量子効果を考慮した希薄気体流れの数値シミュレーション*
(第2報, VHS モデルと VSS モデルの性能)松本 裕昭^{*1}, 小関 純子^{*2}, 高木 通俊^{*3}Numerical Simulation of Quantum Effect in Rarefied Gas Flow by the Direct
Simulation Monte Carlo Method
(2nd Report, The Efficiency of VHS and VSS Molecular Models)Hiroaki MATSUMOTO^{*4}, Junko KOSEKI, and Michitoshi TAKAGI^{*1} Division of Systems Research, Yokohama National University,
79 5 Tokiwadai, Hodogaya ku, Yokohama shi, Kanagawa, 240 8501 Japan

The variable hard sphere (VHS) and variable soft sphere (VSS) molecular models are extended to the molecular collision with quantum mechanical scattering. The total collision cross sections of the VHS and VSS models and softness coefficient of the VSS model are calculated for ^4He and ^3He gases with the Lennard-Jones potential. It is revealed that the VSS model has significant errors that the total cross section and softness parameter are diverged for collision energy ratio $0.05 \leq E/\epsilon_{LJ} \leq 0.5$. The efficiency of the VHS model for quantum mechanical scattering is examined for the simulation of velocity relaxation in a homogeneous space and free jet of ^4He as compared with those of quantum calculation. The macroscopic quantities of VHS model such as density, velocity, and temperature profiles are in good agreement with those of quantum calculation, although there are some discrepancy between the VHS model and quantum calculation in the velocity distribution functions of the relaxation process.

Key Words: Direct Simulation Monte Carlo Method, Quantum Mechanical Scattering, Variable Hard Sphere, Variable Soft Sphere, Bose Einstein Statistics, Fermi-Dirac Statistics, Boltzmann Statistics, Free jet of ^4He

1. は じ め に

希薄気体流れの挙動は, Boltzmann 方程式を基礎とした分子レベルでの解析が必要とされている. Boltzmann 方程式は, 分子の位置と速度を独立変数にもつ速度分布関数に関する微分・積分方程式で, 差分法等を直接適用して解析することは極めて困難である. したがって直接シミュレーション・モンテカルロ (DSMC) 法⁽¹⁾に代表されるような, 模擬分子の挙動を確率・統計的に扱う手法が有効であることが知られている. また DSMC 法は分子間の衝突や分子と壁面との干渉において, より現実的な計算手法やモデルを容易に組み込めるため, 希薄気体流れの解析に最も多く適用されていると考えられる. 計算機の高速度化・大容量化に伴い, より現実的な解析を行うための分子間衝突モデルや壁面と分子の干渉モデル等が多く提案されている. 第1報において, 著者らは分子間衝突に量子力学を適用した計算手法を構築し, その性能を調べ

た⁽²⁾. しかしながら現時点では, 計算負荷が非常に大きく, 実用的なレベルには達していないため, 計算手法の工夫や簡易モデルによる解析が必要であることが明らかになった. 本研究では, 簡易モデルの代表として variable hard sphere (VHS)⁽³⁾⁽⁴⁾ならびに variable soft sphere (VSS)^{(5)~(7)}モデルに量子効果を取り入れ, その性能について検討する.

2. 基 礎 理 論

2.1 VHS モデルと VSS モデルの散乱則 VHS モデルの散乱角 χ および衝突断面積 σ_t は次式のように定義される⁽³⁾⁽⁴⁾.

$$b = d \cos(\chi/2) \dots\dots\dots (1)$$

$$\sigma_t = \pi d^2 = \begin{cases} Q^{(1)} \\ \frac{3}{2} Q^{(2)} \end{cases} \dots\dots\dots (2)$$

ここに, b , d は衝突径数, 分子直径をそれぞれ表す. また, $Q^{(1)}$, $Q^{(2)}$ は, 拡散係数に関する輸送断面積および粘性係数に関する輸送断面積をそれぞれ表し, Lennard-Jones ポテンシャル等を用いた計算値や, 実在気体の輸送係数から実験的に得られる値を用いる^{(5)~(7)}. 式(2)から VHS モデルは, ポテンシャルや実験の拡散係数もしくは粘性係数のいずれか一方しか

* 原稿受付 2001年2月19日.

^{*1} 正員, 横浜国立大学大学院工学研究院システムの創生部門
(〒240 8501 横浜市保土ヶ谷区常盤台 79 5).^{*2} ユニテック (〒162-0067 東京都新宿区富久町 8 21).^{*3} 正員, 東海大学工学部 (〒259 1292 平塚市北金目 1117).
E mail: matsu@ynu.ac.jp

一致しないことがわかる。通常は、粘性係数が一致するように衝突断面積を選ぶ。一方 VSS モデルは、散乱則に softness parameter と呼ばれるパラメータ α を一つ追加し、粘性係数と拡散係数を同時に一致させる。VSS モデルの散乱角、衝突断面積、および、散乱に関するパラメータ α は、次式で与えられる^{(5)~(7)}。

$$b = d \cos^{\alpha}(\chi/2) \dots\dots\dots (3)$$

$$\sigma_t = \pi d^2 = \frac{Q^{(2)}}{2} \frac{2Q^{(1)} + Q^{(2)}}{2Q^{(1)} - Q^{(2)}} \dots\dots\dots (4)$$

$$\alpha = \frac{2Q^{(2)}}{2Q^{(1)} - Q^{(2)}} \dots\dots\dots (5)$$

2.2 量子散乱に対する輸送断面積 分子間衝突に量子力学を適用した場合、拡散係数および粘性係数に関する輸送断面積は、次式で与えられる⁽⁸⁾。

$$Q^{(1)} = \frac{Ah^2}{2\pi\mu E} \sum_l (l+1) \sin^2(\eta_{l+1} - \eta_l) \dots\dots\dots (6)$$

$$Q^{(2)} = \frac{Ah^2}{2\pi\mu E} \sum_l \frac{(l+1)(l+2)}{2l+3} \sin^2(\eta_{l+2} - \eta_l) \dots\dots\dots (7)$$

ここに、 h は Plank 定数、 μ は分子の換算質量、 E は、衝突エネルギー、 η_l は量子状態 l の角運動量に対する散乱シフトを表す。式(6)、(7)の係数 A は、Bose-Einstein (BE) 統計、Fermi-Dirac (FD) 統計および Boltzmann (BL) 統計に関する係数である。 $A=2$ とし、 l について偶数の和をとれば BE 統計に従う分子に対する輸送断面積を表し、 l について奇数の和をとれば FD に従う分子に対する輸送断面積を表す。また、 $A=1$ としてすべての l について和をとれば BL 統計に対する輸送断面積を表す。式(6)、(7)における散乱シフトは、次式で与えられる時間に依存しない波動方程式を解くことにより求める⁽⁸⁾⁽⁹⁾。

$$\frac{d^2 G(r)}{dr^2} + \left[k^2 - \frac{m}{\hbar^2} \Phi(r) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] G(r) = 0 \dots\dots\dots (8)$$

$$k = \frac{\sqrt{mE}}{\hbar}, \quad \hbar = \frac{h}{2\pi} \dots\dots\dots (9)$$

$$G(r) = rR(r) \dots\dots\dots (10)$$

$$\eta_l = \tan^{-1} \frac{j_l(kr_n)}{n_l(kr_n)} \dots\dots\dots (11)$$

ここに r 、 $R(r)$ 、 $\Phi(r)$ 、 m 、 k は、分子間距離、波動関数、分子間ポテンシャル、分子質量、衝突エネルギーに対する波数をそれぞれ表し、 j_l 、 n_l は、球 Bessel 関数および球 Neumann 関数をそれぞれ表す。また、式(11)の r_n は、 $E \gg \Phi(r_n)$ かつ $G(r_n) = 0$ を満たす分子間距離である。

2.3 輸送断面積の計算概要 本研究では、分子間ポテンシャルとして Lennard-Jones (6-12) ポテンシャル (LJ ポテンシャル) を用いて散乱シフトおよび

輸送断面積を計算する。式(8)において r を Δr に分割し、 $r=r_1$ における G と dG/dr を初期値に与え四次精度の Runge-Kutta-Gill により数値積分し、式(11)から η_l を計算する。 η_l の収束条件は、式(11)を満たす連続した5点 (r_n , r_{n+1} , r_{n+2} , r_{n+3} , r_{n+4}) の散乱シフト $(\eta_l)_{n+i}$ ($i=0, 1, 2, 3, 4$) に対し $|(\eta_l)_{n+i} - (\eta_l)_{n+i-1}| < 1 \times 10^{-4} [\text{rad}]$ とする。積分開始点 r_1 , r_1 における G および dG/dr の初期値は、文献(9)を参考に、それぞれ $r_1/d_{LJ} = 0.5$, $G=0$, $dG/dr = 1.0 \times 10^{-30}$ とする。また、分割サイズ Δr は、次式により与える⁽⁸⁾。

$$\Delta r/d_{LJ} = \min[\lambda/(80d_{LJ}), 1/(40N)] \dots\dots\dots (12)$$

$$N \approx \frac{1}{2} + 0.27 \frac{2\pi d_{LJ}}{A} \dots\dots\dots (13)$$

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2\mu E}}, \quad A = \frac{h}{\sqrt{2\mu \epsilon_{LJ}}} \dots\dots\dots (14)$$

ここに d_{LJ} および ϵ_{LJ} は、LJ ポテンシャルのパラメータで、ポテンシャルが零になる分子間距離およびポテンシャルの深さをそれぞれ表す。 λ および A は、それぞれ $r=r_{\infty}$ におけるドブロイ波の波長、 ϵ_{LJ} をベースとした代表長さを表す。図1(a)、(b)に、衝突エネルギー比 E/ϵ_{LJ} の変化に対する He 気体の無次元輸送断面積 $Q^{(1)*}$, $Q^{(2)*}$ の計算値を示す。ただし、He 気

Fig. 1 (a) Reduced cross section $Q^{(1)*}$ for the Lennard Jones potential

Fig. 1 (b) Reduced cross section $Q^{(2)*}$ for the Lennard Jones potential

体の LJ ポテンシャルパラメータは, $d_{LJ}=2.556 \text{ \AA}$, $\epsilon_{LJ}/k_B=10.22 \text{ K}$ (k_B : Boltzmann 定数) としている⁽⁸⁾. また, 古典散乱に対する輸送断面積も合わせて示す. 古典散乱による輸送断面積の計算手法は, 文献(5), (7)を参照されたい. なお, 無次元輸送断面積は d_{LJ} を直径とする剛体球の輸送断面積を用いて次式で定義されている.

$$Q^{(1)*} = Q^{(1)}/[Q^{(1)}]_{HS} = Q^{(1)}/(\pi d_{LJ}^2) \dots\dots\dots (15)$$

$$Q^{(2)*} = Q^{(2)}/[Q^{(2)}]_{HS} = Q^{(2)}/(2\pi d_{LJ}^2/3) \dots\dots (16)$$

図1(a), (b)より, BE, FD, BL 統計に従う He の輸送断面積はいずれも, 衝突エネルギー比が, 10 以下で量子効果が現れ, 古典散乱による輸送断面積との差異が生じていることがわかる. また, BE, FD 統計の輸送断面積 $Q^{(1)*}$, $Q^{(2)*}$ はいずれも, $10^{-2} \leq E/\epsilon_{LJ} \leq 1$ の範囲で大きく振動しているが, BL 統計の輸送断面積は, それほど大きな振動はなく, 古典散乱の断面積と同様に緩やかな変化をしている. なお, BE, FD 統計の輸送断面積を用いて計算した ^4He および ^3He の粘性係数は, $T=100 \text{ K}$ 以下の実験結果を非常によく再現することをすでに確認している⁽²⁾.

2・4 VSS モデルの衝突面積の特性

図2(a) ~ (c) に VSS モデルの無次元衝突断面積 $\sigma_t/\pi d_{LJ}^2$ および散乱に関するパラメータ α の衝突エネルギー比 E/ϵ_{LJ} に対する変化を示す. 図2(a), (b)より, BE 統計の衝突断面積および散乱に関するパラメータ α は $0.05 \leq E/\epsilon_{LJ} \leq 0.1$ 付近で, また FD 統計では $0.3 \leq E/\epsilon_{LJ} \leq 0.5$ 付近で発散しており, モデルが破たんしていることがわかる. これは, 図1(a), (b)に示すように, これらのエネルギー比の領域で $Q^{(1)*}$ の値が $Q^{(2)*}$ に比べ非常に小さくなっており, 式(4), (5)において分母の値が零以下になることが原因である. 一方, 図2(c)に示すように BL 統計では衝突断面積は発散していない. したがって VSS モデルでは量子効果が顕著となり, BL 統計で近似できないような領域のシミュレーションが不可能であることがわかり, 式(3)の散乱則の改良が必要であると考えられる.

3. VHS モデルの性能試験

BE 統計に従う ^4He 気体のシミュレーションによりモデルの評価を行う. ただし, 2・3節で示したように VSS モデルは量子効果が顕著になるとモデル自体が破たんするので, 本研究では衝突断面積に $Q^{(1)}$ を用いる VHS(D)モデルならびに $Q^{(2)}$ を用いる VHS(V)モデルの二つのモデルについて量子計算⁽²⁾の結果と比較することで性能を調べる.

3・1 一様空間中での分子熱速度の緩和 数密度

n の一様空間に存在する全分子に初期速度 $c_i \cdot \mathbf{R}$ を与える. ここに $\mathbf{R}$ は, 大きさが1のランダムベクトルである. 本研究では, c_i として温度 T の平衡状態における分子の二乗平均速度 $c_i = (3kT/m)^{1/2}$ を与える. 図3(a), (b)に $T=10, 300 \text{ K}$ に対する c_i を含む速度領域 $(c_r/c_m) - \Delta(c/c_m)/2 \leq (c_r/c_m) < (c_r/c_m) + \Delta(c/c_m)/2$ に存在する分子の確率 $f(c_r/c_m)$ の無次元時間 $t \cdot c_m/\lambda$ に対する変化を示す. ここに, $c_m = (2k_B T/m)^{1/2}$ は温度 T における分子の最大確率熱速度を表し, c_r は参照速度を表す. 本研究では, 速度空間

Fig. 2 (a) Collision cross section and softness parameter of VSS model for Bose Einstein statistics

Fig. 2 (b) Same as Fig. 2 (a) for Fermi Dirac statistics

Fig. 2 (c) Same as Fig. 2 (a) for Boltzmann statistics

を $\Delta(c/c_m)=0.1$ に等分割しているので, $c_r/c_m=1.25$ となる. また, λ は分子の平均自由行程で, 次式により定義している.

$$\lambda = \frac{1}{\sqrt{2} \pi d_{ij}^2 n} \quad (17)$$

計算に用いた無次元時間刻みおよび模擬分子数はそれぞれ $\Delta(t \cdot c_m/\lambda)=0.01$, $N=10\,000$ である. 図3(a), (b)より, 量子計算ならびに VHS(D), VHS(V)のいずれも, 時間の経過とともに速度分布関数が緩和され, Maxwell 分布における参照速度の確率の値 $f_e(c_r/c_m)=0.7391$ に近づいていくことがわかる. また, 温度の上昇に伴い輸送係数が増大するので, いずれの計算においても $T=300\text{ K}$ の緩和は $T=10\text{ K}$ に比べ遅くなっていることもわかる. しかし, 量子計算と VHS モデルの結果は VHS(D) および VHS(V) のいずれも一致せず, VHS の緩和が遅れており, さらに VHS(D) の緩和が VHS(V) モデルよりも遅くなっている. VHS(D) モデルの緩和が VHS(V) モデルよりも遅れるのは, VHS(D) モデルの衝突断面積が平均的には VHS(V) モデルよりも小さいことに起因すると考えられる. また, VHS モデルの緩和が量子計算よりも遅れるのは散乱則の違いに原因があると

考えられる. VHS(D) および VHS(V) モデルでは, 単位時間・単位体積中で生じる分子間の全衝突において, それぞれ衝突前の相対速度方向の運動量またはエネルギーの平均値が量子散乱のものと一致するだけで, 衝突後の個々の速度については量子散乱による速度と必ずしも一致しない⁽⁷⁾. そのため, 速度分布関数が変化する緩和過程においては, その形状に差異が生じると考えられる. 図4に $T=300\text{ K}$ の無次元時刻 $t \cdot c_m/\lambda=2.0$ における量子計算と VHS(V) の速度分布関数 f の比較を示す. 量子散乱の速度分布関数は, 参照速度 c_r/c_m 近傍の $(c_r/c_m)-\Delta(c/c_m)/2$, ならびに $(c_r/c_m)+\Delta(c/c_m)/2$ を代表値とする領域にも比較的分子が多く存在しているのに対し, VHS(V) モデルは, 量子散乱に比べ, これらの領域に存在する分子が少なく, かわりに $c/c_m \sim 0.5$ および 1.5 付近の分子の存在確率が量子散乱よりも若干多いことがわかる. これより VHS(V) モデルでは, 衝突前後で衝突分子速度の大きさが, 量子散乱よりも大きく変わっていることが予想される. すなわち量子散乱よりも散乱角の大きな衝突の割合が多く, 1回の衝突で変化する衝突前の相対速度方向の運動量またはエネルギーは, 平均的には量子散乱よりも大きいと考えられる. そのため量子計算に比べ衝突数が少なく, c_r のクラスの分子が多く残ると考えられる. この傾向は, VHS(D) モデルにも当てはまるほか, 散乱を古典的に扱う VHS(D) モデルや VHS(V) モデルおよび VSS モデルにも共通していると考えられる. したがって, 分子の速度分布やエネルギー分布が問題になるような現象を VHS や VSS モデルで扱う際には, 上記のような特性を考慮する必要があると考えられる.

3・2 真空中に放出される自由噴流の解析

本研究ではオリフィスから噴出する ^4He の自由噴流の解析を点源から球対称に広がる噴流の一次元問題として

Fig. 3 (a) Relaxation to equilibrium in a homogeneous space for $T=10\text{ [K]}$

Fig. 3 (b) Same as Fig. 3 (a) for $T=300\text{ [K]}$

Fig. 4 Velocity distribution function at $c_m \cdot t/\lambda=2$

扱う。流れ方向に r 軸をとり、計算領域を $r_1/r^* \leq r/r^* \leq r_2/r^*$ として等間隔の衝突セルおよびデータセル Δr に分轄する。本研究では文献(1)および実験⁽¹⁰⁾を参考に、 $r_1/r^*=1.05$, $r_2/r^*=41.05$, $\Delta(r/r^*)=0.01$ としている。ここに r^* は流れが音速となるソースからの距離を表す。 r_1 , r_2 における境界条件は、それぞれ平衡状態の一樣流、完全真空とする。 r_1 における数密度、流れの平均速度、温度は、ソースをよどみ点状態とし、 r_1 まで連続流として断熱変化すると仮定して求める。計算条件は、実験に合せ、 $p_0 \cdot D = 51.2$ Torr $\cdot$ mm, $T_0 = 296$ K とする。ここに p_0 , T_0 は、よどみ点の圧力と温度である。また、 D はオリフィスの直径を表し、 $r^* = 0.699 D$ の関係がある⁽¹⁰⁾。平均自由行程を式(17)と同様に定義すると、よどみ点におけるクヌッセン数は、 $Kn = \lambda/D = 2.06 \times 10^{-3}$ ($Kn^* = \lambda/r^* = 1.44 \times 10^{-3}$) となる。計算に用いた時間刻み、分子数は、 $\Delta(t \cdot c_m/\lambda) = 0.001$, $N \sim 40\,000$ である。図5~7に噴流の流れ方向 r に対する、無次元密度分布 ρ/ρ_0 (ρ_0 : よどみ点密度)、流れ方向の平均速度分布 $\bar{u}_{||}/c_m$ 、流れ方向温度 $T_{||}/T_0$ ならびに流れと垂直方向温度

Fig. 5 Density profiles of ^4He free jet for $p_0 \cdot D = 51.2$ Torr $\cdot$ mm, $T = 296$ K

Fig. 6 Velocity profiles of ^4He free jet for $p_0 \cdot D = 51.2$ Torr $\cdot$ mm, $T = 296$ K

$T_{\perp}/T_0$ の分布をそれぞれ示す。また、温度分布については、Cattorica, Muntz らの測定値を合せて示す。図5, 6より、密度分布および速度分布については、量子計算と VHS(D) および VHS(V) の結果は、計算誤差範囲内で一致していることがわかる。一方、温度分布については、VHS(V) の結果は流れ方向温度ならびに流れと垂直方向温度のいずれも量子計算の結果を非常によく再現しているのに対し、VHS(D) は、流れ方向温度が高くなっている。これは、噴流内で生じている分子間衝突について、平均的には VHS(D) の衝突断面積が小さいことに原因があり、従来から指摘されているように、流れ問題のような粘性が支配的な現象には、VHS(V) モデルの適用が望ましいと考えられる。また、図7よりわかるように、量子計算ならびに VHS(V) の流れ方向の温度分布は、Cattorica らの実験値よりも高く、Muntz らの実験値よりも低い。計算と実験との相違は今後さらに検討を要すると思われる。図8(a)~(f)に量子計算ならびに VHS(V) の $r/r^* = 10, 20, 30$ における流れ方向の速度分布関数 $f_{||}$ 、流れと垂直方向の速度分布関数 $f_{\perp}$ を示す。図8中実線は、次式で与えられる Maxwell 分布を表す。

$$f_{||} = \left(\frac{m}{2\pi k_B T_{||}} \right)^{1/2} \exp \left\{ -\frac{m}{2k_B T_{||}} (u_{||} - \bar{u}_{||})^2 \right\} \quad \dots\dots\dots (18)$$

$$f_{\perp} = \frac{m}{k_B T_{\perp}} u_{\perp} \exp \left(-\frac{m}{2k_B T_{\perp}} u_{\perp}^2 \right) \quad \dots\dots\dots (19)$$

ここに、 $u_{||}$ および $u_{\perp}$ は、分子個々の流れ方向速度および、流れと垂直方向速度をそれぞれ表す。図8からわかるように、量子計算においてデータのばらつきは大きい。量子計算および VHS(V) の速度分布関数は、下流にいくに従って平行方向および垂直方向のいずれも Maxwell 分布に比べ、ピークが低速側に偏り、ピーク値が増加する傾向にあることがわかる。また、わずかではあるが流れ方向の速度分布関数では、

Fig. 7 Parallel and normal temperature profiles for ^4He free jet

Fig. 8 (a) Parallel velocity distribution function at $r/r^* = 10$ Fig. 8 (d) Perpendicular velocity distribution function at $r/r^* = 10$ Fig. 8 (b) Same as Fig. 8 (a) at $r/r^* = 20$ Fig. 8 (e) Same as Fig. 8 (d) at $r/r^* = 20$ Fig. 8 (c) Same as Fig. 8 (a) at $r/r^* = 30$ Fig. 8 (f) Same as Fig. 8 (d) at $r/r^* = 30$

$u_{||}/c_m \sim 2$ 付近に Maxwell 分布より分子の存在確率が高い領域が見られ、流れと垂直方向の速度分布関数では、 $u_{\perp}/c_m \sim 0.2$ 付近に Maxwell 分布より分子の存在確率が高い領域が見られる。Maxwell 分布からのずれは、特に垂直方向の速度分布関数で顕著に見られ、非平衡状態が増大していることが予想される。また、 $r/r^* = 10, 20, 30$ のすべての位置において、量子計算と VHS(V) の速度分布関数の形状は非常に類似しており、分子の熱速度の緩和問題で見られたような大きな違いは見られない。これは、噴流中の速度分布関数が、比較的緩やかな変化をしていくためであると考えられ

る。以上の結果から、量子効果が生じるような流れ場の解析において VHS(V) モデルは、マクロな物理量の推定には有効であると考えられる。また、拡散が支配的な流れ場については、古典散乱の VHS モデルの場合と同様に、VHS(D) モデルが有効となると予想される。

4. ま と め

拡散係数をベースとした VHS(D) モデルおよび粘性係数をベースにした VHS(V) モデルならびに VSS モデルに量子散乱の効果を取り入れ、その性能を評価

した。その結果以下のような結論を得た。

(1) 衝突エネルギー比の小さな領域で、Bose-Einstein 統計および Fermi-Dirac 統計に従う分子に対する VSS モデルの衝突断面積および散乱則に関するパラメータが発散し、モデルが破たんする。

(2) VHS(V)および VHS(D)モデルは、衝突断面積が発散することではなく、量子効果を取り入れることが可能である。

(3) VHS(V)および VHS(D)モデルは、量子計算に比べ散乱角の大きな衝突が多く、衝突数は少ない。したがって速度分布関数が大きく変化するような過程で、その形状は量子散乱による速度分布関数形状と異なる場合がある。

(4) 緩和過程における速度分布関数の形状の違いは、古典散乱に関する VHS(V)および VHS(D)モデルならびに VSS モデルにも存在することが予想される。

(5) 粘性が支配的な流れ場では VHS(V)モデルによる密度・速度・温度等のマクロな物理量は、十分な精度で量子計算の値を再現する。

Boltzmann 統計に従う分子の VSS モデルの衝突断面積と散乱角に関するパラメータは発散することはないので、Boltzmann 統計で近似できるような領域で、VSS モデルにより量子効果を表現することは可能であると考えられる。しかし、Bose-Einstein や、Fermi-Dirac 統計に従うような領域では散乱則の改良が必要になると考えられる。散乱則の改良は、最も単純な等方散乱をベースにすることが考えられるが、現在のところ適切な関数を見つけることはかなり難しい状況にある。散乱則に対する新しいモデルを導入す

る等の工夫も必要で、今後の大きな課題と考えられる。一方 VHS モデルは、拡散が支配的な流れ場と粘性が支配的な流れ場で、VHS(D)と VHS(V)の二つのモデルを使い分ける必要があるが、マクロな物理量について量子効果を適切に表現することができると考えられる。なお、VHS モデルによる計算時間は、Alpha 2116 チップ 600 MHz のマシンで、自由噴流の解析において無次元時刻 100(100 000 ステップ)進むのに約数時間程度であった。これは、量子散乱を直接扱う場合の無次元時刻 1(100 ステップ)進むのに約 1 週間程度⁽²⁾ に比べ飛躍的に効率が高く、工学的応用面からは、十分なモデルであると考えられる。ただし、速度分布関数レベルでは量子計算の結果を必ずしも表現できないので、分子の速度分布やエネルギー分布が重要となるような解析に適用する場合には、モデルの性能をさらに検証する必要があると考えられる。

文 献

- (1) Bird, G. A., *Molecular Gas Dynamics*, (1976), 118-132, Clarendon Press, Oxford, *Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gases*, (1994), 203-407, Clarendon Press, Oxford.
- (2) 松本裕昭・高木通俊, 機論, **67**, 664, B (2001), 2913-2919.
- (3) Bird, G. A., *Prog. Astronaut.*, **74** (1981), 239-255.
- (4) Bird, G. A., *Phys. Fluids*, **26** (1983), 3222-3223.
- (5) Koura, K. and Matsumoto, H., *Phys. Fluids*, **A3** (1991), 2459-2465.
- (6) Koura, K. and Matsumoto, H., *Phys. Fluids*, **A4** (1992), 1083-1085.
- (7) Matsumoto, H., *JSME Int. J.*, B (1997), 529-535.
- (8) Imam Rahajoe, S., Curtiss, C. F. and Bernstein, R. B., *J. Chem. Phys.*, **42** (1965), 530-536.
- (9) Benstein, R. B., *J. Chem. Phys.*, **33** (1960), 795-804.
- (10) Cattolica, R., Robben, F., Talbot, L. and Willis, D. R., *Phys. Fluids*, **17** (1974), 1793-1807.