

3次元希薄気体流解析プログラム

RAFAL-3D VER.10.0

概要説明書

株式会社 科学技術ソフトウェア

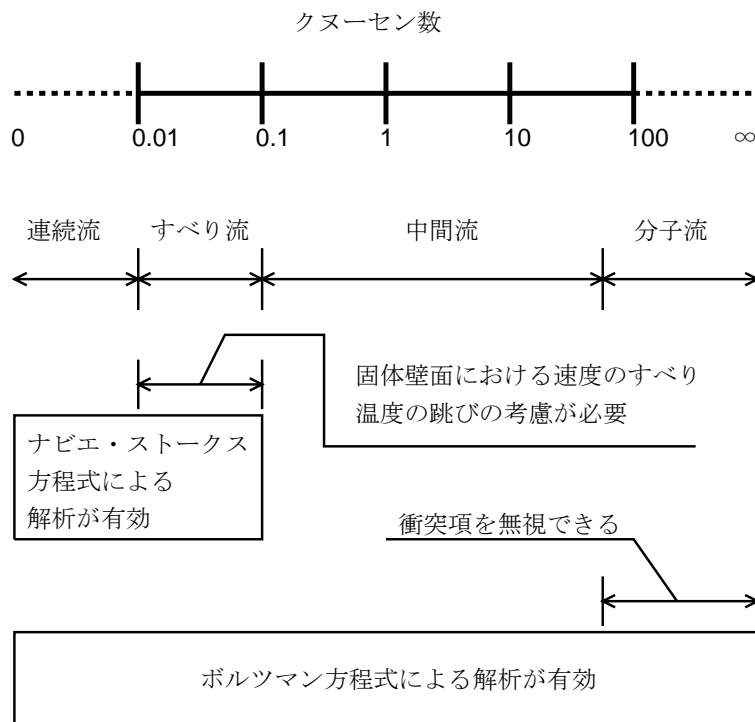
目 次

1. はじめに	1
2. 動作環境	2
3. 適用分野	2
4. プログラムの仕様および機能	3
5. 入力データ	6
5.1 コントロールデータ	6
5.2 頂点データ, セルデータ	7
5.3 境界データ	7
6. 出力データ	7
6.1 プリント出力項目	7
6.2 ファイル出力項目	8
7. 関連プログラム	8
7.1 幾何学データ生成プログラム CGEN	8
7.2 入力データチェック, 出力結果プロットプログラム PP	9
7.3 シミュレーション分子数グラフプロットプログラム NML	9
7.4 他のプリポスト処理プログラムの流用	9

1. はじめに

RAFAL-3D(Rarefied Flow Analyzer-3Dimensions) 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ことにより、定常、非定常の3次元希薄気体流を解析するプログラムです。

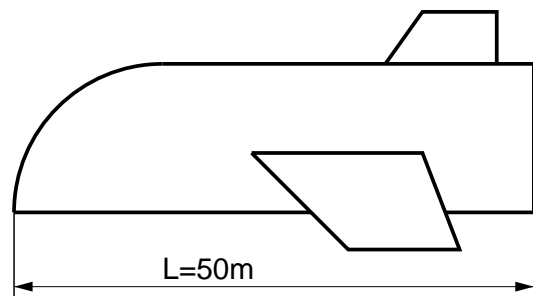
流れの希薄度はクヌーセン数 $K_n = (\text{気体分子の平均自由行程 } \lambda) / (\text{流れ場の代表長 } L)$ の値により分類され、各クヌーセン数 K_n に対する有効な解析法は以下のようになります。



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。

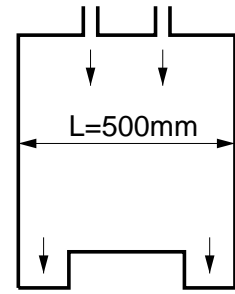
(1) 高空を飛行する物体の周りの流れ

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。



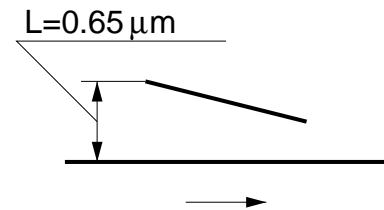
(2) 半導体製造装置内部の流れ

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。



RAFAL-3D では、すべり流, 中間流領域から自由分子流領域までの希薄気体流を解析します。なお、連続流領域の流れを解析することも原理的には可能ですが、計算量が膨大になり実際的ではありません。

2. 動作環境

RAFAL-3D 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

- 真空装置の最適設計
- 半導体製造装置内の流れの解析
- 超高空を飛行する物体の周りの流れの解析
- マイクロマシン内外の流れの解析
- 真空蒸着過程の解析
- 熱ほふく流, 熱遷移流の解析
- 衝撃波の内部構造の解析
- 混合気体の拡散過程の解析

4. プログラムの仕様および機能

(1) 解法

DSMC 法 (Direct Simulation Monte Carlo 法, 直接シミュレーションモンテカルロ法)

(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

$0.01 \leq K_n \leq \infty$ (自由分子流)

(K_n の小さい側に対する制限は原理的なものではなく、現存する計算機の性能から一応の目安として設けた制限です。)

(5) 分子モデル

剛体球分子

VHS 分子 (剛体球分子の衝突全断面積が分子相対速度に対応して変化)

逆べき分子 (分子間斥力が分子間距離の逆べきに比例)

レナードジョーンズ分子 (分子間力ポテンシャル $\phi(r)$ が、 $\phi(r) = 4\epsilon\{(\sigma/r)^{12} - (\sigma/r)^6\}$ である分子 (r は分子間距離))

(6) 分子衝突処理法

単一成分気体 : 保存型南部法, Bird time counter 法, 最大衝突数法

混合気体 : 保存型南部法, 最大衝突数法

(保存型南部法 [1],[2] では、最大衝突数法で必要であった分子間相対速度の最大値の見積りが不要)

[1] Babovsky, H. : A convergence proof for Nanbu's Boltzmann simulation scheme :

European Journal of Mechanics B/Fluids Vol.8(1989), pp.41-55.

[2] Cercignani, C., Illner, R. and Pulvirenti, M. : The Mathematical Theory of Dilute Gases,

Springer, N.Y. (1994), pp.295-303.

(7) 混合気体解析の場合の成分気体数

99種類

(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 (単一成分気体のみ)

上記の流入境界条件のうち流入気体マクロ流速の境界面に垂直方向の成分を自動設定。

- 流出境界
- 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), 付着率, 放出ガス量, 面内方向移動速度を指定。

固体壁面への分子滞留時間を指定可能。

放出ガス量の時間変化を指定可能。

半透過境界として透過確率を指定可能。

混合気体解析の場合は成分気体ごとに上記条件を指定可能。

- 固体壁+流入境界 (固体壁面に小径のノズルが開口する形状に適用)

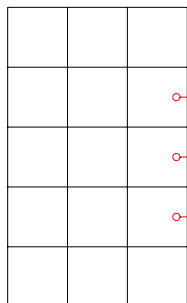
開口位置, 開口径, 開口から流入する気体の流入境界条件, 固体壁境界条件を指定。

- 反応面境界

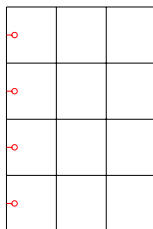
反応面の被覆率, 反応面に衝突した分子の反応確率, 反応生成物種類数, 各反応生成物分子の生成分子数を、反応面に衝突した気体分子種ごとに指定。

- 接合面境界

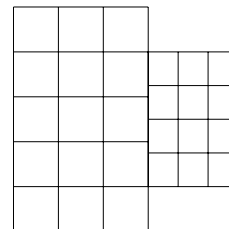
図 A,B のようにセル分割された領域を接合して、図 C のようなセル分割を可能とする境界 (不整合セル分割を実現する境界)。



A

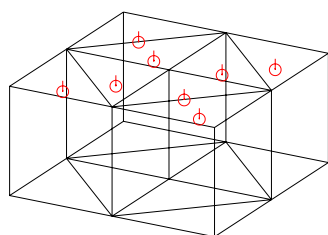


B

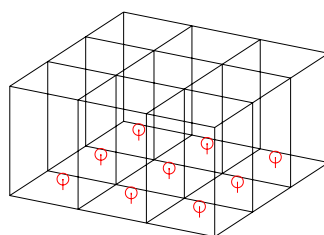


C

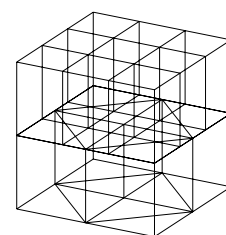
2次元, 軸対称



A



B



C

3次元

(9) 重み因子解析機能

混合気体解析の場合、各成分気体のシミュレーション用分子数が同程度となるように気体種ごとに重み因子を指定する。

(10) 流入流出分子数, 放出ガス分子数カウント機能

解析領域内に流入境界から流入した分子数と、解析領域外に流入境界から流出した分子数を、流入境界別, 分子種類別にカウントする。

解析領域内に放出ガス境界から流入した分子数を分子種類別にカウントする。

(11) 固体壁付着分子数カウント機能

付着率がゼロでない固体壁に付着した各気体種の分子数を、固体壁別および固体壁グループ別にカウントする。また、付着レートを算出する。

(12) 固体壁伝達熱量算出機能

固体壁に入射する分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算出する。

(13) 固体壁入射分子の並進運動エネルギー分布算出機能

指定した固体壁グループに入射する分子の並進運動エネルギーの度数分布表を出力する。

(14) 指定セル内の分子数カウント機能

複数のセルグループを指定して、各セルグループ内のシミュレーション用分子数を、指定した時間ステップ間隔で気体種ごとにファイル出力する。

(15) 反応回数, 生成分子数カウント機能

反応面境界に衝突した分子の反応回数, 反応により生成された分子の分子数をカウント。このカウント結果より単位時間単位面積当たりの反応回数, 生成分子数 (成膜レート, エッチレートなどに相当) を算出。

(16) 流体力算出機能

固体壁に入射する分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。

(17) 初期状態指定機能

初期状態としてセル単位に平衡状態の温度, 圧力, マクロ流速を指定する。

(18) 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分子位置と分子速度をリスタートファイルに保持。

(19) 選択出力機能

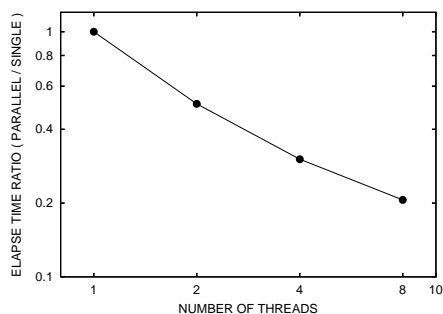
指定したステップの指定したセルに関する結果を出力する。

(20) 使用ファイル

リスタートファイル 5~9 本

(21) 並列処理機能

マルチコア CPU を搭載したパソコンで実行する場合は並列計算が可能。並列計算による時間短縮率の目安は、 $1/(\text{コア数} \times \text{ハイパースレッディングによる増速率})$ 。



スレッド数と計算時間の関係 (CORE i7 搭載パソコンの場合)

5. 入力データ

RAFAL-3D 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。

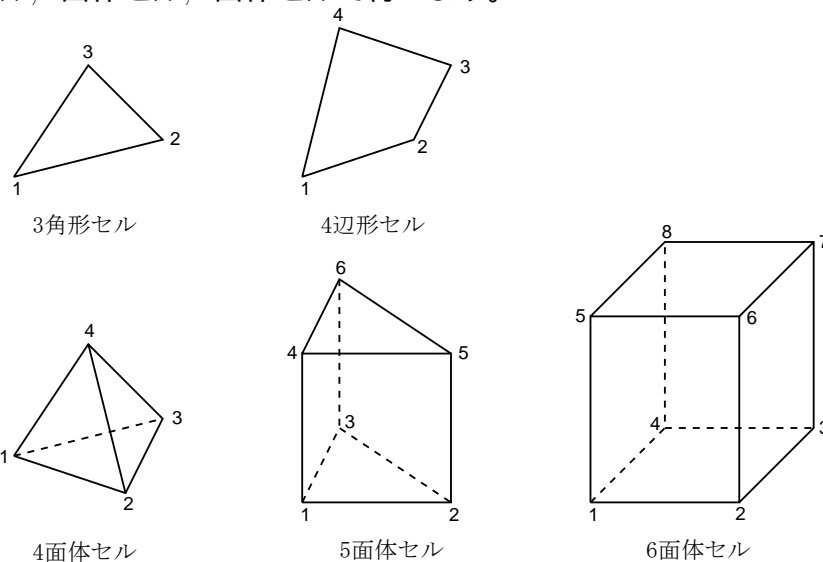
コントロールデータ
頂点データ
セルデータ
境界データ

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

DSMC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) セル内分子単位体積当り並進運動エネルギー

- (7) セル内分子 1 個当り並進運動エネルギー
- (8) 熱流束ベクトルの X, Y, Z 成分と絶対値
- (9) セルにおける単位時間当り分子衝突回数
- (10) 単位体積単位時間当り分子衝突回数

混合気体の場合は (1)~(10) の項目が混合気全体と成分気体について出力されます。

● その他

- (11) 気体別, 流入境界別の解析領域への流入流出分子数
- (12) 放出ガス分子数
- (13) 付着率がゼロでない固体壁に付着した気体別分子数, 付着レート
- (14) 固体壁に入射する分子の並進運動エネルギー度数分布表
- (15) 気体から固体壁への伝熱量
- (16) 反応面境界における反応回数, 反応により生成された分子数およびそれらの単位時間単位面積当りの値。
- (17) 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) 解析領域内のシミュレーション用分子数とステップ数の関係
- (2) 指定セルグループ内のシミュレーション用分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 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 PP

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) 分子位置分布図を 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, 混合気体混合比の分布図 (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) 指定断面内のマクロ量分布を CRT 上に表示

3次元解析において、平面上の一点の座標, 平面の法線方向, 法線方向への平面移動幅を指定して、この平面によって切断された解析対象の断面上のマクロ量分布を表示。逐次断面を移動させて表示することによりマクロ量の3次元分布の把握が容易となる。

- (7) 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 シミュレーション分子数グラフプロットプログラム NML

- (1) 横軸にステップ数, 縦軸に解析領域内にあるシミュレーション分子数をとったグラフを CRT 上に表示
- (2) 横軸にステップ数, 縦軸に解析領域内の指定セルグループ内にある気体種ごとのシミュレーション分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。

株式会社 科学技術ソフトウェア

〒107-0062 東京都港区南青山 2-28-104-301

TEL. 03-3401-6761 ; FAX. 03-3401-8796

<http://www.rafal.co.jp>