

# モンテカルロシミュレーションによる二次元希薄気体流れの解析

Numerical Analysis of Two Dimensional Rarefied Gas Flow by Montecarlo Direct Simulation

小 林 敏 雄\*・松 本 裕 昭\*

Toshio KOBAYASHI and Hiroaki MATSUMOTO

## 1. はじめに

LSI, 超 LSI の基盤となるシリコンウエハーなどの真空槽を利用した技術開発が盛んに行われているが, 槽内の内部流動現象は詳しく解析されていない。真空槽内の低圧下の流動現象は分子どうしの衝突と, 分子と固定壁の衝突が同程度の割合で起こる中間領域の流動とみなせる場合が多い。この領域の解析手段としては, Navier-Stokes の方程式を用いる法<sup>1)</sup>やボルツマン方程式をモデル化して解析する試み<sup>2)</sup>などいくつかの提案があるが, まだ決定的な解析法は確立されていない。その中で中間領域の有効な解析法の一つとして有力視されているモンテカルロ・ダイレクトシミュレーション法<sup>3)</sup>がある。この手法はボルツマン方程式との対応が必ずしも明確ではないとの議論<sup>4)</sup>もあるが, 取り扱いが簡単であり計算処理時間の点からして広く応用が期待されている。

本報では, モンテカルロ・ダイレクトシミュレーション法の概要を述べ, 流れ場がステップ状に拡大する二次元チャンネル内流れに適用した例について報告する。

## 2. 計算手法

計算手法のフローチャートを図 1 に示す。概要は以下のとおりである。物理空間すなわち計算領域をセルと呼ばれる微小空間に分割し, 各セルに模擬分子を配置する。各分子には乱数により初期位置座標, 初期速度が与えられる。時刻を微小時間刻み  $\Delta t_m$  だけ進め,  $\Delta t_m$  後の分子の位置座標, 速度を計算する。順次同様の手続きを繰り返しセルに含まれる分子の平均量として流れ場の巨視的速度, 密度, 温度等の物理量がセルごとに計算される。以下に  $\Delta t_m$  後の分子情報の決め方を詳しく述べる。

本手法では以下の二つの前提に従うものとする。

(i) 分子間の衝突は二体衝突だけとし完全弾性衝突とする。

(ii) 分子は分離の原理<sup>3) 4)</sup>に従う。

分離の原理とは, 微小時間刻み  $\Delta t_m$  を分子の平均自由時

間 (平均衝突時間) より小さく選ぶと位置座標の計算と分子間衝突による速度の計算を別々に扱うことができるという原理である。

### 2-1 分子の移動

現在設定されている速度情報を用いて各分子は他の分子の位置とは無関係に移動させられる。その際, 固定壁と干渉する分子については, 反射条件により速度, 位置が修正され, 壁との運動量, エネルギーのやりとりが計算される。すべての分子について同様の操作を行い,  $\Delta t_m$  後の位置を決定する。

### 2-2 速度の決定

各分子は移動により位置が変化するので分子間衝突の計算を容易にするために各分子がどのセルに属するかが

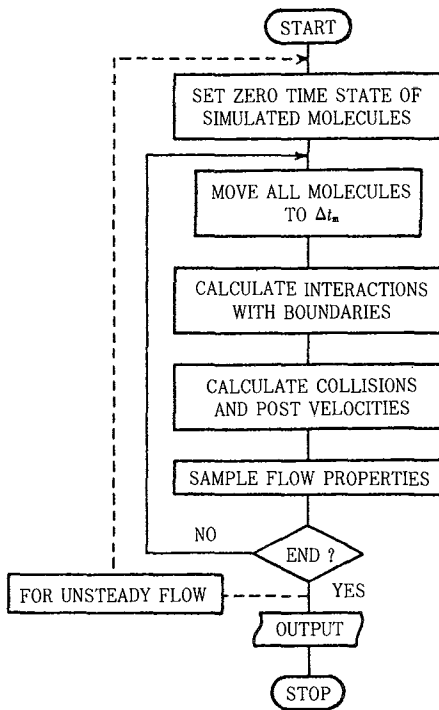


図 1 フローチャート

\* 東京大学生産技術研究所 第 2 部

研 究 速 報

調査される。この結果を基にセル単位で分子間衝突による  $\Delta t_m$  後の各分子の速度を決定する。今、あるセルに  $N$  個の分子が存在していたとする。衝突分子ペアの組み合わせは全部で  $N(N-1)/2$  通りあるが、この組み合わせのすべてについて衝突の有無を判定することは多くの計算量を必要とし非常に多くの時間がかかると考えられる。そこでここでは本手法の最大の特徴であるセルタイム法を用いる。セルタイムとは分子間の衝突を見積るために、セルごと設けられた「専用時計」であり、タイムカウンタと呼ばれる時間刻みにより時刻が進んでいく。タイムカウンタは、分子移動に用いた時間刻み  $\Delta t_m$  を、 $\Delta t_m$  間にセル内で生じる分子間の全衝突回数  $N_c$  で割ったものにとり、次式により与えられる。

$$\tau = \Delta t_m / N_c = 2 / (N n c_r \sigma)$$

ここに  $n$  は気体の数密度、 $\sigma$  は衝突断面積、 $C_r$  は衝突分子対の相対速度、 $N$  はセル内分子数をそれぞれ示す。

セル内に含まれる  $N$  個の分子から乱数を用いて任意の 2 個の分子  $i, j$  を選び出しこれらの速度  $c_i, c_j$  から相対速度  $c_r = |c_i - c_j|$  を計算する。セル内の最大相対速度  $c_r^*$  と比較して  $c_r > c_r^*$  ならば最大値を入れ代える。 $c_r^*$  については初期状態においてあらかじめ予測値、たとえば分子の most probable thermal speed (最大確率熱速度) の 2 倍などをセルごとに与えておく。乱数  $R_n$  を発生させて  $c_r / c_r^* > R_n$  が満たされるまで分子対の抽出を行う。条件が満たされたならばセルタイムを 1 タイムカウンタ分だけ進め衝突後の速度 ( $c'_i, c'_j$ ) を次式により求める。

$$c'_i = (c_i + c_j + c_r R) / 2, \quad c'_j = (c_i - c_j + c_r R) / 2$$

ただし  $R$  はランダムな向きに単位ベクトルである。同様の操作を繰り返しセルタイムが  $\Delta t_m$  に達するまで行う。これにより  $\Delta t_m$  後の分子速度がすべて求まる。

以上 2-1, 2-2 を順次行い、非定常問題においては分子情報のアンサンブル平均をとり、また定常問題では定常

達成後の分子情報の時間平均をとり、流れ場全体の、速度、密度、温度などの物理量が計算される。

### 3. 計 算 例

計算対象とした流れ場は図 2 に示すように流れ場がステップ状に急に変化する二次元チャンネル内流れである。 $t=0$  において流体が  $x$  軸の正方向に  $u = u_\infty$  の速度で急激に動き出すものとする。図中各形状比は次のようである。

$$L_1/H_1 = 5/3, \quad L_2/L_1 = 4, \quad H_2/H_1 = 25/6$$

#### 3-1 セル分割

計算領域のセル分割数は、 $x$  方向に 40、 $y$  方向に 25 とし等間隔正方形セルとする。またセルの一辺の大きさは分子の平均自由行程よりも小さくするのが望ましいとされており、本報ではセルの一辺を平均自由行程の半分の大きさにとった。

#### 3-2 境界条件

固定壁と干渉する分子は反射条件により位置、速度を与え直すが、反射の機構は現在のところ十分に解明されていない。ここでは Maxwell によって提唱された鏡面反射壁と拡散反射壁の二つのモデルを採用する。鏡面反射壁とは反射する分子の壁に垂直な運動量だけが逆転する条件の壁で、拡散反射壁とは反射する分子は壁に衝突する前の状態とは無関係にある平衡状態に達して、ランダムな向きに反射する条件の壁である。物理的にみて拡散反射壁が実際の壁に近いと考えられる。本報では、上壁に鏡面反射壁、下壁には拡散反射壁を用いる。また拡散反射した分子は壁温度になって反射するものとする。計算領域から流出した分子はすべて消去し、入口からは一定量の分子が流入しているものとする。流入分子の座標

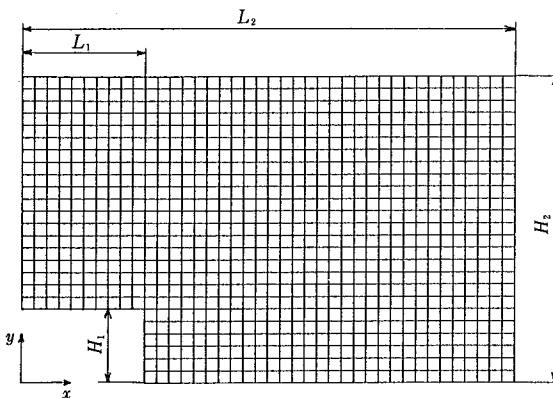


図 2 セル分割図

表 1 無次元化諸量

(1) 温度 $T$	熱平衡分子温度	$T_\infty$
(2) 速度 $C$	分子 most probable thermal speed	$C_\infty$
(3) 長さ $L$	分子平均自由行程	$\lambda_w$
(4) 時間 $t$	(2) と (3) の商	$\lambda_w / C_\infty$

表 2 計算条件

分 子 数	$M=30$ 個/セル
分 子 温 度	$T_\infty^* = 1.0$
壁 面 温 度	$T_w^* = 1.0$
一 様 流 速	$U_\infty^* = 2.0$
時 間 刻 み	$\Delta t_m^* = 0.1$

研究速報

は乱数により入口部に与えられ、速度はやはり乱数を用いて初期状態の条件を与える。

3-3 無次元化

計算における無次元化は表1に示した諸量を用いて行い、\*印を無次元量として

$$T^* = T/T_\infty, C^* = C/C_\infty, L^* = L/\lambda_\infty, t^* = tC_\infty/\lambda_\infty$$

で与える。

3-4 計算条件

計算条件は表2に示すように初期条件として各セルに30個の分子を配置し、乱数により座標、Maxwell平衡分布から熱速度をそれぞれ与えx方向速度成分には $u_x^* = 2$ を加える。拡散反射壁の温度は $T_w = 1.0$ とする。また乱数の初期値を変えて25回の計算を行った。

4. 計算結果と考察

計算は非定常問題として扱い、速度、温度、密度、圧力の各物理量をアンサンブル平均として求めた。本計算で得られた結果は25個分の巨視的物理量のアンサンブル平均をとったことに相当し、分子のサンプル数は1セルあたり、ステップの背面で $10^2$ のオーダー以上その他の領域では $10^3$ のオーダーである。また流れ場の希薄度を示すクヌードセン数 $K_n$ は、ステップの高さ $H_1$ を代表長さにとり、 $K_n = \lambda_\infty/H_1 = 1/3 = 0.33$ ( $\lambda_\infty$ :分子の

平均自由行程)である。図3に無次元時刻 $t^* = 15.0$ における速度分布図を示す。流れは層流の様相を示しており、拡散反射壁近くでは流速が遅くなっていること、ステップの後流で逆流が存在していることが示されている。一方鏡面反射壁側では流れの減速はなく一様流となっていることが示されている。

Birdによれば計算において1セルあたりの模擬分子数が20を下回ると統計的なゆらぎが大きくなり正しい結果が得られないとしている。また1セルあたりの模擬分子数が20以上でも、結果を得るためのサンプル数が少なければ同様のことが言える。本計算においてもステップの背後で模擬分子数が20を下回るセルが存在した。図中にもサンプル数不足が原因と考えられる部分が見られる。ステップの後流側は物理的にみて、密度の低下が予想されるので、この領域では分子の平均自由行程が大きくなっていると考えられる。そのため他の部分と比較して、セルを大きくとればサンプル数を増やすことができると思われるが、これからの検討を要する。現在のところ流れ場の全体像としては定性的にみて良く表現されていると思われる。図4に $t^* = 15.0$ の等密度線図を示す。図より流れの入口部直後の拡散壁近くに高密度の部分が見られるが、これは3-2項における条件の影響によるものと考えられる。3-2項の条件は、流入する分子は

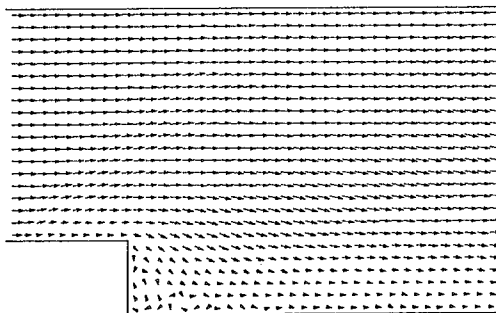


図3 速度分布 ( $t^* = 15.0$ )



図5 等温度線図 ( $t^* = 15.0$ )

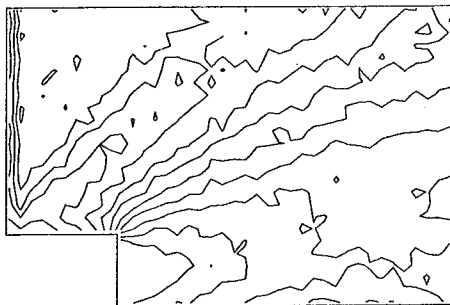


図4 等密度線図 ( $t^* = 15.0$ )

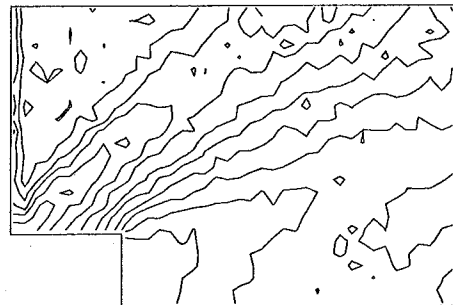


図6 等圧力線図 ( $t^* = 15.0$ )

研究速報

## 研 究 速 報

すべて  $x$  軸の正方向に  $u^* = u_{\infty}^*$  の速度が与えられており、これは  $y$  軸方向に対して常に一様な速度分布を仮定したことになる。そのため拡散反射壁の影響による急な減速が原因と考えられる。またステップ角部付近から Expansion Wave が発生していることがわかる。図 5 に同時刻の等温度線図、図 6 に等圧力線図を示す。いずれも等密度線図と同様の様相を示しているが、等温度線図においてステップ後流に、高温部が存在していることが興味深い。これも Expansion Wave の影響と思われる。

## 5. ま と め

モンテカルロ・ダイレクトシミュレーション法によりステップ状に拡大する二次元チャンネル内希薄気体流れの数値シミュレーションを行った。計算結果は定性的には流れ場を良く表現していると思われる。今後実験との比較検討およびシミュレーションの技術的問題としてサ

ンプル数の少ないセルの処理を検討する必要がある。前者に対しては実験が極めて困難なことがネックとなっている。後者については、セルを大きくとったり近傍セルと融合するなどの処理が考えられる。

本計算は東京大学計算機センター M280-H システムにより計算され、1 ステップ ( $1 \Delta t_m$ ) あたりの処理時間は、約 5.4 CPU sec であった。

(1985 年 10 月 29 日受理)

## 参 考 文 献

- 1) Tannehill, J. C., Mohling, R. A. et al, AIAA 73-200 January (1973)
- 2) Chu, C. K. Rarefied Gas Dynamics, Academic press (1967)
- 3) Bird, G. A, Molecular Gas Dynamics, Oxford Univ. press (1976)
- 4) Nanbu, K, J. Phys. Soc. Jpn 52-10 (1983)

