中間流・分子流のシミュレーション法 —大面積微小ギャップの排気への応用—

南部 健一*1・渡部 安雄*2・米村 茂*1

(受理2000年2月16日, 掲載決定2000年5月6日)

Simulation Method of Flows in Transitional and Free-Molecular Regimes
—Application to Pumping of a Narrow Gap Between Large Plates—

Kenichi NANBU*1, Yasuo WATANABE*2 and Shigeru YONEMURA*1

*1(Institute of Fluid Science, Tohoku University, Katahira 2-1-1, Aoba-ku, Sendai 980-8577)

*2(Department of Mechanical Engineering, Tsukuba College of Technology, Amakubo 4-3-15, Tsukuba 305-0005)

(Received February 16, 2000, Accepted May 6, 2000)

1. はじめに

分子の平均自由行程 λ は

$$\lambda = \frac{1}{\sqrt{2} \pi d^2 n} \quad (1)$$

で与えられる。 d は分子の直径, n は 1 m^3 に含まれる分子の数で数密度という。 d は N_2 では 0.375 nm , O_2 では 0.361 nm である。気体の状態方程式は

$$p = nkT \quad (2)$$

である。ただし $k = 1.38 \times 10^{-23} \text{ JK}^{-1}$ はボルツマン定数, T は絶対温度である。式(2), (1)から

$$\lambda = \frac{kT}{\sqrt{2} \pi d^2 p} \quad (3)$$

となる。 20°C の空気について考え, 空気分子の直径 d を 0.37 nm とすると, 上式から

$$\lambda (\text{mm}) = \frac{6.65}{p (\text{Pa})} \quad (4)$$

任意の $p (\text{Pa})$, $T (\text{K})$, $d (\text{nm})$ に対する平均自由行程は

$$\lambda (\text{mm}) = \frac{6.65}{p (\text{Pa})} \left(\frac{T (\text{K})}{293} \right) \left(\frac{0.37}{d (\text{nm})} \right)^2 \quad (5)$$

で与えられる。

流れの代表長 (例えばギャップの大きさ) を L とする。 $Kn = \lambda/L$ をクヌッセン数という。希薄な気体の流れの性質は Kn に支配される。 $Kn > 10$ の流れは自由分子流 (分子流) と呼ばれ, 分子間の衝突を無視できる。すなわち分子と固体壁の衝突のみによって流れが決まる。自由分子流の流量は, 管路の形状によって決まるコンダクタンスが分かれば求められる。 $0.01 < Kn < 10$ の流れは中間流と呼ばれ, ボルツマン方程式を用いて流れを解析する必要がある。 $Kn < 0.01$ の流れは連続流 (粘性流) と呼ばれ, ナビエ・ストークス方程式に支配される。中間流のうち, $0.01 < Kn < 0.1$ の流れはすべり流とも呼ばれ, ナビエ・ストークス方程式にすべり境界条件を適用して流れを解析してもよい。真空排気では, p が減少するにつれ λ (したがって Kn) が増大し, 一つの流れが時間とともに連続流, 中間流, 自由分子流を経てゆく。高真空に到達するまでの時間は, 中間流以降の排気に支配されるので, ここでは中間流と自由分子流のシミュレーション法について述べる。この方法は DSMC 法^{1,2)} (Direct Simulation Monte Carlo method) と呼ばれるもので, 中間流や自由分子流のほか連続流にも適用できる。

*1 東北大学流体科学研究所 (〒980-8577 仙台市青葉区片平 2-1-1)

*2 筑波技術短期大学 (〒305-0005 つくば市久保 4-3-15)

2. シミュレーション法

具体例によって DSMC 法を説明する。プラズマディスプレイパネル (PDP) の模型として、狭いギャップを持つ平行平板を考える。平板の大きさを $820\text{ mm} \times 610\text{ mm}$ とし、ギャップを 0.1 mm とする。時刻 $t=0$ で平板間のギャップには 533 Pa ($=4\text{ Torr}$) のネオンが充填されているものとする。排気はチップ管を通してではなく、ギャップの周辺すべてを通して行なわれるものとする。すなわち $t=+0$ でギャップの四周に有った仮想的な固体壁が瞬時に取り除かれて排気が始まる。平板の外は完全真空とする。 $t=0$ でのネオンの温度は平板のペーキング温度に等しいものとする。

計算領域は

$$0 < x < a, 0 < y < b, 0 < z < \delta$$

である。ただし $a=820\text{ mm}$, $b=610\text{ mm}$, $\delta=0.1\text{ mm}$ である。ガスの初期圧を p_0 ($=533\text{ Pa}$)、初期温度 (ペーキング温度) を T_0 (K) とする。

DSMC 法は流れの時間発展を計算する方法である。計算領域にある全分子の運動と衝突を各時間ステップごとに計算する。分子の位置から流れ場の数密度が求まり、分子の速度からは流速と温度が求まる。DSMC 法の詳細を以下に説明する。

2.1 セル分割

DSMC 法では、まず計算領域 $a \times b \times \delta$ を小さな $\Delta x \times \Delta y \times \Delta z$ に分割する。セルの境界は

$$x_i = i\Delta x, (i=0, 1, \dots, L_x)$$

$$y_j = j\Delta y, (j=0, 1, \dots, L_y)$$

$$z_k = k\Delta z, (k=0, 1, \dots, L_z)$$

で与えられる。 L_x, L_y, L_z は分割数で

$$\Delta x = a/L_x, \Delta y = b/L_y, \Delta z = \delta/L_z$$

となる。セルの大きさ $\Delta x, \Delta y, \Delta z$ はガスの平均自由行程 λ 程度の大きさにとる。ネオンの分子直径 d は 0.2602 nm である。ペーキング温度として 300°C , 400°C , 500°C , したがって

$$T_0 = 573\text{ K}, 673\text{ K}, 773\text{ K}$$

の場合を考える。 $T_0=573\text{ K}$, 圧力 p_0 ($=533\text{ Pa}$) のとき、式(5)よりネオンの平均自由行程は $\lambda=0.0493\text{ mm}$ となる。 $\Delta z \approx \lambda$ にとるため $L_z=2$ とする。 $\Delta x \approx \lambda, \Delta y \approx \lambda$ にとると、 L_x, L_y が非常に大きくなり計算量が大きすぎる。流れの勾配が小さいときにはセルの大きさを大きくとっても構わない。PDP では x 方向および y 方向の流れの勾配は小さいと予想される。そこで $\Delta x=\Delta y=10\text{ mm}$ ($\approx 200\lambda$)、したがって $L_x=82, L_y=61$ とする。 $\Delta x, \Delta y$ の大きさが気になる場合には、 $\Delta x=\Delta y=5\text{ mm}$ に対する流れ解析も行ない、得られた結果が $\Delta x, \Delta y$ の大き

さに依存しないことを確かめておく。

2.2 分子の初期条件

DSMC 法では、時々刻々変化する分子の位置と速度を計算してゆく。しかしすべての分子の運動を追跡する必要はない。標準状態 0°C , 1 atm での気体の数密度 n_{ST} は

$$n_{\text{ST}} = 2.687 \times 10^{25}\text{ m}^{-3}$$

である。したがって p_0 ($=533\text{ Pa}$)、 T_0 ($=573\text{ K}$) で計算領域 $a \times b \times \delta$ に含まれる分子の数は

$$ab\delta \times n_{\text{ST}} \times \frac{0.533}{101.3} \times \frac{273}{573} = 3.37 \times 10^{18}$$

体積 $\Delta x \Delta y \Delta z$ の 1 つのセルには 3.37×10^{14} 個含まれる。この 3.37×10^{14} 個の中から N_c ($=5$) 個だけランダムに取り出して追跡することにする。ランダムに取り出した分子をサンプル分子と呼ぶ。1 つのサンプル分子は

$$W = \frac{3.37 \times 10^{14}}{N_c} = 6.74 \times 10^{13}$$

の実分子を表わしている。この W を重みという。空間のある一点に 1 つのサンプル分子が存在すれば、その点に W 個の実分子が位置していると考えてよい。わずか 5 個のサンプル分子の運動を調べれば W 個の実分子の様子が十分正確に分かる。これは、3000 人程度を対象とした世論調査から 12,000 万人の国民の意識を調査する方法と同じである。サンプル分子の総数 N_0 ($=N_c L_x L_y L_z$) は 50,020 である。以下、混乱がない限りサンプル分子を単に分子と呼ぶことにする。

各セルに N_c ($=5$) 個の分子を置き、各分子に位置 $r(x, y, z)$ と速度 $c(c_x, c_y, c_z)$ を与える。分子は各セルの中に一様に分布させる。したがって領域 (x_{i-1}, x_i) , (y_{j-1}, y_j) , (z_{k-1}, z_k) を占めるセル (i, j, k) 内の 1 つの分子の座標は

$$x = (i-U)\Delta x$$

$$y = (j-U)\Delta y$$

$$z = (k-U)\Delta z$$

ただし 3 つの U は $0 < U < 1$ の一様乱数であり、すべて異なるものとする。以下においても異なる一様乱数 U をすべて同一の記号 U で表わすことにする。

各分子の初期速度はマクスウェル分布から抽出する。実分子 1 個の質量を m とし、気体定数を R ($=k/m$) とすると

$$c_x = A \cos \theta$$

$$c_y = A \sin \theta$$

$$c_z = A' \sin \theta'$$

となる。ただし $\theta=2\pi U$, $\theta'=2\pi U'$

$$A = (-2RT_0 \ln U)^{1/2} \quad (6a)$$

$$A' = (-2RT_0 \ln U')^{1/2} \quad (6b)$$

である。4つの U から1つの分子の c が決まる。

2.3 分子の運動

すべての分子を時間ステップ Δt だけ動かす。動かす前の位置を r_0 、速度を c_0 とすると Δt 後には

$$r = r_0 + c_0 \Delta t \quad (7)$$

になる。 Δt は平均自由時間以下にとる。すなわち

$$\Delta t = \alpha \frac{\lambda}{\sqrt{2RT_0}} \quad (8)$$

とし $\alpha < 1$ にとればよい。式(7)の r が計算領域 D に含まれているなら、 Δt 時間後の分子の速度 c は $c = c_0$ である。そうでないときは次のようにする。 $\delta_1 = \delta/2$, $a_1 = a/2$, $b_1 = b/2$ とする。まず分子の z が条件

$$|z - \delta_1| > \delta_1 \quad (9)$$

を満足しているかどうか調らべる。この条件を満足していない分子は

$$|x - a_1| > a_1 \text{ または } |y - b_1| > b_1$$

を満たしており、計算領域 D の外にあるので排気されたものとして消去する。式(9)を満たすときは、まず面 $z=0$ または面 $z=\delta$ に達する時間 $\Delta t'$ を次式から求める。

$$z_0 + c_{0z} \Delta t' = z_w$$

ただし z_w は $c_{0z} < 0$ で 0 , $c_{0z} > 0$ で δ とする。入射点は

$$x' = x_0 + c_{0x} \Delta t'$$

$$y' = y_0 + c_{0y} \Delta t'$$

$$z' = z_w$$

となる。

$$|x' - a_1| > a_1 \text{ または } |y' - b_1| > b_1$$

を満たすときは、分子は領域 D の外にあるので消去する。そうでないときは、分子は $z = z_w$ にある上下いずれかの面で反射されるので、反射後の速度と位置を求める。反射後の速度 c' は、壁温 T_0 の壁での乱反射を仮定すると

$$c'_x = A \cos \theta$$

$$c'_y = A \sin \theta$$

$$c'_z = -A' \operatorname{sgn}(c_{0z})$$

で与えられる。ただし $\theta = 2\pi U$ であり、 $\operatorname{sgn}(c_{0z})$ は $c_{0z} < 0$ で -1 , $c_{0z} > 0$ で $+1$ である。 A, A' は式(6)で与えられる。 c' が決まったので、 Δt 後の分子の位置 r は

$$x = x' + c'_x (\Delta t - \Delta t')$$

$$y = y' + c'_y (\Delta t - \Delta t')$$

$$z = z_w + c'_z (\Delta t - \Delta t')$$

となる。もちろん分子の速度は c' である。もしこのように決めた分子の (x, y, z) が領域 D に含まれていれば、その分子の運動の計算は終了する。含まれていないときは、条件(9)以降の手順にある分子の消去や反射の計算を繰り返し、以後の時間ステップで計算対象となる

分子はすべて領域 D に含まれるようにしておく。なお領域 D に残っている分子の総数を N_t とすると、平均圧力 $\bar{p}$ は

$$\bar{p} = p_0 (N_t / N_{t0}) \quad (10)$$

から求められる。 p_0 は初期圧力、 N_{t0} は $t=0$ でのサンプル分子の総数である。

2.4 分子の衝突

分子は Δt 時間運動する間に他の分子と衝突することがある。しかし Δt を平均自由時間より十分小にとる(式(8)の係数 α を $\alpha \ll 1$ にとる)と、分子の運動と衝突を分離して考えてよい。すなわちこの分離の原理のおかげで、すべての分子を無衝突で Δt 時間走らせたのち、衝突をした分子は速度を衝突後の速度に置き換えればよい。なお経験上、式(8)の α は $\alpha \ll 1$ ではなく $\alpha < 1$ にとれば十分であることが知られている。分子衝突の取り扱いには種々あるが、ここでは最大衝突数法について述べる。各セル内で起こる衝突は他のセルでの衝突に無関係に扱う。したがってどの分子も、衝突相手は自分の属するセルの分子から選ばれる。分子は直径 d の剛体球であるとする。

あるセルに着目し、ここに N 個のサンプル分子が含まれているとする。サンプル分子間の衝突について考えよう。 N 個の分子の速度を $c_1, c_2, \dots, c_N$ とする。分子の平均熱速度を $\bar{C}$ とすると、1つの分子が単位時間に衝突する回数 ν (s^{-1}) は

$$\nu = \frac{\bar{C}}{\lambda} = n \bar{g} \sigma_T \quad (11)$$

となる。式(1)を用いた。衝突断面積 σ_T は $\sigma_T = \pi d^2$ であり、また2分子間の平均相対速度 $\bar{g}$ は $\bar{g} = \sqrt{2} \bar{C}$ で与えられることを用いた。セル内のサンプル分子 i に着目すると式(11)の $\bar{g}$ は

$$\bar{g} = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N g_{ij}$$

で近似できる。ただし $g_{ij} = |c_j - c_i|$ である。 $g_{ii} = 0$ である。しかしボルツマン方程式から、上式の $1/N$ を $1/(N-1)$ で置き換えてはいけないことが分かっている。

$\bar{g}$ を式(11)に代入し、 $\nu \Delta t$ が $\nu \Delta t < 1$ のとき分子 i の衝突確率 P_i を表わすことに注意すると

$$P_i = N^{-1} n \Delta t \sum_{j=1}^N g_{ij} \sigma_T = \sum_{j=1}^N P_{ij} \quad (12)$$

ただし

$$P_{ij} = N^{-1} n g_{ij} \sigma_T \Delta t \quad (13)$$

である。式(13)の P_{ij} は分子 i が Δt 時間に分子 j と衝突する確率と考えられる。分子 i は相対速度 g_{ij} が大きい相手と衝突しやすいことが分かる。今着目しているセル内で Δt 時間に起こる衝突の回数 N_{col} は

$$N_{\text{col}} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N P_i = \frac{1}{2N} n \sigma_T \Delta t \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N g_{ij} \quad (14)$$

となる。すべての P_i が 1 のとき、衝突する分子の数は N であり、衝突回数は $N/2$ である。このため、因子 $1/2$ が必要となる。式(14)の2重和を求めるには、 $(N^2 - N)/2$ 個の g_{ij} を計算する必要がある。この計算量がほぼ N^2 に比例することは、計算能率を著しく低下させる。そこで g_{ij} の最大値 g_{max} を適当に見積り、式(14)の g_{ij} をすべて g_{max} で置き換えた衝突数(最大衝突数 N_{max})を N_{col} の代わりに用いることにする。 N_{max} はすぐ求まり

$$N_{\text{max}} = \frac{1}{2} (N-1) n g_{\text{max}} \sigma_T \Delta t \quad (15)$$

となる。数密度 n は

$$n = \frac{WN}{\Delta x \Delta y \Delta z}$$

から求まる。 W は重みである。式(8)の λ が σ_T に反比例するので、 N_{max} は σ_T に依存しなくなる。

N_{max} は N_{col} を過大に見積ったものであり、次の補正が必要となる。すなわち、着目しているセルに対し N_{max} 回の衝突を計算する。ただし選ばれた分子対 (i, j) を確率 g_{ij}/g_{max} で本当に衝突させる。この手順をフォートラン風にまとめると

```
DO i=1, Nmax
  Make a pair (i, j) randomly
  Obtain gij
  IF (U < gij/gmax) then
    let the pair (i, j) collide,
    replace pre-collision velocities by
    post-collision velocities
  ELSE
    No collision
  END IF
END DO
```

となる。ここに U は 0~1 の乱数である。

対 (i, j) が衝突するときは、衝突後の速度 (c'_i, c'_j) は

$$c'_i = w_{ij} - \frac{1}{2} g_{ij} \mathbf{R}$$

$$c'_j = w_{ij} + \frac{1}{2} g_{ij} \mathbf{R}$$

で与えられる。ただし $g_{ij} = |c_j - c_i|$ であり、 $w_{ij} = [(c_i + c_j)/2]$ は重心の速度、 $\mathbf{R}$ はランダムな方向を持つ単位ベクトルである。 $\mathbf{R}$ の直角座標成分を

$$R_x = \sin \theta \cos \varphi$$

$$R_y = \sin \theta \sin \varphi$$

図1 狭空間の排気特性

$$R_z = \cos \theta$$

と置くと、 $\cos \theta = 1 - 2U$, $\sin \theta = + (1 - \cos^2 \theta)^{1/2}$, $\varphi = 2\pi U$ となる。 (c_i, c_j) から (c'_i, c'_j) への置き換えは衝突が起こるたびに行なう。したがって DO ループが N_{max} 回まわるうちに、複数回衝突するサンプル分子も有りうることになる。これは許される。なぜなら最大衝突数法のアルゴリズムは Kac 方程式に基づいているからである。

2.5 データのサンプリング

分子の運動と衝突の計算はセットになっており、各 Δt に対しこの計算を行なう。データのサンプリングを 100 ステップ置きに行なうなら、 $100\Delta t$, $200\Delta t$, ... ごとに各セルでの数密度 n , 流速 V , 温度 T を次式から求める。

$$n = \frac{WN}{\Delta x \Delta y \Delta z}$$

$$V = \frac{1}{N} \sum_i c_i$$

$$T = \frac{N}{3R(N-1)} \left(\frac{1}{N} \sum_i c_i^2 - V^2 \right)$$

ここに N はセル内のサンプル分子の数、和はセル内の N 個のサンプル分子についてとる。式(10)は、どの時刻でも平板間の狭いギャップではガス温度 T は壁温 T_0 に等しいと仮定して、状態方程式 $p = nkT$ からギャップ間の平均圧力 $\bar{p}$ を求める式である。

図1に式(10)から求めた平均圧力 $\bar{p}$ と時間 t の関係を片対数で示す。 $\bar{p}$ は指数関数的に減少する。ペーキング温度が高いとより速やかに排気されることが分かる。図2はギャップの圧力分布 $p/\bar{p}$ を示す。どの時刻においても圧力分布はほぼ相似である。すなわちどの時刻においても、 $p/\bar{p} = 0.5 \sim 2.5$ の圧力勾配が見られる。このように、DSMC 法を用いるとギャップにおける圧力場や流

図2 ギャップの圧力分布

れ場を求めることも可能である。計算には、VT-Alpha (533 MHz) の21164A (1 CPU) で、1 ケースあたり数日要した。

本講義が開発現場で活かされるようプログラムを付けておく。2010~2140行では、データのゆらぎが増大しないようサンプル分子の総数を2倍にしている。2150~2180行では、クヌッセン数が100を越えたとき分子間衝突の計算を省略している。本プログラムを多少変更すればいろいろな排気の問題に適用できるはずである。プログラムは、いずれ <http://www.ifs.tohoku.ac.jp/> 上で公開する予定である。

謝辞

計算にさいし近藤修司君、松岡道友君の助力があった。謝意を表す。

文献

- 1) 南部健一：数値流体力学，(保原 充・大宮司久明編)，(東京大学出版会，東京，1992)，初版，第13章，287-324頁。
- 2) 南部健一：原子・分子モデルを用いる数値シミュレーション，(日本機械学会編)，(コロナ社，東京，1996)，初版，第3章，76-127頁。[混合気体や多原子分子を対象とした DSMC 法について述べている]。

```

0010c program narrow
0020c Pumping of a narrow gap between two plates
0030c Kenichi Nanbu, Institute of Fluid Science, Tohoku University
0040c January 1, 2000
0050c parameter(cputm=7000.)
0060c parameter(lxp=82,lyp=61,lzp=2,ncp=5,ntp=lxp*lyp*lzp*ncp,ntpl=ntp/
0070c & 1,lx=lxp,ly=lyp,lz=lzp,nc0=ncp,nmin=5000,lt=3,nstep=200000)
0080c dimension x(ntp,3),c(ntp,3),lcr(ntp),indx(ntp),xx(ntp,3)
0090c dimension lcr1(ntpl),lcr2(ntpl),lc(lxp,lyp,lzp,2),lcr(ntp),rdm(3),
0100c & cmc(3),ddt(ntp)
0110c SI units are used except comments
0120c pi=3.1415927
0130c pi2=2.*pi
0140cc input data
0150c panel size
0160c ax=820.e-3
0170c ay=610.e-3
0180c az=0.1e-3
0190c hax=az/2.
0200c hay=ay/2.
0210c haz=az/2.
0220c initial pressure(4Torr)
0230c p00=4.*133.3
0240c gas is neon, atomic diameter=2.602A
0250c dia=2.602e-10
0260c mean free path of neon(mm)=0.198/torr at 573 K
0270c number of cells:lx,ly,lz
0280c cell size
0290c dx=ax/lx
0300c dy=ay/ly
0310c dz=az/lz
0320c dx=dy=10mm, dz=0.05mm
0330c number of cells
0340c ncl=lx*ly*lz
0350c molecules per cell at time zero:nc0
0360c total number of molecules
0370c nt0=ncl*nc0
0380c rigid sphere model
0390c baking temperature=300C,400C,500C
0400c temperature in Kelvin
0410c tmp=300+100*(itp-1)+273
0420c write(6,*) tmp
0430c molecular weight of neon
0440c wmol=20*0.9092+21*0.00257+22*0.00882
0450c Avogadro's number
0460c avg=6.022e+23
0470c Boltzmann constant
0480c bz=1.38066e-23
0490c mass of atom(kg)
0500c w=wmol*0.001/avg
0510c gas constant per unit mass
0520c rgas=bz/w
0530c most probable speed
0540c cmp=sqrt(2.*rgas*tmp)
0550c weight:wgt
0560c stden=2.687e+25 10C,1atm
0570c den00=stden*(273./tmp)*(p00/101.3e+3)
0580c vcell=dx*dy*dz
0590c wgt0=den00*vcell/nc0
0600c wgt=wgt0
0610cc initial state of atoms
0620c i=0
0630c do iz=1,lz
0640c do iy=1,ly
0650c do ix=1,lx
0660c do icl=1,nc0
0670c i=i+1
0680c position of molecules
0690c x(i,1)=dx*(ix-rand(1.))
0700c x(i,2)=dy*(iy-rand(1.))
0710c x(i,3)=dz*(iz-rand(1.))
0720c velocity components of molecules
0730c c1=cmp*sqr(-alog(rand(1.)))
0740c c2=cmp*sqr(-alog(rand(1.)))
0750c c3=pi2*rand(1.)
0760c c4=pi2*rand(1.)
0770c c(i,1)=c1*cos(c3)
0780c c(i,2)=c1*sin(c3)
0790c c(i,3)=c2*sin(c4)
0800c end do
0810c end do
0820c end do
0830c end do
0840cc push molecules
0850c mean free path of neon
0860c rmd=(6.05e-3/p00)*(tmp/293.)*(3.7e-10/dia)**2
0870c timestep
0880c dt=1.0*rmd/cmp
0890c number of timesteps:nstep
0900c ntot=nt0
0910c it=0
0920c t=0.
0930c write(6,*)it,t,ntot,p00
0940c do 20 it=1,nstep
0950c ntt=ntot
0960c do i=1,ntt
0970c lcr(i)=i
0980c ddt(i)=dt
0990c end do
1000c n2=0
1010c do 100 irf=1,6
1020c n1=0
1030c do 110 j=1,ntt
1040c i=lcr(j)
1050c indx(i)=0
1060c xx(i,1)=x(i,1)+c(i,1)*ddt(i)
1070c xx(i,2)=x(i,2)+c(i,2)*ddt(i)
1080c xx(i,3)=x(i,3)+c(i,3)*ddt(i)
1090c choose reflected or outgoing molecules
1100c cz=abs(xx(i,3)-haz)
1110c if(cz.gt.haz) then !case 1
1120c indx(i)=1
1130c if(xx(i,3).gt.az) indx(i)=2
1140c n1=n1+1
1150c lcr1(n1)=i
1160c go to 110
1170c end if
1180c cx=abs(xx(i,1)-hax)
1190c cy=abs(xx(i,2)-hay)
1200c if(cx.gt.hax.or.cy.gt.hay)then !case 2
1210c indx(i)=3
1220c n2=n2+1
1230c lcr2(n2)=i
1240c go to 110
1250c end if
1260c 110 continue
1270cc case 1
1280c if(n1.eq.0) go to 310
1290c nn1=0
1300c do 120 j=1,n1
1310c i=lcr1(j)
1320c az0=az
1330c if(indx(i).eq.1) az0=0.
1340c t=(az0-x(i,3))/c(i,3)
1350c incident point
1360c x(i,3)=az0
1370c x(i,1)=x(i,1)+c(i,1)*t
1380c x(i,2)=x(i,2)+c(i,2)*t
1390c cx=abs(x(i,1)-hax)
1400c cy=abs(x(i,2)-hay)
1410c if(cx.gt.hax.or.cy.gt.hay) then !case 2
1420c indx(i)=3
1430c n2=n2+1
1440c lcr2(n2)=i
1450c go to 120
1460c end if
1470c reflection at z=0 or z=az
1480c c1=cmp*sqr(-alog(rand(1.)))
1490c c2=cmp*sqr(-alog(rand(1.)))
1500c c3=pi2*rand(1.)
1510c sgn=1.
1520c if(indx(i).eq.2) sgn=-1.
1530c c(i,3)=sgn*c1
1540c c(i,1)=c2*cos(c3)
1550c c(i,2)=c2*sin(c3)
1560c nn1=nn1+1
1570c lcr(nn1)=i
1580c ddt(i)=ddt(i)-t
1590c 120 continue
1600c ntt=nn1
1610c 100 continue
1620c 310 continue
1630c delete strange molecules
1640c ndt=0
1650c do 130 i=1,ntot
1660c x(i,1)=xx(i,1)
1670c x(i,2)=xx(i,2)
1680c x(i,3)=xx(i,3)
1690c if(indx(i).eq.3) go to 130
1700c cx=abs(x(i,1)-hax)
1710c cy=abs(x(i,2)-hay)
1720c cz=abs(x(i,3)-haz)
1730c if(cx.gt.hax.or.(cy.gt.hay.or.cz.gt.haz)) then
1740c indx(i)=3
1750c n2=n2+1
1760c lcr2(n2)=i
1770c ndt=ndt+1
1780c if(ndt.ge.1000) write(6,*)it,it,ntot,ndt
1790c end if
1800c 130 continue
1810c ntot0=ntot
1820c ntot=ntot0-n2
1830c t=dt*it
1840c press=p00*ntot*wgt/(nt0*wgt0)
1850c if(mod(it,100).eq.0) write(6,*) it,t,ntot,press
1860c if(mod(it,100).eq.0) write(60,*) it,t,ntot,press
1870c remove molecules pumped out of gap
1880c i=0
1890c do j=1,ntot0
1900c if(indx(j).ne.3) then
1910c i=i+1
1920c x(i,1)=x(j,1)
1930c x(i,2)=x(j,2)
1940c x(i,3)=x(j,3)
1950c c(i,1)=c(j,1)
1960c c(i,2)=c(j,2)
1970c c(i,3)=c(j,3)
1980c end if
1990c end do
2000c ntot=i
2010c replenish new molecules
2020c if(ntot.lt.nmin) then
2030c do j=1,ntot
2040c i=j+ntot
2050c x(i,1)=x(j,1)
2060c x(i,2)=x(j,2)
2070c x(i,3)=x(j,3)
2080c c(i,1)=c(j,1)
2090c c(i,2)=c(j,2)

```

```

2100      c(i,3)=c(j,3)
2110      end do
2120      wgt=wgt/2.0
2130      ntot=2*ntot
2140      end if
2150cc Is temporal Knudsen number greater than 100 ?
2160      rmdt=(6.65e-3/press)*(tmp/293.)*(3.7e-10/dia)**2
2170      aknt=rmdt/az
2180      if(aknt.gt.100.) go to 350
2190cc indexing
2200      do l=1,lx
2210          do m=1,ly
2220              do n=1,lz
2230                  lc(l,m,n,1)=0
2240              end do
2250          end do
2260      end do
2270      do i=1,ntot
2280          lx=x(i,1)/dx+1.
2290          my=x(i,2)/dy+1.
2300          nz=x(i,3)/dz+1.
2310          lc(l,m,n,1)=lc(l,m,n,1)+1
2320c lc(l,m,n,1) is number of molecules in cell(l,m,n)
2330      end do
2340      j=0
2350      do l=1,lx
2360          do m=1,ly
2370              do n=1,lz
2380                  lc(l,m,n,2)=j
2390                  j=j+lc(l,m,n,1)
2400              lc(l,m,n,1)=0
2410          end do
2420      end do
2430      end do
2440c lc(l,m,n,2) is number of molecules in all preceding cells
2450c prepare an array of seats
2460      do i=1,ntot
2470          lx=x(i,1)/dx+1.
2480          my=x(i,2)/dy+1.
2490          nz=x(i,3)/dz+1.
2500          lc(l,m,n,1)=lc(l,m,n,1)+1
2510          j=lc(l,m,n,2)+lc(l,m,n,1)
2520          lxr(j)=i
2530      end do
2540cc collision
2550c maximal collision number method
2560c cross section,maximal relative speed
2570      sigm=pt*dia**2
2580      gmax=5.*sqrt(rgas*tmp)
2590      coef=0.5*(wgt/vcell)*gmax*sigm*dt
2600c max collision number is N(N-1)*coef
2610      do l=1,lx
2620          do m=1,ly
2630              do n=1,lz
2640                  mol=lc(l,m,n,1)
2650                  coll=coef*mol*(mol-1)
2660                  ncoll=coll
2670                  if(rand(1.).lt.(coll-ncoll)) ncoll=ncoll+1
2680                  do nc=1,ncoll
2690                      ia=lc(l,m,n,2)+rand(1.)*mol+1
2700                      ja=lc(l,m,n,2)+rand(1.)*mol+1
2710                      if(ja.eq.ia) go to 330
2720                      i=lxr(ia)
2730                      j=lxr(ja)
2740c (i,j) is a tentative collision pair
2750                      g1=c(j,1)-c(i,1)
2760                      g2=c(j,2)-c(i,2)
2770                      g3=c(j,3)-c(i,3)
2780                      g=sqrt(g1*g1+g2*g2+g3*g3)
2790                      if(rand(1.).lt.(g/gmax)) then
2800c a real collision occurs
2810                          cs=1.-2.*rand(1.)
2820                          si=sqrt(1.-cs*cs)
2830                          c1=pi2*rand(1.)
2840                          rdm(1)=si*cos(c1)
2850                          rdm(2)=si*sin(c1)
2860                          rdm(3)=cs
2870                          do k=1,3
2880                              ccm(k)=0.5*(c(i,k)+c(j,k))
2890                              c(i,k)=ccm(k)-0.5*g*rdm(k)
2900                              c(j,k)=ccm(k)+0.5*g*rdm(k)
2910                          end do
2920                      end if
2930                  end do
2940              end do
2950          end do
2960      end do
2970 350 continue
2980      call clock(cpusec)
2990      if(cpusec.gt.cputm) go to 360
3000 20 continue
3010 360 continue
3020      write(61) it,wgt,ntot,x,c
3030      stop
3040      end

```