分布からも明らかなように鏡の中心から4mmの位置になると輻射強度は中心の 10^{-9} 程度となり、端付近での位相のずれを問題にする必要はない。図5.20は全体エネルギーの変化である。この計算の場合には徐々に減少している。しかし1往復する間の光のエネルギーの変化は全体の約 2×10^{-7} であり、全エネルギーの保存は十分であるといえる。

以上のことから光共振器系のモデル及び数値計算方法は実用に耐えるものと判断される。

5.3 まとめ

本章ではCO₂GDLのレーザー出力の計算に必要な2つの要素

- 超音速ノズル内の分子振動非平衡流れ
- 光共振器内の光の伝播

をそれぞれ個別に数値解析する事によって次のことが分かった。

- 超音速ノズル内の分子振動非平衡流れの計算について
 1. 陰的な時間積分と高精度 TVD スキームを用いることにより、安定に定常解を求めることができた。
 2. 計算結果は C. C. ノズル内の全体的な流れ場を良く再現しており、実験でのカラーシュリーレン写真や壁面圧力測定結果と良い一致を示した。
 3. 流れ場はノズル側壁付近を除いてほぼ2次的である。

4. 乱流の影響を2方程式渦粘性モデルによって考慮したが、本研究においてはその影響は殆んど見られなかった。

5. 計算は微小信号利得係数を実験よりも高めに見積もった。この原因としては作動流体に CO_2 , N_2 , H_2O 以外の O_2 , CO といった不純物を含んでいないこと、振動緩和モデルの不備等の影響が考えられる。また実験での測定誤差もその一因と考えられる。

● 光共振器内の光の伝播の計算について

1. 真空の光共振器内の光の伝播を数値的に解き共振状態を得ることができた。

2. 共振状態で得られた光の分布はガウス分布で、その形は光共振器の仕様から理論的に決まる形とほぼ一致した。

3. 光のエネルギーが数値的誤差で増減することは殆ど無く本研究で用いた計算方法のエネルギーの保存性は十分である。

第 6 章

レーザー出力計算

第 5 章で超音速ノズル内の分子振動非平衡流れと光共振器内の光の伝播がそれぞれ数値的に解析できることが確認されたので、本章ではそれら 2 つを組み合わせ CO_2 GDL のレーザー出力の計算を試みる。

代表的な貯気槽条件、ノズル形状、共振器仕様に対し出力計算を行ない実験結果と比較検討する。

6.1 計算モデル

実際の GDL 装置では光学鏡はノズル壁に取り付けられているのではなく、気流からの保護のために図 6.1 に示すようにキャビティーの奥に取り付けられている。このようなキャビティー流れではキャビティー前縁からの剪断層によって流路が狭められ流れは圧縮されるが、その影響はさほど大きくないと予想される。本研究ではこの予想をもとに簡単のために光学鏡がノズル壁に取り付けられているとする。この際問題となるのは光路長がキャビティー分だけ短くなることである。ビームの光学的性質を実験条件と同じにするにはフレネル数を一致させる必要がある。またレーザー出力を推算するためにはビーム半径を合わせる必要もある。実際のノズルの幅を L_w 、共振器の光路長を L_{cv} 、凹面鏡の焦点距離を f とする時、フレネル数を合わせるために計算上での凹面鏡の焦点距離 f' を

$$f' = f \cdot \frac{L_w}{L_{cv}} \quad (6.1)$$

とする。またビーム径を合わせるために計算上での光の波長 λ' を

$$\lambda' = \lambda \cdot \frac{L_{cv}}{L_w} \quad (6.2)$$

とする。

6.2 計算条件

6.2.1 ノズル形状および貯気槽条件

ノズル形状および貯気槽条件は 5.1節と同じである。

6.2.2 共振器仕様

光共振器の仕様としては表 6.1 に示す 4 ケースについて計算を行なった。再記すると平面鏡の反射率と光路長は全ケース一定でそれぞれ 98% と 280mm、凹面鏡の焦点距離については 0.5m と 4.0m の 2 ケース、光共振器の位置としては焦点距離 0.5m の場合について鏡の中心がスロートから 27.5, 30.0, 32.5mm の位置の 3 ケース、焦点距離 4m の場合は 30.0mm としている。

6.2.3 計算格子

計算格子はケース 1~3 には 5.1 と同じ計算格子を用いた。ケース 4 に用いた計算格子は格子点数は同じであるが、光共振器付近の格子間隔は約 0.4mm としている。なお、光の伝播の計算領域は、ケース 1~3 で鏡の中心から 4mm の範囲、ケース 4 で 7.5mm としている。

6.3 結果および考察

計算は航空宇宙技術研究所の NWT の 1PE を用いて行った。流体の計算 1 ステップと光の伝播 1 往復を交互に計算することにより、レーザー発振していない状態から約 1000 回の繰り返し計算で収束解を得た。

6.3.1 凹面鏡焦点距離 0.5m の場合

ケース 1

図 6.2 にケース 1 の半透過鏡から取り出される輻射強度分布を示す。これを積分して得られるレーザー出力は 18.2W となる。強い輻射強度は共振器の中心付近に集中しており、流体

と光の方程式を組み合わせる場合も、光の方程式のみを解いた場合と同じく光共振器の特性を良く再現した結果が得られている。

図 6.3 は平面鏡上での輻射強度および位相の等値線図である。位相の等値線間隔は 1deg である。5.2 に示したように光共振器内が真空とした場合は平面鏡上での光の位相は揃っていたが、光共振器内部にレーザー媒質がある場合は位相は揃わないことが分かる。これは流体中の密度分布が一様でない事も 1 要因であるが、後に示すようにレーザー発振に伴い微小信号利得係数分布の非一様性が激しくなることが主な原因である。

図 6.4 はレーザー発振している時の微小信号利得係数分布であり、これを光軸方向に積分し 2 次元的に示した分布が図 6.5 である。図 6.5(b) から明らかなように、レーザー発振位置では利得は減少しレーザービームの中心付近では 0 近くまで減少するが、輻射強度がピーク値となった辺りから増加し始め、下流ではレーザー発振しない場合の 70% 程度まで回復している。

この利得が回復する原因について考えてみる。レーザー発振位置では誘導放出に伴う $\text{CO}_2(\nu_3)$ から $\text{CO}_2(\nu_1)$ へのエネルギー遷移（レーザー遷移）により $\text{CO}_2(\nu_3)$ が失活し $\text{CO}_2(\nu_1)$ が励起される。このため $\text{CO}_2(\nu_3)$ と $\text{CO}_2(\nu_1)$ の振動モード間の数密度反転の程度が下がり利得が減少する。一度減少した利得が回復するのは N_2 の影響が大きい。 $\text{CO}_2(\nu_3)$ の失活に伴い $\text{N}_2(\nu_N)$ から $\text{CO}_2(\nu_3)$ へのエネルギー遷移が活発となり $\text{CO}_2(\nu_3)$ は $\text{N}_2(\nu_N)$ によって励起される。輻射強度がピーク値を過ぎた辺りから下流ではレーザー遷移による $\text{CO}_2(\nu_3)$ の失活よりも $\text{N}_2(\nu_N)$ による励起が上回りはじめ $\text{CO}_2(\nu_3)$ と $\text{CO}_2(\nu_1)$ の振動モード間の数密度反転の程度が回復する。また $\text{CO}_2(\nu_1)$ が緩和によって失活するのも数密度反転の程度を回復させる要因の一つである。

これらのことは振動温度の分布からも理解できる。図 6.6 ~ 6.9 はそれぞれノズル内の並進温度、 $\text{CO}_2(\nu_{12})$ の振動温度、 $\text{CO}_2(\nu_3)$ の振動温度、 $\text{N}_2(\nu_N)$ の振動温度の等値線図である。等値線の間隔は 50K としている。 $\text{CO}_2(\nu_3)$ の振動温度はレーザー発振位置で大きな変化を起こしていることが分かる。見通しを良くするためにノズル中心線上の振動温度分布を示したのが図 6.10 である。レーザー発振位置では $\text{CO}_2(\nu_3)$ の振動温度は急激に下がり、 $\text{CO}_2(\nu_{12})$ の振動温度はわずかに上昇している。これは誘導放出に伴うレーザー遷移を表している。また $\text{N}_2(\nu_N)$ の振動温度はレーザー発振位置では他の領域よりも急な勾配で降下している。これはレーザー発振位置では $\text{N}_2(\nu_N)$ は $\text{CO}_2(\nu_3)$ に他の領域よりも多くのエネルギーを供給

し続けていることを示している。

光を粒子として扱い共振器内を1往復する間の増幅分と外部に取り出される輻射エネルギーが釣りあうとして求められるレーザー発振時の微小信号利得係数 G_t は r_1, r_2 を反射鏡の反射率として

$$G_t = \frac{1}{2L} \ln \frac{1}{r_1 r_2} \quad (6.3)$$

となる。 G_t はレーザー発振のためのしきい値とも呼ばれる。今 $L = 0.138\text{m}$, $r_1 = 1.0$, $r_2 = 0.98$ とすると G_t は 0.073m^{-1} となる。図6.5(b)に示すようにビームの中心での微小信号利得係数は 0.01m^{-1} 程度であり G_t よりもかなり小さい値でレーザー発振している。これは光の回折によってエネルギーがビーム中心に集められるため、その分レーザー媒質による増幅は少なくて済むためである。

図6.6の並進温度分布はレーザー発振しない場合の並進温度分布図5.11と殆ど一致している。これはレーザー発振は全体的な流れ場には影響を及ぼさないことを示している。このことは図6.10において並進温度だけはレーザー発振位置で特別な変化がないことから分かる。

また3次元的に示した図から分かるようにレーザー発振がある場合も5.1節に示したレーザー発振がない場合と同様に、微小信号利得係数分布、振動温度分布とも2次元である。これは本計算で用いた共振器仕様では5.2節に示したように伝播方向のビーム径の変化が小さく、全体的な流れ場からみれば伝播方向にビーム径がほぼ一定だからである。

共振器位置に対する出力特性

図6.11には共振器の位置に対するレーザー出力の変化を調べた結果を示す。実験結果では共振器の位置が後方になるほどレーザー出力が低下するという傾向がある。計算でも絶対値に多少の違いはあるが同様の傾向が捉えられている。図5.10に示したレーザー発振のない場合の微小信号利得係数はスロートから35mm程度の位置まで増加している。この結果はスロートから35mm 辺りまでは共振器位置が後ろにあるほどレーザー出力が増加すると予想させる。しかしながらレーザー出力の実験結果および計算結果ともにその逆の結果となっている。

この原因について考えてみる。輻射強度が増幅するとレーザー遷移により $\text{CO}_2(\nu_3)$ の数密度が減り $\text{CO}_2(\nu_1)$ の数密度が増すため微小信号利得係数が減少する。逆に輻射強度が減衰

すると微小信号利得係数は増加する。流体内の輻射強度と微小信号利得係数はこの過程がバランスするように決まる。レーザー遷移による単位質量当たりの $\text{CO}_2(\nu_3)$ の振動エネルギーの減少および $\text{CO}_2(\nu_1)$ の振動エネルギーの増加は流体の密度に反比例する。従って数密度の増加減少も密度にほぼ反比例すると考えられる。このため密度が小さいほど輻射強度が増幅した際の微小信号利得係数の減少が激しく、バランスする輻射強度が小さくなる。圧縮波の上流では膨張し続けているので下流ほど密度が小さく、この効果が元々微小信号利得係数が大きい効果を上回り、共振器位置が下流になるほどレーザー出力が減少すると考えられる。

定量的にはケース 1.3 では計算は過大評価している。この理由のとしては微小信号利得係数を計算では過大評価すること、また計算では光学鏡の歪みや光軸のずれ等の実験誤差を見積もれていないことが考えられる。逆にケース 2 では計算が実験結果よりも出力を小さく見積もっているが、これは実験条件の貯気槽温度が約 1300K と計算に用いた貯気槽温度 1200K よりも高いためである。

6.3.2 凹面鏡焦点距離 4.0m の場合

焦点距離が長い凹面鏡を用いるとビームの径が太くなるのでレーザー出力も増加する予想される。そこで凹面鏡の焦点距離を実験機の 8 倍の 4.0m とした場合について計算した。なおこの場合のフレネル数は 0.84 である。

図 6.12 は半透過鏡での輻射強度分布である。ケース 1 の場合と比べて太いビームが得られ、レーザー出力としては 46.0W が得られている。図 6.13 は平面鏡上での輻射強度および位相の等値線図である。輻射強度の最大値は凹面鏡の焦点距離が 0.5m の場合に比べやや小さいが、これはビーム径が太いためビーム中心に到達する前に流体が失うエネルギーが大きいこと、フレネル数が大きいこと回折によるエネルギーの供給が少ないためと考えられる。また輻射強度が最大となる位置がやや上流に移動していること、位相のずれが著しいことも分かる。

図 6.14~6.20 に微小信号利得係数分布、および振動温度分布を示すがビーム径が太いために広い範囲でレーザー発振の影響があること以外はケース 1 とほぼ同様の結果となっている。

6.4 まとめ

本章では超音速ノズル内の分子振動非平衡流れと光共振器内の光の伝播を組み合わせ、数値解析することによって CO_2GDL のレーザー出力を計算した。その結果次のことが分かった。

1. 光共振器の仕様を反映した平面鏡上での輻射強度分布が得られた。
2. 真空の共振器の場合と異なり、出力光の位相は揃わない。これはレーザー発振によって微小信号利得係数に強い非一様性が生じたためである。
3. 計算結果はレーザー発振に伴う $\text{CO}_2(\nu_3)$ から $\text{CO}_2(\nu_1)$ への振動エネルギーの移動およびそれによって活性化される $\text{N}_2(\nu_N)$ から $\text{CO}_2(\nu_3)$ へのエネルギー供給といった物理現象を良く再現している。
4. 計算で得られたレーザー出力は実験結果と概ね良好な一致を示した。ただし定量的には実験結果よりも高めに見積もっている。この原因としては5.1に示したように計算が微小信号利得係数を過大評価すること、また光学系の微妙なずれを見積もっていないことが考えられる。
5. レーザー発振がある場合もノズル内の様子はほぼ2次元的であった。これは本計算で用いた共振器仕様では伝播中のビーム径の変化が小さいためである。

以上の結果は第2章に示した物理モデルおよび第4章に示した計算方法の妥当性を示すものであり、本研究で開発した計算コードが CO_2GDL のレーザー出力を予測する能力を十分備えていることを示すものである。

第7章

パラメトリックスタディ

前述の通り共振器内が真空とした場合、光路長 0.28m、凹面鏡焦点距離 0.5m の安定共振器においては平面鏡でのビームの径は 0.87mm、凹面鏡でのビームの径は 1.025mm であり、その比は 1.18 である。この差は流れ場全体から見れば非常に小さく、ほぼ一定と取り扱えると考えられる。実際、図 5.9 の微小信号利得係数分布は光が伝播する方向にほぼ 2 次的である。そこで流体は 2 次元として扱う簡便なレーザー出力計算が可能であると考えらる。

この方法では光に関しては光軸方向に並べられた 2 次元流れの中を伝播するとすればよい。流体の計算においては、実際には 3 次的に変化する輻射強度をどの様に 2 次元計算に組み込むかという問題があるが、本研究では簡単に光の伝播を解いた後で、伝播方向に輻射強度を平均化することで 2 次的な輻射強度分布を得ることとする。また、流体を 2 次元として扱うと、ノズル側壁の境界層の影響を考慮できないが、境界層厚さはノズル幅と比べ非常に薄いのでその影響は非常に小さいと考えられる。実際 6 章のケース 1 に対してこの方法を用いて計算した出力は 18.4W であり、流体を 3 次元計算で求めた場合との差は 0.2W、割合にして 1% 程度である。

本章ではノズル形状を 6 章に示した C.C. ノズルとし、貯気槽条件、共振器仕様に対する出力特性を求める。

7.1 貯気槽条件に対する出力特性

7.1.1 貯気槽圧力に対する出力特性

貯気槽圧力が低い程微小信号利得係数が高くなる事が数値計算で予測されている [42]。そこで、ここでは貯気槽圧力に対する出力特性を調べた。貯気槽圧力以外の諸量は以下の通り

定めた。

貯気槽温度	1200K
作動流体組成比 (体積分率)	CO ₂ :N ₂ :H ₂ O = 10:85:5
光共振器位置	鏡中心がスロートから 30mm
透過鏡の反射率	98%
凹面鏡の焦点距離	$\begin{cases} 0.5\text{m} \\ 4.0\text{m} \end{cases}$

図 7.1 は貯気槽圧力に対する微小信号利得係数の特性である。なお微小信号利得係数はノズル対称線上スロートから 30mm の位置 (鏡中心) での値である。この図から明らかなように微小信号利得係数は貯気槽圧力に対し敏感で貯気槽圧力が低い程微小信号利得係数は高いという特性を示す。これは圧力が低いほど分子の衝突が少ないため流れの非平衡度が高く数密度反転を起こしやすいからである。

一方、図 7.2 は貯気槽圧力に対するレーザー出力特性である。この図から分かるように、凹面鏡の焦点距離が 0.5m の場合レーザー出力は殆ど貯気槽圧力には依存しない。また焦点距離が 4.0m の場合も実際の作動条件の範囲 20~30atm ではレーザー出力の貯気槽圧力に対する依存性は殆ど無い。これは 6 章の共振器位置に対する出力特性で述べた通り、密度が小さいとレーザー発振による微小信号利得係数の減少の度合いが激しいという事と、元々の利得が高いことが相殺しているためと考えられる。

7.1.2 貯気槽温度および流体組成に対する出力特性

レーザー出力は貯気槽圧力に対してはあまり敏感で無いということが分かったので、ここでは貯気槽圧力を固定して、貯気槽温度および流体の組成に対するレーザー出力の特性を調べる。ただし、東京大学工学部航空宇宙工学科の CO₂GDL 装置では作動流体をベンゼン (C₆H₆) の燃焼によって生成した CO₂ と H₂O に N₂ を加えることによって得ているので CO₂ と H₂O の体積分率の比は 2:1 とし残りは N₂ であるとする。従って流体の組成比は CO₂ の体積分率によって決まり

$$X_{\text{H}_2\text{O}} = \frac{1}{2} X_{\text{CO}_2} \quad (7.1)$$

$$X_{\text{N}_2} = 1.0 - (X_{\text{CO}_2} + X_{\text{H}_2\text{O}}) \quad (7.2)$$

である。その他の諸条件は以下の通り。

貯気槽圧力	21atm
光共振器位置	鏡中心がスロートから 30mm
透過鏡の反射率	98%
凹面鏡の焦点距離	$\begin{cases} 0.5\text{m} \\ 4.0\text{m} \end{cases}$

図 7.3は貯気槽温度と CO_2 の体積分率に対する微小信号利得係数の特性を調べた結果で、縦軸に貯気槽温度、横軸に CO_2 の体積分率をとり、微小信号利得係数の等値線を描いている。ただし微小信号利得係数は鏡中心位置で評価している。微小信号利得係数は貯気槽温度 1500K、 CO_2 の体積分率 7% 辺りで最大値約 1.5m^{-1} がとなることが分かる。

図 7.4, 7.5はそれぞれ凹面鏡の焦点距離を 0.5m, 4.0m とした場合の貯気槽温度と CO_2 の体積分率に対するレーザー出力の特性を調べた結果である。図 7.4に示す焦点距離が 0.5m の場合は貯気槽温度 1450K、 CO_2 の体積分率 6% 辺りでレーザー出力が最大となる。また図 7.5に示す焦点距離が 4.0m の場合は貯気槽温度 1400K、 CO_2 の体積分率 6% 辺りで最大となる。どちらの場合もほぼ同じ条件でレーザー出力最大となるが、微小信号利得係数が最大となる条件よりも貯気槽温度は低く、 CO_2 の体積分率は小さい条件となっている。これは主に $\text{N}_2(\nu_N)$ から $\text{CO}_2(\nu_3)$ へのエネルギー遷移の影響と考えられる。前述の通りレーザー遷移が起こると $\text{N}_2(\nu_N)$ から $\text{CO}_2(\nu_3)$ へのエネルギーの供給が活発になる。 $\text{N}_2(\nu_N)$ から $\text{CO}_2(\nu_3)$ へ供給されたエネルギーは $\text{CO}_2(\nu_1)$ へのレーザー遷移を通じてレーザー出力として取り出される。従って、このエネルギーの供給がレーザー出力に与える影響は大きいことが分かる。

CO_2 の体積分率について言えば、 CO_2 の体積分率が小さい程 N_2 の体積分率は大きいので $\text{CO}_2(\nu_3)$ へのエネルギーの供給源が大きくなる。そのため出力を最大にする CO_2 の体積分率は微小信号利得係数を最大にする CO_2 の体積分率よりも多少小さい値になるものと考えられる。

次に貯気槽温度について考える。貯気槽温度が 1000~1500K の範囲では、超音速ノズルによる急膨張によって気流の温度は急激に低下し、例えば図 5.15に示すように共振器位置辺りの温度は 200~300K となる。図 7.6には温度変化による $\text{N}_2(\nu_N)$ と $\text{CO}_2(\nu_3)$ の間の振動緩和時間の変化を示すが、300K 以下の温度範囲では温度が低いほど $\text{N}_2(\nu_N)$ と $\text{CO}_2(\nu_3)$ の間の振動緩和時間は短くなっている。すなわち 2つの振動モード間のエネルギー遷移が活発になることを示している。この影響で出力を最大にする貯気槽温度は微小信号利得係数を最大にする貯気槽温度よりも低くなると考えられる。

図 7.7には作動流体組成に対するレーザー出力特性を計算と実験とで比較して示す、ただし実験では燃焼によってCO₂を得ているため、CO₂の体積分率と貯気槽温度の間には相関関係があり分離して扱うことはできない。そこで計算条件として、実験データ [4] から得られた貯気槽温度とCO₂の体積分率の関係式

$$T_c = 41.7 \times X_{\text{CO}_2} + 850 \quad (7.3)$$

を用い実験と比較した。定量的には過大評価しているが、CO₂の体積分率が約9%で最大値をとるといった傾向は捉えられている。

7.2 共振器仕様に対する出力特性

7.2.1 凹面鏡の焦点距離に対する出力特性

装置に用いられている共振器が安定共振器なのでフレネル数が1程度までの範囲で計算した。なお焦点距離8.0mでフレネル数1.2である。貯気槽条件およびその他の共振器仕様は以下の通り。

貯気槽温度	1200K
貯気槽圧力	21atm
作動流体組成比(体積分率)	CO ₂ :N ₂ :H ₂ O = 10:85:5
光共振器位置	鏡中心がスロートから30mm
透過鏡の反射率	98%

図 7.8の実線が凹面鏡の焦点距離に対する出力の変化である。焦点距離が長い程出力が増加することが分かる。これは焦点距離が長い程ビーム径が大きくなり広い範囲でレーザー光を取り出せるからである。ビーム径 s はおおよそ式 (5.7) で決まるのでレーザー出力 P はその自乗に比例し

$$P \propto s^2 = \sqrt{\frac{1}{k_w^2}(2fL_{cv} - L_{cv}^2)} \quad (7.4)$$

となると考える。これに基づいて焦点距離0.5mでの値から推算した出力が破線である。焦点距離が長くなるに従って破線は実線から大きく離れていく。これはレーザー発振によって流体が輻射エネルギーに変換可能な振動エネルギーを失う効果で、ビーム径が大きくなると流体が失う振動エネルギーが大きく全体的に輻射強度の増幅が抑えられるからである。

7.2.2 ノズル幅に対する出力特性

図 7.9 はノズルの幅に対するレーザー出力特性である。なお本研究では第 6 章で述べたようにノズル側壁に光学鏡が取り付けられていると問題を単純化しているのでノズル幅 L_n と光路長 L_{cv} の比を一定に保ち、

$$\frac{L_w}{L_{cv}} = \frac{138.0}{280.0} \quad (7.5)$$

としている。諸条件は以下の通り。

貯気槽温度	1200K
貯気槽圧力	21atm
作動流体組成比 (体積分率)	CO ₂ :N ₂ :H ₂ O = 10:85:5
光共振器位置	鏡中心がスロートから 30mm
透過鏡の反射率	98%
凹面鏡の焦点距離	$\begin{cases} 0.5\text{m} \\ 4.0\text{m} \end{cases}$

ノズル幅の変化は光路長の変化と同意であるが、ノズルの 2 次元的な形状は一定なので流量の変化と考えることもできる。この観点からするとレーザー出力は流量に比例して増加するのではなく指数関数的に急激に増加するといえる。これはノズル幅を広げることによって装置の効率が飛躍的に上昇することを示している。

7.3 まとめ

本章では流体の支配方程式に 2 次元方程式を用いる簡便なレーザー出力計算コードを用いて貯気槽条件、共振器仕様に対するレーザー出力特性を予測した。その結果、以下のことが分かった。

● 貯気槽条件に対するレーザー出力特性

1. 微小信号利得係数は貯気槽圧力に対して非常に敏感で圧力が低いほど高い値が得られるのに対しレーザー出力はあまり敏感でない。これはレーザー発振時には圧力が低く密度が小さい程、微小信号利得係数の減少が激しいからである。
2. 貯気槽温度および作動流体組成比のレーザー出力に対する最適条件は貯気槽温度 1400K、 $X_{\text{CO}_2} = 6\%$ 程度であり、微小信号利得係数に対する最適条件と比べると貯気槽温度は低く X_{CO_2} は小さい。これはレーザー発振時には N₂(ν_N) から CO₂(ν_3)

へのエネルギー供給が重要となり、このエネルギー遷移を活発とする方向に最適条件が移動するためである。

● 共振器仕様に対するレーザー出力特性

1. 凹面鏡の焦点距離長くすることによってレーザー出力は向上する。ただし焦点距離が長くなるとビーム径が太くなり流体が失うエネルギーが大きくなるためレーザー出力の増加は徐々に鈍くなる。
2. ノズルの幅を広げ光路長を長くすることにより飛躍的なレーザー出力能率向上が期待できる。

第 8 章

結論

本研究では超音速ノズル内の分子振動非平衡流れと光共振器内の光の伝播を数値的に解析する計算方法を確立し、その 2 つを組み合わせることにより CO_2 ガスダイナミックレーザーの出力を推算した。第 2 章で示したモデルに基づく第 4 章で示したレーザー出力計算方法は次の要素を兼ね備えている点で従来の方法よりも優れている。

- (1) 超音速ノズル内の流れを正確に解いている。

流れ場の支配方程式は 2 方程式乱流モデルを用いたレイノルズ平均 3 次元ナビエ-ストークス方程式と CO_2 - N_2 系の振動緩和方程式を組み合わせた方程式で更に光とのエネルギーの交換の項も含んでいる。これを風上差分に基づく高精度 TVD スキームを用いて空間方向に離散化し LU-ADI 法等の陰的な方法によって時間方向にすることにより、流れ場を正確に効率良く解いている。

5.1 節では超音速ノズル内の流れ場を数値的に解き、実験結果と比較することによって、解析方法の妥当性を確認した。微小信号利得係数をやや高めに予測するが全体的な流れ場は実験と非常によく一致を示した。なお、乱流の影響を 2 方程式渦粘性乱流モデルを用いて考慮したが、本研究においては乱流の効果は殆んど見られなかった。

- (2) 光を平面波として扱うことにより光共振器の仕様を与えるだけでその中の輻射強度分布を計算することができる。

光の伝播を平面波の伝播として扱い、伝播の方程式としては波動方程式から導かれた光の回折、屈折、増幅を考慮した方程式を用いた。計算方法としては流体の計算と同じく差分法を用い繰り返し計算によって共振状態を求めた。

5.2節では真空の安定共振器内の光の伝播を解き、解析解と比較することによって、計算方法の確認をおこなった。フレネル数の小さい安定共振器に対して共振器の基本固有モードであるガウス分布が得られ、また共振器内伝播中に輻射エネルギーを正確に保存することが確認された。

(3) 流体と光の相互作用を考慮している。

流体の計算と光の伝播の計算を交互に計算し、互いに必要なデータを受け渡ししながら双方の満たすべき条件が満たされるまで計算を行っている。

この計算コードを用いて東京大学工学部航空宇宙工学科のCO₂GDL装置に対するレーザー出力計算をおこなった結果以下のことが分かった。

- (1) 実験結果と比較して妥当なレーザー出力値が得られ、また輻射強度分布も光共振器の特性を良く再現しており、本研究で開発したCO₂GDLの出力計算コードの有効性が確認された。ただし輻射強度の分布は実験では確認されておらず、その比較は今後の課題である。
- (2) 真空の共振器内の発振モードでは平面鏡上での光の位相は揃うのに対し、レーザー媒質がある場合には位相分布にズレが見られた。これはレーザー発振の影響で微小信号利得係数分布に強い非一様性が生じた結果である。
- (3) 超音速ノズル内の全体的な流れ場はレーザー発振に影響されない。
- (4) レーザー発振時でも振動温度分布および微小信号利得係数分布はほぼ2次元的な分布を示した。これは後述の流体を2次元として扱う簡便なレーザー出力計算法の妥当性を示している。

次に流体を2次元として扱う簡便なレーザー出力計算法によって、貯気槽状態、光共振器仕様に対するレーザー出力特性を調べた。その結果以下のことが予測された。

- (1) 微小信号利得係数は貯気槽圧力に対して非常に敏感で貯気槽圧力が低いほど微小信号利得係数は高いが、レーザー出力の貯気槽圧力への依存性は小さい。
- (2) 貯気槽温度および作動流体組成比のレーザー出力に対する最適条件は貯気槽温度1400K、 $X_{CO_2}=6\%$ 程度で微小信号利得係数に対する最適条件と比べると貯気槽温度は低く

X_{CO_2} は小さい。これはレーザー発振時には $\text{N}_2(\nu_{\text{N}})$ から $\text{CO}_2(\nu_3)$ へのエネルギー供給が重要となり、このエネルギー遷移を活発とする方向に最適条件が移動するためである。

- (3) 凹面鏡の焦点距離を長くするとレーザー出力が増大する。
- (4) ノズルの幅を広げることにより飛躍的なレーザー出力の向上が期待できる。

CO_2GDL の性能向上に向け、ノズルの複数化、不安定共振器の使用が考えられる。最後にこれらの場合について本研究の有効性について述べる。また、装置改良による作動条件の変化を考慮し、本研究で用いた解析方法の適用範囲についても触れる。

(1) ノズルの複数化について

本研究で計算対象とした CO_2GDL では単一の超音速ノズルによって作動流体を急膨張させているが、これにかわって小型の超音速ノズルを複数個並べる形態も考えられる。これはノズルを小型化することにより膨張時間を短くし流れの非平衡度を高め大きな利得が得られることを利用し、小型化による流量の減少をノズルの複数化により補うものである。このような形態の CO_2GDL に対しても計算機の能力があれば本研究で用いた解析方法は基本的には有効であると考えられる。ただし隣合うノズルとの干渉により流れ場が非定常となる可能性がある。この様に流れ場が非定常になる場合には、本研究で用いた時間精度を持たない流れ場の計算方法では当然解析することは出来ないので時間精度を維持する計算方法を用いる必要がある。一方、光の伝播に関しては、光の速さが流体の変化する速度に比べると無限に速いと考えられるので準定常と考えることができ、流れ場は非定常となっても、本研究で用いた解析方法が有効である。

(2) 不安定共振器の使用について

本研究で計算対象とした CO_2GDL 装置では光共振器として安定共振器を用いている。これは安定共振器は回折損失が少ないからである。しかし安定共振器では共振状態でのビームの径が非常に小さく、その結果ノズル内の流体のごく一部しか利用できない。レーザー出力向上のためには利用する流体の体積を増加させることが不可欠で、

そのためにはノズル幅を広くすること、凹面鏡の焦点距離を長くすることが考えられる。しかしながら、ノズル幅の拡大に関しては装置規模による制限があり、また凹面鏡の焦点距離に関してはフレネル数による制限がある。これらのことから安定共振器による出力の飛躍的な向上は期待できないと予測される。これに対し不安定共振器を用いた場合は利用できる流体の体積も大きく、また単一モード発振も得られやすい [26]。従って、大出力を実現する1つの手段として、光共振器として不安定共振器を採用することが考えられる。不安定共振器を用いた装置の計算の場合に問題となるのは、反射鏡外部に逃げていく光があるため鏡の端では輻射強度に不連続が生じることである。本研究で用いた計算方法は差分法であり光の伝播方程式の解法は線形安定しか保証しないので鏡端での不連続には対応できない。しかし、この問題は、鏡端に計算格子点を集め、鏡端付近では反射率が滑らかな関数に従って0になると仮定することによって解決できる可能性はある。また、格子間隔が小さくなると式(4.108)から分かるように光の伝播方向の積分幅は急激に小さく制限されるという問題が生じるが、これは光の伝播方程式の積分を陰的に行うことで解決できるであろう。この様に、不安定共振器に対しても本論文で用いた解析方法を若干修正することで出力計算は可能であると考えられる。

以上に示した様な今後の装置改良に伴い、第7章に示したレーザー出力特性に変化が生じることは明らかである。特に、装置改良によって振動-輻射のエネルギー交換効率が上がった場合、レーザー出力に対する最適条件は流体の持つ振動エネルギーが大きい貯気槽温度が高い方向に移動すると予想される。

本研究が対象とした実験装置では貯気槽温度の最適値は1300~1400Kであったが、貯気槽温度が上がると、2000K程度の場合になるとCO₂分子のうち約1%が、2250K程度になると約5%が解離する [5]。このように2000Kを超えたあたりから解離の影響が急激に大きくなり、本研究で用いた物理モデルの正当性が失われる。なぜなら、解離により作動流体成分が変化することは勿論のこと、振動モード内における調和振動子とボルツマン分布の仮定の妥当性も薄れるからである。調和振動子の仮定は振動のエネルギー準位が等間隔に無限に存在するという仮定なので、明らかに解離とは相容れない。また、エネルギー準位が高い分子程解離しやすいのでボルツマン分布も保証されない。従って、貯気槽温度が高くなった場合に

謝辞

本研究を進めるにあたり、多くの方々から御指導、御協力を賜りました。

指導教官である久保田弘敏教授には、本論文をとりまとめるに際し、懇切なる御指導、御鞭撻頂きました。ここに感謝の意を表します。

綿貫忠晴助手には久保田研究室における GDL 勉強会他で貴重な御助言、御指導を頂きました。山根佳子さんには日々、励まして頂きました。ここに感謝致します。

航空宇宙技術研究所、和田安弘主任研究官には数値計算を志す動機を与えて頂くとともに、基礎から非平衡流れまで数値計算について御指導頂きました。同研究所、松尾裕一主任研究官には乱流モデルを中心に数値計算全般について御指導頂きました。同研究所、中村孝主任研究官には多くの御助言御示唆を頂きました。同研究所、齊藤茂室長には研修生として受け入れて頂くとともに親切的な御教示を頂きました。また同研究所飛行実験部の方々には多大な御協力を賜りました。ここに感謝致します。

久保田研究室大学院研究生、小倉栄二氏、大学院生、高石武久氏、学部学生、杉田屋友敦氏には実験データを提供して頂きました。どうもありがとうございました。

本研究に御協力頂いた多くの先輩、友人および久保田研究室の人々に深く感謝するとともに厚くお礼申し上げます。

参考文献

- [1] 久保田弘敏, '輻射加熱防衛法研究のための連続出力ガスダイナミックレーザー', 昭和58年度科学研究費補助金成果報告書, 1984.
- [2] Basov, N. G. and Oraevskii, A. N., 'Attachment of Negative Temperatures by Heating and Cooling of a System,' Sov.Phys.JETP, Vol.17, 1963, pp.1171-1172.
- [3] Gerry, E. T., 'Gasdynamic lasers,' IEEE Spectrum, Vol.7,1970, pp.51-58.
- [4] 小倉栄二, '燃焼駆動式 CO₂ガスダイナミックレーザーの出力特性に関する実験的研究,' 東京大学大学院工学系研究科航空学専攻博士論文, 1993.
- [5] Anderson, J. D. , Jr. , 'Gasdynamic Lasers : An Introduction,' Academic Press , New York, 1976.
- [6] Lee, G., Gowen, F. E. and Hagen, J. R., 'Gain and Power of CO₂ Gasdynamic Lasers,' AIAA Journal, Vol.10, No.1 pp.65-71.
- [7] Lee, G., 'Quasi-one-dimensional solution for the power of CO₂ Gasdynamic Lasers,' The Physics of Fluids, Vol.17, 1974, pp.644-649.
- [8] Munjee, S.A., ' Numerical Analysis of a Gasdynamic Laser Mixture,' The Physics. of Fluids, Vol.15, No.3, 1972, pp.506.
- [9] Maeno, K. , 'A Note of Vibrational Rate Equations for CO₂-N₂ System Applied to CO₂ Gasdynamic Laser,' Memoirs of the Muroran Inst.Tech.Vol.10, pp.555-576, 1982.
- [10] Taylor, R. L., Bitterman. S. , 'Survey of Vibrational Relaxation Data for Processes Important in the CO₂-N₂ Laser System,' Reviews of Modern Physics, Vol.41, No.1,

pp.26-47, 1969.

- [11] 綿貫忠晴, 小倉栄二, 溝淵泰寛, 佐藤茂, 久保田弘敏, '燃焼駆動式 CO₂ ガスダイナミックレーザーの特性 (I) 超音速ノズル開口比の影響,' 日本航空宇宙学会誌 第36巻 第419号, 1988, pp.550-557.
- [12] Wada, Y., Yamaguchi, M. and Kubota, H., 'Numerical Investigation of Nozzle Shape Effects on CO₂ Gas Dynamic Laser Performance,' AIAA Paper 87-1452, 1987.
- [13] Tatsumi, M., Wada, Y., Sato, S., Watanuki, T. and Kubota, H., 'Numerical Analysis on Gain of C₆H₆-O₂-N₂ Type CO₂ GDL,' Proceedings of the 7th International Symposium on Gas Flow and Chemical Lasers, Vienna, SPIE Vol.1031, pp.166-171, August 1988.
- [14] Mizobuchi, Y., Ogura, E., Watanuki, T. and Kubota, H., 'Numerical Analysis of Vibrational Nonequilibrium Flows in Supersonic Nozzle of CO₂ Gasdynamic Laser,' Proc. of the 9th Int. Symp. on Gas Flow and Chemical Laser, pp.200-203, 1992.
- [15] Chakravarty, P., Reddy, N. M. and Reddy, K. P. J., 'Two-Dimensional Analysis of a 16- μ m CO₂ Downstream-mixing Gasdynamic Laser,' AIAA Journal Vol.25, pp.713-720, 1987.
- [16] Zeitoun, D., Maurel, M., Imbert, M. and Brun, R., 'Numerical Analysis of Mixing of Nonequilibrium Supersonic Flows,' AIAA Journal Vol.29, pp.425-430, 1991.
- [17] 山口直人, 前野一夫, 'CO₂ガスダイナミック・レーザーの出力解析,' 第14回流体力学講演会講演集, 1982, pp.96-99.
- [18] Kogelnik, H. and Li, T., 'Laser Beams and Resonators,' Applied Optics Vol.5, No.10, pp.1150-1567, 1966.
- [19] Siegman, A. E. and Sziklas Edward A., 'Mode Calculations in Unstable Resonators with Flowing Saturable Gain. 1: Hermite-Gaussian Expansion,' Applied Optics, Vol.13, No.12, pp.2775-2792, 1974.

- [20] Sziklas Edward A. and Siegman, A. E., 'Mode Calculations in Unstable Resonators with Flowing Saturable Gain. 2:Fast Fourier transformation method,' *Applied Optics*, Vol.14, No.8, pp.1874-1889, 1975.
- [21] Rensch, D. B., 'Three-Dimensional Unstable Resonator Calculations with Laser Medium,' *Applied Optics*, Vol.13, No.11, pp.2546-2561, 1974.
- [22] Vincenti, W. G. and Kruger, C. H., 'Introduction to Physical Gas Dynamics,' John Wiley & Sons, Inc., New York, 1965.
- [23] Anderson, D. A., Tannehill, J. C. and Pletcher, R. H., 'Computational Fluid Mechanics and Heat Transfer,' Hemisphere Publishing Corporation, 1984.
- [24] 松尾裕一, '様々な乱流モデルの実用問題への適用と比較,' 第 22 期年会講演会講演集, 1991, pp.20-25.
- [25] Coakley, T. J., 'Turbulence Modeling Methods for the Compressible Navier-Stokes Equations,' AIAA Paper 83-1693, 1983.
- [26] Clark, Peter. O., 'Design Consideration for High Power Laser Cavities,' AIAA Paper 72-708, 1972.
- [27] 伊賀健一, 'レーザー光学の基礎,' オーム社, 1988.
- [28] Pai, Shih-I, 'Radiation Gas Dynamics', Springer-Verlag, New York, 1966.
- [29] Wilke, C. R. , 'A Viscosity Equation for Gas Mixtures,' *Journal of Chemical Physics*, Vol.15, 1950, pp.517-519.
- [30] Harten, A., 'On A Class of Hight Resolution Total-Variation-Stable Finite-Difference Schemes,' *SIAM Journal Numerical Analysis*, Vol.21, No.1, pp.1-23, 1984.
- [31] Roe, P. L., 'Approximate Riemann Solvers, Parameter Vectors, and Difference Schemes,' *Journal of Computational Physics*, Vol.43, pp.357-372, 1981.
- [32] Liu, Y. and Vinokur, M., 'Upwind Algorithms for General Thermo-Chemical Nonequilibrium Flows,' AIAA Paper 89-201, 1989.

- [33] Wada, Y. and Kubota, H. : Numerical Simulation of Re-Entry Flow Around the Space Shuttle with Finite-Rate Chemistry. Journal of Aircraft Vol.29 pp.1049-1056, 1992.
- [34] Chakravarthy, S. R. and Osher, S., 'A New Class of High Accuracy TVD Schemes for Hyperbolic Conservation Laws,' AIAA paper 85-0363, 1985.
- [35] Takakura, Y., Ishiguro, T., and Ogawa, S., 'On the Recent Difference Schemes for the Three-Dimensional Euler Equations,' AIAA Paper 87-1151-CP, 1987.
- [36] Bussing, T. R. A. and Murman, E. M., 'A Finite Volume Method for the calculation of Compressible Chemically Reacting Flows,' AIAA Paper 85-0331, 1985.
- [37] Pulliam, T. H. and Chaussee, D. S., 'A Diagonal Form of an Implicit Approximate Factorization Algorithm', Journal of Computational Physics, Vol.39, pp.347-363, 1981.
- [38] Obayashi, S. and Fujii, K., 'Computation of Three-Dimensional Viscous Transonic Flows with the LU Factored Scheme,' AIAA Paper 85-1510, 1985.
- [39] Watanuki, T., Sato, S., Itakura, Y., Ogura, E., Mizobuchi, Y. and Kubota, H., 'Characteristics of $C_6H_6-O_2-N_2$ type CO_2 Gasdynamic Laser,' Proceedings of 7th International Symposium on Gas Flow and Chemical Lasers, pp.160-164, 1988.
- [40] Baldwin, B. and Lomax, H., 'Thin-Layer Approximation and Algebraic Model for Separated Turbulent Flows,' AIAA Paper 78-257, 1978.
- [41] Nakahashi, K and Deiwert, G. S., 'Self-Adaptive-Grid Method with Application to Airfoil Flow,' AIAA Journal Vol.25, No.4, pp.513-520, 1987
- [42] 溝渕泰寛, '燃焼駆動式 CO_2 ガスダイナミックレーザーの超音速流系に関する数値的研究,' 東京大学大学院工学系研究科航空学専攻修士論文, 1992.

補遺 A

分子振動緩和方程式の導出

分子衝突による振動エネルギーの遷移過程は一般に以下のように書ける [22].

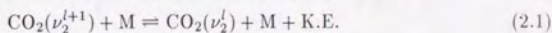
$$\left(\begin{array}{l} \text{単位体積, 単位時間あたりの} \\ \text{エネルギー遷移を起こす分子} \\ \text{衝突の数} \end{array} \right) = \left(\begin{array}{l} \text{単位体積, 単位時間} \\ \text{あたりの分子衝突数} \\ \text{[collision rate]}Z \end{array} \right) \times \left(\begin{array}{l} \text{十分なエネルギー} \\ \text{を有する衝突の割合} \\ \text{[activation factor]}f \end{array} \right) \\ \times \left(\begin{array}{l} \text{十分なエネルギーを有している} \\ \text{衝突のうち実際に遷移を起こす割合} \\ \text{[steric factor]}P \end{array} \right) \quad (\text{A.1})$$

小節 2.1.1 で示された分子振動緩和方程式はこの関係から導く事ができる.

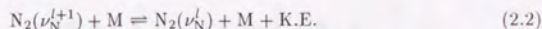
本論文で考慮したエネルギー遷移 (2.1) ~ (2.4) は遷移の形態によって T-V 遷移, 分子間 V-V 遷移, 分子内 V-V 遷移に分けられる. ここではそれらの遷移を記述する方程式が上の関係から導かれることを示す [9].

A.1 T-V 遷移

小節 2.1.1 で示したエネルギー遷移のうち



および



の 2 つは同じ振動モード内のエネルギー遷移であり, 最終的には並進モードと振動モードの間のエネルギー遷移となるので T-V (Translational-Vibrational) 遷移と呼ばれる.

式(A.1)に従うと、振動モード i のエネルギー準位 l にある数密度 $N_{i,l}$ の時間変化を表す主方程式は

$$\begin{aligned} \frac{dN_{i,l}}{dt} = & Z_{iM} N_M N_{i,l+1} f\left[\begin{smallmatrix} l+1 \\ i \end{smallmatrix}\right] P\left[\begin{smallmatrix} l+1 \\ i \end{smallmatrix}\right] - Z_{iM} N_M N_{i,l} f\left[\begin{smallmatrix} l \\ i \end{smallmatrix}\right] P\left[\begin{smallmatrix} l \\ i \end{smallmatrix}\right] \\ & - Z_{iM} N_M N_{i,l} f\left[\begin{smallmatrix} l \\ i \end{smallmatrix}\right] P\left[\begin{smallmatrix} l-1 \\ i \end{smallmatrix}\right] + Z_{iM} N_M N_{i,l-1} f\left[\begin{smallmatrix} l-1 \\ i \end{smallmatrix}\right] P\left[\begin{smallmatrix} l-1 \\ i \end{smallmatrix}\right] \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

と得られる。但し、 $f\left[\begin{smallmatrix} m,n \\ i \end{smallmatrix}\right]$, $P\left[\begin{smallmatrix} m,n \\ i \end{smallmatrix}\right]$ は振動モード i の振動準位 m から n への遷移に対する activation factor および steric factor で各振動モード内における局所平衡と調和振動子の仮定のもと

$$f\left[\begin{smallmatrix} l,l+1 \\ i \end{smallmatrix}\right] = \exp\left(-\frac{\theta_i}{T}\right) \quad (\text{A.3})$$

$$f\left[\begin{smallmatrix} l,l+1 \\ i \end{smallmatrix}\right] = 1 \quad (\text{A.4})$$

$$P\left[\begin{smallmatrix} l,l+1 \\ i \end{smallmatrix}\right] = P\left[\begin{smallmatrix} l+1,l \\ i \end{smallmatrix}\right] \quad (\text{A.5})$$

$$P\left[\begin{smallmatrix} l+1,l \\ i \end{smallmatrix}\right] = (l+1)P\left[\begin{smallmatrix} 1,0 \\ i \end{smallmatrix}\right] \quad (\text{A.6})$$

という関係がある [5]。これらの関係を用いると主方程式 (A.2) は次式となる。

$$\frac{dN_{i,l}}{dt} = Z_{iM} N_M P\left[\begin{smallmatrix} 1,0 \\ i \end{smallmatrix}\right] \left[(l+1)N_{i,l+1} - lN_{i,l} + \exp\left(-\frac{\theta_i}{T}\right) \{lN_{i,l-1} - (l+1)N_{i,l}\} \right] \quad (\text{A.7})$$

一方、振動モード i の単位質量当たりの振動エネルギー e_i^{vib} は

$$e_i^{vib} = \frac{1}{N_i m_i} \sum_{l=0}^{\infty} l h \nu_i N_{i,l} \quad (\text{A.8})$$

と書ける。ここで m_i は i 種分子の質量である。この関係を用いて式 (A.7) を振動エネルギーの時間変化に書換えると

$$\frac{de_i^{vib}}{dt} = \frac{1}{N_i m_i} \sum_{l=0}^{\infty} l h \nu_i Z_{iM} N_M P\left[\begin{smallmatrix} 1,0 \\ i \end{smallmatrix}\right] \left[(l+1)N_{i,l+1} - lN_{i,l} + \exp\left(-\frac{\theta_i}{T}\right) \{lN_{i,l-1} - (l+1)N_{i,l}\} \right] \quad (\text{A.9})$$

となる。上式に総和操作

$$\begin{aligned} \sum_{l=0}^{\infty} \{l(l+1)N_{i,l+1} - l^2 N_{i,l}\} &= \sum_{l=0}^{\infty} (l-1)lN_{i,l} - \sum_{l=0}^{\infty} l^2 N_{i,l} = - \sum_{l=0}^{\infty} lN_{i,l} \\ \sum_{l=0}^{\infty} \{l^2 N_{i,l-1} - l(l+1)N_{i,l}\} &= \sum_{l=0}^{\infty} lN_{i,l} + \sum_{l=0}^{\infty} N_{i,l} \end{aligned}$$

を用いると以下の式となる.

$$\begin{aligned} \frac{de_i^{vib}}{dt} &= \frac{1}{N_i m_i} Z_{iM} N_M P_i^{1,0} \left[- \sum_{l=0}^{\infty} l h \nu_i N_{i,l} \exp\left(-\frac{\theta_i}{T}\right) \left(\sum_{l=0}^{\infty} l h \nu_i N_{i,l} + h \nu_i \sum_{l=0}^{\infty} N_{i,l} \right) \right] \\ &= \frac{1}{N_i m_i} Z_{iM} N_M P_i^{1,0} \left\{ -e_i^{vib} + \exp\left(-\frac{\theta_i}{T}\right) (e_i^{vib} + k \theta_i N_i) \right\} \\ &= Z_{iM} N_M P_i^{1,0} \left\{ 1 - \exp\left(-\frac{\theta_i}{T}\right) \right\} \left\{ \frac{R_i \theta_i}{\exp(\theta_i/T) - 1} - e_i^{vib} \right\} \end{aligned} \quad (A.10)$$

ここで, 振動モード i と並進モード間の緩和時間として τ_{i-tr} を

$$\frac{1}{\tau_{i-tr}} \equiv \sum_M Z_{iM} N_M P_i^{1,0} \left\{ 1 - \exp\left(-\frac{\theta_i}{T}\right) \right\} \quad (A.11)$$

と定めると, 振動モード i の T-V 遷移による速度方程式は次式となる.

$$\frac{de_i^{vib}}{dt} = \frac{1}{\tau_{i-tr}} \left\{ \frac{R_i \theta_i}{\exp(\theta_i/T) - 1} - e_i^{vib} \right\} \quad (A.12)$$

上式を $\text{CO}_2(\nu_2)$ と $\text{N}_2(\nu_N)$ に適用すると, T-V 遷移によるそれぞれの振動エネルギーの時間変化は以下の通り得られる.

$$\frac{de_2^{vib}}{dt} = \frac{1}{\tau_{2-tr}} \left\{ \frac{R_{\text{CO}_2} \theta_2}{\exp(\theta_2/T) - 1} - e_2^{vib} \right\} \quad (A.13)$$

$$\frac{de_N^{vib}}{dt} = \frac{1}{\tau_{N-tr}} \left\{ \frac{R_{\text{N}_2} \theta_N}{\exp(\theta_N/T) - 1} - e_N^{vib} \right\} \quad (A.14)$$

A.2 分子間 V-V 遷移

小節 2.1.1 で示したエネルギー遷移のうち

$$\text{CO}_2(\nu_3^{l+1}) + \text{N}_2(\nu_N^k) = \text{CO}_2(\nu_3^l) + \text{N}_2(\nu_N^{k+1}) + \text{K.E.} \quad (2.3)$$

は異種分子の振動モード間のエネルギー遷移であり, 分子間 V-V (Intermolecular Vibrational-Vibrational) 遷移と呼ばれる.

いま $\text{CO}_2(\nu_3)$ のエネルギー変化について考える. $\text{CO}_2(\nu_3)$ のエネルギー準位 l の主方程式は

$$\begin{aligned} \frac{dN_{3,l}}{dt} &= \sum_{r=0}^{\infty} Z_{3N} N_{3,l+1} N_{N,r} f \left[\begin{matrix} l+1, l \\ 3; N \end{matrix} \right] P \left[\begin{matrix} l+1, l \\ 3; N \end{matrix} \right] \\ &\quad - \sum_{r=0}^{\infty} Z_{3N} N_{3,l} N_{N,r+1} f \left[\begin{matrix} l, l+1 \\ 3; N \end{matrix} \right] P \left[\begin{matrix} l, l+1 \\ 3; N \end{matrix} \right] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& - \sum_{r=0}^{\infty} Z_{3N} N_{3,l} N_{N,r} f \left[\begin{smallmatrix} l, l-1, r, r+1 \\ 3; N \end{smallmatrix} \right] P \left[\begin{smallmatrix} l, l-1, r, r+1 \\ 3; N \end{smallmatrix} \right] \\
& + \sum_{r=0}^{\infty} Z_{3N} N_{3,l-1} N_{N,r+1} f \left[\begin{smallmatrix} l, l+1, r+1, r \\ 3; N \end{smallmatrix} \right] P \left[\begin{smallmatrix} l, l+1, r+1, r \\ 3; N \end{smallmatrix} \right] \quad (A.15)
\end{aligned}$$

と得られる。但し、 $f \left[\begin{smallmatrix} l_1, l_2, r_1, r_2 \\ 3; N \end{smallmatrix} \right]$ および $P \left[\begin{smallmatrix} l_1, l_2, r_1, r_2 \\ 3; N \end{smallmatrix} \right]$ は $\text{CO}_2(\nu_3)$ の振動準位 l_1 から l_2 、 $\text{N}_2(\nu_N)$ の振動準位 r_1 から r_2 のエネルギー遷移に対する activation factor および steric factor で以下の関係が成り立つ。

$$f \left[\begin{smallmatrix} l, l+1, r+1, r \\ 3; N \end{smallmatrix} \right] = \exp \left(-\frac{\theta_3 - \theta_N}{T} \right) \quad (A.16)$$

$$f \left[\begin{smallmatrix} l+1, l, r, r+1 \\ 3; N \end{smallmatrix} \right] = 1 \quad (A.17)$$

$$P \left[\begin{smallmatrix} l, l+1, r+1, r \\ 3; N \end{smallmatrix} \right] = P \left[\begin{smallmatrix} l+1, l, r, r+1 \\ i; N \end{smallmatrix} \right] \quad (A.18)$$

$$P \left[\begin{smallmatrix} l+1, l, r+1, r \\ 3; N \end{smallmatrix} \right] = (l+1)(r+1) P \left[\begin{smallmatrix} l, 0, 0, 1 \\ 3; N \end{smallmatrix} \right] \quad (A.19)$$

これらの関係を用いて式 (A.15) を書き換えると

$$\begin{aligned}
\frac{dN_{3,l}}{dt} &= Z_{3N} N_N P \left[\begin{smallmatrix} l, 0, 0, 1 \\ 3; N \end{smallmatrix} \right] \left[\{(l+1)N_{3,l+1} - lN_{3,l}\} \left(\frac{e_N^{vib}}{R_{N_2} \theta_N} + 1 \right) \right. \\
& \left. - \{(l+1)N_{3,l} - lN_{3,l-1}\} \exp \left(\frac{\theta_N - \theta_3}{T} \right) \frac{e_N^{vib}}{R_{N_2} \theta_N} \right] \quad (A.20)
\end{aligned}$$

となる。この式を l について総和をとり単位質量当たりの振動エネルギー e_3^{vib} の時間変化の式に書き直すと次式となる。

$$\frac{de_3^{vib}}{dt} = Z_{3N} N_N P \left[\begin{smallmatrix} l, 0, 0, 1 \\ 3; N \end{smallmatrix} \right] \left[\frac{e_N^{vib}}{R_{N_2} \theta_N} \exp \left(\frac{\theta_N - \theta_3}{T} \right) (e_3^{vib} + R_{\text{CO}_2} \theta_3) - \left(\frac{e_N^{vib}}{R_{N_2} \theta_N} + 1 \right) e_3^{vib} \right] \quad (A.21)$$

ここで、 $\text{CO}_2(\nu_3)$ と $\text{N}_2(\nu_N)$ の間の緩和時間として τ_{3-N} を

$$\frac{1}{\tau_{3-N}} \equiv Z_{3N} N_N P \left[\begin{smallmatrix} l, 0, 0, 1 \\ 3; N \end{smallmatrix} \right] \quad (A.22)$$

と定めると、エネルギー遷移 (2.3) による $\text{CO}_2(\nu_3)$ の振動エネルギーの時間変化は次式で表される。

$$\frac{de_3^{vib}}{dt} = \frac{1}{\tau_{3-N}} \left[\frac{e_N^{vib}}{R_{N_2} \theta_N} \exp \left(\frac{\theta_N - \theta_3}{T} \right) (e_3^{vib} + R_{\text{CO}_2} \theta_3) - \left(\frac{e_N^{vib}}{R_{N_2} \theta_N} + 1 \right) e_3^{vib} \right] \quad (A.23)$$

同様に、エネルギー遷移 (2.3) による $N_2(\nu_N)$ の振動エネルギーの時間変化は次式の様に導かれる。

$$\frac{de_N^{vib}}{dt} = -\frac{C_{CO_2}\theta_N}{C_{N_2}\theta_N} \frac{1}{\tau_{3-N}} \left[\frac{e_N^{vib}}{R_{N_2}\theta_N} \exp\left(\frac{\theta_N - \theta_3}{T}\right) (e_3^{vib} + R_{CO_2}\theta_3) - \left(\frac{e_N^{vib}}{R_{N_2}\theta_N} + 1\right) e_3^{vib} \right] \quad (A.24)$$

A.3 分子内 V-V 遷移

小節 2.1.1 で示したエネルギー遷移のうち

$$CO_2(\nu_2^j, \nu_3^{k+1}) + M = CO_2(\nu_2^{j+3}, \nu_3^k) + M + K.E. \quad (2.4)$$

は CO_2 内の振動モード間のエネルギー遷移で分子内 V-V (Intramolecular Vibrational-Vibrational) 遷移と呼ばれる。

いま $CO_2(\nu_3)$ のエネルギー変化について考える。 $CO_2(\nu_3)$ のエネルギー準位 l に対する主方程式は

$$\begin{aligned} \frac{dN_{3,l}}{dt} = & \sum_{r=0}^{\infty} Z_{3M} N_M N_{3,l+1}^{2,r} f \left[\begin{matrix} l+1, l \\ 3; 2 \end{matrix} \right] P \left[\begin{matrix} l+1, l \\ 3; 2 \end{matrix} \right] \\ & - \sum_{r=0}^{\infty} Z_{3M} N_M N_{3,l}^{2,r+3} f \left[\begin{matrix} l, l+1 \\ 3; 2 \end{matrix} \right] P \left[\begin{matrix} l, l+1 \\ 3; 2 \end{matrix} \right] \\ & - \sum_{r=0}^{\infty} Z_{3M} N_M N_{3,l}^{2,r} f \left[\begin{matrix} l, l-1 \\ 3; 2 \end{matrix} \right] P \left[\begin{matrix} l, l-1 \\ 3; 2 \end{matrix} \right] \\ & + \sum_{r=0}^{\infty} Z_{3M} N_M N_{3,l-1}^{2,r+3} f \left[\begin{matrix} l, l+1 \\ 3; 2 \end{matrix} \right] P \left[\begin{matrix} l, l+1 \\ 3; 2 \end{matrix} \right] \end{aligned} \quad (A.25)$$

と得られる。但し、 $f \left[\begin{matrix} l_1, l_2 \\ 3; 3 \end{matrix} \right]$ および $P \left[\begin{matrix} l_1, l_2 \\ 3; 3 \end{matrix} \right]$ は $CO_2(\nu_3)$ の振動準位 l_1 から l_2 、 $CO_2(\nu_2)$ の振動準位 r_1 から r_2 のエネルギー遷移に対する activation factor および steric factor で以下の関係が成り立つ。

$$f \left[\begin{matrix} l, l+1 \\ 3; 2 \end{matrix} \right] = \exp\left(-\frac{\theta_3 - 3\theta_2}{T}\right) \quad (A.26)$$

$$f \left[\begin{matrix} l+1, l \\ 3; 2 \end{matrix} \right] = 1 \quad (A.27)$$

$$P \left[\begin{matrix} l, l+1 \\ 3; 2 \end{matrix} \right] = P \left[\begin{matrix} l+1, l \\ i; 2 \end{matrix} \right] \quad (A.28)$$

$$P \left[\begin{matrix} l+1, l \\ 3; 2 \end{matrix} \right] = \frac{1}{6} (l+1)(r+1)(r+2)(r+3) P \left[\begin{matrix} 1, 0 \\ 3; 2 \end{matrix} \right] \quad (A.29)$$

これらの関係を用いると式 (A.25) は次式となる.

$$\begin{aligned} \frac{dN_{3,l}}{dt} = & \frac{1}{6} Z_{\text{CO}_2\text{M}} N_{\text{M}} P[3; 2] \sum_{r=0}^{\infty} \left[(l+1)(r+1)(r+2)(r+3) N_{3,l}^{2,r} \right. \\ & - l(r+1)(r+2)(r+3) N_{3,l}^{2,r} \\ & + \exp\left(\frac{3\theta_2 - \theta_3}{T}\right) \left\{ l(r+1)(r+2)(r+3) N_{3,l-1}^{2,r+3} \right. \\ & \left. \left. - (l+1)(r+1)(r+2)(r+3) N_{3,l}^{2,r+3} \right\} \right] \quad (\text{A.30}) \end{aligned}$$

これを l について総和をとり単位質量当たりの振動エネルギー e_3^{vib} の時間変化の式に書換え、 $x_r = N_{2,r}/N_{\text{CO}_2}$ とおくと

$$\begin{aligned} \frac{de_3^{\text{vib}}}{dt} = & \frac{1}{6} Z_{\text{CO}_2\text{M}} N_{\text{M}} P[3; 2] \left[-e_3^{\text{vib}} \sum_{r=0}^{\infty} (r^3 + 6r^2 + 11r + 6) x_r \right. \\ & \left. + \exp\left(\frac{3\theta_3 - \theta_2}{T}\right) (R_{\text{CO}_2} \theta_3 + e_3^{\text{vib}}) \sum_{r=0}^{\infty} (r^3 - 3r^2 + 2r) x_r \right] \quad (\text{A.31}) \end{aligned}$$

となる. また振動モード内の局所平衡すなわち振動モード内のボルツマン分布の仮定により以下の関係が導かれる.

$$\sum_{r=0}^{\infty} (r^3 + 6r^2 + 11r + 6) x_r = 6 \left(\frac{e_2^{\text{vib}}}{R_{\text{CO}_2} \theta_2} + 1 \right)^3 \quad (\text{A.32})$$

$$\sum_{r=0}^{\infty} (r^3 - 3r^2 + 2r) x_r = 6 \left(\frac{e_2^{\text{vib}}}{R_{\text{CO}_2} \theta_2} \right)^3 \quad (\text{A.33})$$

これを用いると,

$$\begin{aligned} \frac{de_3^{\text{vib}}}{dt} = & Z_{\text{CO}_2\text{M}} N_{\text{M}} P[3; 2] \left[\left(\frac{e_2^{\text{vib}}}{R_{\text{CO}_2} \theta_2} \right)^3 (e_3^{\text{vib}} + R_{\text{CO}_2} \theta_3) \exp\left(\frac{3\theta_2 - \theta_3}{T}\right) \right. \\ & \left. - \left(\frac{e_2^{\text{vib}}}{R_{\text{CO}_2} \theta_2} + 1 \right)^3 e_3^{\text{vib}} \right] \quad (\text{A.34}) \end{aligned}$$

ここで, $\text{CO}_2(\nu_3)$ と $\text{CO}_2(\nu_2)$ の間の緩和時間として τ_{3-2} を

$$\frac{1}{\tau_{3-2}} \equiv Z_{\text{CO}_2\text{M}} N_{\text{M}} P[3; 2] \quad (\text{A.35})$$

と定めると, エネルギー遷移 (2.4) による $\text{CO}_2(\nu_3)$ の振動エネルギーの時間変化は次式で表される.

$$\frac{de_3^{\text{vib}}}{dt} = \frac{1}{\tau_{3-2}} \left[\left(\frac{e_2^{\text{vib}}}{R_{\text{CO}_2} \theta_2} \right)^3 (e_3^{\text{vib}} + R_{\text{CO}_2} \theta_3) \exp\left(\frac{3\theta_2 - \theta_3}{T}\right) \right]$$

$$-\left(\frac{e_2^{vib}}{R_{CO_2}\theta_2} + 1\right)^3 e_3^{vib} \quad (A.36)$$

同様に、エネルギー遷移(2.4)による $CO_2(\nu_2)$ の振動エネルギーの時間変化は次式の様に導かれる。

$$\frac{de_3^{vib}}{dt} = \frac{1}{\tau_{3-2}} \frac{3\theta_3}{\theta_2} \left[-\left(\frac{e_2^{vib}}{R_{CO_2}\theta_2}\right)^3 (e_3^{vib} + R_{CO_2}\theta_3) \exp\left(\frac{3\theta_2 - \theta_3}{T}\right) + \left(\frac{e_2^{vib}}{R_{CO_2}\theta_2} + 1\right)^3 e_3^{vib} \right] \quad (A.37)$$

補遺 B

振動緩和時間

振動モード間の緩和時間は '抵抗の並列結合則' によって以下の通り求められる [9].

$$\frac{1}{\tau_{2-tr}} = \frac{X_{CO_2}}{\tau_{2-CO_2}} + \frac{X_{N_2}}{\tau_{2-N_2}} + \frac{X_{H_2O}}{\tau_{2-H_2O}} \quad (B.1)$$

$$\frac{1}{\tau_{N-tr}} = \frac{X_{CO_2}}{\tau_{N-CO_2}} + \frac{X_{N_2}}{\tau_{N-N_2}} + \frac{X_{H_2O}}{\tau_{N-H_2O}} \quad (B.2)$$

$$\frac{1}{\tau_{3-2}} = \frac{X_{CO_2}}{\tau_{3-CO_2}} + \frac{X_{N_2}}{\tau_{3-N_2}} + \frac{X_{H_2O}}{\tau_{3-H_2O}} \quad (B.3)$$

$$\frac{1}{\tau_{N-3}} = \frac{X_{N_2}}{\tau_{N-CO_2}(\nu_3)} \quad (B.4)$$

緩和時間のデータは Maeno と [9]Anderson[5] に従う. どちらのデータも Taylor と Bitterman の実験結果 [10] より求められている.

$$\log(p\tau_{2-CO_2}) = -0.7636 - 30.94\alpha + 599.1\alpha^2 - 2123\alpha^3, \quad (B.5)$$

$$\log(p\tau_{2-N_2}) = -2.475 + 41.43\alpha - 94.36\alpha^2, \quad (B.6)$$

$$\log(p\tau_{2-H_2O}) = 0.643 - 20.4 \max(\alpha, 600^{-\frac{1}{3}}) \quad (B.7)$$

$$\log(p\tau_{N-CO_2}) = \log(p\tau_{N-N_2}) \quad (B.8)$$

$$\log(p\tau_{N-N_2}) = -4.61 + 93\alpha \quad (B.9)$$

$$\log(p\tau_{N-H_2O}) = -3.2415 + 27.62\alpha \quad (B.10)$$

$$\log(p\tau_{3-CO_2}) = -0.9207 - 89.93\alpha + 1433\alpha^1 - 5114\alpha^3, \quad (B.11)$$

$$\log(p\tau_{3-N_2}) = -20.73 + 412.9\alpha - 2681\alpha^2 + 5988\alpha^3, \quad (B.12)$$

$$\log(p\tau_{3-H_2O}) = 5.5 \times 10^{-2} \quad (B.13)$$

$$\log(p\tau_{N-CO_2}(\nu_3)) = 3.630 - 160.8\alpha + 1821\alpha^2 - 5699\alpha^3 \quad (B.14)$$

ここに

$$\alpha = T^{-\frac{1}{3}} \quad (\text{B.15})$$

であり、温度 T 、圧力 p 、緩和時間 τ の単位はそれぞれ K, atm, μsec である。

图·表

表 4-1 常用二端元件的漏电阻

元件名称	漏电阻 (MΩ)	漏电阻 (MΩ)	漏电阻 (MΩ)	漏电阻 (MΩ)
电阻	1000	1000	1000	1000
电容	1000	1000	1000	1000
电感	1000	1000	1000	1000
二极管	1000	1000	1000	1000

表 6.1: 計算に用いた共振器仕様

ケース	光路長 (mm)	平面鏡の 反射率 (%)	凹面鏡の 焦点距離 (m)	スロットから光共振器 中心までの距離 (mm)
1	280.0	98.0	0.5	30.0
2	280.0	98.0	0.5	27.5
3	280.0	98.0	0.5	32.5
4	280.0	98.0	4.0	30.0

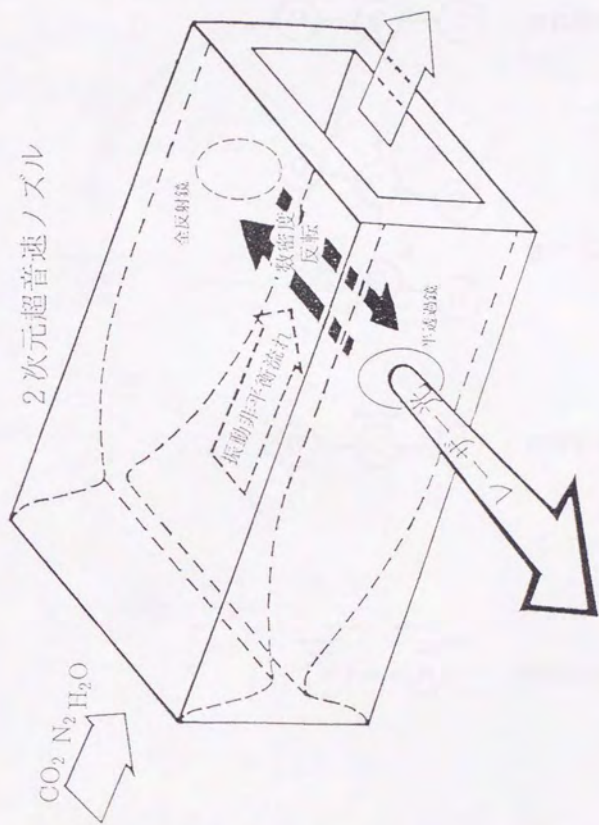
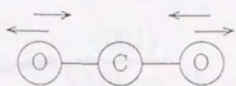
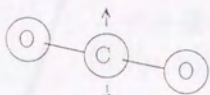


図 1.1: CO₂GDL の概要

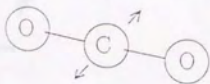
CO₂



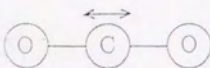
対称伸縮 (ν_1)



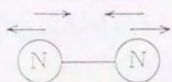
曲げ (ν_2)



非対称伸縮 (ν_3)



N₂



伸縮 (ν_N)

図 1.2: CO₂と N₂の振動モード

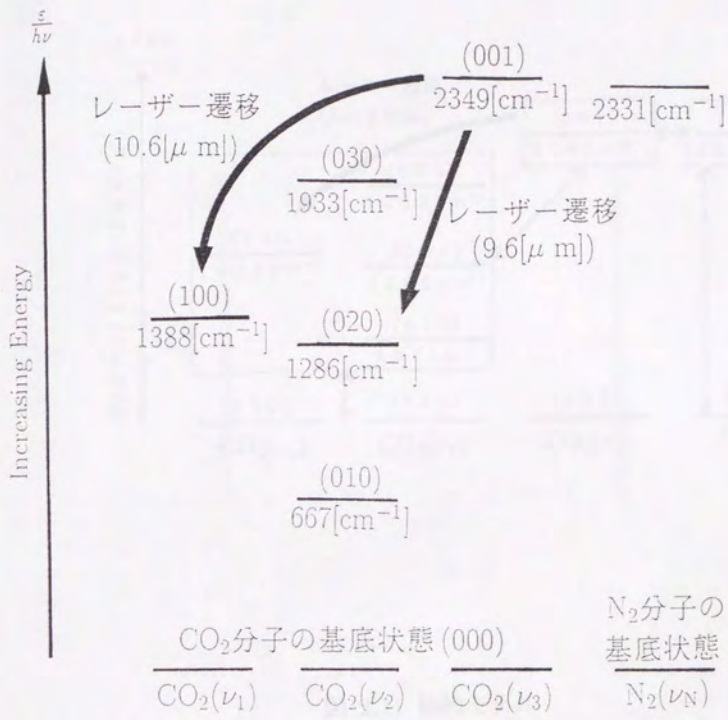


図 1.3: エネルギー準位図

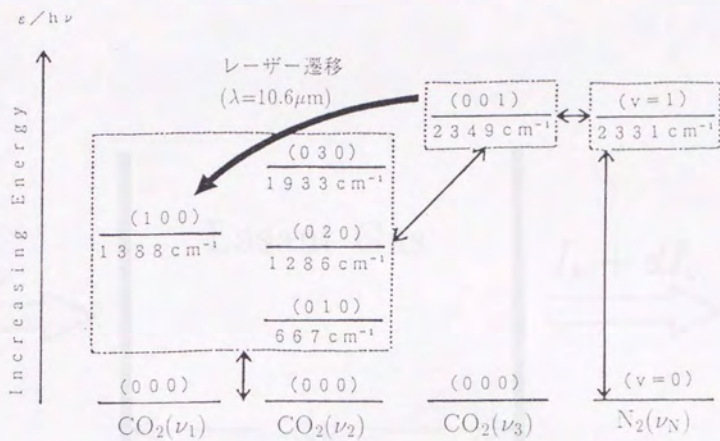
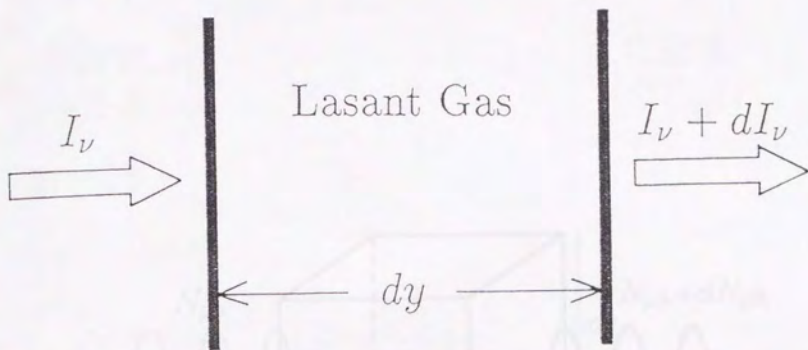


図 2.1: 熱的モデル



$$\frac{dI_v}{I_v} \equiv G_{0v} dy$$

図 2.2: 利得の定義



平面鏡
(半透過)

凹面鏡
(全反射)

図 2.4: 平面-凹面鏡からなる安定共振器

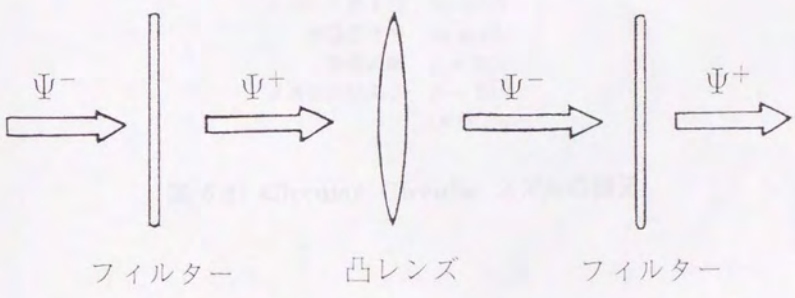
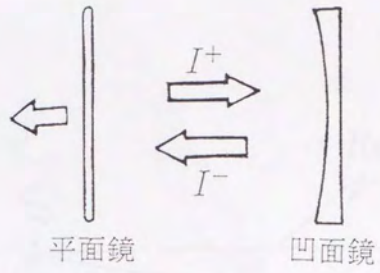
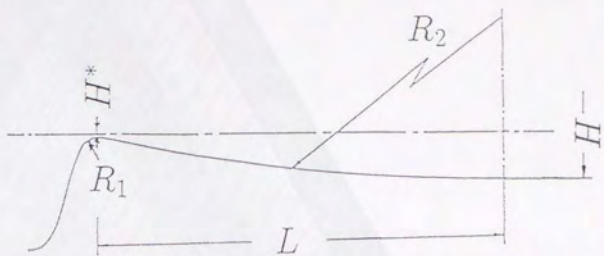


図 2.5: 共振器のモデル化



スロート高さ $H^* = 1.0$
 スロート部半径 $R_1 = 5.0$
 膨張部半径 $R_2 = 47.1$
 膨張距離 $L = 30.0$
 ノズル出口高さ $H = 20.0$
 (単位 : mm)

図 5.1: Circular-Circular ノズルの諸元

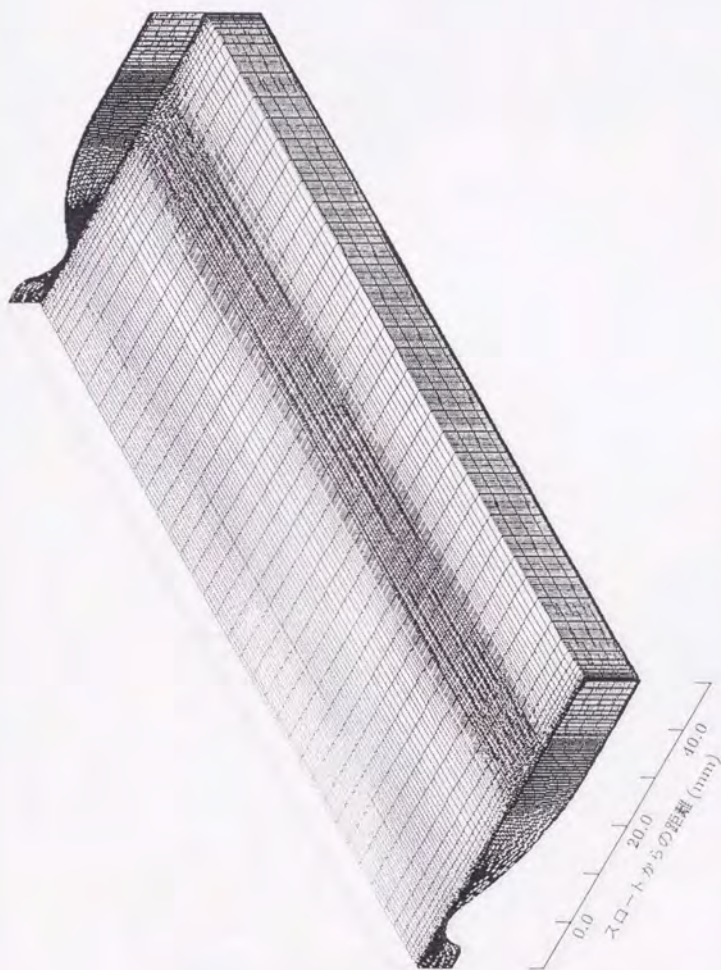


図 5.2: 計算格子 (101×45×79)

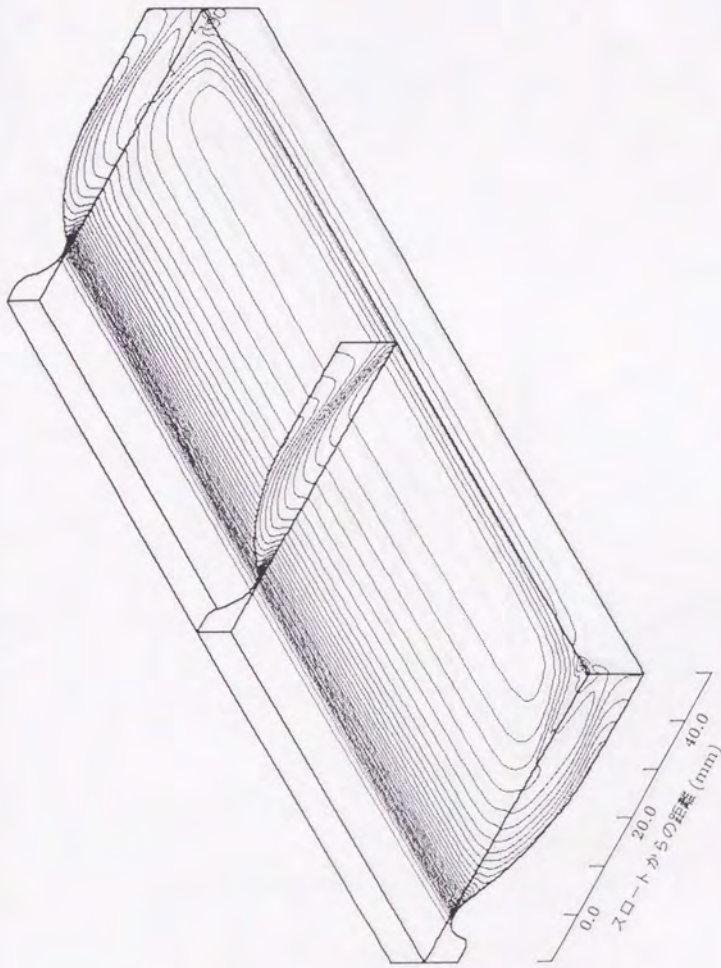


図 5.3: 圧力分布

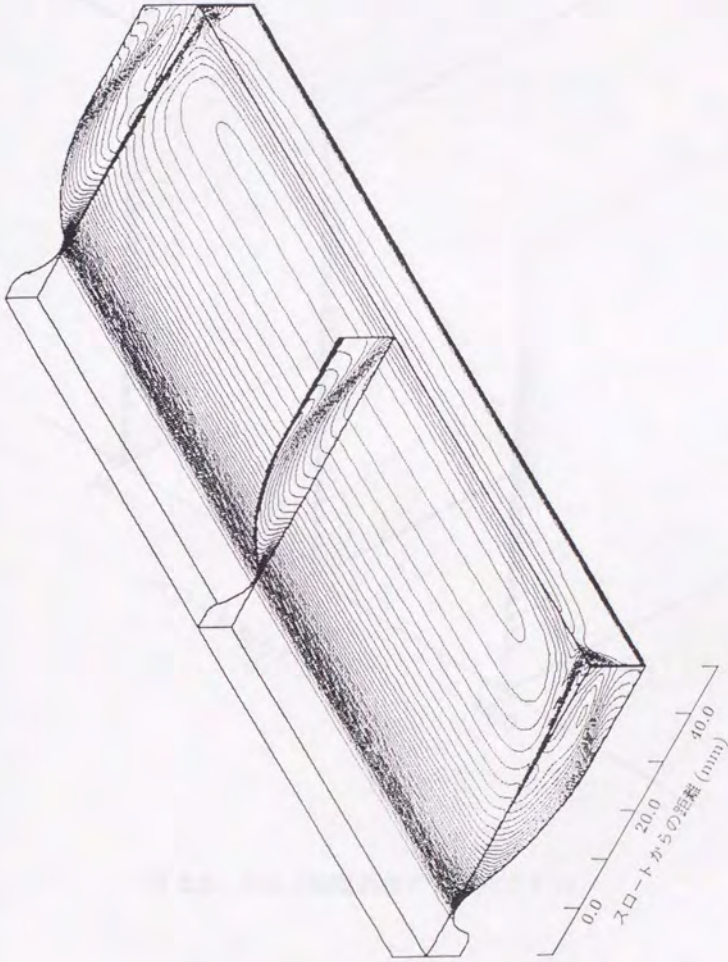


図 5.4: 密度分布

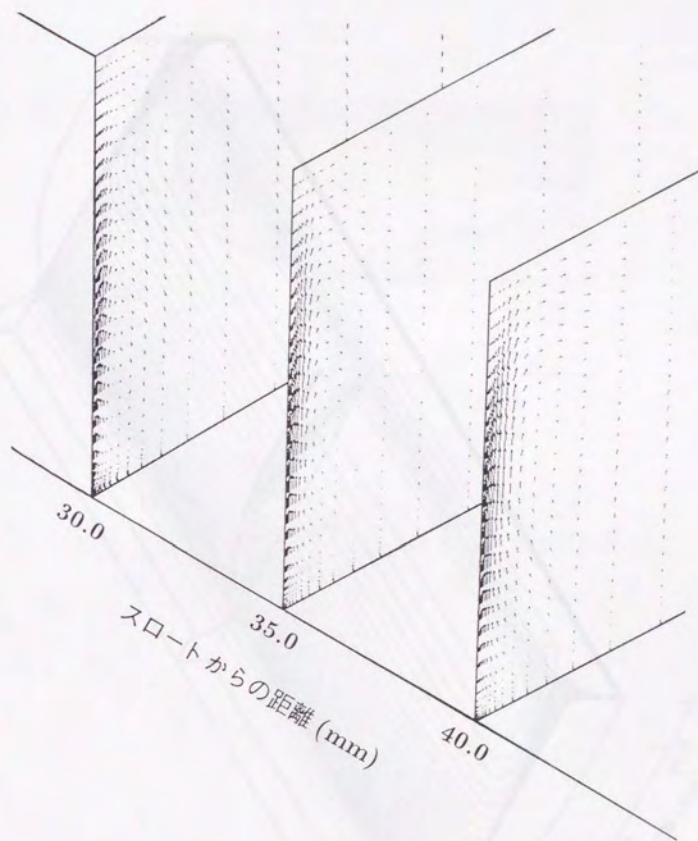


図 5.5: ノズル側壁近傍の速度ベクトル

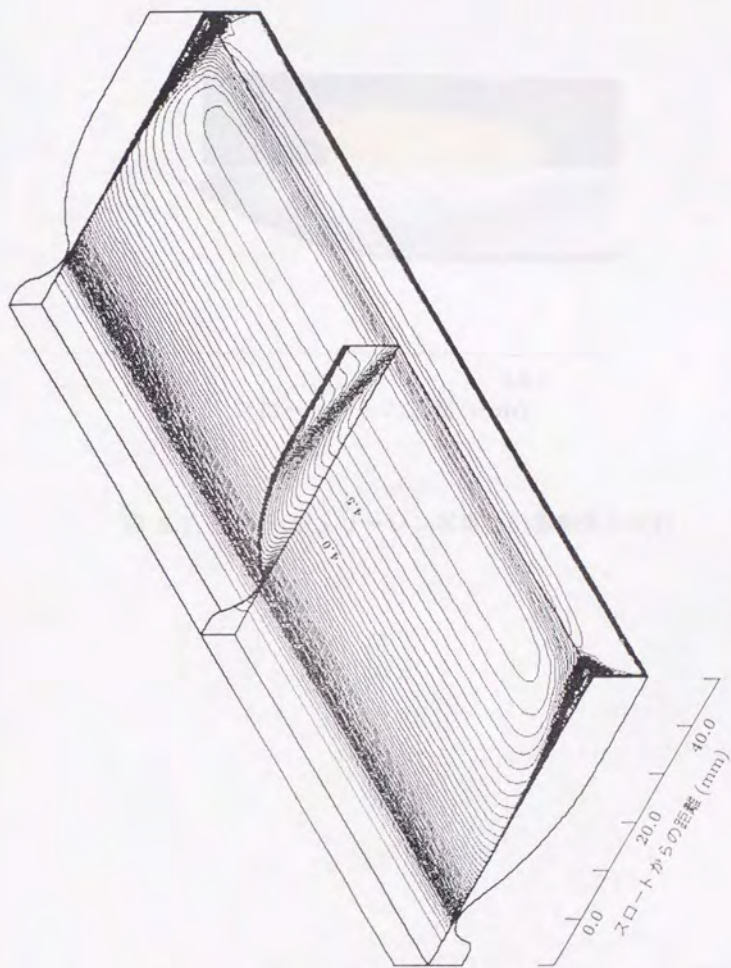


図 5.6: マッハ数分布

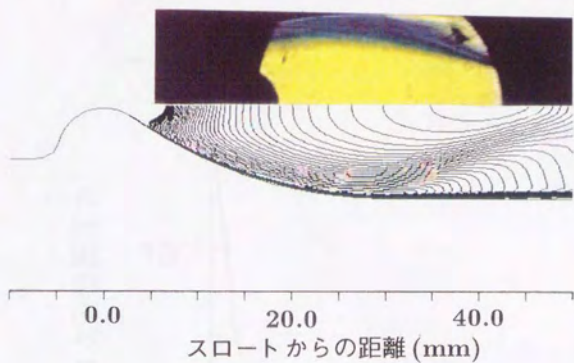


図 5.7: カラーシュリーレン写真と計算結果の比較

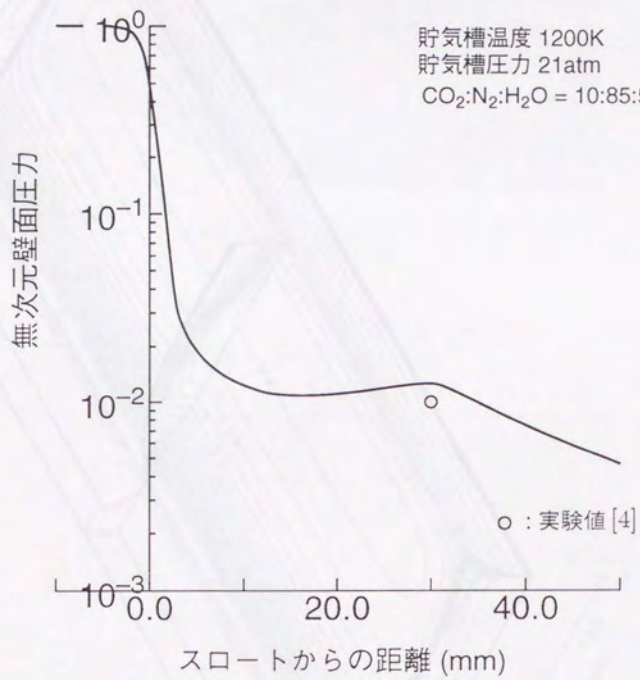


図 5.8: 壁面圧力分布

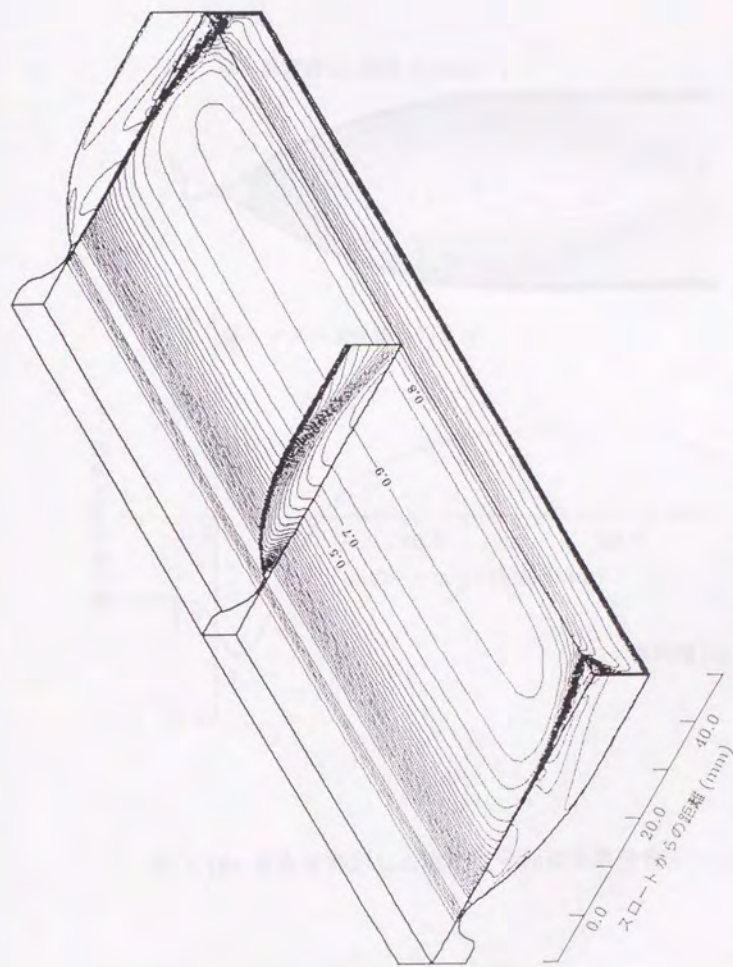


図 5.9: 微小信号利得係数分布 (単位: m^{-1} , 間隔: 0.1m^{-1})

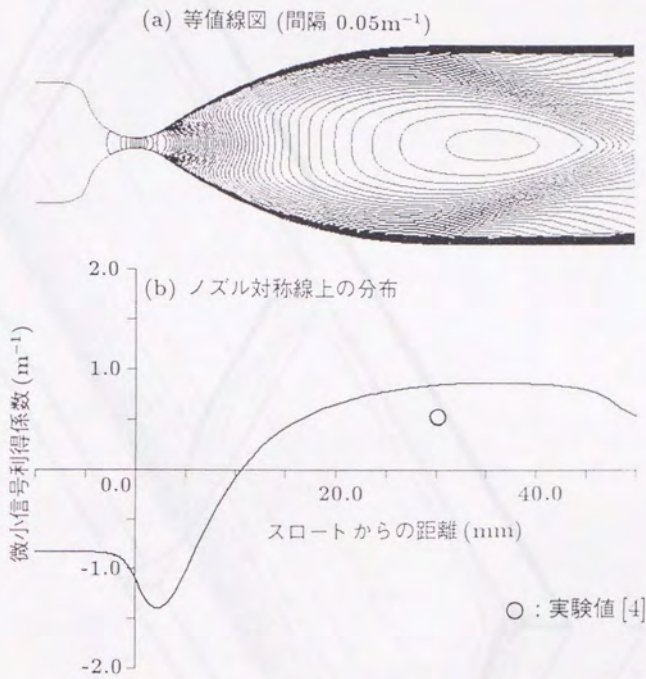


図 5.10: 2次元表示した微小信号利得係数分布

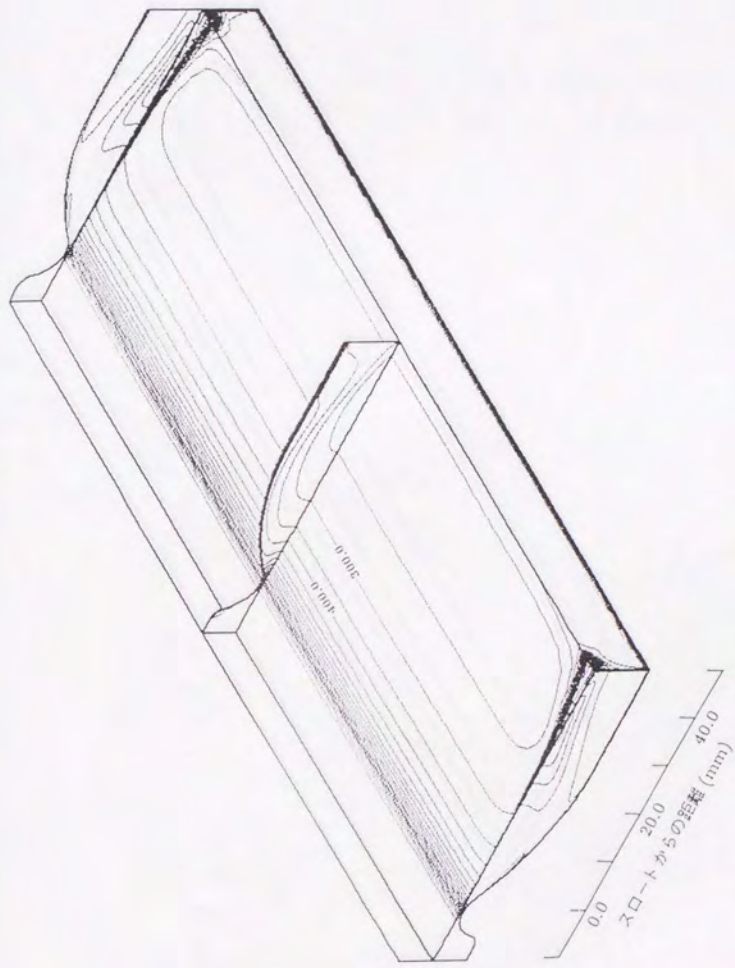


図 5.11: 並進温度分布 (単位:K, 間隔:50K)

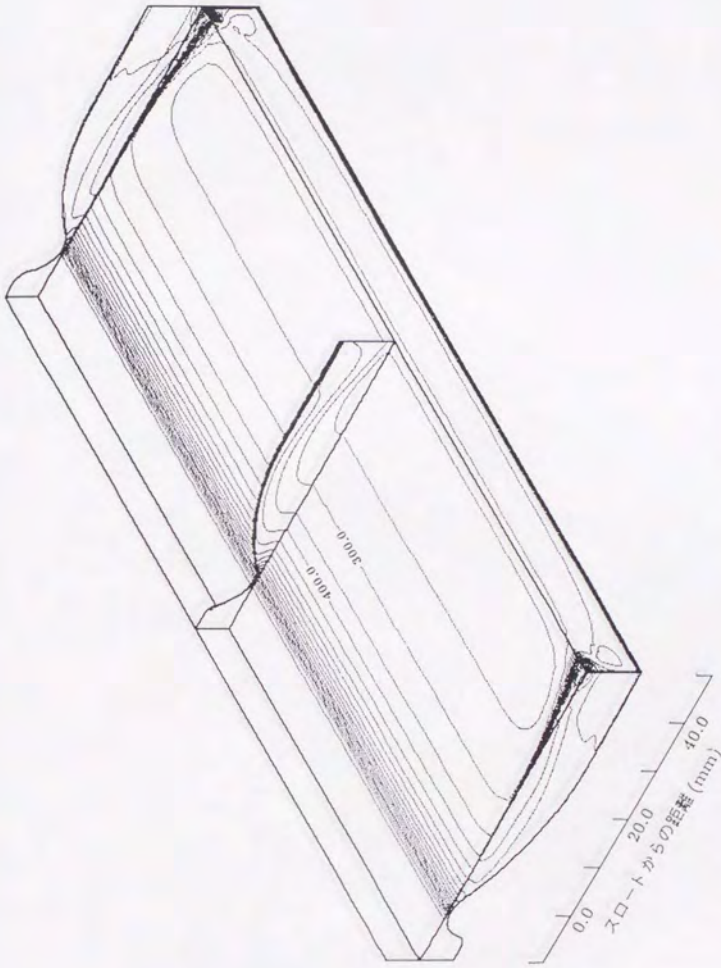


図 5.12: $\text{CO}_2(\nu_{12})$ の振動温度分布 (単位:K, 間隔:50K)

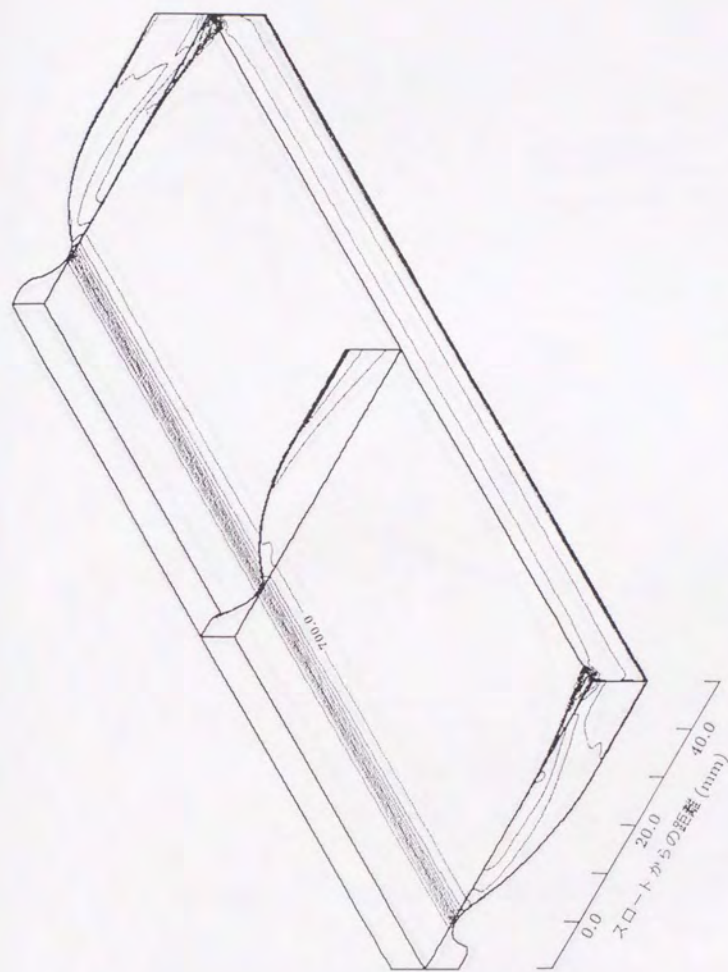


図 5.13: $\text{CO}_2(\nu_3)$ の振動温度分布 (単位:K, 間隔:50K)

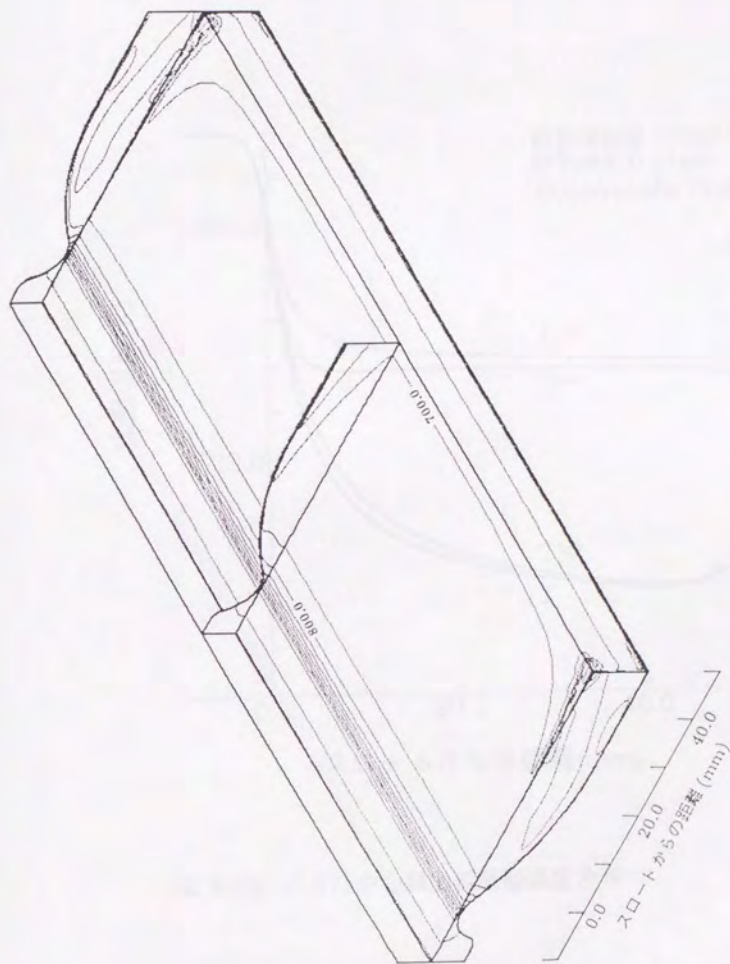


図 5.14: $N_2(\mu N)$ の振動温度分布 (単位:K, 間隔:50K)

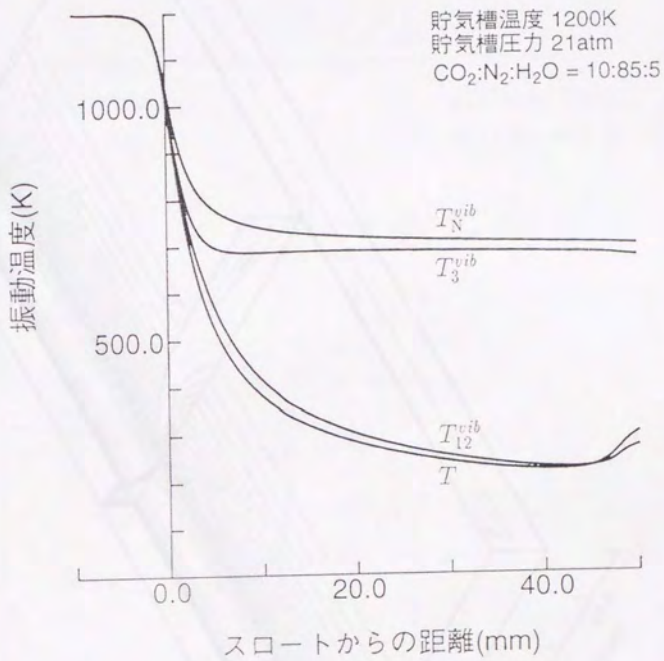


図 5.15: ノズル中心線上の振動温度分布

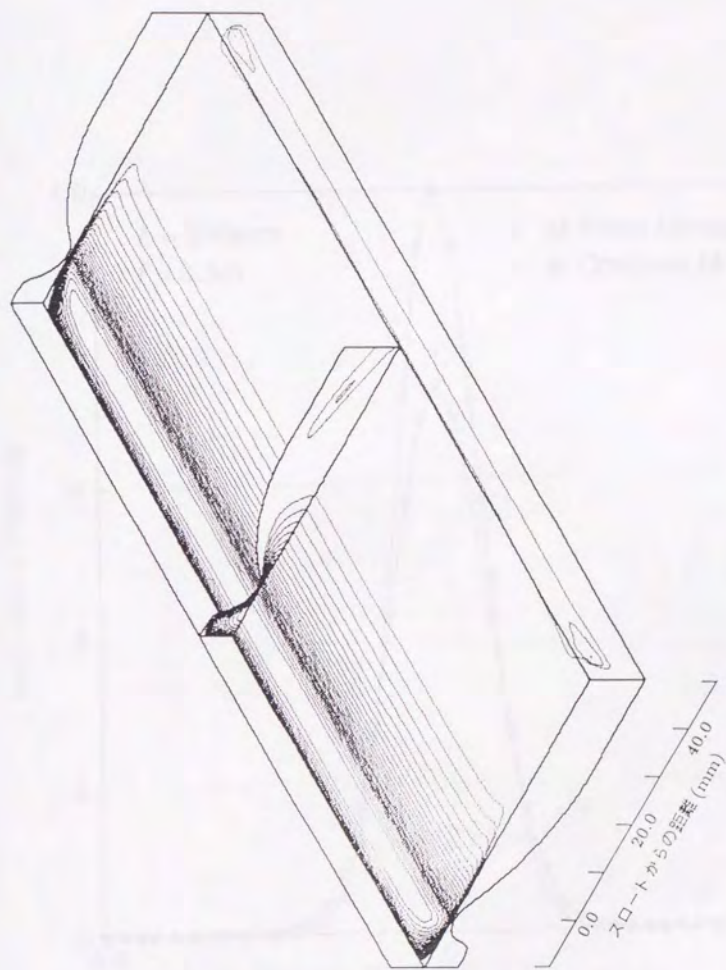


図 5.16: 渦粘性分布

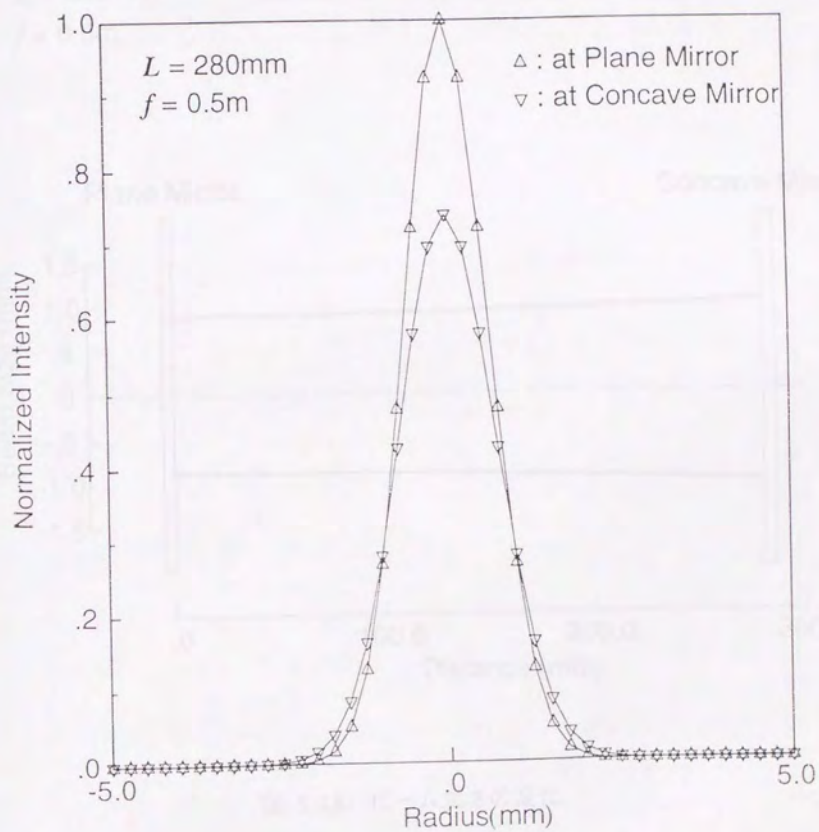


图 5.17: 輻射強度分布

$L = 280\text{mm}$

$f = 0.5\text{m}$

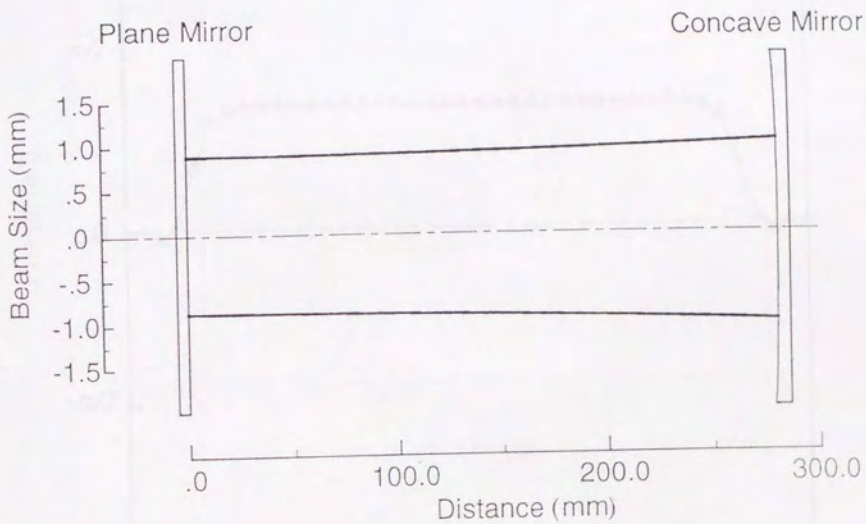


図 5.18: ビーム太さの変化

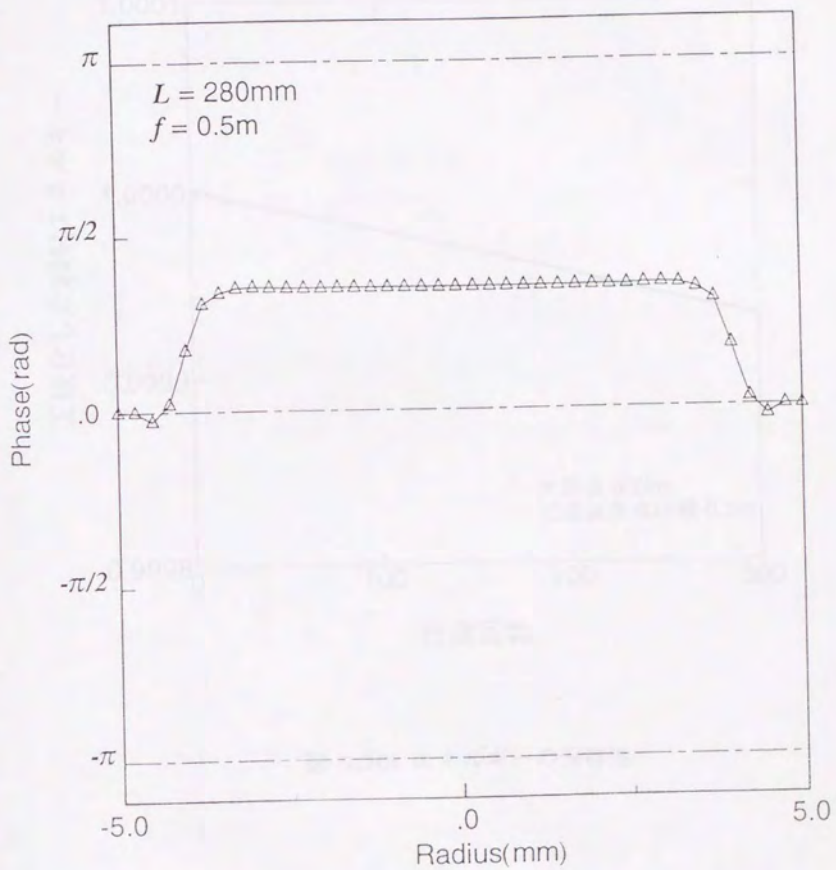


図 5.19: 平面鏡での位相分布

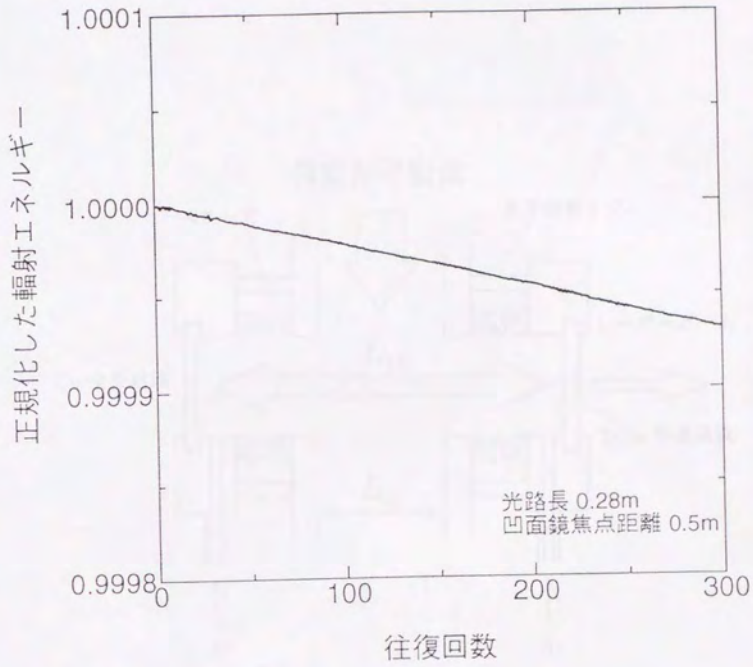


図 5.20: エネルギーの保存性

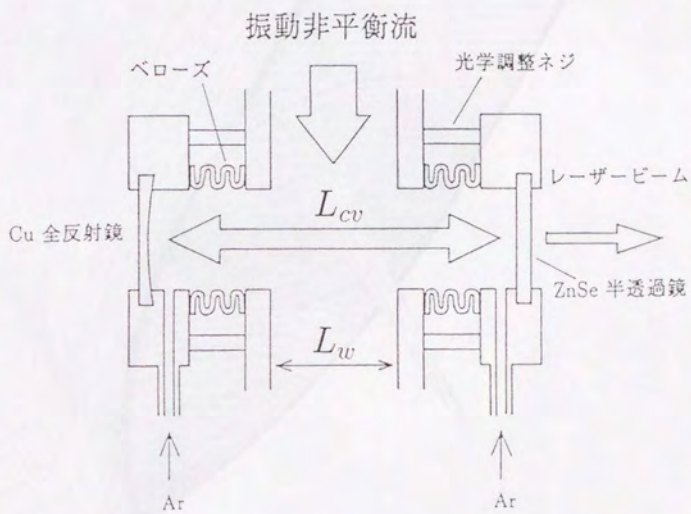


図 6.1: 共振器キャビティ

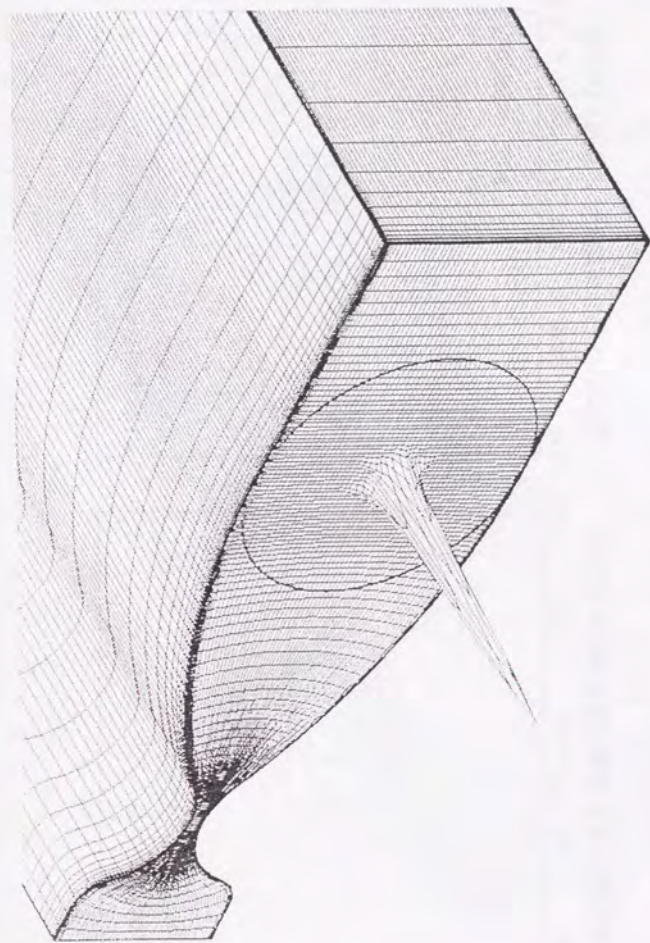


図 6.2: 半透過鏡での輻射強度分布 (ケース1)

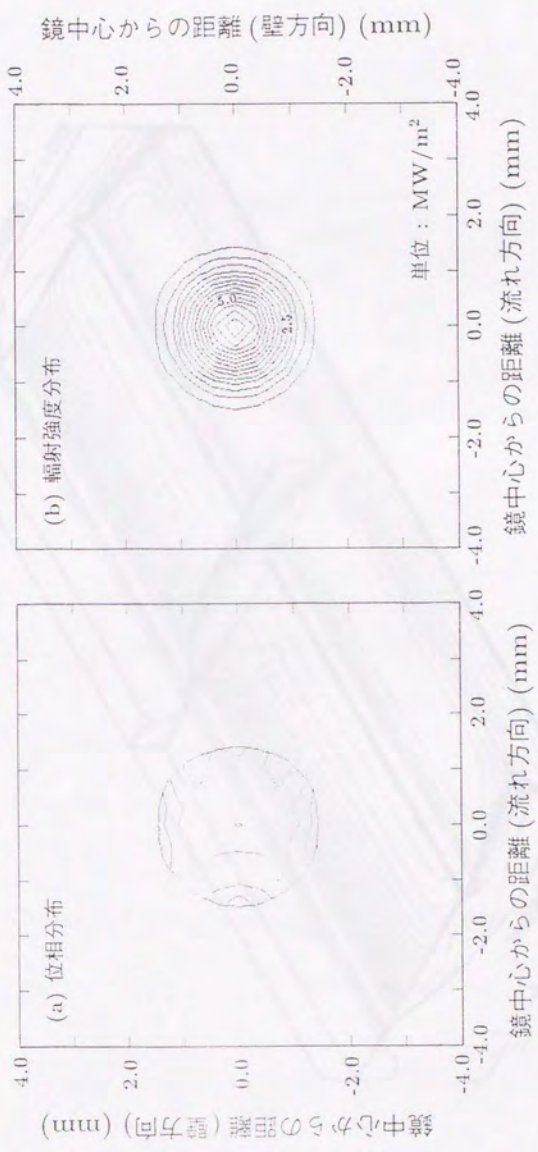


図 6.3: 半透過鏡での位相および輻射強度分布 (ケース 1)

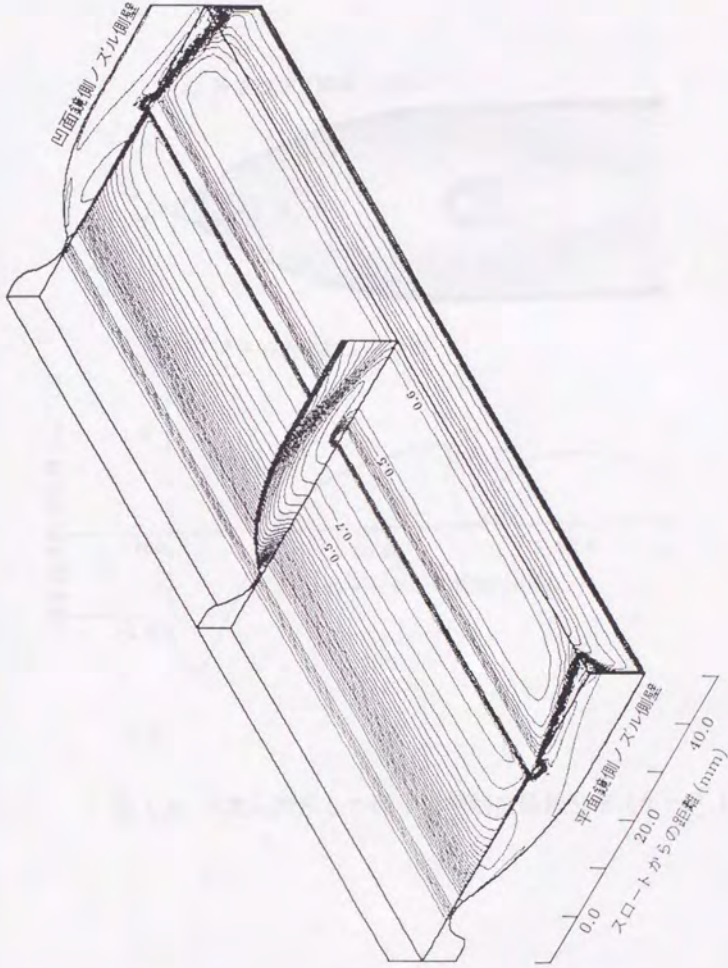


図 6.4: 微小信号利得係数分布 (ケース1) (単位: m^{-1} , 間隔: 0.1m^{-1})

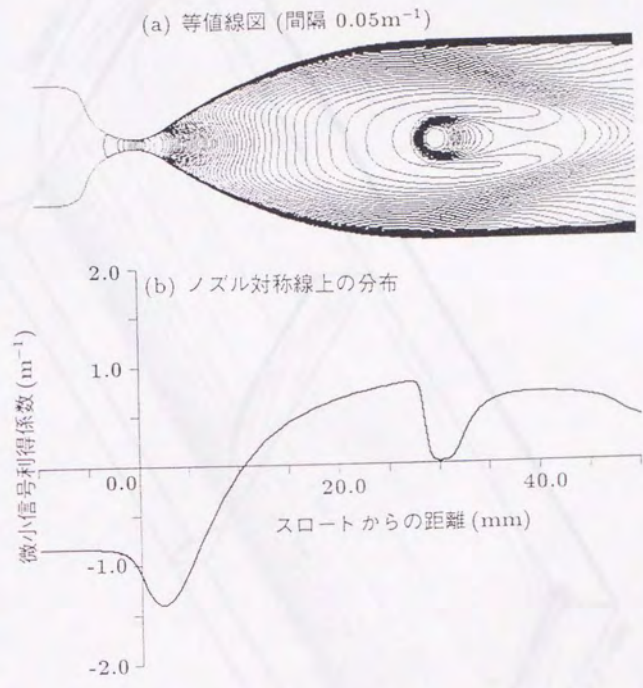


図 6.5: 2次元表示した微小信号利得係数分布 (ケース1)

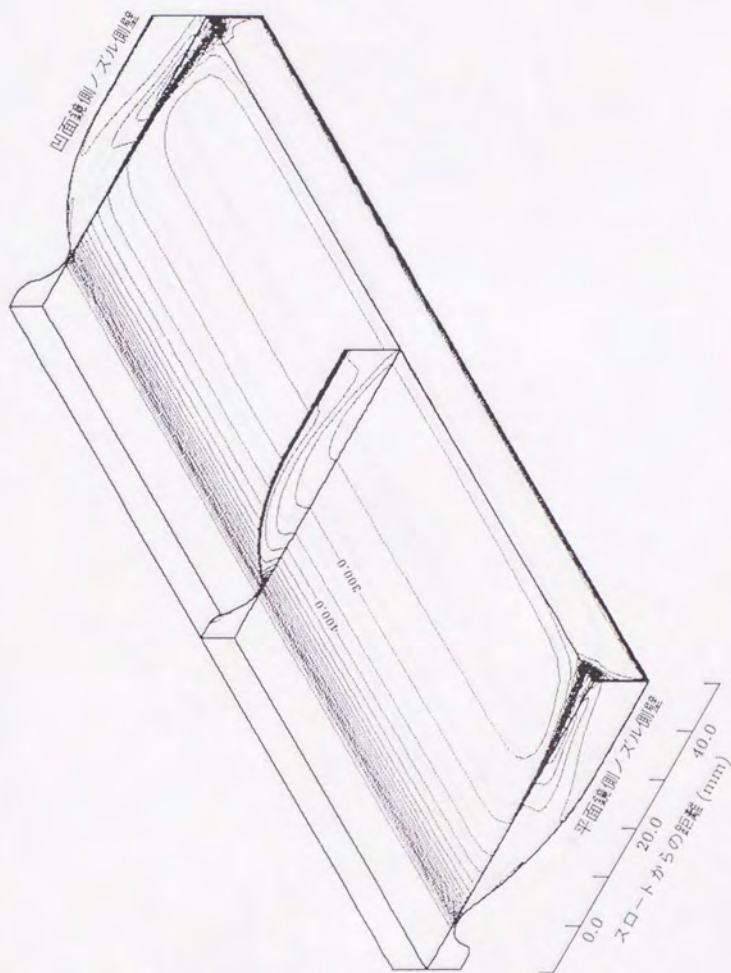


図 6.6: 並進温度分布 (ケース1) (単位:K, 間隔:50K)

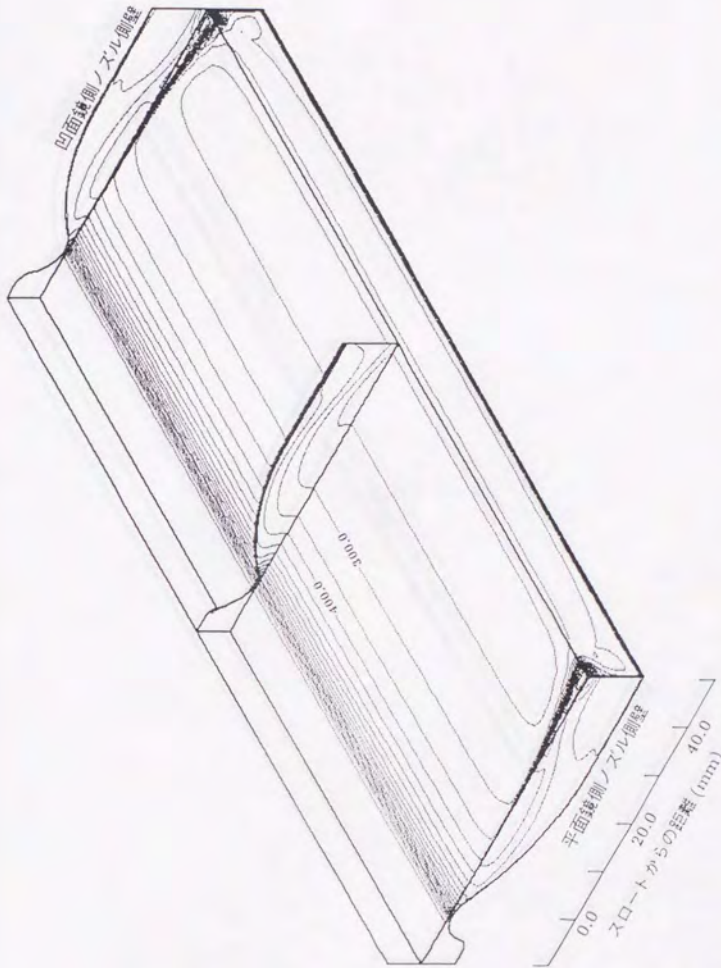


図 6.7: CO₂(ν_{12}) の振動温度分布 (ケース 1) (単位:K, 間隔:50K)

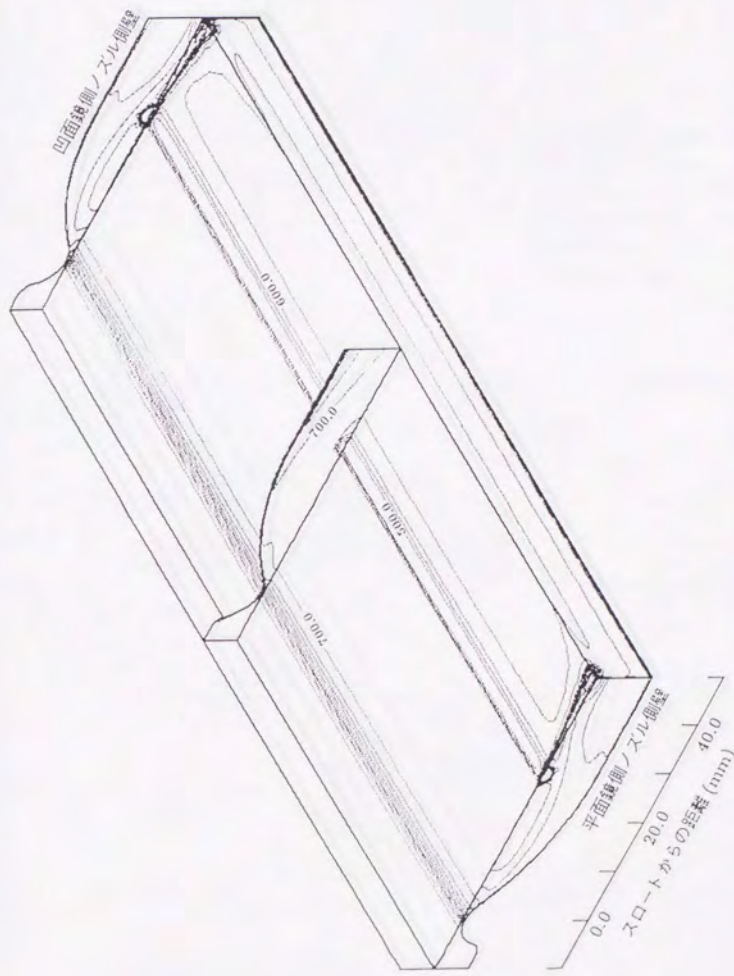


図 6.8: $\text{CO}_2(\nu_3)$ の振動温度分布 (ケース 1) (単位: K, 間隔: 50 K)

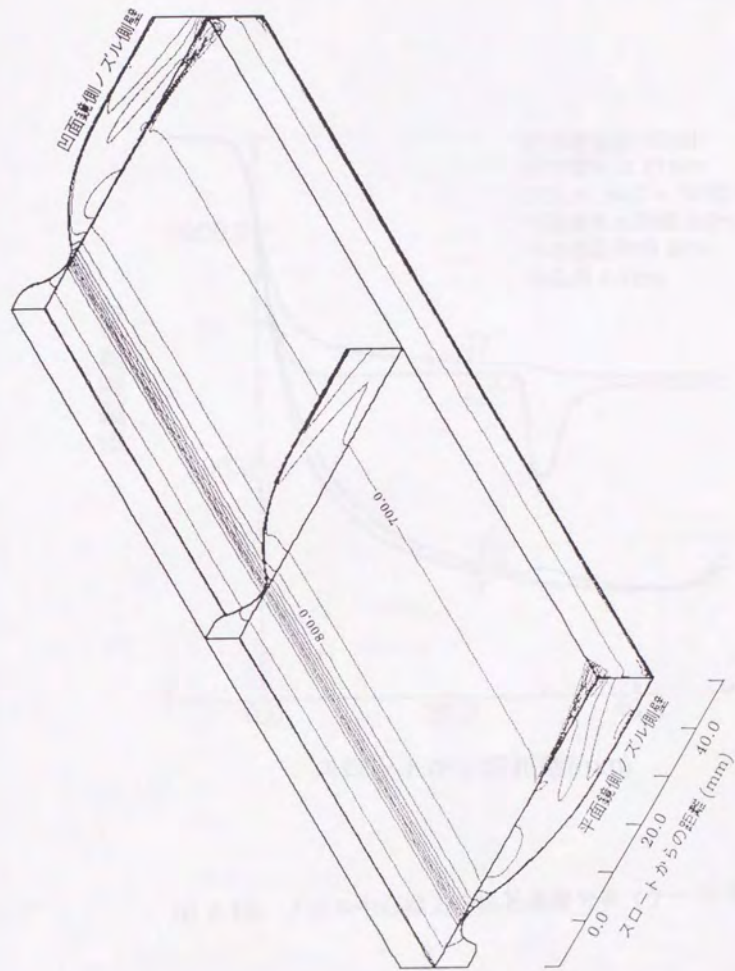


図 6.9: $N_2(\mu N)$ の振動温度分布 (ケース1) (単位:K, 間隔:50K)

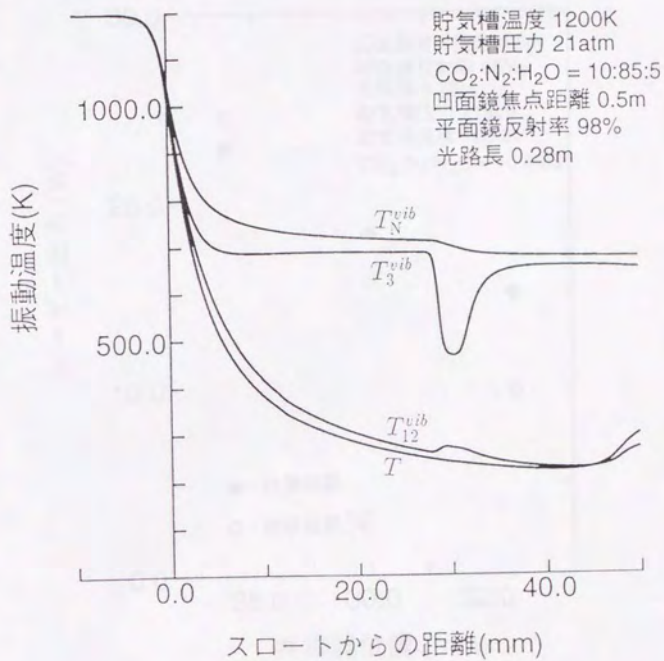


図 6.10: ノズル中心線上の振動温度分布 (ケース 1)

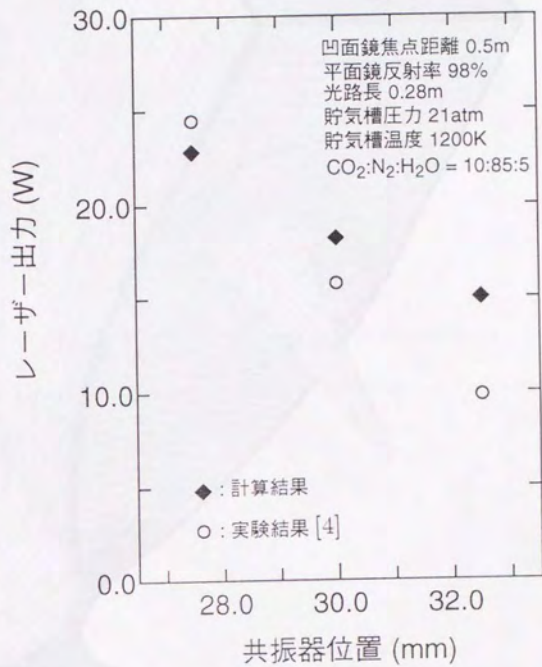


図 6.11: 共振器位置に対する出力の変化

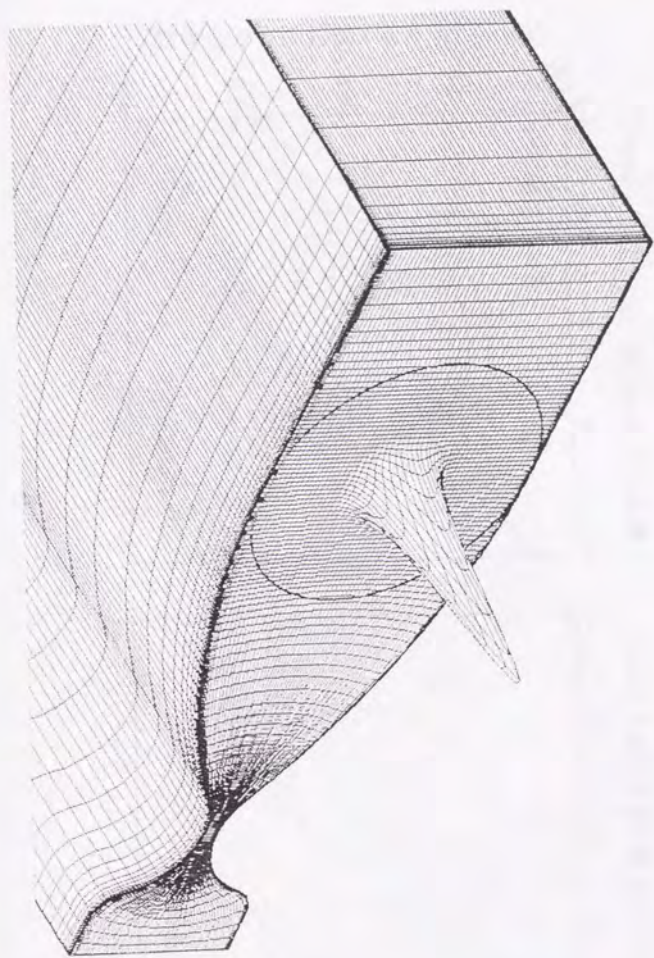


図 6.12: 半透過鏡での輻射強度分布 (ケース 4)

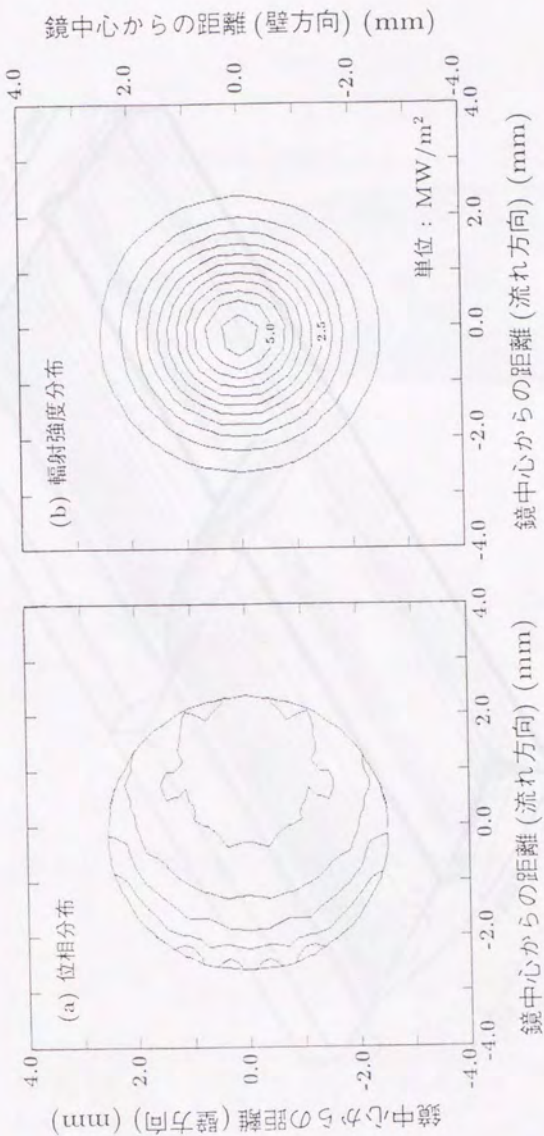


図 6.13: 半透過鏡での位相および輻射強度分布 (ケース 4)

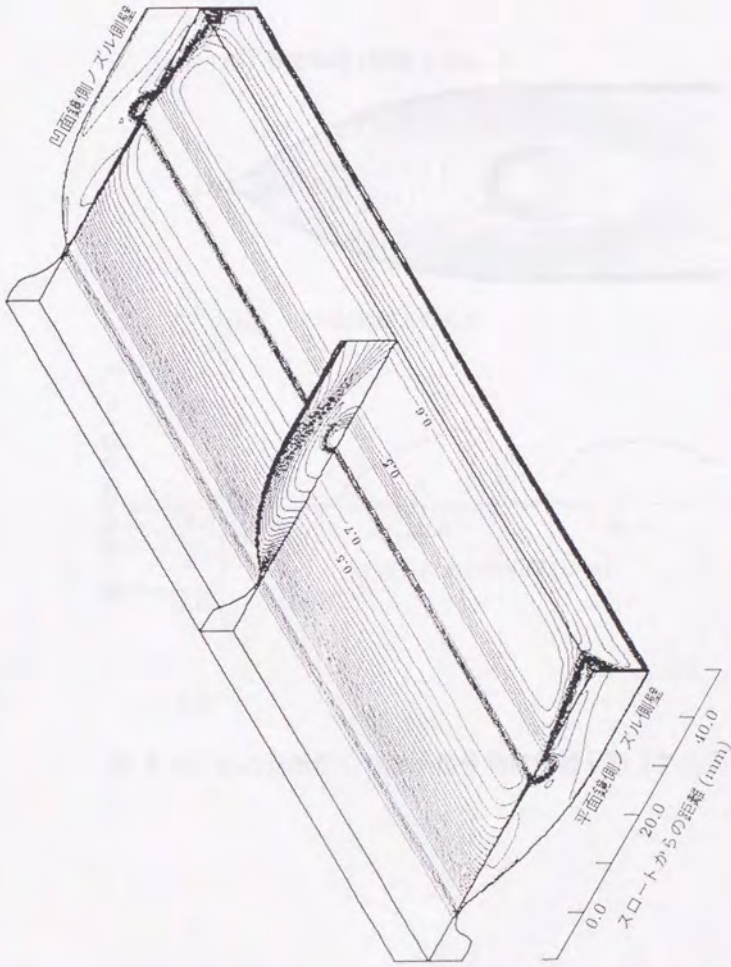


図 6.14: 微小信号利得係数分布 (ケース 4) (単位: m^{-1} , 間隔: 0.1m^{-1})

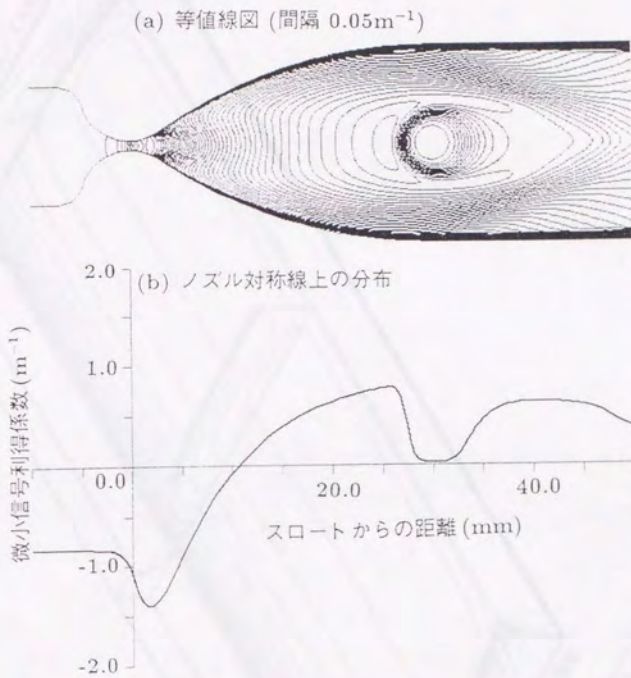


図 6.15: 2次元表示した微小信号利得係数分布 (ケース4)

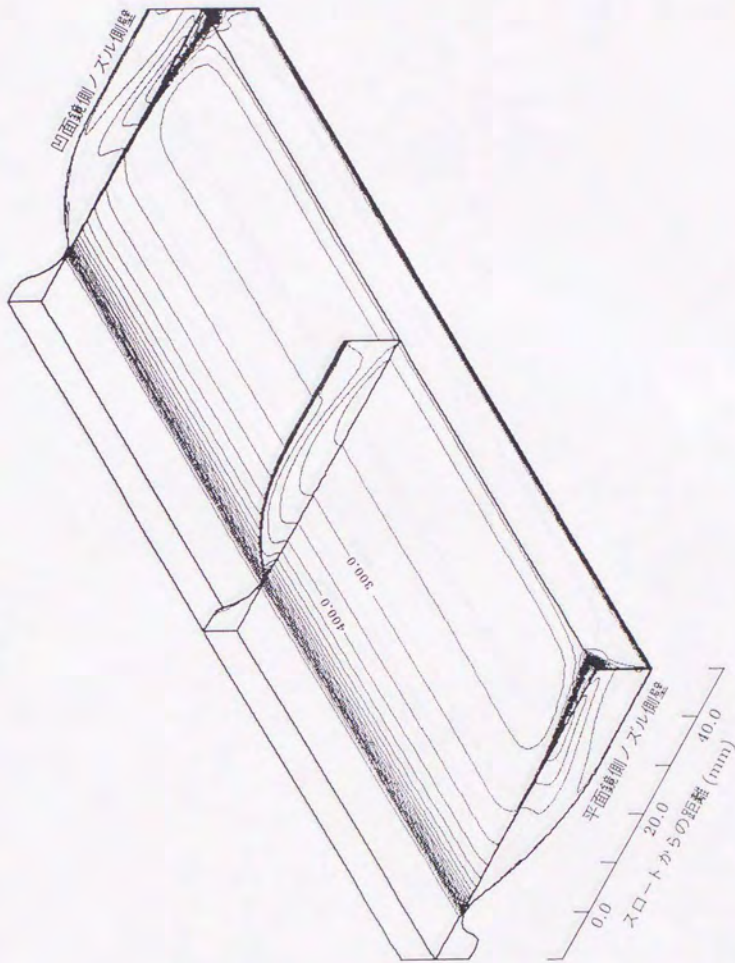


図 6.16: 並進温度分布 (ケース4) (単位:K, 間隔:50K)

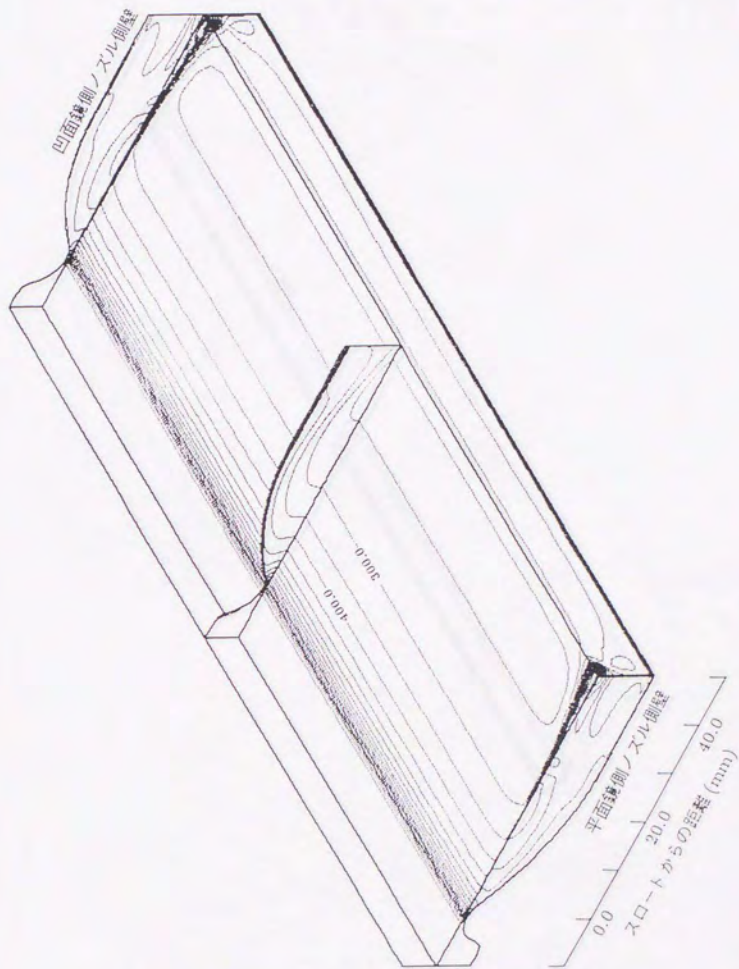


図 6.17: $\text{CO}_2(\nu_{12})$ の振動温度分布 (ケース4) (単位:K, 間隔:50K)

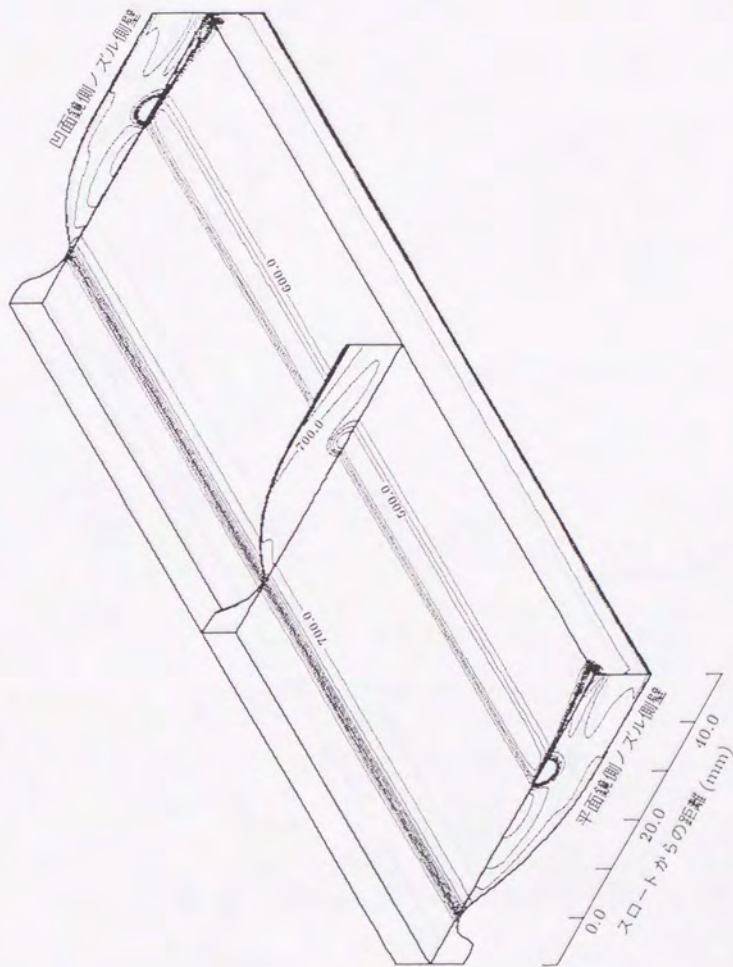


図 6.18: CO₂(ν₃) の振動温度分布 (ケース 4) (単位:K, 間隔:50K)

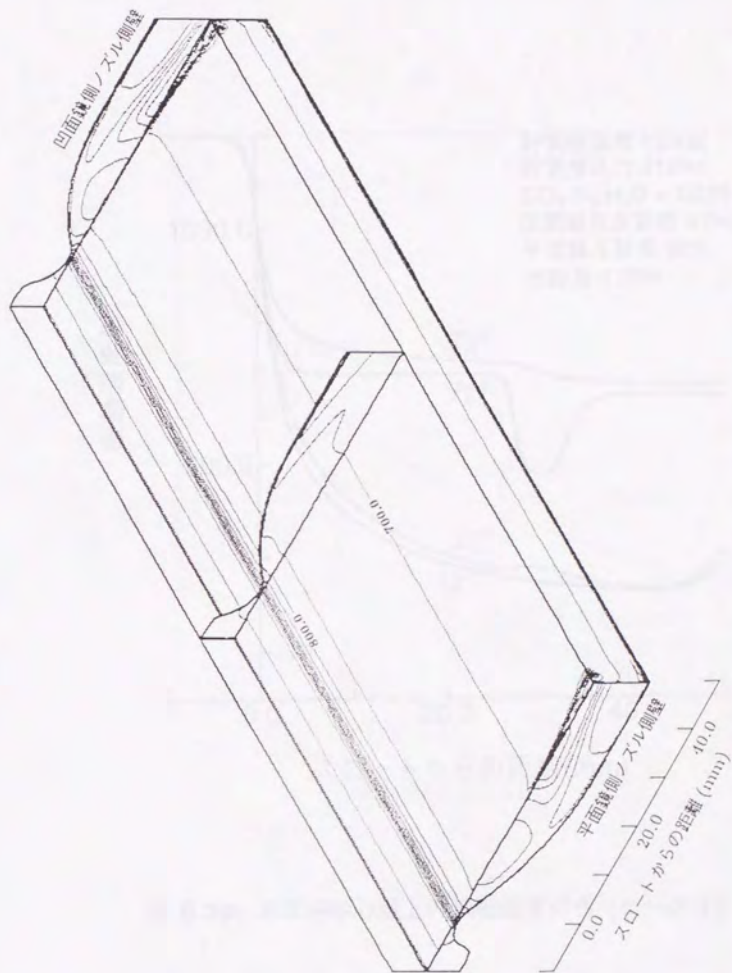


図 6.19: $N_2(\nu_N)$ の振動温度分布 (ケース 4) (単位: K, 間隔: 50 K)

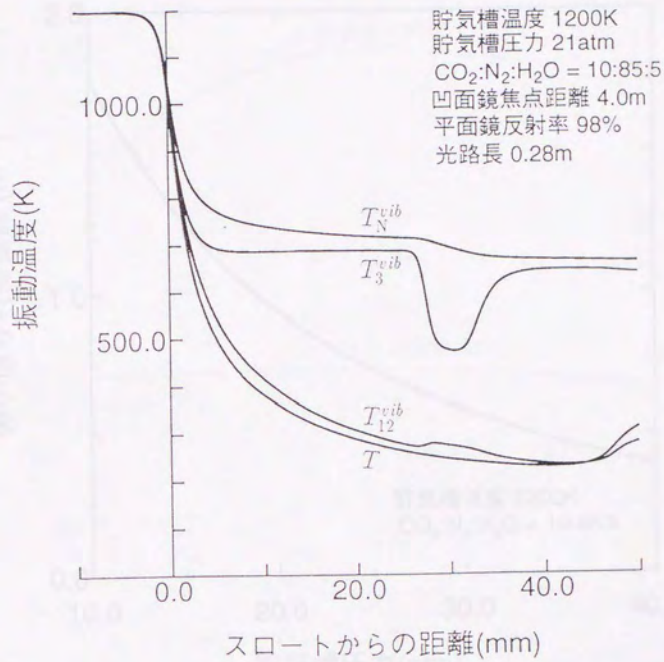


図 6.20: ノズル中心線上の振動温度分布 (ケース 4)

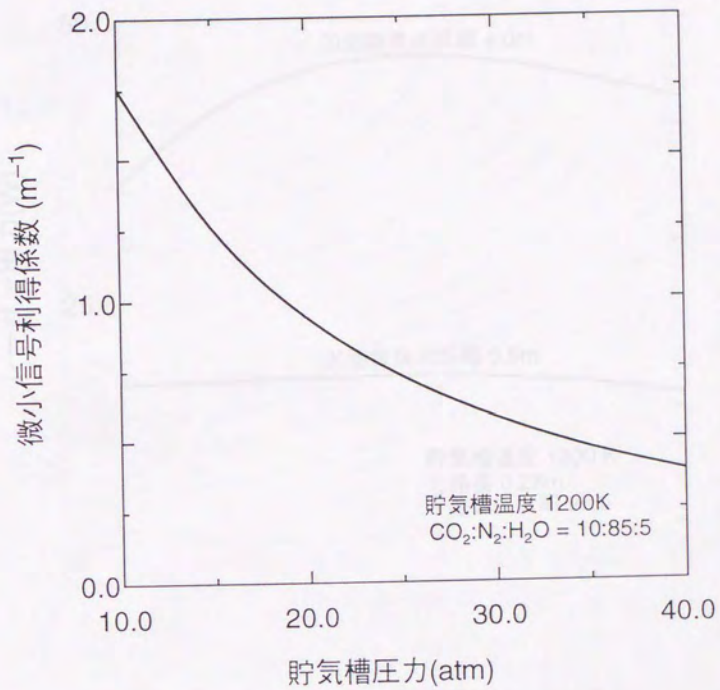


図 7.1: 貯気槽圧力に対する微小信号利得係数特性

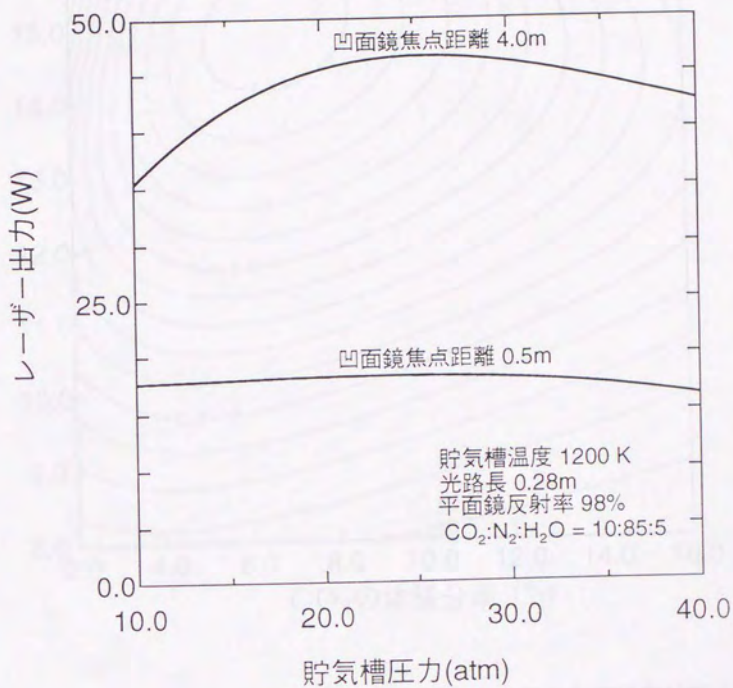


図 7.2: 貯気槽圧力に対する出力特性

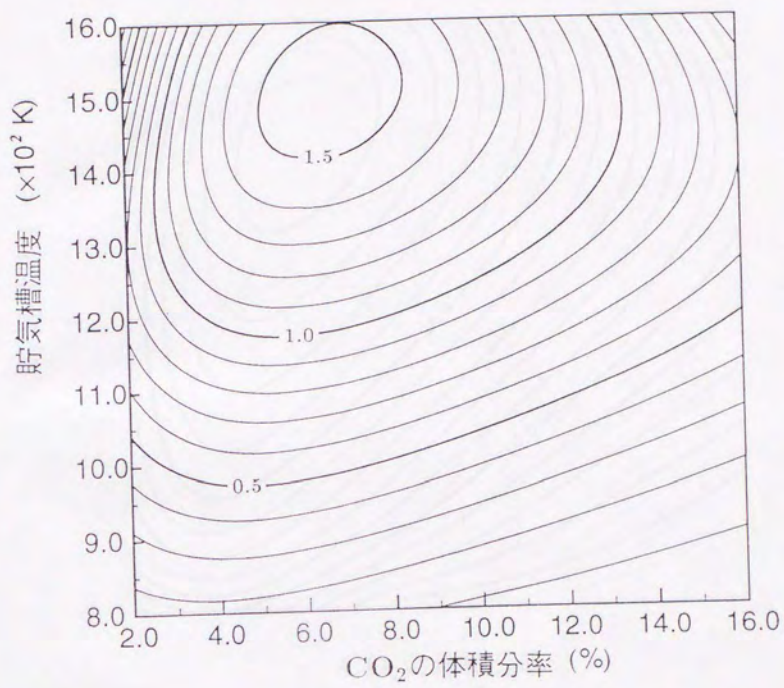


図 7.3: 貯気槽温度および流体組成に対する微小信号利得係数特性 (単位: m^{-1})

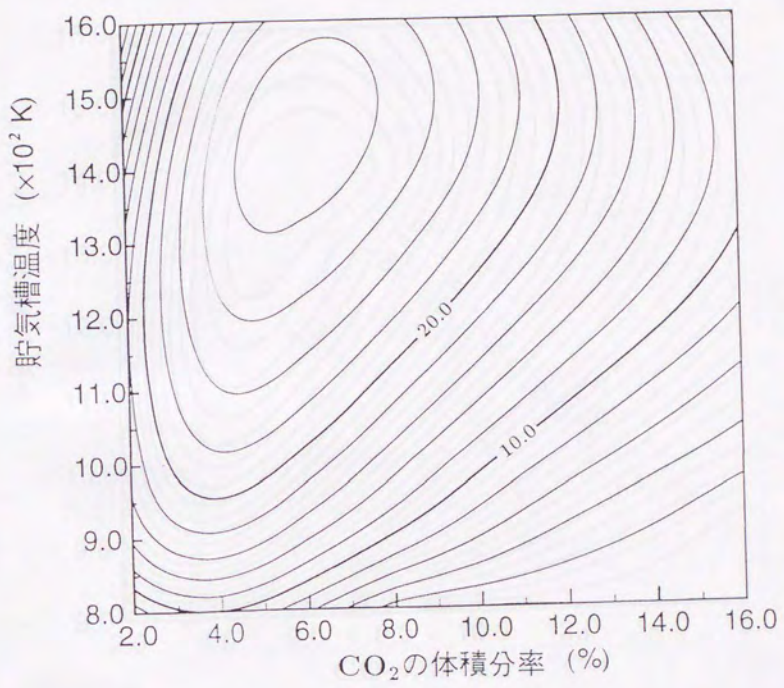


図 7.4: 貯気槽温度および流体組成に対する出力特性 (凹面鏡の焦点距離 0.5m) (単位:W)

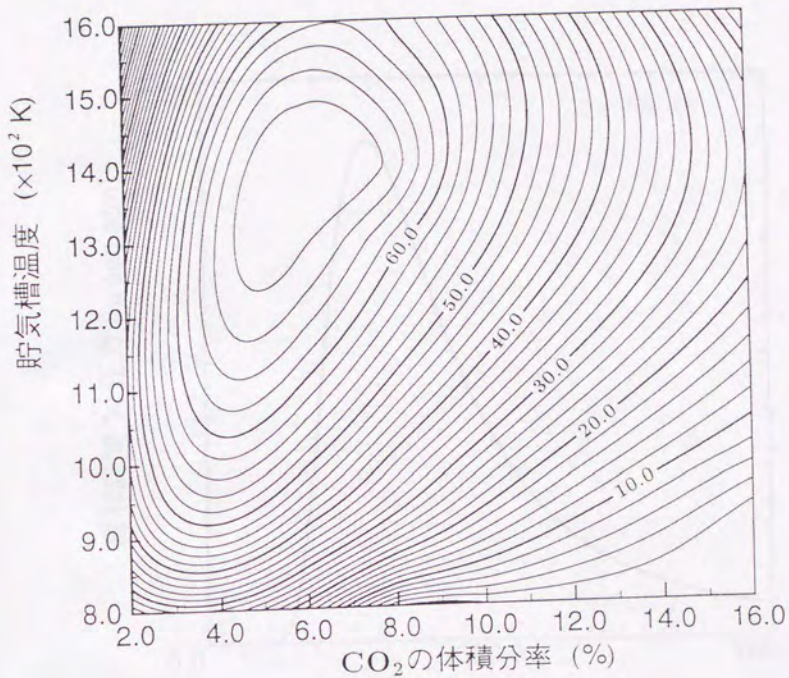


図 7.5: 貯気槽温度および流体組成に対する出力特性 (凹面鏡の焦点距離 4.0m) (単位:W)

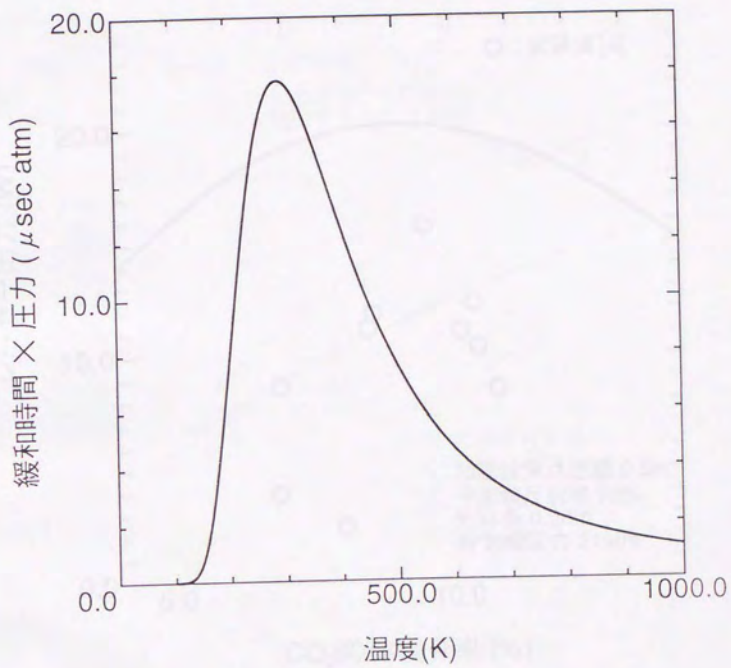


図 7.6: $\text{N}_2(\nu_N)$ と $\text{CO}_2(\nu_3)$ の間の振動緩和時間

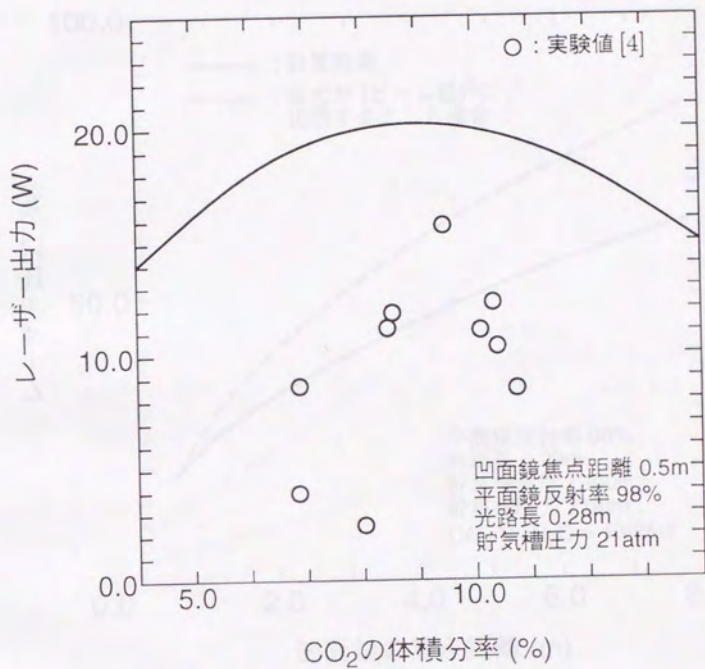


図 7.7: 流体組成に対する出力特性 (実験との比較)

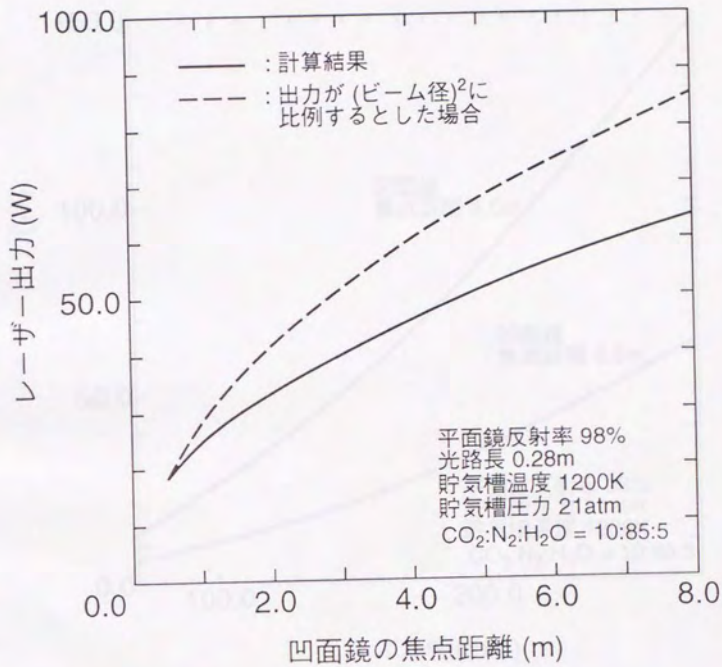


図 7.8: 凹面鏡の焦点距離に対する出力特性

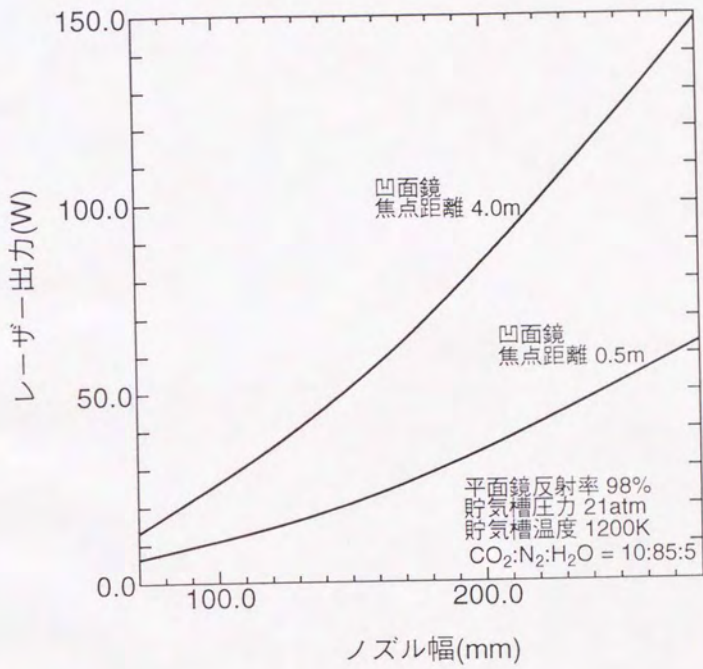
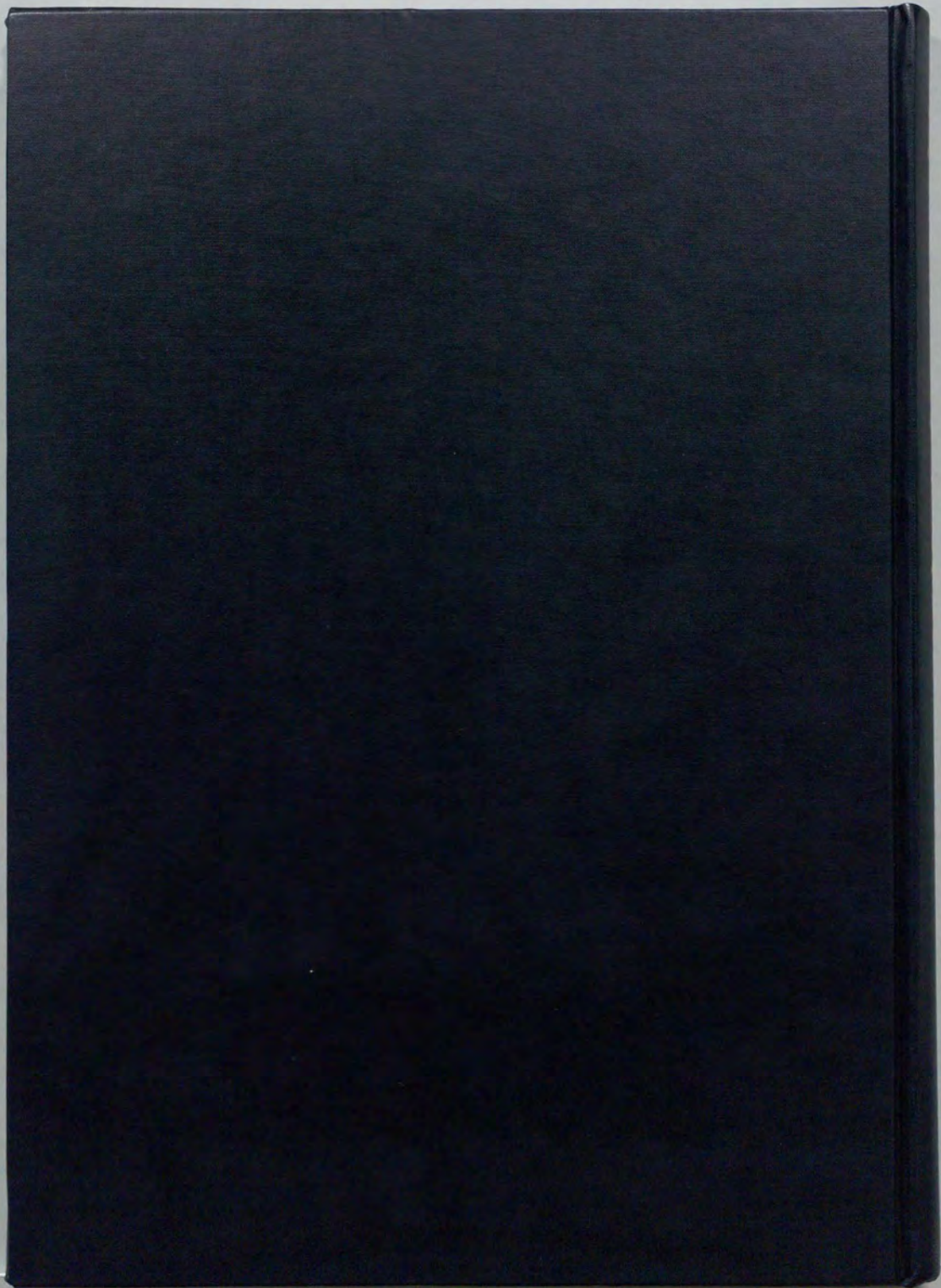


図 7.9: ノズル幅に対する出力特性



inches 1 2 3 4 5 6 7 8
cm 1 2 3 4 5 6 7 8 9 10 11 12 13 14 15 16 17 18 19

Kodak Color Control Patches

© Kodak, 2007 TM Kodak



Kodak Gray Scale



© Kodak, 2007 TM Kodak

A 1 2 3 4 5 6 **M** 8 9 10 11 12 13 14 15 **B** 17 18 19

