

## RAFAL - 3D 解析例 (9)

## 微小すきまのあるキャビティ流れ (2次元解析)

## • 計算内容

図1に示す深さ  $H$ 、幅  $1\mu\text{m}$  のキャビティが設けられた幅  $10\text{nm}$ 、長さ  $5\mu\text{m}$  の流路の下側壁 (走行面) が速度  $U$  で移動する。この流路内の流れを、走行面速度  $U$  とキャビティ深さ  $H$  を表1のように変化させて解析し、 $U, H$  の流れに対する影響を調べる。

系は圧力  $p = 101325\text{Pa}$ 、温度  $T = 293.15\text{K}$  の空気中にあるとする。

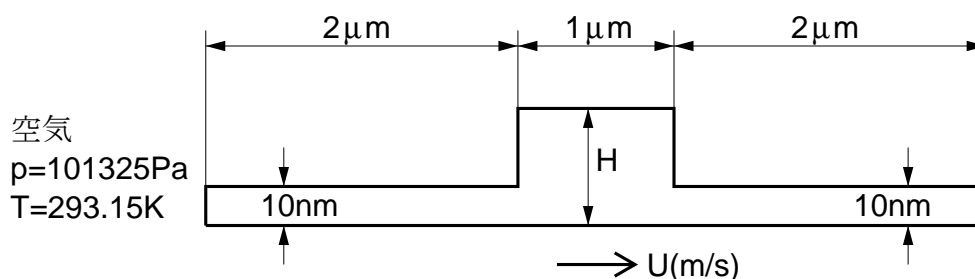


図1 微小すきまのあるキャビティ流れ (2次元解析)

	$H = 20\text{nm}$	$H = 50\text{nm}$	$H = 100\text{nm}$	解析プログラム
$U = 20\text{m}$	ケース1	ケース2	ケース3	RAFAL-3D
$U = 2\text{m}$	ケース4	ケース5	ケース6	RAFAL-3D
$U = 0.2\text{m}$	ケース7	ケース8	ケース9	RAFAL-3D-SL

表1 計算ケース

ケース1~6はRAFAL-3D(DSMC法)で、ケース7~9はRAFAL-3D-SL(DPMC法)で解析する。また、それぞれの結果をMGL法による結果と比較する。

- 空気の物性値

解析に必要な物性値データを以下のように算定する。

密度	$\rho = 1.293$	(kg/m <sup>3</sup> ) 0 , 1atm における値 (理科年表 1989 年, p.443)
1mol の質量	$M = 0.02898143$	(kg/mol)
分子 1 個の質量	$m = 4.812483 \times 10^{-26}$	(kg)
単位質量当り気体定数	$R = 286.8910$	(J/kgK)
比熱比	$\gamma = 1.403$	273.15K における値 (理科年表 1989 年, p.474)
剛体球分子モデルの全衝突断面積	$\sigma_T = 4.3264 \times 10^{-19}$	(m <sup>2</sup> )

空気は元素でないため 1mol の質量  $M$  と分子 1 個の質量  $m$  は、温度  $T=0 = 273.15\text{K}$ , 圧力  $p = 1\text{atm} = 0.101325 \times 10^6 \text{Pa}$  における密度  $\rho$  から

$$m = \frac{\rho k T}{p}, \quad M = m N_A$$

により求めた。ここで、 $k$  はボルツマン定数、 $N_A$  はアボガドロ定数で、 $k = 1.380658 \times 10^{-23} \text{JK}^{-1}$ 、 $N_A = 6.0221367 \times 10^{23} \text{mol}^{-1}$  (CODATA 1986 年調整値) である。これらの値から

$$m = \frac{1.293 \times 1.380658 \times 10^{-23} \times 273.15}{0.101325 \times 10^6} = 4.812483 \times 10^{-26} \quad (\text{kg})$$

$$M = 4.812483 \times 10^{-26} \times 6.0221367 \times 10^{23} = 0.02898143 \quad (\text{kg/mol})$$

を得る。

単位質量当り気体定数  $R$  は、1mol 当り気体定数  $\hat{R} = 8.31451 \text{J}/(\text{molK})$  (CODATA 1986 年調整値) より

$$R = \frac{\hat{R}}{M} = \frac{8.31451}{0.02898143} = 286.8910 \quad (\text{J}/(\text{molK}))$$

を得る。

剛体球分子モデルの全衝突断面積  $\sigma_T$  は、Chapman-Enskog の公式

$$\sigma_T = \frac{1}{\mu} \sqrt{\frac{m k T}{\pi}}$$

から求めた。ここで、 $\mu$  は温度  $T$  における粘性係数である。空気の温度  $T = 293.15\text{K}$  における粘性係数  $\mu = 18.2 \times 10^{-6} \text{Pa} \cdot \text{s}$  (理科年表 1989 年, p.448) を代入すれば

$$\sigma_T = \frac{1}{18.2 \times 10^{-6}} \sqrt{\frac{4.812483 \times 10^{-26} \times 1.380658 \times 10^{-23} \times 293.15}{\pi}} = 4.3264 \times 10^{-19} \quad (\text{m}^2)$$

を得る。分子直径  $d$  は  $d = 3.71 \times 10^{-10} \text{m}$  となる。

• DSMC 法, DPMC 法計算に必要なパラメータの計算

(1) 平均自由行程  $\lambda$

剛体球分子の平均自由行程  $\lambda$  は

$$\lambda = \frac{kT}{\sqrt{2}\sigma_T p}$$

より求められる。圧力  $p$ , 温度  $T$  に上記の値を代入して

$$\lambda = \frac{1.380658 \times 10^{-23} \times 293.15}{\sqrt{2} \times 4.3264 \times 10^{-19} \times 101325} = 6.528564 \times 10^{-8} \text{ (m)}$$

となる。

(2) 平均自由時間  $\tau$

平均自由時間  $\tau$  は、

$$\tau = \frac{\lambda}{\bar{c}}$$

で定義される。ここで  $\bar{c}$  は、空気分子の平均速度で

$$\bar{c} = \sqrt{\frac{8RT}{\pi}} = \sqrt{\frac{8 \times 286.8910 \times 293.15}{\pi}} = 462.7788 \text{ (m/s)}$$

である。以上より平均自由時間  $\tau$  は、

$$\tau = \frac{6.528564 \times 10^{-8}}{462.7788} = 1.410731 \times 10^{-10} \text{ (s)}$$

となる。

(3) 緩和時間  $\tau_R$

DPMC 法の基礎方程式である BGK 方程式中の緩和時間  $\tau_R$  は

$$\tau_R = \frac{4}{\pi}\tau = \frac{4}{\pi} \times 1.410731 \times 10^{-10} = 1.796198 \times 10^{-10} \text{ (s)}$$

となる。

• DSMC 法, DPMC 法シミュレーションモデル

解析領域

キャビティ上流側の幅 10nm の流路入口からキャビティを経てキャビティ下流側の幅 10nm の流路出口までを 2 次元問題として解析する。図 1 に示す領域が解析領域となる。

解析領域のセル分割

キャビティ上流側の幅 10nm の流路入口面の走行面上を原点  $O$  とし、走行方向を  $X$  軸、走行面と垂直方向を  $Y$  軸とする座標系を設定して解析領域をセル分割する。

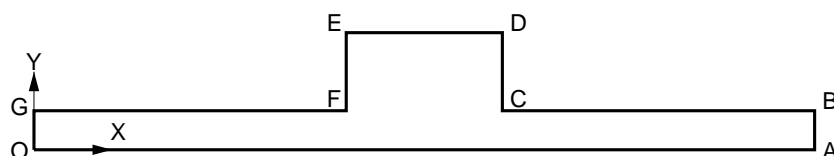


図2 座標系の設定

## (1) 流路部分のセル分割

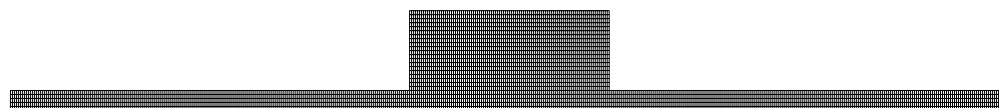
$X$  方向 (走行方向)  $2\mu\text{m}$  を 200 等分割、 $Y$  方向 (流路幅方向)  $10\text{nm}$  を 5 等分割する。

(2) キャビティ部のセル分割 ( $H = 20\text{nm}$  の場合)

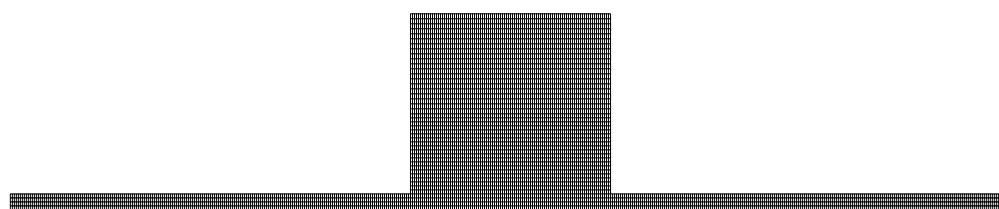
$X$  方向 (走行方向)  $1\mu\text{m}$  を 100 等分割、 $Y$  方向 (流路幅方向)  $20\text{nm}$  を 10 等分割する。

図3 キャビティ深さ  $H = 20\text{nm}$  の場合のセル分割図 ( $Y$  方向を 10 倍に拡大)(3000 セル)(3) キャビティ部のセル分割 ( $H = 50\text{nm}$  の場合)

$X$  方向 (走行方向)  $1\mu\text{m}$  を 100 等分割、 $Y$  方向 (流路幅方向)  $Y = 0 \sim 20\text{nm}$  を 10 等分割、 $Y = 20 \sim 50\text{nm}$  を 15 等分割する。

図4 キャビティ深さ  $H = 50\text{nm}$  の場合のセル分割図 ( $Y$  方向を 10 倍に拡大)(4500 セル)(4) キャビティ部のセル分割 ( $H = 100\text{nm}$  の場合)

$X$  方向 (走行方向)  $1\mu\text{m}$  を 100 等分割、 $Y$  方向 (流路幅方向)  $Y = 0 \sim 20\text{nm}$  を 10 等分割、 $Y = 20 \sim 50\text{nm}$  を 15 等分割、 $Y = 50 \sim 100\text{nm}$  を 20 等分割する。

図5 キャビティ深さ  $H = 100\text{nm}$  の場合のセル分割図 ( $Y$  方向を 10 倍に拡大)(6500 セル)

## 境界条件

### (1) 流路入口 OG、流路出口 AB

圧力  $p = 101352\text{Pa}$ , 温度  $T = 293.15\text{K}$  のマクロ流入速度自動設定流入境界とする。

### (2) 走行面 OA

$X$  方向に速度  $U(\text{m/s})$  で移動する壁面温度  $293.15\text{K}$  の拡散反射固体壁境界とする。

### (3) その他の固体壁境界 BCDEFG

壁面温度  $293.15\text{K}$  の拡散反射固体壁境界とする。

## 時間ステップ幅 $\Delta t$

上で求めた平均自由時間  $\tau$  を参照して、DSMC 法, DPMC 法とも時間ステップ幅  $\Delta t$  を  $\Delta t = 0.2 \times 10^{-10}\text{s}$  とする。この  $\Delta t$  は平均自由時間  $\tau$  の  $1/7$  程度の時間である。

## 解析手順

以下の手順でシミュレーションする。

(過程 1) 流路入口出口のマクロ流入速度をゼロに設定して、時刻  $t = 0$  に走行面を速度  $U$  で移動開始させ定常状態を達成する。

(過程 2) 過程 1 の定常状態達成後、流路入口出口のマクロ流入速度を自動設定する境界条件に変更して、定常状態を達成する。

(過程 3) 過程 2 の定常状態達成後、10 ステップ間隔 (0.2ns 間隔) でサンプルし、マクロ量の時間平均を算出する。

## ● 結果

### (1) 解析領域内のシミュレーション用分子数と時間ステップの関係

(1-1)  $H = 20\text{nm}$ ,  $U = 20\text{m/s}$  の場合の解析領域内のシミュレーション用分子数と時間ステップの関係を図 6 に示す。

1~20 万ステップが過程 1、20 万 1~60 万ステップが過程 2、60 万 1~70 万ステップが過程 3 に対応する。

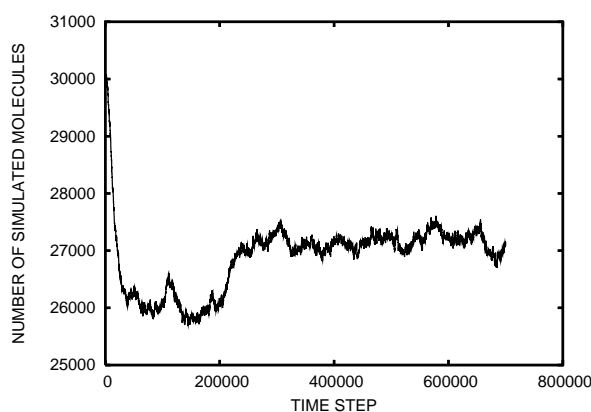


図 6 シミュレーション用分子数と時間ステップの関係 ( $H = 20\text{nm}$ ,  $U = 20\text{m/s}$ )

(1-2)  $H = 20\text{nm}, U = 2\text{m/s}$  の場合の解析領域内のシミュレーション用分子数と時間ステップの関係を図 7 に示す。

図中 1~280 万ステップが過程 1、280 万 1~600 万ステップが過程 2、600 万 1~760 万ステップが過程 3 に対応する。

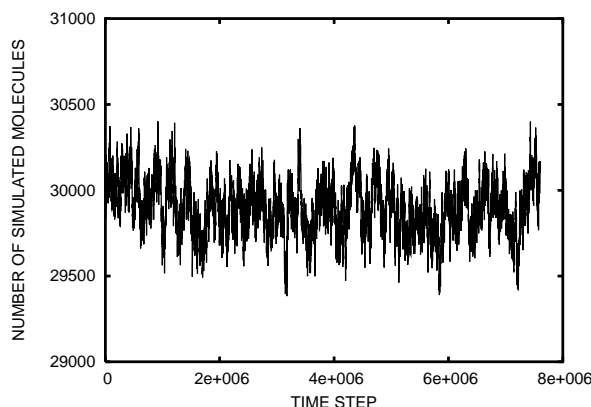


図 7 シミュレーション用分子数と時間ステップの関係 ( $H = 20\text{nm}, U = 2\text{m/s}$ )

(1-3)  $H = 20\text{nm}, U = 0.2\text{m/s}$  の場合の解析領域内の偏差粒子数と時間ステップの関係を図 8 に示す。

1~530 万ステップが過程 1、530 万 1~980 万ステップが過程 2、980 万 1~1100 万ステップが過程 3 に対応する。図中黒線は全偏差粒子数、赤線は + 偏差粒子数、青線は - 偏差粒子数である。

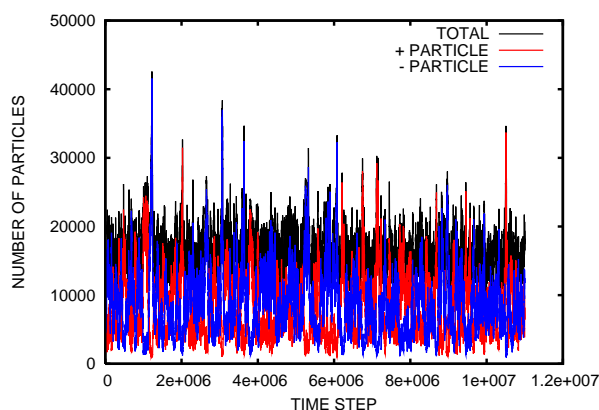
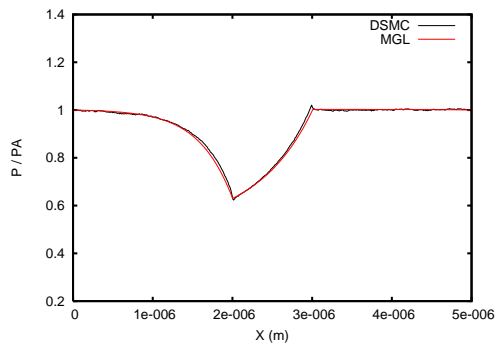


図 8 偏差粒子数数と時間ステップの関係 ( $H = 20\text{nm}, U = 0.2\text{m/s}$ )

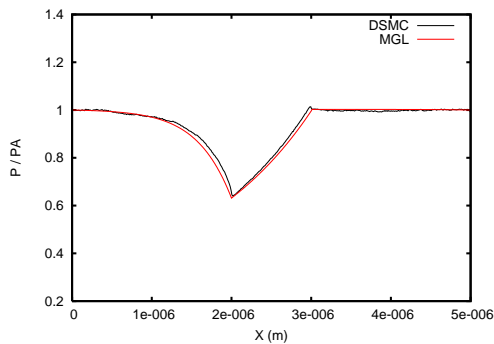
$H = 50\text{nm}, H = 100\text{nm}$  の場合も図 6,7,8 と同様な傾向であった。

## (2) 走行面上の圧力分布

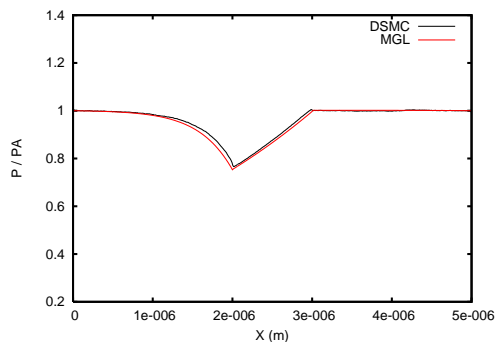
走行面上の  $X$  方向圧力分布 ( $p_A = 101325\text{Pa}$  で無次元化) を図 9,10,11 に示す。走行面上の圧力は、走行面に衝突した分子の走行面垂直方向 ( $Y$  方向) の衝突前後の運動量差から算出した。



$H = 20\text{nm}$

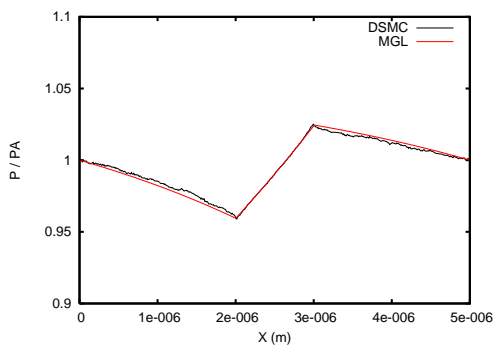


$H = 50\text{nm}$

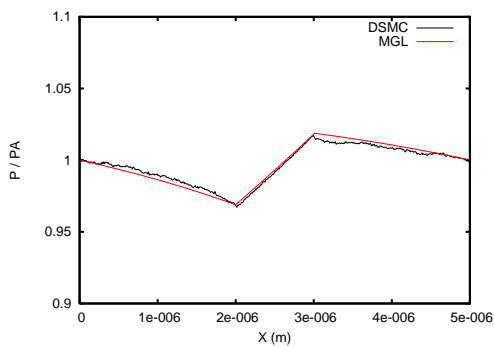


$H = 100\text{nm}$

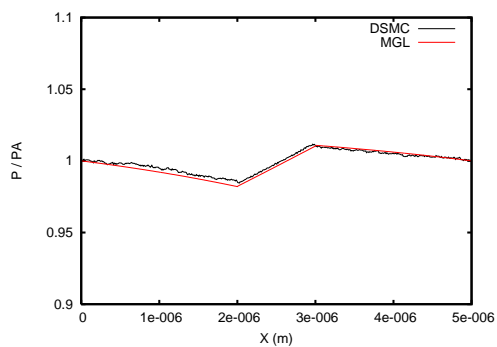
図9 走行面上の圧力分布 ( $U=20\text{m/s}$ )



$H = 20\text{nm}$

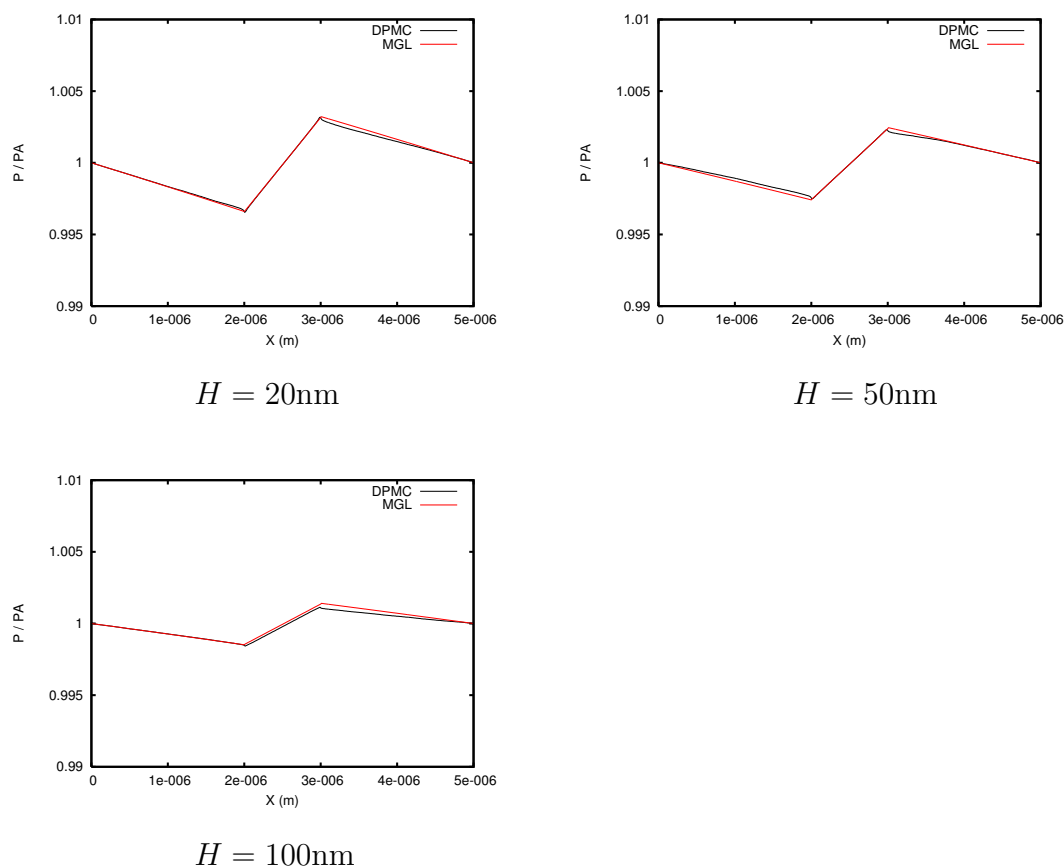


$H = 50\text{nm}$



$H = 100\text{nm}$

図10 走行面上の圧力分布 ( $U=2\text{m/s}$ )

図 11 走行面上の圧力分布 ( $U=0.2\text{m/s}$ )

### (3) 走行面上のせん断応力分布

走行面上のせん断応力 ( $-X$  方向を正) 分布を図 12,13,14 に示す。走行面上のせん断応力は、走行面に衝突した分子の走行面内方向 ( $X$  方向) の衝突前後の運動量差から算出した。



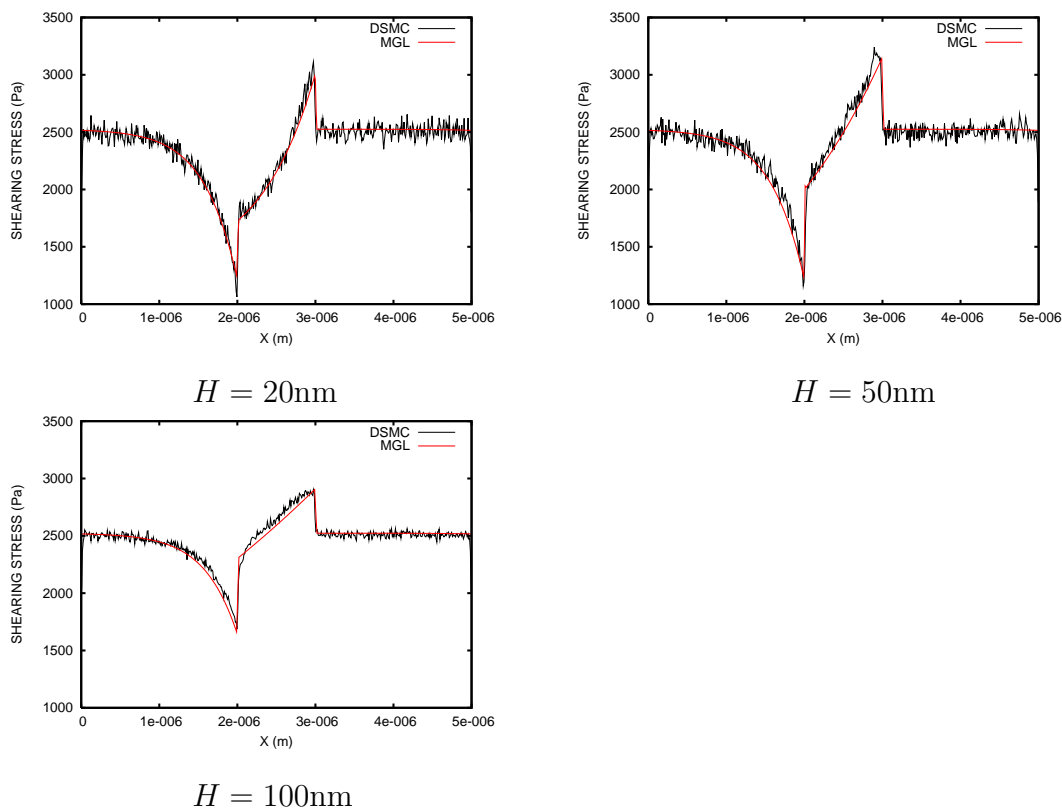


図 12 走行面上のせん断応力 ( $-X$  方向を正) 分布 ( $U=20\text{m/s}$ )

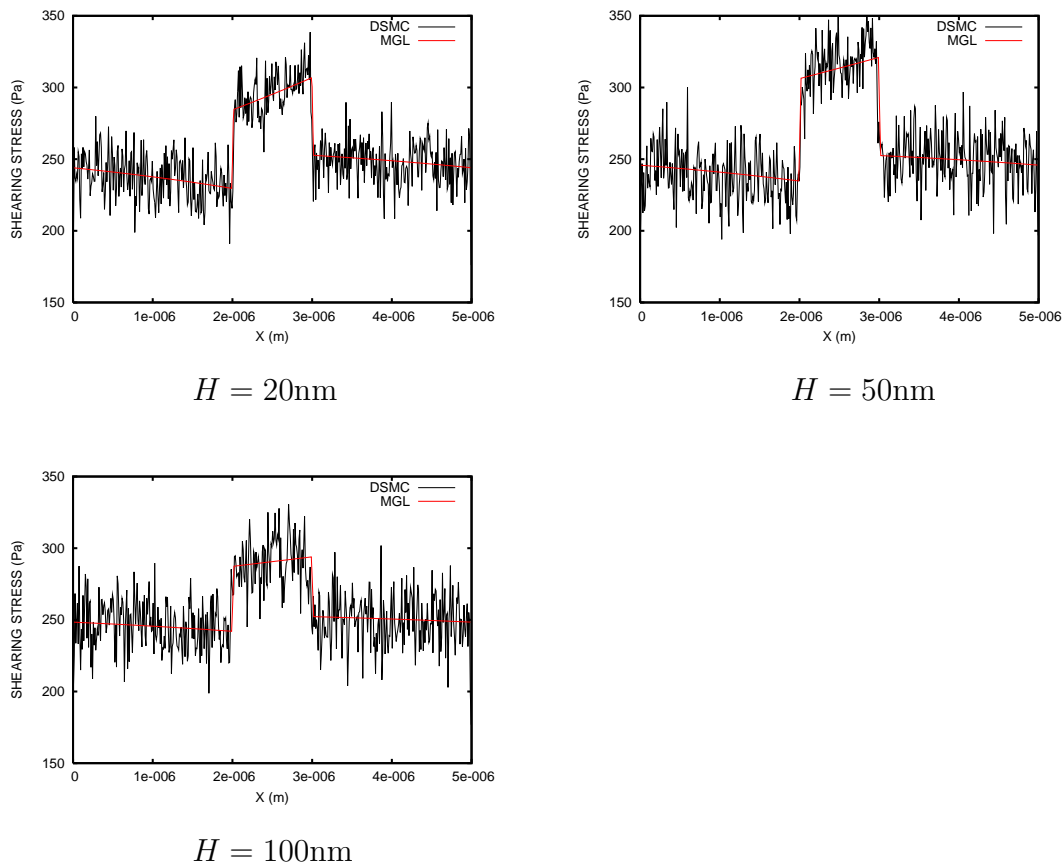


図 13 走行面上のせん断応力 ( $-X$  方向を正) 分布 ( $U=2\text{m/s}$ )

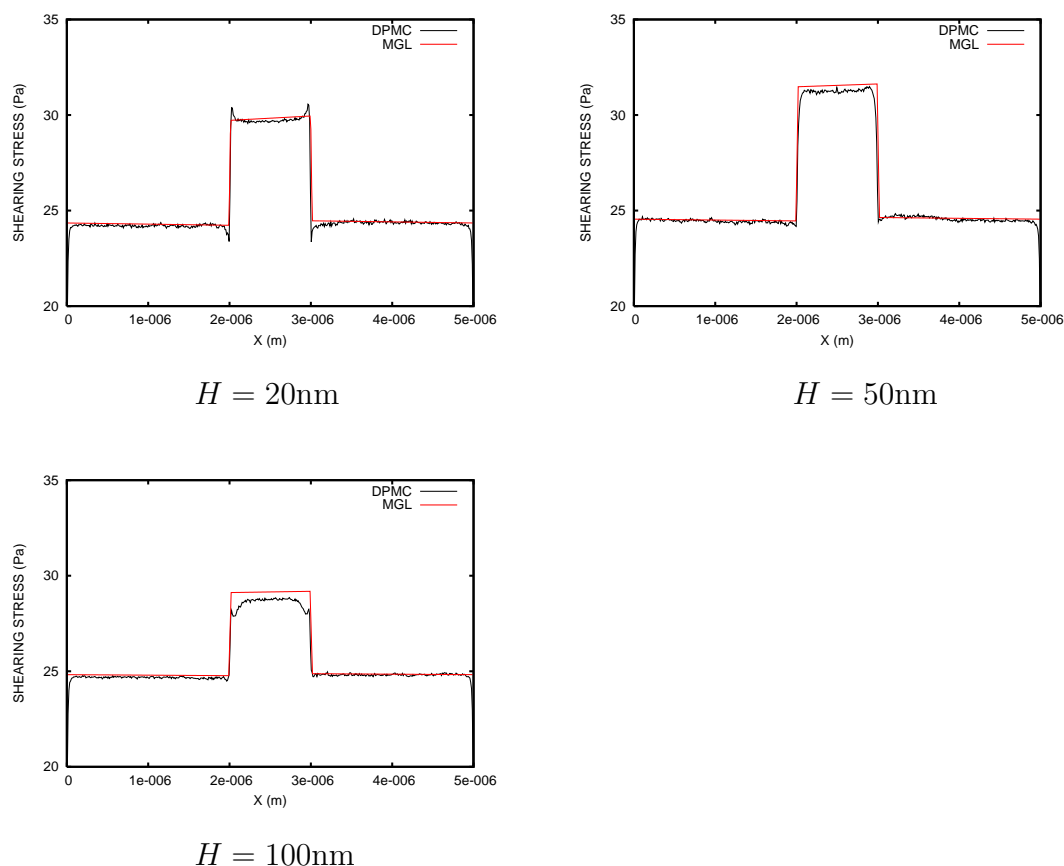


図 14 走行面上のせん断応力 ( $-X$  方向を正) 分布 ( $U=0.2\text{m/s}$ )

## ● 検討

### (1) 解析領域内のシミュレーション用分子数と時間ステップの関係

図 6 の走行面速度  $U = 20\text{m/s}$  の場合、走行面移動開始後、過程 1 の定常状態が達成されるまでに解析領域内の分子数は約 13% 減少している。これは走行面の移動による分子ドラッグ効果によりキャビティ内の気体が排気されることに対応する。その後、マクロ流入速度自動設定境界による過程 2 の定常状態が達成されるまでに解析領域内の分子数は増加し、最終的に初期状態の約 10% 減となっている。

図 7,8 の走行面速度  $U = 2\text{m/s}$ ,  $U = 0.2\text{m/s}$  の場合、走行面の分子ドラッグ効果が弱く解析領域内の分子数変化が小さくなり、ゆらぎのため分子数の時間変化を読み取ることはできない。

このため、走行面速度  $U = 20\text{m/s}$  の場合には過程 1, 過程 2 とともに定常状態達成までに約 10 万ステップ (走行面が解析領域  $X$  方向長さ  $5\mu\text{m}$  の 8 倍程度移動する時間) を要していることを参考にして、走行面速度  $U = 2\text{m/s}$ ,  $U = 0.2\text{m/s}$  の過程 1,2 の時間ステップ数を設定した。

## (2) 走行面上の圧力分布

図 9 の走行面速度  $U = 20\text{m/s}$  の場合、解析領域内の圧力は全域初期状態の圧力より小さくなっている。一方、図 10,11 の  $U = 2\text{m/s}, U = 0.2\text{m/s}$  の場合は、キャビティ下流側の圧力は初期状態の圧力より大きくなっている。ここで、 $U = 2\text{m/s}$  の場合、 $p/p_A > 1$  の部分の面積は  $p/p_A < 1$  の部分の面積より小さいのに対して、 $U = 0.2\text{m/s}$  の場合、両者の面積はほぼ等しくなっている。

これは、走行面速度が小さくなると分子ドラッグ効果による排気能力が下がり、キャビティ右端側にかき寄せられた分子を排気しきれなくなることによるものと思われる。

いずれの走行面速度においてもキャビティが深くなるにつれ最低圧力が大きくなり全体の圧力差が小さくなっている。これは、キャビティ体積が増加することによりキャビティ前後の流路が分離され、キャビティ前後の流路の流れがそれぞれクエット流に近づくことによるとと思われる。

本来段差部に対しては適用に懸念がある MGL 法よる圧力分布と、DSMC 法、DPMC 法の圧力分布の一致は本計算例に関してはよい。

## (3) 走行面上のせん断応力分布

図 12 の走行面速度  $U = 20\text{m/s}$  の場合、DSMC 法の結果は若干ゆらぎがあるものの MGL 法との一致はよい。

各キャビティ深さで同様の傾向を示すせん断応力分布は、(i) 圧力が下がるとせん断応力が小さくなる、(ii) クエット流による  $-X$  方向のせん断応力は、順逆圧力勾配に対応した  $X$  方向正負の向きのポアズイコ流によるせん断応力により減少または増加する、から説明される分布となっている。

図 13 の走行面速度  $U = 2\text{m/s}$  の場合、DSMC 法の結果は相当ゆらぎがあるが MGL 法の結果を平均としたゆらぎとなっている。この DSMC 法の結果は、走行面を表す DSMC 法の 1 個のセル境界にシミュレーション用分子が約 1800 万回衝突した場合の結果である。ゆらぎを抑えるためには、更にシミュレーションをする必要がある。

図 14 の走行面速度  $U = 0.2\text{m/s}$  の場合、DPMC 法の結果と MGL 法の結果は  $H = 100\text{nm}$  のキャビティ部を除き一致はよい。

いずれの走行面速度でもキャビティ深さ  $H = 50\text{nm}$  のとき、キャビティ部のせん断応力が最大となっているが、理由は不明である。

## ● 計算時間

各計算ケースの計算時間を表 2 に示す。計算機は Core i7 2.67Ghz 搭載パソコンで非並列計算。

	$H = 20\text{nm}$	$H = 50\text{nm}$	$H = 100\text{nm}$	解析プログラム
$U = 20\text{m}$	4 時間	5 時間	19 時間	RAFAL-3D (DSMC 法)
$U = 2\text{m}$	64 時間	66 時間	91 時間	RAFAL-3D (DSMC 法)
$U = 0.2\text{m}$	104 時間	170 時間	246 時間	RAFAL-3D-SL (DPMC 法)

MGL 法	全ケース 1 秒以内
-------	------------