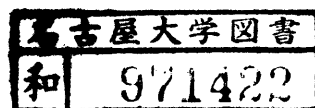


オリフィスおよび短い管路を通る 希薄気体流に関する研究

宇 佐 美 勝

オリフィスおよび短い管路を通る 希薄気体流に関する研究

昭和 61 年 4 月



宇 佐 美 勝

目次

主な記号	-----	1
第1章	緒論 -----	4
第2章	オリフィス及び短い管路を通る希薄気体の流れ (穴の上流と下流とで大きな圧力比を持つ場合) -----	13
2.1	緒言 -----	13
2.2	実験装置 -----	14
2.2.1	真空槽及び排気系 -----	14
2.2.2	圧力測定 -----	15
2.2.3	温度測定 -----	16
2.2.4	短い管路の作製法とその形状 -----	16
2.2.5	試験気体 -----	17
2.3	実験方法 -----	17
2.3.1	流量及びコンダクタンスの算出法 -----	17
2.3.2	圧力比の定義 -----	19
2.3.3	容器壁面からのガス放出を無視できる状態での実験法 -----	19
2.3.4	容器壁面からのガス放出を考慮した場合の実験法 -----	21
2.4	結果及び考察 -----	23
2.4.1	穴の断面が円形である場合の実験結果 -----	23
2.4.2	実験式 -----	25
2.4.3	他の実験データとの比較 -----	27
2.4.4	細長い断面形状を持つ場合の実験結果 -----	28
2.5	結論 -----	28
	補遺 -----	30
第3章	オリフィス及び短い管路を通る希薄気体の流れ (穴の下流側圧力が上流側圧力に対して無視できない場合) -----	58

3.1	緒言	58
3.2	実験方法	58
3.3	結果及び考察	60
3.4	結論	61
第4章	モンテカルロ直接シミュレーション法	70
4.1	モンテカルロ直接法の概要	70
4.2	二体弾性衝突の力学と分子モデル	71
4.3	空間のセル分割と時間ステップ	77
4.4	分子情報の初期設定	77
4.5	分子の移動	80
4.6	分子の索引情報操作（前後参照配列上の分子名の並べ替え）	83
4.7	分子間衝突の計算	84
4.7.1	分子衝突数の算定	84
4.7.2	衝突分子ペアの選択	88
4.7.3	衝突後の速度成分の算出法	88
4.8	変数の無次元化	89
4.9	空間情報のサンプリング	90
第5章	スリットを通過する希薄気体のモンテカルロ直接シミュレーション （上流と下流との間で大きな圧力比を持つ場合）	102
5.1	緒言	102
5.2	モンテカルロ直接法の準備	103
5.2.1	空間のセル分割	103
5.2.2	境界条件と流入分子数	104
5.2.3	流れのコンダクタンス	104
5.2.4	衝突分子ペアの選択	105
5.3	二次元スリット空間上での分子の移動	106
5.3.1	最初から対象空間に存在している分子の移動	106
5.3.2	上流境界から流入する分子の移動	108

5.4	計算結果及び考察	109
5.4.1	上流側流入境界の有限性を考慮しない場合の計算結果	109
5.4.2	上流境界から流入する分子の速度分布の補正	110
5.4.3	流入分子速度分布の補正を行った場合の計算結果	111
5.5	結論	113
第6章	円筒孔を通過する希薄気体の穴板温度上昇による流量抑制効果	129
6.1	緒言	129
6.2	実験装置及び方法	130
6.3	モンテカルロ直接シミュレーション	131
6.3.1	シミュレーションにおける上流空間の大きさ	131
6.3.2	シミュレーション空間のセルによる分割	132
6.3.3	軸対称空間上の分子の移動 (二次元スリット空間との相違)	132
6.3.4	温度変化のある境界外空間から流入する分子の計算	133
6.4	結果及び考察	135
6.4.1	実験結果	135
6.4.2	シミュレーション結果	136
6.5	結論	137
第7章	総括	160
謝辞		164
参考文献		165

主な記号

- a : スリット幅
- A : 断面積
- b : 衝突パラメータ, スリット横幅
- c : 分子速度
- c' : 分子の熱運動速度
- \bar{c} : 分子の平均速度
- c_0 : 巨視的速度 (流れの速度)
- c_m : 分子の最大確率速度
- c_r : 分子の相対速度
- C : セル一辺の長さ, サザランド定数, 比例定数
- C_D : 流出係数
- d : 直径
- f : 分子の速度分布関数
- F : コンダクタンス, 分子間力, 累積分布関数
- k : ボルツマン定数
- Kn : クヌッセン数
- l : 管路長さ (穴板の厚み)
- L : 代表長さ
- m : 分子質量
- \dot{m} : 質量流量
- \dot{m}_{max} : 理想ノズルを通過して断熱膨張する気体の最大流量
- m_r : 換算質量
- M : 分子量
- n : 分子数密度
- N : 分子数, 衝突分子数, 通過分子数
- P : 圧力, 衝突数 (衝突確率)
- P_r : 圧力比

ΔP : 圧力差
 \dot{q} : ガス放出量
 \dot{Q} : 流量
 r : 半径, 分子間距離, 極座標の線分長さ
 R : 気体定数
 Re : レイノルズ数
 t : 時間
 Δt : 微少時間
 Δt_m : モンテカルロ直接法における時間ステップ
 Δt_c : モンテカルロ直接法における衝突時間
 T : 絶対温度
 u : 分子のx方向速度成分
 v : 分子のy方向速度成分
 V : 体積
 \dot{V} : 体積流量
 w : 分子のz方向速度成分
 W_0 : 無次元衝突パラメータ
 x_0 : 上流空間のx方向の大きさ
 y_0 : 上流空間のy方向の大きさ
 α : 流量係数, 適応係数
 β : 分子の最大確率速度の逆数
 γ : 比熱比
 ε : 衝突パラメータ
 η : 逆べき乗分子モデルにおける指数
 θ : 極座標の角度, 極角
 κ : 逆べき乗分子モデルにおける定数
 λ : 平均自由行程
 μ : 粘性係数
 ν : 衝突頻度
 ρ : 密度

σ : 衝突断面積

σ_T : 総衝突断面積

τ : 平均衝突時間

ϕ : 方位角, 分子間力によるポテンシャルエネルギー

χ : 分子間衝突における偏向角

Ω : 立体角

添え字

* : 分子間衝突後の状態

1 : 上流側

2 : 下流側

a : 見かけ上の値

e : 膨張室 (下流側)

fm : 自由分子流状態

fmo : 厚みなしオリフィスの自由分子流状態

i : 入射分子

o : 平衡状態, 基準平衡状態

r : 反射分子

s : 貯気室 (上流側)

w : 壁面における値

第1章 緒論

1946年に、Tsien⁽¹⁾によって、流体力学の一分野として希薄気体力学の必要性が提唱されて以来、その重要性は、電子・冶金・宇宙・原子力・医療・食品等のさまざまな分野に拡大している。希薄気体力学の発展の最重要課題は宇宙開発のための基礎技術の確立にあったが、今日では、半導体素子としての薄膜の製造、核融合実験装置の排気と燃料供給技術等、先端技術の基礎としての多くの問題に及んでいる。その中で、低圧気体の流動状態における、流量、温度、密度等の制御は、その技術の確立が急がれているものの一つである。

管路あるいはオリフィスを通過する希薄気体流に関する研究は、真空装置系の設計あるいは真空圧力の微少コントロール、微量の気体導入等の技術の基礎となるものであり、Knudsen⁽²⁾以後数多くの研究が報告されてきた。しかし、短い管路を通る希薄気体流動現象については、中間流（遷移流）領域において有効な理論的解析が見いだされていないことに加えて、実験的にも微量流量測定に困難な点があり、いまだ、完全に確立された関係は導かれていない。

希薄気体の中間流領域に対する研究の、ここ数年の傾向としては、流れの中に物体が存在するような外部流れを取り扱ったものが圧倒的に多く、内部流れについてはあまり解析されていない。しかし、最近、管内流に関する詳細な解析が要求されるようになってきた。たとえば、分子線エピタクシーに用いられるクヌッセンセル出口は、一般に短管状になっており、そこにおける蒸気の流れは中間流領域に入ることがある。また、スパッタ装置のガス供給ノズル付近の流れも中間流を形成している。分子間衝突が無視できるような自由分子流の解析は数多く行われているが、中間流は十分に解明されておらず、薄膜化技術における一つの問題点となっている。あるいは、核融合装置においても、中間流領域の管内流れとして解析が必要なものに、ポンプ吸気口付近の流れや燃料交換時のトーラス内の流れなどがある。

本研究は、ここ十年來の計測技術の進歩にかんがみて、管内流れに関するいままでの実験法を見直し、実用性の高いデータを得るための高精度の実験を試みたものである。また、計算機容量及び計算速度の飛躍的向上により可能となったシ

ミュレーション計算を用いて、希薄気体の流動現象の理論的解析を行ったものである。

希薄気体の流れを取り扱う場合、その圧力の程度に応じて、一般に、三つの領域に分けて考えることができる。その領域分割のために用いられる無次元数はクヌッセン数 Kn と呼ばれ、次式で定義される。

$$Kn = \lambda / L \quad (1.1)$$

ここで、 λ は気体分子の平均自由行程である。また、 L は流れの代表長さを表し、円管内流れの場合一般にその直径 d が採用される。第一の領域は、代表長さ L が平均自由行程 λ に比べて十分大きい場合で、連続流領域と呼ばれる。ここでは、分子同士の衝突割合が分子と境界壁面との衝突割合より十分大きく、分子間の衝突が支配的に流れ場を決定する。すなわち、その領域では、密度・圧力・温度などの分子の統計的平均値を用いて流れを連続体として巨視的に取り扱うことが可能であり、粘性係数・熱伝導率といった輸送係数が分子間衝突の力学から導かれる。通常の流体力学が成立する領域であり、ナビエ・ストークスの方程式を用いて解析できる。この流れは粘性流とも呼ばれる。一方、圧力が十分低くなって、平均自由行程 λ が大きくなるか、あるいは、代表長さ L が極端に小さくなるとクヌッセン数 Kn は大きくなる。この状態では、逆に、分子と境界壁との衝突が流れ場を支配する要素となり、分子個々が独立に境界内を運動するのを追跡すればよい。すなわち、流れは、物理境界の幾何学形状及び気体分子の固体表面における反射法則だけで決定されとも言える。この領域を自由分子流領域と呼ぶ。第三は、上記二領域の中間に相当するもので、中間流領域あるいは遷移流領域と呼ばれるものである。ここでは、分子と物理境界との衝突頻度が分子同士の衝突と同程度の割合で生じるので、流れ場を記述する場合、複雑な境界条件の下に非線形なボルツマン方程式を解き分子の分布関数を求めねばならず、解析を行なう上で最も困難となる領域である。これら三つの領域にはっきりした境界線は存在しないが、長い円管内流れの考察からDushman⁽³⁾は、 Kn によって以下のような分割を行っている。

$$Kn < 0.01 \quad \text{連続流領域}$$

$$0.01 < Kn < 1.00$$

中間流領域

$$Kn > 1.00$$

分子流領域

過去における管内流れの研究を振り返る場合、その対象が長い管路であるのか、あるいは、オリフィスのような十分短い管路であるのかによって分けて考えることができる。また、それらが実験的研究に重点を置いているか、あるいは、数値計算を含めた理論的研究であるか等にも分類できる。

長い管路に関する過去の研究

十分長い円管に対しては、Knudsen⁽²⁾の研究が最も古く自由分子流領域における理論的考察と実験による裏付けを行った点で重要な意義を持つ。また、中間流領域におけるKnudsenの半実験式は、配管系を設計する際、十分有効な式として現在も用いられているものである。Knudsenの解析は、その後、Kennard⁽⁴⁾、Present⁽⁵⁾等によって検討された。また、同時期に、Smoluchowski⁽⁶⁾も自由分子流における様々な管路についての解析を行った。

自由分子流領域における有限長の管路を通る流れは、Clausing⁽⁷⁾の計算が最も基本となっているものである。彼は、円管内の気体温度は一定で一様であり壁面での分子の反射には余弦法則が成り立っているものとして、分子束分布に関する積分方程式に基づいて通過分子数の計算を行った。Clausingの計算以前には、Dushman⁽⁸⁾によって近似式が提案されていたが、単に、Knudsen提案による円管部の抵抗とオリフィスの抵抗とを組み合わせる管路を考えたものであった。

Clausing以後、De Marcus⁽⁹⁾, Sparrow⁽¹⁰⁾, Berman⁽¹¹⁾, ColeとPack⁽¹²⁾, PackとYamamoto⁽¹³⁾, NawynとMeyer⁽¹⁴⁾等、その積分方程式に変分法を用いるなど様々な解法が試みられている。また、管オリフィスに関するKatoとFujimoto⁽¹⁵⁾, 分子流の過渡的流れを扱ったYamamotoとPack⁽¹⁶⁾の研究、分子の壁面反射の表現に関するMcCormickとKuščer⁽¹⁷⁾の報告、矩形管と楕円管との抵抗比較に関するSteckelmacher⁽¹⁸⁾の研究もある。このような解析的な手法は比較的単純な形状の流路にしか適用できないのに対して、自由分子流領域では分子は他の分子に独立して運動するという理由から、モンテカルロ法によるシミュレーションもさかんに行われてきた。この手法はDavis⁽¹⁹⁾⁽²⁰⁾によって流れの問題に初めて適用さ

れた。これは、test-particle モンテカルロ法と呼ばれ、後で述べる直接シミュレーション法 (direct simulation method) と区別される。ほとんどどんな複雑な流路に対しても適用可能であり、使用する計算機は記憶容量よりも計算速度の速いものが望まれる。壁面の粗さが流れに及ぼす影響を調べた Chubb⁽²¹⁾ の計算は興味深い。

中間流領域の解析は、連続流に近い領域か、分子流に近い領域か、のいずれかに重点をおいて行われている。連続流に近い領域ではすべり理論に基づいて解析されたものが多い。連続流領域において長い管路の流れはポアズイユ流になるが、圧力が低くなるにつれて平均自由行程 λ が大きくなり、管壁での流速がゼロとはならなくなるので、ナビエ・ストークスの方程式にすべりの境界条件を入れて解こうとするものである。Brownら⁽²²⁾ の解析、Weber⁽²³⁾ の研究、あるいはHanksとWeissberg⁽²⁴⁾、Shidlovskiy⁽²⁵⁾ そして差分法を用いたWagner⁽²⁶⁾ 等の研究がこれに属する。またこの領域の実験的研究としてはSreekanth⁽²⁷⁾ の研究があげられる。一方、分子流に近い中間流領域では、Cercignaniら⁽²⁸⁾ によるBGKモデル方程式に基づく理論的研究、速度に依存しない平均自由行程を用いた λ モデルによるEekelenら⁽²⁹⁾ の研究、壁面での反射法則に、後ろ向き反射 (Backscattering) の仮定を加えてBGKモデル方程式を解いたBermanとMaegley⁽³⁰⁾ の研究、一様でない壁面温度における流れをモーメント法で解いたKankiとIuchi⁽³¹⁾ の研究、あるいは、LundとBerman⁽³²⁾ による実験的研究などがある。また、これら管内流研究に関する概説が、Edwards⁽³³⁾、Cercignani⁽³⁴⁾ により行われている。

オリフィス流に関する過去の研究

本研究に最も関連する、管長が極端に短くなった場合の流れをここではオリフィス流と呼ぶことにする。厚みがゼロの穴を通る完全な自由分子流状態の流量は、気体分子運動論により容易に導くことができる。一方、連続流領域においては、Perry⁽³⁵⁾ による実験的研究がある。しかしこの流れの中間流領域を理論的に解くことは非常に困難である。Willis⁽³⁶⁾ は、分子流状態の速度分布関数を基礎にした反復法 (first-iterate法) を用いてオリフィス断面の五箇所における局所的流量を算出し解析を行った。Willis が BGKモデル方程式を用いたのに対し、RotenbergとWeitzner⁽³⁷⁾ は剛体球分子に対しボルツマン方程式を用いて同様な方

法で解いたが、いずれも分子流に近い領域を対象としたに過ぎない。また、二次元スリットに対する同様な研究にWangとYu⁽³⁸⁾の報告がある。一般に、広いクヌッセン数にわたる領域の流量変化の研究は、実験的に行われたものが多く

Liepmann⁽³⁹⁾, Sreekanth⁽⁴⁰⁾⁽⁴¹⁾, Smetana⁽⁴²⁾, Lordら⁽⁴³⁾, NaumannとChun⁽⁴⁴⁾等があげられる。この中で、Naumannらの研究では広範囲の圧力比にわたる実験値と簡単な流れのモデルの考察からいくつかの実験式を導いている。しかし、微少流量測定が困難なことから、これらの研究者による実験結果の間にはかなりのばらつきが生じており、質量流に対する確立した関係式はいまだ得られていない。

希薄気体の微少流量測定法

希薄気体の流れにおける微少流量測定法には、原理的に二つの方法がある。一つは定常測定法と呼ばれるもので、オリフィス穴の上流側と下流側とで流れの定常状態を作っておき、その際、外部から上流側へ供給する気体の量を大気圧状態で計測する方法である。この方法では、希薄な気体の量を大気圧状態におき直して測定するために、上流側圧力が低くなるほど容積的に非常に微少な量を計測することになり大きな誤差を生む原因となる。他の一つは、非定常測定法であり、外部から上流側貯気室への連続的な気体の供給は行わず、貯気室から穴を通過して下流側へ気体が流れ出たときの貯気室に生じる圧力降下率を計測し、流量に換算する方法である。非定常法では、圧力の時間的変化割合を正確に測定しなければならないなど技術的な問題点が多く、そのために過去のほとんどの報告は定常法で実験されている。わずかにLordら⁽⁴³⁾の実験でのみ非定常法が採用されたが、真空計の精度あるいは正確な時間間隔の割り出しなどに疑問が残る。本研究では、微少流量計測に限界のある定常測定法を避け、非定常測定法を採用することにより、オリフィスあるいは短い管路を通過する希薄気体流の流動抵抗に関して有効な実験法を見いだした。

中間流領域の流れに対する理論的解析法

中間流領域を解析的に解こうとする場合、ボルツマン方程式の衝突項の強い非線形性のために、そのまま直接的に解くのはほとんど不可能で、一般に次の二つ

の方法が考えられている。一つは、ある分子速度の関数 Q をボルツマン方程式に掛け合わせて作られるモーメント方程式を利用する方法で、モーメント法と呼ばれている。Chapman-Enskogの方法⁽⁴⁵⁾では、分布関数を平衡状態の分布関数の近傍で無限級数に展開し、それを基にしてモーメント方程式系を作る。しかし、平衡状態からのずれが大きくなるにつれて高次の項が必要になってくるために、その場合は、衝突によって保存されない量 Q についてのモーメント方程式も用いることになる。このとき、この方程式系は閉じことができなくなり（未知数の方が方程式の数より多い）、したがって、適当な次数のモーメントで打ち切りを行わざるをえなくなる。このように、実際には困難な点が多く、二次元問題にはほとんど適用されていない。他の一つは、ボルツマン方程式の衝突項そのものを近似式で置き換えるもので、モデル方程式と呼ばれている。代表的なモデル方程式に、分子衝突頻度 ν をパラメータとした BGKモデルがある。この場合、Chapman-Enskog展開などにより分布関数の形を仮定して解くこともできる⁽⁴⁶⁾。この方法は、衝突項を近似式で表現しているために、平衡状態からのずれが小さい状態には有効であるが、非線形性の強い問題に対しては対応できない。モデル方程式に関する最近の研究としては、差分法によりモデル方程式を解いた Morinishi と Oguchi⁽⁴⁷⁾の研究、Sモデル（BGKモデル方程式の平衡分布関数 f_0 を別の分布関数で置き換えたもの）を取り扱った Shakhov⁽⁴⁸⁾、BGKモデルに関する Makiyara と Ito⁽⁴⁹⁾の研究等がある。これらの手法において、最終的な解は数値計算により求められることが多い。希薄気体問題のこのような解析手法に関する要約は、Sone⁽⁵⁰⁾、Cercignani⁽³⁴⁾⁽⁵¹⁾らにより行われている。Beylich⁽⁵²⁾は、二次元スリットを通る希薄気体の密度変化等の解析を、BGKモデルを利用したモーメント法により行った。しかし、噴流構造の解析を目的としているために、解析空間はスリットの周囲の比較的小さな領域に限られており、本研究の目的である質量流の算出は行われていない。

解析的に非常に困難であるボルツマン方程式の衝突項を、乱数を用いたモンテカルロ法によって計算しようとする方法が Nordsieck と Hicks⁽⁵³⁾によって考えられている。有限の速度空間上で、モンテカルロ法によって衝突項の積分計算を行い、あとは差分法により数値的に解くものである。この方法は、Yenら⁽⁵⁴⁾により発展させられているが、物理空間の初期設定の如何により収束時間が大きく左右

されるなどの問題がある。この方法はBGKモデルに適用することも可能である。

希薄気体に関するモンテカルロシミュレーション法は、大きく二つに分類できる。一つは、test-particleモンテカルロ法と呼ばれるもので、基本的には、一つ一つの分子を独立に物理空間に流入させ、境界壁あるいは流れ場の他の分子との干渉を通して流れの解析を行うものである。分子間衝突のない自由分子流に対する解析には十分威力を発揮している⁽¹⁹⁾⁽²¹⁾。中間流領域の流れにtest-particle法を適用することは、最初 Haviland⁽⁵⁵⁾によって行われた。彼は、初期仮定された速度分布を持つ流れ場の分子中に、多数のtest分子を一つずつ流入させ、それが場の分子と衝突しながら移動を繰り返したときのtest分子の速度によって流れ場の速度分布関数を修正していくという手法をとった。しかし、この手法は定常問題にしか適用できないし、流れ場の分子の初期速度分布を仮定しなければならないことと、またその仮定によって収束時間が大きく左右されることから、その後、ほとんど用いられていない。このtest-particle法を改良し計算速度と記憶容量の改善を試みたものにTuerとSpringer⁽⁵⁶⁾の研究があるが、やはり同様の短所を持つ。

もう一つのモンテカルロ法は直接シミュレーション法と呼ばれるもので、最初 Bird⁽⁵⁷⁾により均質気体の並進エネルギー緩和問題に適用された。その後、十年間ほどは、計算機容量と計算時間が膨大なものになるという理由のために、もっぱら理想化された単純な問題に適用されていた。しかし、1976年に直接シミュレーション法に関する総括的な著書がBird⁽⁵⁸⁾により出版されたことと、ちょうどその頃からの計算機技術の急速な進歩に支援されて、工学の実際的な問題に広く応用が試みられるようになったもので、現在では、希薄気体問題の数値解法として最も注目を集めている⁽⁵⁹⁾。非定常問題も定常問題とほとんど同様な手順で解析でき、並進運動以外の内部エネルギー（回転・振動）の取り扱いや混合気体についての計算も比較的容易である。直接シミュレーション法の特徴は、分子の物理空間内での移動と分子間衝突を微小時間間隔で分離し独立に計算することにある。すなわち、まず分子の移動の計算では、test-particle法と同様に、各々の分子は互いに独立に運動し、境界壁との衝突があればあらかじめ決められた反射法則に従って反射後の新たな速度が計算される。次に、分子間衝突の計算では、シミュレーション空間を細かく分割している微小体積（セル）毎に、移動に費やしたと

同じ時間内に起こる分子間衝突が計算されるものである。分子間衝突の計算法における細部（衝突数の計算）については、Birdの方法以外にいくつかの手法が提案されており、それらの妥当性についても検討されている⁽⁶⁰⁾⁽⁶¹⁾。その中で、Birdによって開発されたセルタイム法（タイムカウンタ法）は、「ボルツマン方程式の数値解法という点において厳密さに欠ける」との議論⁽⁵⁴⁾⁽⁶¹⁾⁽⁶²⁾があるものの、密度・温度など流れの巨視的な量を問題にする場合には十分良い結果が得られるとの意見が一般的であり、その手法の簡便さと、それに伴う卓越した計算速度のために、広く応用が期待されているものである。最近、並列演算によって高速処理の行えるスーパーコンピュータが一般にも使用できるようになってきたが、直接シミュレーション法において、分子移動の計算では分子一個一個に対して並列に処理できるし、分子間衝突のルーチンでもセル毎に独立に計算することから、今後、この手法を用いた研究は飛躍的に発展するものと考えられる。事実、モンテカルロ法による数値風洞の研究も現在すでに行われつつある⁽⁶³⁾。直接シミュレーション法を内部流れに適用した例は、二次元管路の出口部と軸対称ノズルの流れを扱ったもの⁽⁶⁴⁾、超音速分子線スキマー内の流れを取り扱ったもの⁽⁶⁵⁾（いずれもBird）などが上げられるが、質量流を計算することは行っていない。

このように現在までの研究を振り返ってみると、特に、希薄気体のオリフィス流については、研究者によって実験値にばらつきが存在しているために広い領域にわたって確立された関係は得られていないし、理論的にも、わずかに自由分子流に近い領域で解析が行われているに過ぎない。質量流を理論的に精度良く取り扱おうとした場合、穴の上流側および下流側の広い領域を対象にしなければならないことも、これを困難にしている理由の一つである。

本論文は、大きく二つの部分に分かれている。前半は、第2章と第3章における実験的研究に関する記述である。そこでは、微少流量計測に限界のある定常測定法を避け、非定常測定法を採用することにより、穴を通る希薄気体流の流動抵抗に関して有効な実験法を見いだしている。後半は、第4章から第6章までの、モンテカルロ直接シミュレーション法を用いた数値解析とその応用である。

まず、第2章⁽⁶⁶⁾⁻⁽⁶⁸⁾では、短い管路を通る希薄気体流の実験装置と非定常測定法の概要を述べ、上流側の圧力に対して下流圧力が無視できるような大きな圧力比を持った流れについての実験結果を示す。また、第3章⁽⁶⁸⁾では、下流圧力が無視できない状態、すなわち、小さな圧力比を持つ場合の質量流の実験結果を示す。次に、第4章⁽⁶⁹⁾⁻⁽⁷¹⁾では、直接シミュレーション法の詳細な検討を、特に、Birdのセルタイム法（タイムカウンタ法）を中心に論ずる。第5章⁽⁶⁹⁾⁽⁷⁰⁾では、それを希薄気体のオリフィス流に適用する場合の問題点について検討したのち、シミュレーション結果を示して実験値との比較考察を行う。第6章⁽⁷¹⁾では、オリフィス流れの応用として、希薄気体の微少流量コントロールをオリフィス板の温度制御を用いて行うことを考え、実験とシミュレーションにより検討する。最後に、第7章では、以上の結果をまとめ、本研究の総括を行う。

第2章 オリフィス及び短い管路を通る希薄気体の流れ⁽⁶⁶⁾⁽⁶⁷⁾⁽⁶⁸⁾

(穴の上流と下流とで大きな圧力比を持つ場合)

2.1 緒言

オリフィスあるいは短い管路を通る希薄気体の流れに関する研究は、古くから数多く行われている。これは、真空技術の基本となるものであり、分子線研究あるいは宇宙航空技術にも欠くことのできないものである。この希薄気体流の解明には、流れの局所的な性質（速度分布、密度分布、圧力分布等）を知ることがも重要な問題であるが、実用的な見地からは、流れの平均的（全体的）な性質として、オリフィスから十分離れた上・下流の圧力差と質量流量の関係を求めることがより重要である。しかし、遷移流（中間流）領域において、ボルツマン方程式に基づく有効な理論解析が見いだされていないことに加えて、実験的にも、微少流量測定などに困難な点があり、この領域で圧力差と質量流量に関して確立した関係は、いまだ得られていない。

希薄気体の流れにおける微少流量測定法には、原理的に二つの方法がある。その一つは定常測定法と呼ばれるもので、オリフィスあるいは管路の上流側（本研究では貯気室と呼ぶ）と下流側（膨張室）とで流れの定常状態を作っておき、その際、外部から上流側へ供給する気体の量を大気圧状態で測定する方法である。この方法では、たとえば、ビュレット式流量計などを用いた場合、希薄な気体の量を大気圧状態におき直して測定するために、容積的に非常に微少な量を計測することになる。そのため、貯気室圧力が低くなるほど長時間にわたる計測が必要となり、圧力および温度の変動等によって大きな誤差を生じる可能性がでてくる。

他の一つは、非定常測定法と呼ばれるものである。外部から貯気室への連続的な気体の供給は行わず、貯気室から穴を通して膨張室へ気体の流れ出たときの貯気室に生じる圧力降下率を測定し、流量に換算する方法である。非定常法は、広い圧力範囲にわたる一連のデータを短時間に測定できるという特徴を持つが、反面、圧力の時間的変化割合を正確に測定しなければならず、このためには、連続的に使用できて安定な性能を持つ圧力計が不可欠である。また、高い圧力状態で

貯気室容器壁面に吸着した気体分子が、低い圧力状態で再放出（ガス放出）された場合、大きな誤差を生じるという欠点がある。非定常法に伴うこのような困難さのために、いままでの多くの報告はほとんど定常法で実験されたものであり、著者の知るかぎりでは、わずかにLordら⁽⁴³⁾の実験で非定常法が採用されたに過ぎない。Lordらは、その研究の中で、圧力データの時間微分操作に異なった二つの方法を用いるなどくふうをしているが、それぞれの方法から得られた結果にはかなりの差異を生じており、その実験に用いたアルファートロン真空計の精度、あるいは、正確な測定時間間隔の割り出しなどに難点があったものと思われる。さらに、Lordらの実験では、容器壁からのガス放出に対してなんら考慮がなされておらず、問題点は多い。

本実験では、微少流量測定に限界のある定常測定法を避け、非定常測定法を採用することにより、大きな圧力比で穴を通過する希薄気体の質量流に関して有効な実験法を見いだした。壁面からのガス放出効果に対しては、これを少なくし、また、これを補正する方法を考えた。また、マイクロコンピュータを利用した自動計測により、正確な時間間隔で測定し処理することを試みた。このような方法により、形状の異なる様々な管路のコンダクタンスに関して十分信頼できる結果を得ることができた。得られた一連のデータから、異なる圧力範囲で有効に利用できる二つの実験式の作成を行った。また、従来得られている結果との比較も行った。

2. 2 実験装置

本研究に用いた実験装置とその概要図を、図2.1, 2.2 に示す。実験装置は、真空槽及び排気系、種々の測定装置、そして、供試部品（オリフィスあるいは短い管路）から成る。

2.2.1 真空槽及び排気系

真空槽は、図2.2 に示すように、隔壁 によって、上流側の貯気室（内容積 0.152m^3 、直径約600mm、長さ約400mm）と下流側の膨張室（内容積 0.674m^3 、直径約600mm、長さ約1600mm）に分けられている。両室は、開閉可能なバイパス管路に

よって連結されている。試験されるオリフィスあるいは短い管路は、隔壁の中心に設けられた取付け部に固定される。真空中では、いったん容器壁面に吸着された気体分子の再放出（ガス放出）が常に生じているが、その吸着分子を少なくし、ガス放出量を少なくするために、真空槽内面はニッケルめっきが施されている。壁面からのガス放出量は、真空槽内圧力、壁面の温度あるいはその時点までに壁面がどのような環境（圧力、温度、接触していたガスの種類等）にさらされていたかによって、大きく左右されるものである。単位時間に壁から放出されるガスの質量 \dot{m}_0 は、完全気体を仮定すると

$$\dot{m}_0 = V(dP/dt)/RT \quad (2.1)$$

と表すことができる。ここで、 V は真空槽容積、 dP/dt は真空槽内の圧力上昇率、 T は槽内温度である。一定温度の下では、

$$\dot{q} = V \cdot (dP/dt) \quad (2.2)$$

という量は \dot{m}_0 に比例するので、この \dot{q} を用いてガス放出量を表現することが一般的である。本実験装置の貯気室における \dot{q} は、温度25℃において24時間以上 $1.33 \times 10^{-2} \text{Pa}$ ($1 \times 10^{-4} \text{mmHg}$) 以下の真空状態におかれていた場合、 $10^{-6} \text{Pa} \cdot \text{m}^3/\text{s}$ ($10^{-5} \text{mmHg} \cdot \text{l}/\text{s}$) のオーダーであった。

排気系は、二台の油拡散ポンプ（DPF-14）、二台の油拡散噴射ポンプ（DBP-10）ならびに一台の油回転ポンプ（KRP6500）で構成されている（いずれのポンプも大垂真空製）。各ポンプの特性を表2.1に示す。この排気系を完全に作動させたときの到達真空度は、膨張室が $1.33 \times 10^{-4} \text{Pa}$ ($1 \times 10^{-6} \text{mmHg}$)、貯気室が $1.33 \times 10^{-3} \text{Pa}$ ($1 \times 10^{-5} \text{mmHg}$) である。また、使用するポンプの組み合わせを上流側貯気室の圧力に応じて変えることにより、下流側膨張室の圧力を上流側の 1/100 以下（ほとんどの場合 1/1000 以下）に保つことが可能である。

2.2.2 圧力測定

本実験では、上流側貯気室の圧力減少率を測定して流量を算出する非定常測定

法を用いるため、安定で精度が高く連続的に使用できる真空計が必要である。その要求を満たすものとして、MKS社製のバラトロン真空計（容量形の隔膜真空計）を採用した。本実験では、測定範囲の異なる二機種の絶対圧測定型バラトロン真空計を用いた。絶対圧測定型の基準圧力側は、 $1.33 \times 10^{-5} \text{ Pa}$ (10^{-7} mmHg)以下の圧力で密封されており、ケミカルゲッターによって高真空状態を保持している。また、センサー部は、 45°C の温度で一定に保たれている。表2.2 に、二つのバラトロン真空計の特性を示す。

バラトロン真空計は、零点圧力を基準真空計と較正する必要があるが、本実験での最低使用レンジは比較的高いので、 10^{-4} Pa 程度の圧力において三極管形電離真空計（GI-T，日本真空技術製）を較正用真空計として使用した。また、電離真空計は下流側（膨張室）圧力の測定にも用いた。ピラニー真空計（GP2T，日本真空技術製）は、バラトロン真空計で較正したものを下流側圧力の確認用として用いた。また、真空装置各部の圧力のモニター用としても用いた。油マノメータは、バラトロン真空計指示値（ 133 Pa 以上の圧力における）の確認用として用いた。マノメータで使用した油は、シリコンオイルDC-705であり、その密度はピクノメータ（蒸留水により容積確認）によって、異なる温度に対して測定された。図2.3 に、シリコンオイルの密度変化を示す。

バラトロン真空計の出力は、デジタル電圧計（Type 2502，横河電機製）のBCD端子を介してマイクロコンピュータ（TK80BS，日本電気製）に入力され処理される。

2.2.3 温度測定

貯気室及び膨張室内の気体温度の測定には、真空容器内空間に吊した直径 0.1 mm の銅-コンスタンタン熱電対を用いた。熱電対線の真空容器への挿入口から接合部までの長さは約 60 cm であり、容器壁面に接触しないようにしている。

2.2.4 短い管路の作製法とその形状

実験に用いた短い管路(穴)の形状を表2.3 と表2.4 に示す。表2.3 は、円筒形状の穴寸法を表し、表2.4 は、図2.4 に示すような細長い断面形状の穴の寸法を表す。穴板の厚み（管路の長さ）が 0.1 mm 以下のものは、シックネスゲージ用鋼板

の素材にドリルで穴あけし，サンドペーパー（粒度800番を少し目づまりさせたもの）で仕上げたものを用い，それ以上の長さの管路は，黄銅板にドリルあるいはフライスで穴あけして作製したものと，黄銅の円筒管を切断したものを使用した．いずれも同形状のものを多数作製し，真円度，穴の裏表の形状差，仕上がり等の最も良い穴を選んだ．穴の断面形状は，万能投影機あるいは読み取り顕微鏡でいくつかの方向に測定し平均した．管路の長さはマイクロメータで測定した．

2.2.5 試験気体

試験気体としては，乾燥空気（シリカゲルを詰めた乾燥筒を通過させ水蒸気を除去したもの）を用いた．

2.3 実験方法

2.3.1 流量及びコンダクタンスの算出法

真空技術で取り扱う流量 \dot{Q} の形は，[体積流量] \times [圧力]で表されることが多く，完全気体を仮定すると，温度一定の下で \dot{Q} は質量流量 \dot{m} と比例関係にある．

$$\dot{Q} = P_s \cdot \dot{V} = \dot{m} \cdot R \cdot T_s \quad (2.3)$$

ここで， P_s 及び T_s は上流側貯気室の圧力及び温度であり， \dot{V} は上流側でみた体積流量， R は気体定数を表す．定常測定法による実験では，上流側と下流側をそれぞれ一定の圧力に保っておき，外部から上流側へ供給する気体の体積流量 \dot{V} を測定し流量 \dot{Q} を算出する．一方，非定常測定法では，いったん所定の圧力まで貯気室に気体を流入させたあとは，外部から気体の供給は行わず，体積 V_s の貯気室から下流側へ気体が流出することによって生ずる圧力減少率 $-(dP_s/dt)$ を測定して，次式により流量を算出する．

$$\dot{Q} = -V_s \cdot (dP_s/dt) \quad (2.4)$$

また，コンダクタンス F という量も真空技術ではよく用いられ，下流側（膨張室）

圧力を P_e としたとき，次式で定義されるものである．

$$F = \dot{Q}/(P_s - P_e) = -V_s \cdot (dP_s/dt)/(P_s - P_e) \quad (2.5)$$

ここで，コンダクタンスとは，気体の流れやすさを表すものであり，気体の圧力差を電気回路における電圧，気体流量を電流にそれぞれ置き換えたときの，抵抗の逆数に相当するものである．このように，非定常測定法では，貯気室の容積，貯気室圧力の減少率，そして上流と下流の圧力差を測定することにより，原理的にはコンダクタンスを計算できる．

一般に，コンダクタンスは，厚みのないオリフィスに対する理論的自由分子流コンダクタンス^{*1}

$$F_{fmo} = \dot{Q}_{fmo}/(P_s - P_e) = (A/4)\sqrt{8RT_s/\pi} \quad (2.6)$$

によって無次元化されて表示される．ここで， A は穴の断面積，添字 fmo は厚みなしオリフィスの自由分子流状態を示す．また，通常の流体力学で用いられる流量係数 α は^{*2}

$$\dot{m} = \alpha A \sqrt{2(P_s - P_e)/\rho_s} \rho_s \quad (2.7)$$

という関係式で与えられるので， $P_s \gg P_e$ の場合，式(2.6)(2.7)から α と F/F_{fmo} とは次のような関係にある．

$$\begin{aligned} \alpha &= \dot{m}/(A \sqrt{2\rho_s P_s}) = \dot{Q}/(A \sqrt{2\rho_s P_s} R T_s) \\ &= F P_s/(A \sqrt{2RT_s} P_s) \\ &= \sqrt{1/(4\pi)}(F/F_{fmo}) \end{aligned} \quad (2.8)$$

*1 補遺参照

*2 ここで言う流量係数は，膨張補正係数を含んだ形のものである．

ここで、 \dot{m} は質量流量、 ρ_s は貯気室における気体密度、 R は気体定数を表す。

なお、貯気室容積 V_s の値は、貯気室を十分排気した後、大気圧で一定容量の乾燥空気を流入させ、定常に達したときの圧力を読み取ることにより、完全ガスの状態方程式を用いて算出した。流入乾燥空気の容積の測定には、ビュレット式流量計および、水により容積を検定した塩化ビニール製のタンクを使用した。また、同様の方法で、真空槽全体（貯気室と膨張室を合わせたもの）の容積も算出した。一方、両室を真空中に排気した後、貯気室と膨張室を遮断し、貯気室だけに133Pa以下（高精度のバラトロン真空計を用いるため）の気体を導入し、その後、仕切り弁を開放して両室の圧力を平衡させ、そのときの圧力値から容積比を計算した。このようにして得られた容積比と、前に得られた二つの容積から計算された容積比が等しいことは確認された。以下に、それらの値を示す。

$$\text{貯気室容積 } V_s = 0.152 \text{ m}^3$$

$$\text{膨張室容積 } V_e = 0.674 \text{ m}^3$$

$$\text{容積比 } V_e/V_s = 4.435$$

2.3.2 圧力比の定義

本実験では、圧力比 P_r を次のように定義する。

$$P_r = (P_s - P_e)/P_s = \Delta P/P_s \quad (2.9)$$

本章では、下流側圧力が十分低く、上流側圧力に対して無視できるような高い圧力比 $P_r > 0.99$ ($P_s/P_e > 100$) の状態を取り扱う。また、第3章では、下流側圧力が無視できないような状態 $P_r > 0.5$ ($P_s/P_e > 2$) の実験について述べる。

2.3.3 容器壁面からのガス放出を無視できる状態での実験法

貯気室容器壁面に吸着されている気体分子の放出は、貯気室圧力の上昇をもたらすので、非定常測定法に影響を与える可能性があるが、ここでは、貯気室圧力がある程度高く、穴を通して流れ出る気体の流量が、ガス放出量に比べて十分大きい（ガス放出を無視できる）場合について、実際の実験手順を示す。真空槽内を十分排気 ($1.33 \times 10^{-2} \text{ Pa}$ { $1 \times 10^{-4} \text{ mmHg}$ }) 以下で15時間以上排気した後、膨張室側

で $2.67 \times 10^{-4} \text{Pa} \{2 \times 10^{-6} \text{mmHg}\}$ 以下，貯気室側で $2.67 \times 10^{-3} \text{Pa} \{2 \times 10^{-5} \text{mmHg}\}$ 以下の圧力に3時間以上維持)したのち，貯気室と膨張室とをつないでいるバイパス管路を閉じ，リーク弁を通して貯気室へ試験気体を送り込む．貯気室内が所定の圧力に達したところでリーク弁を閉じ，それ以後の圧力減少を読み取る．バラトロン真空計の出力は，ディジタル電圧計のBCD端子を介してマイクロコンピュータに入力されており，また，その電圧計の計数開始信号もマイクロコンピュータによって与えられるので，正確な時間間隔で計測し計算処理することができる．なお，実験中の下流側膨張室圧力は上流側の1/100以下（ほとんどの場合1/1000以下）に保った．

バラトロン真空計（310BHS-1）の応答時間は，コントロールユニットにより40ms，400ms，4sの切り替えが可能である．ノイズレベルを低くするためには，データサンプル数を減らして応答時間を長くするか，応答速度を速くしてサンプル数を増しそれを平均するかのとおりが考えられる．この処理系の最大データサンプル数は毎秒約8回であり，それ以下の数で任意に設定できるが，真空計の応答時間とデータサンプル数のどのような組合せに対しても，結果に大きな差異は現われなかった．実際には，40ms，400msの2種の応答時間に対して，それぞれ毎秒1回でデータサンプルし，それをマイクロコンピュータ上で平均するという操作によって，ほとんどの実験が行われた．

いま，図2.5の曲線Aに示すように，時刻 t_1 における貯気室圧力 $P_s(t_1)$ が，時刻 t_2 で圧力 $P_s(t_2)$ に変化したとすれば， $\Delta t = t_2 - t_1$ が十分小さいとき，式(2.4)は近似的に次のように書ける．

$$\dot{Q} = -V_s \cdot \{P_s(t_2) - P_s(t_1)\} / \Delta t \quad (2.10)$$

ここで，この流量 \dot{Q} は， $P_s(t_1)$ と $P_s(t_2)$ の平均圧力 $P_s = \{P_s(t_1) + P_s(t_2)\} / 2$ における値であるとみなす．本実験では，上流側圧力 P_s に比べて下流側圧力 P_o は十分小さいので，コンダクタンス F は次式で求められる．

$$F = \dot{Q} / (P_s - P_o) \\ \approx \dot{Q} / P_s$$

$$= V_s [\{P_s(t_1) - P_s(t_2)\} / \Delta t] / [\{P_s(t_1) + P_s(t_2)\} / 2] \quad (2.11)$$

2.3.4 容器壁面からのガス放出を考慮した場合の実験法

貯気室圧力が低くなってくると、壁面からのガス放出量が無視できなくなり、穴を通過する気体流量が式(2.4)で表されなくなる。たとえば、ガス放出によって、図2.5の曲線Bのごとく貯気室圧力の上昇が引き起こされると、結果として圧力計で読み取る圧力減少曲線はCのようになる。小さな圧力減少率を持った曲線Cから計算される流量あるいはコンダクタンスは、真の値より小さく、この傾向は貯気室圧力が低くなるほど、すなわち、真の流量が少なくなるほど顕著に現われてくる。この効果を小さくするために、壁面を清潔に保っておくことと、温度の低い状態で実験することは当然考えられることであるが、今回それに加えて、次の二つの方法でガス放出に対処した。

(I) ガス放出率一定の仮定に基づくデータの補正 壁からのガス放出量が時刻によらず一定であると仮定してデータを補正する方法を考えた。いま、単位時間に穴を通過する真の流量を \dot{Q} 、壁からのガス放出量を \dot{q} とすると、実際に真空計で読み取る圧力減少率 $(dP_s/dt)_a$ から計算されるみかけ上の流量 \dot{Q}_a 及びみかけ上のコンダクタンス F_a は、次のように書ける。

$$\dot{Q}_a = -V_s (dP_s/dt)_a = \dot{Q} - \dot{q} \quad (2.12)$$

$$F_a = \dot{Q}_a / P_s = (\dot{Q} - \dot{q}) / P_s \quad (2.13)$$

よって、真のコンダクタンス $F \equiv \dot{Q} / P_s$ と、みかけ上のコンダクタンス F_a とは、次のような関係になる。

$$F_a = -\dot{q} \cdot (1/P_s) + F \quad (2.14)$$

ここで、完全に自由分子流領域に入った状態を考えると、その領域での真のコンダクタンスは一定値 F_{im} を取るとみなし得るので、ガス放出量 \dot{q} を一定と仮定すれば、式(2.14)において \dot{q} と F とは定数となり、 F_a は貯気室圧力の逆数 $1/P_s$ の一

次関数となる。図2.6 は、横軸を貯気室圧力の逆数 $1/P_s$ 、縦軸をみかけ上のコンダクタンス F_a にとった場合のグラフであるが、完全な自由分子流領域では上述のような理由で直線関係が成立する。そこで、完全に自由分子流状態にあると考えられるすべての実験値を用いて、最小二乗法によりガス放出量 \dot{q} (図2.6 における直線の傾き) を算出し、これを分子流領域以外のデータにもあてはめて補正を行うものである。ここで問題となるのは、どの状態で完全に自由分子流領域に入ったとするかであるが、今回は、分子流領域に入ったと思われる箇所をいくつか上げて、それぞれガス放出量補正の計算を行い、得られたコンダクタンスが分子流領域において一定値に収束している場合を採用した。ほとんどの場合、 $1/Kn < 0.3$ においてガス放出量が算出された。

さて、ガス放出率が一定であるという仮定を満たすためには、実験中の容器壁面温度は一定に保たれ、かつ短時間内に一連のデータを採取する必要がある。本実験のこの低圧域における一連のデータ取得は、最大でも一時間程度で完了するものである。また、実際にガス放出量の補正を必要とするのは、真の流量の少ない自由分子流及びそれに近い領域であるが、高い貯気室圧力の状態から始まり次第に低い圧力へ移る一連の実験において、補正に使用するデータは自由分子流と思われる低圧状態でとられるので、自由分子流に対しては時間的ギャップはなく、自由分子流に近い流れに対しても時間的ずれは小さい。したがって、その間のガス放出量変化は無視できるものと考えられる。

以上の議論において、壁面から放出される気体分子は、試験気体と同じものであることを前提にしているが、実際に、実験中に算出されるガス放出量は、試験気体が貯気室に導入される前の高真空状態におけるガス放出量の 7~10倍程度であることから、放出分子は、実験開始後の高圧時に貯気室壁面に吸着されたものがほとんどであると考えられる。

(Ⅱ) 複数個の穴を持つ供試部品による実験 ガス放出の影響を減らすためには、真の流量が相対的に大きくなるような、断面積の大きな穴で実験を行えばよい。しかし、大きな断面積の穴では、貯気室圧力が増大した場合、その流量の増加に真空ポンプの排気容量が追いつかなくなり、十分な圧力比を保った実験は不可能となる。そこで、ガス放出に対するもう一つの対応として、穴形状は圧力

が高い場合の実験で用いるものと同じもので、複数個の穴を持った供試部品を作り、低圧域における実験に用いた。実際には、同形状の穴を五つあるいは六つ持つものを作製し、各穴を通る各噴流が相互に干渉するのを避けるために、穴の間隔をできるかぎり大きく取った（穴間隔は、穴直径の5倍以上）。この複数穴の実験データと、一つ穴で得られたデータとが、両データの共存する領域で完全に一致することは、実験後確認された。

2. 4 結果及び考察

2.4.1 穴の断面が円形である場合の実験結果

円形断面の穴を用いて得られた実験結果を、図2.7、2.8 に示した。縦軸は、厚みのないオリフィスに対する理論的自由分子流コンダクタンス F_{fm0} によって無次元化されたコンダクタンス F/F_{fm0} を示している。図2.7 の横軸は、クヌッセン数の逆数 $1/Kn$ で示されており、温度一定の条件では、これは上流側圧力 P_s に比例するものである。ここで、クヌッセン数は、貯気室内平均自由行程 λ_s と代表長さ L を用いて次のように定義される。

$$Kn = \lambda_s / L \quad (2.15)$$

$$\lambda_s = \mu_s / \{0.499 \bar{c} P_s / (R T_s)\} \quad (2.16)$$

ここで、 \bar{c} は分子の平均速度である。また、 μ_s は貯気室における気体の粘性係数を表し、温度 T_0 K の粘性係数 μ_0 が知れているとき、温度 T K の粘性係数 μ は式(2.17)で計算できる。

$$\mu = \mu_0 \sqrt{T/T_0} (1 + C/T_0) / (1 + C/T) \quad (2.17)$$

ここで、 C はサザランドの定数で、空気の場合 $C=117$ である。また、代表長さ L は、穴の断面積の4倍を周囲長で除して得られる等価直径（円形断面の場合は直径 d となる）を用いた。図2.8 の横軸は、レイノルズ数 Re で示されているが、 Re 数は次式で求められる。

$$Re = u d \rho_s / \mu_s = 0.501(1/Kn)(1/F_{rmo}) \dot{V} \quad (2.18)$$

ここで、 u は、上流側でみた体積流量 \dot{V} を穴の断面積で除したものである。また、 $P_s \gg P_o$ が成立する場合には、

$$Re = 0.501(1/Kn)(F/F_{rmo}) \quad (2.19)$$

となる。

図から明らかなように、オリフィス及び各円筒管とも、分子流領域から連続流領域にかけて、なめらかに変化していくデータが得られている。図2.7には、自由分子流領域における理論解析値として、Nawyn-Meyer⁽¹⁴⁾の値（本実験に用いた穴形状の範囲内では、ほぼ Clausius⁽⁷⁾の解析値に等しい。表2.5 参照）が、それぞれの管の長さとの比 l/d に応じて直線（一点鎖線）で描かれている。いずれも、本実験値と良く一致しており、前節で述べた壁面からのガス放出量補正法が十分有効であることが分かる。一方、連続流領域においては、Perry⁽³⁵⁾の作成した半実験式が直線（破線）で描かれている。Perryは、レイノルズ数 $Re > 10^5$ の連続流領域において、薄刃オリフィスを用いてその流量に関する実験を行い、その結果から流量公式を提唱したが、それを、無次元コンダクタンス F/F_{rmo} を用いて表すと、式(2.20)のようになる。

$$P_r = (P_s - P_o)/P_s \geq 0.474 \text{ に対して} \\ F/F_{rmo} = \{1.449 + 0.778(P_o/P_s)\} / \sqrt{1 - P_o/P_s} \quad (2.20)$$

本実験におけるいずれの円筒管も、連続流領域の限界では、Perryの半実験式の値にほぼ収束する傾向にある。特に、 $l/d=0.025$ のオリフィスでは、連続流領域においていったん Perryの値よりも大きな値を示しながら、次いで、わずかに減少し Perryの値に収束するという特異な傾向を見せている。図2.9 は、図2.7 の一部分を抜き出して描いたものであるが、黒丸は、一つ穴の円筒孔により得られたデータ、白丸は、複数穴により得られたデータである。両データが共に存在する

圧力領域において、実験結果に全く差異は見られない。これは、複数穴を通る噴流が、質量流に影響を与えるような干渉を起こしていないことを示すものである。図 2.9 には、さらに、中間流領域の有限長さの円筒管に対して作成された Hanksら⁽²⁴⁾による半実験式が破線で描かれている。Hanksらは、有限長の円管のコンダクタンスを求めるにあたって、端の影響のない無限長円管として計算したコンダクタンスに、管の先端を薄刃オリフィスとみなして計算したコンダクタンスを組み合わせ、内壁でのすべりの影響は円管内流れと同じ形であると仮定して、中間流領域における式(2.21)を導いた。

$$\begin{aligned}
 F/F_{fmo} &= w_s + B \cdot (d/2\lambda_m) \\
 w_s &= 9B^2 [\pi/4 + \{128/(27\pi)\}(2l/d)] \\
 B &= (\pi/8) / \{(2l/d) + (3\pi/8)\}
 \end{aligned}
 \tag{2.21}$$

ただし、 λ_m は、円筒管の上流と下流の平均圧力 $P_m = (P_s + P_o)/2$ に基づく平均自由行程である。管の長さ l と直径 d の比 l/d がかなり大きい場合には、分子流に近づいた領域で実験値と一致することが認められるけれども本実験の大部分であまり良い一致は見られない。本実験で用いたような短い円筒管にはHanksらの半実験式は適用できないと言える。なお、実験で用いた試験気体の温度は、実験日により15℃～25℃の間で変化しているが、同形状の穴について行った異なる温度における結果は、厚みなしオリフィスの分子流コンダクタンスで無次元化することによって完全に一致した。したがって、本実験の温度範囲内では、自由分子流領域におけると同様にすべての領域で、コンダクタンスは絶対温度の平方根に比例すると考えられる。

2.4.2 実験式

これまでに得られた実験データを基にして、下流側圧力が無視できる状態で利用できる実験式の作成を試みた。図2.9の実験データを全体的に眺めると、 $1/Kn$ に対するコンダクタンス変化の様子は、どの形状の管路もある範囲内で類似の傾向を示している。そこで、まず、 $l/d=0.025$ に対する実験式を作成し、修正係数によって他の l/d の管路にもあてはめることを行った。 $l/d=0.025$ に対する実験

式は、クヌッセン数Kn の二次式の逆数 を基本に用いることによって良好に作成することができた。実験式(2.22)の第一項の分子にある平方根は、細かな調整のために加えたもの、また、定数0.4733は、連続流領域の極限 ($1/Kn \rightarrow \infty$) においてコンダクタンスが Perryの値⁽³⁵⁾に一致するように選んだものである。そして、係数 a を変化させることによって、他の l/d の管路に対しても、 $1/Kn < 25$ の領域で実験値に一致させることができた。

$$\frac{F}{F_{fm0}} = \frac{0.4733 + A\sqrt{1/(a/Kn)}}{1 + B/(a/Kn) + C/(a/Kn)^2} + \frac{F_{fm}}{F_{fm0}} \quad (2.22)$$

$$\begin{aligned} a &= F_{fm}/F_{fm0} + 0.125\exp[-(12F_{fm}/F_{fm0} - 11.2)^2/2] \\ &\quad + 0.18\exp(-14.7F_{fm}/F_{fm0}) - 0.08, \\ A &= 0.907, B = 10.4, C = 16.1 \end{aligned}$$

ここで、 F_{fm} は、管路の幾何学的形状に依存した自由分子流コンダクタンスであり、 l/d に対する F_{fm}/F_{fm0} の理論計算値が Nawyn-Meyer⁽¹⁴⁾あるいは Clausing⁽⁷⁾などによって計算されている(表2.5)。また、 F_{fm}/F_{fm0} の値の簡略化された計算式が Henning⁽⁷²⁾によって提案されているので、それを利用することもできる。この実験式(2.22)を用いて計算した値が、図2.9 に示されている。

次に、式(2.22)に係数の追加を行って実験式の適用範囲を広げることを試みた。しかし、 $1/Kn$ に対する F/F_{fm0} の変化を広範囲にわたって表現する実験式はうまく得られず、代わりに、 Re に対する実験式(2.23)を作成することができた。適用範囲は、 $Re < 2800$ ($1/Kn < 4000$) である。

$$\frac{F}{F_{fm0}} = \frac{0.4733 + I\sqrt{1/(aRe)^c}}{1 + J/(aRe)^c + K/(aRe)^{2c}} b + \frac{F_{fm}}{F_{fm0}} \quad (2.23)$$

$$I = 1.31(F_{fm}/F_{fm0})^{16}, J = 8.537, K = 3.599$$

ここで、係数 a, b, c は表2.6 により F_{fm}/F_{fm0} から求める。この実験式では、 Re 数から無次元コンダクタンスを算出するようになっているが、一般には、上流側の

圧力すなわち $1/Kn$ から計算したい場合が多い。その場合には、コンダクタンスの予測値と $1/Kn$ を式(2.19)に代入してまず Re 数を計算する。それを実験式に代入し、得られたコンダクタンスの値と予測値とに差があれば、その二つの値の平均値を用いて逐次近似の方法で満足な値が得られるまで計算を繰り返す。実験式(2.23)を用いて計算した値が図2.7 に実線で描かれているが、全領域にわたって、実験値をよく表現していることがわかる。なお、これら実験式を導くにあたって、係数 I, J, K あるいは A, B, C などの最適化にはシンプレックス法⁽⁷³⁾を使用した。

2.4.3 他の実験データとの比較

オリフィスを通る希薄気体流の研究は数多く行われており、その中で、十分大きな圧力比での実験値は、本章で作成した実験式と比較できる。ただし、比較するにあたり、それぞれの報告で用いられている値^{*1} を、本章で採用した整理法すなわち $1/Kn$ と F/F_{fmo} の関係に書き直す必要がある。以下に、それらの数値の間の関係を示した。

$$\begin{aligned} Kn[\text{本実験}] &= 1.256 Kn_{(\text{Naumann})} \\ &= 1.256(1/Re)_{(\text{Liepmann, Willis})} \\ &= 0.5 Kn_{(\text{Lord})} \end{aligned} \quad (2.24)$$

$$Re_{(\text{Naumann, Smetana})} = 0.501(F/F_{fmo})(1/Kn)[\text{本実験}] \quad (2.25)$$

$$\begin{aligned} F/F_{fmo}[\text{本実験}] &= 2.507 KR_{(\text{Naumann})} \\ &= \dot{m}/\dot{m}_{fm}(\text{Willis, Lord, Sreekanth}) \\ &= \Gamma/\Gamma_k(\text{Liepmann}) \\ &= 1.72 C_D(\text{Smetana}) \end{aligned} \quad (2.26)$$

*1 $Kn_{(\text{Naumann})} = 1/Re_{(\text{Liepmann, Willis})} = \mu_s \sqrt{RT_s}/P_s d$

$Kn_{(\text{Lord})} = \lambda_s/r = 2\lambda_s/d$

$Re_{(\text{Naumann, Smetana})} = 4\dot{m}/\pi d \mu_s$

$KR_{(\text{Naumann})} = \dot{m} \sqrt{RT_s}/P_s A_0$

$C_D(\text{Smetana}) = \dot{m}/\dot{m}_{\max}$

r : 穴断面の半径, \dot{m}_{\max} : 理想ノズルを通して断熱膨張する気体の最大流量

以上のように変換された Liepmann⁽³⁹⁾, Sreekanth⁽⁴⁰⁾⁽⁴¹⁾, Lordら⁽⁴³⁾, Smetana⁽⁴²⁾, Naumann⁽⁴⁴⁾の実験値及びWillis⁽³⁶⁾の理論解析値と、本章で得られた実験式(2.22)を用いて計算された厚みなしオリフィスのコンダクタンス F/F_{fo} の値が、図2.10 に描かれている。ただし、Lord, Naumann, Willis の値は曲線で表示してある。全体的に見て、各データは広い幅を持って分布しており、本実験式の値はその分布帯のほぼ下限に位置している。そして、 $1/Kn < 7$ の領域では、Naumannの実験値と良く一致している。また、Willis の 分子流速度分布を基礎とした反復法による解析に関しては、多項式によって得られた値 (Full-first-iterate)の方が、初項近似解(Leading-term)によるものよりも、本実験に近い結果となっている。

2.4.4 細長い断面形状を持つ穴の実験結果

図2.11～2.22 に、穴の断面が円形でなく、細長い断面形状を持った穴についての実験結果を示す。横軸は、貯気室内平均自由行程と穴の等価直径により計算されたクヌッセン数の逆数 $1/Kn$ で示されている。それぞれの図には、円形断面の実験値から得られた実験式(2.23)の値が曲線で描かれているが、いずれの場合も結果と実験式はほぼ一致している。すなわち、代表長さ L として等価直径を用いれば、本実験におけるような l/L の小さい穴に関しては、円形断面と細長い断面とではほぼ同じコンダクタンスの値をとると考えられる。

2.5 結論

[1] 非定常測定法を用いて、圧力比の大きい場合における、オリフィスあるいは短い管路のコンダクタンス測定の実験を行い、信頼できる結果を得た。コンダクタンスは、自由分子流領域におけるNawyn-Meyerの理論計算値から、連続流領域におけるPerryの値まで、なめらかに変化する傾向にある。

[2] 容器壁面からのガス放出率を、一連のデータ取得時間内では一定であるとみなし、自由分子流領域における実験データからガス放出量を算出してコンダクタンスの補正を行った。また、その有効性を確認した。

[3] 非定常測定法を用いるにあたって、複数の穴（穴間隔は穴直径の5倍以上）

を持つ供試部品を作製し低圧域の実験に用いたが、各穴を通る噴流相互の干渉は全く認められなかった。複数穴による計測は、質量流を増大させガス放出量を相対的に減少させるので、低圧域の質量流に関する実験に有効である。

[4] 中間流領域において、有限長の円筒管に適用されるべきHanksの半実験式は、本実験で用いたような短い管路の流れには適用できない。

[5] 円形断面の穴を用いて得られたデータに基づいて、適用範囲の異なる二つの実験式を提案した。

[6] 細長い断面形状を持つ穴のコンダクタンスは、 l/L が小さければ、円筒孔のコンダクタンスとほぼ同じ値となり、実験式(2.22)(2.23)が利用できる。

[7] 本実験で用いた試験気体の温度は、実験日により 15°C ～ 25°C の間で変化しているが、この温度範囲内では、コンダクタンスは絶対温度の平方根に比例すると考えられる。

補遺

壁面に衝突する分子数

平衡状態において，単位時間，単位面積の壁面に衝突する気体分子数 N は，厚みを無視できるオリフィスを一方向に通過する分子数と同じものと考えられる．この値は，希薄気体の管内流れを考える場合の基本的な量であり，平衡状態の速度分布関数

$$f_0 = \{m/(2\pi kT)\}^{3/2} \exp[-\{m/(2kT)\}(u^2+v^2+w^2)] \quad (1)$$

を用いて導くことができる．ここで， m は分子質量， k はボルツマン定数， T は絶対温度， u, v, w はそれぞれ分子の x, y, z 方向速度成分である．

いま，図1に示すように， x - y 平面上に単位面積の底面を持つ斜めの円柱を考え，円柱の中心軸の長さを速度ベクトル \mathbf{c} の大きさに等しくとると，その円柱の中に含まれる \mathbf{c} クラスの分子（速度成分が $u \sim u+du$ ， $v \sim v+dv$ ， $w \sim w+dw$ の範囲にある分子）は，単位時間後には，必ず円柱の底面に衝突する．その個数 dN は，

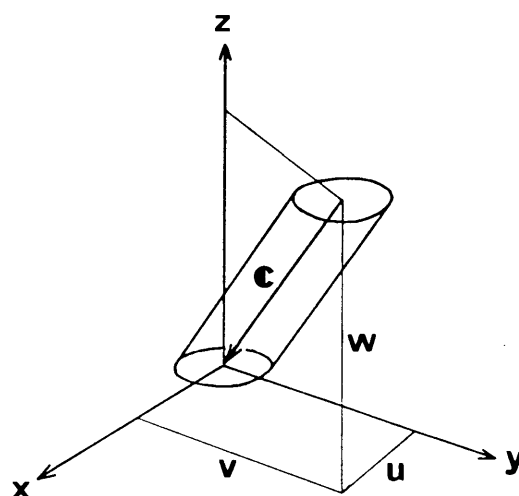


図1 平衡状態において壁面をたたく分子数

$$\begin{aligned} dN &= n w f_0 d\mathbf{c} \\ &= n w \{m/(2kT)\}^{3/2} \exp[-\{m/(2kT)\}(u^2+v^2+w^2)] du dv dw \end{aligned} \quad (2)$$

と表すことができる．ここで， n は分子数密度である．式(2)を，速度成分 u, v については $-\infty$ から ∞ まで積分し，速度成分 w に関しては $-\infty$ から 0 まで積分す

れば，壁面に衝突する分子数 N が式(3)で得られる．

$$N = \int_{-\infty}^0 \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} n w \left\{ m / (2kT) \right\}^{3/2} \exp \left[- \left\{ m / (2kT) \right\} (u^2 + v^2 + w^2) \right] du dv dw$$

$$= (n/4) \sqrt{8kT / (\pi m)} \quad (3)$$

一方，平衡状態における分子の平均速度 \bar{c} ，及び，最大確率速度 c_m は，速度分布関数から式(4)(5)のように計算できる．

$$\bar{c} = \sqrt{8kT / (\pi m)} = \sqrt{8RT / \pi} \quad (4)$$

$$c_m = \sqrt{2kT / m} = 1 / \beta \quad (5)$$

ここで， R はガス定数， β は最大確率速度の逆数である．したがって， N は平均速度を用いて式(6)のように書くこともできる．

$$N = (1/4) n \bar{c} \quad (6)$$

下流圧力 P_o がゼロの場合に，厚みのないオリフィスの自由分子流コンダクタンス F_{fmo} は，式(6)を用いて理論的に計算できる．

$$\begin{aligned} F_{fmo} &= \dot{Q}_{fmo} / (P_s - P_o) \approx \dot{Q}_{fmo} / P_s \\ &= \dot{m}_{fmo} / \rho_s \\ &= (1/4) \bar{c} \cdot A \\ &= (A/4) \sqrt{8RT_s / \pi} \\ &= 3638 A \sqrt{T_s / M} \quad [\text{cm}^3/\text{s}] \end{aligned} \quad (7)$$

ここで， \dot{m} は質量流量， ρ_s は貯気室における気体の密度， A は穴の断面積（単位は cm^2 ）， M は分子量を表し，添字 fmo は厚みなしオリフィスの自由分子流状態を示す．

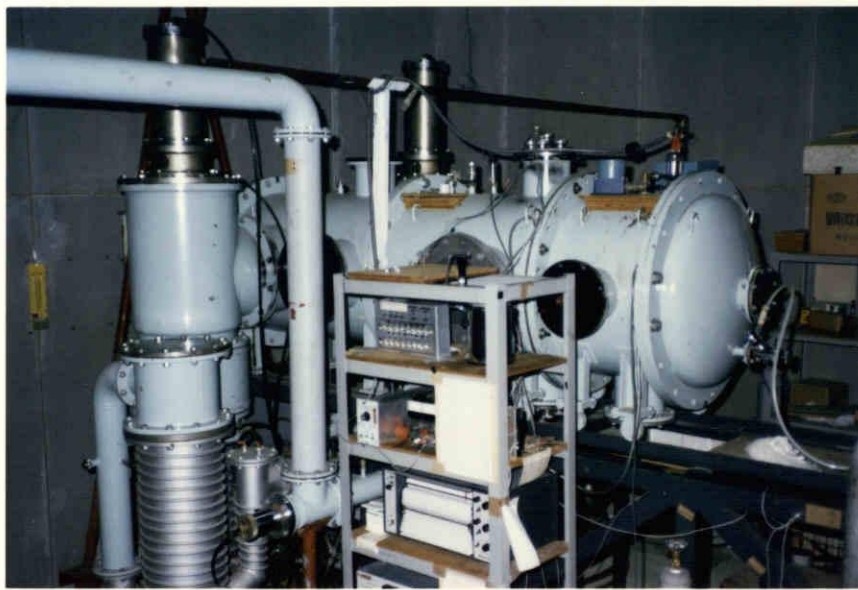
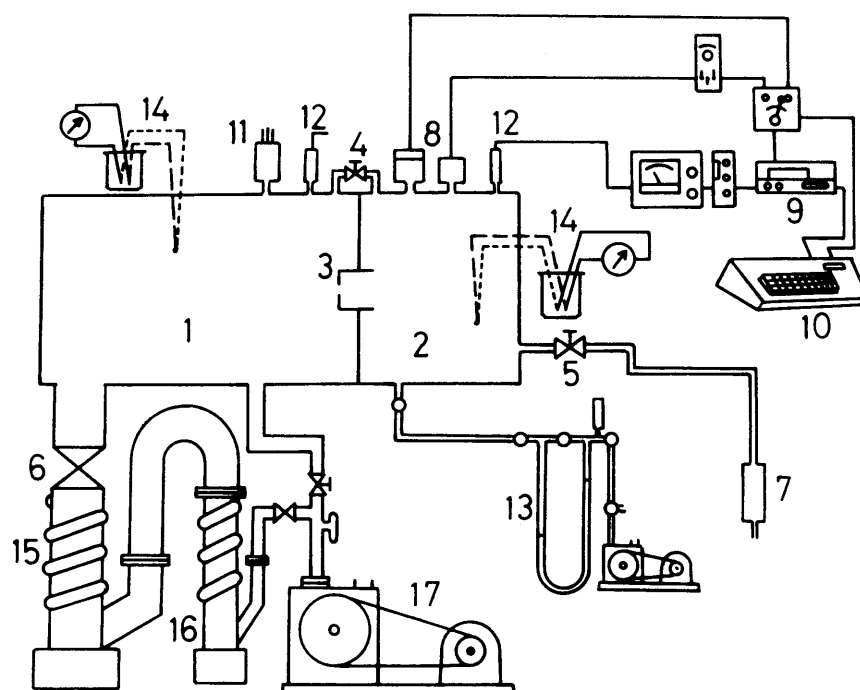


図2.1 実験装置



- | | |
|--------------------------|--------------------------|
| 1. Expansion chamber | 10. Microcomputer |
| 2. Source chamber | 11. Ionization gauge |
| 3. Test aperture | 12. Pirani gauge |
| 4. Bypass-valve | 13. Oil U-tube manometer |
| 5. Leak valve | 14. Thermocouple |
| 6. Main valve | 15. Diffusion pump |
| 7. Drier with silicagel | 16. Booster pump |
| 8. Baratron vacuum gauge | 17. Rotary pump |
| 9. Digital volt meter | |

図2.2 実験装置概要図

表2.1 真空ポンプの諸特性

型式	KRP-6500	DBP-10	DPF-14
回転数	350 r.p.m.	—————	—————
排気速度	0.1 m ³ /s	2.0 m ³ /s	4.3 m ³ /s
到達真空度	0.5 Pa (4×10 ⁻³ mmHg)	8×10 ⁻³ Pa (6×10 ⁻⁵ mmHg)	8×10 ⁻⁵ Pa (6×10 ⁻⁷ mmHg)
電力	11 kW	4.5 kW	3 kW
油量	24 ℓ	4.5 ℓ	3 ℓ
臨界背圧	—————	160 Pa	13 Pa

表2.2 バラトロン隔膜真空計の諸特性

型式	測定範囲	圧力分解能	測定側内部容量	精度	応答時間	温度係数
310BHS-1	$1.33 \times 10^{-3} \sim 133 \text{ Pa}$ ($1 \times 10^{-5} \sim 1.0 \text{ mmHg}$)	$1.33 \times 10^{-4} \text{ Pa}$ ($1.0 \times 10^{-6} \text{ mmHg}$)	2 cm^3	読みの0.08% ±温度係数	40 ms	$7 \times 10^{-4} \text{ Pa/}^\circ\text{C}$ ($5 \times 10^{-6} \text{ mmHg/}^\circ\text{C}$)
220BHS -100	$1.33 \sim 1.33 \times 10^{-4} \text{ Pa}$ ($1 \times 10^{-2} \sim 100 \text{ mmHg}$)	1.33 Pa ($1.0 \times 10^{-2} \text{ mmHg}$)	7.9 cm^3	読みの0.15% ±温度係数	16 ms	$0.7 \text{ Pa/}^\circ\text{C}$ ($5 \times 10^{-3} \text{ mmHg/}^\circ\text{C}$)

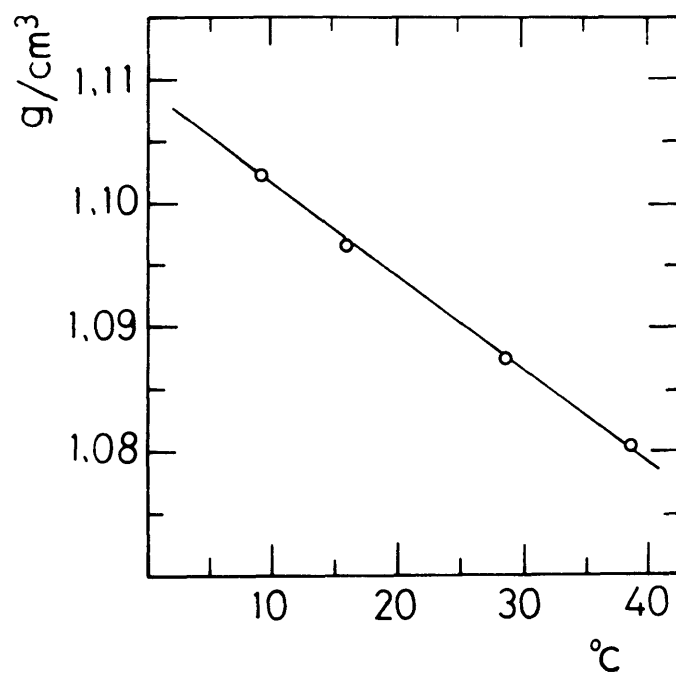


図2.3 シリコンオイルDC-705の密度

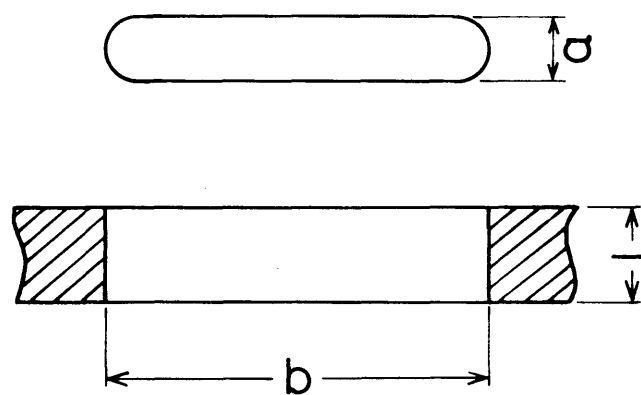


図2.4 細長い断面を持った穴の寸法記号

表 2.3 円形断面を持った管路の形状

直径 d (mm)	長さ (穴板の厚み) ℓ (mm)	ℓ/d
2.02±0.01	0.05±0.005	0.025±0.003
1.03±0.01	0.10±0.005	0.097±0.006
3.00±0.01	0.29±0.01	0.097±0.004
1.49±0.01	0.28±0.01	0.188±0.008
2.01±0.01	0.50±0.01	0.249±0.007
1.02±0.01	0.28±0.01	0.275±0.013
2.52±0.01	1.02±0.01	0.405±0.006
2.00±0.01	0.99±0.01	0.495±0.008
2.51±0.01	2.05±0.01	0.817±0.008
1.52±0.01	1.98±0.01	1.30±0.02
3.01±0.02	3.97±0.02	1.32±0.02
2.55±0.02	3.99±0.02	1.56±0.03
2.53±0.04	8.03±0.02	3.17±0.06
2.51±0.08	16.0±0.05	6.37±0.23
3.03±0.10	38.4±0.1	12.7±0.46
10.1±0.1	128.3±0.1	12.7±0.14

表2.4 細長い断面を持った穴の形状

縦幅 a(mm)	横幅 b(mm)	穴板の厚み l (mm)	面積 $A(\text{mm}^2)$
1.027	2.055	0.499	1.884
1.447	2.941	1.520	3.880
1.020	2.190	2.016	2.011
1.486	4.450	1.520	6.121
1.018	5.008	0.500	4.876
1.022	5.025	1.020	4.874
0.997	5.192	1.978	4.963
1.007	7.003	0.499	6.819
1.003	6.994	1.017	6.727
1.010	7.189	2.014	7.043
1.002	14.19	1.001	14.00
0.995	28.13	1.003	27.78

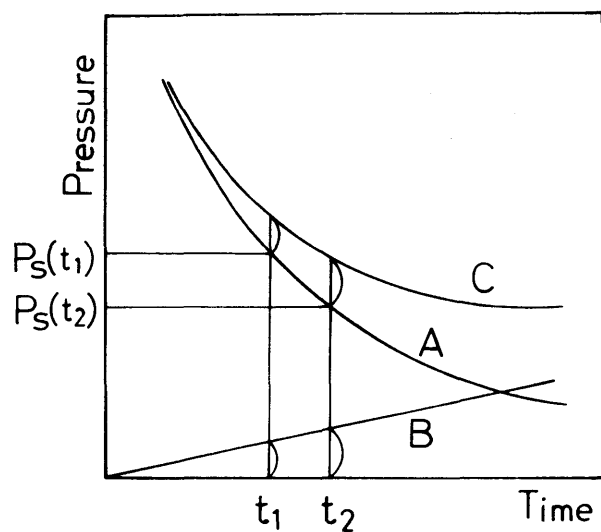


図2.5 貯気室圧力減少に対する壁面からのガス放出効果
 A：気体流出によって生じる貯気室圧力降下
 B：壁面からのガス放出によって生じる圧力上昇
 C：見かけ上の圧力減少曲線

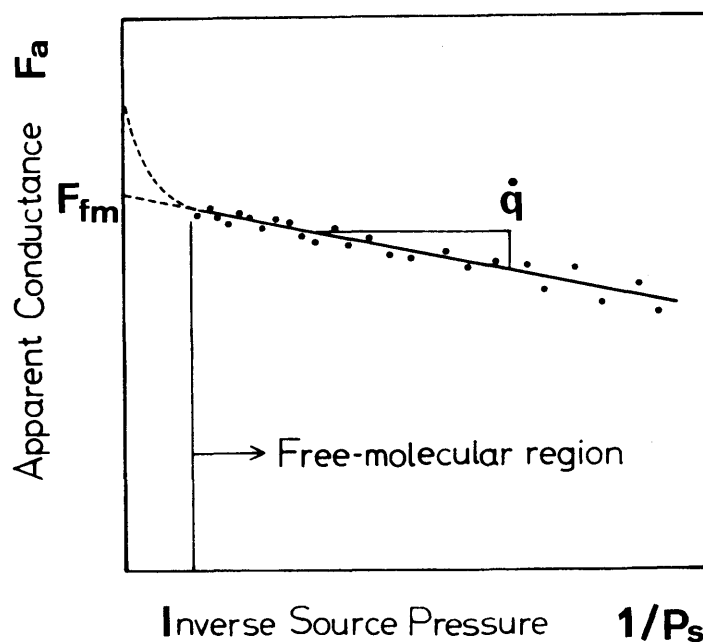


図2.6 壁面からのガス放出量算出
 (貯気室圧力の逆数と見かけ上のコンダクタンスの関係)

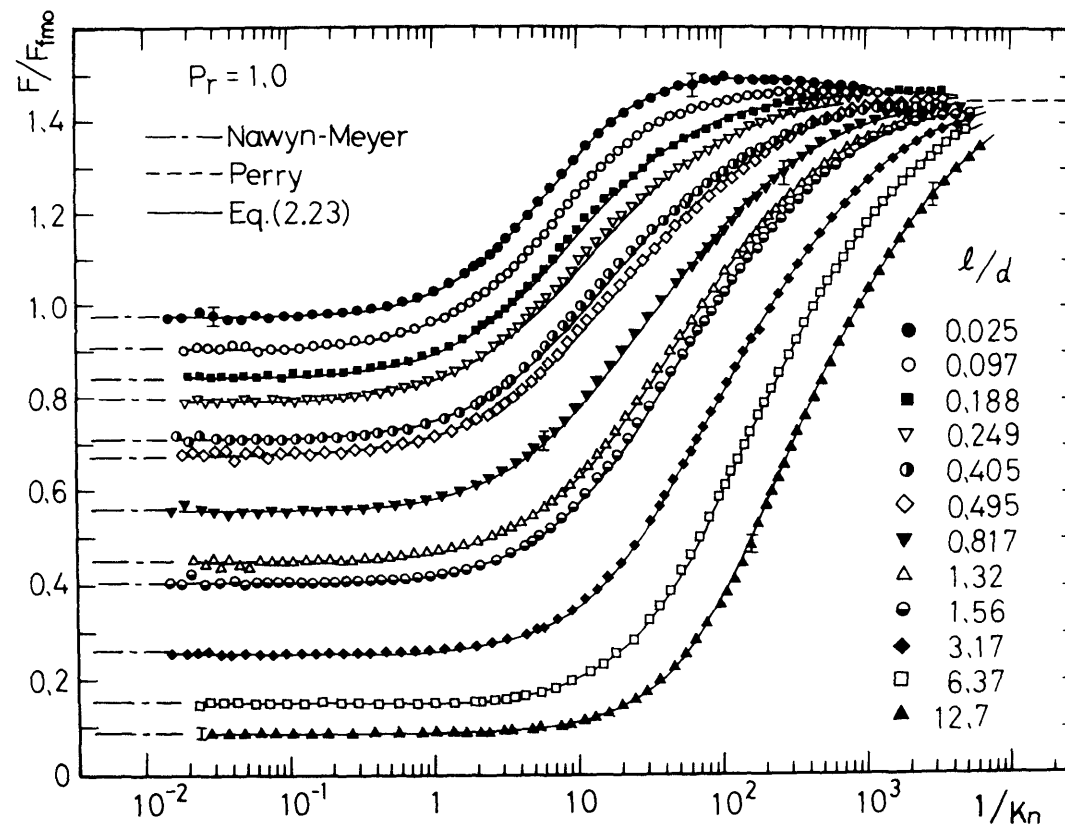


図2.7 オリフィス及び短い円筒管のコンダクタンス
(横軸をクヌッセン数の逆数で表示)

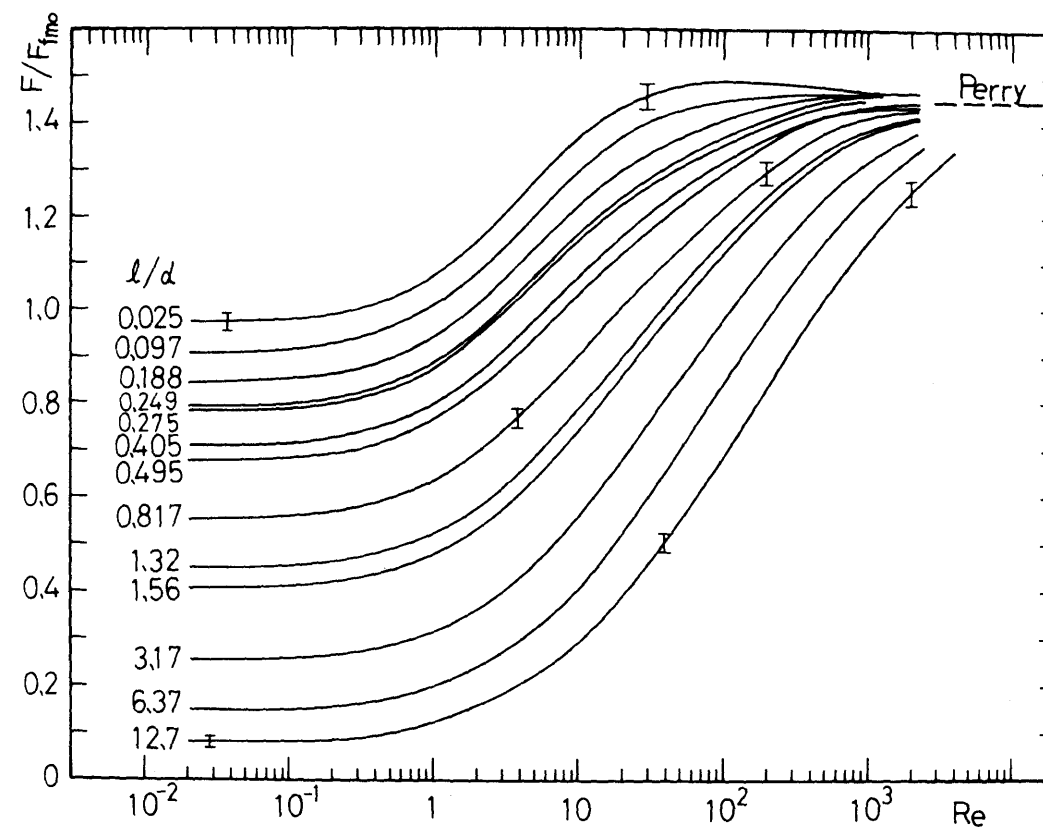


図2.8 オリフィス及び短い円筒管のコンダクタンス
(横軸をレイノルズ数で表示)

表2.5 自由分子流状態の円筒管コンダクタンスの理論計算値

l / d	Nawyn-Meyer の値	Clausing の値
0.005	0.99514	0.99502
0.01	0.99027	0.99010
0.015	0.98541	0.98522
0.02	0.98057	0.98039
0.025	0.97576	0.97561
0.03	0.97100	0.97088
0.035	0.96627	0.96619
0.04	0.96160	0.96155
0.045	0.95697	0.95695
0.05	0.95240	0.95240
0.10	0.90922	0.90922
0.15	0.86993	0.86993
0.20	0.83405	0.83408
0.25	0.80127	0.80127
0.30	0.77115	0.77114
0.35	0.74341	0.74338
0.40	0.71779	0.71773
0.45	0.69404	0.69395
0.50	0.67190	0.67185
1.00	0.51423	0.51364
1.50	0.42006	0.42045
2.00	0.35657	0.35890
2.50	0.31053	0.31458
3.00	0.27544	0.28068
3.50	0.24774	0.25368
4.00	0.22526	0.23155
4.50	0.20664	0.21303
5.00	0.19094	0.19729
10.00	0.10932	0.11352
15.00	0.07694	0.07966
20.00	0.05945	0.06135

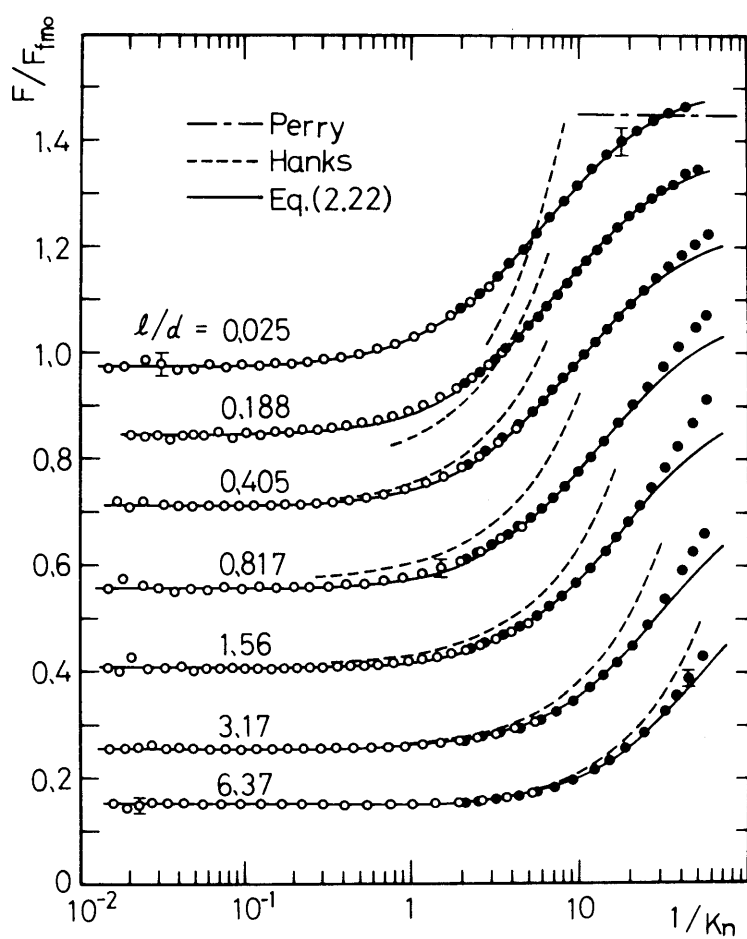


図2.9 オリフィス及び短い円筒管のコンダクタンス
(一つ穴と複数穴のデータの比較)

表2.6 実験式(2.23)における係数 a , b , c

F_{fm}/F_{fmo}	a	b	c
0.05	0.188	3.245	0.527
0.1	0.287	3.060	0.573
0.15	0.379	2.894	0.596
0.2	0.476	2.760	0.607
0.25	0.573	2.635	0.615
0.3	0.686	2.505	0.622
0.35	0.805	2.385	0.628
0.4	0.935	2.276	0.634
0.45	1.067	2.165	0.639
0.5	1.220	2.059	0.642
0.55	1.399	1.950	0.645
0.6	1.570	1.838	0.650
0.65	1.751	1.730	0.661
0.7	1.935	1.621	0.683
0.75	2.150	1.510	0.713
0.8	2.178	1.400	0.754
0.85	2.058	1.291	0.839
0.9	1.745	1.175	0.934
0.95	1.291	1.057	0.983
1.0	0.700	0.932	1.013

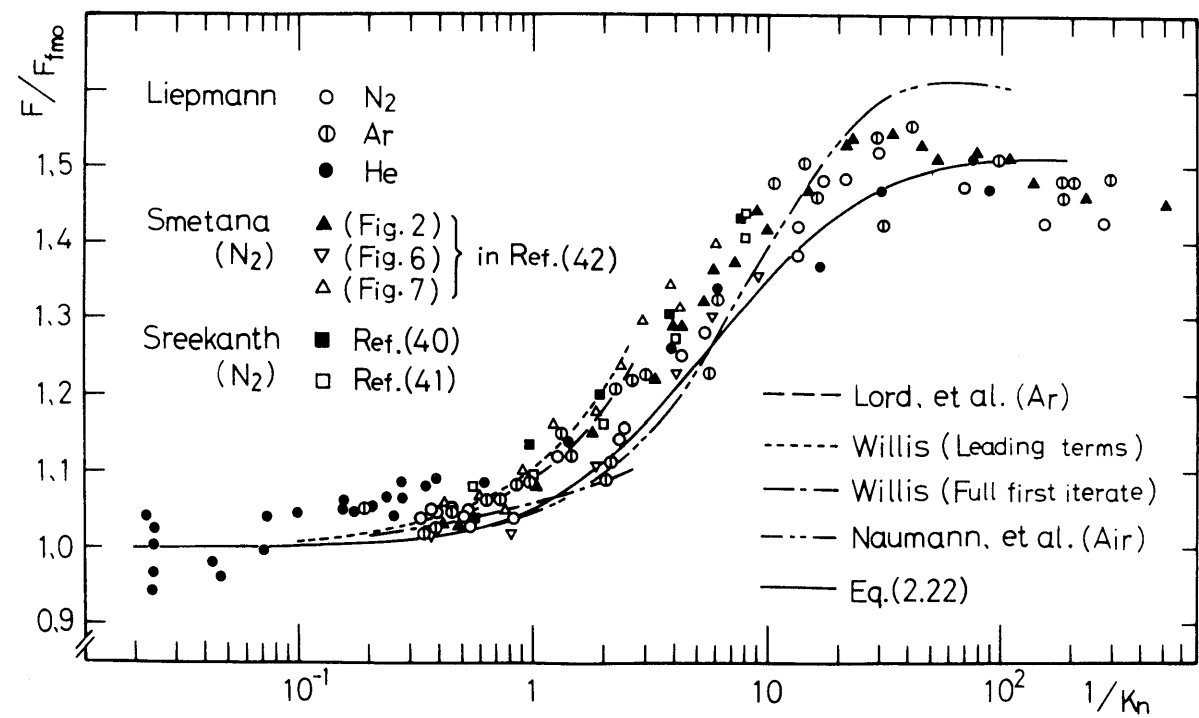


図2.10 オリフィスコンダクタンスに関する他の実験値と実験式(2.22)との比較

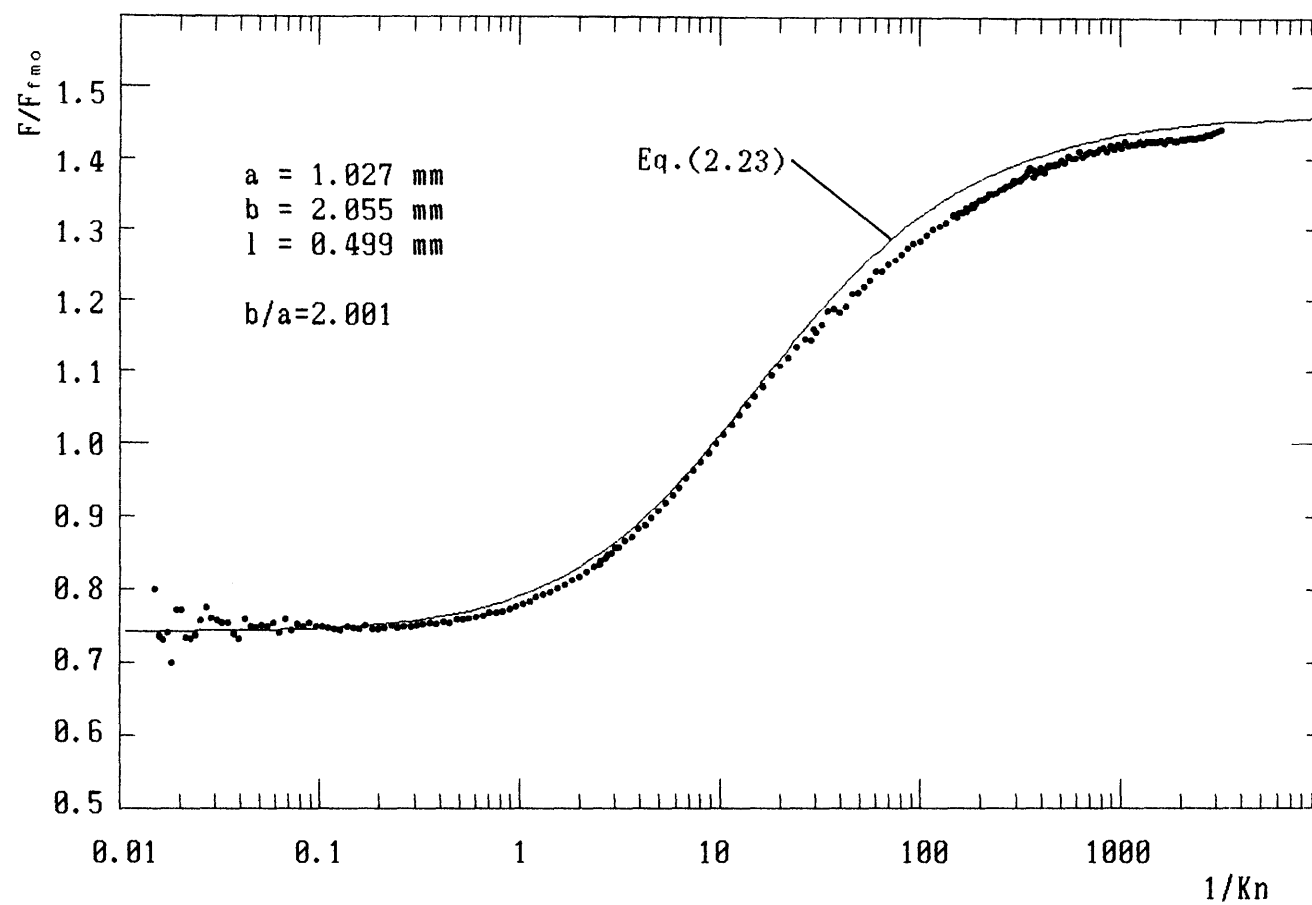


図2.11 細長い断面形状を持つ穴のコンダクタンス
($a=1.027\text{mm}$, $b=2.055\text{mm}$, $l=0.499\text{mm}$)

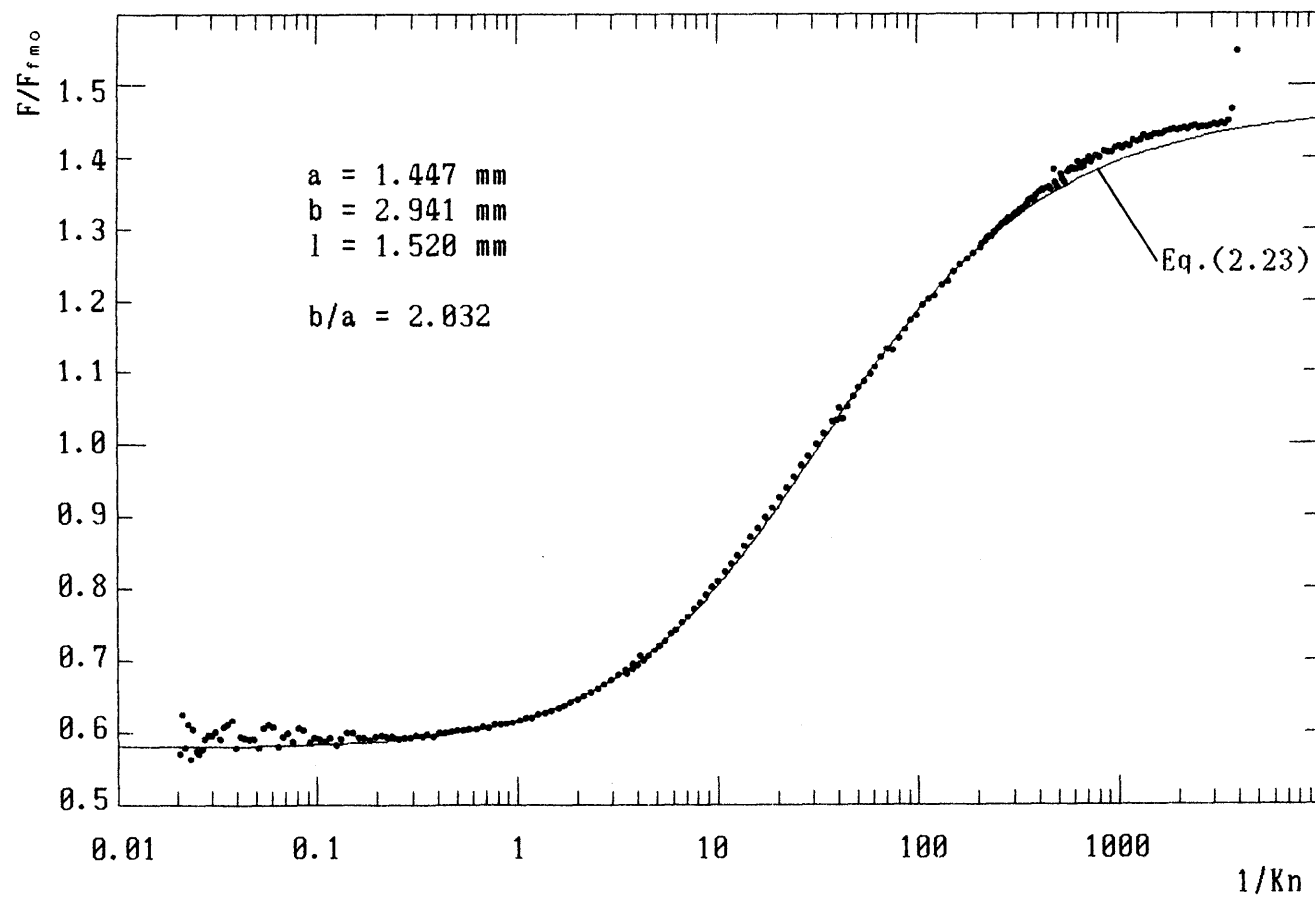


図2.12 細長い断面形状を持つ穴のコンダクタンス
($a=1.447\text{mm}$, $b=2.941\text{mm}$, $l=1.520\text{mm}$)

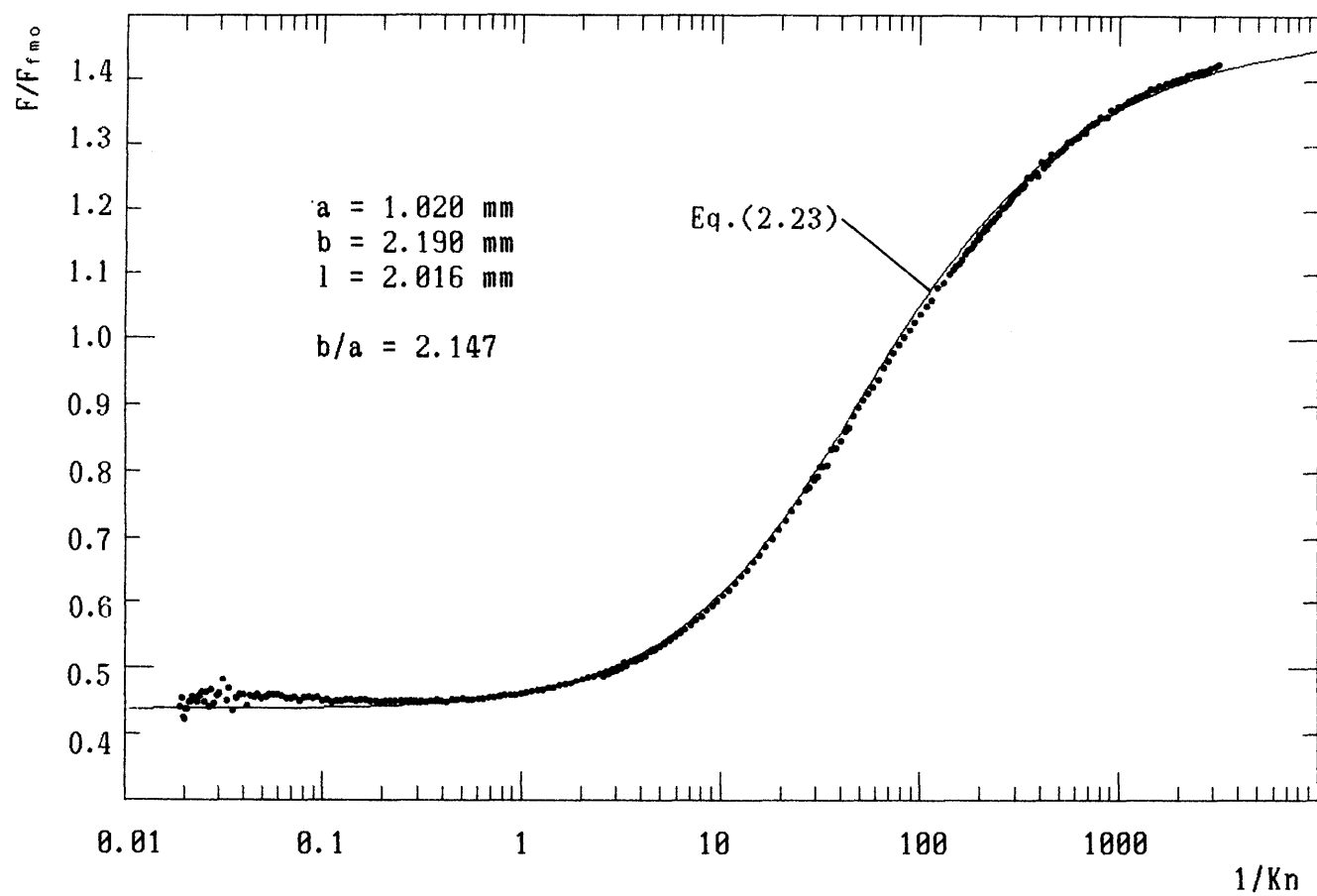


図2.13 細長い断面形状を持つ穴のコンダクタンス
($a=1.020\text{mm}$, $b=2.190\text{mm}$, $l=2.016\text{mm}$)

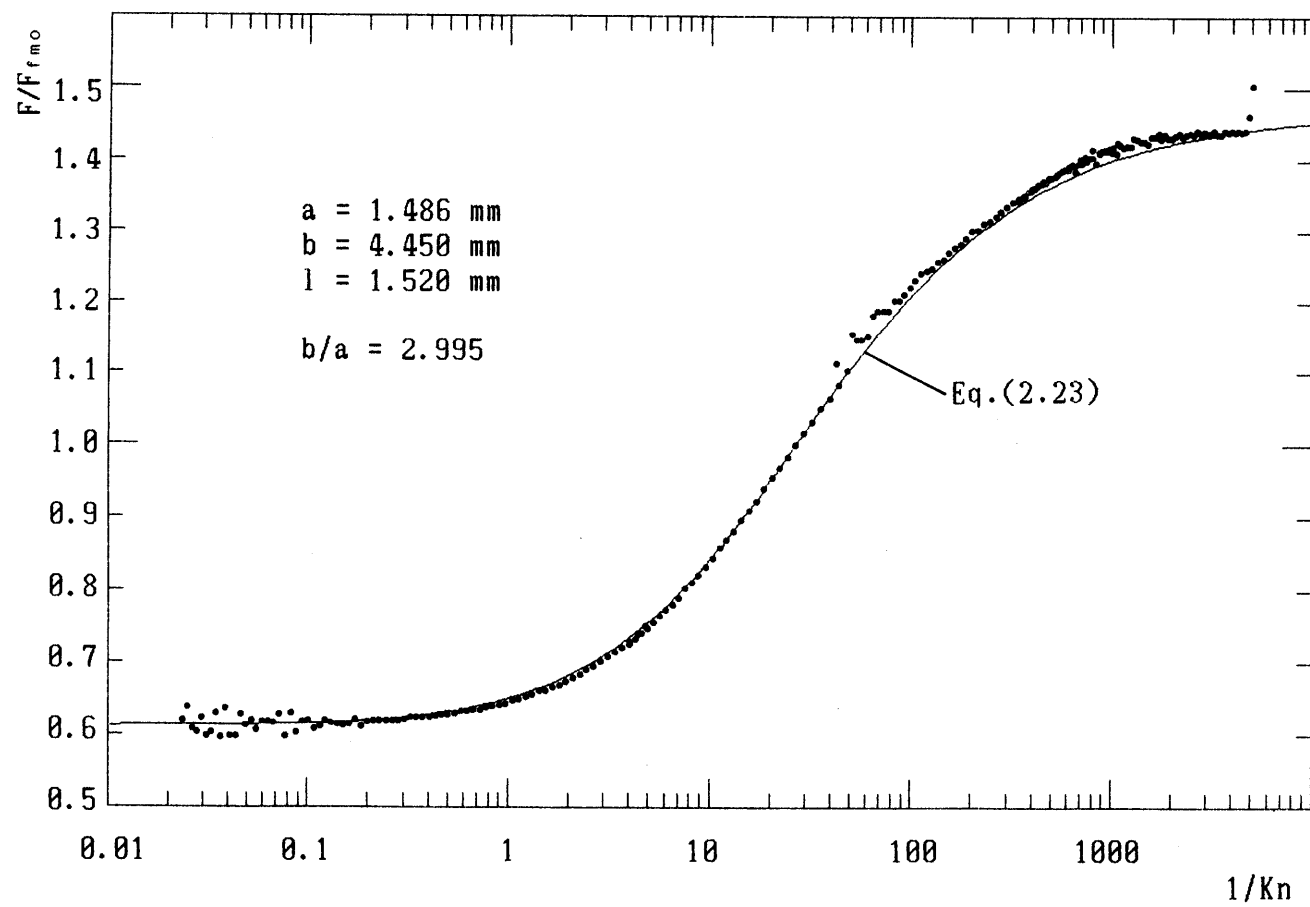


図2.14 細長い断面形状を持つ穴のコンダクタンス
($a=1.486\text{mm}$, $b=4.450\text{mm}$, $l=1.520\text{mm}$)

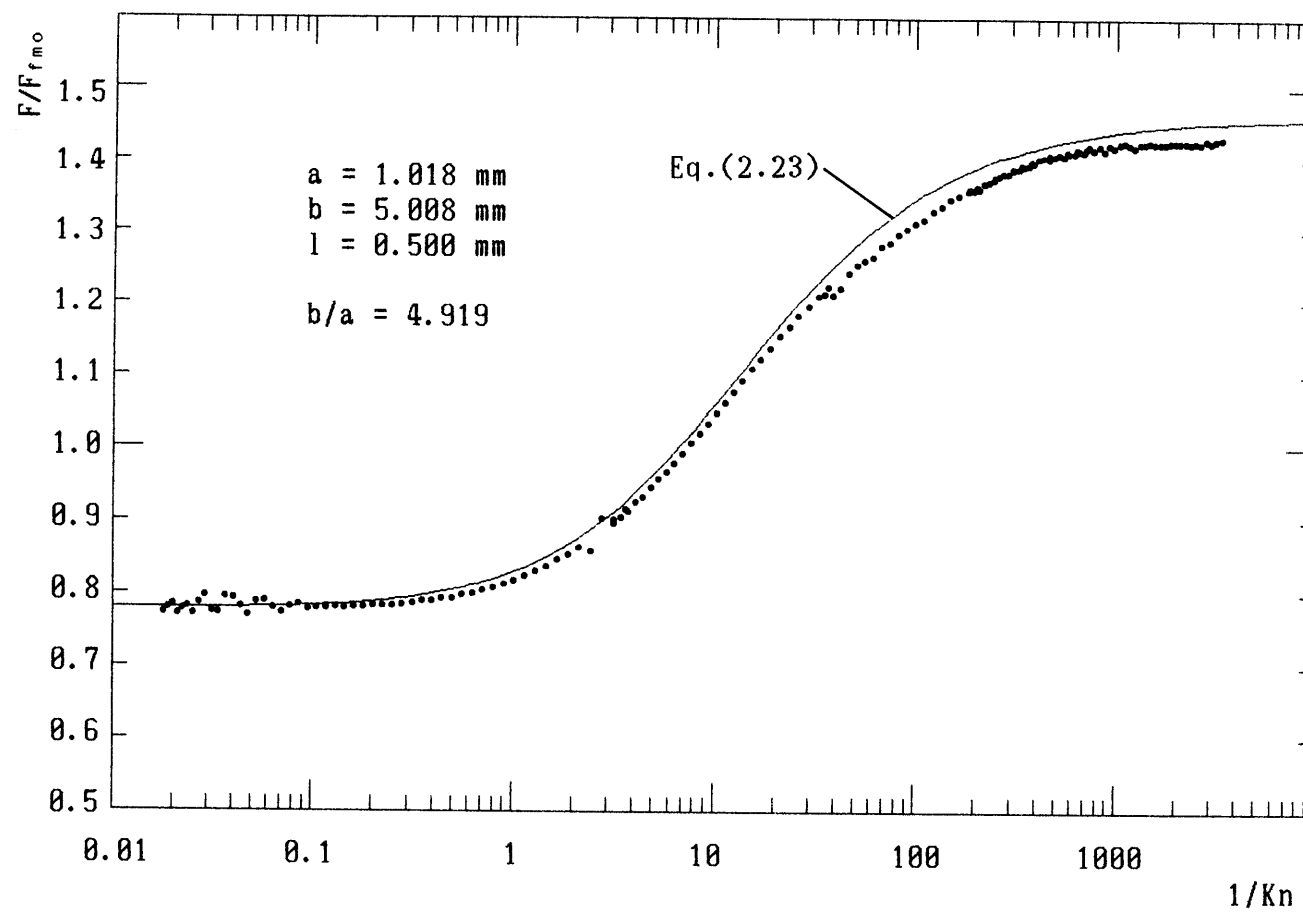


図2.15 細長い断面形状を持つ穴のコンダクタンス
($a=1.018\text{mm}$, $b=5.008\text{mm}$, $l=0.500\text{mm}$)

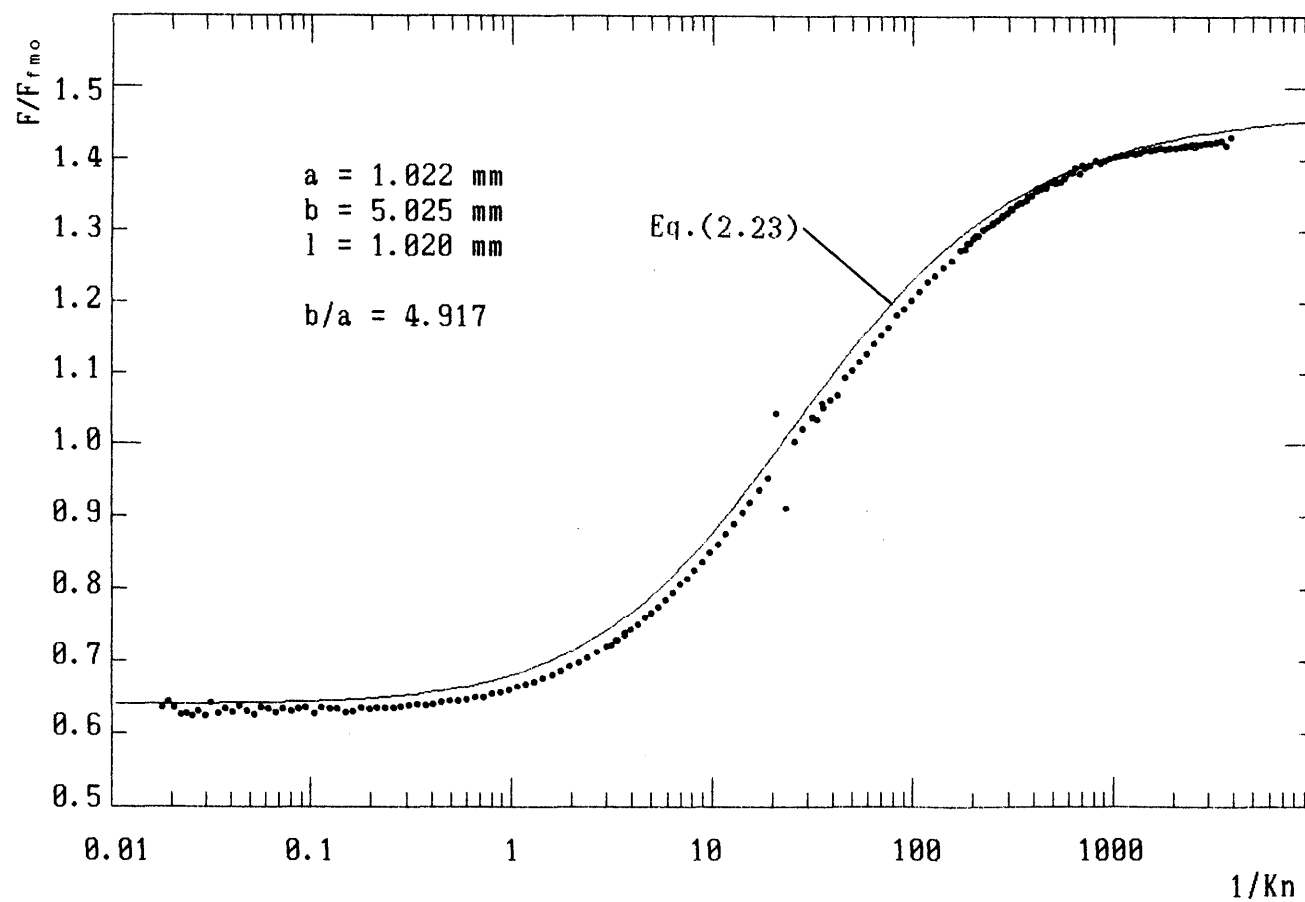


図2.16 細長い断面形状を持つ穴のコンダクタンス
($a=1.022\text{mm}$, $b=5.025\text{mm}$, $l=1.020\text{mm}$)

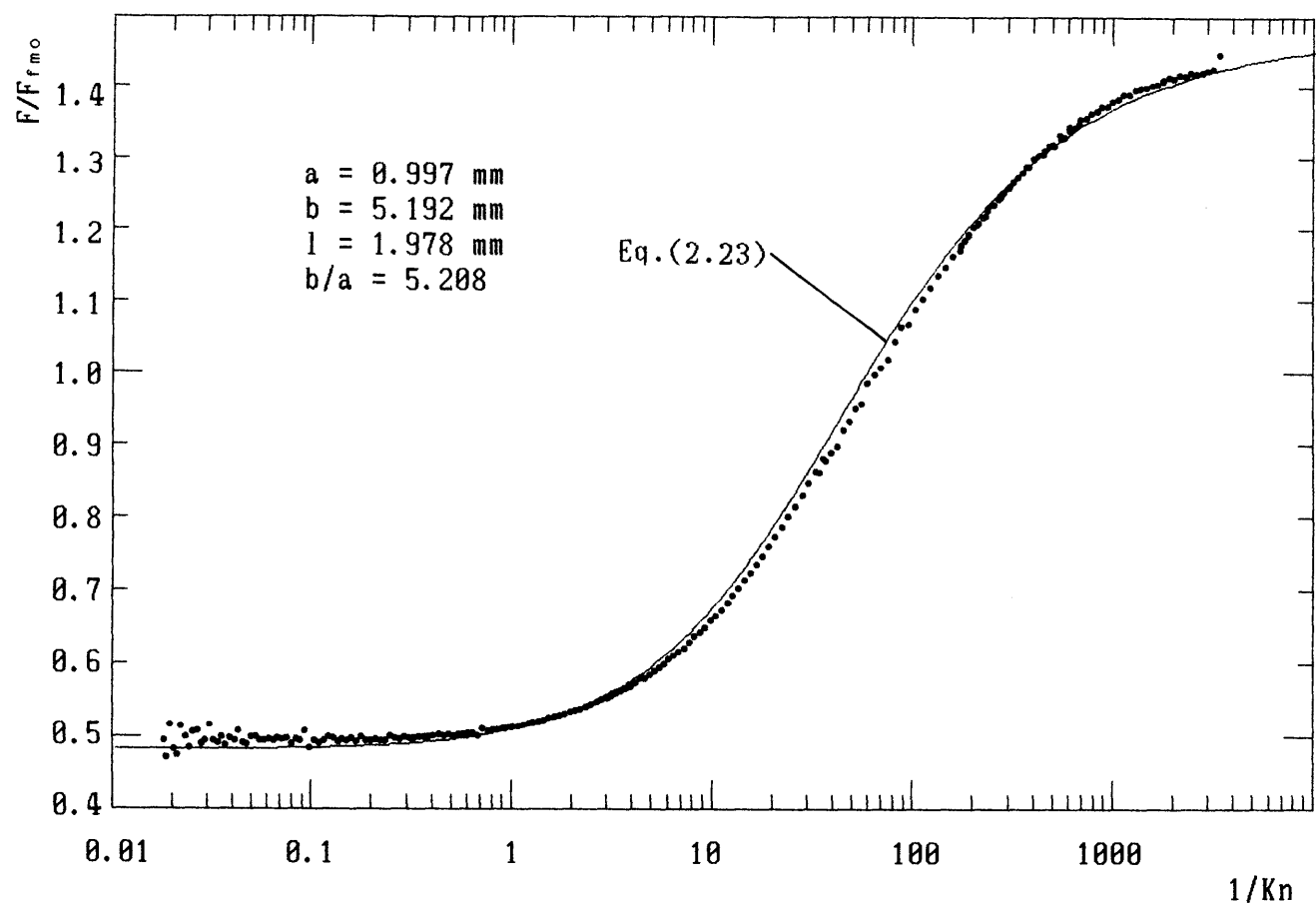


図2.17 細長い断面形状を持つ穴のコンダクタンス
($a=0.997\text{mm}$, $b=5.192\text{mm}$, $l=1.978\text{mm}$)

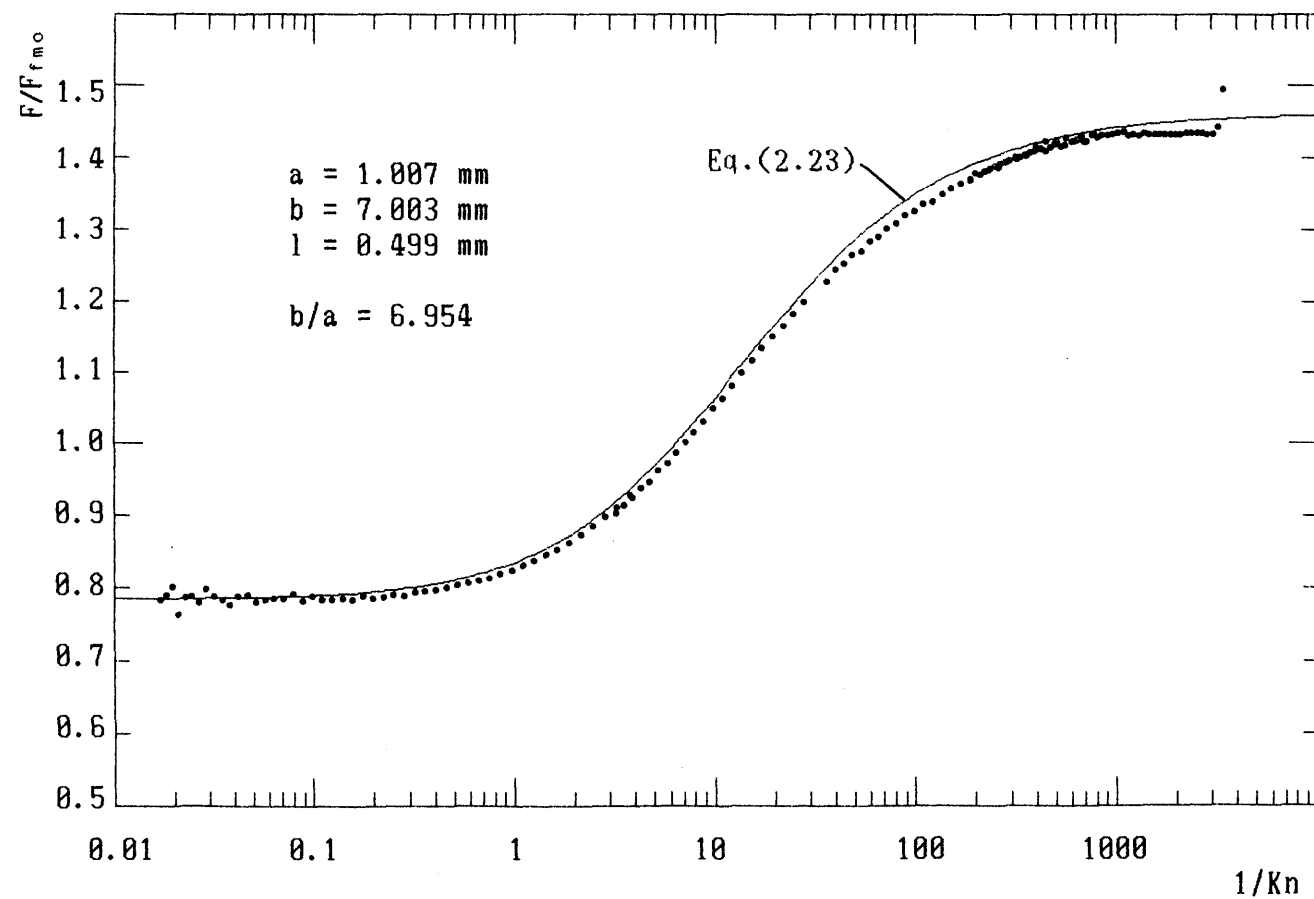


図2.18 細長い断面形状を持つ穴のコンダクタンス
 ($a=1.007\text{mm}$, $b=7.003\text{mm}$, $l=0.499\text{mm}$)

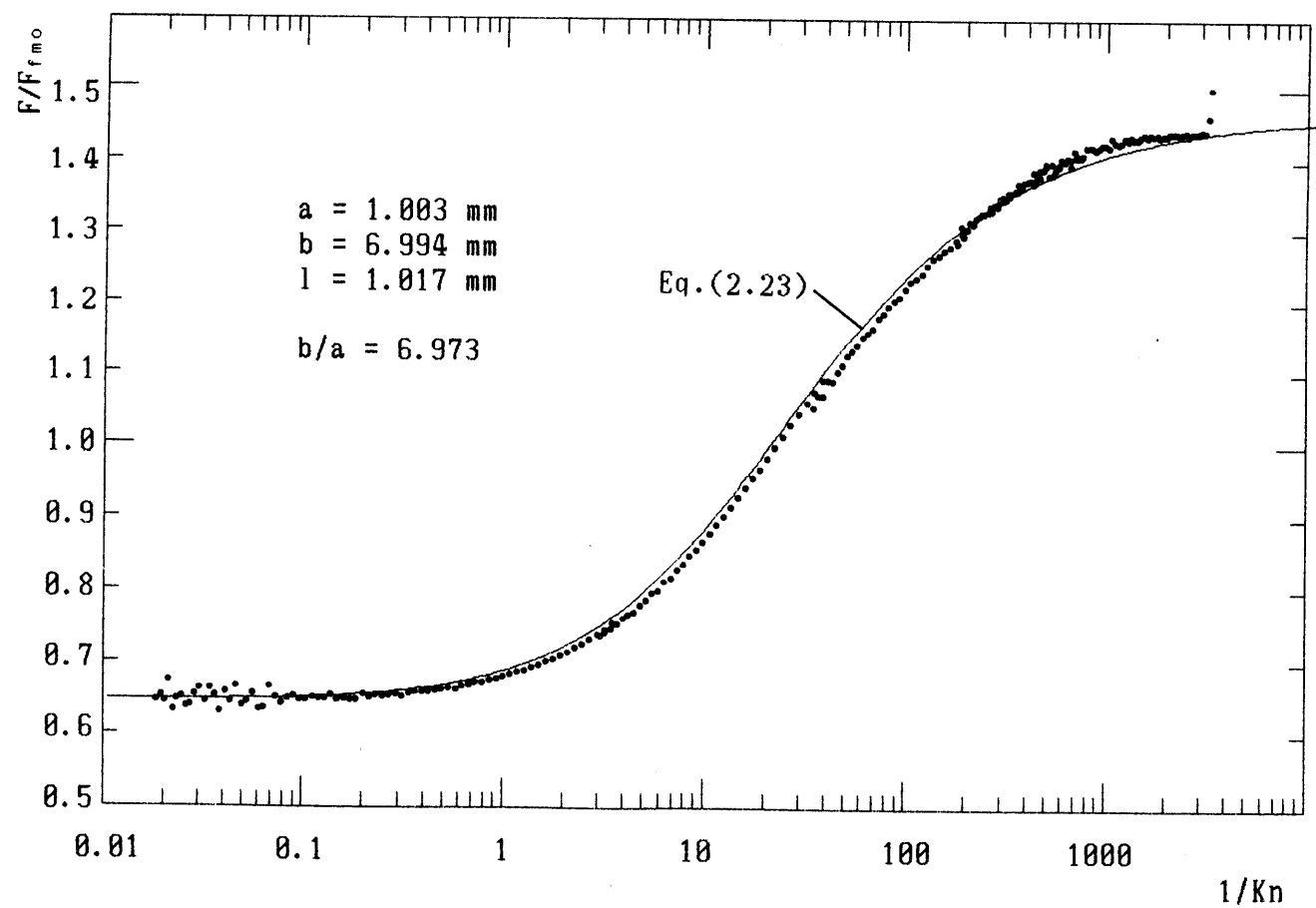


図2.19 細長い断面形状を持つ穴のコンダクタンス
($a=1.003\text{mm}$, $b=6.994\text{mm}$, $l=1.017\text{mm}$)

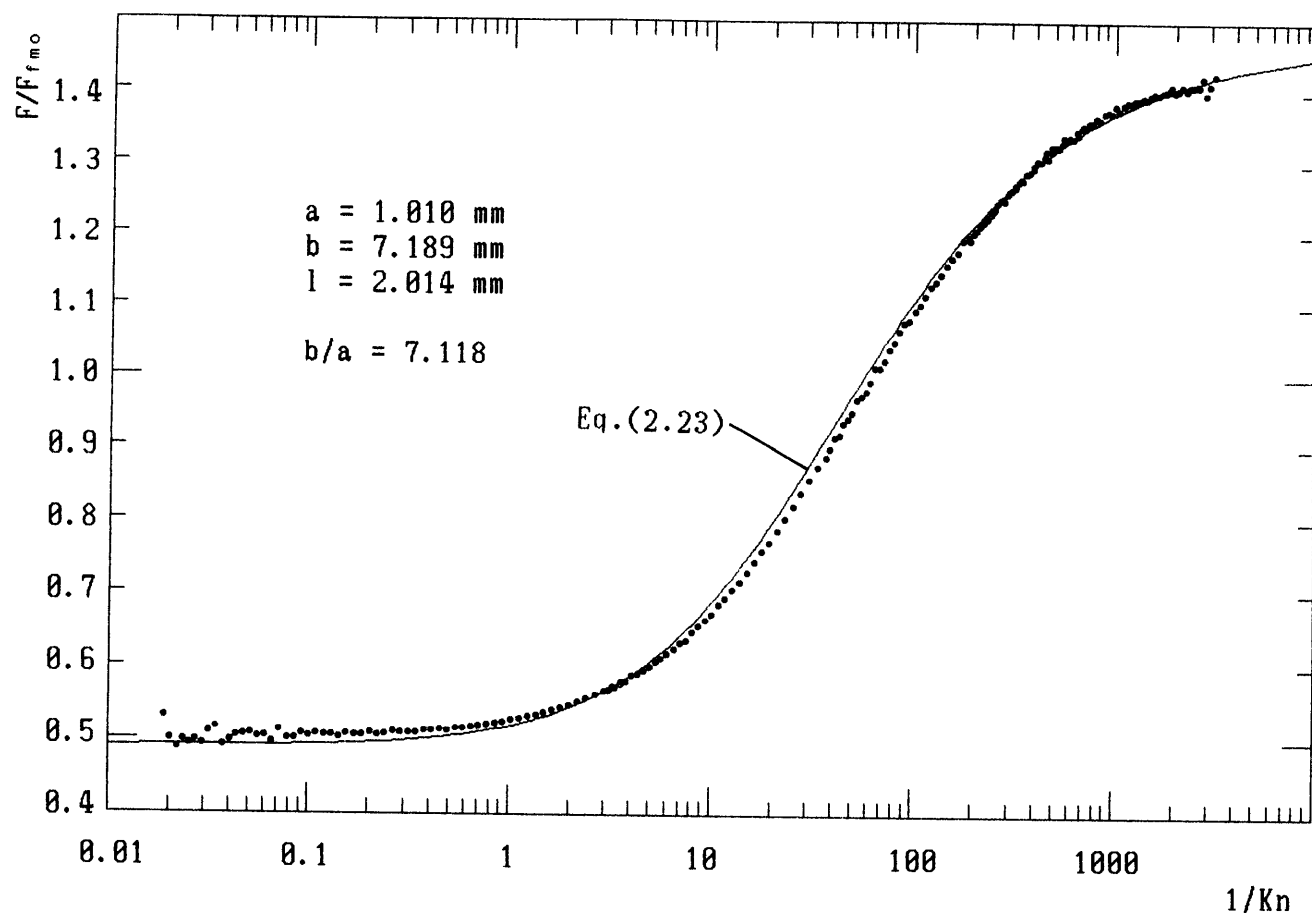


図2.20 細長い断面形状を持つ穴のコンダクタンス
($a=1.010\text{mm}$, $b=7.189\text{mm}$, $l=2.014\text{mm}$)

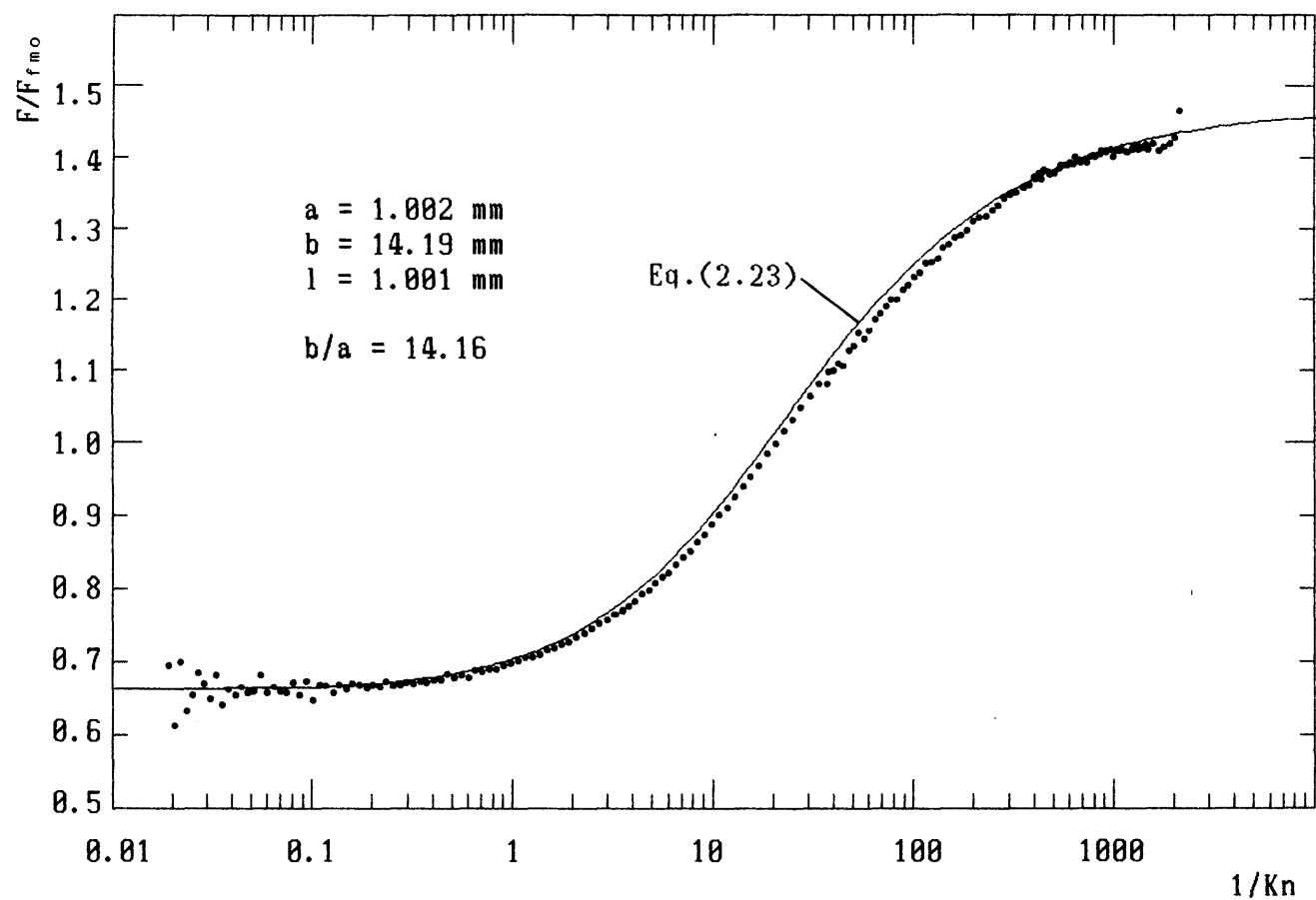


図2.21 細長い断面形状を持つ穴のコンダクタンス
($a=1.002\text{mm}$, $b=14.19\text{mm}$, $l=1.001\text{mm}$)

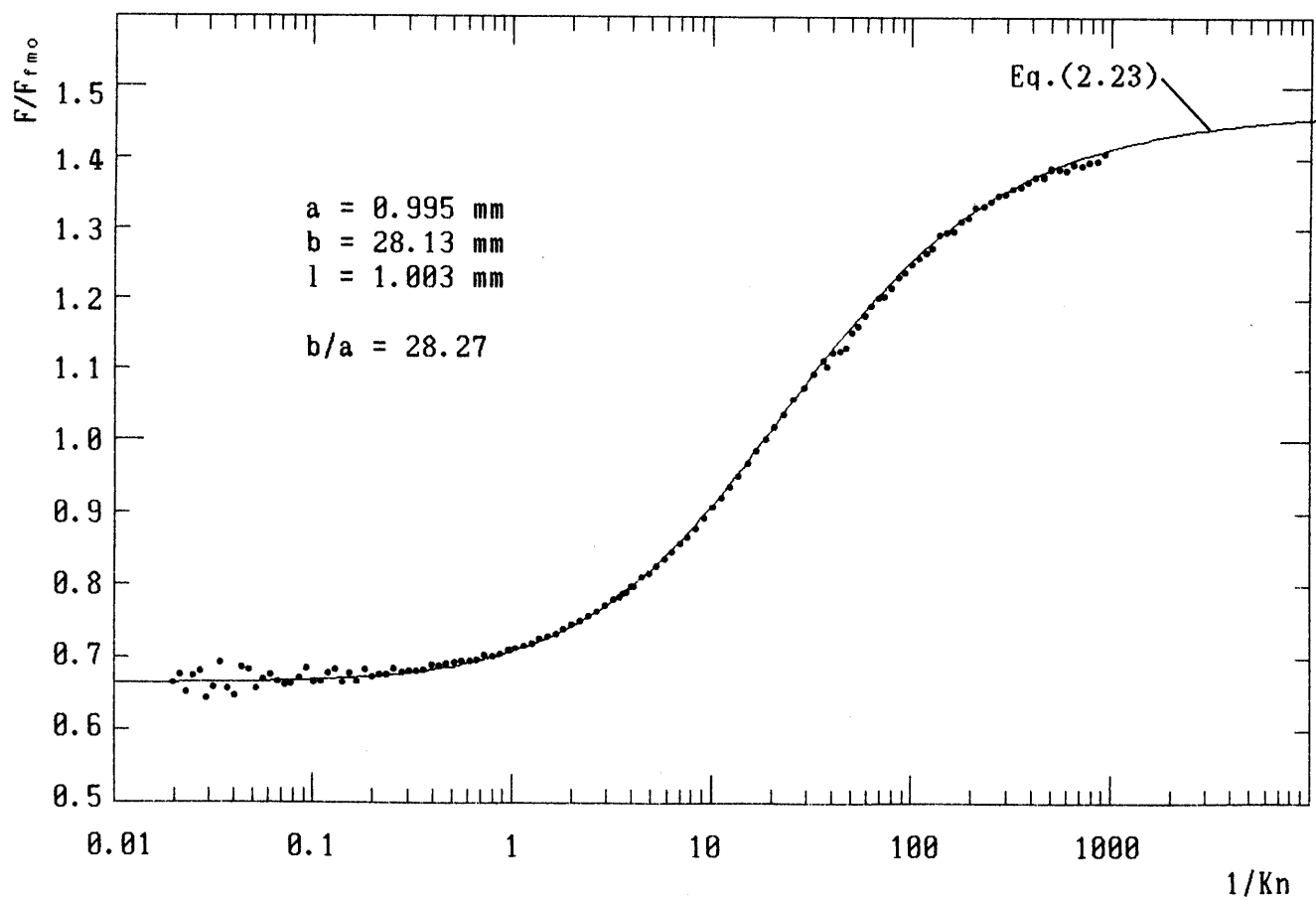


図2.22 細長い断面形状を持つ穴のコンダクタンス
($a=0.995\text{mm}$, $b=28.13\text{mm}$, $l=1.003\text{mm}$)

第3章 オリフィス及び短い管路を通る希薄気体の流れ⁽⁶⁸⁾

(穴の下流側圧力が上流側圧力に対して無視できない場合)

3.1 緒言

オリフィス及び短い管路を通る希薄気体の質量流に関する研究は，薄膜製造における蒸気圧力制御あるいは微量の気体導入等の技術に欠くことのできないものである．管路を通る希薄気体流に関する研究は古くから行われているが，管路長さが管直径と同程度以下の短い管路に関して，上流の圧力及び上・下流の圧力比によって質量流量がどのように変化するかを広範囲の条件について実験した報告は見当たらない．Naumannら⁽⁴⁴⁾は厚みのないオリフィスについて圧力比を変化させ実験を行ったが，厚みを持つような短い管路については実験していない．このように，この種の実験報告が少ないのは，上流及び下流の圧力を同時に安定に保つことの困難さと微量流量の測定の困難さに原因するものであろう．第2章においては，穴の上流と下流の間で大きな圧力比を持つ場合すなわち下流圧力が上流圧力に比べて無視できる場合のコンダクタンスを実験により明らかにしたが，本章では，下流側圧力が高くなって無視できなくなった状態，すなわち，圧力比 $P_r = (P_s - P_o)/P_o$ が， $0.5 < P_r < 1.0$ の範囲における管路のコンダクタンスを実験により求めた．実験は非定常測定法により行った．外部に対して閉じられた貯気室（上流）と膨張室（下流）において，上流から下流へ気体を流出させ，上流側の圧力減少と下流側の圧力上昇とから，圧力比の異なる条件での質量流を測定するものである．この方法は，上流・下流の圧力を一定に保つ必要がないので精度の高い結果を容易に得ることができる．

3.2 実験方法

実験は，第2章で用いたのと同じ実験装置を使用して行った．まず，真空槽内を十分排気したのち，貯気室（上流）と膨張室（下流）をつないでいるバイパス管路を閉じ，リーク弁を通して貯気室へ試験気体を送り込む．貯気室内が所定の

圧力に達したところでリーク弁を閉じ，それと同時に，膨張室と排気系（三種類の真空ポンプで構成）とを結ぶ管路を閉鎖する．貯気室と膨張室は，外部に対して閉じられているので，穴を通して上流から下流へ気体が流れることにより，上流側の圧力減少と下流側の圧力上昇が同時に起こされる．同じ測定範囲のバラトロン真空計は一つしかないので，測定は上流側の圧力減少だけについて行う．適当数のデータが得られたら，バイパス管路を開いて上流・下流両室の圧力を等しくし，そのときの平衡圧力 P_0 を読み取る．任意の時刻における下流側の圧力は，その時の上流側圧力と，膨張室容積 V_0 と貯気室容積 V_s の比 $V_0/V_s=4.435$ から次式で計算できる．

$$\begin{aligned} P_0 &= \{P_s(1+V_0/V_s) - P_s\} / (V_0/V_s) \\ &= (P_s \times 5.435 - P_s) / 4.435 \end{aligned} \quad (3.1)$$

いま，時刻 t_1 における上流・下流の圧力 $P_s(t_1), P_0(t_1)$ が，時刻 t_2 でそれぞれ $P_s(t_2), P_0(t_2)$ に変化したとすれば， $\Delta t = t_2 - t_1$ が十分小さいとき 式(2.5)からコンダクタンスは近似的に次のように書ける．

$$\begin{aligned} F &= -V_s [\{P_s(t_2) - P_s(t_1)\} / \Delta t] \\ &\quad / [\{P_s(t_1) + P_s(t_2)\} / 2 - \{P_0(t_1) + P_0(t_2)\} / 2] \end{aligned} \quad (3.2)$$

ただし，このコンダクタンスは貯気室圧力 $P_s(t_1)$ と $P_s(t_2)$ との平均圧力における値であるとみなす．

本実験の目的は，上流側の圧力と上・下流の圧力比によってコンダクタンスがどのように変化するかを調べることにあるが，最初に与えた貯気室圧力から始まる上流側圧力減少と下流側圧力増加のために，得られる一連のデータは圧力比の刻々変化したものである．したがって，一定の圧力比をパラメータにして結果を整理するためには，最初に与える貯気室圧力をいくつも変化させて実験を繰り返す必要がある．

表3.1 に，実験に用いたオリフィス及び短い管路の形状を示す．試験気体には，シリカゲルの乾燥筒を通過させた乾燥空気を用いた．

3.3 結果及び考察

図3.1～3.3 は，圧力比 P_r をパラメータとして実験結果を整理し，横軸を上流側圧力の平均自由行程に基づくクヌッセン数の逆数 $1/Kn$ で，縦軸を無次元コンダクタンス F/F_{rmo} で表示したものである．また，図3.4～3.7 は，縦軸を流出係数 C_D (Discharge coefficient) で表したものである．ここで，流出係数 C_D とは，質量流量 \dot{m} を，理想ノズルを通して断熱膨張する気体の最大流量 \dot{m}_{max} によって無次元化したものである．

$$C_D = \dot{m} / \dot{m}_{max} \quad (3.3)$$

$$\dot{m}_{max} = \frac{A_0 P_s}{\sqrt{RT_s}} \sqrt{\gamma \left(\frac{2}{\gamma+1} \right)^{\frac{\gamma+1}{\gamma-1}}}$$

ここで， γ は比熱比を表し，空気の場合 $\gamma=1.4$ である．

穴の長さ と 直径の比 $l/d=1.3$ の場合 (図3.4) には， $1/Kn$ が増加するにつれて，圧力比 P_r の相違による流出係数 C_D の違いは急激に少なくなり， $1/Kn=1000$ においては， $P_r=0.6 \sim 1.0$ の間の値に差はほとんど見られない．また， $P_r=0.5$ と 0.55 についても，さらに $1/Kn$ が増加すれば $P_r=1.0$ のものと一致する傾向にある．一方， $l/d=0.097$ の場合 (図3.6) は， $1/Kn$ が増加しても，圧力比の相違による流出係数の違いはそれほど少なくならず，特に $P_r=0.5 \sim 0.6$ の場合には，さらに $1/Kn$ が増加しても， $P_r=1.0$ における値とは差異を維持したまま連続流領域で一定値に到達する傾向が見られる．また， $l/d=0.025$ の場合 (図3.7) には，それぞれの圧力比における流出係数 C_D を $1/Kn$ の大きい方へ延長すると， $Re > 10^5$ の連続流状態で得られた Perry⁽³⁵⁾ の半実験式の値にほぼ一致する傾向が見られる．理想的な先細ノズルを通して等エントロピ膨張する気体は，下流側圧力が臨界圧 (空気の場合 $P_0/P_s=0.53$) 以下で流量が一定に保たれる．圧力比の影響に関する限り， $l/d=1.3$ の連続流領域の傾向はそれに類似したものと考えられる．なお，オリフィス

の流量が圧力比によって変化することに関して、Perryは、オリフィスを通過する噴流の最小断面積が下流側圧力によって変化するためであると論じているが、これを実証するためには噴流構造の詳細な解析を行う必要がある。

3. 4 結 論

[1] 圧力比 $P_r = (P_s - P_e)/P_s = 0.5 \sim 1.0$ において、短い円筒孔を通過する希薄気体流のコンダクタンス及び流出係数を実験により求め、 $1 < l/Kn < 1000$ の領域でなめらかに変化する結果を得た。

[2] $l/d=1.3$ の円筒孔を通る連続流に近い流れでは、 $P_r \geq 0.6$ において、圧力比の相違による流出係数 C_D の違いはほとんど見られない。

[3] l/d が小さい円筒孔ほど、連続流領域においても圧力比の影響が大きく現われ、特に $l/d=0.025$ の場合、それぞれの圧力比における流出係数は、連続流の極限でPerryの値に近づく傾向にある。

表3.1 円形断面を持った短い管路の形状

直径 $d(\text{mm})$	長さ(穴板の厚み) $l(\text{mm})$	l/d
2.02 ± 0.01	0.05 ± 0.005	0.025 ± 0.003
1.03 ± 0.01	0.10 ± 0.005	0.097 ± 0.006
3.00 ± 0.01	0.29 ± 0.01	0.097 ± 0.004
2.00 ± 0.01	0.99 ± 0.01	0.495 ± 0.008
1.52 ± 0.01	1.98 ± 0.01	1.30 ± 0.02
3.01 ± 0.02	3.97 ± 0.02	1.32 ± 0.02

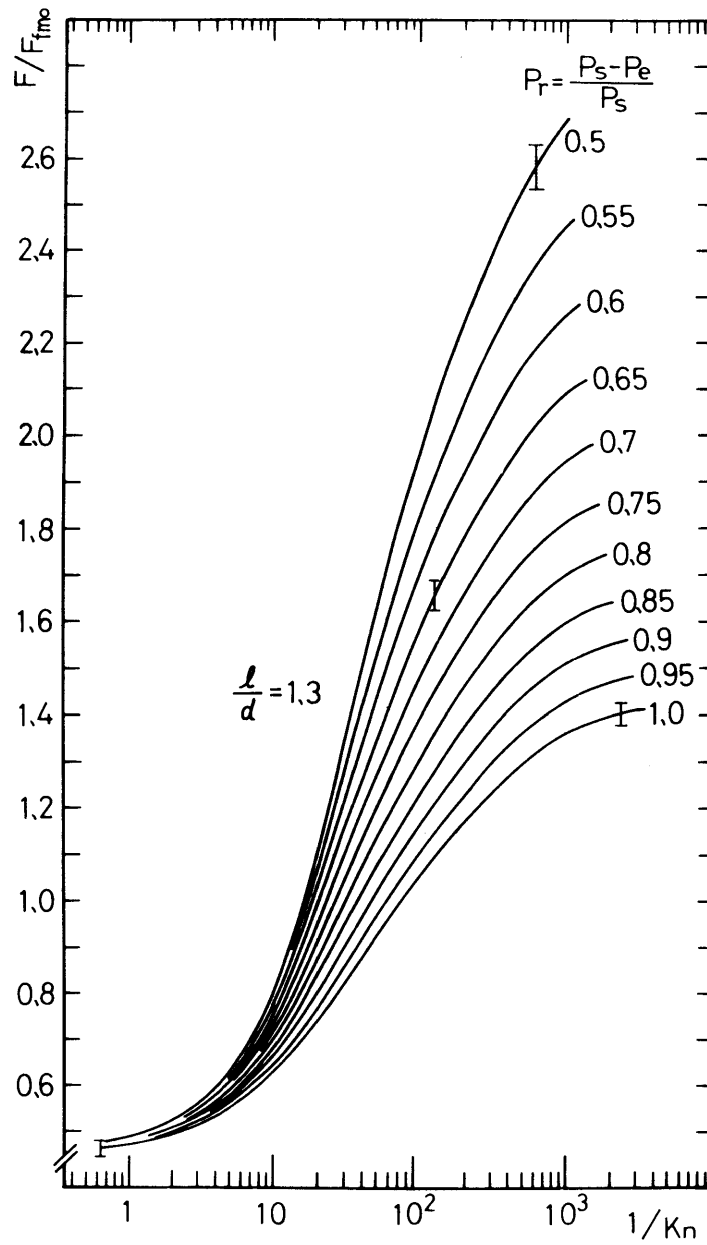


図3.1 下流側圧力を無視できない場合の短い円筒管のコンダクタンス ($l/d=1.3$)

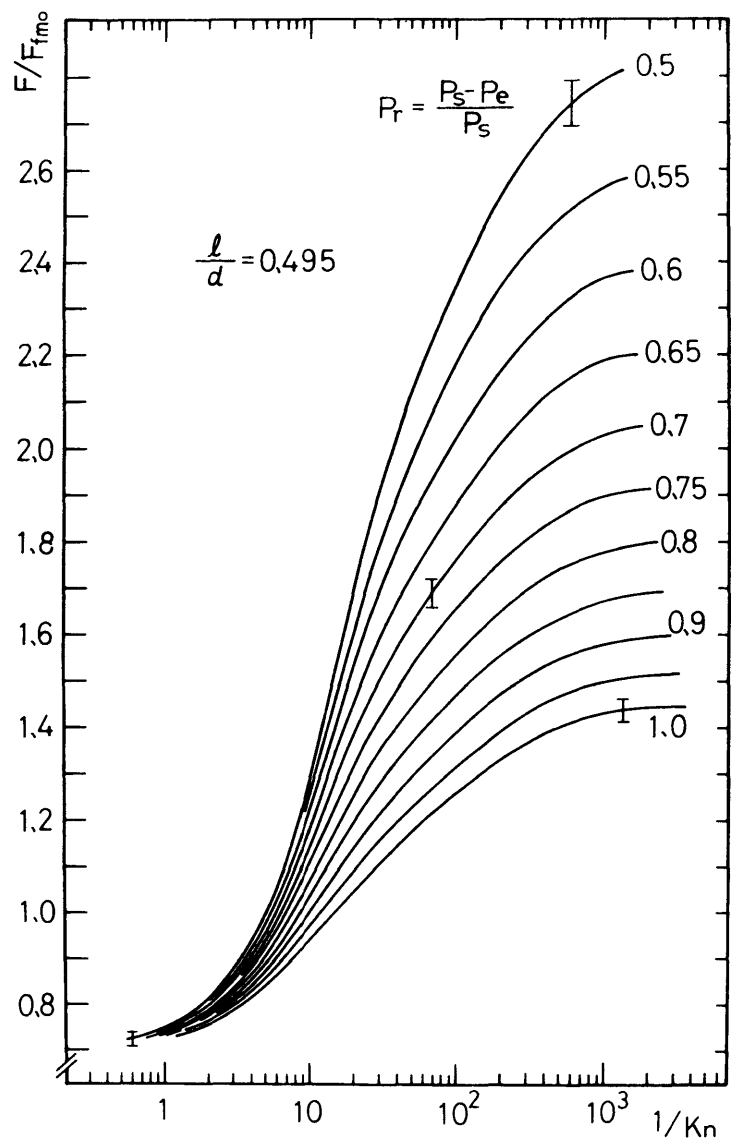


図3.2 下流側圧力を無視できない場合の短い円筒管のコンダクタンス ($l/d=0.495$)

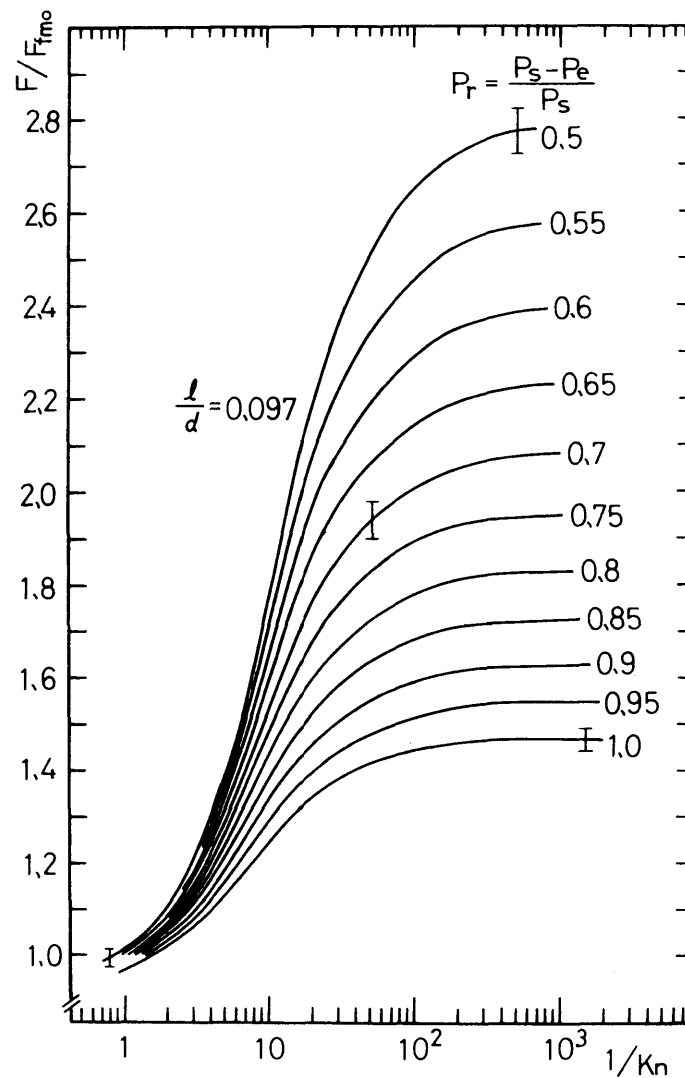


図3.3 下流側圧力を無視できない場合の短い円筒管のコンダクタンス ($l/d=0.097$)

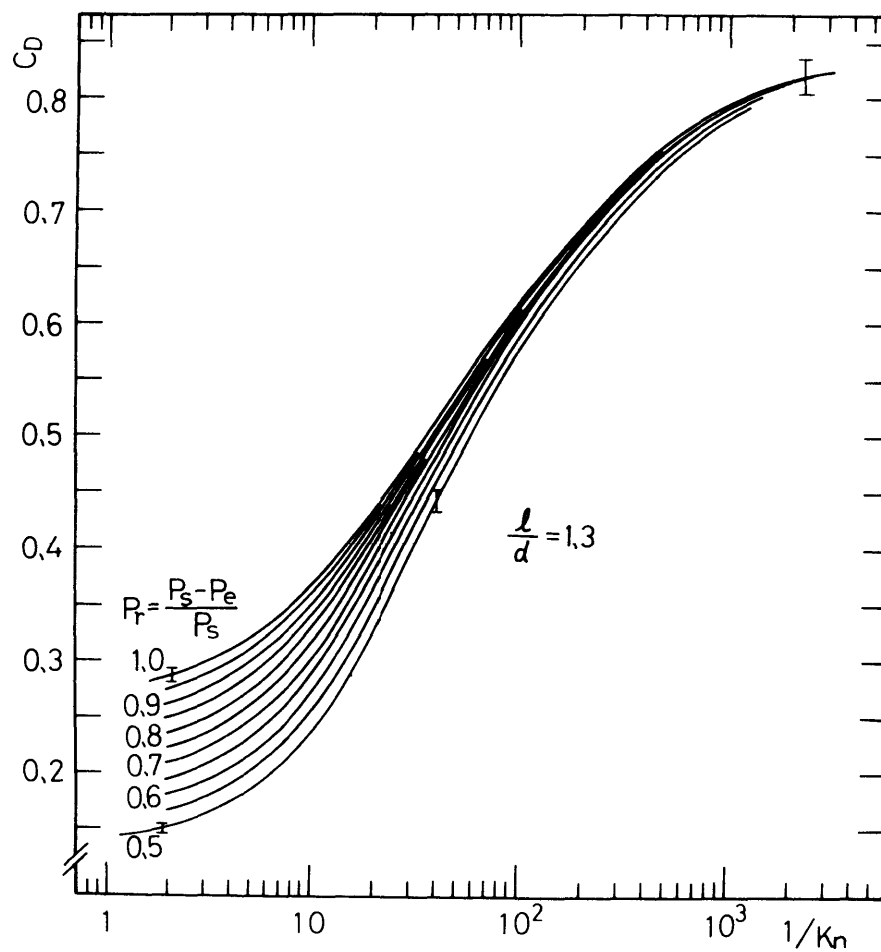


図3.4 下流側圧力を無視できない場合の短い円筒管の流出係数 ($l/d=1.3$)

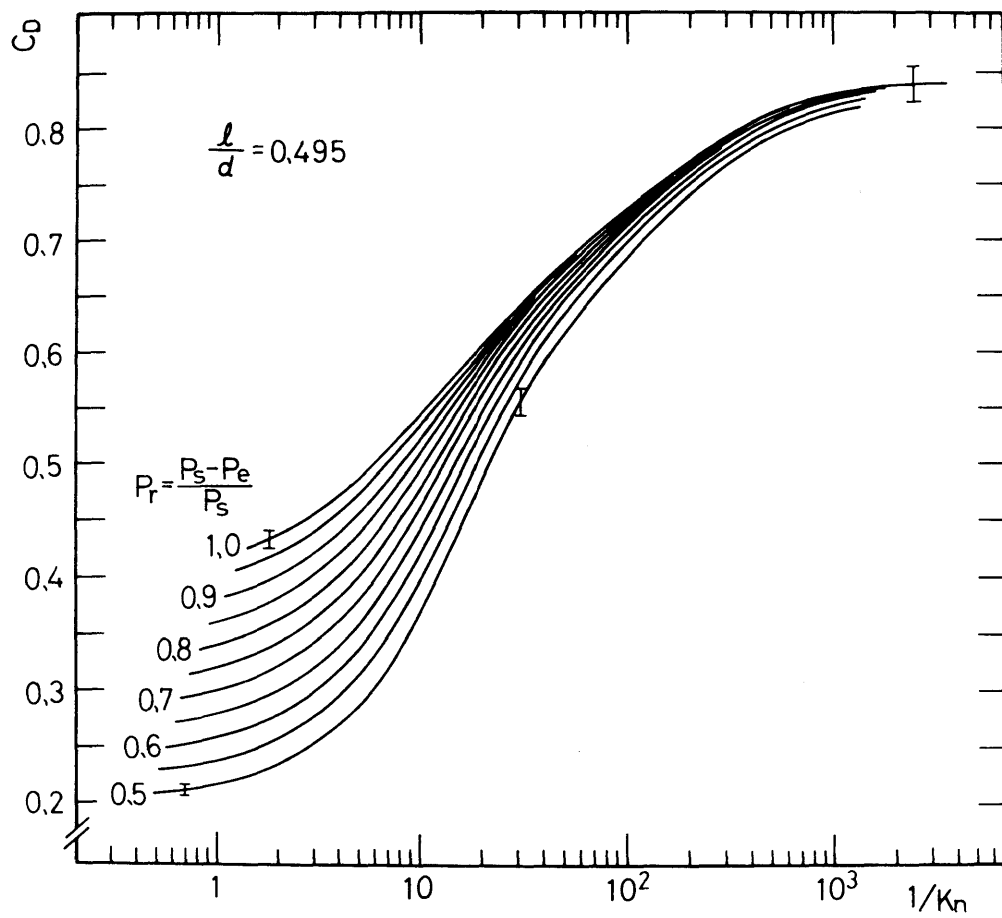


図3.5 下流側圧力を無視できない場合の短い円筒管の流出係数 ($l/d=0.495$)

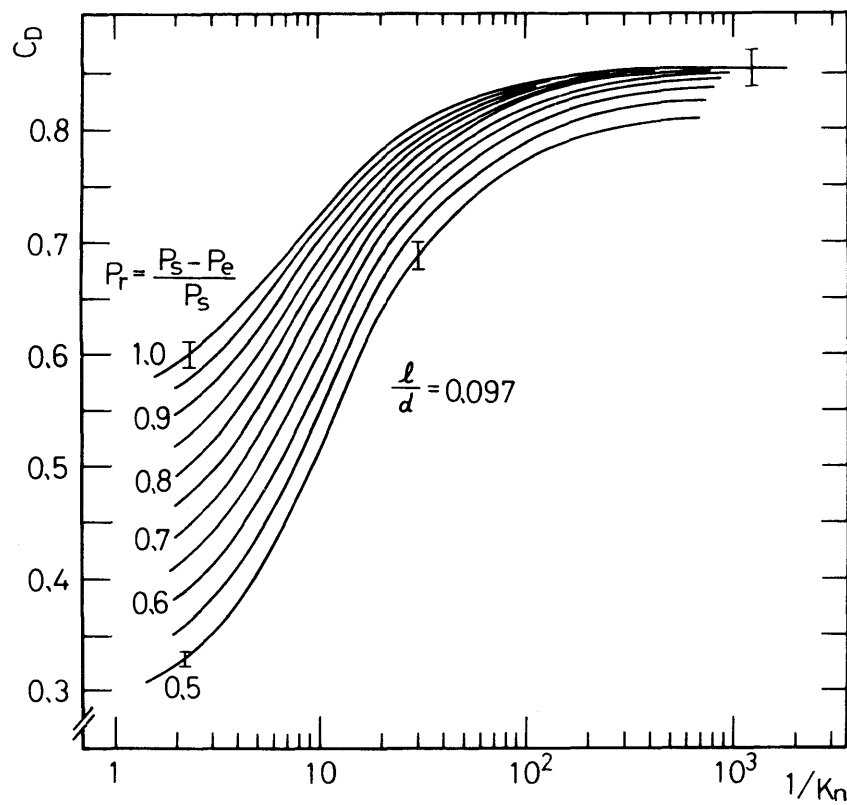


図3.6 下流側圧力を無視できない場合の短い円筒管の流出係数 ($l/d=0.097$)

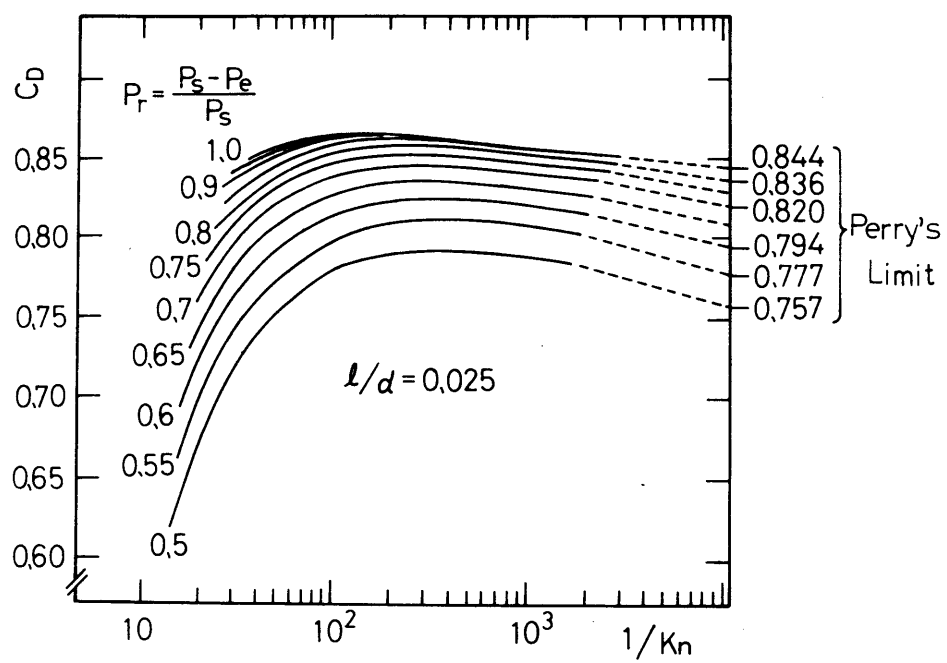


図3.7 下流側圧力を無視できない場合の短い円筒管の流出係数 ($l/d=0.025$)

第4章 モンテカルロ直接シミュレーション法⁽⁶⁹⁾⁽⁷⁰⁾⁽⁷¹⁾

希薄気体問題の解析において、分子と物理境界との衝突頻度が、分子同士の衝突と同程度の割合で生ずる圧力状態(中間流領域)では、実用上有効な、ボルツマン方程式に基づく気体運動論的理論解析法が確立されていない。一方、計算機シミュレーションによる解析は、近年、数多くの手法が試みられている⁽⁵⁹⁾⁻⁽⁶¹⁾。その中で、Birdによって開発されたモンテカルロ直接法は、「ボルツマン方程式の数値解法という点において厳密さに欠ける」との議論⁽⁵⁴⁾⁽⁶¹⁾⁽⁶²⁾があるものの、密度・温度など流れの巨視的な量を問題にする場合には十分良い結果が得られるとの意見が一般的であり、その手法の簡便さと、それに伴う卓越した計算速度のために、広く応用⁽⁷⁴⁾が期待されているものである。

4.1 モンテカルロ直接法の概要

モンテカルロ直接法は、何万あるいは何十万もの分子の位置座標及び速度成分を計算機内に記憶し、時間の経過とともに、それらを合理的に変更していくことによって、気体の流れを計算機上で再現しようとするものである。この手法は、本質的に非定常流だけを取り扱うものであるが、非定常流が最終的にある状態へ収束した場合に、定常流が形成されるので、この計算法では、どちらの流れもほとんど同様な取り扱いで処理することができる。

モンテカルロ直接法の詳細な説明に入る前に、計算手順の概略を述べておくことは、この手法を理解する上で重要であると思われる。以下に、流れ図(図4.1)に沿って概要を述べる。

〔1〕 分子は、まず、乱数により初期座標と初期速度成分とを与えられて、対象となる物理空間に配置される。その物理空間は、セルと呼ばれる微小空間に分割されている。このセルの大きさは、平均自由行程よりも小さく取ることが望ましいとされている。

〔2〕 分子の物理空間内での移動(固定壁との干渉および境界での分子の流入流出を含む)の計算と、分子間衝突の計算は、それぞれ、微少時間 Δt_m (Δt_m

は、平均衝突時間よりも小さくなるように決められる) ごとに独立して計算される。すなわち、次の3段階の過程で計算が行われる。

(I) 各々の分子は、その速度に応じて Δt_m 時間だけ、他の分子と無関係に移動させられ、その際、固定壁における反射あるいは境界からの流出が生ずれば、運動量およびエネルギーの交換などが計算される。また、境界外から新しく分子が流入させられるが、その速度成分および境界上の侵入位置も、乱数により決定される。

(II) 分子の移動によって、各々の分子の位置座標が変化するので、各セルに属する分子が調査され、分子間衝突等の計算を容易にするために、前後参照用の配列 (Cross-Referencing Array) において分子の並べ替えが行われる。すなわち、各セルには、その中に存在する分子数だけの連続した番号 (座席番号) が、配列の添字として与えられ、その配列要素に分子名が記憶される。あるセルに属する座席番号が与えられると、その番号から、この配列を用いて実際の分子名が参照され、分子の速度成分などの情報が得られることになる (図4.2参照)。

(III) 分子間の衝突は、衝突の法則に基づき、セル単位で計算が行われる。衝突分子ペアの選択、あるいは、衝突パラメータの決定 (衝突後の速度成分の決定) に乱数が用いられるが、セル内の分子位置に関する考慮は行われない。この手法の最大の特徴は、個々の分子間衝突に対してそれぞれ衝突時間を割り当て、各セルにおける衝突時間の和が Δt_m に達するまで分子間衝突の計算を行うことにあり (セルタイム法あるいはタイムカウンタ法と呼ぶ)、これが卓越した計算速度を実現させている。ただし、このセルタイム法を用いるにあたっては、計算機上のセル内分子数が20個を大きく下まわると、厳密な気体運動論的計算とは異なる衝突数を生ずる可能性があるので注意が必要である。

[3] 上記[2]の過程が繰り返され、非定常問題にあってはアンサンブル平均が、定常問題にあっては定常状態達成後の時間平均が計算される。

4. 2 二体弾性衝突の力学と分子モデル

質量 m_1, m_2 の二つの分子の衝突前の速度をそれぞれ $\mathbf{c}_1, \mathbf{c}_2$ 、衝突後の速度を $\mathbf{c}_1^*, \mathbf{c}_2^*$ とし、衝突前と衝突後の相対速度を $\mathbf{c}_r, \mathbf{c}_r^*$ 、二つの分子の質量中心速度を \mathbf{c}_m と

すると、弾性衝突では、式(4.1)が成立する。

$$\begin{aligned}\mathbf{c}_m &= (m_1\mathbf{c}_1 + m_2\mathbf{c}_2)/(m_1 + m_2) \\ \mathbf{c}_1^* &= \mathbf{c}_m + \{m_2/(m_1 + m_2)\}\mathbf{c}_r^* \\ \mathbf{c}_2^* &= \mathbf{c}_m - \{m_1/(m_1 + m_2)\}\mathbf{c}_r^*\end{aligned}\tag{4.1}$$

弾性衝突では、衝突の前後で相対速度の絶対値は変化しないので、衝突後の分子速度を決定するためには、相対速度ベクトルの方向の変化を求めればよい。図4.3(a)は、質量中心座標系において、この二体衝突を衝突平面上に描いたものである。この図における偏向角 χ を決定することによって、衝突後の速度が算出できる。いま、二つの分子間に働く力を \mathbf{F} とし、それらの分子の位置ベクトルを $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2$ とすれば、運動方程式は次のように書ける。

$$\begin{aligned}m_1(d^2\mathbf{r}_1/dt^2) &= \mathbf{F} \\ m_2(d^2\mathbf{r}_2/dt^2) &= -\mathbf{F}\end{aligned}\tag{4.2}$$

したがって、

$$m_1m_2\{(d^2\mathbf{r}_1/dt^2) - (d^2\mathbf{r}_2/dt^2)\} = (m_1 + m_2)\mathbf{F}\tag{4.3}$$

となる。ここで、相対速度ベクトルを $d\mathbf{r}/dt$ 、換算質量 $m_r = m_1m_2/(m_1 + m_2)$ とすれば、

$$m_r(d^2\mathbf{r}/dt^2) = \mathbf{F}\tag{4.4}$$

となる。すなわち、質量 m_2 の分子に対する質量 m_1 の分子の動きは、 m_2 分子を固定して考えた座標系において、換算質量 m_r が力 \mathbf{F} を受けて運動したものと等価なものとなる（図4.3(b)）。

図4.3(b)における極座標 r, θ において、点0 回りの角運動量方程式は、

$$r^2(d\theta/dt) = b \cdot c_r \quad (4.5)$$

と書ける．ここで， b を衝突パラメータと呼ぶ．今，分子間に働く力 F によるポテンシャルエネルギーを ϕ とすると，エネルギー保存則により，

$$(1/2)m_r\{(dr/dt)^2 + r^2(d\theta/dt)^2\} + \phi = (1/2)m_r c_r^2 \quad (4.6)$$

となる．式(4.5)(4.6)から

$$(dr/d\theta)^2 = (r^4/b^2) - r^2 - [\phi r^4/\{(1/2)m_r c_r^2 b^2\}] \quad (4.7)$$

と書ける．ここで， r の代わりに，無次元変数 $W=b/r$ を用いると，式(4.7)は次のようになる．

$$(dW/d\theta)^2 = 1 - W^2 - \phi/\{(1/2)m_r c_r^2\} \quad (4.8)$$

したがって，

$$\theta = \int_0^W [1 - W^2 - \phi/\{(1/2)m_r c_r^2\}]^{-1/2} dW \quad (4.9)$$

となる．図4.3(b)において，換算質量 m_r の軌跡が点0に最も近づいた位置Aでは $dW/d\theta=0$ となるので， W_1 を次式

$$1 - W^2 - \phi/\{(1/2)m_r c_r^2\} = 0 \quad (4.10)$$

の正の解とすれば，線OAと c_r とのなす角 θ_A は式(4.11)のように得られる．

$$\theta_A = \int_0^{W_1} [1 - W^2 - \phi/\{(1/2)m_r c_r^2\}]^{-1/2} dW \quad (4.11)$$

したがって，偏向角 χ は， θ_A を用いて，式(4.12)のように計算できる．

$$\chi = \pi - 2\theta_a \quad (4.12)$$

図4.4 は，ある基準平面（基準平面と衝突平面の交差線が相対速度 \mathbf{c}_r と平行になるようにとった）と衝突平面とのなす角が ε となる場合を描いたものである． ε も b と同様に衝突パラメータと呼ぶ．いま，相対速度 \mathbf{c}_r で衝突した分子が，角 χ と ε の方向の微小立体角 $d\Omega$ へ飛んで行くような衝突を考え，単位時間・単位体積当りの その衝突数を $n_1 n_2 c_r \sigma d\Omega$ とおくことによって，衝突断面積 σ というものを定義する．ここで， n_1, n_2 は，このような衝突を起こす分子の数密度である．また，微小立体角 $d\Omega$ は，式(4.13)で表される．

$$d\Omega = \sin\chi \, d\chi \, d\varepsilon \quad (4.13)$$

図4.4において， \mathbf{c}_r に垂直で点0を含む平面を考えると，微分衝突断面積 $\sigma d\Omega$ は式(4.14)のように書くことができる．

$$|\sigma d\Omega| = |b \, db \, d\varepsilon| \quad (4.14)$$

したがって， σ は，式(4.13),(4.14)から

$$\sigma = (b/\sin\chi) |db/d\chi| \quad (4.15)$$

となる．*1 また，総衝突断面積 σ_T は，式(4.16)のように定義される．

$$\sigma_T = \int_0^{4\pi} \sigma d\Omega = 2\pi \int_0^\pi \sigma \sin\chi \, d\chi \quad (4.16)$$

気体分子のシミュレーションを行う場合，最初に考えるべきことは，どうい

*1 衝突パラメータ b が大きくなるにつれて偏向角 χ は小さくなるので， $db/d\chi < 0$ となる．このために，式(4.14)と式(4.15)において絶対値記号を用いた．

分子モデルで近似するかという問題である．実際の分子挙動を比較的忠実に表現し，かつ，計算上の取り扱いも容易である単原子分子気体のモデルとしては，一般的に，逆べき乗法則モデル (Inverse Power Law Model) が挙げられる．逆べき乗分子に働く斥力 F は，式(4.17)で与えられる．

$$F = \kappa / r^\eta \quad (4.17)$$

ここで， r は分子間距離， κ ， η は定数である． η は，それが小さい程，遠く離れた空間まで衝突の作用が及ぶことを示す指数であり， $\eta = \infty$ のとき 剛体衝突 (剛体球分子モデル) となり， $\eta = 5$ のときを特に Maxwell 分子モデルという．

逆べき乗分子に対するポテンシャル ϕ は，式(4.18)のように求められる．

$$\phi = \int_{\infty}^r (-F) dr = \int_r^{\infty} F dr = \kappa / \{(\eta - 1)r^{\eta-1}\} \quad (4.18)$$

ここで，衝突パラメータとして，新たに W_0 を式(4.19)のように定義する．

$$W_0 = b(m_r c_r^2 / \kappa)^{1/(\eta-1)} \quad (4.19)$$

式(4.10)(4.11)(4.12)を用いれば，逆べき乗分子の偏向角 χ は，式(4.20)のようになる．

$$\chi = \pi - 2 \int_0^{W_1} \{1 - W^2 - \{2/(\eta - 1)\}(W/W_0)^{\eta-1}\}^{-1/2} dW \quad (4.20)$$

ただし， W_1 は，式(4.21)の正の解である．

$$1 - W^2 - \{2/(\eta - 1)\}(W/W_0)^{\eta-1} = 0 \quad (4.21)$$

このように， η が与えられたならば，偏向角 χ は，衝突パラメータ W_0 だけで決定できる．なお，剛体球分子の偏向角は，すべての方向に対して等しい確率を持ち，衝突後の相対速度は，すべての方向に一様に分布する．

逆べき乗分子では、二つの分子間の距離がどんなに離れていても、わずかながら力を及ぼし合うので、総衝突断面積は無限大に発散してしまう。しかし、実際には、分子間距離がある程度大きくなれば、その影響を無視することができるので、分子が力を及ぼし合う距離の限界値を、無次元衝突パラメータ W_0 の打ち切り値 W_{0m} として表現する。この W_{0m} を用い、式(4.19)とその微分を式(4.14)に代入すれば、式(4.16)から、逆べき乗分子の総衝突断面積 σ_T は式(4.22)のように書ける。

$$\sigma_T = \pi W_{0m}^2 \{ \kappa / (m_r c_r^2) \}^{2/(7-1)} \quad (4.22)$$

なお、互いに等しい直径 d を持つ剛体球分子の総衝突断面積 σ_T は、式(4.23)で求められる。

$$\sigma_T = \pi d^2 \quad (4.23)$$

二つの分子の衝突する確率は $\sigma_T \cdot c_r$ に比例するので、 $\eta = \infty$ （剛体球分子）の場合は相対速度 c_r に比例し、 $\eta = 5$ （Maxwell分子）の場合は相対速度に依存しない。また、 $\eta = 9$ のときの衝突確率は、相対速度の平方根に比例する。

このように、モンテカルロ直接シミュレーション法においては、まず、二つの分子ペアが衝突するか否かの判断を $\sigma_T \cdot c_r$ に基づいて行い、衝突が生じた場合、衝突後の相対速度の方向の決定に偏向角 χ の計算を行うものである。

最近Birdによって、VHS分子モデル（Variable Cross-Section Hard Sphere）という衝突分子モデルが考えられている⁽⁶⁰⁾⁽⁷⁵⁾。分子モデルの相違（たとえば、逆べき乗分子と剛体球分子）によって引き起こされる効果は、 $\sigma_T \cdot c_r$ の違い（すなわち、総衝突断面積 σ_T の違い）に因るところが大で、偏向角 χ の関数形の相違にはほとんど依存しない——という観察に基づいて考えられたものである。衝突する二つの分子の相対速度に応じて、総衝突断面積（すなわち、分子直径）は変化させるが、衝突力学は剛体球と同じく、一様な方向性で衝突後の速度を決定するものである。VHSモデルは、逆べき乗モデルとほぼ同じ計算結果をもたらすが、その単純な衝突力学のために計算速度は非常に速い。

二原子分子あるいは多原子分子気体では、並進エネルギーに加えて回転あるいは

振動のエネルギーモードを考える必要がある。モンテカルロ直接法で取り扱い得る分子モデルとしては、衝突において分子の接触点の相対速度（並進及び回転速度を合成したものの相対速度）の反転を考える Rough-Sphereモデル⁽⁵⁸⁾がある。一方、現象論的モデルとしては、Energy-Sinkモデル⁽⁷⁶⁾あるいはLarsen-Borgnakkeモデル⁽⁷⁷⁾があり、シミュレーションにはこの現象論的モデルの方が扱い易い。Energy-Sink モデルは、各エネルギー・モードが自由度当り同じエネルギーを持つように、その差に応じたエネルギー移動を各モード間で考えるものである。また、Larsen-Borgnakkeモデルは、エネルギー保存則を前提に、各エネルギー・モードの値が平衡状態のエネルギー分布に基づいて算出されるものである。VHSモデルとLarsen-Borgnakkeモデルとを組み合わせることもできる。

4. 3 空間のセル分割と時間ステップ

シミュレーションに先立って決めておかなければならないものに、セルによる物理空間の分割と時間ステップ Δt_m があげられる。いずれも、理想的には、無限に小さいことが望まれるが、セル内分子数を一定としたとき、空間のセル分割を小さくすれば計算機上で同時に扱わなければならない分子数が増加するので、記憶容量の関係で限界が生ずる。一般的には、セル一辺の大きさは平均自由行程よりも小さく取ることが基本となるが、流れの状態変化の緩やかな空間では平均自由行程と同程度あるいはそれ以上でも十分有効に計算できる。一方、分子の移動と分子間衝突の計算を分離する時間ステップ Δt_m は、平均衝突時間よりも小さくとることが基本である。 Δt_m を小さくとればとるほど分子移動の計算に要する時間は長くなるが、分子間衝突の計算に要する時間はほとんど変わらないので、セル分割の場合と違って、たとえば Δt_m を常に平均衝突時間の1/5以下にとったとしても、シミュレーションを行う上でそれほど困難な条件とはならない。

4. 4 分子情報の初期設定

定常流あるいは非定常流のいずれの場合であっても、シミュレーションを行う分子個々の初期座標と初期速度成分を設定しておく必要がある。この場合、位置

座標に関しては，一次元問題では一座標，二次元問題では二座標だけを考えれば十分であるが，分子間衝突が三次元的現象であるという理由のために，分子速度は三成分すべて必要となる．点対称あるいは軸対称問題においても位置座標の省略が可能であるが，分子が空間を移動した場合，速度成分に適当な座標回転操作（図4.5 参照）を加える必要がある．非定常問題では，初期条件に応じて初期設定を行うが，定常問題では，任意の初期状態から計算できる．その場合，最終目的である定常状態に近い状態から出発するほど速く収束するが，予測することは不可能なことが多いので，一般に，ある温度・圧力の平衡状態から計算を始めることが多い．

平衡状態の x 方向速度成分 u' の分布は，式(4.24)で与えられる．

$$f_{u'} = (\beta / \sqrt{\pi}) \exp(-\beta^2 u'^2) \quad (4.24)$$

ここで， β は 最大確率速度 c_m の逆数である．この分布関数に基づいた速度成分を一様乱数を用いて算出する方法は二通り考えられる．一つは，棄却法 (Acceptance Rejection Method) による方法で， $f_{u'}$ をその最大値 $f_{u', \max}$ で無次元化した分布関数 $f'_{u'}$ を用いて計算を行う．まず，一様乱数を用いて一つの速度を算出し，その値に対する無次元化された分布関数値を計算する．次に，その分布関数の値と新たに発生させた一様乱数とを比較し，乱数の方が小さい場合はその速度を採用するが，乱数の方が大きい場合にはもう一度初めから計算をやり直すというものである．平衡状態の速度成分の絶対値はゼロから無限大まで分布するが，それが大きくなるにつれて確率分布は指数関数的に減少するので，ある一定の値より大きなものを省略しても 実際の計算にはほとんど影響を与えない．たとえば， $-3 < \beta u' < 3$ の範囲内にある速度のみを対象とした場合，この範囲外に存在する分子の確率は約0.002%となり事実上無視できる．この場合，0～1 の範囲の一様乱数を R_r とすれば， $f'_{u'} = \exp \{ -(-3+6R_r)^2 \}$ となり，この値と次に得られた乱数 R_r との比較によって $\beta u'$ （そして，目的とする速度成分 u' ）の採否を決定する．このような棄却法は，どんな分布にも適用できるが，反面，乱数を二度用いねばならないことと，必ずしも一回の計算で分子の速度成分が決定できないという欠点を持つ．

他の一つの方法は，二つの速度成分を一度に算出する方法である．まず， u' と v' の分布関数の積を計算すると，式(4.25)のようになる．

$$f_u \cdot du' \cdot f_v \cdot dv' = (\beta^2 / \pi) \exp \{ - \beta^2 (u'^2 + v'^2) \} du' dv' \quad (4.25)$$

いま，

$$u' = r \cos \theta, \quad v' = r \sin \theta \quad (4.26)$$

とおけば，式(4.27)が得られる．

$$\begin{aligned} f_u \cdot du' \cdot f_v \cdot dv' &= (\beta^2 / \pi) \exp \{ - \beta^2 r^2 \} r \, dr \, d\theta \\ &= \exp \{ - \beta^2 r^2 \} d(\beta^2 r^2) d\theta / (2\pi) \end{aligned} \quad (4.27)$$

ここで，角 θ は0から 2π まで一様に分布しているので，一様乱数 R_r を用いて式(4.28)のように計算できる．

$$\theta = 2\pi R_r \quad (4.28)$$

変数 $\beta^2 r^2$ は，0から ∞ まで

$$f_{\beta^2 r^2} = \exp(-\beta^2 r^2) \quad (4.29)$$

にしたがって分布している．この分布関数は全領域で積分すると1.0になっており，このようなものを正規化された分布関数と呼ぶ．この正規化された分布関数を用いて，累積分布関数 $F_{\beta^2 r^2}$ を次のように計算する．

$$F_{\beta^2 r^2} = \int_0^{\beta^2 r^2} f_{\beta^2 r^2} d(\beta^2 r^2) = 1 - \exp(-\beta^2 r^2) \quad (4.30)$$

得られた累積分布関数 $F_{\beta^2 r^2}$ を一様乱数 R_r と等しいと置くことにより，求めるべき

値（ここでは r の値）が得られる。^{*1} 乱数の性質上、 R_r と $1 - R_r$ とは等価であるので、式(4.30)において、 $1 - \exp(-\beta^2 r^2) = 1 - R_r$ とすることができ、したがって次式を得る。

$$r = \{-\ln(R_r)\}^{1/2} / \beta \quad (4.31)$$

このように、二つの乱数と式(4.28)(4.31)とを用いて r, θ が決定され、式(4.26)により u', v' の値が計算できる。

一方、空間の気体密度が一定の状態では、分子の位置座標は一様乱数により容易に決定できる。物理空間の幾何学形状が複雑な場合には、棄却法を利用することもできる。

4.5 分子の移動

分子は、互いに独立に、その持っている速度と時間 Δt_m の積に相当する距離だけ物理空間内を移動する。そして、移動の途中に固定壁（境界）があれば、あらかじめ決められた反射法則にしたがって反射を行い、残りの時間、新たな速度で空間内を再び移動する。ただし、壁面が速度を持って移動しているような場合には、一般に、壁面に固定した座標系で反射の計算を行う。

反射法則は、鏡面反射と拡散反射（散乱反射）に大別される。鏡面反射では、

*1 正規化された累積分布関数 $F(x)$ を、0～1の範囲の一様乱数 R_r と等しいとおくことによって、任意の分布 $f(x)$ を持つ x の値を決定する方法は、直接法（逆変換法）と呼ばれる「任意分布の乱数発生法」の一つである。 x が、 $x_1 \sim x_1 + dx$ の範囲にある確率は $f(x_1)dx$ であり、 $x_2 \sim x_2 + dx$ の範囲にある確率は $f(x_2)dx$ である。いま、 $f(x_2)dx$ が $f(x_1)dx$ の a 倍であるとき、

$$dF(x_2) = f(x_2)dx = a \cdot f(x_1)dx = a \cdot dF(x_1)$$

となるので、 $F(x)$ と一様乱数 R_r とを対応させることによって、 $x_2 \sim x_2 + dx$ に対する乱数の範囲は、 $x_1 \sim x_1 + dx$ に対する乱数範囲の a 倍となり、 $f(x)$ の分布にしたがった値を一様乱数を用いて発生させることができる。

入射角と反射角が同じで、壁面に垂直方向の速度成分が反転させられる他は、分子の速度成分に全く影響を及ぼさない。したがって、分子と壁とのエネルギー交換は行われない。工学上、このような壁面はほとんど存在しないが、対称面を分子が通過するときにこの反射と同様な操作が行われる。

一方、拡散反射では、入射時に分子の持っていた運動量はすべて壁に吸収され、分子は壁面温度に完全になじんだものとして、その温度の平衡状態に対する速度分布で壁から再放出されるものである。したがって、反射後の速度成分の内、壁面に平行な二成分に関しては、平衡状態（壁の温度での）における分子の速度発生と同じ計算式(4.26)(4.28)(4.31)を用いてそれらを算出することができる。壁面に垂直な方向の成分は、平衡状態の分布関数 f_v に速度 v を掛け合わせた分子流束の分布関数によって計算する必要がある。これは、平衡状態の気体が、厚みのない小さな穴を通過して流出する場合の分子速度分布と同じ考え方に基づくものである。今、その速度分布を $f_v = C v \exp(-\beta^2 v^2)$ とすれば、 $f_v dv$ は次の様に変形できる。ここで、 C は定数である。

$$\begin{aligned} f_v dv &= C v \exp(-\beta^2 v^2) dv \\ &= (1/2) C \exp(-\beta^2 v^2) d(v^2) \\ &= (1/2) (C/\beta^2) \exp(-\beta^2 v^2) d(\beta^2 v^2) \end{aligned} \quad (4.32)$$

ここで、分布関数の規格化の条件（全領域で積分すると1.0になる）を考慮すると、 C が決定でき、 $\beta^2 v^2$ の分布関数として次式を得る。

$$f_{\beta^2 v^2} = \exp(-\beta^2 v^2) \quad (4.33)$$

すなわち、 v^2 の分布は、式(4.29)における r^2 を v^2 と置き換えたものであり、よって、式(4.31)と同じく次式が得られる。

$$v = \{-\ln(R_f)\}^{1/2} / \beta \quad (4.34)$$

現実には存在する壁面は拡散反射に近いものであるが、完全な拡散反射面ではない。気体分子が壁面で拡散反射する割合を表現するために、適応係数を用いる方法がある。たとえば、入射分子の持つエネルギーを E_i 、反射分子のそれを E_r 、壁の温度で完全に平衡状態に達した分子の持つエネルギーを E_w とした場合、その熱適応係数 α は次のように定義される。

$$\alpha = (E_r - E_i) / (E_w - E_i) \quad (4.35)$$

いま、式(4.35)を変形すると

$$E_r = \alpha \cdot E_w + (1 - \alpha) E_i \quad (4.36)$$

が得られる。上式において、反射分子の α 部分が拡散反射に対応し、 $(1 - \alpha)$ 部分が鏡面反射に対応すると考えられるので、これに基づいた反射モデルとして、本シミュレーションでは、次の二つの方法を検討した。一つは、分子が壁に入射した場合、個々の分子を完全に拡散反射させるかあるいは完全に鏡面反射させるか、乱数によって決める方法である。すなわち、計算機内で発生させた一様乱数(0～1)を R_r とおいたとき、

$R_r < \alpha$ の場合は、拡散反射

$R_r > \alpha$ の場合は、鏡面反射

として、計算するものである。他の一つの方法は、鏡面反射の場合の反射後の速度 c_i と、完全な拡散反射として計算した場合に得られた速度 c_w とを、適応係数の割合に応じて合成し、一個の分子の反射後の速度 c_r とする方法である。すなわち、

$$c_r = \alpha \cdot c_w + (1 - \alpha) c_i \quad (4.37)$$

によって算出するものである。入射角 45° の方向から来る入射分子の反射後の分布が、この二つの方法を用いることによってどのように計算されるかを示したものが図4.6である。 $\alpha = 0.8$ についての結果を示しているが、明らかに、後者の方法によって、現実に近い反射分布が実現されている。

壁面での分子の反射によって生ずる気体と壁との運動量およびエネルギーの交換が、分子の反射計算の過程で同時に計算される。垂直方向の運動量からは壁に及ぼす圧力が、壁面に平行な運動量からはせん断応力が、また、並進エネルギーからは熱流束の値が計算される。最終的な、気体と壁面との間の輸送量の算出には、第8節で示す無次元化による表現に注意しなければならない。

分子の空間内の移動によって、その分子がセルを移り変わる可能性が生ずる。よって、分子の移動後の位置座標が決定した段階で、どのセルに属しているかを調べる必要がある。分子がシミュレーションの対象空間外へ流出した場合には、計算機上の総分子数を減少させる等の必要な手続きを行う。また、境界から流入する分子に対する移動の計算もこの段階であわせて行う。

4.6 分子の索引情報操作（前後参照配列上の分子名の並べ替え）

分子間衝突は同一のセル内に存在する分子の間で行われる。そのために、分子の空間座標及び速度成分の情報を、それが位置するセルごとにまとめて記憶しておくと便利であるが、分子がセルを移り変わるたびにそれらの情報を計算機内の配列変数間で移しかえるのは、かなりの計算時間を要するものである。またその時間は、ほぼ分子数の二乗に比例して増加するという不都合な性質を持つ。このような計算時間の浪費を避けるために、前後参照用の配列LCR(K)を用いた分子の索引処理の方法が考えられている。

図4.2 に示すように、前後参照配列LCR(K)の添字Kは、分子が位置を占めるべき座席に相当するもの（ただし、この座席は物理空間の一点に固定されてはいない）であり、そのKに対し、LCR(K)にはその座席に存在する分子の名前（シミュレーション上の分子が物理空間内に初めて置かれたときに付けられた分子の番号）が記憶される。すなわち、空間内の各セルは、分子移動の計算が終了した直後にセル内分子数だけの連続した座席番号を順にあてがわれ、それらの座席番号に対する前後参照配列要素LCR(K)にそのセル内に存在する分子名を記憶する。衝突を行う二つの分子ペアを選択するためには、そのセルに属する座席番号から二つの番号を乱数によって選び出せばよく、得られた座席番号から分子の名前を参照し、分子情報を記憶している配列変数からその分子名に対する速度成分などの情報を得

ることができる。

前後参照配列 $LCR(K)$ 上の分子名の並べ替え操作の方法は、実際のプログラムから容易に理解できる。図4.7 にFortranプログラムを示す。ここで、 $IP(M)$ は、分子 M の属するセル名を表す変数である。まず、セル N 内の分子数を示す変数 $IC(1,N)$ を、すべてのセルについてゼロにした後、各々の分子についてその属するセル名を調べ、 $IC(1,N)$ を一つずつカウントしながらセル内分子数を計算する。次に、得られた各セルの分子数を順に累積していくことによって、前後参照配列上の各セルの「先頭座席から1を引いた値」 $IC(2,N)$ を順に計算していく。この際、次の操作のために、すでに累積計算に用いられたセル内分子数 $IC(1,N)$ は再びゼロにされる。最後に、もう一度、各々の分子についてその属するセルを調べ、 $IC(1,N)$ をカウントしながら、それにそのセルの「先頭座席 - 1」すなわち $IC(2,N)$ を加えることによって、分子が入るべき座席番号 K を算出する。一つのセルに割り当てられた一連の座席には、そのセルに属する分子が番号（分子名）の小さい順に並ぶことになる。

4. 7 分子間衝突の計算

分子間衝突の計算を考えるにあたって、簡単のために、分子モデルを剛体球分子に限定して論を進める。巨視的物理量だけを扱う工学上の多くの問題は、剛体球分子で十分な場合が多いし、剛体球分子の議論にいくつかの事項を追加すれば比較的容易に逆べき乗分子モデルにも拡張できる。最近では、計算時間の長くなる逆べき乗モデルの代わりに、計算時間が少なくかつ逆べき乗モデルを用いたのと同様な結果の期待できるVHS分子モデルに注目が向けられているが、その衝突力学は、剛体球分子の場合とほぼ同じものである。

分子間衝突の計算は、(1)与えられた時間に生ずる衝突回数の算定、(2)セル内に存在するすべての分子から衝突確率に応じた衝突分子ペアを選択する方法、そして、(3)実際に選ばれた分子ペアの衝突後の速度成分の計算法 の三つの部分に分けて考えることができる。

4.7.1 分子衝突数の算定

体積Vのセルにおける単位時間当りの総分子衝突数 N_t は次式で与えられる。

$$\begin{aligned} N_t &= (1/2)V n^2 \sigma_T \overline{c_r} \\ &= (1/2)V n^2 \pi d^2 \overline{c_r} \end{aligned} \quad (4.38)$$

N_t を求める際に問題となるのは、相対速度の平均値を計算することである。すなわち、セル内に分子が N 個存在していた場合、衝突ペアの組み合わせは $N(N-1)/2$ だけ考えられるため、 $N=20$ の場合でも相対速度の演算は190回にも及ぶこととなる。セル内分子数が増えれば、その数のほぼ二乗に比例して演算数は増加する。相対速度の計算は、速度成分によるベクトル演算であるため、これがシミュレーション全体の計算時間に及ぼす影響は非常に大きく、モンテカルロ直接法を工学上の計算に適用する上での最大の問題点であった。これに対し、Birdは、総分子衝突数を計算することなしにシミュレーションを行う方法を考案した。これはセルタイム法（タイムカウンタ法）と呼ばれているもので、本研究では、その方法を採用している。セルタイム法では、個々の分子間衝突に対してそれぞれ衝突時間を割り当て、各セルにおける衝突時間の和が時間ステップ Δt_m を越えるまで分子間衝突の計算を行うものである。セル内分子数が N の場合に、相対速度 c_r の分子ペアに与えられる衝突時間は以下のように求められる。

セル内に N 個の分子があるとき、可能な衝突分子ペアの組み合わせ数は

$$N_p = N(N-1)/2 \quad (4.39)$$

である。それぞれの分子ペアの相対速度を c_{rm} ($m=1,2,\dots,N_p$) とし、ある特定の時間間隔 t を考えたときに、 c_{r0} という相対速度を持つ分子ペアの衝突数が P であれば、任意の分子ペアの衝突数 P_m は相対速度に比例（剛体球分子の場合）するので

$$P_m = P c_{rm}/c_{r0} \quad (4.40)$$

と書ける。 t 時間内に生ずる総衝突数 N_T は、すべての可能な分子ペアの合計である

から次式で求められる。

$$N_T = \sum_{m=1}^{N_p} (P \cdot c_{rm}/c_{ro}) = (P/c_{ro}) \sum_{m=1}^{N_p} c_{rm} \quad (4.41)$$

一方、単位時間当りの総衝突数 N_t は、剛体球分子の場合次のように与えられる。

$$\begin{aligned} N_t &= (1/2)V \cdot n^2 \pi d^2 \overline{c_r} = (1/2)N \cdot n \pi d^2 \overline{c_r} \\ &= (N \pi d^2 n / 2) (1/N_p) \sum_{m=1}^{N_p} c_{rm} \end{aligned} \quad (4.42)$$

ゆえに、式(4.41)(4.42)より、時間間隔 t を算出すると、

$$\begin{aligned} t &= N_T / N_t = \{2N_p / (N \pi d^2 n)\} (P/c_{ro}) \\ &= \sum_{m=1}^{N_p} [\{2 / (N \pi d^2 n)\} (P/c_{ro}) (c_{rm}/c_{rm})] \\ &= \sum_{m=1}^{N_p} [\{(2/N) (\pi d^2 n c_{rm})^{-1}\} \{P \cdot c_{rm}/c_{ro}\}] \end{aligned} \quad (4.43)$$

となる。 $\{P \cdot c_{rm}/c_{ro}\}$ は、ある一組の分子ペアの t 時間内に起こる衝突数を表しているので、 $\{(2/N) (\pi d^2 n c_{rm})^{-1}\}$ は、その分子ペアの衝突一回当りに割り当てられた衝突時間とみなすことができる。

このように、各セルで十分な数の分子間衝突が計算された場合、相対速度 c_r を持つ分子ペアの衝突は、式(4.44)で示される Δt_c の衝突時間を持つ。

$$\begin{aligned} \Delta t_c &= (2/N) (\pi d^2 n c_r)^{-1} \\ &= (2/V) (\pi d^2 n^2 c_r)^{-1} \end{aligned} \quad (4.44)$$

ただし、この衝突時間という概念は、その分子ペアが実際に衝突を行っている時間というものではなく、ある時間内に生じた分子衝突を時間軸上に一列に並べた場合、それぞれの衝突がその時間をどれだけ割り当てられるかを示すものである。そして、 Δt_c が小さいと衝突は起こり易く、逆に Δt_c が大きいとその衝突は起こ

りにくいという意味を持つものである。

図4.8 に示すように，全体を統轄する時間軸上で時間カウンタが Δt_m ステップだけ進められることにより，まず，すべての分子は Δt_m 時間だけ空間を移動する．次に，第一セルに対して分子間衝突が計算され，各々の衝突の衝突時間 Δt_c だけ，第一セル時間軸上の時間カウンタ（セルタイム）が進められる．衝突はそのセルの時間カウンタが全体の時間カウンタの値を越えるまで行われ，引き続き第二セルの分子間衝突の計算に移る．この場合，全体の時間進行と各セルの時間進行とで各々の時間ステップ Δt_m の終了点は必ずしも一致せず，セルの時間カウンタは毎回超過を起こすが，その超過分については，次回にその越えた位置から始めることで対処される．このように，二回目以降の時間ステップでは全体の時間カウンタよりも少しオーバーした点から出発するので，第一回目の開始点もゼロの位置より少し進んだ位置にすべきであるとの考え方ができる．非定常流問題の，特に，自由分子流に近い状態ではこの操作は必ず必要であるが，本研究のような定常問題を対象とした場合には必ずしもその必要はない．

このシミュレーションにおいて，一回の計算で同時に取り扱い得る分子数は，計算機の容量のために制限を受けるので，同じ条件下での計算を何度も繰り返して平均値（非定常問題ではアンサンブル平均，定常問題では時間平均）をとることにより，実際に取り扱う分子数を増加させている．この場合，式(4.44)における数密度 n は，本来，平均値 \bar{n} を用いて計算しなければならないが，実際にはそれはほとんど不可能で，一般にそのときの n の瞬時値を用いて計算する． $\overline{1/n^2}$ の値と n の平均値の二乗の逆数 $1/\bar{n}^2$ とは， n に統計的ばらつきが存在した場合異なったものとなり，瞬時値を用いた場合には，平均値を用いた場合より衝突時間 Δt_c が大きくなってしまう．すなわち，衝突数を少なく見積もってしまうことになる．この効果は，セル内分子数が少なくなる程大きくなる傾向にあり，セル内分子数が20個を大きく下まわるとシミュレーションの結果に影響が出てくる．これがセルタイム法を用いた場合に注意を要する点であり，もし分子数の10個以下になるセルが数多く生ずる場合には，式(4.38)によって総衝突数を計算する方法とこのセルタイム法との併用を考えることが必要である．セル内分子数が10以下の場合には衝突ペアの数は比較的少なくなり，総衝突数の計算に要する時間が全体の計算時間に占める割合も小さくなる．

4.7.2 衝突分子ペアの選択

同一セルにある分子から，互いに衝突を起こす分子ペアを選び出す操作は，棄却法(Acceptance Rejection Method)を用いて二段階で行われる．まず，すべての分子ペアが同じ衝突確率を持つものとして，一様乱数と前後参照配列LCR(K)とによって二つの分子を選び出す．そして，一時的に選ばれた分子ペアが実際に衝突するかどうかは，その分子ペアの相対速度とあらかじめ各セルについて設定された最大相対速度との比が，新たな乱数の値よりも大きい小さいかによって判断する．ここで問題となるのは，最大相対速度をどのように決定するかである．あまり大きな値を用いると，棄却法において棄却される回数が多くなり分子選択の計算に時間がかかりすぎるし，小さな値では正しい確率分布が得られない（大きな相対速度の生ずる確率が一定値となる）．Birdは，最初，最大相対速度として，初期平衡状態の平均相対速度の2倍を与え，計算の途中で最大値よりも大きな相対速度が出現したときには，その値を新しい最大値として設定し直すという操作を行っている．ただしこの方法では，最大相対速度よりも大きな相対速度が出現するたびに棄却法の基準値が変化するので，これによる影響を考慮しておかなければならない．

4.7.3 衝突後の速度成分の算出法

衝突分子ペアが決定されると，その衝突に対する衝突時間がカウントされ，その後，分子の衝突後の速度の計算が行われる．二つの分子の衝突前の速度をそれぞれ \mathbf{c}_1 ， \mathbf{c}_2 ，衝突後の速度を \mathbf{c}_1^* ， \mathbf{c}_2^* とし，衝突後の相対速度を \mathbf{c}_r^* ，二つの分子の質量中心速度を \mathbf{c}_m とすると，質量の等しい分子の弾性衝突では次式が成立する．

$$\begin{aligned}\mathbf{c}_m &= (\mathbf{c}_1 + \mathbf{c}_2)/2 \\ \mathbf{c}_1^* &= \mathbf{c}_m + (1/2)\mathbf{c}_r^* \\ \mathbf{c}_2^* &= \mathbf{c}_m - (1/2)\mathbf{c}_r^*\end{aligned}\tag{4.45}$$

相対速度の大きさは衝突の前後で変化しないので，問題は，衝突後の相対速度の方向を決定することに帰着する．剛体球分子の場合，衝突断面積は一定で，衝突

後の相対速度 c_r^* には特定の方向性がないので、その取り扱いは非常に簡単になる。

速度空間を極座標で考え、 c_r^* の極角を θ 、方位角を ϕ とすると、この極座標における立体角の要素は $\sin\theta d\theta d\phi$ となる。したがって、方位角 ϕ は、 $0\sim 2\pi$ まで一様に分布し、極角 θ は、 $0\sim \pi$ の範囲を分布関数 $f_\theta = \sin\theta$ で分布することになる。これを変形することにより次の式を得る。

$$f_\theta d\theta = \sin\theta d\theta = -d(\cos\theta) = f_{\cos\theta} d(\cos\theta) \quad (4.46)$$

すなわち、 $\cos\theta$ は、 $-1\sim 1$ の範囲で一様に分布する。求めるべき衝突後の相対速度の三方向成分は、相対速度の絶対値に $\cos\theta$ 、 $\sin\theta \sin\phi$ 、 $\sin\theta \cos\phi$ を乗じたものであるから、まず、 $-1\sim 1$ までの一様乱数により $\cos\theta$ 、 $\sin\theta$ を計算し、次に、 $0\sim 2\pi$ の範囲の一様乱数により ϕ すなわち $\sin\phi$ 、 $\cos\phi$ を計算すればよい。

分子間衝突の計算に関する流れ図を 図4.9 に示す。

4. 8 変数の無次元化

現象を解析する場合、問題を一般化するために、変数を、基準値で割ることによって、無次元化することがよく行われる。このシミュレーションにおいても変数の無次元化は行えるが、その場合、物理定数が実際の値と異なった数値になるので注意を要する。工学的問題に関しては、問題の扱い易さあるいはプログラムの理解し易さ等の理由で、必ずしも変数の無次元化を行う必要はないとの意見もあるが、本研究では、変数の無次元化を次の基準値を用いて行う。

長さ： λ 。(基準となる平衡状態の平均自由行程)

速さ： $c_{m0}' = 1/\beta_0 = \sqrt{2RT_0}$ 。(c_{m0}' ：平衡状態の最大確率速度， R ：ガス定数)

時間： $\lambda_0/c_{m0}' = \lambda_0 \beta_0$ 。

質量： m (分子の質量)

温度： T_0 。(平衡状態の絶対温度)

密度： ρ_0 。(平衡状態の密度)

分子流束： n_0/β_0 。(n_0 ：平衡状態の数密度)

圧力： ρ_0/β_0^2

熱流束： ρ_o/β_o^3

ただし、計算を進める上で、数密度 n は、セル内分子数をそのまま用いて、次元のある値として扱った方が便利の場合が多い。

これらの無次元化によって導かれた定数及び変数をいくつか挙げる。

ガス定数： $R=(1/\beta_o)^2(1/2T_o)=1/2$

ボルツマン定数： $k=(1/\beta_o)^2(m/2T_o)=1/2$

剛体球分子の衝突断面積： $\sigma_T=1/(\sqrt{2}n_o\lambda_o)=1/(\sqrt{2}n_o)$

平衡状態の平均速度： $\overline{c'}_o=2/(\sqrt{\pi}\beta_o)=2/\sqrt{\pi}$

平衡状態の平均相対速度： $\overline{c_{r'o}}=\sqrt{2}\overline{c'}_o=2\sqrt{2}/\sqrt{\pi}$

平衡状態の二乗平均速度の平方根： $c'_{s'o}=\sqrt{3\pi/8}\overline{c'}_o=\sqrt{3/2}$

平衡状態の平均衝突時間： $\tau_o=1/\nu_o=\lambda_o/\overline{c'}_o=\sqrt{\pi}/2$

温度 T における最大確率速度： $c'_m=\sqrt{2RT}=\sqrt{T}$

なお、今後、無次元化された変数を表現する場合には、変数記号にアンダーラインを付加することによって、それを明確にする（たとえば、 \underline{R} , $\underline{c'}$, \underline{T} など）。

4.9 空間情報のサンプリング

物理空間上の巨視的物理量は、セル内に存在する分子の情報量を平均することにより得られる。密度はセル内分子数から、圧力は分子の運動量（すなわち速度）から、並進温度は分子の並進エネルギーからそれぞれ計算される。たとえば、 x 方向の並進温度 T_{trx} は、以下のように定義される。

$$T_{trx} = (m/k)\overline{u'^2} = (m/k)(\overline{u^2} - \bar{u}^2) \quad (4.47)$$

本計算における変数の無次元化の手続きを用いれば、 $\underline{m}=1$, $\underline{k}=1/2$ であるので次式を得る。

$$\begin{aligned} \underline{T}_{trx} &= 2(\overline{\underline{u}^2} - \bar{\underline{u}}^2) \\ &= 2\{\sum \underline{u}^2/N - (\sum \underline{u}/N)^2\} \end{aligned} \quad (4.48)$$

ここで、 N はセル内分子の総サンプル数である。

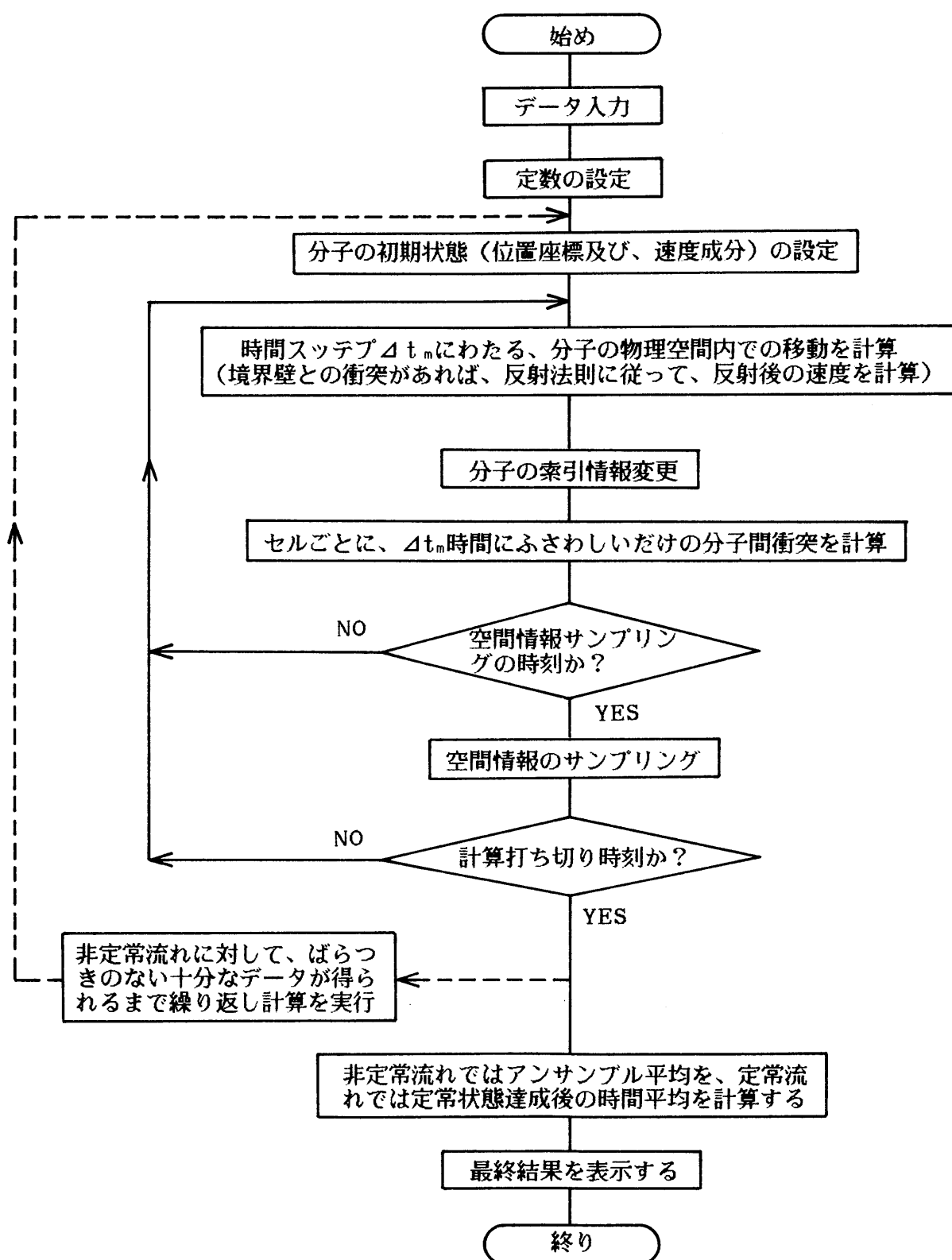


図4.1 モンテカルロ直接シミュレーション法の計算手順を示す流れ図

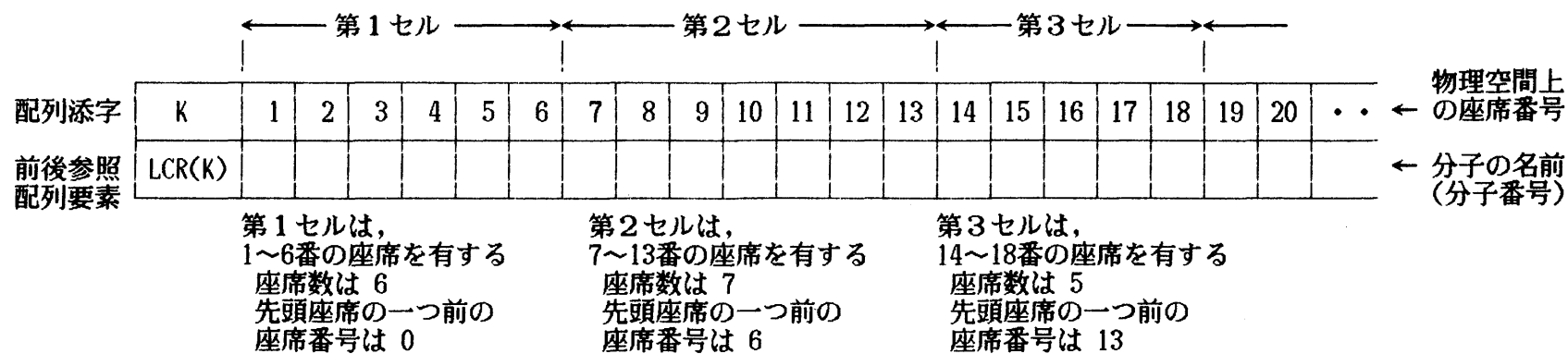


図4.2 前後参照配列 (Cross-Referencing Array) 上の、各セルに属する座席番号と分子名 (分子番号) の関係。
分子の速度成分等の情報は 別の配列に記憶されている。

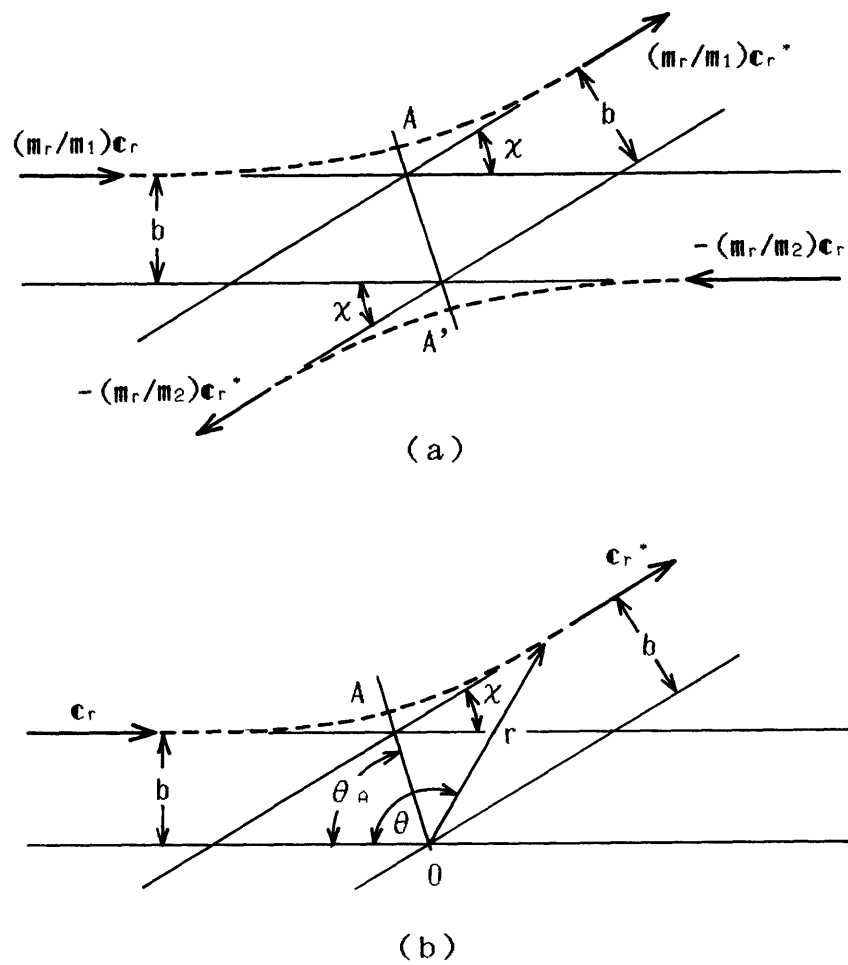


図4.3 二つの座標系における二体衝突

(a)質量中心座標系での二体衝突

(b)質量 m_2 の分子を固定した座標系での換算質量 m_r の運動

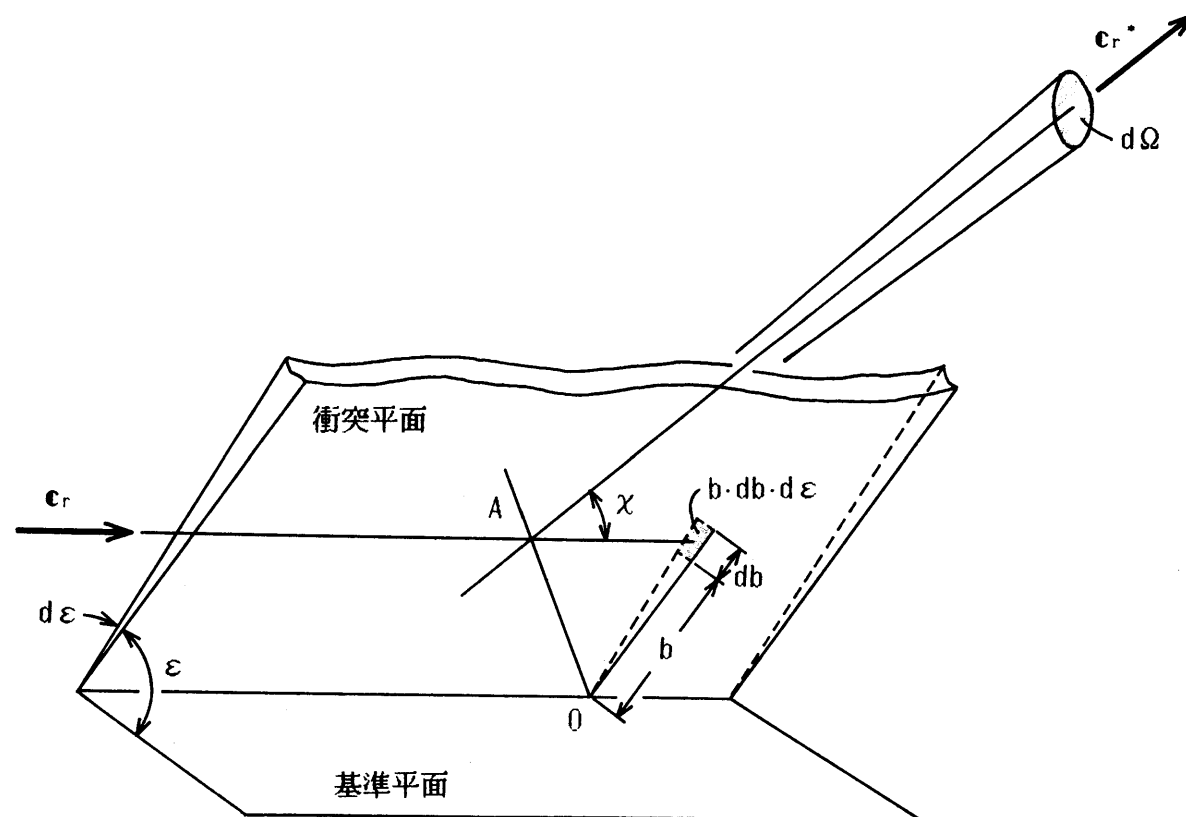


図4.4 衝突パラメータ b と ε

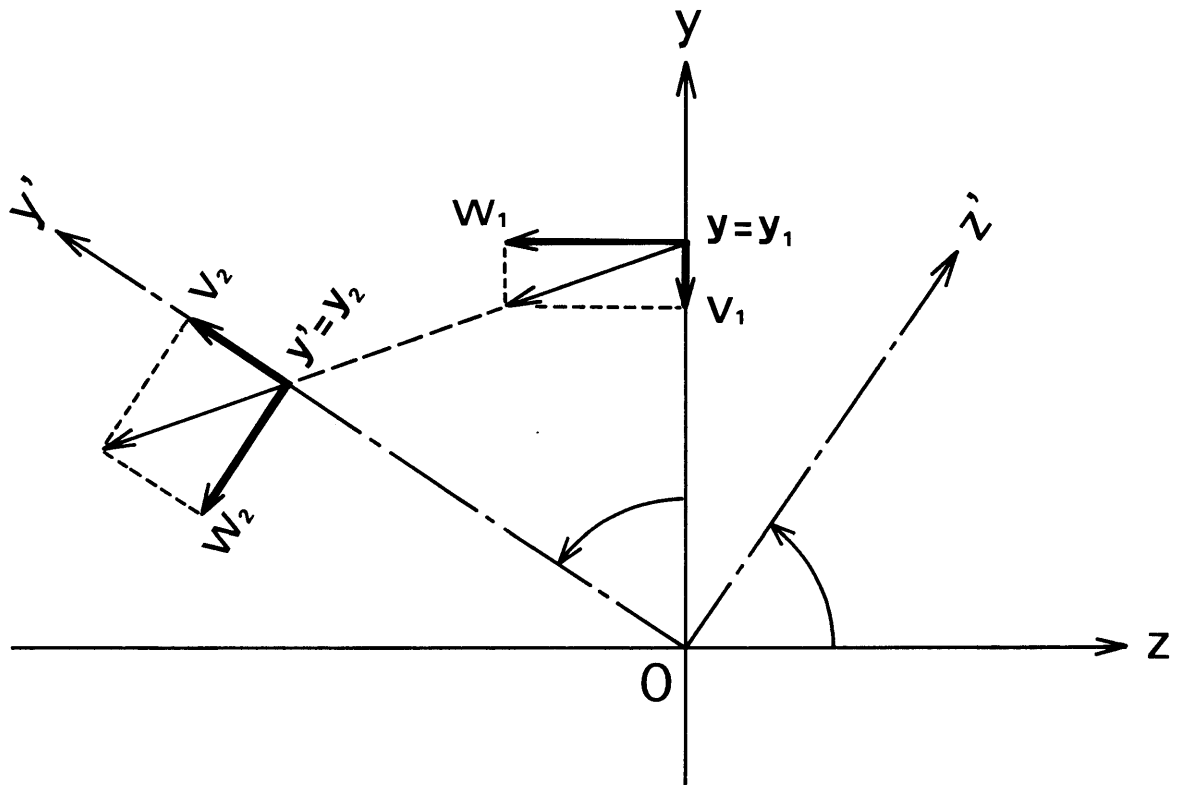


図4.5 軸対称な問題における座標回転による速度成分の変換。
移動前の半径方向および接線方向の速度成分 v_1, w_1 は、
移動後 v_2, w_2 に変換される。

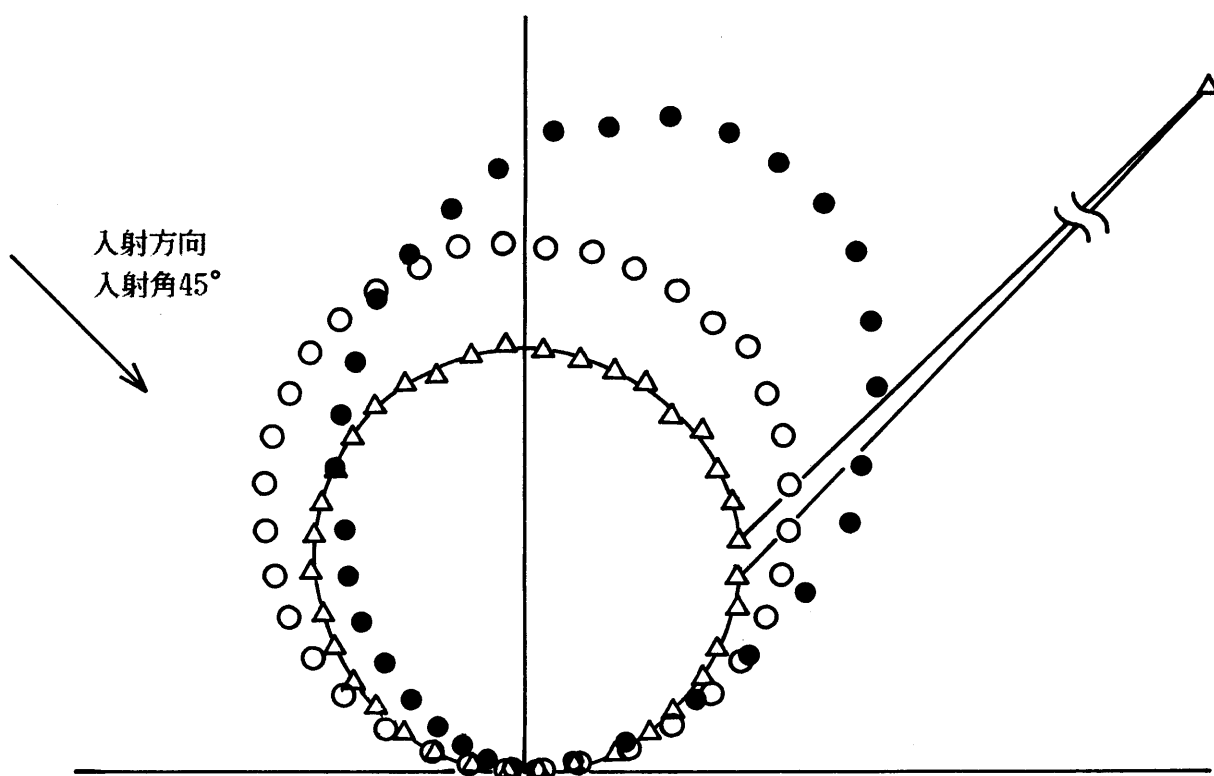


図4.6 適応係数 α を考慮した分子の壁面反射における二つの計算法の相違

- △ 拡散反射か鏡面反射かを α に応じた乱数により決定
(入射角に等しい反射角 45° の方向に極端に多くの分子が反射を起こす。他の方向は、余弦法則で分布)
- 拡散反射の場合の速度と鏡面反射の場合の速度を式(4.37)に応じて合成し、反射分子の速度とする
- 完全な拡散反射(余弦法則で分布)

```

C-----
C
C   LCR(K) is the cross-referencing array
C   NC is the total number of cells
C   NM is the total number of molecules
C   IC(1,N) contains the number of molecules in cell N
C   IC(2,N) contains "Starting Address - 1" for molecules of cell N in LCR(K)
C   IP(M) is the cell number in which molecule M lies
C
      DO 27 N=1,NC
27  IC(1,N)=0
C
      DO 28 M=1,NM
        N=IP(M)
28  IC(1,N)=IC(1,N)+1
C
        L=0
        DO 29 N=1,NC
          IC(2,N)=L
          L=L+IC(1,N)
29  IC(1,N)=0
C
        DO 30 M=1,NM
          N=IP(M)
          IC(1,N)=IC(1,N)+1
          K=IC(2,N)+IC(1,N)
30  LCR(K)=M
C
C-----

```

図4.7 前後参照配列 LCR(K) 上の分子の並べ替えに関する FORTRANプログラム

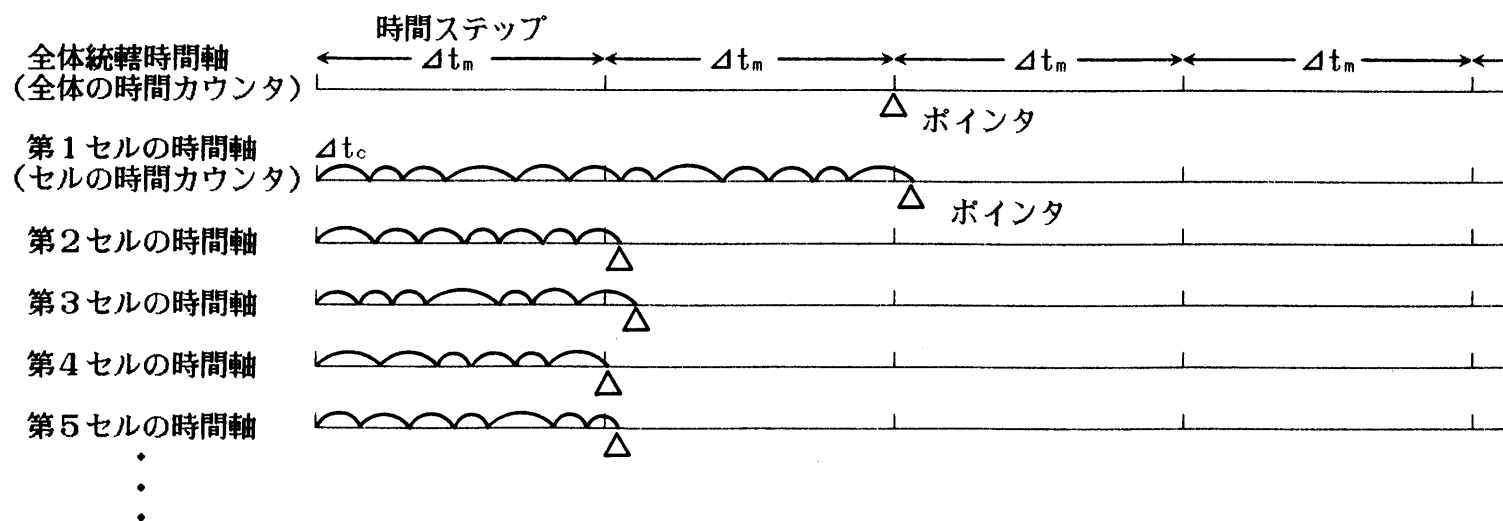


図4.8 セルタイム法における全体統轄時間軸と各セルの時間軸との関係。
この図は、2回目の時間ステップにおいて分子移動を終了した後、
第1セルの分子間衝突の計算まで終わったところ。

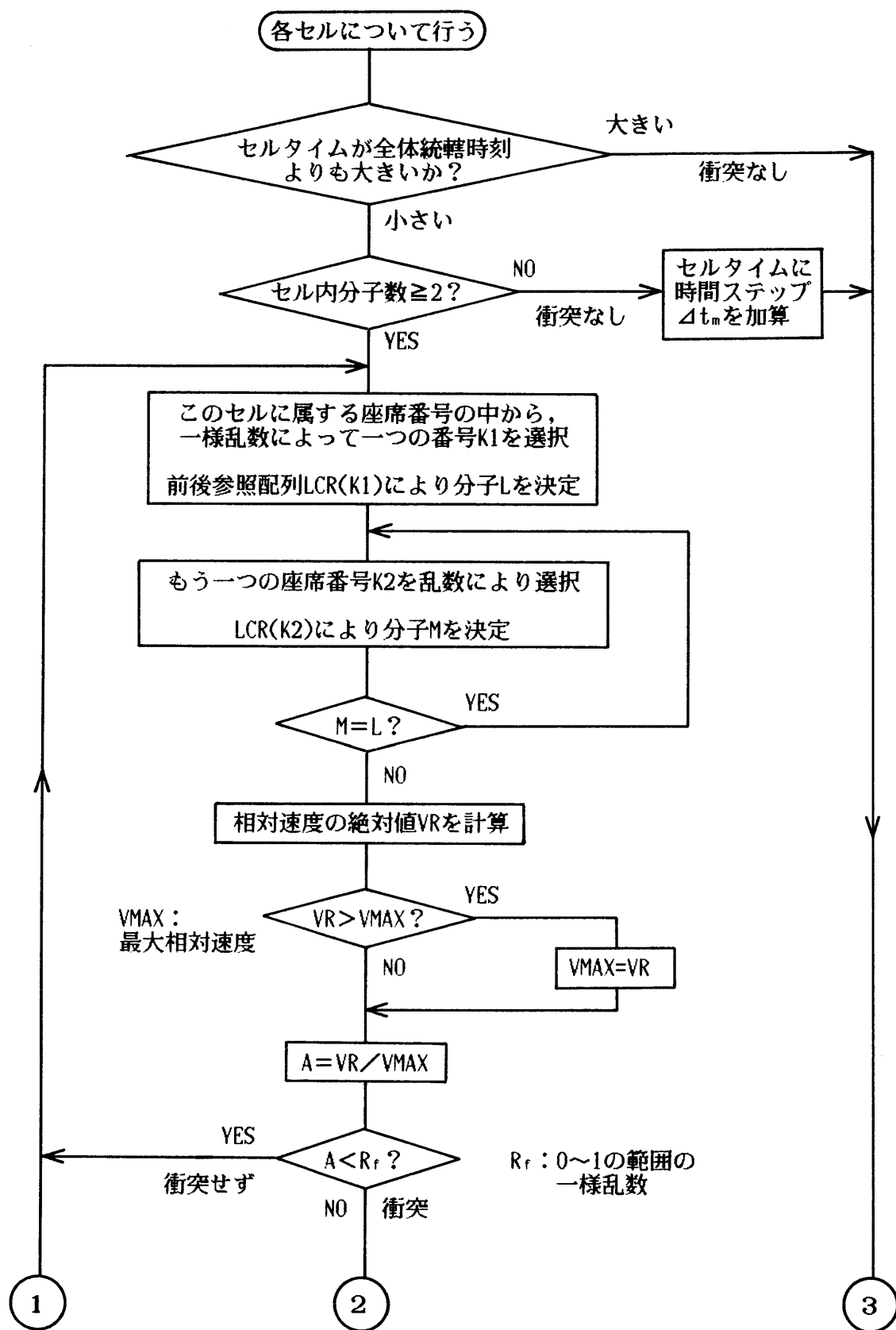


図4.9(a) 分子間衝突に関する計算の流れ図（その一）

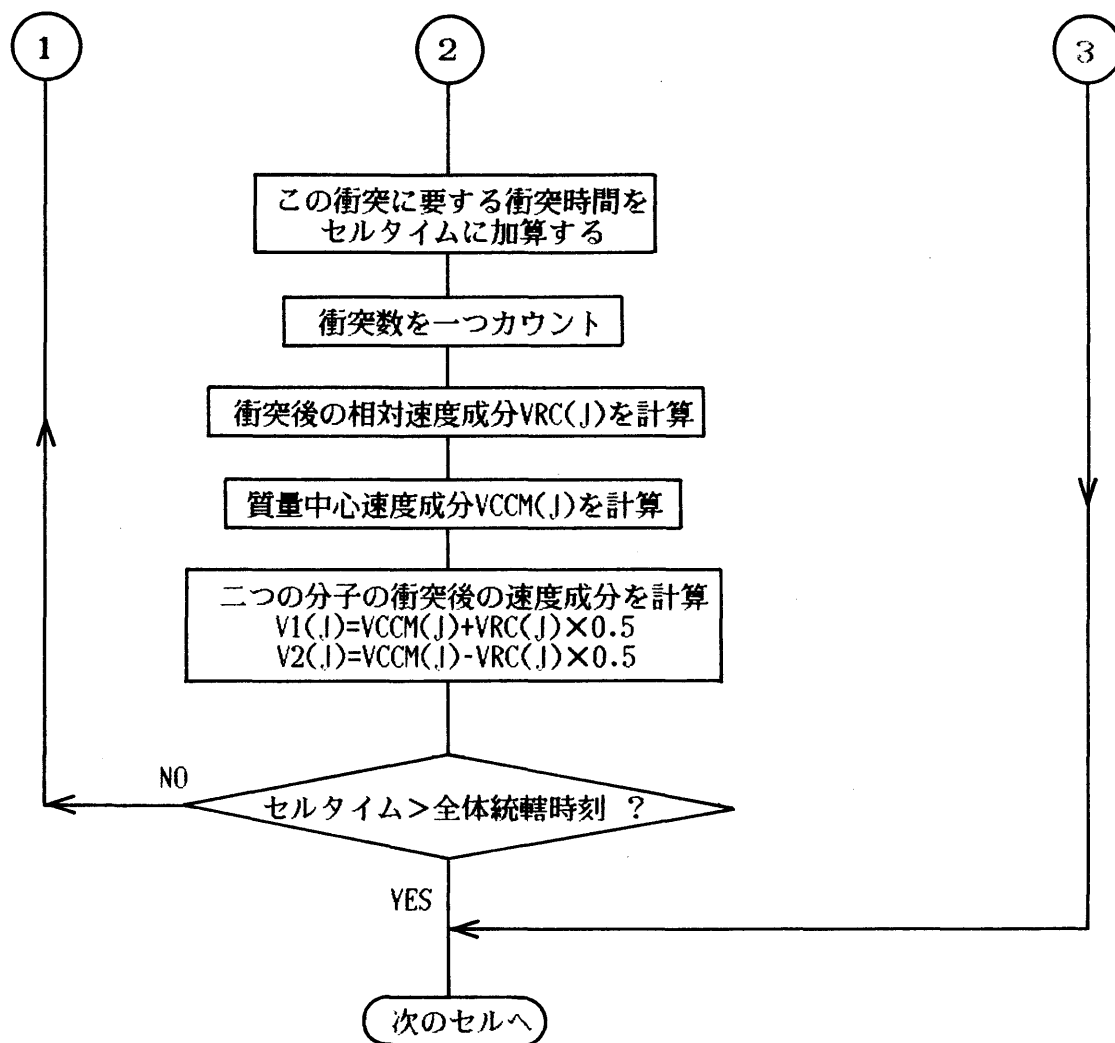


図4.9(b) 分子間衝突に関する計算の流れ図（その二）

第5章 スリットを通過する希薄気体のモンテカルロ直接シミュレーション (上流と下流との間で大きな圧力比を持つ場合)

5.1 緒言

円筒管あるいはスリットを通る希薄気体の流れに関する研究は、真空技術の基本となるものであり、分子線研究などに欠くことのできないものである。第2章及び第3章において、短い管路を通過する希薄気体の流動抵抗に関する実験結果を示したが、この実験結果を理論的な立場から検証するために、シミュレーション計算による解析を試みた。シミュレーションの手法としては、Birdによるモンテカルロ直接法⁽⁵⁸⁾⁽⁶⁰⁾を用いた。

今までに行った実験によれば、代表長さ l を、[穴の面積/周囲長さ]の4倍(等価直径)と定義したとき、穴の奥行き(穴板の厚み) l が代表長さより小さければ、スリットの場合と短い円筒管の場合とで、流動抵抗に関し、ほぼ類似した結果が得られている。一方、二次元スリット(z軸方向に無限大の長さをもつスリット)を通過する流れは純粋な二次元問題であるため、軸対称な三次元問題である円筒管通過の流れよりも、計算処理が比較的容易である。このような二つの理由から、本章のシミュレーションは、円筒管ではなく、二次元スリットを通過する流れに対して行った。

モンテカルロ直接法を行ううえで、まず問題となるのは、計算に要する時間と計算機容量である。穴を通過する流れをシミュレートする場合、上流境界から穴に至るまでの空間における一つ一つの分子の衝突が、全体として流動抵抗を決定する。したがって、精度のよい計算を行うためには、計算の対象となる空間を十分大きく取る必要がある(本シミュレーションでは、特に、上流側境界の大きさが重要となる)。一方、二次元問題においては、境界領域が2倍になると対象空間は4倍となり、計算時間および計算機容量は4倍以上になるという問題が生ずる。そこで、本研究では、対象空間を比較的小さくとっても、得られる結果に誤差が生じないように、境界領域から流入させる分子に、平衡状態のものではなく、境界面に垂直な方向に巨視的速度を加えたものを速度成分として与えて計算することを

試みた。

シミュレーションは，分子数約16000（剛体球分子モデル），セル数約800を用いて行われた．その結果は，実験によって得られた結果と比較され，良い一致の見られることが確認された．

5. 2 モンテカルロ直接法の準備

5.2.1 空間のセル分割

実際の計算に入る前に，まず，穴の下流側が，流動抵抗に関して，どの程度関与しているかを調べた．すなわち，穴の下流側の空間のみをセルに分割し，穴を通していったん下流側へ流出してきた分子のうち，再び上流側へ押し戻される分子の割合を調べた．その結果，本研究のように，上流・下流の圧力比が大きく変化する状態では，下流側において分子密度は急激に減少するために，下流での分子間衝突によって上流側へ押し戻される分子は非常に少なく，また，押し戻される分子のほとんどは，穴の出口付近に存在する分子に限られることが判明した．以上のことから，本シミュレーションでは，上流側の空間を大きく取り {スリット幅 a の1/2の大きさに対し，スリットに垂直方向 8倍($x_0=8 \cdot a/2$)，スリットに平行な方向 6倍($y_0=6 \cdot a/2$)を標準とした}，下流の空間は，穴の近傍の小さな領域に限定した．

セルの大きさの決め方としては，ほとんどの場合，セルの一辺の大きさが上流側境界における平均自由行程よりも小さいか等しくなるように取った．しかし，計算機容量の都合で，クヌッセン数 Kn が1/16より小さい状態では，必ずしもそうになっていない場合もある．なお，クヌッセン数の大きい状態においては，上流側境界の平均自由行程がどれほど大きくなろうとも，セル一辺は，最大，スリット幅の1/4より大きくとることは避けた．図5.1 に， $1/Kn=16$ の状態の厚みなしスリットにおいて，セル一辺を上流境界の平均自由行程と等しく取った場合のセル配置を示す．上述したように，下流側で分子密度が急激に減少するので，図5.1 において，計算機上のセル内分子数が 20個を大きく下回ることを防ぐために，下流では，穴から遠ざかるにつれてセル一辺を等比級数的に大きくする方法を採用した．

5.2.2 境界条件と流入分子数

シミュレーションの対象となる空間は、セルに分割されるが、それ以外の空間は、何らかの平衡状態にあると仮定した。本計算では、下流側境界の外では完全真空であると見なし、下流側境界から対象空間へ流入する分子はないものとした。すなわち、この下流境界を通過して流出した分子数から、このシミュレーションにおける流量が算出される。

一方、上流側境界の外側は、その境界が穴から十分遠い位置にとられた場合には、一定温度・圧力における平衡状態と考えられるので、そこから対象空間へ単位時間、単位面積当りに流入する分子数 $N_{1\infty}$ は、式(5.1)によって与えられる。

$$N_{1\infty} = (1/4)n_1\overline{c'} \quad (5.1)$$

ここで、 n_1 は上流境界における分子数密度、 $\overline{c'}$ は分子の熱運動速度の平均である。しかし、境界が穴から比較的近い位置にとられた場合には、上流側境界の外から流入する分子の速度分布および流入分子数に、平衡状態からのずれを考慮に入れた修正を加える必要がある。

5.2.3 流れのコンダクタンス

真空技術で取扱う流量 \dot{Q} は、(体積×圧力)の形で表されることが多く、温度一定の下で質量流量に比例する。また、コンダクタンス F (流動抵抗の逆数に相当、流れやすさを示すもの)は、 \dot{Q} を用いて、式(5.2)によって定義される。

$$F = \dot{Q}/(P_1 - P_2) \approx \dot{Q}/P_1 \quad (5.2)$$

ここで、 P_1 は上流境界での圧力、 P_2 は下流境界での圧力であり、本計算では、 $P_2 \approx 0$ とみなしている。コンダクタンス F は、厚みのない穴を通過する自由分子流状態のコンダクタンス

$$F_{fmo} = (1/4)\overline{c'}A \quad (5.3)$$

で無次元化して表現するのが一般的である．ここで， A は穴の断面積である．

今，定常状態に達したのち，下流境界の外へ流出する流量を \dot{Q}_2 ，そのときの流出分子数を穴の断面積で除したものを N_2 とすれば，コンダクタンス F は次のように書ける．

$$F = \dot{Q}_2 / P_1 = m N_2 A R T / (\rho_1 R T) = (N_2 / n_1) A \quad (5.4)$$

ここで， m は分子の質量， ρ_1 は上流境界での密度である．

したがって，式(5.1)(5.3)(5.4)より

$$F / F_{fmo} = N_2 A / \{(1/4) n_1 \overline{c^2} A\} = N_2 / N_{1\infty} \quad (5.5)$$

となる．このように，無次元化されたコンダクタンスは，上流境界からの流入分子数と，下流側境界外への流出分子数とから簡単に算出される．

5.2.4 衝突分子ペアの選択

第4章で示したように，衝突分子ペアの選択は棄却法によって行われる．棄却法を用いるにあたっては，セル内分子ペアの最大相対速度をあらかじめ定めておく必要があるが，あまり大きな値を用いると分子選択の計算に時間がかかりすぎ，逆に，小さな値では誤差が大きくなってしまう．Birdの方法は，最初，平均相対速度の2倍を最大相対速度として与え，シミュレーションの途中でそれより大きな相対速度が出てきた場合には，その値を新しい最大値として計算を続けるものである．しかし，この方法では，万一，起こりそうもないような大きな相対速度が生じた場合，それ以後の計算に多大の時間が必要となる恐れがあり，また，この前後で棄却法の基準値が変化するので，これによる誤差も考慮しなければならない．今回のシミュレーションでは，最初はBirdと同様に，平均相対速度の2倍を最大値として与えるが，連続して選ばれた1000対の分子ペアから計算された相対速度の中で，2回以上，設定した最大値より大きなものが現れたときにのみ最大相対速度を変更し，しかも，変更1回あたりの増加分は，平均相対速度の値を越え

ないようにするという条件を付加した。この方法でも、計算の最初と最後では最大相対速度の値に差を生じるが、今回は定常問題を対象としているので、流れの状態が定常に達し時間平均の算出が始まるまでに、最大相対速度はほぼ一定した値になり、それ以後の増加はわずかなものであることが確認されている。

5.3 二次元スリット空間上での分子の移動

希薄気体流の様々な問題にモンテカルロ直接法を適用する場合の基本的な計算法については、第4章で詳しく述べた。個々の問題で考えなければならないのは、その問題の物理空間の幾何学形状に応じて、分子の移動を処理する部分のプログラムを作成することにある。この節では、二次元スリット問題に対する分子移動の計算がどのように行われているかについて詳細に述べる。

二次元スリット問題における物理空間は、基本的に、三つの空間に分割される。第一はスリットの上流側空間、第二はスリット内部の空間、そして、第三に下流側空間である。図5.2に、それら空間の各点の位置を表す変数名を示した。また、図5.2には、以下の説明及び分子移動に関する流れ図（図5.3(a)～(d)）で用いられる変数の意味も示されている。

5.3.1 最初から対象空間に存在している分子の移動

上記の三空間のいずれから出発する分子に対しても、まず、境界壁が全くないものとして、その速度と時間ステップ Δt_m とから、仮の移動後の位置を算出する。ここで取り扱うスリット流れは中心軸（ x 軸）に対称であるため、もし、移動後の y 座標が負になるような場合には、 x 軸に関する対称性を保つために y 座標と y 方向速度成分を反転させ、あたかも、分子が $y < 0$ の領域から飛んで来たように考える。そのために、出発点の y 座標も反転させる。（これらの操作は、分子を中心軸上で鏡面反射させたのと同じものである。出発点の y 座標の反転は、後の計算を容易にするために行うと考えてもよい。）このあと、三つの空間における分子移動に関しては、それぞれ、異なった処理を行う。

①上流側空間内での分子移動（図5.3(a)(b)）

上流側空間を移動する分子は、まず、スリット入口のx座標 SZA（上流空間に面したスリット壁面のx座標と同じ）まで移動するかどうか調べられる。もし、分子が SZA まで移動しなければ、壁との衝突も、あるいは、スリット内部への流入も起こらない。その場合には、上流側境界の外へ逆流出していないかどうかを調べ、外部へ飛び出した場合には、上流境界からの流出分子カウンタを一つ進める。上流境界を飛び出していない場合には、その分子の移動は上流空間内で終了したものとなる。

一方、分子がスリット入口のx座標 SZA 以上に移動している場合には、まず、分子が SZA に達した時点でのy座標とそこに至るまでに要した時間を計算する。そのy座標が、スリット幅の1/2よりも大きければ、分子はスリットの上流側壁面と衝突したか、あるいは、そのときすでに上流境界外へ飛び出していたかのどちらかである。上流境界外に流出していない場合には、分子と壁面との反射法則にしたがって反射後の速度成分を計算し、それに残り時間を掛け合わせた位置まで分子を移動させる。もしその移動位置のy座標が負の場合には、前と同じ鏡面反射の操作を行う。その後、上流境界外への移動か、あるいは、上流空間内での移動かを計算する。スリット入口のx座標 SZA における分子のy座標がスリット幅の1/2よりも小さい場合には、スリット内部の空間へ分子が流入したものである。その場合、スリット内部への流入分子カウンタを一つ進め、スリット内部空間における分子移動処理ルーチンに入る。図5.4(a)に、上流空間内移動における種々の移動をそれぞれ矢印で示した。

②スリット内部空間内での分子の移動（図5.3(c)）

スリット内部空間内での計算は、まず、分子の移動後のy座標が、スリット内部壁面の位置するy座標 EZA よりも大きいかどうかの計算から始める。分子のy座標が、EZA より小さい場合には、そのときのx座標を調べることで、次のいずれに該当するかによって、それにふさわしい処理を行う。(a)上流境界外へ流出する場合、(b)上流空間内へ移動する場合、(c)スリット内部空間にとどまる場合、(d)下流空間内へ移動する場合、(e)下流境界外へ流出する場合。

一方、分子移動後のy座標が、スリット内部壁面のy座標 EZA より大きい場合には、その壁面で衝突を起こす可能性があるため、分子が EZA まで移動した時点で

の x 座標を調査する．その x 座標が，スリット内部壁面の占める x 座標の範囲内 $SZA < x < SOZA$ にある場合には，壁面で衝突を生じたものであるので，反射後の分子の速度成分と残りの移動時間とを計算し，それらの値から新しい移動場所を算出する．そして，再度，スリット内部空間内移動の計算ルーチンの先頭に戻る．分子移動後の y 座標が EZA より大きくとも，壁面との衝突が生じない場合には，次の4通りの可能性 {(g)上流境界外へ流出する場合，(h)上流空間内に移動する場合，(i)下流空間内に移動する場合，(j)下流境界外へ流出する場合} があるので，それぞれにふさわしい処理を行う．図5.4(b)に，スリット内部空間内移動における種々の移動をそれぞれ矢印で示した．

③スリット下流側空間内での移動 (図5.3(d))

下流側空間での分子の移動は，上流側空間における分子移動の計算と基本的には全く同じであるので，詳しい記述は省略する．下流境界の外へ分子が移動した場合には，その流出分子カウンタを進める．この流出分子数が，質量流を算出する場合の基礎となるものである．

なお，個々の分子の空間内移動が終了するごとに，その分子がどのセルに属することになったかを調べ記憶する．

以上の計算において，分子が，スリット入口の x 座標 SZA あるいはスリット出口の x 座標 $SOZA$ から出発する場合には，上流側空間あるいは下流側空間内での移動として計算を行うべきで，スリット内部空間での移動として計算すべきでない．また，壁との衝突に関して，分子が壁面の存在する位置を越えたときにはじめて衝突が起こるとするのが良い（壁面の座標と等しい位置では，まだ衝突しないとする）．これらは，いずれも，無限ループに陥るのを防ぐために必要である．

5.3.2 上流境界から流入する分子の移動

上流境界から流入する分子の移動の計算は，空間内に存在する分子の移動計算が終了した時点で行うのが望ましい．分子の位置座標あるいは速度成分などの情報を記憶すべき配列変数には限度があるので，境界外へ流出した分子についてのそれら情報の記憶場所が空きになった後で，新しく流入する分子に対する移動の

計算を行うことにより，記憶場所の効率のよい利用ができるからである．

分子移動の計算は，最初から上流側空間内にある分子の移動とほとんど同様の処理で行われる．ただし，境界から流入する分子については，時間ステップ Δt_m 時間が，すべてこのシミュレーション空間内の移動時間として費やされるとは限らない（流入分子は，境界面より遠くの位置から飛んで来るので，このシミュレーション空間に至るまでに時間を消費している）ので， Δt_m の乱数倍（乱数は，0～1 の範囲の一様乱数）を実際の移動時間として与える．

5. 4 計算結果及び考察

5.4.1 上流側流入境界の有限性を考慮しない場合の計算結果

図5.5 に，上流境界の有限性を考慮せず，境界から流入する分子を完全な平衡状態の速度分布に基づいて発生させ，シミュレーションを行って得られた結果を示す．ここで，クヌッセン数 Kn は上流境界の平均自由行程 λ を代表長さ L で除したものである．ただし，代表長さとしては等価直径を用い，二次元スリットにおいては，次式で示すように， L はスリット幅 a の 2 倍となる．

$$L = 4\{a \cdot b / 2(a+b)\} \doteq 4\{a \cdot b / 2b\} = 2a \quad (5.6)$$

ここで， b はスリット横幅であり， $b \gg a$ である（図5.6参照）．

図5.5 中， C/L は，上流側空間を分割するセル一辺の大きさ C と 代表長さ L との比を表したものである．さらに， l は，スリットの奥行き（厚み）を表し，この図5.5 では，厚みなしの場合 ($l=0$) を示している．図中，実線は，ナイフエッジで作製した，スリット幅 $a=0.473\text{mm}$ ，横幅（ z 軸方向長さ） $b=30.0\text{mm}$ のスリットで，空気を用いて得られた実験値である．自由分子流に近い領域では比較的良い一致を示しているものの， $1/Kn$ が大きくなるにつれて，計算値は実験値よりも小さな値となり（このナイフエッジによるスリットは，完全に厚みゼロではないので，全体的に，計算値は実験値より大きな値になるべきものである），その差異は大きくなっていく．この理由は，上流側境界を穴から有限の位置に取ったにもかかわらず，境界条件として式(5.1)を採用したことにあると考えられる．すなわち，

上流境界を通過して流入する総分子数を ΣN_1 ，その境界を逆戻りして流出する総分子数を ΣN_3 とし，下流側境界外へ流れ去る総分子数を ΣN_2 とすれば，定常状態においては，

$$\Sigma N_1 = \Sigma N_2 + \Sigma N_3 \quad (5.7)$$

が成立しなければならないが，一方，上流側境界で平衡状態が成立していると考えれば，

$$\Sigma N_1 \approx \Sigma N_3 \quad (5.8)$$

も満足されねばならない．もし，上流境界が穴から無限遠のところであれば，式(5.8)および式(5.1)は成立するが，本計算では，上流境界が穴から有限の距離にあり，この境界が有限の大きさであるため，これらは成立しない．このように，図5.5 で得られた結果に差異を生じているのは，上流境界で平衡状態の条件が満足されていないためと考えてよいであろう．すなわち，このシミュレーションにおいては，上流境界から流入する分子の速度分布は完全な平衡状態のものでなく，それに何らかの補正を加えたもので与えられるべきであることを意味している．

5.4.2 上流境界から流入する分子の速度分布の補正

有限の位置に上流境界をとった場合（上流境界の大きさが有限の場合），境界において無視できない巨視的速度を生ずるために，流入分子は，流れの方向にかたよった速度分布を持つであろう．したがって，上流境界の外で発生させる分子に平均速度ゼロからのずれを与えて計算を進める必要がある．そこで，境界面に平行な速度成分に関しては平衡分布を与えるが，垂直な方向の速度成分に関しては，巨視的速度 c_0 を持った局所的平衡状態の速度分布として式(5.9)を仮定し，この分布（平衡分布を全体的に正の方向に c_0 だけずらした分布（図5.7））により分子に速度を与えることを考えた．

$$f_{\perp} = (\beta / \sqrt{\pi}) \exp\{-\beta^2(c - c_0)^2\} \quad (5.9)$$

ここで、 f_{\perp} は、境界に垂直な方向の速度分布関数を表し、境界面がx軸に平行の場合にはy方向速度成分に、y軸に平行の場合にはx方向成分に対応する。また、 β は最大確率速度の逆数である。

さて、巨視的速度 c_0 を流入分子に与える場合に、シミュレーションにおける物理的な境界の他に、仮想的な上流境界を考える必要がある。すなわち、 c_0 は、流入分子の発生位置が穴に近づくほど大きな値になるが、上流境界面に流入する分子は、平均的にみて、実際の境界から平均自由行程の1/2 だけ外側へ離れた位置「仮想境界」から飛来すると考えられる（ここで言う平均自由行程とは、正確には、境界に垂直な方向に関する自由行程の平均を考えたものである）。したがって、その仮想境界の位置で、局所的平衡状態にある分布関数を考え、連続の条件が成立するように巨視的速度（分布関数を正の方向にずらす量） c_0 を決定した（流入分子数の計算は、分布関数の値に垂直方向の速度成分を掛け、それを積分して計算される。対象空間へ流入する方向に向かう気体の流量と逆方向の流量とが、仮想境界における巨視的速度によって、平衡状態の流量の何倍になるかは、あらかじめ計算され、表として記憶される。その一部を、表5.1 に示す）。連続の条件を用いるためには、下流側へ流出する分子数があらかじめ与えられていなければならないが、これはシミュレーションの結果として得られるべきものである。したがって、シミュレーションを繰返し、逐次近似の方法で求めていくことが必要であるが、近似的な予測値による一回の計算でほぼ良い結果の得られることが、実際の計算により判明した。クヌッセン数が小さい連続流に近い状態では、分布関数を考える仮想境界の位置とシミュレーションにおける実際の上流境界とは、ほぼ一致するが、クヌッセン数が大きい自由分子流状態では、分子は無限遠から飛んで来ることになる。このように、自由分子流状態に近づくほど、あるいは、境界をスリット穴から遠ざけるほど、この巨視的速度による補正量は小さくなる。逆に、連続流に近づくほど、分布関数の補正が結果に大きく影響を与える。したがって、もし、上流側空間の領域の取り方の大小によって、連続流に近い状態の計算結果に差異が現われなければ、この補正は一応有効と認められるであろう。

5.4.3 流入分子速度分布の補正を行った場合の計算結果

図5.8 に、上流側境界から流入する分子に、上述したような速度分布の補正を行ってシミュレーションした場合の結果を示す。ナイフエッジで作られたスリットの実験値に対して、 $l/a=0$ （厚みなし）の場合と、 $l/a=0.025$ の場合のシミュレーション結果が比較して描かれているが、 0.025 の方の値にほぼ良い一致を示している。これは、実験に用いたスリットが、必ずしも厚さゼロではないことから、このような結果になったものであろう。図5.9 は、 $l/a=1.0$ の形状のスリットに対し、分子のスリット壁面における 適応係数 α が、 1.0 （完全な拡散反射）の場合と 0.93 （部分的に鏡面反射の性質を含む）の場合についてシミュレーションを行い、結果を比較したものである。コンダクタンスは、全体的に、 $\alpha=0.93$ の方が大きな値となっており、連続流に近づくほどその差は大きくなる傾向にある。図には、真ちゅうで作製したスリットを用いて行った実験値が描かれているが、その実験との比較においては、 $\alpha=0.93$ の方により近い結果となっている。なお、いずれのシミュレーションでも、定常状態達成後における下流側への流出分子総数は 10000個以上で計算しており、信頼係数 0.95 としたときの結果の誤差範囲（母平均の信頼区間）は、いずれも $\pm 2.5\%$ 以内（ほとんどの場合 $\pm 2.0\%$ 以内）であった。図5.8, 5.9 における $\square \cdot \triangle \cdot \circ$ 印などは、セルによる空間分割の細分化の程度が異なることを示すもので、セル一辺の長さと代表長さの比 C/L でそれを表現している。クヌッセン数の逆数が大きくなるほど、対象空間を細かなセルに分割している。

図5.10 は、クヌッセン数が小さい状態（連続流領域に近い状態）において、シミュレーションの結果が、上流側空間の領域の大きさの取り方によって、どのように影響を受けるかを調べたものである。スリット幅の $1/2$ の大きさに対し {x方向8倍, y方向6倍} の領域による計算結果と {x方向5倍, y方向5倍} の領域による結果とを比較したところ、大きな差は生ぜず、誤差の範囲内にとどまることが判明した。また、図5.11 は、 $1/Kn=8$ の場合の厚みなしスリットに対する計算結果が、上流境界の大きさ $\{x_0+y_0\}$ によってどのように変化するかを調べたものである。 $a/2$ の大きさに対して、上流境界を4倍から32倍の範囲で変化させてシミュレーションを試みたが、統計的誤差範囲内ではほぼ一致した結果が得られた。これらはいずれも、本計算で行った 上流境界の外で発生させる分子の速度分布補正が、十分有効であることを示すものである。

さて、連続流に近い状態でのセルによる空間の細分化に関して、本計算では、 $C/L=1/16$ を多く採用している。この場合、 $1/Kn>16$ では、空間を分割するセル一辺の長さは、上流境界の平均自由行程よりも大きいことになるが、その結果は、ほぼ満足できるものであった。

5. 5 結論

[1] モンテカルロ直接法を用いたシミュレーション計算によって、大きな圧力比でスリットを通過する希薄気体の流動抵抗に関する解析を行い、満足できる結果を得た。

[2] 上流側空間の有限性から生じる計算誤差の補正に関しては、上流側境界から流入する分子に、平衡状態の速度分布を与えるのではなく、境界面に垂直な方向の巨視的速度を加えたものを与えることが有効である。

[3] 希薄気体の質量流を詳細にシミュレーションする場合、分子の境界壁面における反射法則（たとえば拡散反射と鏡面反射の割合）を考慮して計算を行う必要がある。この反射過程の相違は、自由分子流領域よりも、中間流領域における流動抵抗に より大きな効果を及ぼす。

[4] $1/Kn>16$ の状態（連続流に近い状態）においては、空間を分割するセル一辺の大きさを、上流側境界における平均自由行程よりも大きくとったが、ほぼ有効にシミュレーションできた。

今回の計算は、剛体球分子を用いて行ったが、今後 これを、VHS (Variable Cross-Section Hard Sphere)モデル⁽⁶⁰⁾を応用した分子モデルなどに適用すれば、内部エネルギーの変換過程等の幅広い応用が期待できるであろう。

本研究で得られた多くの結果は、記憶容量約600Kbiteのマイクロコンピュータで計算されたものであるが、その他に、名古屋大学大型計算機センターおよび岡崎国立共同研究機構分子科学研究所・電子計算機センターを利用した。

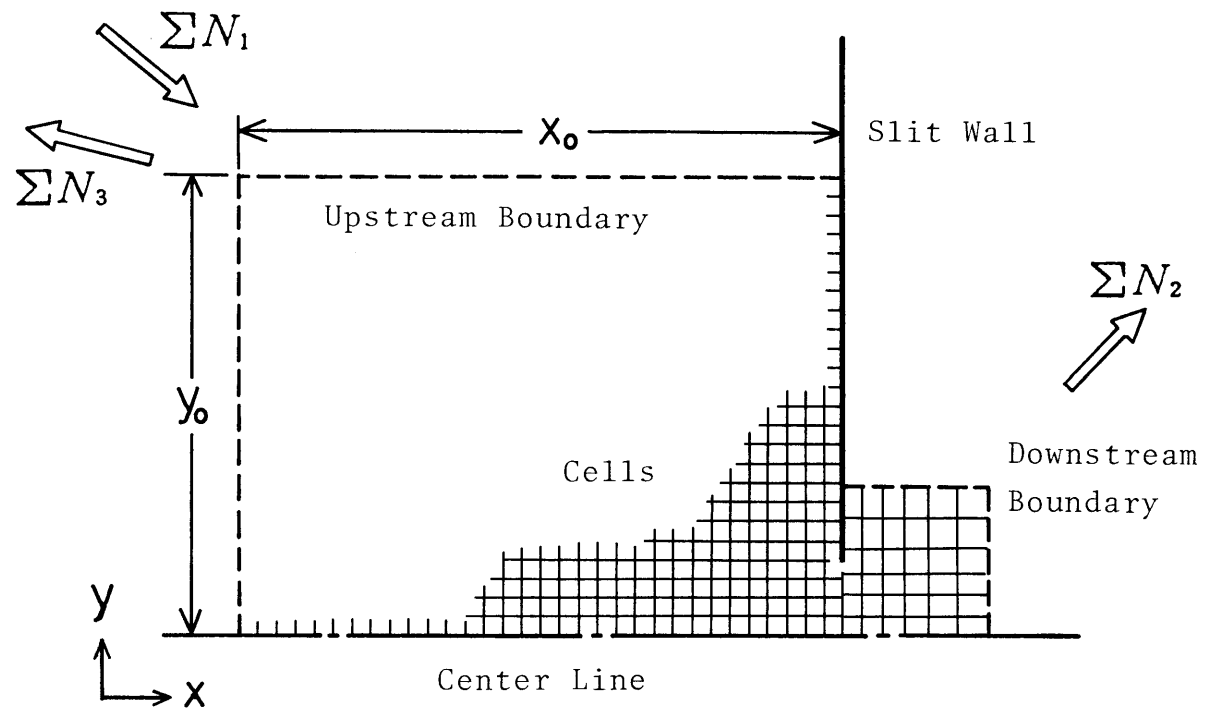
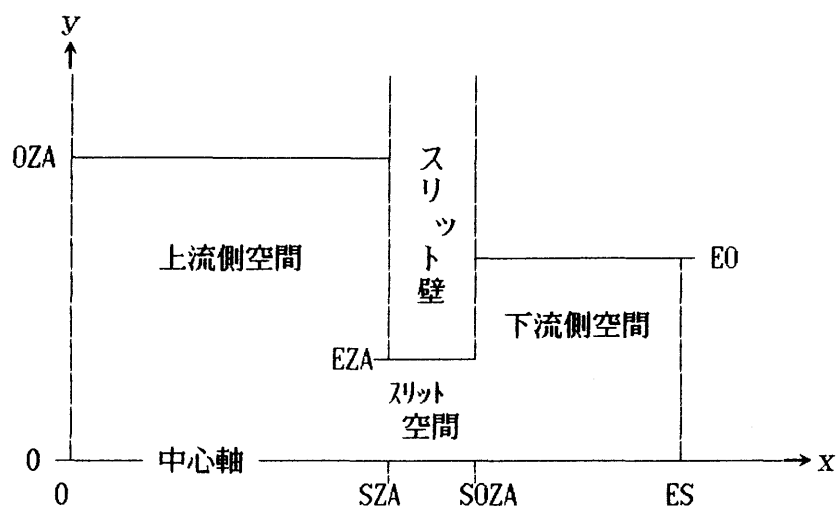


図5.1 シミュレーション空間のセル分割



SZA: 上流空間に面したスリット壁面のX座標
 SOZA: 下流空間に面したスリット壁面のX座標
 ES: X軸に垂直な下流境界のX座標
 E0: Y軸に垂直な下流境界のY座標
 EZA: スリット内部の壁面のY座標
 OZA: Y軸に垂直な上流境界のY座標
 (X軸に垂直な上流境界のX座標=0)

$\Delta t_m = \text{DTM}$: 時間ステップ
 DTT: 分子の移動時間
 PZ1(N): 分子NのX座標
 PZ2(N): 分子NのY座標
 P1(N): 分子NのX方向速度成分
 P2(N): 分子NのY方向速度成分
 P3(N): 分子NのZ方向速度成分

図5.2 分子移動に関するプログラムに用いる変数名

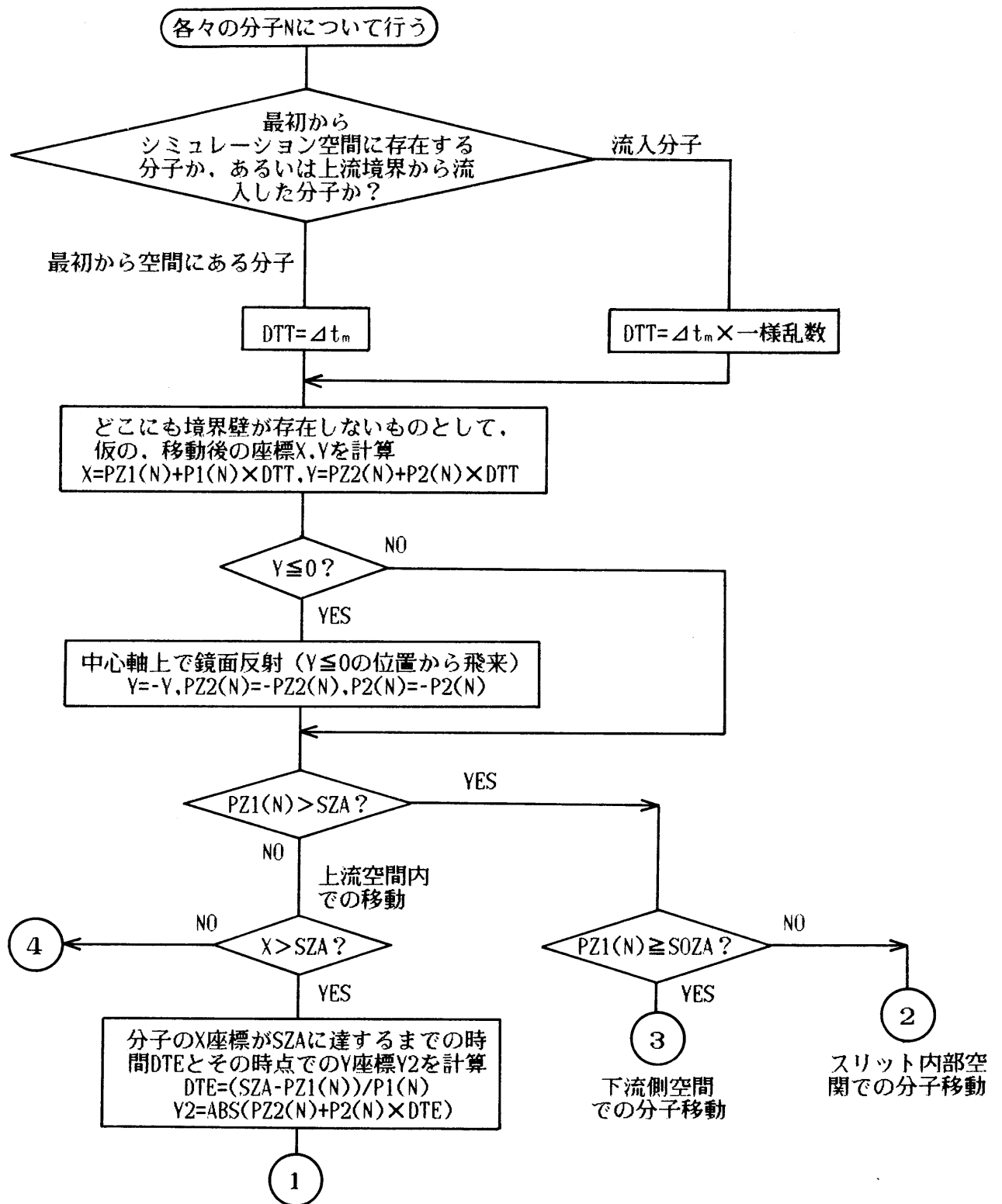


図5.3(a) 二次元スリット空間上での分子移動に関する流れ図 (その一)

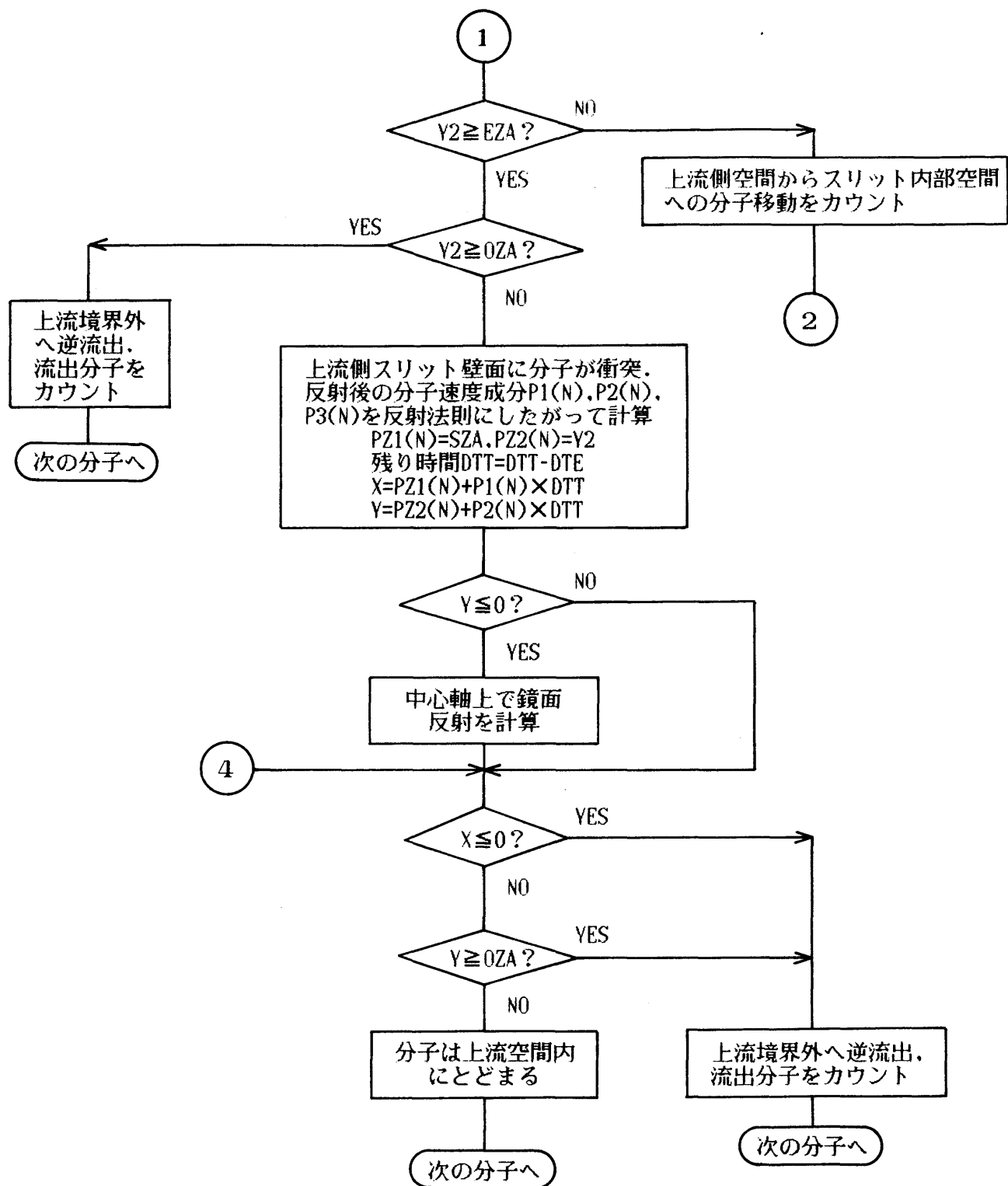


図5.3(b) 二次元スリット内部空間上での分子移動に関する流れ図（その二）

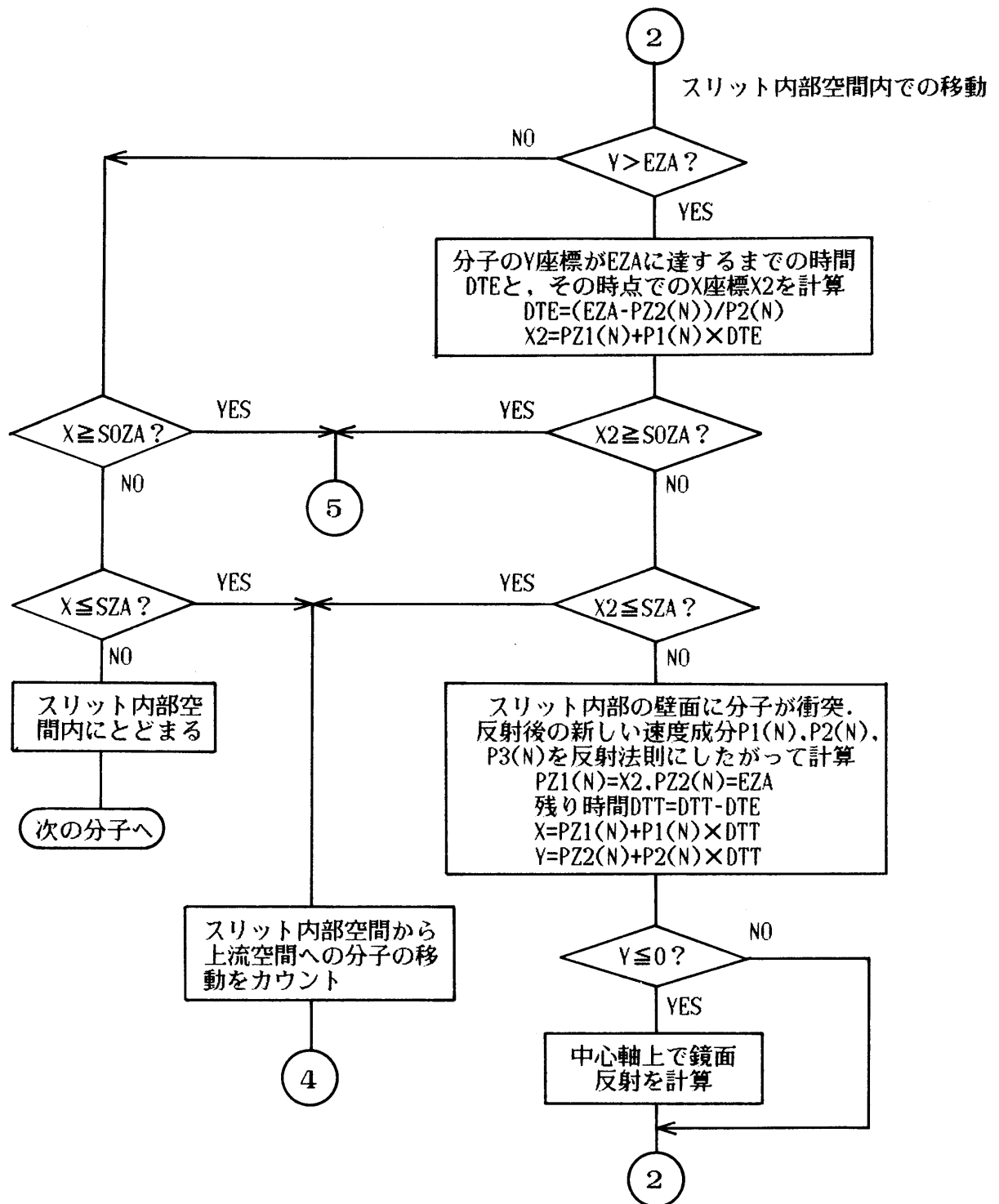


図5.3(c) 二次元スリット空間での分子移動に関する流れ図（その三）

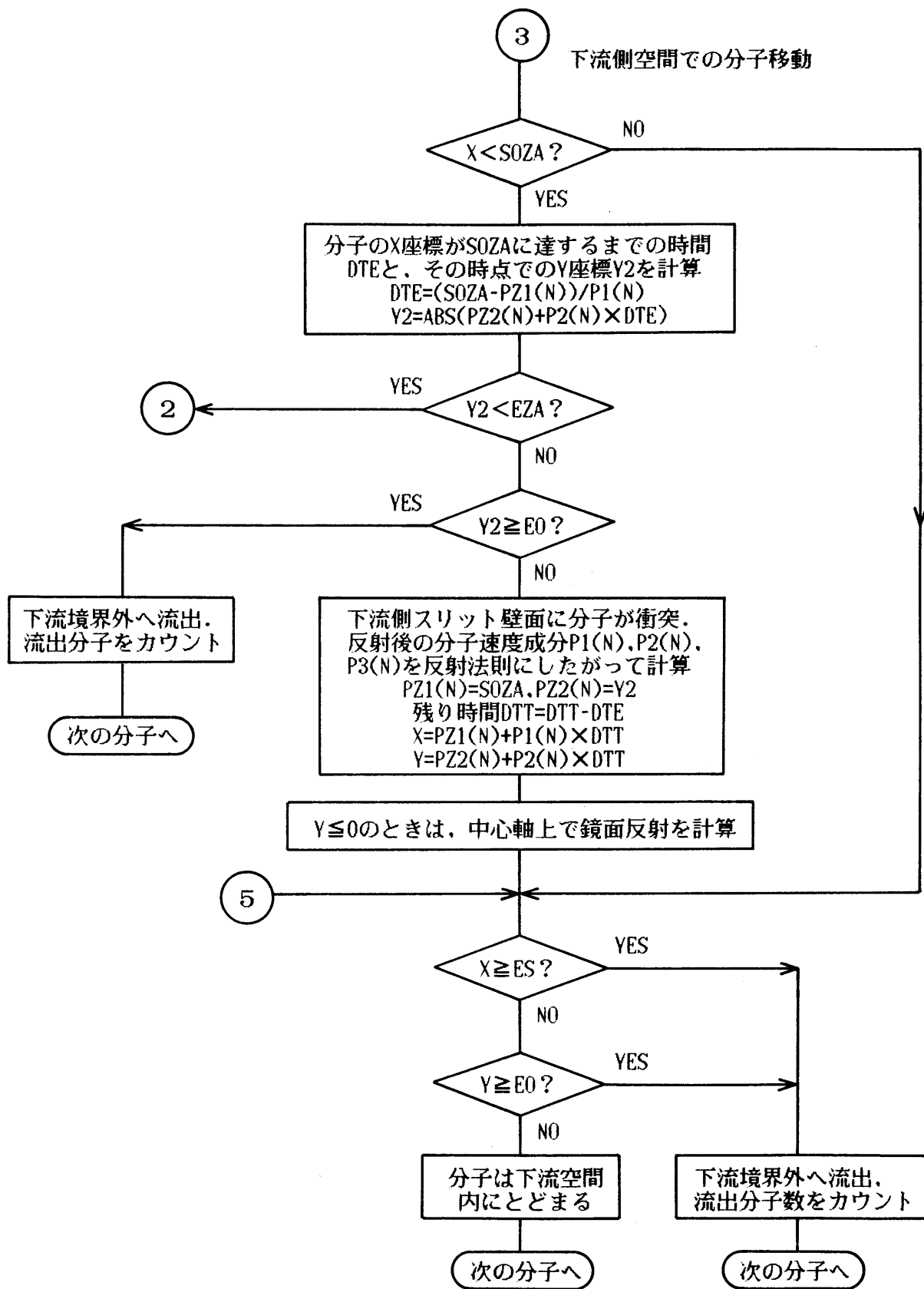
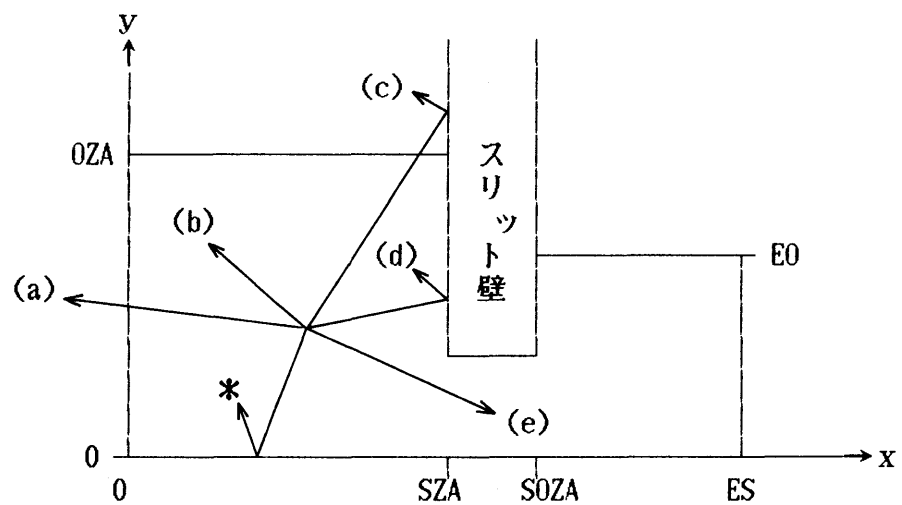


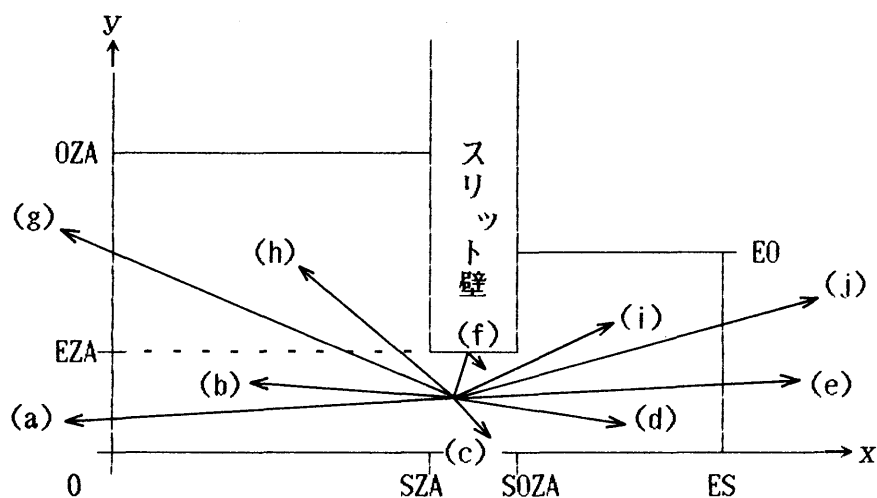
図5.3(d) 二次元スリット空間での分子移動に関する流れ図（その四）



- (a) 上流側境界の外へ逆流出（上流側スリット壁面に衝突せず）
- (b) 上流空間内で移動を終了
- (c) 上流側境界の外へ逆流出（境界外で壁面に衝突）
- (d) 上流空間内で壁面に衝突
- (e) スリット内部空間に流入

* $y \leq 0$ の位置に移動した分子は、中心軸で鏡面反射した後、(a)～(e)のいずれかの移動を行う

図5.4(a) 上流空間内での分子移動



移動後のy座標がEZAより小さい場合

- (a) 上流側境界の外へ逆流出
- (b) 上流空間内へ移動
- (c) スリット内部空間にとどまる
- (d) 下流空間内へ移動
- (e) 下流側空間の外へ流出

移動後のy座標がEZAより大きい場合

- (f) スリット内部壁面に衝突
- (g) 上流側境界の外へ逆流出
- (h) 上流空間内へ移動
- (i) 下流空間内へ移動
- (j) 下流側空間の外へ流出

図5.4(b) スリット内部空間内での分子移動

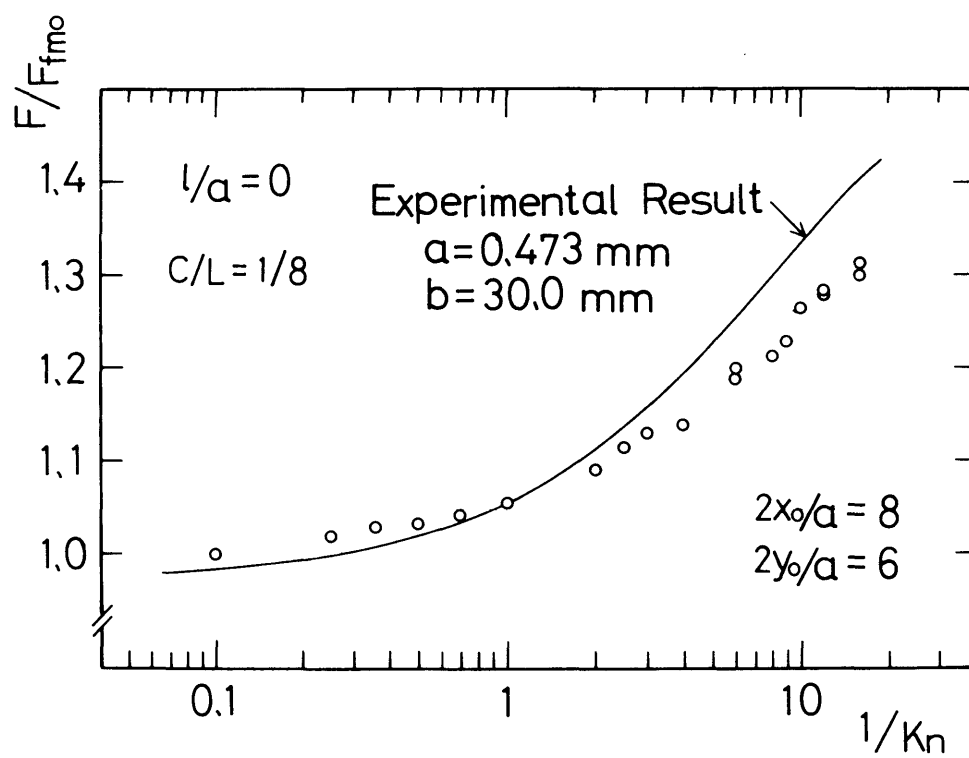


図5.5 上流境界の有限性を考慮しない計算結果

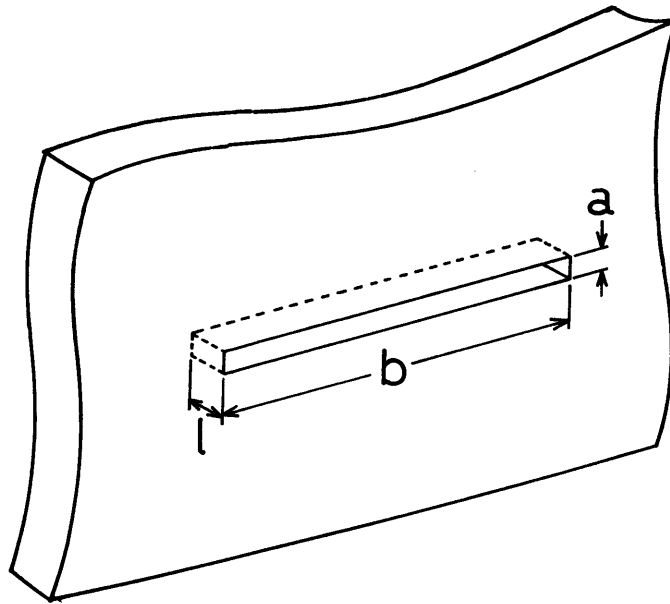


図5.6 スリット形状を表すための寸法表示

a : スリット幅

b : スリット横幅

l : スリット厚み (奥行き長さ)

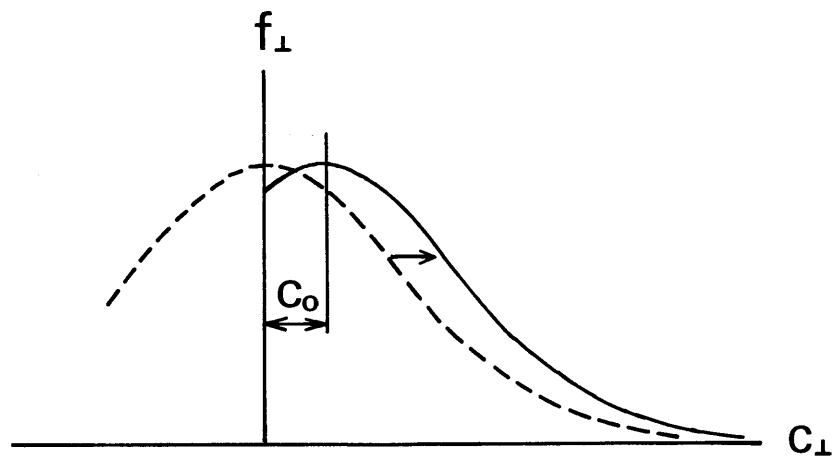


図5.7 巨視的速度を持った局所的平衡状態の速度分布

巨視的速度 上流平衡状態における 最大確率速度で無次元化	流入分子数 上流平衡状態の流入 分子数で無次元化	流出分子数 上流平衡状態の流入 分子数で無次元化
0.000	1.00000	1.00000
0.004	1.00711	.99293
0.008	1.01424	.98588
0.012	1.02141	.97887
0.016	1.02862	.97190
0.020	1.03585	.96495
0.024	1.04311	.95804
0.028	1.05041	.95116
0.032	1.05774	.94431
0.036	1.06510	.93749
0.040	1.07250	.93070
0.044	1.07992	.92395
0.048	1.08738	.91723
0.052	1.09487	.91054
0.056	1.10239	.90388
0.060	1.10995	.89725
0.064	1.11753	.89066
0.068	1.12515	.88409
0.072	1.13280	.87756
0.076	1.14048	.87106
0.080	1.14819	.86460
0.084	1.15593	.85816
0.088	1.16371	.85176
0.092	1.17152	.84539
0.096	1.17936	.83905
0.100	1.18723	.83274
0.104	1.19513	.82646
0.108	1.20307	.82022
0.112	1.21103	.81400
0.116	1.21903	.80782
0.120	1.22706	.80167

表5.1 上流境界の巨視的速度によって生じた 流入分子数と流出分子数の変化

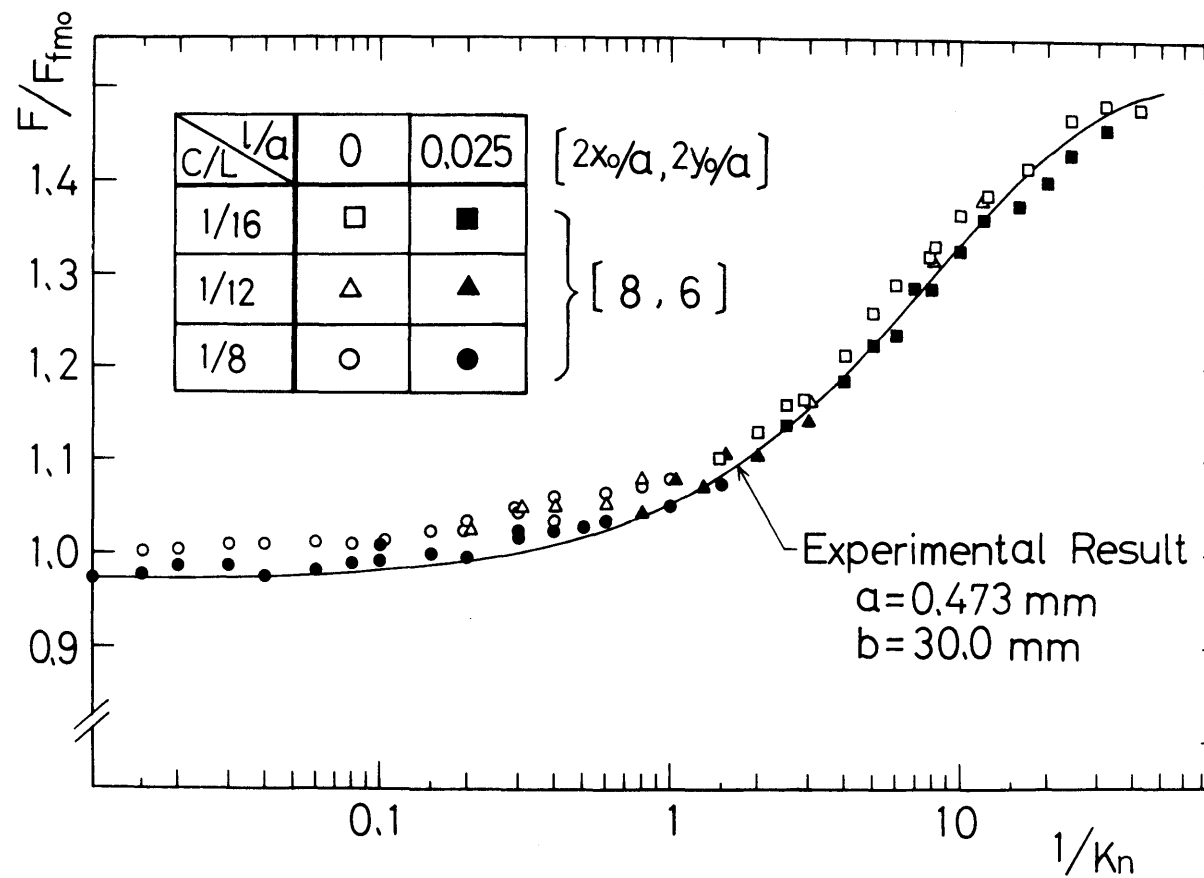


図5.8 流入分子に速度分布の補正を行って得られた計算結果

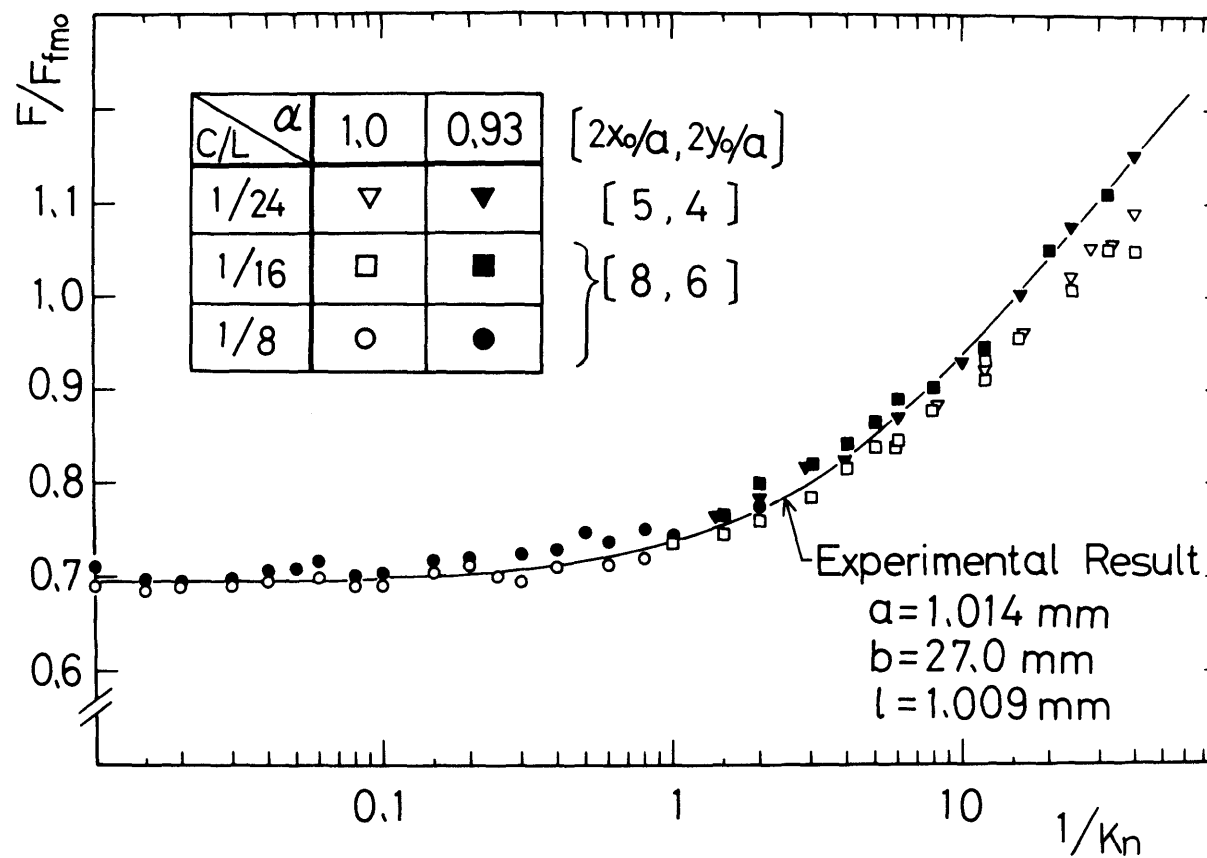


図5.9 分子とスリット壁面との反射過程の相違による効果

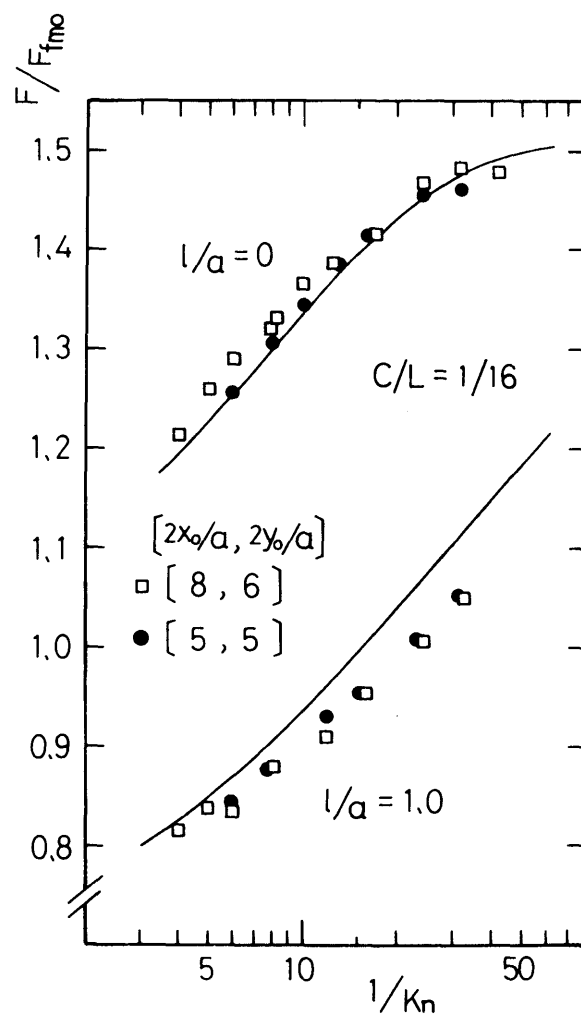


図5.10 上流側空間の大きさの影響 ($1/Kn$ を変化させた場合)

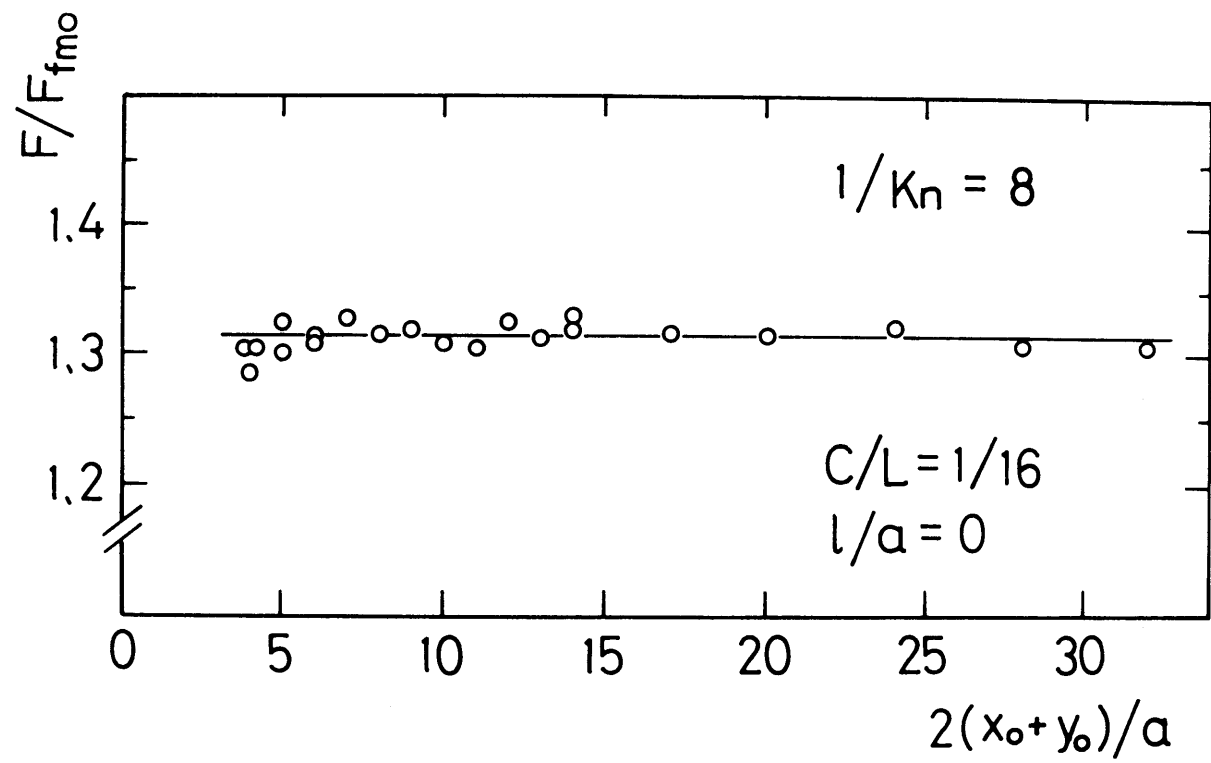


図5.11 上流側空間の大きさ変化による影響 ($1/Kn=8$)

第6章 円筒孔を通過する希薄気体の 穴板温度上昇による流量抑制効果⁽⁷¹⁾ (非定常実験と直接シミュレーション)

6.1 緒言

宇宙技術がスペースシャトルのような実用の時代を迎えたと同時に、真空技術の工業面への応用も活発になりつつある。それに伴い、希薄気体流に対する微小流量制御の方法が、今後、重要な課題になるものと思われる。第5章までは、非定常測定法による実験とモンテカルロ直接シミュレーションとによって、一様な温度場において小さな穴を通過する希薄気体の質量流を論じてきたが、この章では、穴板の温度上昇によって生じる流量抑制効果について、実験と数値シミュレーションの両面から調べてみた。

真空技術で取り扱う流量 \dot{Q} は、一般に、(体積流量 \times 圧力)の形で表わされることが多く、温度一定の下では、質量流量 \dot{m} に比例する。

$$\dot{Q} = P_1 \dot{V} = \dot{m} R T_1 \quad (6.1)$$

ここで、 P_1 、 T_1 はそれぞれ、穴の上流側の圧力及び絶対温度、 \dot{V} は上流側でみたときの体積流量である。一方、流れやすさを示す量として、コンダクタンス F が、式(6.2)で定義される。

$$F = \dot{Q} / (P_1 - P_2) \quad (6.2)$$

ここで、 P_2 は穴の下流側の圧力である。第2章、第3章の実験で得られたコンダクタンスは、上流平衡状態の温度における厚みなしオリフィスの分子流コンダクタンス F_{fmo} で無次元化して表示してあるが、その F_{fmo} の値が絶対温度の平方根に比例するのに対し、無次元化されたコンダクタンスは上流側の温度に左右されない。これは、コンダクタンスが気体の絶対温度の平方根に比例して増加することを示すものである。したがって、式(6.1)(6.2)より、質量流量 \dot{m} は、圧力一定の

下で絶対温度の平方根 \sqrt{T} に反比例することになる。すなわち、気体の温度が上昇すれば、実質的な流量は減少する。これは、完全な自由分子流状態において、厚みのない穴の単位面積を通過する分子数 N が、式(6.3)で表わされ、圧力を一定に保った状態では、やはり \sqrt{T} に反比例することと一致する。

$$N = (1/4)n \overline{c'} \quad (6.3)$$

ここで、 $n (\propto 1/T)$ は分子数密度、 $\overline{c'} (\propto \sqrt{T})$ は分子の熱運動速度の平均である。

さて、穴板の温度 T_w を上昇させた場合、穴の近傍の気体は壁面でのエネルギー交換によって温度上昇を起し、完全に板の温度にならないまでも、流量減少の効果が生じるものと考えられる。本研究は、このような考えに基づき、非定常測定法によって穴板温度変化を伴った短円筒流に関する実験を行い、さらには、直接シミュレーション法により、その流量抑制効果に対する解析を行ったものである。

6. 2 実験装置及び方法

本実験で用いた円筒孔は、真ちゅう板にドリルで穴あけしサンドペーパー(粒度800番)で仕上げたものであり、第2章で示した真空装置の隔壁の中心に取付けられる。その穴板は、図6.1に示すように、板の両端に取付けられた10Wのセラミックヒータ4個によって加熱されるようになっている。穴の直径 d は2.001mmで、板の厚みは1.0mmのものを用了。板の下流側の面に、穴の中心から直角な2方向に約5mm間隔でC-C熱電対を7個張り付け、板の温度を測定した。穴板温度 T_w は、上流側の貯気室内の気体温度 T_1 に対して、 $T_w/T_1 = 1.0, 1.06, 1.12, 1.18, 1.24$ の五とおりに設定し実験を行った。設定温度に対する各測定点の温度変動は $\pm 1^\circ\text{C}$ 以内であることが確認されている。非定常測定法は、貯気室から穴を通して膨張室へ気体が流れ出たときの貯気室に生じる圧力降下率を測定し、流量を算出するものである。穴板を加熱した場合、特に圧力の低い状態で、板あるいは板の取付け部分からガス放出を生じて測定に悪影響を及ぼす可能性がある。それに対する補正法あるいは詳しい実験方法については第2章で述べたとおりである。

6.3 モンテカルロ直接シミュレーション

希薄気体問題の解法において、特に中間流領域では、ボルツマン方程式に基づく気体運動論的理論解析が確立されていない。一方、Birdを中心にして発展してきたモンテカルロ直接シミュレーション法(DS法)⁽⁵⁸⁾⁻⁽⁶⁰⁾は、計算機の進歩とあいまって、最近、実用的な問題に適用されつつある⁽⁷⁴⁾。第5章では、スリットを通過する流れ(二次元問題)にDS法を適用し、満足できる結果を得た。この章では、これを短い円筒孔通過の問題(軸対称三次元問題)に発展させ、さらには、穴板温度変化による影響もシミュレーションした。基礎となる考え方は、第4章、第5章に示されているので、ここでは、それらの章で述べられなかった事項について論じることとする。

6.3.1 シミュレーションにおける上流空間の大きさ

円筒孔流れの問題が、スリット流れ問題に比べて困難である点は、その三次元性のために、対象となる空間が大きくなることである。初期のBird⁽⁵⁸⁾は、このような軸対称問題に対しては、空間を分割するセルごとに分子に重みを与え、計算機上で取り扱う分子数の低減を行うのが良いと提案していたが、この方法では、重みの大きいセルから小さいセルへ分子が移動するとき、全く同じ速度成分を持った分子が数多く生じてしまう恐れがあるために必ずしも有効ではない(Birdも最近の文献⁽⁶⁰⁾では、この方法は避けた方が良いとの報告をしている)。さて、先のスリット流れ問題のシミュレーションにおいて、上流側境界から流入させる分子に巨視的速度を与えることにより、計算の対象となる上流空間を小さくとり得ることが示された。図6.2(図5.11の横軸を書き換えたもの)は、 $1/Kn=8$ の場合における厚みなしスリットの流れにおいて、穴の入口中心から上流境界までの距離を変化させた場合に、無次元コンダクタンス $F/F_{rmo.}(P_1)P_2$ の状態では質量流量の無次元表示と比例関係にある)の計算結果がどのように影響を受けるかを調べたものである。図6.2より、穴入口中心から上流境界までの距離 x_0 と y_0 の平均 $(x_0+y_0)/2$ をスリット幅 a と同程度にとっても、統計的誤差範囲内ではほぼ一致した結果が得られていることがわかる。また、図6.3は、 $1/Kn=1.0$ の場合の円筒孔($l/d=0.5$)を通過する流れに対して同様な影響を調べたものである。直径 d に対

して $(x_0+y_0)/2$ を 1~5 の範囲で変化させたが、全く影響は現われなかった。そこで、今回の円筒孔流れシミュレーションにおいては、穴入口中心から上流境界までの距離を穴直径と同じ長さにとって計算を行い（この場合、上流境界全体の面積は穴の断面積の12倍となる）、シミュレーション領域は小さくなるけれども、セルごとに分子に重みを与えることは避けて計算を試みた。各セルの密度が同じ場合、セル内分子数はセル体積に比例して与えられることを意味するものである。ただし、 $1/Kn$ が小さい領域では、セル一辺の長さを大きくとることによりシミュレーション空間を拡大して計算することを行った。

6.3.2 シミュレーション空間のセルによる分割

DS法を行う上で、もう一つの重要な点は、空間をどの程度細かなセルに分割するかの問題である。図6.4 も、スリット流れ問題に対して行った結果であり、セル一辺の大きさ C を代表長さ L （スリット幅 a の2倍）に対していろいろ変化させて調べたものである。セル一辺 C が、上流境界における平均自由行程 λ の2倍以下ならば、実験値に対してほぼ満足できる結果の得られることが示されている。今回の円筒孔流れのシミュレーションでは、セル一辺の大きさを穴直径 d （代表長さ）の $1/14$ まで分割して計算を行うので、 $1/Kn=28$ （ $Kn \equiv \lambda/d$ ）程度までは信頼できる結果が得られるものと考えられる。また、最中心セルの体積とそのすぐ外側のセルの体積との間には、3倍もの差が生じるため、最中心セル内の分子数に限って、基準となる分子数20よりかなり少なく分子を配置し、全体の総分子数を低く抑えることを試みた。空間のセル分割の様子を図6.5 に示す。

6.3.3 軸対称空間上の分子の移動（二次元スリット空間との相違）

第5章では、二次元スリットを対象とした空間における分子移動を取り扱ったが、この章では、それを軸対称三次元空間に拡張した。軸対称空間上の分子移動に関して注意せねばならないのは、軸に垂直な方向の分子の位置座標として、半径方向の値しか記憶されないということである。そのため、分子が空間を移動した場合、その位置座標と速度成分には適当な座標回転の操作を施さねばならない。いま、空間を分子が移動する前の y 座標を y_1 、半径方向の速度成分を v_1 、接線方向の速度成分を w_1 とすると、 Δt 時間移動した後の、それぞれの値 y_2, v_2, w_2 は、座

標回転の操作によって、次式のように計算できる（図4.5 参照）。

$$\begin{aligned} y_2 &= \{(y_1 + v_1 \Delta t)^2 + (w_1 \Delta t)^2\}^{1/2} \\ v_2 &= \{v_1(y_1 + v_1 \Delta t) + w_1^2 \Delta t\} / y_2 \\ w_2 &= w_1 y_1 / y_2 \end{aligned} \quad (6.4)$$

また、本シミュレーションでは、分子が、円筒孔の内壁面（半径 r ）に衝突するまでの時間 t を算出せねばならない場合がある。分子の出発位置 y_1 が、半径 r よりも小さい場合と、大きい場合（穴の上流あるいは下流側空間から円筒孔内壁面へ分子が飛来する場合に生ずる）の状況が考えられるが、いずれの場合も、円と直線の交点を解くことにより、時間 t は次式で計算できる。

$$t = [\{(v_1^2 + w_1^2)r^2 - (w_1 y_1)^2\}^{1/2} - v_1 y_1] / (v_1^2 + w_1^2) \quad (6.5)$$

このように、分子移動に関する計算は、二次元スリット流れに比べて多少複雑なものとなるが、基本的には同じ計算処理で行える。分子移動に関する流れ図を、図6.7(a)～(d)に、流れ図上の記号の意味を図6.6 に示す。

6.3.4 温度変化のある境界外空間から流入する分子の計算

第5章においては、上流境界から流入する分子の速度成分として、完全な平衡状態のものではなく、境界面に垂直な方向に巨視的速度を加えたものを与えることにより計算を行った。その際、シミュレーション空間の上流境界の外側に仮想境界を設け、分子は（平均的にみて）その仮想境界から飛んで来るものとして、近似計算を行った。この章のシミュレーションにおいては、上流境界の外空間に、温度変化を与えて計算を行う場合があるが、その際の流入分子の計算に関しては、第5章で用いた近似計算とは異なる計算法を採用したので以下にその方法を述べる。

図6.6 に示すように、シミュレーションの対象空間の外側に、分子発生のための予備空間を設けた。予備空間の大きさとしては、上流境界から平均自由行程の2倍の距離の範囲を与えた。この予備空間において、空間の各点の密度に比例した

数の分子が発生させられ、その位置と速度成分とに応じて、平均衝突時間に等しい時間だけ分子は飛行する。その結果、分子が上流境界を横切った場合には、境界から流入した分子として計算機内に登録されるが、境界を横切らない分子についてはそのまま棄却される。分子発生における速度成分の計算は、その発生位置の温度に対応した平衡状態の速度分布に、その位置の巨視的速度を加えたもので行われる。このような分子発生のための予備空間は、十分大きくとることが望ましいが、大きくとるほど、むだに棄却される分子が多くなり、計算時間の増加となる。今回は、平均自由行程の2倍の幅の範囲をとったが、この予備空間で発生された分子の内、実際に対象空間内に流入するのは、 $1/Kn=8$ の場合 約10%であった。これは、上流側圧力が低くなるほど小さな値となり、流入分子に対する計算時間が全体の計算時間に占める割合が大きくなる。なお、予備空間の範囲外から対象空間へ流入する可能性は、0.1%以下であった。これらの値は、予備空間の大きさを変更すれば異なったものになる。

図6.6 に示されているように、実際の計算では、予備空間を三つの部分空間①②③に分割して、分子発生の計算を行う。なお、上流境界は、円筒状上流空間の側面BC と円筒底面のAB に分けられる。詳しい計算手順は、図6.8(a)～(d)の流れ図に示してあるので、ここでは、それに対する簡単な説明を行う。三つの予備空間のそれぞれに対して、まず、それらの空間が基準の平衡状態と同じ温度であるとして分子の発生を行う。いま、予備空間の圧力は一定と考えるので、密度は、その点の温度に反比例する。そこで、いったん発生された分子を採用するかどうかは、その点の密度（すなわち温度）に応じて、乱数により決定する。予備空間①から発生された分子は、x方向の速度成分が正の場合のみ、AB境界へ流入する可能性がある。x=0における分子のy座標がAB間距離(OZA)より小さい場合は流入、そうでない場合は、予備空間上の穴板壁面と衝突する可能性を調べる。空間②あるいは③において発生された分子も、空間①の場合と同様に、その点の温度に応じて一部分子の棄却が行われる。棄却されなかった分子について、まず、半径方向(y方向)速度成分vの正負を調べる。v>0 の分子については穴板壁面との衝突の有無を計算する。v<0 の分子については、まず、分子軌道が、X軸を中心とする半径OZAの仮想円筒面（この一部が境界BC）と交差するかどうかを調べ、交差する場合は、交差までに要する時間を計算する。交差しない分子あるいは交差するまでの

時間が平均衝突時間よりも長いものについては、やはり、穴板壁面との衝突の可能性を調べる。一方、時間内に仮想円筒を横切る分子の内、 x 方向速度成分 u が負のものは、交わる位置の x 座標が正の場合に流入、 x 座標が負の場合は流入しない。 $u > 0$ の分子については、仮想円筒と交わる前に、穴板壁面と衝突しないかを調べ、衝突しない分子が $x > 0$ で仮想円筒と交差すれば BC境界から流入する。また、 $x < 0$ で仮想円筒と交差する分子が 時間内に $x=0$ の点に到達していれば AB境界からの流入を調べる。

6. 4 結果及び考察

6.4.1 実験結果

図6.9～6.13に、実験で得られた無次元コンダクタンスが、クヌッセン数の逆数 $1/Kn$ に対して変化する様子を示す。図6.9 は、試験気体に、シリカゲルの入った乾燥筒を通過させた空気を用いて得られた結果である。穴板壁面温度 T_w が上昇するにつれて、無次元コンダクタンスは減少することが示されている。先に述べたように、穴の付近の気体が、完全に穴板壁面温度まで上昇した場合、分子の熱運動速度増加による流れの増加よりも、密度減少による流量減少効果がより大きく働いて、実質的な流量は一樣な温度の場合の $\sqrt{T_i/T_w}$ 倍に減少すると考えられる。図6.9 中、各々の実線は、穴板温度が上流側貯気室の気体温度と同じ場合の実験データを $\sqrt{T_i/T_w}$ 倍 (T_w は、実験で採用した5種類の穴板温度) して描いたものであるが、中間流領域において、それぞれの T_w における実験値とほぼ一致した結果になっているのがわかる。すなわち、中間流領域における穴板温度の上昇は、穴の付近の気体をその壁面温度まで上昇させたのとはほぼ同じ効果を有するものである。

自由分子流領域において、実線と実験値にずれが生じているのは、もはや分子は、高温の穴板の影響の及ばない空間から穴に突入してくるためである。また、連続流領域では、穴を通過する分子数が多くなるために、相対的に分子が壁から受ける影響は小さくなり、理想的ノズルを通過する断熱流に近い状態となって、やはり、上流境界の温度のみに支配される結果となる。

図6.10, 6.11 は、試験気体にアルゴンを用いて行ったものである。図中、破線

は、一様な温度の場合のデータを $\sqrt{T_1/T_w}$ 倍して表したものであるが、乾燥空気の場合と同様な効果が現われている。図6.12, 6.13 も、やはりアルゴンをを用いたものであるが、高温穴板から上流側容器に熱が伝導して上流壁面温度を上昇させるのを防ぐために、穴板取付部(Adapter Ring)を水冷して得られた実験結果である。冷却しないものとほぼ同じ結果が得られた。

6.4.2 シミュレーション結果

図6.14 に、穴板壁面温度と気体温度が等しい場合($T_w=T_1$)のシミュレーション結果と、それに相当する実験結果を示す。円筒孔の長さ l と直径 d の比 l/d の異なる2種類について計算を行った。第5章のスリット流れの計算においては、分子の壁面における反射過程を検討したが、本計算でも $l/d=0.5$ の円筒孔に関しては、完全な拡散反射の場合(●印)と一部鏡面反射の性質を含む衝突の場合(○印)の二とおりについて計算を行った。この一部鏡面反射の性質を含む衝突とは、第4章で示したように、完全に拡散反射した場合に得られる速度成分の α 割合と鏡面反射した場合の反射後の速度成分の $\{1-\alpha\}$ 割合とを合成することによって、壁面に衝突したあとの分子の速度成分を計算するものである。図6.14において、 $l/d=0.5$ の実験結果は、 $\alpha=0.93$ と $\alpha=1.0$ の計算結果の中間に位置している。一方、 $l/d=0.025$ のオリフィスの場合は、 $\alpha=0.95$ で実験値と一致する結果が得られている。このように、 α が0.95付近の値をとることは十分考えられるものである。しかし、 α の値に関して確定した値を用いるためには、さらに十分なデータと検討が必要であるし、また、 $\alpha=1.0$ の計算結果は、実験値よりわずかに低い値であるものの ほぼ良い一致を示しているので、穴板温度を上昇させたときの円筒孔流れのシミュレーションにおいては、分子は完全な拡散反射($\alpha=1.0$)をするものとして計算を行うこととした。

図6.15 における、 $T_w/T_1=1.24$ の場合のシミュレーションでは、上流境界における境界条件として三とおりの条件を考えた。まず最初に、穴板温度にかかわりなく、上流境界から流入する分子は上流気体の温度で局所的平衡状態に達しており、ただ、境界に垂直方向の速度成分に巨視的速度だけの補正を加えるという条件によって計算を行った。図6.15 中、▽印 がそれを表しているが、実験値(実線)とは明らかに異なっていることがわかる。この理由は、実験における高温穴

板の壁面面積は、穴面積より十分大きいにもかかわらず、シミュレーションでは、穴の数倍の壁面面積によってしか計算を行っていないことと、シミュレーション空間から上流境界の外へ逆流していく分子が穴板温度の影響を流入分子に及ぼすにもかかわらず、その効果を見逃しているところにある。そこで、二番目の境界条件として、上流円筒空間の側面境界BC面（図6.6 参照）から流入する分子は穴板温度の影響を受けているとみなし、その流入分子については穴板と同じ温度で発生させる（分子流入数は基準の平衡状態の値の $\sqrt{T_1/T_w}$ 倍に、また、その速度成分は逆に $\sqrt{T_w/T_1}$ 倍となる）という境界条件を与えて計算を試みた。図6.15 中の◇印は、その結果を示している。実験結果と比較的良好な一致を示しているが分子流領域に近いところで少し差を生じている。さらに、第三の境界条件として、穴板の位置から穴直径の3倍だけ離れた範囲の空間において、気体の温度が T_w から T_1 まで直線的に減少しているものと仮定し（図6.16参照）、シミュレーション空間に流入する分子の流入数及び速度成分に補正を加えて計算を試みた。上流境界を通過して流入して来る分子は、境界外の点で発生させられるが、その発生位置における気体温度によって流入分子の情報（流入数、速度成分）を補正したものである。図6.15 中の▼印は、その結果を表しているが、実験結果と非常に良い一致を示している。

さて、実験では穴より十分大きな面積を持つ穴板壁面の温度を上昇させて測定を行っているが、シミュレーションにおける第一の境界条件というのは、実は、穴の数倍だけの面積しか持たない板の温度を上げて流量抑制効果を調べたものと考えられる。結果から明らかなように、そのようなわずかの面積の穴板温度上昇によっても流量の明らかな減少を生じており、穴板温度制御が、中間流領域における微小流量コントロールのための有効な手段になり得ることを示している。図6.17 は、 $1/Kn=15$ において、 $T_w/T_1=1.0, 1.06, 1.12, 1.18, 1.24, 1.30$ に対して第三の境界条件で計算を行い、実験と比較したものである。それらの結果が直線で結ばれ、その傾きが ほぼ 1.0 であることは、やはり、流量が $\sqrt{T_1/T_w}$ で変化することを示すものである。

6. 5 結 論

[1] 円筒孔を通過する希薄気体流に対して，穴板温度を上昇させることによって生ずる流量抑制効果を明らかにした．中間流領域における流量は，気体の温度と穴板温度との比の平方根 $\sqrt{T_1/T_w}$ にほぼ比例して減少する．

[2] モンテカルロ直接法により，円筒孔を通る希薄気体のシミュレーションを行い，穴板温度が気体の温度と等しい場合あるいは異なる場合に対して実験結果と一致する結果を導くことができた．

[3] シミュレーション計算によると，穴板温度上昇の効果は，穴の周りのわずかな板面積の温度変化に対しても顕著に現われるものであり，これは希薄気体の微小流量制御に有効な手段になると考えられる．

本研究は，希薄気体が一枚の穴板だけを通過する場合の効果調べたが，これを複数枚にすることにより，さらに複雑な効果を期待できると思われる．

本研究の一部計算には，岡崎国立共同研究機構分子科学研究所・電子計算機センターを利用した．

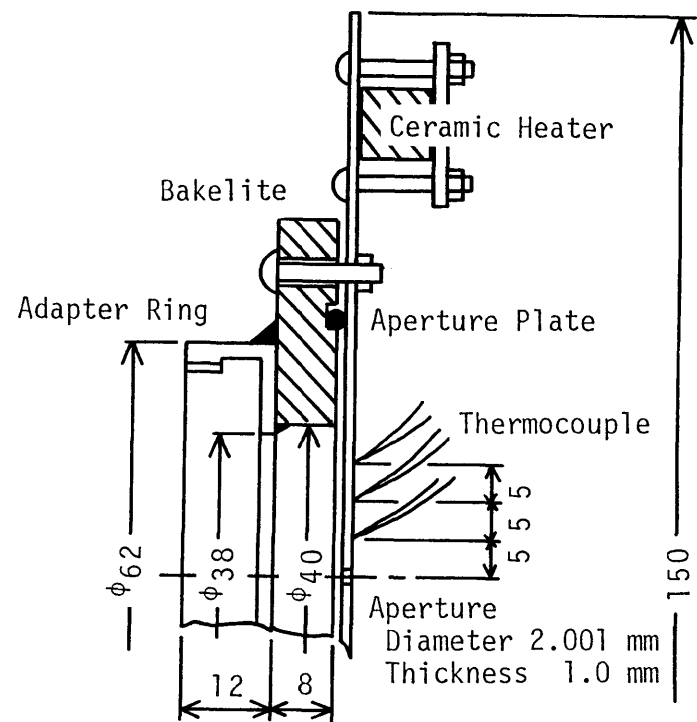


図6.1 穴板へのヒータ取付け図

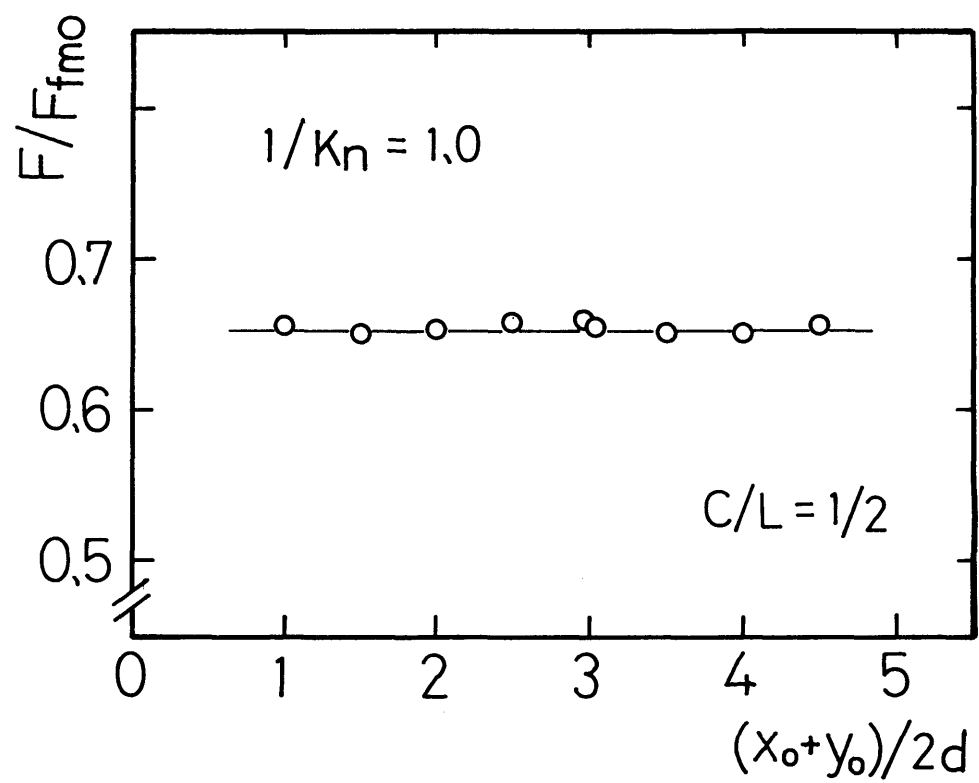


図6.3 穴入口中心から上流境界までの距離の変化がシミュレーションの結果に及ぼす影響（円筒孔流れの場合、 $1/K_n=1$ ）

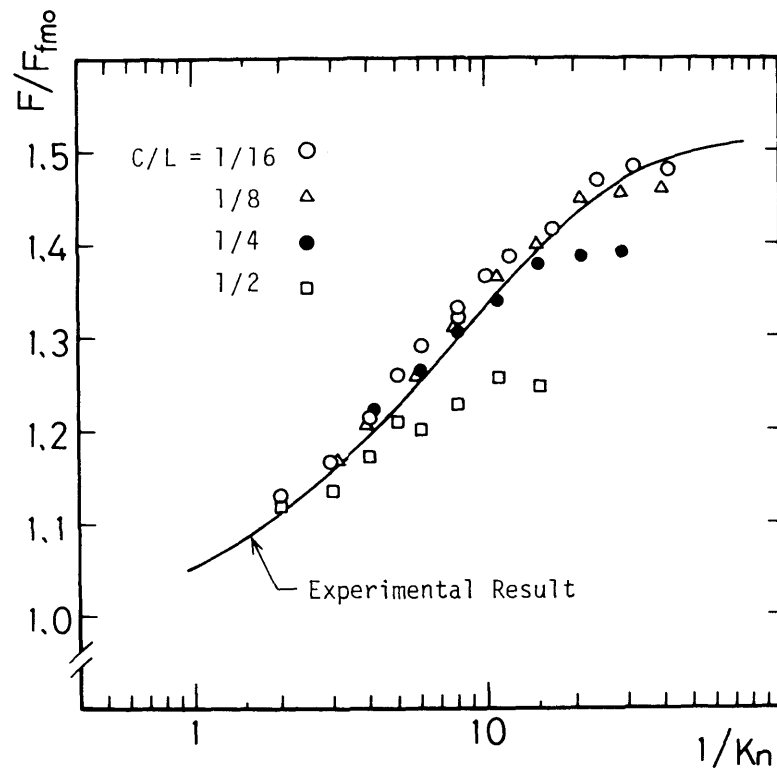


図6.4 シミュレーションの結果に及ぼすセル一辺の大きさの影響
(二次元スリット流れの場合)

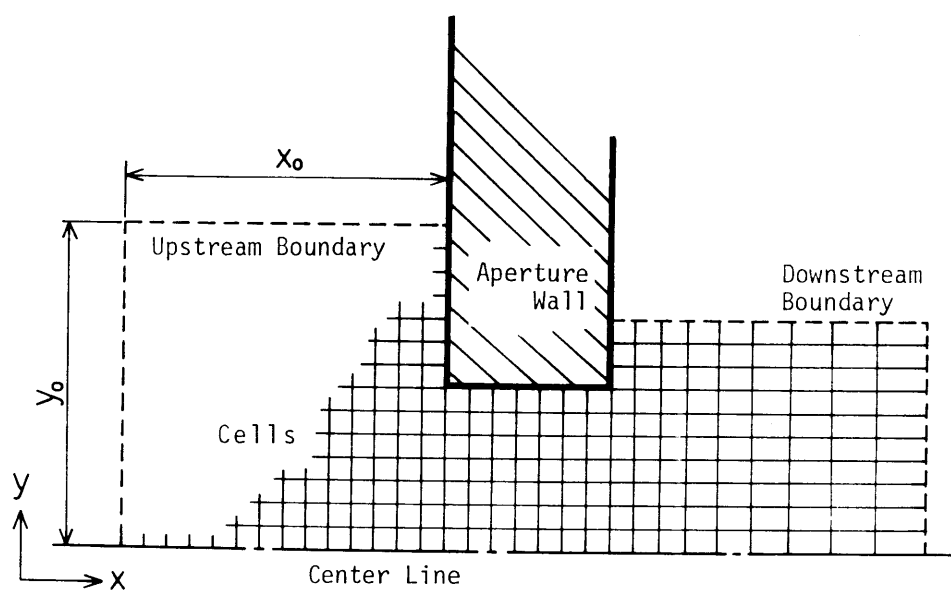
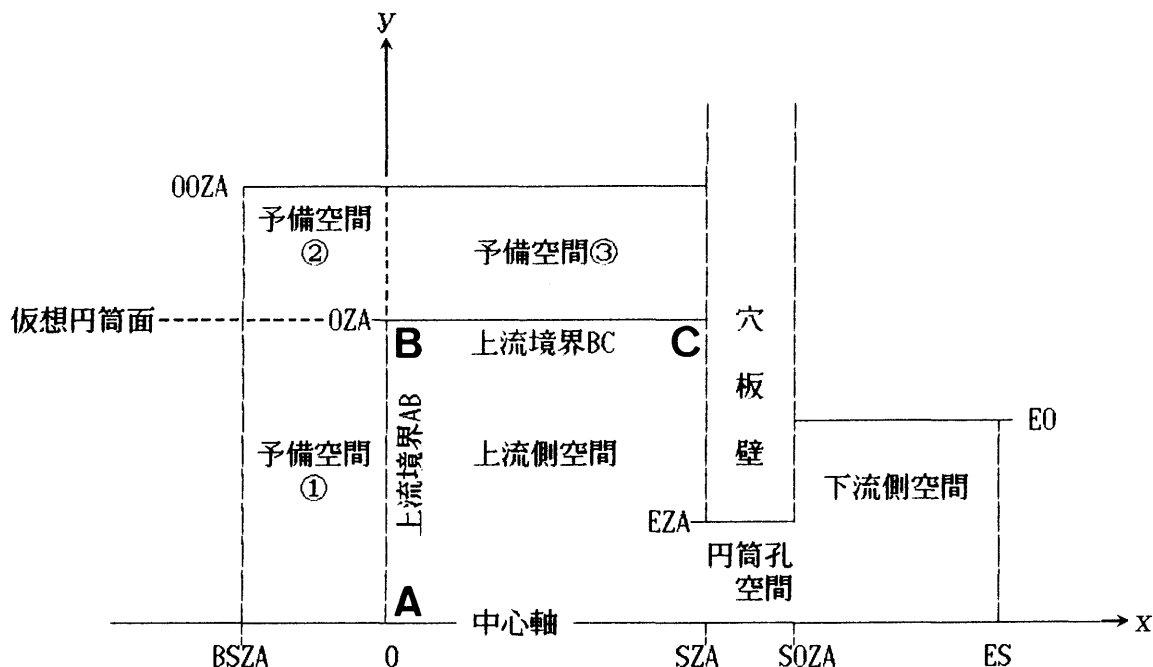


図6.5 シミュレーションにおける空間のセル分割



SZ A : 上流空間に面した穴板壁面のX座標
 SOZA : 下流空間に面した穴板壁面のX座標
 ES : 下流側の平面境界のX座標
 E0 : 下流側の円筒面境界のY座標
 EZA : 円筒孔内部の壁面のY座標
 OZA : 上流側の円筒面境界のY座標
 (上流側の平面境界のX座標=0)
 BSZA : 予備空間の平面境界のX座標
 00ZA : 予備空間の円筒面境界のY座標

$\Delta t_m = \text{DTM}$: 時間ステップ
 DTT : 分子の移動時間
 PZ1(N) : 分子NのX座標
 PZ2(N) : 分子NのY座標
 P1(N) : 分子NのX方向速度成分
 P2(N) : 分子NのY方向速度成分
 P3(N) : 分子NのZ方向速度成分

S : 分子の移動後のY座標 (元の座標系)
 S2 : 分子の移動後のZ座標 (元の座標系)
 Y, Y2 : 座標回転を行ったあとの, 移動後のY座標 (新しい座標系)

図6.6 分子移動及び分子発生に関する計算プログラムに用いる変数名

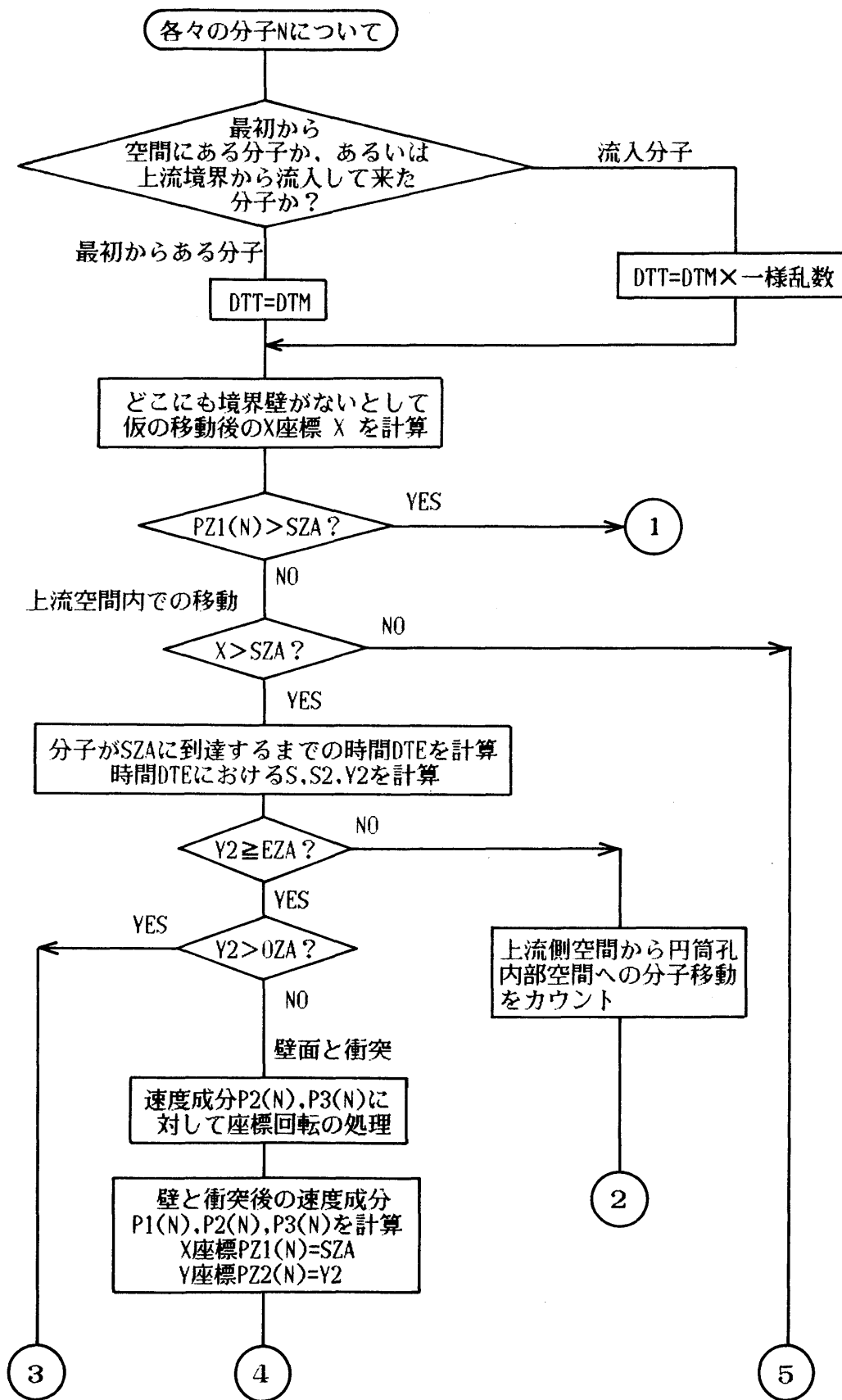


図6.7(a) 軸対称空間上の分子移動に関する流れ図（その一）

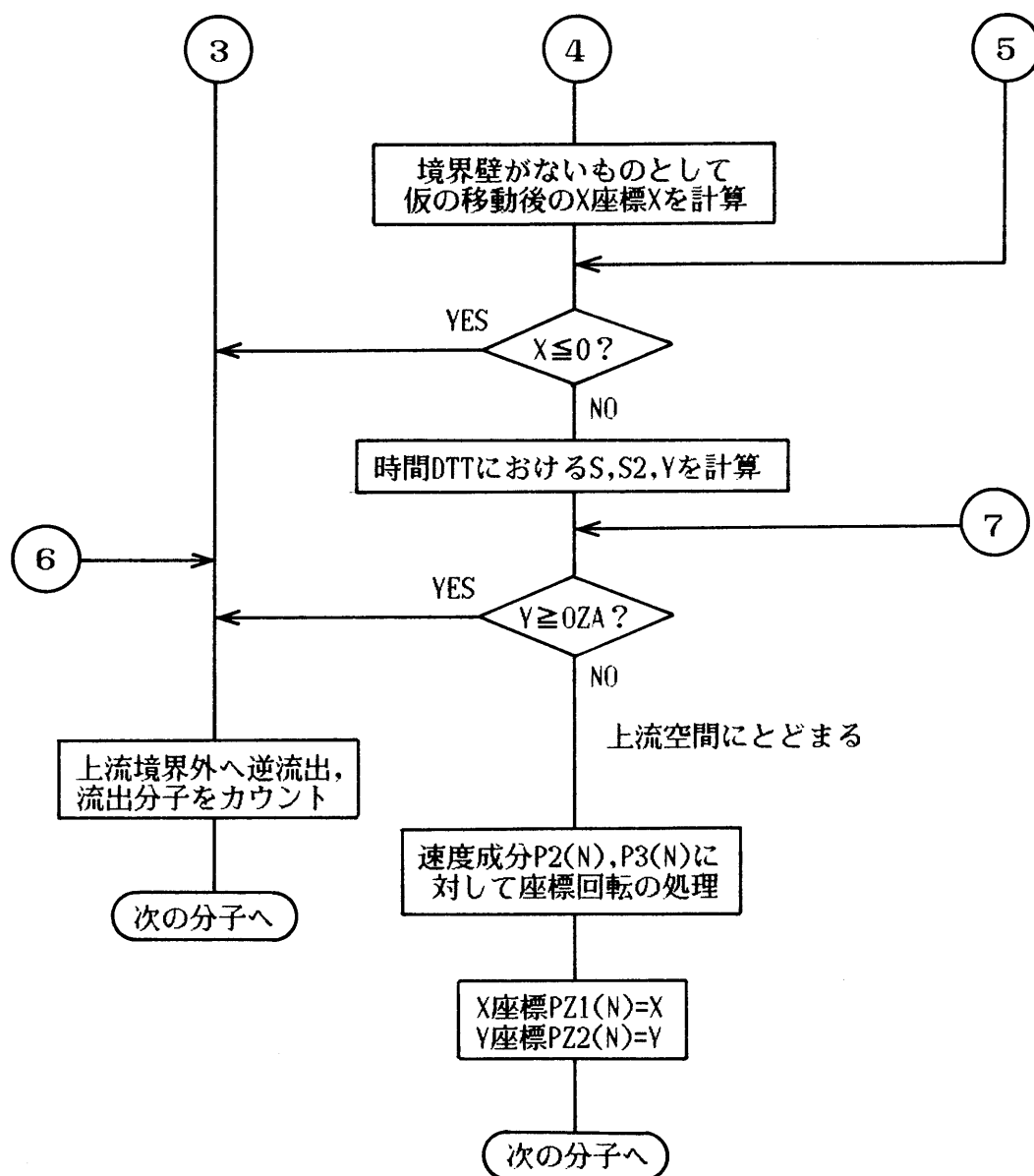


図6.7(b) 軸対称空間上の分子移動に関する流れ図（その二）

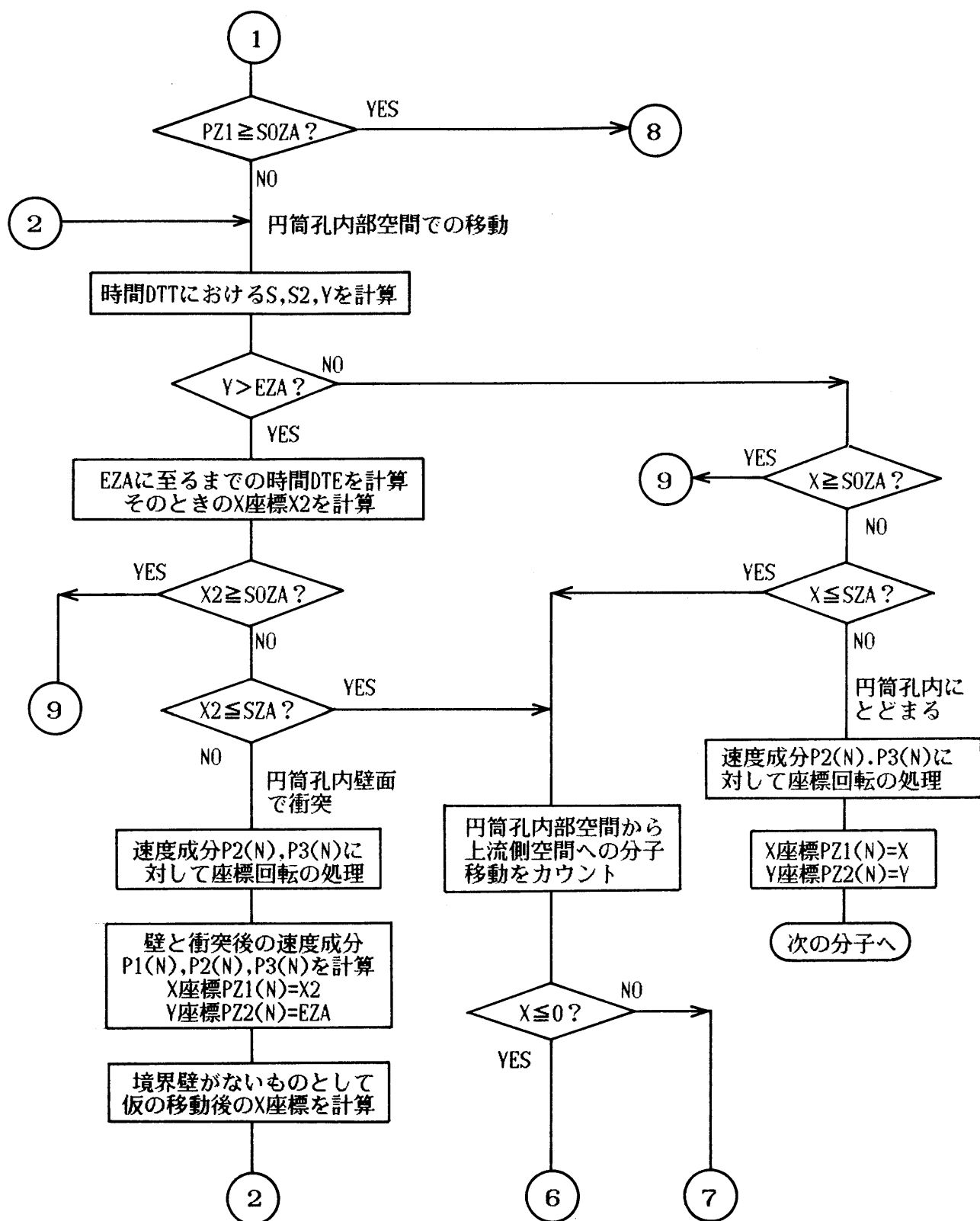


図6.7(c) 軸対称空間上の分子移動に関する流れ図（その三）

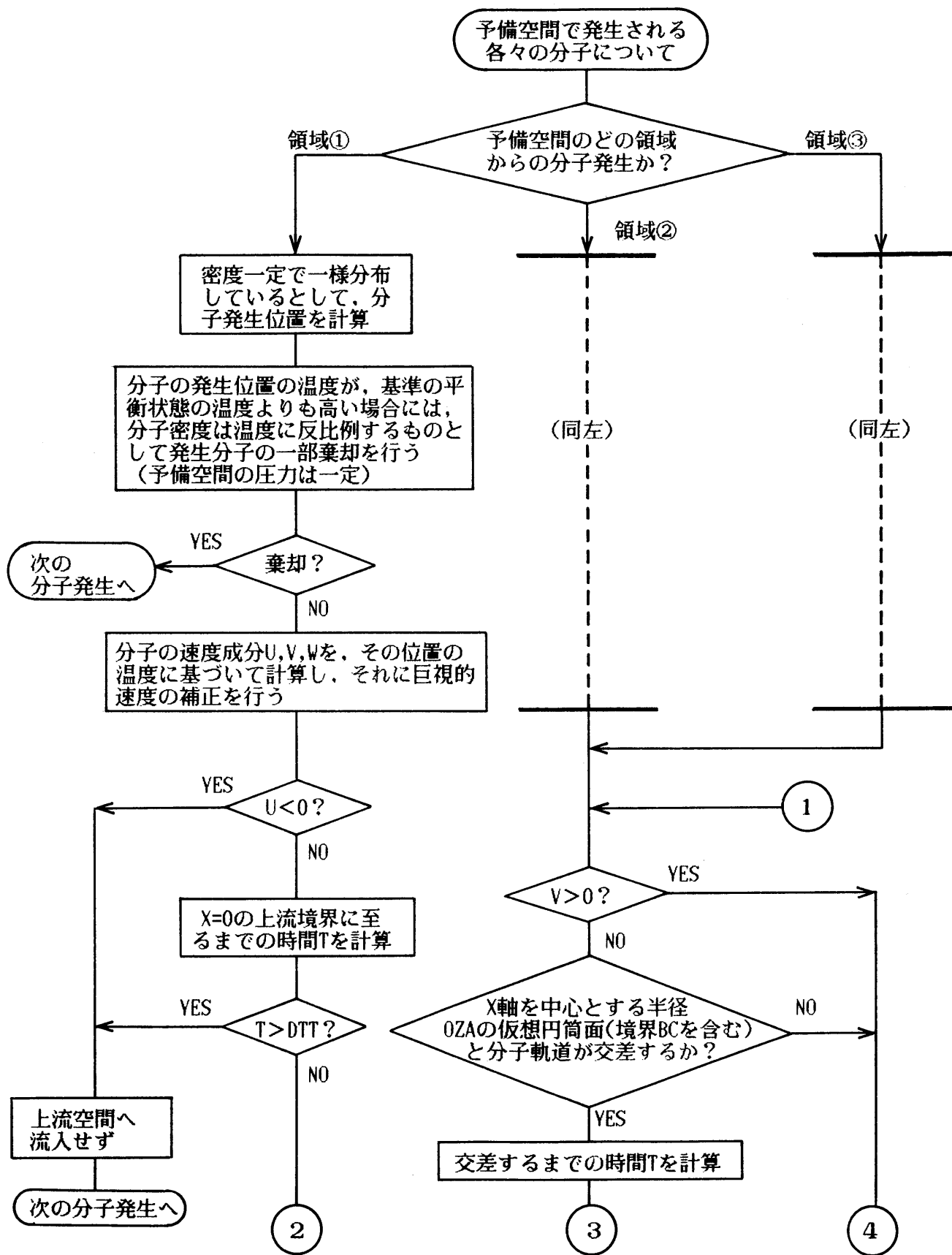


図6.8(a) 予備空間からの分子発生に関する流れ図（その一）

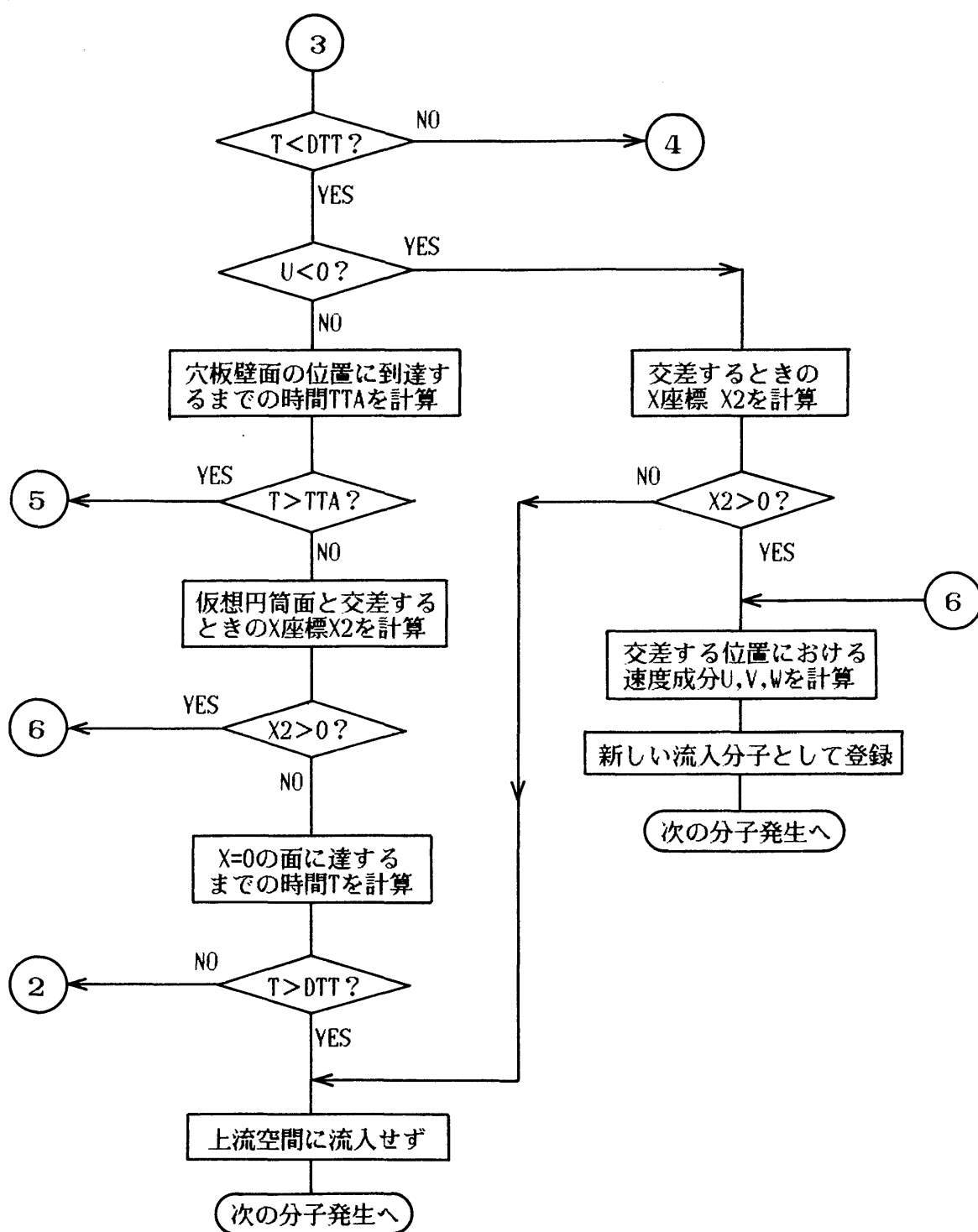


図6.8(b) 予備空間からの分子発生に関する流れ図（その二）

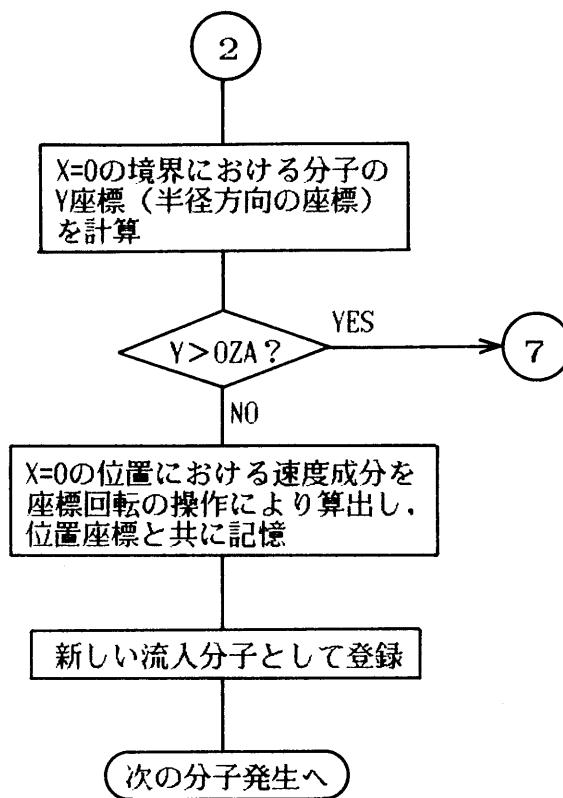


図6.8(c) 予備空間からの分子発生に関する流れ図(その三)

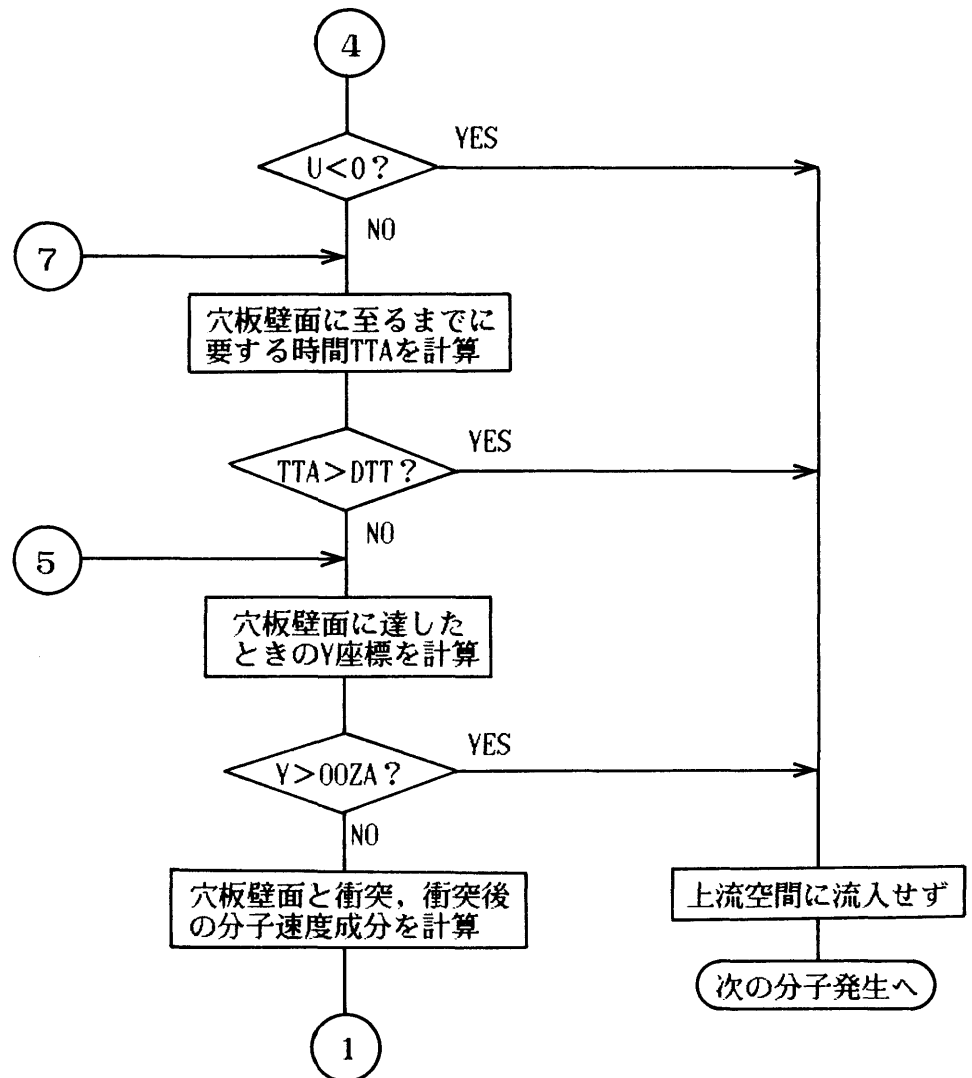


図6.8(d) 予備空間からの分子発生に関する流れ図（その四）

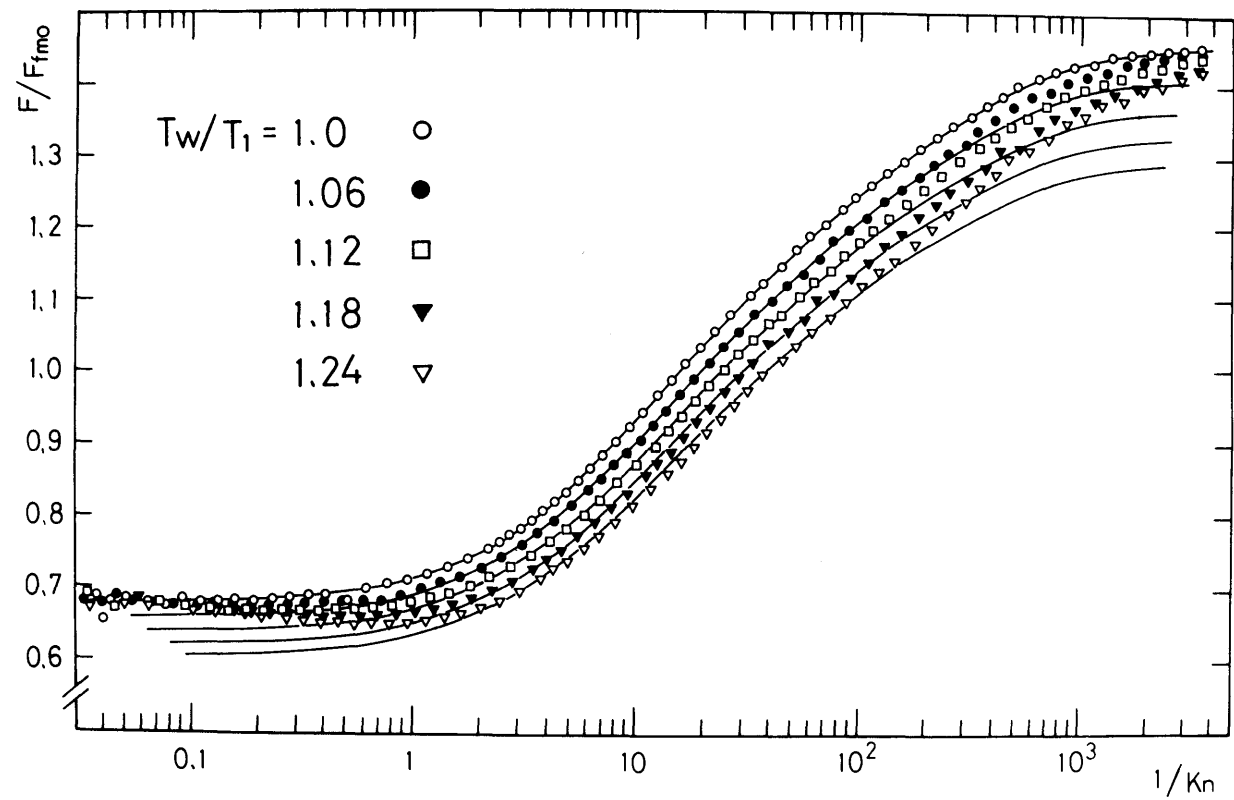


図6.9 無次元コンダクタンスに及ぼす穴板壁面温度の影響
(空気による実験, $l/d=0.5$)

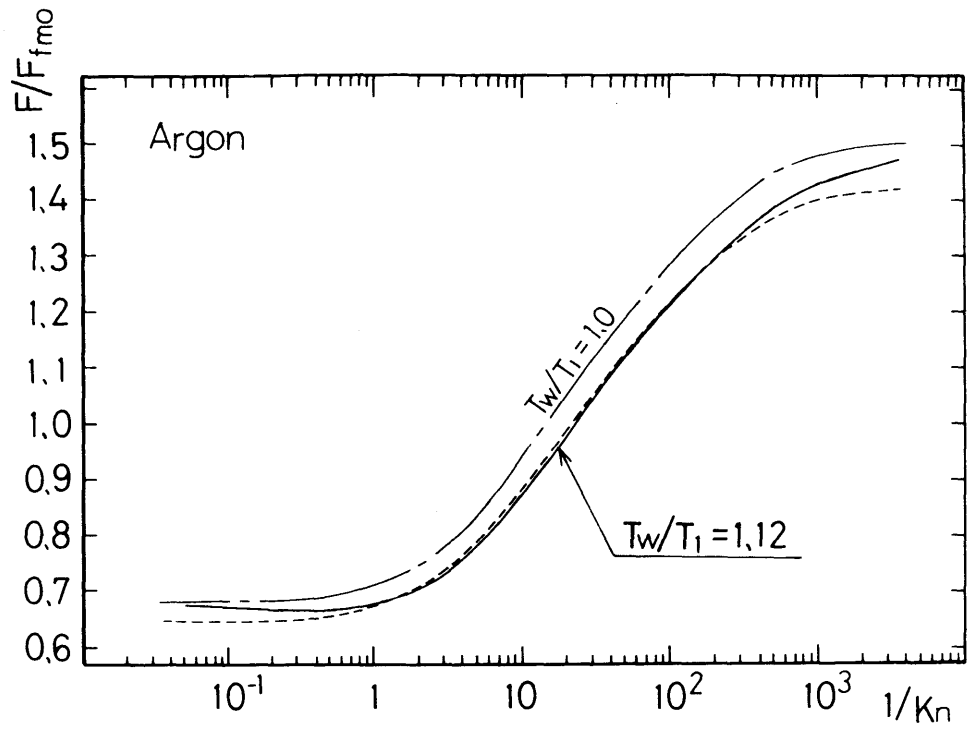


図6.10 無次元コンダクタンスに及ぼす穴板壁面温度の影響
(アルゴンによる実験, $T_w/T_1=1.12$)

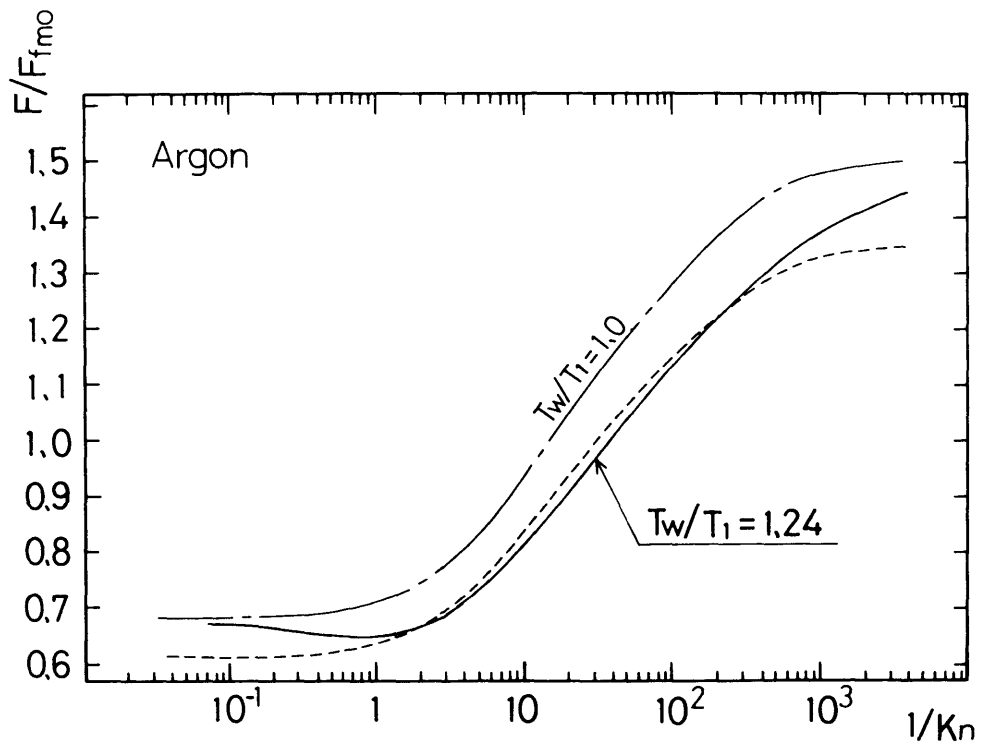


図6.11 無次元コンダクタンスに及ぼす穴板壁面温度の影響
(アルゴンによる実験, $T_w/T_1=1.24$)

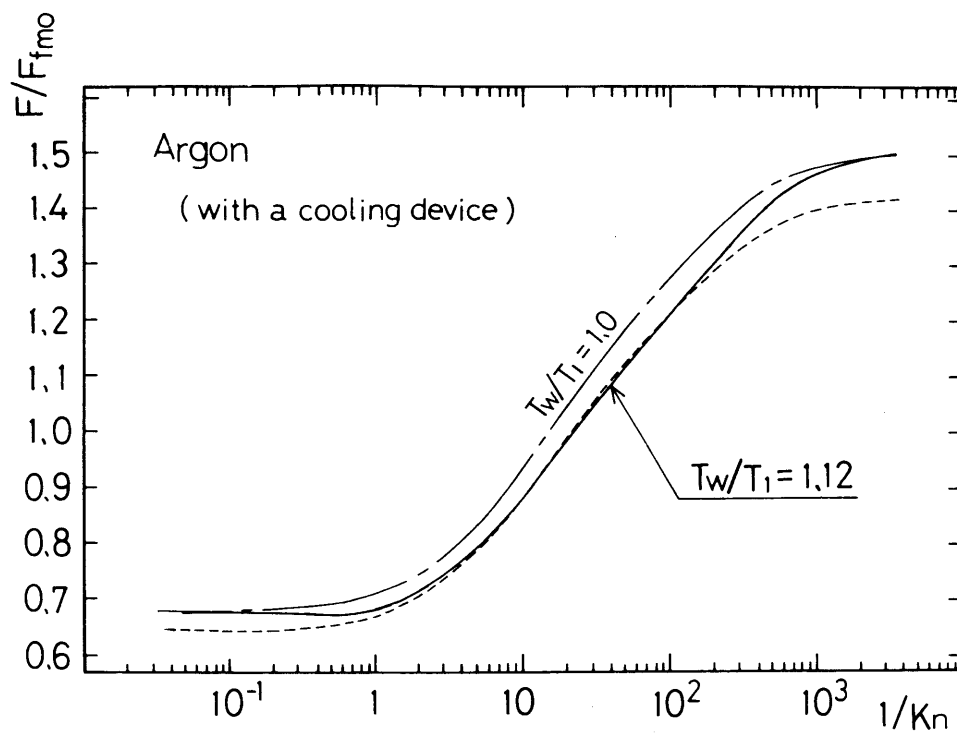


図6.12 無次元コンダクタンスに及ぼす穴板壁面温度の影響
(アルゴンによる実験, $T_w/T_1 = 1.12$, 穴板取付け部を水冷)

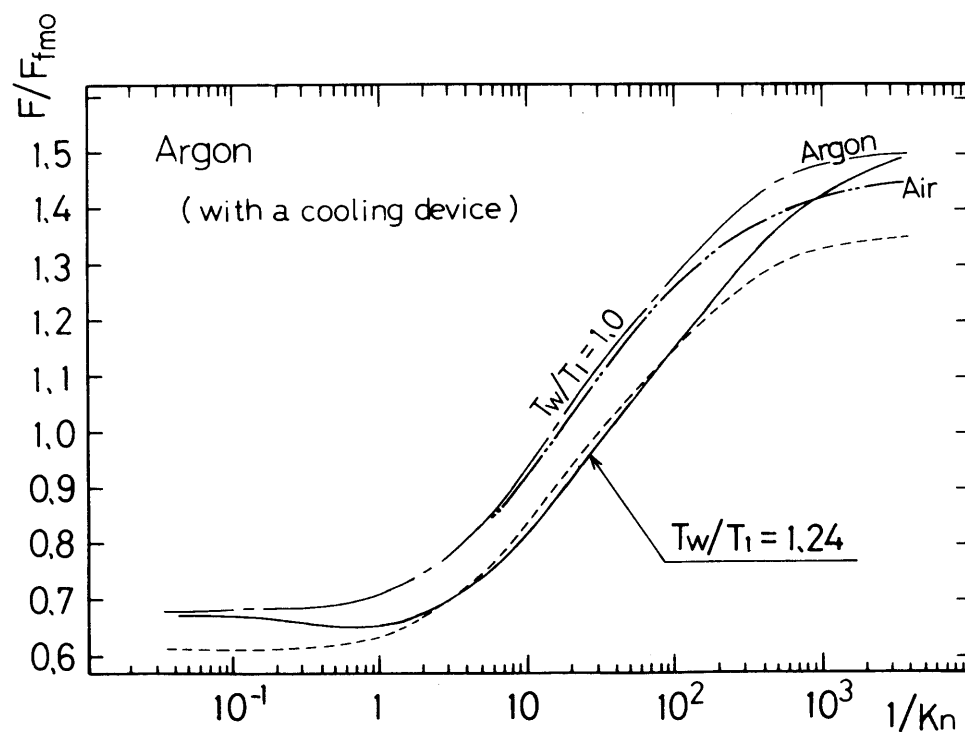


図6.13 無次元コンダクタンスに及ぼす穴板壁面温度の影響
(アルゴンによる実験, $T_w/T_1 = 1.24$, 穴板取付け部を水冷)

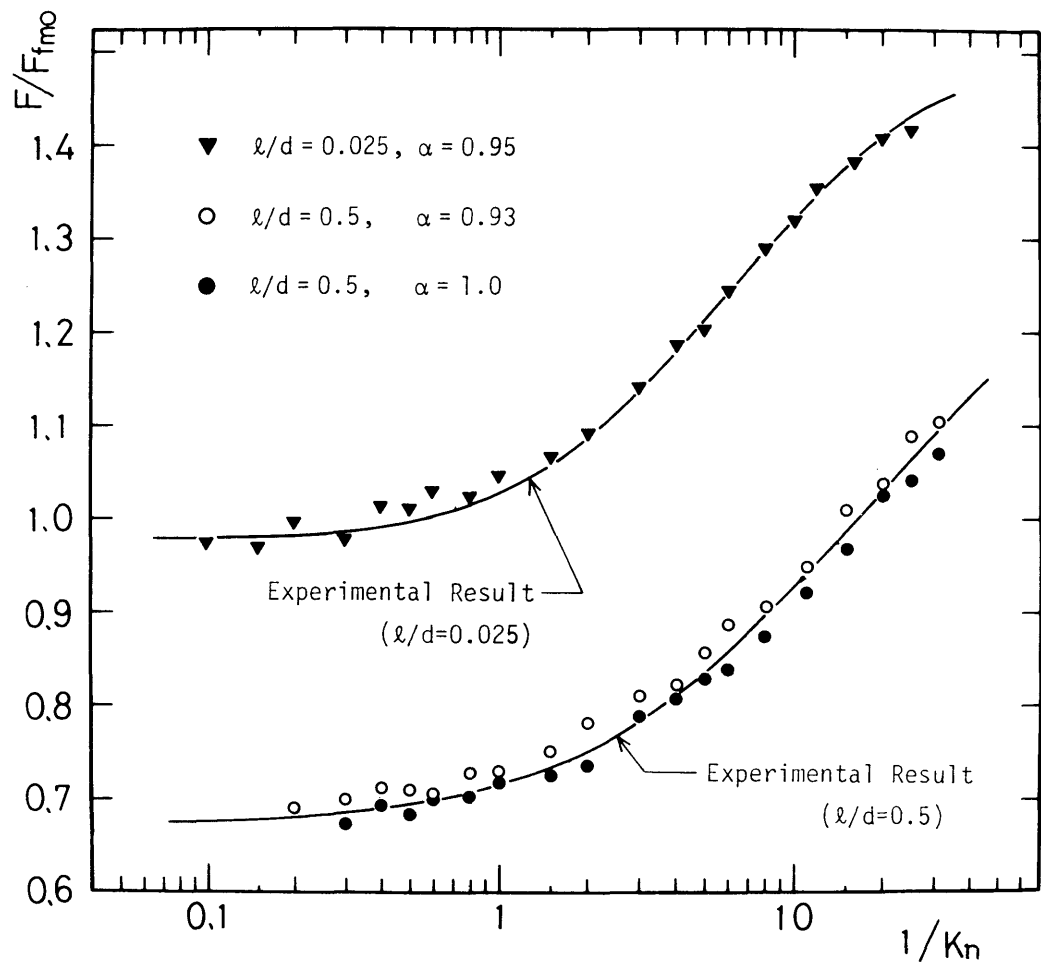


図6.14 シミュレーションによる計算結果と実験結果との比較
 $(T_w/T_1=1.0, \quad l/d=0.025, 0.5)$

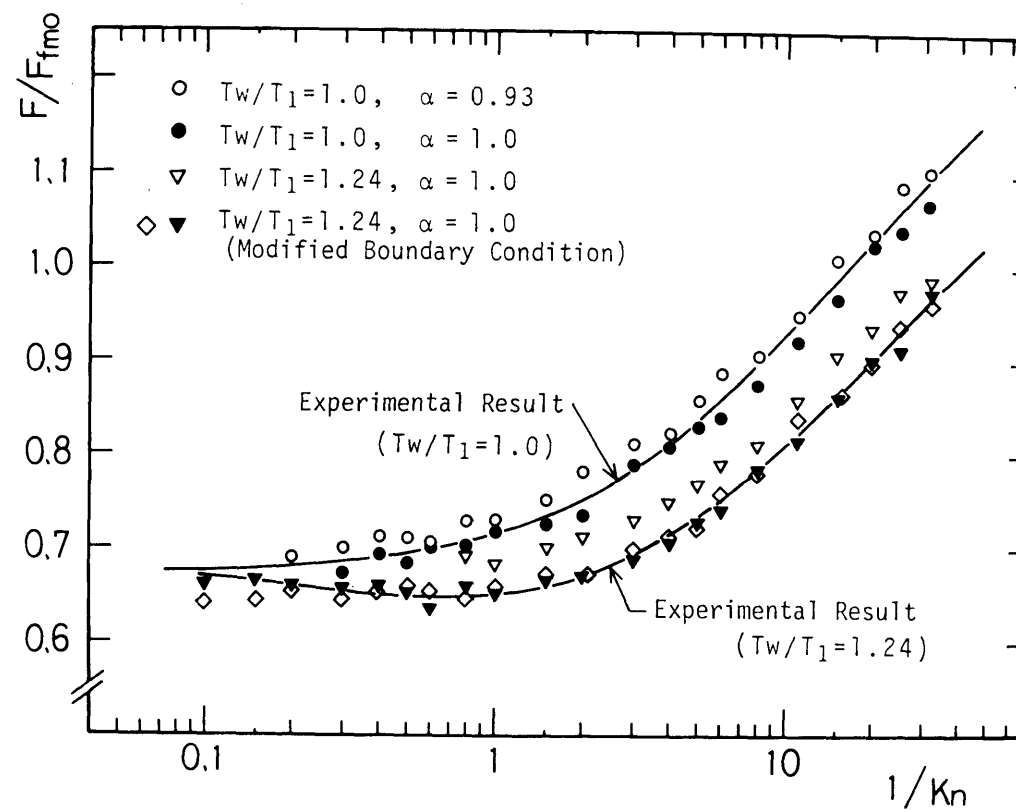


図6.15 シミュレーションによる計算結果と実験結果との比較
($T_w/T_1=1.0, 1.24, \quad l/d=0.5$)

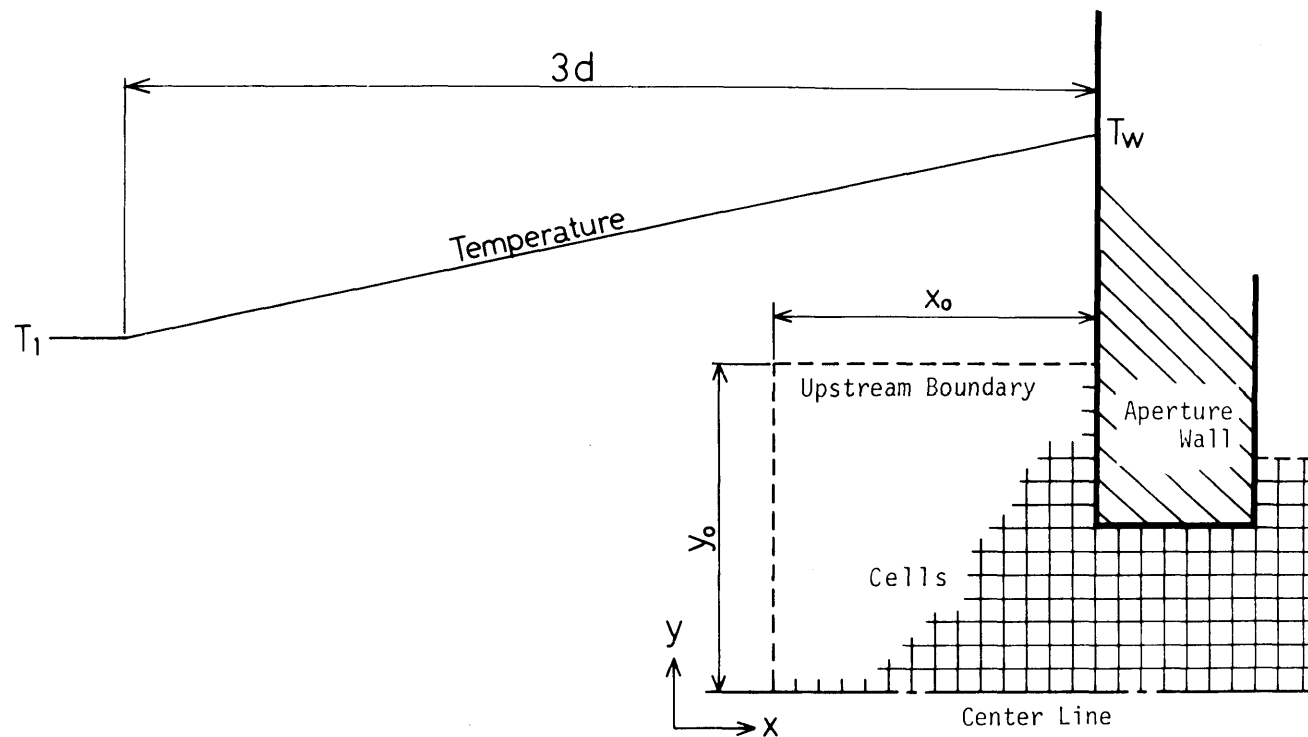


図6.16 上流境界から流入する分子に与える第三の境界条件
(穴板位置から穴直径の3倍だけ離れた範囲の上流空間で、
気体温度が T_w から T_1 まで直線的に減少すると仮定)

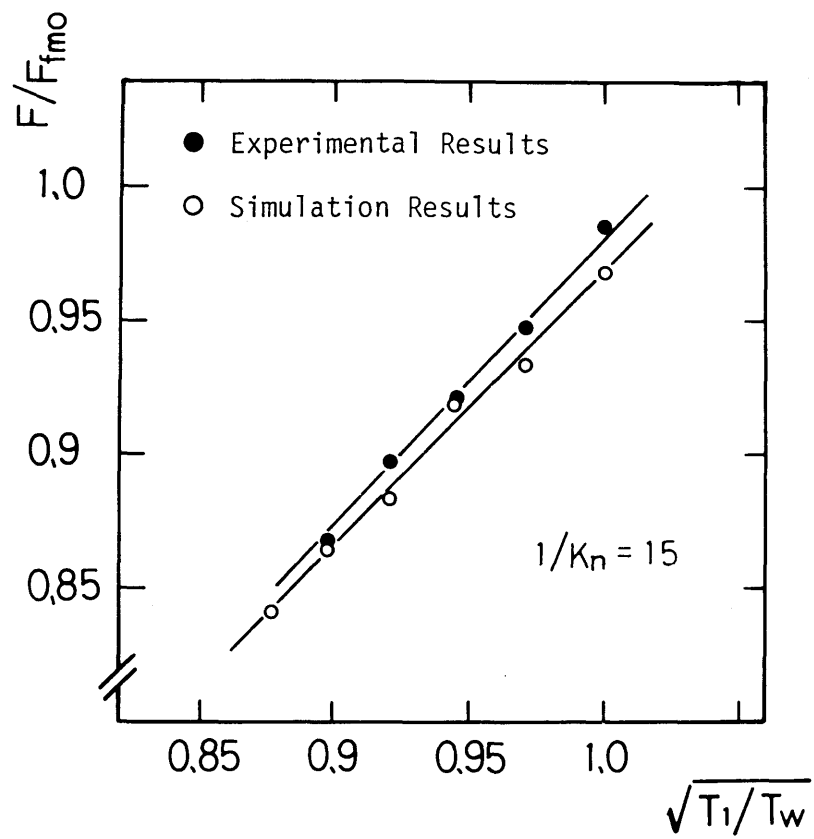


図6.17 シミュレーションによる計算結果と実験結果との比較
($l/d=0.5$, $1/K_n=15$)

第7章 総括

真空技術が工業の様々な分野で用いられるようになり，真空の質が問題になってきたのに伴って，いままで十分解明されていなかった中間流領域における管内流れの詳細な解析が要求されるようになってきた．希薄気体の管内流れに関する研究は真空技術の基本となるものであり，いままでにも数多くの研究者によって様々な報告がなされているが，たとえば，質量流に関する実験結果においては研究者によってかなりの相違が見られるし，また，理論的にも，中間流領域においてボルツマン方程式に基づく気体運動論的理論解析が見いだされていないなど，最近の技術的要求を満たすまでの十分な解明はなされていない．管内流れの中でも特に解析が困難なのは，管の端の影響が大きく現われる短い管路及び薄刃オリフィスであり，早急な解明が求められているものである．本研究は，以上のような背景の下に，オリフィス及び短い管路を通る希薄気体の質量流の解析を実験と数値シミュレーションの両面から試みたものである．実験に関しては，いままでほとんど試みられなかった非定常測定法を用いることにより様々な形状の管路のコンダクタンスに関するデータを得ることができた．また，この種の問題には適用されたことのないモンテカルロ直接法を用いてシミュレーション計算を行い，実験値と良く一致する計算結果を得た．以下に，各章において明らかになった諸点をまとめ，本論文の総括とする．

第1章では，まず本論文の目的と意義を明らかにし，希薄気体流に関する一般的な領域区分を述べた後，希薄気体の管内流れに関する過去の研究を概観し，解析の最も困難な中間流領域に対する理論的解析法の現状を述べた．

第2章では，まず，オリフィス及び短い管路を通る希薄気体の質量流に関する実験装置と非定常測定法の説明を行った．次いで，穴(管路)の上・下流の圧力比が十分大きく，下流側の圧力が無視できる状態での実験に関して以下の結論を得た．
[1] 非定常測定法を用いて，圧力比の大きい場合における，オリフィスあるいは短い管路のコンダクタンス測定の実験を行い，信頼できる結果を得た．コンダク

タンスは、自由分子流領域におけるNawyn-Meyerの理論計算値から、連続流領域におけるPerryの値まで、なめらかに変化する傾向にある。

[2] 容器壁面からのガス放出率を、一連のデータ取得時間内では一定であるとみなし、自由分子流領域における実験データからガス放出量を算出してコンダクタンスの補正を行った。また、その有効性を確認した。

[3] 非定常測定法を用いるにあたって、複数の穴（穴間隔は穴直径の5倍以上）を持つ供試部品を作製し低圧域の実験に用いたが、各穴を通る噴流相互の干渉は全く認められなかった。複数穴による計測は、質量流を増大させガス放出量を相対的に減少させるので、低圧域の質量流に関する実験に有効である。

[4] 中間流領域において、有限長の円筒管に適用されるべきHanksの半実験式は、本実験で用いたような短い管路の流れには適用できない。

[5] 円形断面の穴を用いて得られたデータに基づいて、適用範囲の異なる二つの実験式を提案した。

[6] 細長い断面形状を持つ穴のコンダクタンスは、 l/L が小さければ、円筒孔のコンダクタンスとほぼ同じ値となり、実験式(2.22)(2.23)が利用できる。

[7] 本実験で用いた試験気体の温度は、実験日により $15^{\circ}\text{C} \sim 25^{\circ}\text{C}$ の間で変化しているが、この温度範囲内では、コンダクタンスは絶対温度の平方根に比例すると考えられる。

第3章では、穴の下流側圧力が上流側圧力に対して無視できないような圧力比の下で、オリフィス及び短い管路を通る希薄気体質量流に関する実験を行った。実験は、外部に対して閉じられた貯気室（上流）と膨張室（下流）において、上流から下流へ気体を流出させ、上流側の圧力減少と下流側の圧力上昇とから圧力比の異なる条件での質量流を測定するという方法で行った。このような非定常測定法により、以下の結論が得られた。

[1] 圧力比 $P_r = (P_s - P_0)/P_s = 0.5 \sim 1.0$ において、短い円筒孔を通過する希薄気体流のコンダクタンス及び流出係数を実験により求め、 $1 < 1/Kn < 1000$ の領域でなめらかに変化する結果を得た。

[2] $l/d = 1.3$ の円筒孔を通る連続流に近い流れでは、 $P_r \geq 0.6$ において、圧力比の相違による流出係数の違いはほとんど見られない。

[3] l/d が小さい円筒孔ほど，連続流領域においても圧力比の影響が大きく現われ，特に $l/d=0.025$ の場合，それぞれの圧力比における流出係数は，連続流の極限でPerryの値に近づく傾向にある．

第4章では，計算機の飛躍的な進歩により可能となったモンテカルロ直接シミュレーション法に関し，まずその手法の概要の説明から始め，境界壁面での分子の反射に関する計算法，分子間衝突に関する計算法等を詳細に論じた．

第5章では，穴の上流と下流との間で大きな圧力比を持つ場合の二次元スリットを通過する希薄気体流をモンテカルロ直接法でシミュレーション計算し，以下の結論を得た．

[1] モンテカルロ直接法を用いたシミュレーション計算によって，大きな圧力比でスリットを通過する希薄気体の流動抵抗に関する解析を行い，満足できる結果を得た．

[2] 上流側空間の有限性から生じる計算誤差の補正に関しては，上流側境界から流入する分子に，平衡状態の速度分布を与えるのではなく，境界面に垂直な方向の巨視的速度を加えたものを与えることが有効である．

[3] 希薄気体の質量流を詳細にシミュレーションする場合，分子の境界壁面における反射法則（たとえば拡散反射と鏡面反射の割合）を考慮して計算を行う必要がある．この反射過程の相違は，自由分子流領域よりも，中間流領域における流動抵抗により大きな効果を及ぼす．

[4] $1/Kn > 16$ の状態（連続流に近い状態）においては，空間を分割するセル一辺の大きさを，上流側境界における平均自由行程よりも大きくとったが，ほぼ有効にシミュレーションできた．

第6章では，円筒孔を通過する希薄気体流に関して，穴板の温度上昇によって生じる質量流の減少を，非定常測定法による実験とモンテカルロ直接法によるシミュレーションの両面から調べ，以下のような結論を得た．

[1] 円筒孔を通過する希薄気体流に対して，穴板温度を上昇させることによって生ずる流量抑制効果を明らかにした．中間流領域における流量は，気体の温度と

穴板温度との比の平方根 $\sqrt{T_1/T_w}$ にほぼ比例して減少する。

[2] モンテカルロ直接法により，円筒孔を通る希薄気体のシミュレーションを行い，穴板温度が気体の温度と等しい場合あるいは異なる場合に対して実験結果と一致する結果を導くことができた。

[3] シミュレーション計算によると，穴板温度上昇の効果は，穴の周りのわずかな板面積の温度変化に対しても顕著に現われるものであり，これは希薄気体の微少流量制御に有効な手段になると考えられる。

謝 辞

本研究は，名古屋大学工学部藤本哲夫教授の御指導により完結し得たものであり，ここに謹んで感謝の意を表します．

また，本研究について数々の有益な御指導，御助言を賜った名古屋大学工学部中村育雄教授，保原充教授に厚く御礼申し上げます．

さらに，本研究をまとめるに当たり，多くの貴重な御意見と御激励を頂いた三重大学工学部加藤征三教授に厚く感謝いたします．

また，研究進行の過程で懇切な御教示を頂いた名古屋大学工学部藤田秀臣教授，三重大学工学部社河内敏彦助教授に深く感謝いたします．

最後に，多大の御教示御協力を頂いた三重大学工学部機械工学科熱工学講座の方々，並びに名古屋大学工学部電子機械工学科第四講座の方々に深く感謝の意を表します．

参考文献

- (1) Tsien, H. S., "Superaerodynamics, Mechanics of Rarefied Gases," J. Aeron. Sci., 13-12 (1946), 653.
- (2) Knudsen, M., "Die Gesetze der Molekularströmung und der inneren Reibungsströmung der Gase durch Röhren," Ann. d. Phys., 28 (1909), 75.
- (3) Dushman, S., "Scientific Foundations of Vacuum Technique," 2nd ed. (1966), 80, John Wiley & Sons.
- (4) Kennard, E. H., "Kinetic Theory of Gases," (1938), McGraw-Hill.
- (5) Present, R. D., "Kinetic Theory of Gases," (1958), McGraw-Hill.
- (6) Smoluchowski, M. V., "Zur Kinetischen Theorie der Transpiration und Diffusion verdünnter Gase," Ann. d. Phys., 33 (1910), 1559.
- (7) Clausing, P., "Über die Strömung sehr verdünnter Gase durch Röhren von beliebiger Länge," Ann. d. Phys., 12 (1932), 961.
- (8) Dushman, S., "Scientific Foundations of Vacuum Technique," 2nd ed. (1966), 91, John Wiley & Sons.
- (9) De Marcus, W. C., "The Influence of Specular Reflection on the Knudsen Conductance of Circular Capillaries," Proc. 2nd Int. Symp. Rarefied Gas Dynamics, (1961), 161, Academic Press.
- (10) Sparrow, E. M., Jonsson, V. K. and Lundgren, T. S., "Free Molecule Tube Flow and Adiabatic Wall Temperatures," Trans. ASME, J. Heat Transfer, 85-2 (1963), 111.
- (11) Berman, A. S., "Free Molecular Transmission Probability," J. Appl. Phys., 36 (1965), 3356.
- (12) Cole, R. J., Pack, D. C., "Drag and Conductance of Free Molecular Flow through a Rectangular Duct," Proc. 9th Int. Symp. Rarefied Gas Dynamics, 2 (1974), D-19, DFVLR-Press.
- (13) Pack, D. C., Yamamoto, K., "Conductance of Long Inclined Tubes in Collisionless Flow," Proc. 10th Int. Symp. Rarefied Gas Dynamics, Part 1 of Vol. 51 of Progress in Astronautics and Aeronautics (1977), 247, AIAA.

- (14) Van Essen, D., Heerens, W.C., "On the Transmission Probability for Molecular Gas Flow through a Tube," J. Vac. Sci. Technol., 13-6 (1976), 1183.
- (15) Kato, S., Fujimoto, T., "Numerical Solutions of Free-Molecule Flows through Circular Tubes Containing Orifices or Sudden Enlargements or Contractions," Proc. 10th Int. Symp. Rarefied Gas Dynamics, Part 1 of Vol. 51 of Progress in Astronautics and Aeronautics (1977), 237, AIAA.
- (16) Yamamoto, K., Pack, D. C., "Transient Free Molecular Flow through a Tube," Proc. 11th Int. Symp. Rarefied Gas Dynamics, 1 (1979), 207, Commissariat a l'Energie Atomique.
- (17) McCormick, N. J., Kuščer, I., "Knudsen Flow in a Tube with Arbitrary Gas-Wall Interaction," Phys. Fluids. 15-9 (1972), 1567.
- (18) Steckelmacher, W., "The Effect of Cross-Sectional Shape on the Molecular Flow in Long Tubes," Vacuum, 28 - 6/7 (1978), 269.
- (19) Davis, D. H., "Monte Carlo Calculation of Molecular Flow Rates through a Cylindrical Elbow and Pipes of Other Shapes," J. Appl. Phys., 31-7 (1960), 1169.
- (20) Davis, D. H., Levenson, L. L. and Milleron, N., "Effect of Rougher-than-Rough Surfaces on Molecular Flow through Short Ducts," J. Appl. Phys., 35-3 (1964), 529.
- (21) Chubb, J. N., "Monte Carlo Studies of Free Molecular Gas Flow through Various Vacuum Structures," Proc. 4th Int. Vacuum Congress, (1968), 433.
- (22) Brown, G.P., DiNardo, A., Cheng, G.K. and Sherwood, T.K., "The Flow of Gases in Pipes at Low Pressures," J. Appl. Phys., 17-10 (1946), 802.
- (23) Weber, S., "Über den Zusammenhang zwischen der Laminaren Strömung der Reinen Gase durch Rohre und dem Selbstdiffusionskoeffizienten," Det Kongelige Danske Videnskabernes Selskab, 28 (1954), 1.
- (24) Hanks, R. W., Weissberg, H. L., "Slow Viscous Flow of Rarefied Gases through Short Tubes," J. Appl. Phys., 35-1 (1964), 142.
- (25) Shidlovskiy, V.P., "Special Case of Viscous Gas Motion in Cylindrical Tube in Slip Flow Regime," Proc. 6th Int. Symp. Rarefied Gas Dynamics, 1 (1969), 215, Academic Press.

- (26) Wagner, M. H., "Developing Flow in Circular Conducts, Transition from Plug Flow to Tube Flow," J. Fluid Mech., 72 (1975), 257.
- (27) Sreekanth, A.K., "Slip Flow through Long Circular Tubes," Proc. 6th Int. Symp. Rarefied Gas Dynamics, 1 (1969), 667, Academic Press.
- (28) Cercignani, C., Sernagiotto, F., "Cylindrical Poiseuille Flow of a Rarefied Gas," Physics Fluids, 9-1 (1966), 40.
- (29) Van Eckelen H. A. M., Smit, W., "Kinetic Models for Pressure Flow and Self-Diffusion of Rarefied Gases Through Tubes," Physics Fluids, 14-11 (1971), 2295.
- (30) Berman, A.S., Maegley, W.J., "Internal Rarefied Gas Flows with Backscattering," Physics Fluids, 15-5 (1972), 772.
- (31) Kanki, T., Iuchi, S., "Cylindrical Poiseuille Flow and Thermal Creep of a Rarefied Gas," Physics Fluids, 16-6 (1973), 938.
- (32) Lund, L. M., Berman, A. S., "Flow and Self-Diffusion of Gases in Capillaries," J. Appl. Phys., 37-6 (1966), 2489.
- (33) Edwards, R. H., "Low-Density Flows through Tubes and Nozzles," Proc. 10th Int. Symp. Rarefied Gas Dynamics, Part 1 of Vol.51 of Progress in Astronautics and Aeronautics (1977), 199, AIAA.
- (34) Cercignani, C., "Transition Regime and Boltzmann Equation," Proc. 11th Int. Symp. Rarefied Gas Dynamics, 1 (1979), 141, Commissariat a l'Energie Atomique.
- (35) Perry, J. A. , "Critical Flow Through Sharp-Edged Orifices," Trans. ASME, 71 (1949), 757.
- (36) Willis, D. R., "Mass Flow through a Circular Orifice and a Two-Dimensional Slit at High Knudsen Numbers," J. Fluid Mech., 21-1 (1965), 21.
- (37) Rotenberg, A., Weitzner, H., "Nearly Free Flow through an Orifice," Physics Fluids, 12-8 (1969), 1573.
- (38) Wang, P.Y., Yu, E.Y., "Nearly Free-Molecular Slit Flow at Finite Pressure and Temperature Ratios," J. Fluid Mech., 50-3 (1971), 565.
- (39) Liepmann, H. W., "Gaskinetics and Gasdynamics of Orifice Flow," J. Fluid Mech., 10-1 (1961), 65.
- (40) Sreekanth, A. K., "Some Experiments on the Flow of a Rarefied Gas through a Circular Orifice," Proc. 4th Int. Symp. Rarefied Gas Dynamics, 1(1964), 621, Academic Press.

- (41) Sreekanth, A. K., "An Experimental Investigation of Mass Flow through Short Circular Tubes in the Transition Flow Regime," Flight Sci. Labo. Report 95, D1-82-0427 (1965), Boeing Scientific Research Labo.
- (42) Smetana, F. O., Sherrill, W. A., II, Schort, D. R., Jr., "Measurements of the Discharge Characteristics of Sharp-Edged and Round-Edged Orifices in the Transition Regime," Proc. 5th Int. Symp. Rarefied Gas Dynamics, 2 (1966), 1243, Academic Press.
- (43) Lord, R. G., Hurlbut, F. C. and Willis, D. R., "Nearly Free Molecule Flow through a Circular Orifice at High Pressure Ratios," Proc. 5th Int. Symp. Rarefied Gas Dynamics, 2 (1966), 1235, Academic Press.
- (44) Naumann, A., Chun, C. H., "Mass-Flow Measurements for Sharp-Edged Orifices in Low Density Flow," Proc. 9th Int. Symp. Rarefied Gas Dynamics, 2 (1974), D.21, DFVLR Press.
- (45) Chapman, S., Cowling, T. G., "The Mathematical Theory of Non-Uniform Gases," 3rd edn. (1970), Cambridge Univ. Press.
- (46) Vincenti, W. G., Kruger, C. H., "Introduction to Physical Gas Dynamics," (1967), John Wiley and Sons.
- (47) Morinishi, K., Oguchi, H., "A Computational Method and Its Application to Analyses of Rarefied Gas Flows," Proc. 14th Int. Symp. Rarefied Gas Dynamics, 1 (1985), 149, Univ. Tokyo Press.
- (48) Shakhov, E. M., "Kinetic Model Equations and Numerical Results," Proc. 14th Int. Symp. Rarefied Gas Dynamics, 1 (1985), 137, Univ. Tokyo Press.
- (49) Makiyara, H., Ito, T., "Numerical Analysis of Rarefied Cylindrical Couette Flows," Proc. 14th Int. Symp. Rarefied Gas Dynamics, 1 (1985), 159, Univ. Tokyo Press.
- (50) Sone, Y., "Analytical Studies in Rarefied Gas Dynamics," Proc. 14th Int. Symp. Rarefied Gas Dynamics, 1 (1985), 71, Univ. Tokyo Press.
- (51) Cercignani, C., "Mathematical Methods in Kinetic Theory," (1969), Plenum Press.
- (52) Beylich, A. E., "Plane Flow through an Orifice," Proc. 14th Int. Symp. Rarefied Gas Dynamics, 1 (1985), 517, Univ. Tokyo Press.
- (53) Nordsieck, A., Hicks, B. L., "Monte Carlo Evaluation of the Boltzmann Collision Integral," Proc. 5th Int. Symp. Rarefied Gas Dynamics, 1 (1967), 695, Academic Press.

- (54) Yen, S.M., "Numerical Solution of the Nonlinear Boltzmann Equation for Nonequilibrium Gas Flow Problems," Ann. Rev. Fluid Mech., 16 (1984), 67.
- (55) Haviland, J. K., "Determination of Shock Wave Thickness by the Monte Carlo Method," Proc. 3rd Int. Symp. Rarefied Gas Dynamics, 1 (1963), 274, Academic Press.
- (56) Tuer, T. W., Springer, G. S., "A Test Particle Monte Carlo Method," Computers & Fluids, 1 (1973), 399.
- (57) Bird, G. A., "Approach to Translational Equilibrium in a Rigid Sphere Gas," Phys. Fluids, 6 (1963), 1518.
- (58) Bird, G. A., "Molecular Gas Dynamics," (1976), Oxford Univ. Press.
- (59) Bird, G. A., "Monte Carlo Simulation of Gas Flows," Ann. Rev. Fluid Mech., 10 (1978), 11.
- (60) Bird, G. A., "Monte-Carlo Simulation in an Engineering Context," Proc. 12th Int. Symp. Rarefied Gas Dynamics, Part 1 of Vol. 74 of Progress in Astronautics and Aeronautics, (1981), 239, AIAA.
- (61) Nanbu, K., "Interrelations between Various Direct Simulation Methods for Solving the Boltzmann Equation," J. Phys. Soc. Jpn., 52-10 (1983), 3382.
- (62) Deshpande, S. M., Subba Raju, P. V. and Ramani, N., "A Comparative Study of the Time Counter and Random Collision Number Strategies Used in Monte Carlo Simulation," Proc. 11th Int. Symp. Rarefied Gas Dynamics, 1 (1979), 435, Commissariat a l'Energie Atomique.
- (63) 古浦・津田・斉藤, 希薄気体数値風洞 (モンテカルロシミュレーション), 宇宙科学技術連合講演会講演集, 28 (1984), 124.
- (64) Bird, G. A., "The Nozzle Lip Problem," Proc. 9th Int. Symp. Rarefied Gas Dynamics, 1 (1974), A.22, DFVLR Press.
- (65) Bird, G. A., "Transition Regime Behavior of Supersonic Beam Skimmers," Phys. Fluids, 19-10 (1976), 1486.
- (66) Fujimoto, T., Usami, M., "Rarefied Gas Flow through Orifices," Res. Rep. Eng. Mie Univ., 5 (1980), 21.
- (67) 藤本・宇佐美, オリフィス及び短い円筒管を通る希薄気体の流れ (非定常実験法と実験式), 日本機械学会論文集, B編, 49巻 438号 (昭58-2), 359.
- (68) Fujimoto, T., Usami, M., "Rarefied Gas Flow Through a Circular Orifice and Short Tubes," Trans. ASME, J. Fluid Eng., 106-4 (1984), 367.

- (69) 藤本・宇佐美, スリットを通過する希薄気体のモンテカルロシミュレーション (上流と下流との間で大きな圧力比をもつ場合), 日本機械学会論文集, B編, 50巻 459号 (昭59-11), 2717.
- (70) Usami, M., Fujimoto, T., Kato, S., "Direct Monte-Carlo Simulation on Rarefied Gas Flow," Research Rep. Eng. Mie Univ., 9 (1984), 1.
- (71) 藤本・宇佐美・加藤, 円筒孔を通過する希薄気体の穴板温度上昇による流量抑制効果 (非定常実験と直接シミュレーション), 日本機械学会論文集, B編, 51巻 466号 (昭60-6), 1957.
- (72) Henning, H., "The Approximate Calculation of Transmission Probabilities for the Conductance of Tubulations in the Molecular Flow Regime," Vacuum, 28-3 (1978), 151.
- (73) Kowalik, J., Osborne, M.R. (山本, 小山 訳), 非線形最適化問題, (昭45), 27, 培風館.
- (74) Bird, G. A., "Simulation of Multi-Dimensional and Chemically Reacting Flows," Proc. 11th Int. Symp. Rarefied Gas Dynamics, 1 (1979), 365, Commissariat a l'Energie Atomique.
- (75) Bird, G. A., "Definition of Mean Free Path for Real Gases," Phys. Fluids, 26-11 (1983), 3222.
- (76) Bird, G. A., "Numerical Simulation and the Boltzmann Equation," Proc. 7th Int. Symp. Rarefied Gas Dynamics, 2 (1971), 693, Editrice Tecnico Scientifica.
- (77) Larsen, P.S., Borgnakke, C., "Statistical Collision Model for Simulating Polyatomic Gas with Restricted Energy Exchange," Proc. 9th Int. Symp. Rarefied Gas Dynamics, 1 (1974), A.7, DFVLR Press.

発表論文ならびに業績リスト

氏名 宇佐美 勝

〔1〕 本論文に関するもの

論文題目	公表の方法及び時期	共著者
(1) オリフィス及び短い円筒管を通る希薄気体の流れ（非定常実験法と実験式）	日本機械学会論文集， B編，49巻 438号 (昭58-2)，359-366	藤本哲夫
(2) スリットを通過する希薄気体のモンテカルロシミュレーション（上流と下流との間で大きな圧力比をもつ場合）	日本機械学会論文集， B編，50巻 459号 (昭59-11)，2717-2722	藤本哲夫
(3) Rarefied Gas Flow Through a Circular Orifice and Short Tubes	Transactions of the ASME, Journal of Fluids Engineering, Vol.106 No.4 (1984-12)，367-373	T.Fujimoto
(4) 円筒孔を通過する希薄気体の穴板温度上昇による流量抑制効果（非定常実験と直接シミュレーション）	日本機械学会論文集， B編，51巻 466号 (昭60-6)，1957-1961	藤本哲夫 加藤征三

[2] その他の論文

論文題目	公表の方法及び時期	共著者
(1) Heat Transfer from a Spine through a Rarefied Gas	Research Reports of the Faculty of Engineering, Mie University, Vol.2 (1977-12), 11-18	T.Fujimoto
(2) Rarefied Gas Flow through Orifices	Research Reports of the Faculty of Engineering, Mie University, Vol.5 (1980-12), 21-30	T.Fujimoto
(3) Numerical Approaches to Rarefied Gas Dynamics	Research Reports of the Faculty of Engineering, Mie University, Vol.6 (1981-12), 15-27	T.Fujimoto Y.Yokoo
(4) An Analysis of Structure of Free Jets by Flow Visualization	Research Reports of the Faculty of Engineering, Mie University, Vol.8 (1983-12), 13-22	T.Fujimoto A.Matsubara
(5) 可視化による自由噴流の構造解析	日本機械学会論文集, B編, 50巻 449号 (昭59-1), 233-240	藤本哲夫 松原 章
(6) レーザー蛍光法による自由噴流の構造解析	流体熱工学研究, 19巻 1号 (昭59-5), 39-48	藤本哲夫 加藤征三 松原 章

論文題目	公表の方法及び時期	共著者
(7) Direct Monte-Carlo Simulation on Rarefied Gas Flow	Research Reports of the Faculty of Engineering, Mie University, Vol.9 (1984-12), 1-8	T.Fujimoto S.Kato
(8) A Study on the Structure of Free-Jets of Mixture by Laser-Induced Fluorescence	Proceedings of the 14th International Symposium Rarefied Gas Dynamics, Vol.1 (1984), 467-475	T.Fujimoto S.Kato T.Niimi S.Kamiya
(9) オリフィスを通過する希薄気体 のモンテカルロ直接シミュレー ション	流体熱工学研究, 21巻 1号 (昭61-5) 17-27	藤本哲夫 加藤征三