

3次元低速希薄気体流解析プログラム

RAFAL-3D-SL VER.1.1

概要説明書

株式会社 科学技術ソフトウェア

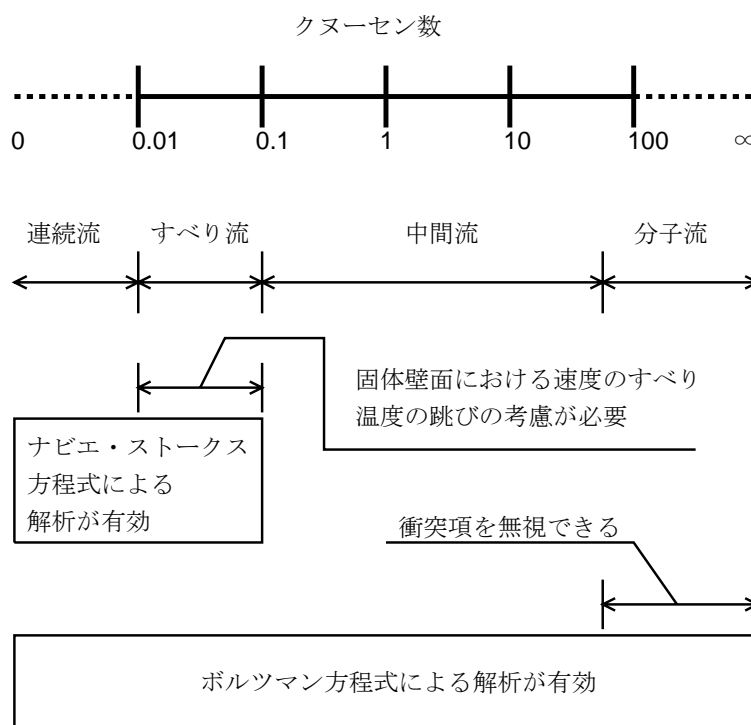
目 次

1. はじめに	1
2. 動作環境	3
3. 適用分野	3
4. プログラムの仕様および機能の概要	3
5. 入力データ	4
5.1 コントロールデータ	4
5.2 頂点データ, セルデータ	4
5.3 境界データ	5
6. 出力データ	5
6.1 プリント出力項目	5
6.2 ファイル出力項目	6
7. 関連プログラム	6
7.1 幾何学データ生成プログラム CGEN	6
7.2 入力データチェック, 出力結果プロットプログラム PPSL	6
7.3 シミュレーション粒子数グラフプロットプログラム NMLSL	6
7.4 他のプリポスト処理プログラムの流用	7

1. はじめに

RAFAL-3D-SL(Rarefied Flow Analyzer-3Dimensions Slow Flow) は、平衡気体からの偏差分をモンテカルロシミュレーションすることにより [1],[2],[3]、低速の希薄気体流を解析するプログラムです。

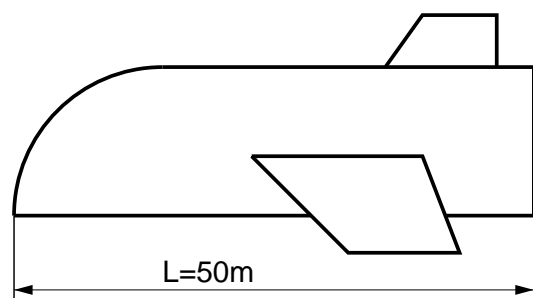
流れの希薄度はクヌーセン数 $K_n = (\text{気体分子の平均自由行程 } \lambda) / (\text{流れ場の代表長 } L)$ の値により分類され、各クヌーセン数 K_n に対する有効な解析法は以下のようになります。



例えば以下のような流れは希薄気体流としての解析が必要になります。

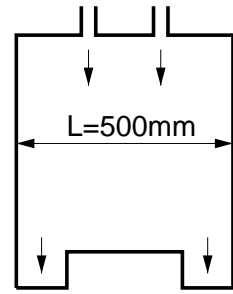
(1) 高空を飛行する物体の周りの流れ

地表から高度 240 キロメートルの空間における気体分子の平均自由行程 λ は 300m になります。この高度を飛行する全長 $L = 50\text{m}$ のスペースシャトルの周りの流れのクヌーセン数は $K_n = 6$ となり、希薄気体流としての解析が必要になります。



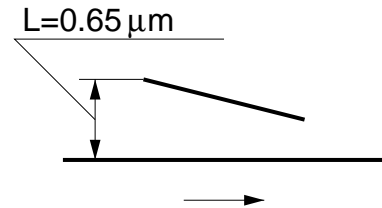
(2) 半導体製造装置内部の流れ

代表寸法 L が 500mm の半導体製造装置では、クヌーセン数 $K_n = 0.1$ に対応する分子の平均自由行程 λ は 50mm です。気体がアルゴンで装置内部の温度が 20 の場合、圧力が $0.138\text{Pa} \approx 10^{-3}\text{Torr}$ 以下になると希薄気体流としての解析が必要になります。



(3) 磁気ヘッドスライダのすきま内部の流れ

常温常圧の空気においては分子の平均自由行程 λ は $0.065\mu\text{m}$ です。すきま幅 L が $0.65\mu\text{m}$ 以下の磁気ヘッドスライダのすきま内部の流れではクヌーセン数 K_n が 0.1 以上となり、希薄気体流としての解析が必要になります。



従来このような希薄気体流の解析にはボルツマン方程式と等価な確率過程をモンテカルロシミュレーションする DSMC 法 (Direct Simulation Monte Carlo Method) が用いられてきました。しかし、DSMC 法の結果にはモンテカルロ法特有のゆらぎが伴うため、マクロ量の値に対してゆらぎが無視できるまでサンプル分子数を増やすシミュレーションをする必要がありました。特に低速流れでは要求精度の絶対値 (マクロ量の許容相対誤差に対応する絶対誤差の値) が小さいため、これに対してゆらぎを無視できるまで小さくするには膨大な計算時間が必要でした。

RAFAL-3D-SL では、平衡気体からの偏差分のみをモンテカルロシミュレーションすることにより [1],[2],[3]、低速の希薄気体流を高速かつ高精度で解析できます。

参考文献

[1]Radtke,G.A. and Hadjiconstantinou,N.G. : Variance-reduced particle simulation of the Boltzmann transport equation in the relaxation-time approximation : Physical Review E Vol.79(2009)056711.

[2]Ramanathan,S. and Koch,D.L. : An efficient direct simulation Monte Carlo method for low Mach number noncontinuum gas flows based on the Bhatnagar-Gross-Krook model : Physics of Fluids Vol.21(2009),033103.

[3]Wagner,W. : Deviation particle Monte Carlo for the Boltzmann equation : Monte Carlo Methods and Applications Vol.14,Issue 3(2008),pp.191-268.

2. 動作環境

RAFAL-3D-SL は、OS が Windows(98,2000,NT,XP,Vista,7) である pentium(または互換品) 搭載のパソコンで動作します。

3. 適用分野

- マイクロマシン内外の流れの解析
- 各種真空装置の低速希薄気体流の解析
- 微小温度差の熱ほふく流, 熱遷移流の解析

4. プログラムの仕様および機能の概要

(1) 解法

DPMC 法 (Deviational Particle Monte Carlo 法, 偏差粒子モンテカルロ法)

(2) 解析可能な流れの幾何学的条件

2次元, 軸対称, 3次元

(3) 解析可能な流れのタイプ

非定常流, 定常流 (非定常流の t の漸近解として解析)

(4) 解析可能なクヌーセン数 K_n の範囲

$0.1 \leq K_n \leq \infty$ (自由分子流)

(5) 分子モデル

(6) 分子衝突処理法

BGK モデル

線形 BGK モデル (未)

(7) 解析可能気体種数

1 種類 (単一種気体のみ)

(8) 境界条件

● 流入境界

流入気体種類, 流入気体温度, 流入気体圧力, 流入気体マクロ流速を指定。

● マクロ流入速度垂直成分自動設定流入境界

流入気体種類, 流入気体温度, 流入気体圧力を指定。(流入気体マクロ流速は自動設定)

● 固体壁境界

壁面温度, 分子反射条件 (鏡面反射, 拡散反射, 鏡面反射および拡散反射の混合), 面内方向移動速度を指定。

(9) 流入境界における流入流量算出機能

流入境界における流入流量 (負号は流出流量) を、指定された流入境界グループ別に算

出する。

流入境界から流入流出した +- 偏差粒子それぞれの個数をカウントし、指定された流入境界グループ別に出力する。

(10) 固体壁伝達熱量算出機能

固体壁に入射する粒子の衝突前後の並進運動エネルギーの変化に基づき、気体から固体壁に伝達する熱量と熱流束を、指定された固体壁別および固体壁グループ別に算出する。

(11) 流体力算出機能

固体壁に入射する粒子の衝突前後の運動量の変化に基づき、固体壁に作用する流体力を、指定された固体壁別および固体壁グループ別に算出する。

(12) リスタート機能

前回のプログラム実行に引き続く過程をシミュレーションする。各プログラム実行の最終ステップにおける粒子位置と粒子速度をリスタートファイルに保持。

(13) 選択出力機能

指定したステップの指定したセルに関する結果を出力する。

(14) 使用ファイル

リスタートファイル 5~9 本

5. 入力データ

RAFAL-3D-SL の入力データはコントロールデータ, 頂点データ, セルデータ, 境界データに大別されます。各データは固定フォーマット形式で、5 文字のヘッダ文字列とデータ本体とから構成されます。

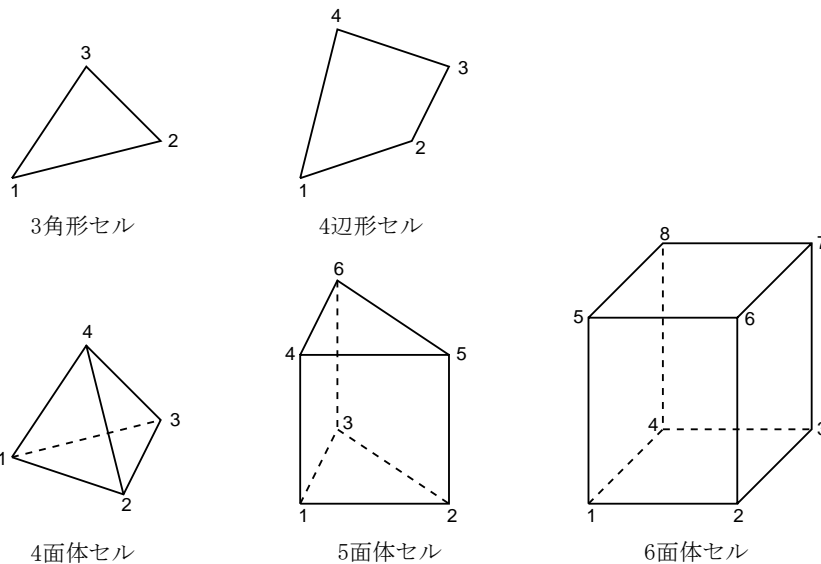
コントロールデータ
頂点データ
セルデータ
境界データ

5.1 コントロールデータ

気体性状, 境界性状, シミュレーション条件や計算結果の出力条件を指定するためのデータです。

5.2 頂点データ, セルデータ

DPMC 法では流れ場をセル分割し、各セルごとにマクロな物理量を評価します。RAFAL-3D-SL ではこのセル分割を 2 次元, 軸対称流れの場合は 3 角形セル, 4 辺形セルで、3 次元流れの場合は 4 面体セル, 5 面体セル, 6 面体セルで行います。



セルデータではセルを構成する頂点の頂点番号を指定し、頂点データでは頂点の座標値を指定します。

5.3 境界データ

境界データはセル境界を構成する辺または面の境界性状を指定するもので、セル番号と面番号またはセル番号と面番号を特定するのに十分な2個または3個の頂点番号を指定し、この面に対して境界性状を指定します。境界データで境界性状を指定されなかった境界は透過境界として扱われます。

6. 出力データ

6.1 プリント出力項目

以下の項目がプリント出力されます。

- セル単位で評価されるマクロ量
 - (1) 分子数密度
 - (2) 密度
 - (3) マクロ流速の X, Y, Z 成分と絶対値
 - (4) X, Y, Z 方向並進温度と温度
 - (5) 気体圧力
 - (6) 熱流束ベクトルの X, Y, Z 成分と絶対値
- その他
 - (7) 流入境界から解析領域への流入流量 (負号は流出流量)
 - (8) 気体から固体壁への伝熱量
 - (9) 固体壁に作用する流体力

6.2 ファイル出力項目

以下の項目がファイル出力されます。

- (1) 解析領域内の粒子数とステップ数の関係

7. 関連プログラム

7.1 幾何学データ生成プログラム CGEN

RAFAL-3D-SL の入力データのうち流れ場の幾何学形状を定義する頂点データとセルデータを生成するプログラムです。機能は以下の通りです。

- (1) 2次元長方形領域の分割による2次元幾何学データの生成
- (2) 2次元円環領域の分割による2次元幾何学データの生成
- (3) 2次元任意形状領域のBFC分割による2次元幾何学データの生成
- (4) 2次元幾何学データのZ方向への伸長による3次元幾何学データの生成
- (5) 2次元幾何学データの θ 方向への伸長による3次元幾何学データの生成
- (6) 幾何学データの平行移動
- (7) 幾何学データの回転移動
- (8) 2次元幾何学データの結合
- (9) 3次元幾何学データの結合
- (10) 隣接するセルの無いセル境界に対する境界データの生成
- (11) 境界データで指定されたセル境界の裏面に対する境界データの生成
- (12) 指定された領域内に属するセルデータの削除
- (13) 2次元任意形状領域の三角形または四辺形セル分割による2次元幾何学データの生成

7.2 入力データチェック, 出力結果表示プログラム PPSL

入力データのチェック図、出力結果のグラフィック表示図をCRT上に出力するプログラムです。機能は以下の通りです。

- (1) セル分割図, 頂点番号, セル番号, 境界条件をCRT上に表示
- (2) 粒子位置分布図をCRT上に表示
- (3) マクロ流速ベクトル図をCRT上に表示
- (4) 熱流束ベクトル図をCRT上に表示
- (5) 分子数密度, 密度, 温度, 圧力の分布図(2次元, 軸対称の場合) またはセル表面の分布図(3次元の場合) をCRT上に表示
- (6) CRT上の表示画面データをポストスクリプト形式でファイル出力

7.3 シミュレーション粒子数グラフプロットプログラム NMLSL

(1) 横軸にステップ数, 縦軸に解析領域内にある粒子数をとったグラフを CRT 上に表示

7.4 他のプリポスト処理プログラムの流用

RAFAL-3D-SL の頂点とセルはそれぞれ有限要素法の節点と要素に対応しますので、幾何学データの生成や解析結果の表示に有限要素法のプリポスト処理プログラムを流用することも可能です。このために、いくつかのプリポスト処理プログラムのデータ形式 (例えばユニバーサルファイル, ニュートラルファイル) との変換プログラムが用意されています。