スリットを通過する希薄気体のモンテカルロシミュレーション*
(上流と下流との間で大きな圧力比をもつ場合)

藤 本 哲 夫**, 宇 佐 美 勝***

Monte-Carlo Simulation on Rarefied Gas Flow through Two-Dimensional Slits
(Cases of High Pressure Ratio)

by Tetsuo FUJIMOTO and Masaru USAMI

The direct simulation Monte-Carlo method has been used to study the behaviour of the rarefied gas flow through the two-dimensional slits, where the pressure ratio between the upstream and the downstream of the slit is high enough to neglect the downstream pressure. In order to correct the error due to the limitation of the simulated physical-space, the equilibrium velocity distribution modified by the addition of the stream velocity normal to the boundary surface, instead of the equilibrium one, is assumed to the molecules which flow into the simulated region through the upstream boundary.

About 16000 molecules of the hard sphere model and 800 cells are used in the calculation. The conductances of the slits calculated by the simulation are in good agreement with the experimental results.

Key Words : Compressible Flow, Rarefied Gas, Direct Simulation, Conductance, Slit, Monte-Carlo Method, Velocity Distribution, Hard Sphere, Cell Network, Intermolecular Collision

1. 緒 言

円筒管あるいはスリットを通る希薄気体の流れに関する研究は、真空技術の基本となるものであり、分子線研究などに欠くことのできないものである。著者らは、低密度風洞を用いて、短い円筒管およびスリットを通過する希薄気体の流動抵抗に関する実験⁽¹⁾を行っているが、この実験結果を理論的な立場から検証するために、シミュレーション計算による解析を試みた。シミュレーションの手法としては、Birdによるモンテカルロ直接法⁽²⁾⁽³⁾を用いた。

今回のシミュレーションは、以下に示す二つの理由から、円筒管ではなく、二次元スリット (z 軸方向に無限大の長さをもつスリット) を通過する流れに対して行った。(理由1) 二次元スリット流れは純粋な二次元問題であるため、軸対称な三次元問題である円筒管通過の流れよりも、計算処理が比較的容易である。(理由2) 今までに行った実験によれば、代表長さ L を、(穴の面積/周囲長さ) の4倍(等価直径)と定義した

とき、穴の奥行(穴板の厚み) t が代表長さより小さければ、スリットの場合と短い円筒管の場合とで、流動抵抗に関し、ほぼ類似した結果が得られている。

モンテカルロ法を行ううえで、まず問題となるのは、計算に要する時間と計算機容量である。穴を通過する流れをシミュレートする場合、穴に至るまでの空間における一つ一つの分子の衝突が、全体として流動抵抗を決定する。したがって、精度のよい計算を行うためには、計算の対象となる空間を十分大きく取る必要がある(本シミュレーションでは、特に、上流側境界の大きさが重要となる)。一方、二次元問題においては、境界領域が2倍になると対象空間は4倍となり、計算時間および計算機容量は4倍以上になるという問題が生ずる。そこで、本研究では、対象空間を比較的小さくとっても、得られる結果に誤差が生じないように、境界領域から流入させる分子に、平衡状態のものではなく、境界面に垂直な方向に巨視的速度を加えたものを速度成分として与えて計算することを試みた。

シミュレーションは、分子数約16000(剛体球分子モデル)、セル数約800を用いて行われた。その結果は、実験によって得られている結果と比較され、よい一致の見られることが確認された。

* 昭和59年8月29日 第927回講演会において講演、原稿受付 昭和59年2月27日。

** 正員、名古屋大学工学部 (〒464 名古屋市千種区不老町)。

*** 正員、三重大学工学部 (〒514 津市上浜町)。

2. モンテカルロ直接法の概要

希薄気体問題の解法において、分子と物理境界との衝突頻度が、分子同士の衝突と同程度の割合で生ずる圧力状態（中間流領域）では、実用上、有効な理論解析が確立されていない。一方、計算機シミュレーションによる解法は、近年、数多くの手法が試みられている^{(3)~(5)}。その中で、Birdによって開発されたモンテカルロ直接法⁽²⁾⁽³⁾は、「ボルツマン方程式の数値解法という点において厳密さに欠ける」との議論⁽⁵⁾⁽⁶⁾があるものの、その手法の簡便さと、それに伴う卓越した計算速度のために、広く応用⁽⁷⁾が期待されているものである。以下に、モンテカルロ直接法の計算手順の概略を述べる。

(1) 分子は、まず、乱数により初期座標と初期速度成分とを与えられて、対象となる物理空間に配置される。その物理空間は、セルと呼ばれる微小空間に分割されている。このセルの大きさは、平均自由行程よりも小さく取ることが望ましいとされている。

(2) 分子の物理空間内での移動（固定壁との干渉および境界での分子の流入流出を含む）の計算と、分子間衝突の計算は、それぞれ、微少時間 Δt_m (Δt_m は、平均衝突時間よりも小さくなるように決められる) ごとに独立して計算される。すなわち、次の3段階の過程で計算が行われる。

(i) 各々の分子は、その速度に応じて Δt_m 時間だけ、他の分子と無関係に移動させられ、その際、固定壁における反射あるいは境界からの流出が生ずれば、運動量およびエネルギーの交換などが計算される。また、境界外から新しく分子が流入させられるが、その速度成分および境界上の侵入位置も、乱数により決定される。

(ii) 分子の移動によって、各々の分子の位置座標が変化するので、各セルに属する分子が調査され、分子間衝突等の計算を容易にするために、前後参照用の配列 (Cross-Referencing Array) において分子の並べ替えが行われる。すなわち、各セルには、その中に存在する分子数だけの連続した番号が、配列の添字として与えられ、その配列要素に分子名が記憶される。あるセルに属する番号が与えられると、その番号から、この配列を用いて実際の分子名が参照され、分子の速度成分などの情報が得られることになる。

(iii) 分子間の衝突は、衝突の法則に基づき乱数を用いて、セル単位で計算が行われる。衝突分子ペアの選択、あるいは、衝突パラメータの決定（衝突後の速度成分の決定）に乱数が用いられるが、セル内の分子位

置に関する考慮は行われない。この手法の最大の特徴は、個々の分子間衝突に対してそれぞれ衝突時間を割り当て、各セルにおける衝突時間の和が Δt_m に達するまで分子間衝突の計算を行うことにあり（セルタイム法）、これが卓越した計算速度を実現させている。ただし、このセルタイム法を用いるにあたっては、計算機上のセル内分子数が20個を大きく下まわると、厳密な気体運動論的計算とは異なる衝突数を生ずる可能性があるので注意が必要である。

(3) 上記(2)の過程が繰返され、非定常問題にあつてはアンサンブル平均が、定常問題にあつては定常状態達成後の時間平均が計算される。

3. モンテカルロ直接法の準備

3.1 空間のセル分割 実際の計算に入る前に、まず、穴の下流側が、流動抵抗に関して、どの程度関与しているかを調べた。すなわち、穴の下流側の空間のみをセルに分割し、穴を通していったん下流側へ流出してきた分子のうち、再び上流側へ押し戻される分子の割合を調べた。その結果、本研究のように、上流・下流の圧力比が大きく変化する状態では、下流側において分子密度は急激に減少するために、下流での分子間衝突によって上流側へ押し戻される分子は非常に少なく、また、押し戻される分子のほとんどは、穴の出口付近に存在する分子に限られることが判明した。以上のことから、本シミュレーションでは、上流側の空間をより大きく取り [スリット幅の1/2の大きさに対し、スリットに垂直方向 (x_0) 8倍、スリットに水平方向 (y_0) 6倍を標準とした]、下流の空間は、穴の近傍の小さな領域に限定した。

セルの大きさの決め方としては、ほとんどの場合、セルの一辺の大きさが上流側境界における平均自由行程よりも小さいか等しくなるように取った。しかし、計算機容量の都合で、クヌッセン数 K_n が1/20より小さい状態では、必ずしもそうならない場合もある。なお、クヌッセン数の大きい状態においては、上流側境界の平均自由行程がどれほど大きくなろうとも、セルの一辺は、最大、スリット幅の1/4より大きくとることは避けた。図1に、 $1/K_n=16$ の状態において、セル一辺を上流境界の平均自由行程に等しく取った場合のセル配列を示す。上述したように、下流側で分子密度が急激に減少するので、図1において、計算機上のセル内分子数が、20個を大きく下まわること避けるために、下流では、穴から遠ざかるにつれてセルの体積を大きくする方法を採用した。

3.2 境界条件と流入分子数 シミュレーション

の対象となる空間は、セルに分割されるが、それ以外の空間は、何らかの平衡状態にあると仮定した。本計算では、下流側境界の外では完全真空であると見なし、下流側境界から対象空間へ流入する分子はないものとした。すなわち、この下流境界を通過して流出した分子数から、このシミュレーションにおける流量が計算される。

一方、上流側境界の外側は、その境界が穴から十分遠い位置にとられた場合には、一定温度・圧力における平衡状態と考えられるので、そこから対象空間へ単位時間、単位面積当たりに入流する分子数 $N_{1\infty}$ は、式(1)によって与えられる。

$$N_{1\infty} = (1/4)n_1\bar{C}' \quad \dots\dots\dots(1)$$

ここで、 n_1 は上流境界における分子数密度、 $\bar{C}'$ は分子の熱運動速度の平均である。しかし、境界が穴から比較的近い位置にとられた場合には、上流側境界の外から流入する分子の速度分布に、平衡状態からのずれを考慮に入れた修正を加える必要がある。

3.3 流れのコンダクタンス 真空技術で取扱う流量 Q は、(体積流量 $\times$ 圧力)の形で表されることが多く、温度一定のもとで質量流量に比例する。また、コンダクタンス F (流動抵抗の逆数に相当、流れやすさを示すもの) は、 Q を用いて、式(2)によって定義される。

$$F = Q/(P_1 - P_2) \approx Q/P_1 \quad \dots\dots\dots(2)$$

ここで、 P_1 は上流境界での圧力、 P_2 は下流境界での圧力であり、本計算では、 $P_2 \approx 0$ とみなしている。コンダクタンス F は、厚みのない穴を通過する自由分子流状態のコンダクタンス F_{fmo} で無次元化して表現するのが一般的である。

$$F_{fmo} = (1/4)\bar{C}'A \quad \dots\dots\dots(3)$$

ここで、 A は穴の断面積である。

今、定常状態に達したのち、下流境界の外へ流出する流量を Q_2 、そのときの流出分子数を穴の断面積で除したものを N_2 とすれば、コンダクタンス F は次の

ように書ける。

$$F = Q_2/P_1 = (N_2/n_1)A \quad \dots\dots\dots(4)$$

したがって、式(1)、(3)、(4)より

$$\begin{aligned} F/F_{fmo} &= N_2A / \{(1/4)n_1\bar{C}'A\} \\ &= N_2/N_{1\infty} \quad \dots\dots\dots(5) \end{aligned}$$

このように、無次元化されたコンダクタンスは、上流境界からの流入分子数と、下流側境界外への流出分子数とから簡単に算出できる。

3.4 衝突分子ペアの選択 今回のシミュレーションは、衝突分子モデルとして剛体球を用いたが、その場合、衝突は相対速度の大きさに比例した確率で生ずる。セルタイム法では、衝突分子ペアを選択するにあたって、一様乱数による棄却法を用いることにより、その分子モデルに相当した衝突確率を実現させている。すなわち、あらかじめ各セルについて、分子の最大相対速度を設定しておき、乱数によって一時的に選ばれた分子ペアが実際に衝突するかどうかは、その分子ペアの相対速度と設定された最大相対速度との比が、乱数の値よりも大きいか小さいかによって判断される。ここで問題となるのは、最大相対速度をどのように決定するかである。あまり大きな値を用いると、分子選択の計算に時間がかかりすぎ、小さな値では誤差が大きくなってしまう。Birdの方法では、最初、最大相対速度として平均相対速度の2倍を与え、計算の途中で最大値よりも大きな相対速度が出現したときには、その値を新しい最大値として設定し直すという操作を行っている。しかしこの方法では、万一、起こりそうもないような大きな相対速度が生じた場合、それ以後の計算に多大の時間が必要となる恐れがあり、また、この前後で棄却法の基準値が変化するので、これによる誤差も考慮しなければならない。今回のシミュレーションでは、最初はBirdと同様に、平均相対速度の2倍を最大値として与えるが、連続して選ばれた

図1 シミュレーション空間のセル分割

図2 上流境界の有限性を考慮しない計算結果

1 000 個の分子ペアから計算された相対速度の中で、2 回以上、設定した最大値より大きなものが現れたときにのみ最大相対速度を変更し、しかも、変更 1 回あたりの増加分は、平均相対速度の値を越えないようにするという条件を付加した。この方法でも、計算の最初と最後では最大相対速度に差を生ずるが、今回は定常問題を対象としているので、流れの状態が定常に達し時間平均の算出が始まるまでに、最大相対速度はほぼ一定した値になり、それ以後の増加はわずかなものであることが確認されている。

4. 計算結果および考察

4.1 上流側流入境界の有限性を考慮しない場合の計算結果 図 2 に、上流境界の有限性を考慮せずシミュレーションを行って得られた結果を示す。ここで、クヌッセン数 K_n は、上流境界の平均自由行程 λ を代表長さ L で除したものである。ただし、代表長さとしては等価直径を用い、二次元スリットにおいては、スリット幅 a の 2 倍となる。また、 k は、上流側空間を分割するセルの一边の大きさを、スリット幅の半分の大きさに対する倍率で表したものである。さらに、 t は、スリットの奥行(厚み)を表し、この図 2 では、厚み無しの場合($t=0$)を示している。図中、実線は、ナイフエッジで作製した、スリット幅 $a=0.473$ mm、横幅(z 軸方向長さ) $b=30.0$ mm のスリットで、空気を用いて得られた実験値である。自由分子流に近い領域では比較的良い一致を示しているものの、 $1/K_n$ が大きくなるにつれて、計算値は実験値よりも低い値となり(このナイフエッジによるスリットは、完全に厚み零ではないので、全体的に、計算値より小さい値になるべきものである)、その差異は大きくなっていく。この理由は、上流側境界を穴から有限の位置に取ったにもかかわらず、境界条件として式(1)を採用したために生じたものと考えられる。すなわち、この境界を通して流入する総分子数を ΣN_1 、境界を逆戻り

して流出する総分子数を ΣN_3 とし、下流側境界外へ流れ去る総分子数を ΣN_2 とすれば、定常状態においては、

$$\Sigma N_1 = \Sigma N_3 + \Sigma N_2 \dots\dots\dots (6)$$

が成立しなければならないが、一方、上流側境界で平衡状態が成立しているとすれば、

$$\Sigma N_1 = \Sigma N_3 \dots\dots\dots (7)$$

も満足されねばならない。もし、上流境界が穴から無限遠のところであれば、式(7)は成立するが、本計算では、上流境界が穴から有限の距離にあり、すなわち、この境界が有限の大きさであるために、これは成立しない。このように、図 2 で得られた結果に差異を生じているのは、上流境界で平衡状態の条件が満足されていないためと考えてよいであろう。すなわち、このシミュレーションにおいては、上流境界から流入する分子の速度分布は平衡状態のものでなく、それになんらかの補正を加えたもので与えられるべきであることを意味している。

4.2 上流境界から流入する分子の速度分布の補正 有限の位置に上流境界をとった場合(上流境界の大きさが有限の場合)、その境界を穴に近づけるほど、流入分子は、流れの方向にかたよった速度分布をもつであろう。したがって、上流境界の外で発生させる分子に平均速度零からのずれを与えて計算を進める必要がある。そこで、境界面に平行な速度成分に関しては平衡分布を与えるが、垂直な方向の速度成分に関しては、巨視的速度 C_0 をもった局所的平衡状態の速度分布として式(8)を仮定し、この分布[平衡分布を全体的に正の方向に C_0 だけずらした分布(図 3)]により分子に速度を与えることを考えた。

図 3 巨視的速度をもった局所的平衡状態の速度分布

図 4 流入分子に速度分布の補正を行った場合の計算結果

$$f_{\perp} = (\beta/\sqrt{\pi}) \exp\{-\beta^2(C_{\perp} - C_0)^2\} \quad \cdots \cdots (8)$$

ここで、 $f_{\perp}$ は、境界に垂直な方向の速度分布関数を表し、境界面が x 軸に平行の場合には y 方向速度成分に、 y 軸に平行の場合には x 方向成分に対応する。また、 β は最大確率速度の逆数である。

さて、 C_0 は流入分子の発生位置が穴に近づくほど大きな値になるが、上流境界面に流入する分子は、平均的にみて、境界から平均自由行程の $1/2$ だけ外側へ離れた位置から飛来すると考えられる。したがって、その位置で、局所的平衡状態にある分布関数を考え、連続の条件が成立するように巨視的速度（分布関数を正の方向にずらす量） C_0 を決定した（流入分子数の計算は、分布関数の値に垂直方向の速度成分を掛け、それを積分して計算される）。このためには、下流側へ流出する分子数があらかじめわかっている必要があるが、おおよその予想値を代入することで、結果に大きな差異の生じないことが、実際の計算により判明した（厳密には、シミュレーションを繰返し、逐次近似の方法で求めることが必要である）。クヌッセン数が小さい（連続流に近い）状態では、分布関数を考える位置と計算機上の上流境界とは、ほぼ一致するが、クヌッセン数が大きい（自由分子流）状態では、分子は無遠くから飛んで来ることになる。このように、自由分子流状態に近づくほど、あるいは、境界をスリット穴から遠ざけるほど、この巨視的速度による補正量は小さくなる。逆に、連続流に近づくほど、分布関数の補正が結果に大きく影響を与える。したがって、もし、上流側空間の領域の取り方の大小によって、連続流に近い状態の計算結果に差異が現れなければ、この補正は一応有効と認められるであろう。

図5 分子とスリット壁面との反射過程の相違による効果

4.3 流入分子速度分布の補正を行った場合の計算

結果 図4に、上流側境界から流入する分子に、上述したような速度分布の補正を行ってシミュレーションした場合の結果を示す。ナイフエッジで作られたスリットの実験値に対して、 $t/a=0$ （厚みなし）の場合と、 $t/a=0.025$ の場合のシミュレーション結果が比較して描かれているが、0.025のほうの値にほぼ良い一致を示している。これは、実験に用いたスリットが、必ずしも厚さ零ではないことから、このような結果になったものであろう。図5は、 $t/a=1.0$ の形状のスリットに対し、分子のスリット壁面における散乱反射の割合 α （鏡面反射の割合は $1-\alpha$ ）が、1.0（完全な散乱反射）の場合と 0.93（部分的に鏡面反射の性質を含む）の場合についてシミュレーションを行い、結果を比較して示したものである。コンダクタンスは、全体的に、 $\alpha=0.93$ のほうが大きな値となっており、連続流に近づくほどその差は大きくなる傾向にある。そして、実験との比較においては、明らかに、 $\alpha=0.93$ のほうにより近い結果となっている。なお、いずれの場合も、流出分子総数は10000個以上で計算しており、信頼係数0.95としたときの結果の誤差範囲（母平均の信頼区間）は、いずれも $\pm 2.5\%$ 以内（ほとんどの場合 $\pm 2.0\%$ 以内）であった。図4, 5中、 $\square, \triangle, \circ$ 印などは、セルによる空間分割の細分化の程度が異なることを示し、スリット幅の $1/2$ の大きさに対する倍率 k

図6 上流側空間の大きさの影響 ($1/K_n$ 変化)

図 7 上流境界の大きさ変化による影響 ($1/K_n$ 一定)

で、セル一辺の大きさを表している。クヌッセン数の逆数が大きくなるほど、対象空間を細かなセルに分割している。

図 6 は、クヌッセン数が小さい状態（連続流領域に近い状態）において、シミュレーションの結果が、上流側空間の領域の大きさの取り方によって、どのように影響を受けるかを調べたものである。スリット幅の $1/2$ の大きさに対し (x 方向 8 倍, y 方向 6 倍) の領域による計算結果と (x 方向 5 倍, y 方向 5 倍) の領域による結果とを比較したところ、大きな差は生じない（誤差の範囲内）ことが判明した。また、図 7 は、 $1/K_n = 8$ の場合の厚みなしスリットに対する計算結果が、上流境界の大きさ ($x_0 + y_0$) によってどのように変化するかを調べたものである。 $a/2$ の大きさに対して、上流境界を 4 倍から 32 倍の範囲で変化させてシミュレーションを試みたが、統計的誤差範囲内でほぼ一致した結果が得られた。これらはいずれも、本計算で行った上流側境界の外で発生させる分子の速度分布補正が、十分有効であることを示すものである。さて、連続流に近い状態における、セルによる空間の細分化は、本計算では、ほとんど $k = 1/4$ を採用している。この場合、 $1/K_n > 16$ では、空間を分割するセル一辺の長さは、平均自由行程よりも大きいことになるが、その結果は、ほぼ満足できるものであった。

5. 結 論

(1) モンテカルロ直接法を用いたシミュレーション計算によって、大きな圧力比でスリットを通過する希薄気体の流動抵抗に関する解析を行い、満足できる結果を得た。

(2) 上流側空間の有限性から生じる計算誤差に関しては、上流側境界から流入する分子に、平衡状態の速度分布を与えるのではなく、境界面に垂直な方向の巨視的速度を加えたものを与えることが有効である。

(3) スリットに厚みがある場合、分子のスリット壁面における、散乱反射あるいは鏡面反射の割合を考慮してシミュレーションを行う必要がある。この反射過程の相違は、自由分子流域よりも中間流域で流動抵抗に大きな効果を及ぼす。

(4) $1/K_n > 16$ の状態（連続流に近い状態）においては、空間を分割するセル一辺の大きさを、上流側境界における平均自由行程よりも大きくとったが、有効にシミュレーションできた。

今回の計算は、剛体球を用いて行ったが、今後これを、VHS (Variable Hard Sphere) モデル⁽³⁾を応用した分子モデルに適用すれば、内部エネルギーの変換過程等の幅広い応用が期待できるであろう。なお、本研究は、昭和 57 年度および 58 年度文部省科学研究補助金（奨励 A）の援助を受けたものである。

文 献

- (1) 藤本・宇佐美, 機論, 49-438, B(昭 58), 359.
- (2) Bird, G. A., *Molecular Gas Dynamics*, (1976), 118, Oxford Univ. Press.
- (3) Bird, G. A., *Proc. 12th Int. Symp. Rarefied Gas Dyn.*, 1 (1980), 239.
- (4) Bird, G. A., *Ann. Rev. Fluid Mech.*, 10(1978), 11.
- (5) Nanbu, K., *J. Phys. Soc. Jpn.*, 52-10(1983), 3382.
- (6) Deshpande, S. M., *Proc. 11th Int. Symp. Rarefied Gas Dyn.*, 1(1978), 435.
- (7) 例えば, Bird, G. A., *Proc. 11th Int. Symp. Rarefied Gas Dyn.*, 1(1978), 365.