

# 希薄気体の数値解析における無次元化について

平野 博之

岡山理科大学工学部応用化学科  
(1999年11月4日 受理)

## 1. 緒言

最近の計算機性能の向上にともなって、多数個の分子あるいは粒子モデルを用いて、さまざまな物理現象を数値計算によって再現できるようになってきた。このうちの1つとして、希薄気体の流れ解析がある。これは、半導体製造技術に関連した電子工業などの分野でとりわけ重要である。この場合、系を構成している気体の分子数密度は非常に低いと、分子同士の衝突の影響を無視できない。このような系は不連続体とよばれ、基礎となる方程式は Boltzmann 方程式とよばれる<sup>1),2)</sup>。一般的な大気圧程度の気体は連続体とよばれ、それを構成する分子は集団として扱ってもよく、Navier-Stokes 方程式にしたがう。

系が不連続体であるかどうかを判断するためによく用いられるのが、Knudsen 数 ( $Kn$ ) とよばれる無次元数である。これは分子の平均自由行程  $\lambda$  に対する系の代表長さ  $L$  で定義される ( $Kn = \lambda/L$ )。一般的には  $Kn$  が 0.01 よりも大きい場合を不連続体という<sup>3)</sup>。したがって、系が不連続体であるというのは、分子数密度が非常に低く (低圧)  $\lambda$  が大きい場合と、系の代表長さ  $L$  が非常に小さい場合が考えられる。

希薄気体の数値計算は、(実際の分子数よりは少ない) 多数個の粒子 (以下あえて分子という) を用いて確率論的に行うことがほとんどである。このような手法で実際に数多くの計算例が報告されている。本論文では、Boltzmann 方程式を基礎方程式とし、Direct Simulation Monte Carlo (DSMC) 法とよばれる方法<sup>3),4)</sup> で希薄気体を数値計算する場合の無次元化について述べる。

物理現象を数値計算するという観点からすると、その現象のもととなる支配方程式は無次元化することによって初めて一般性を持つといえる。支配方程式を無次元化ということは、その方程式に含まれるある有次元の物理量を、基準となる物理量で除して無次元の物理量に換算するというにすぎないが、基準となる物理量をいかに決めるか、ということが最も重要である。方程式の無次元化の方法としては、甲藤<sup>5)</sup> の方向性次元解析および Hellums and Churchill<sup>6)</sup> の方法がそれぞれ独立に導出された。しかしながらこれまでのいくつかの報告<sup>7),8),9),10)</sup> をみても、希薄気体の数値解析に関しては、これらの方法にしたがって支配方程式ならびに DSMC 法を無次元化したものは見あたらない。

そこで本論文では、機械的に無次元化が可能な Hellums and Churchill の方法を取りあげ、まず、希薄気体力学の基礎方程式である Boltzmann 方程式を無次元化し、さらに実際の数値計算を行うための離散化においても、DSMC 法を取りあげて無次元化して定式化を行う。

## 2. Boltzmann 方程式

外力場  $\vec{F}$  が働いているとき、時刻  $t$  において、速度が ( $\vec{v} \sim \vec{v} + d\vec{v}$ ) で位置が ( $\vec{x} \sim \vec{x} + d\vec{x}$ ) にある分子の個数を  $f(\vec{v}, \vec{x}, t)$  とすると、速度空間の微小要素  $dV_v (= dv_1 dv_2 dv_3)$  と物理空間の微小要素  $dV_x (= dx_1 dx_2 dx_3)$  を用いて、着目する全空間における総分子数  $N$  は次式により求まる。

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} f(\vec{v}, \vec{x}, t) dV_v dV_x = N \quad (1)$$

いま、時刻  $t$ 、位置  $\vec{x}$  において、速度の違う各々の分布関数が  $f = f(\vec{v}, \vec{x}, t)$  と  $f_1 = f(\vec{v}_1, \vec{x}, t)$  である分子同士が  $f' = f(\vec{v}', \vec{x}, t)$  と  $f'_1 = f(\vec{v}'_1, \vec{x}, t)$  と変化するような衝突を考える。多数個の分子が存在しているので、この衝突の逆も考えられる。このような衝突をさらに全速度空間と全物理空間にわたって積分した  $f$  についての支配方程式は Boltzmann 方程式と呼ばれ、一般に次のように書ける<sup>1),2)</sup>。

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{x}} + \frac{\vec{F}}{m} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{v}} = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_0^{4\pi} \sigma v_r (f' f'_1 - f f_1) dV_{v_1} d\omega \quad (2)$$

ここに、 $v_r = |\vec{v}_1 - \vec{v}|$ ,  $\vec{F} = m\vec{g}$ である。

### 3. Boltzmann 方程式の無次元化

Eq.(2)を Hellums and Churchillの方法<sup>6)</sup>にしたがって無次元化する。ただし、この式だけでは参照値をすべて決定できないので、各種の分子平均速度あるいはその他の条件なども用いる。いま、上付き $\sim$ を無次元の物理量を表す意味とし、上付きの $*$ を参照値となる物理量(有次元)を表すものとし、以下の無次元変数を導入する。

$$\begin{cases} \tilde{x} = x/x^* \\ \tilde{v} = v/v^* \\ \tilde{t} = t/t^* \\ \tilde{\sigma} = \sigma/\sigma^* \\ \tilde{f} = f/f^* \end{cases} \quad (3)$$

#### 3-1 Boltzmann 方程式

Eq.(3)をEq.(2)に代入すると次式を得る。

$$\underbrace{\frac{\partial \tilde{f}}{\partial \tilde{t}} + \left(\frac{v^* t^*}{x^*}\right) \tilde{v} \cdot \frac{\partial \tilde{f}}{\partial \tilde{x}}}_{\text{A}} + \underbrace{\left(\frac{t^*}{v^*}\right) \tilde{g} \cdot \frac{\partial \tilde{f}}{\partial \tilde{v}}}_{\text{B}} = \underbrace{t^* \sigma^* v^{*4} f^*}_{\text{C}} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_0^{4\pi} \tilde{\sigma} \tilde{v}_r (\tilde{f}' \tilde{f}'_1 - \tilde{f} \tilde{f}_1) d\tilde{V}_{v_1} d\omega \quad (4)$$

#### 3-2 平均速度

各種平均速度は以下のように無次元化される。

$$\begin{cases} \langle v \rangle = \sqrt{\frac{8kT}{\pi m}} \\ v_m = \sqrt{\frac{2kT}{m}} \\ \sqrt{\langle v^2 \rangle} = \sqrt{\frac{3kT}{m}} \end{cases} \rightarrow \begin{cases} \langle \tilde{v} \rangle = \frac{\langle v \rangle}{v^*} \\ \tilde{v}_m = \frac{v_m}{v^*} \\ \sqrt{\langle \tilde{v}^2 \rangle} = \frac{\sqrt{\langle v^2 \rangle}}{v^*} \end{cases} \quad (5)$$

#### 3-3 各種条件

代表長さが $L$ で表されるような系では、

$$x_0 = L \rightarrow \tilde{x}_0 = L/x^* \quad (6)$$

全散乱断面積は、分子が剛体球モデルであるとみなせるときは

$$\sigma_0 = \pi a^2 \rightarrow \tilde{\sigma}_0 = \pi a^2/\sigma^* \quad (7)$$

ただし、 $a$ は分子直径である。Eq.(4), Eq.(5), Eq.(6), Eq.(7)をもとに、各係数を1あるいは0など決めてそれぞれの参照値を順次決めてゆく。

Eq.(5)より、 $\tilde{v}_m = 1$ として、 $v^* = v_m$ となる。このとき、 $\langle \tilde{v} \rangle = 2$ ,  $\sqrt{\langle \tilde{v}^2 \rangle} = \sqrt{3/2}$ となる。

Eq.(6)より、 $\tilde{x}_0 = 1$ として、 $x^* = L$

Eq.(7)より、 $\tilde{\sigma}_0 = 1$ として、 $\sigma^* = \pi a^2$

Eq.(4)に関しては、

④=1として、 $t^* = x^*/v^* = L/v_m$

③=1として、 $f^* = (t^* \sigma^* v^{*4})^{-1} = \{m/(2kT)\}^{3/2} / (L\pi a^2)$

このとき、②= $t^*/v^* = Lm/(2kT)$

以上より、最終的に無次元化された Boltzmann 方程式は以下のように書ける。

$$\frac{\partial \tilde{f}}{\partial \tilde{t}} + \tilde{v} \cdot \frac{\partial \tilde{f}}{\partial \tilde{x}} + \frac{1}{Fr} \tilde{e}_g \cdot \frac{\partial \tilde{f}}{\partial \tilde{v}} = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_0^{4\pi} \tilde{\sigma} \tilde{v}_r (\tilde{f}' \tilde{f}'_1 - \tilde{f} \tilde{f}_1) d\tilde{V}_{v_1} d\omega \quad (8)$$

ここに、 $Fr$  は Froude 数とよばれる無次元数で、 $Fr = 2kT/(Lmg) = v^{*2}/(Lg)$  である。この他にも、たとえば熱平衡状態にある分布関数を参照値に選んだり、いろいろな無次元化が考えられる。しかし、基本的には上述したように支配方程式や各種条件に現れる係数を 0 あるいは 1 などとして参照値を決定してゆくことに変わりはない。

#### 4. DSMC 法

以上で得られた無次元化された Boltzmann 方程式を用いて、実際の希薄気体の数値計算でよく用いられている DSMC 法<sup>3),4)</sup>を定式化する。なお、計算は 1 種類から成る気体について考える。

##### 4-1 分離の原理

Eq.(8) を便宜上、以下のように書く。

$$\frac{\partial \bar{f}}{\partial \bar{t}} = -D\bar{f} + J\bar{f} \quad (9)$$

$$D\bar{f} = \vec{v} \cdot \frac{\partial \bar{f}}{\partial \vec{x}} + \frac{1}{Fr} \vec{e}_g \cdot \frac{\partial \bar{f}}{\partial \vec{v}} \quad (10)$$

$$J\bar{f} = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_0^{4\pi} \bar{\sigma} \vec{v}_t (\bar{f}' \bar{f}'_1 - \bar{f} \bar{f}_1) d\vec{V}_{v_1} d\omega \quad (11)$$

ここで、 $\bar{f}(\vec{v}, \vec{x}, \bar{t})$  に関して、これを  $\bar{f}_{t=0} = \bar{f}(\vec{v}, \vec{x}, 0)$  のまわりで Taylor 展開して、 $\Delta \bar{t}^2$  以上の項を無視すると次式を得る。

$$\bar{f} = (1 - D\Delta \bar{t} + J\Delta \bar{t}) \bar{f}_{t=0} \quad (12)$$

ここでさらに、 $\Delta \bar{t}$  は微小であるとして、これを以下のように書く。

$$\bar{f} = (1 - D\Delta \bar{t})(1 + J\Delta \bar{t}) \bar{f}_{t=0} \quad (13)$$

いま、Eq.(13) について

$$(1 + J\Delta \bar{t}) \bar{f}_{t=0} = \hat{f}(\vec{v}, \vec{x}, 0) = \hat{f}_{t=0} \quad (14)$$

とおき、Eq.(14) を Eq.(13) に代入すると、次式を得る。

$$\bar{f} = (1 - D\Delta \bar{t}) \hat{f}_{t=0} \quad (15)$$

これらの式は、以下のように解釈できる。

Eq.(14) :  $J$  は非線形の衝突演算子で、 $\bar{f}_{t=0}$  が  $\Delta \bar{t}$  の間の衝突によって  $\hat{f}_{t=0}$  に変化する。

Eq.(15) :  $D$  は線形の移動を表す演算子で、 $\Delta \bar{t}$  の間の衝突によって、 $\hat{f}_{t=0}$  から  $\bar{f}_{t=0}$  に変化した分布関数のまま、衝突なしで  $\Delta \bar{t}$  の間移動する。

計算で一番困難なのは Eq.(14) の  $\hat{f}_{t=0}$  をいかにして求めるかということである。これを何らかの方法で求めることができれば、Eq.(15) を用いて次の分布関数  $\bar{f}$  を知ることができる。以下では、この  $\hat{f}_{t=0}$  を計算する方法を定式化する。そのために、まず  $\Delta \bar{t}$  間の衝突回数をいかにして求めるか、そして、各衝突をいかに計算するかについて述べる。

##### 4-2 衝突数

実際の数値計算は、計算対象領域をいくつかのセルに分割し、各々のセルの中では平衡とみなせるものとして行う。平衡であるときを考えると、 $\Delta t$  の間に一つの分子が他の分子と衝突する回数は以下のように書ける。

$$\nu = \sqrt{2} \sigma_T n \langle v \rangle \Delta t = v_{ij} \sigma_T n \Delta t \quad (16)$$

ここに、 $\sigma_T$  は全散乱断面積、 $n$  は分子数密度で、 $v_{ij}$  は分子  $i$  と分子  $j$  の相対速度で  $|\vec{v}_i - \vec{v}_j|$  である。これを無次元で表すと以下のようになる。

$$\nu = \underbrace{\sigma^* n^* t^* v^*}_{\text{A}} \bar{\sigma}_T \bar{n} \bar{v}_{ij} \Delta \bar{t} \quad (17)$$

ここで、 $\textcircled{A} = 1$ となるように  $n^*$  を選ぶと、 $n^* = (\sigma^* v^* t^*)^{-1} = (\pi a^2 L)^{-1}$  となる。したがって最終的に衝突数は以下のように書ける。

$$\nu = \tilde{n} \underbrace{\tilde{\sigma}_T \tilde{v}_{ij}}_{\textcircled{B}} \Delta \tilde{t} \quad (18)$$

ここで、 $\textcircled{B}$  は各セルの平均値として考えると、セル内の分子数  $N_S$  を用いて以下のように書ける。

$$\tilde{\sigma}_T \tilde{v}_{ij} = \frac{1}{N_S} \sum_{j=1}^{N_S} (\tilde{v}_{ij} \tilde{\sigma}_T) \quad (19)$$

以上より、分子  $i$  が  $\Delta \tilde{t}$  の間に衝突する回数  $P_i$  は

$$P_i = \frac{1}{N_S} \sum_{j=1}^{N_S} (\tilde{n} \tilde{v}_{ij} \tilde{\sigma}_T \Delta \tilde{t}) = \sum_{j=1}^{N_S} P_{ij} \quad (20)$$

すなわち、1つのセル内で起こるすべての衝突回数  $\nu_T$  は以下の式で表される。

$$\nu_T = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N_S} P_i = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N_S} \sum_{j=1(\neq i)}^{N_S} P_{ij} = \sum_{i<j}^{N_S} P_{ij} \quad (21)$$

$P_{ij}$  は分子  $i$  と分子  $j$  とが衝突する回数である。

#### 4-3 最大衝突数法

4-2節で衝突数を求めたので、あとは各衝突をいかに計算するかを考える。具体的には、Eq.(18)中の $\textcircled{B}$ をいかに計算するかということになる。ここでは、計算効率の良い最大衝突数法をとりあげる。まず、 $\tilde{G}(i, j) = \tilde{v}_{ij} \tilde{\sigma}_T$  とおく。一般的には  $\tilde{\sigma}_T$  は  $\tilde{v}_{ij}$  の関数であることが多い。したがって、衝突数を計算するためには、 $N_S(N_S - 1)/2$  個の  $\tilde{G}(i, j)$  が必要となる。これは計算負荷が大きすぎる。そこで、これらをすべて一定値  $\tilde{G}_{\max}$  と仮定する。この  $\tilde{G}_{\max}$  は、真の最大値を上回っていればよい。こうすることで、 $\nu_T$  は過大に見積もられることにはなるが、計算負荷はかなり軽減される。このとき、分子  $i$  と分子  $j$  が衝突する回数  $P_{ij, \max}$  は以下のように書ける。

$$P_{ij, \max} = \frac{1}{N_S} \tilde{n} \tilde{G}_{\max} \Delta \tilde{t} \quad (22)$$

Eq.(22) を用いて、全衝突回数  $\nu_T$  は次のように表せる。

$$\nu_T = \sum_{i<j}^{N_S} \left\{ P_{ij, \max} \left( \frac{\tilde{G}(i, j)}{\tilde{G}_{\max}} \right) \right\} \quad (23)$$

Eq.(23) は、次のような意味をもつ。

- ①: 各々の計算セルにおいて、 $N_S$  個の分子から任意の一对  $(i, j)$  を選ぶ。ただし、選んだどの組み合わせについても仮に等しい回数  $P_{ij, \max}$  衝突するものとする。
- ②:  $\tilde{G}(i, j)/\tilde{G}_{\max}$  を計算し、これが乱数  $0 \leq U \leq 1$  よりも大きければ実際に衝突させる。
- ③: 衝突数が  $\nu_T$  になるまで、この操作を繰り返す。

なお、 $\tilde{G}(i, j)/\tilde{G}_{\max}$  は

$$\frac{\tilde{G}(i, j)}{\tilde{G}_{\max}} = \frac{\tilde{v}_{ij} \tilde{\sigma}_T}{\tilde{v}_{\max} \tilde{\sigma}_T} = \frac{v_{ij}}{v_{\max}} \quad (v_{\max} \text{ は系に応じて決める})$$

より計算する。

以上により、Boltzmann 方程式にしたがう分子の衝突ならびに移動が計算できる。

#### 4. 結び

Hellums and Churchill の方法にしたがって、Boltzmann 方程式の無次元化を行った。分子に働く外力としては重力を考慮した。本論文で行った無次元化によれば、Boltzmann 方程式は Froude 数のみを含む形で無次元に整理できた。さらに、これをもとにして希薄気体の数値計算によく用いられる DSMC 法に関しても、無次

元にて定式化を行った。

#### 使用記号

$a$	: 分子直径	[m]
$\vec{e}_g$	: 単位ベクトル (重力方向)	[-]
$\vec{F}$	: 外力ベクトル	[kg m/s <sup>2</sup> ]
$f$	: 分布関数	[s <sup>3</sup> /m <sup>6</sup> ]
$\vec{g}$	: 重力加速度ベクトル	[m/s <sup>2</sup> ]
$k$	: Boltzmann 定数	[J/K]
$m$	: 分子質量	[kg]
$n$	: 分子数密度	[1/m <sup>3</sup> ]
$N$	: 分子数	[-]
$N_S$	: 計算セル内の分子数	[-]
$P_i$	: 分子 $i$ の $\Delta t$ 間の衝突数	[-]
$P_{ij}$	: 分子 $i$ と分子 $j$ の $\Delta t$ 間の衝突数	[-]
$T$	: 温度	[K]
$t$	: 時間	[s]
$V_v$	: 速度空間	[m <sup>3</sup> /s <sup>3</sup> ]
$V_x$	: 物理空間	[m <sup>3</sup> ]
$\vec{v}$	: 速度ベクトル	[m/s]
$v_{ij}$	: 分子 $i$ と分子 $j$ の相対速度	[m/s]
$v_r$	: 相対速度	[m/s]
$\langle v \rangle$	: 平均速度	[m/s]
$v_m$	: 最大確率速度	[m/s]
$\sqrt{\langle v^2 \rangle}$	: 根二乗平均速度	[m/s]
$\vec{x}$	: 位置ベクトル	[m]
ギリシャ文字		
$\nu$	: 衝突回数	[-]
$\nu_T$	: 計算セル内の $\Delta t$ 間の総衝突回数	[-]
$\sigma$	: 微分散乱断面積	[m <sup>2</sup> ]
$\sigma_T$	: 全散乱断面積	[m <sup>2</sup> ]
$\omega$	: 立体角	[sr]
上付き文字		
*	: 参照値	
-	: 無次元物理量	

#### 参考文献

- 1) W.G. Vincenti and C.H. Kruger, Jr.: "Introduction to Physical Gas Dynamics", John Wiley & Sons (1967)
- 2) 曾根良夫, 青木一生: "分子気体力学", 朝倉書店 (1994)
- 3) 南部健一: "ボルツマン方程式の確率解法 I", 東北大学流体科学研究所報告, 第3巻, 47-93(1992)
- 4) G.A. Bird: Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows Oxford University Press, New York (1994)
- 5) 甲藤 好郎: "伝熱概論", 養賢堂 (1964)
- 6) J.D. Hellums and S.W. Churchill: "Simplification of the Mathematical Description of Boundary and Initial Value Problems", *A.I.Ch.E. Journal*, **10**, 110-114(1964)
- 7) G.A. Bird: "Direct Simulation of High-Vorticity Gas Flows", *Phys. Fluids*, **30**(2), 364-366(1987)
- 8) Y. Sone, K. Aoki, H. Sugimoto and H. Motohashi: "The Benard Problem of Rarefied Gas Dynamics", *Rarefied Gas Dynamics*, Oxford University Press, 135-141(1995)
- 9) A.L. Garcia: "Hydrodynamic Fluctuations and the Direct Simulation Monte Carlo Method", *Microscopic Simulations of Complex Flows* (Edited by Michel Mareschal), Plenum Press, New York, 177-188(1990)
- 10) 渡辺 正, 蕪木英雄, 町田昌彦, 横川三津夫: "直接シミュレーションモンテカルロ法による Rayleigh-Benard 不安定性の研究", *Thermal Science & Engineering*, **2**(4), 17-23(1994)

# Nondimensionalization for Numerical Computation of Rarefied Gas Dynamics

Hiroyuki HIRANO

*Department of Applied Chemistry*

*Faculty of Engineering*

*Okayama University of Science*

*1-1, Ridai-cho, Okayama 700-0005, Japan*

(Received November 4, 1999)

Rarefied gas dynamics is important in the semiconductor fabrication and almost any process that involves high vacuum, as well as in the development of the high-vacuum equipment itself. As the demand for the high performance products in these industries has increased, the numerical computation of rarefied gas dynamics is crucial. Any equation in the governing equations and the numerical algorithms has its generality only in the dimensionless form.

This paper presents the nondimensionalization procedure for the numerical computation of rarefied gas dynamics with the Boltzmann equation by the Direct Simulation Monte Carlo (DSMC) method. The Boltzmann equation is nondimensionalized with the Froude number according to the method proposed by Hellums and Churchill.