

9.1 热遷移現象の解析

热遷移現象の実験 [1] に関する DSMC 法による解析 [2] と同様の問題を DPMC 法で解析して文献 [1], [3] の実験式と比較する。

解析内容

直径 10mm, 長さ 100mm の円管の両端に、直径 50mm, 高さ 10mm の円筒容器を円管軸と同軸に接続する (図 9.1.1 参照)。

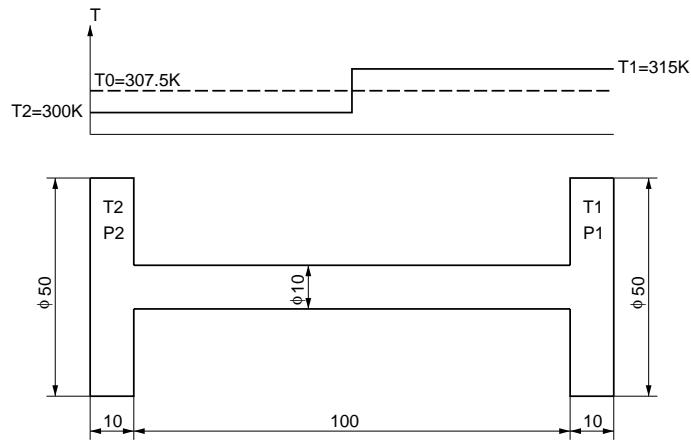


図 9.1.1 热遷移現象計算モデル

この容器の壁面温度を $T_0 = 307.5\text{K}$ に保った状態でアルゴンガスを容器内に導入し、容器内のガス圧力を p_0 に設定する (p_0 の具体値は計算条件の項参照)。時刻 $t = 0$ に、円管中央から左側の部分の容器壁面温度を $T_2 = 300\text{K}$, 右側の部分の容器壁面温度を $T_1 = 315\text{K}$ に変化させ、定常状態を達成させる。定常状態達成後の左側容器の圧力 p_2 と右側容器の圧力 p_1 から算出される圧力比 p_1/p_2 および熱遷移の度合 γ

$$\gamma = \frac{1 - p_2/p_1}{1 - \sqrt{T_2/T_1}} \quad (1)$$

を求めて、それを文献 [3], [1] の実験式と比較する。

計算条件

- 初期圧力 p_0

容器内に導入するアルゴンガス圧力 p_0 を表 1 に示す値に設定した 9 ケースを計算する (表中 K_{n0} は、圧力 p_0 , 温度 $T_0 = 307.5\text{K}$ におけるクヌーセン数)。

p_0 (Pa)	K_{n0}	p_0 (Pa)	K_{n0}
2.29002×10^1	0.031623	7.24168×10^{-2}	10
7.24168	0.1	2.29002×10^{-2}	31.623
2.29002	0.31623	7.24168×10^{-3}	100
7.24168×10^{-1}	1	7.24168×10^{-4}	1000
2.29002×10^{-1}	3.1623		

表 1 初期圧力 p_0 と初期クヌーセン数 K_{n0}

• 時間ステップ幅 Δt

$K_{n0} = 0.031623$ は $\Delta t = 10^{-7}$ s で、 $K_{n0} = 0.031623$ 以外は $\Delta t = 2 \times 10^{-7}$ s とする。

• 境界条件

容器壁面に対応する境界は、容器壁面温度の拡散反射境界とする。

• 左右容器の圧力 p_2, p_1 の算出

左右容器端面の円板面に衝突する気体分子の反射前後の運動量変化から算出される軸方向力を円板面積で割って算出する。具体的には 2 万ステップ間隔でこの値を 60 個算出し、最後の 30 個の値を平均する。

セル分割

軸対称問題として解析し、対称軸を含む面内を 1mm×1mm のセルに分割する。

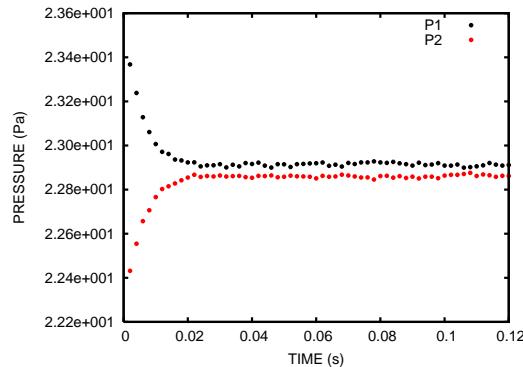


図 9.1.2 解析領域のセル分割図 (軸対称解析 : 1000 セル)

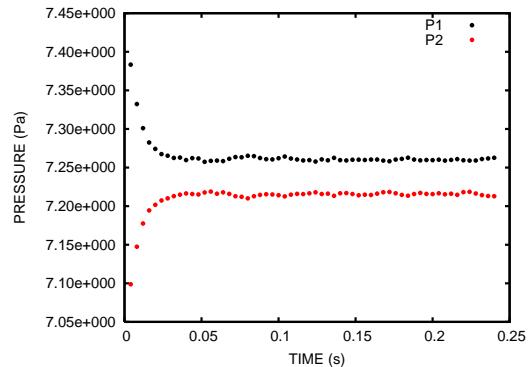
結果

• 左右容器圧力の時間変化

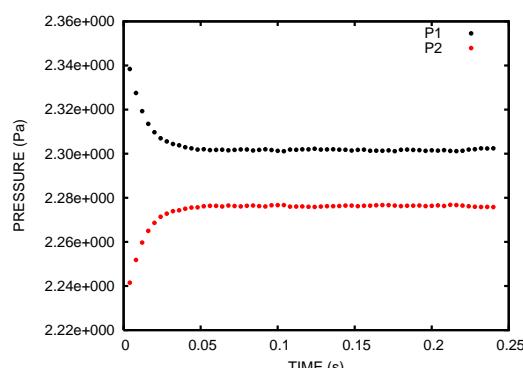
左右容器の圧力 p_2, p_1 と時間 t の関係を図 9.1.3 に示す。



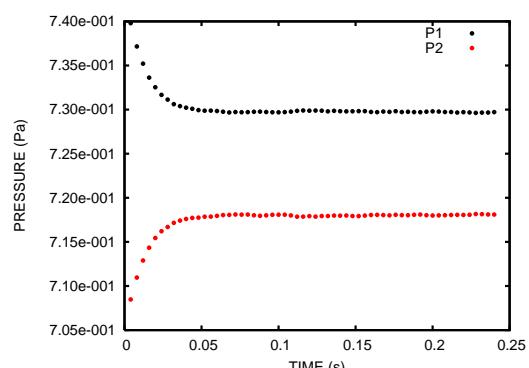
$$K_{n0} = 0.031623$$



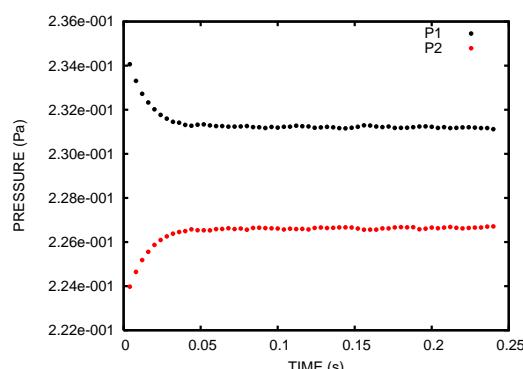
$$K_{n0} = 0.1$$



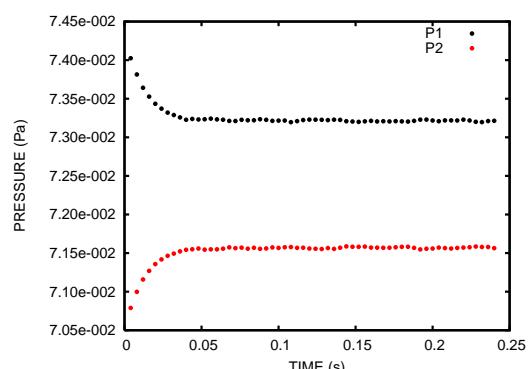
$$K_{n0} = 0.31623$$



$$K_{n0} = 1$$

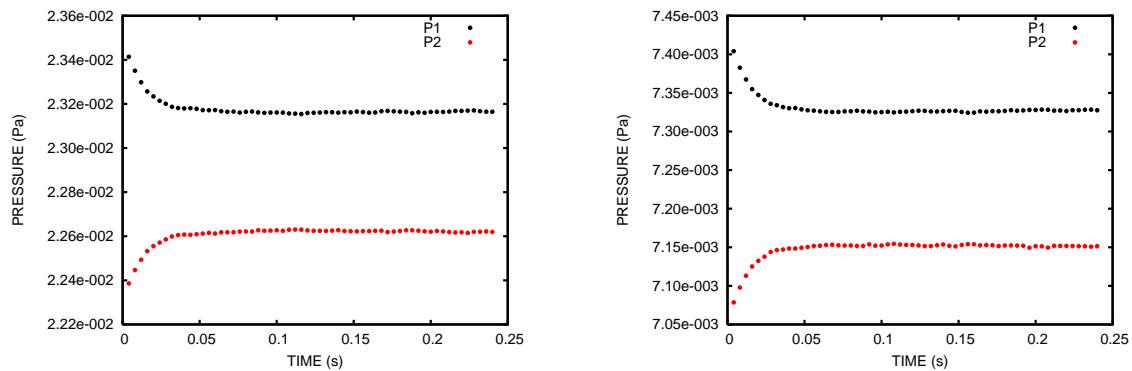


$$K_{n0} = 3.1623$$



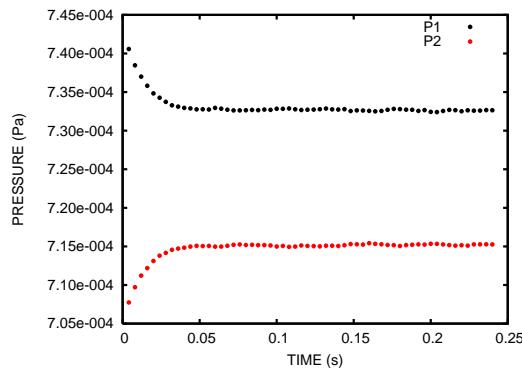
$$K_{n0} = 10$$

図 9.1.3 左右容器圧力 p_2, p_1 と時間 t の関係 (続く)



$$K_{n0} = 31.623$$

$$K_{n0} = 100$$



$$K_{n0} = 1000$$

図 9.1.3 左右容器圧力 p_2, p_1 と時間 t の関係

● 热遷移の度合

左右容器圧力 p_2, p_1 から算出された热遷移の度合 γ と K_n の関係を図 9.1.4 に示す。

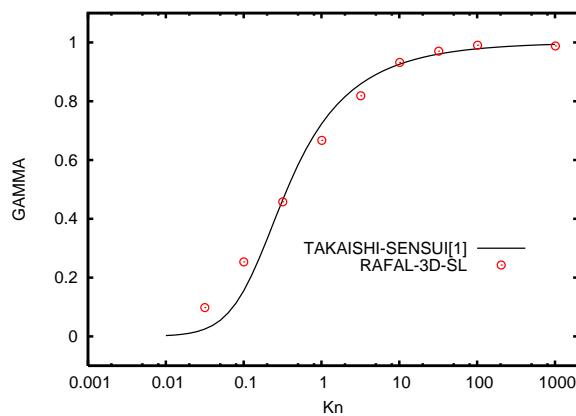


図 9.1.4 热遷移の度合とクヌーセン数の関係

横軸 K_n は圧力 p_2 , 温度 $T_0 = (T_1 + T_2)/2$ におけるアルゴン分子の平均自由行程

$$\lambda = \frac{k(T_1 + T_2)/2}{\sqrt{2}\sigma_T p_2} \quad (2)$$

と円管直径 d で定義されるクヌーセン数

$$K_n = \frac{\lambda}{d} = \frac{k(T_1 + T_2)/2}{\sqrt{2}\sigma_T p_2} \frac{1}{d} \quad (3)$$

である (k はボルツマン定数 $k = 1.380658 \times 10^{-23}$ (J/K)、 σ_T はアルゴン分子を剛体球とみなしたときの全衝突断面積 $\sigma_T = 4.1455 \times 10^{-19}$ m²)。

図中の実線は文献 [1] の熱遷移の度合 γ に関する実験式をクヌーセン数 K_n で表した

$$\gamma = \frac{1}{A(1/K_n)^2 + B(1/K_n) + C\sqrt{1/K_n} + D} \quad (4)$$

である。式 (4) 分母中の定数は、 $A = 3.370 \times 10^{-2}$, $B = 1.427 \times 10^{-1}$, $C = 2.073 \times 10^{-1}$, $D = 1$ である (文献 [1] Table 1 に記載の値を上記の k, σ_T を用いて換算)。

• 左右容器の圧力比

左右容器の圧力比 p_1/p_2 と無次元圧力 Ψ との関係を図 9.1.5 に示す。

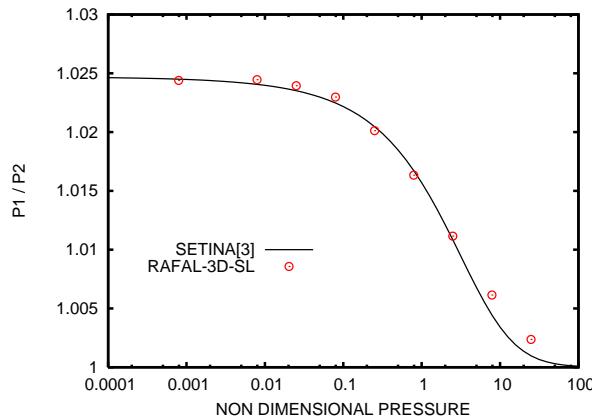


図 9.1.5 左右容器圧力比と右容器 (高温側容器) 無次元圧力の関係

横軸 Ψ は p_1 を p^* で無次元化した $\Psi = p_1/p^*$ であり、 p^* は

$$p^* = \frac{\mu_0 \bar{c}_0}{d} = 0.922061 \quad (\text{Pa}) \quad (4)$$

である。ここで、 μ_0 は温度 $T_0 = 307.5\text{K}$ におけるアルゴンガスの粘度 $\mu_0 = 2.28 \times 10^{-5}\text{Pas}$ 、 \bar{c}_0 は温度 $T_0 = 307.5\text{K}$ におけるアルゴンガス分子の平均速度 $\bar{c}_0 = \sqrt{8RT_0/\pi} = \sqrt{8 \times 208.1333 \times 307.5/\pi} = 403.7043\text{m/s}$ (R は単位質量当たり気体定数)、 d は円管直径 $d = 0.01\text{m}$ である。

図中の実線は文献 [3] の圧力比 p_1/p_2 に関する実験式

$$\frac{p_1}{p_2} = \frac{A\Psi^2 + B\Psi + C\sqrt{\Psi} + \sqrt{T_1/T_2}}{A\Psi^2 + B\Psi + C\sqrt{\Psi} + 1} \quad (5)$$

である。式 (5) 中の定数は、 $A = 0.0262$, $B = 0.275$, $C = 0.272$ である (文献 [3]Table 2 のアルゴンに対する値)。

検討

容器壁面に温度分布を与えてから定常状態が達成されるまでの時間は、圧力レベルが高い程短くなっている。これは圧力レベルが高い程分子間衝突が頻繁になり、緩和過程が促進されるためと思われる。

熱遷移の度合とクヌーセン数の関係は、クヌーセン数が 10 以上の領域では実験式とほぼ一致しているが、クヌーセン数が 10 未満の領域では実験式と相違が見られる。そしてこの相違はクヌーセン数 0.1 以下で特に大きくなっている。また、左右容器圧力比と無次元圧力の関係にも同様の相違が見られる。

この相違が生じる原因として、現バージョンの RAFAL-3D-SL では BGK 方程式のパラメータである緩和時間を全解析領域で一定としているが、この仮定がクヌーセン数が小さい領域で有効でなくなるなどが考えられる (緩和時間は平均自由時間に比例し、左右容器におけるそれぞれの平均自由時間 τ_2, τ_1 は $K_n \rightarrow 0$ のとき $\tau_2/\tau_1 \rightarrow \sqrt{T_2/T_1}$ となる)。

計算時間

Core i7 2.67Ghz 搭載パソコンで

$K_{n0} = 1000$ の場合、33 時間程度

$K_{n0} = 0.031623$ の場合、173 時間程度。

参考文献

- [1]Takaishi,T. , Sensui,Y. : Thermal Transpiration Effect of Hydrogen, Rare Gases and Methane , Transactions of the Faraday Society Vol.59(1963),pp.2503-2514.
- [2]Iwata,K. , Kusumoto,Y. : Modification of Takaishi-Sensui formula for a diaphragm gauge system connected by an arbitrary length pipe , Vacuum Vol.84(2010),pp.729-733.
- [3]Šetina,J. : New approach to corrections for thermal transpiration effects in capacitance diaphragm gauges , Metrologia Vol.36(1999),pp.623-626.