

## 7. アルゴンガス中の炭酸ガスの拡散

- 目的

混合ガスの分子間衝突処理(剛体球分子モデル)と重み因子解析が正しく機能することを確認する。

- 計算内容

アルゴンガス中に放出された微量炭酸ガスの拡散過程をシミュレーションし、拡散係数を求める。このとき、微量炭酸ガスのシミュレーション用分子数が十分大きくなるように重みを付けて解析する。下記の非定常解析を行う。

長さ 2.01m, 幅 0.2m の 2 次元スリットに図 7.1 に示す座標系を設定する。このスリットを  $x$  方向 201 等分割  $y$  方向 1 分割の 201 個のセルに分割する。

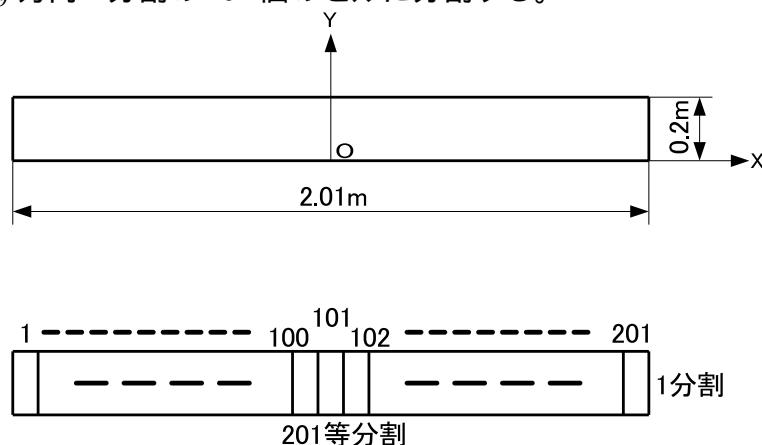


図 7.1 解析領域の設定とセル分割

### 過程 1

101 セル(中央セル)の左右の境界の両面を鏡面反射固体壁境界、その他の境界を流入境界として 1~201 セルに圧力  $p=0.5\text{Pa}$ , 温度  $T=300\text{K}$  のアルゴンガスを導入し、101 セルに圧力  $p=0.0005\text{Pa}$ , 温度  $T=300\text{K}$  の炭酸ガスを導入する。101 セルにはアルゴンガスと炭酸ガスが導入されることになる。ここで、炭酸ガスの重みを 1000 とする。

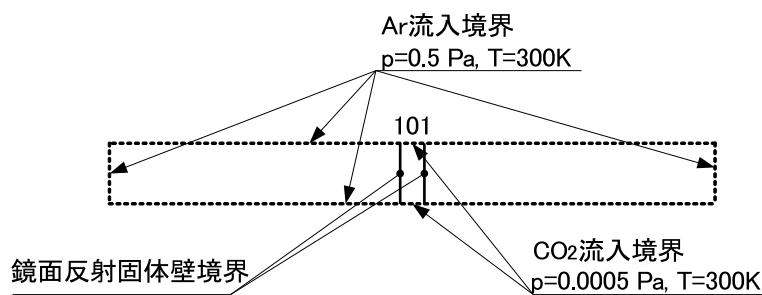


図 7.2 過程 1 境界条件

## 過程 2

101 セルの左右の境界を透過境界、スリット上下の境界を鏡面反射固体壁境界に変更し、101 セル内に導入した炭酸ガスの  $x$  方向の拡散過程をシミュレーションする。このとき、炭酸ガス分子がスリット左右の流入境界に到達する前にシミュレーションが終了するよう時間ステップ数 NSTEP を設定する。また、所定の時間ステップ間隔 NSAMP でマクロ量をファイルに格納する。

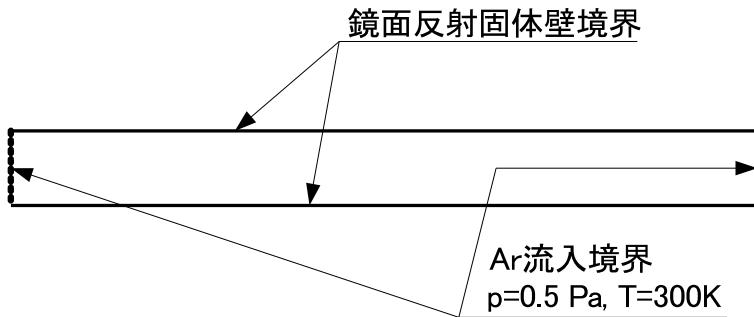


図 7.3 過程 2 境界条件

### • 拡散係数の算出

上記の計算内容は、炭酸ガス分子数密度  $n(x, t)$  に対する一次元拡散方程式

$$\frac{\partial n}{\partial t} = D \frac{\partial^2 n}{\partial x^2} \quad (1)$$

に初期値

$$n(x, 0) = \delta(x) \quad (2)$$

を与えた初期値問題の解の時間変化をシミュレーションしたことに相当する。ここで、 $x$  は  $x$  方向座標値、 $t$  は時間、 $D$  は拡散係数である。

この初期値問題の解は

$$n(x, t) = \frac{1}{2\sqrt{\pi t D}} \exp\left(-\frac{x^2}{4Dt}\right) \quad (t > 0) \quad (3)$$

と求められ、時刻  $t$  における  $n$  の  $x$  方向分布は、平均  $\mu = 0$ 、分散  $\sigma^2 = 2tD$  の正規分布となる。すなわち、時刻  $t$  において区間  $(x, x + dx)$  に炭酸ガス分子が存在する確率は  $n(x, t)dx$  となり、 $\sigma^2 = 2tD$  は時刻  $t$  にスリット内に分布する炭酸ガス分子の  $x$  座標の分散を表す。

この分散  $\sigma^2$  は時間  $t$  に比例し、比例定数は  $2D$  で

$$D = \frac{1}{2} \frac{d\sigma^2}{dt} \quad (4)$$

なる関係がある。

分散  $\sigma^2$  の意味と式 (4) の関係から、上記のシミュレーション結果より拡散係数を以下のように算出する。

(1) 時間ステップ間隔 NSAMP でファイルに格納された各時刻  $t_i (i = 1 \dots N_S : N_S = \text{サンプルマクロ量のファイルへの格納回数} = \text{NSTEP}/\text{NSAMP})$  における炭酸ガス分子数密度を  $n_i^j (j = 1 \dots 201 : j = \text{セル番号})$  とする。 $x_j$  を第  $j$  セル重心の  $x$  座標値として、時刻  $t_i$  における炭酸ガス分子位置の分散  $\sigma_i^2$  を

$$\sigma_i^2 = \frac{1}{201} \sum_{j=1}^{201} x_j^2 \frac{n_i^j}{N_i^T} , \quad N_i^T = \sum_{j=1}^{201} n_i^j$$

と求める ( $N_i^T$  は時刻  $t_i$  における解析領域内のシミュレーション用分子数)。

(2) 横軸に時間  $t$ 、縦軸に分散  $\sigma^2$  をとり、 $N_S$  個の点  $(t_i, \sigma_i^2)$  をプロットし、これらの点に適合する直線を最小二乗法により決定する。その直線の勾配の  $1/2$  を炭酸ガスの拡散係数  $D$  とする。

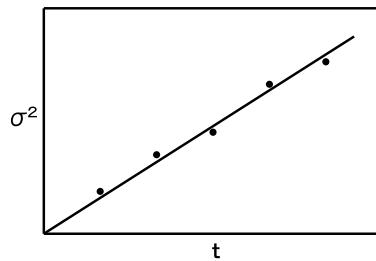


図 7.4 回帰直線の決定

(3) 時間ステップ幅  $\Delta t = 4 \times 10^{-6}\text{s}$ 、時間ステップ数 NSTEP = 2500、サンプルステップ間隔 NSAMP = 50 で計算する。炭酸ガスの拡散過程を 0.01s 間シミュレーションし、0.0002s 間隔でマクロ量を 50 回サンプルすることになる。

#### • 結果

炭酸ガス分子位置の分散と時間の関係を図 7.5 に示す。図中実線は最小自乗法により適合した回帰直線である。

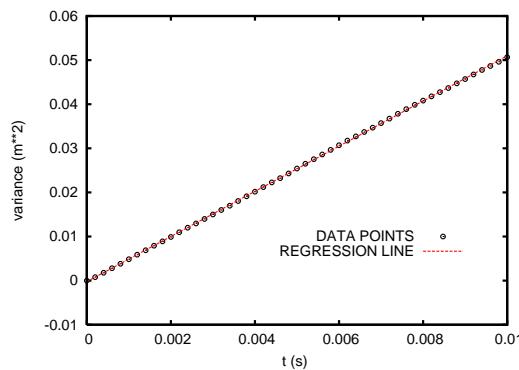


図 7.5 炭酸ガス分子位置の分散と時間の関係

拡散係数  $D$  は、回帰直線の勾配の  $1/2$  として

$$D = 2.5597 \text{ (m}^2/\text{s)}$$

となる。

一方、文献 [1] によれば分子が剛体球の場合、アルゴンガス中の炭酸ガスの拡散係数  $D_{12}$  は

$$D_{12} = \frac{3\sqrt{2}}{16n_1 d_{12}^2} \left( \frac{kT}{\pi m_r} \right)^{1/2} \text{ (m}^2/\text{s)}$$

と表される。ここで、 $n_1$  はアルゴンガスの分子数密度、 $d_{12}$  は分子を剛体球としたときのアルゴンガス分子と炭酸ガス分子直径の平均、 $k$  はボルツマン定数、 $T$  は温度、 $m_r$  は換算質量である。

$n_1$  は、圧力  $p = 0.5\text{Pa}$ 、温度  $T = 300\text{K}$  のときの数密度で  $n_1 = 1.207154 \times 10^{20}\text{m}^{-3}$ 。

剛体球分子の直径  $d$  は、全衝突面積  $\sigma_T$  から  $d = \sqrt{\sigma_T/\pi}$  と求められ、アルゴンガス分子、炭酸ガス分子それぞれの直径  $d_1, d_2$  は

$$\begin{aligned} d_1 &= \sqrt{4.1455 \times 10^{-19}/\pi} = 3.6326 \times 10^{-10} \text{ (m)} \\ d_2 &= \sqrt{6.6007 \times 10^{-19}/\pi} = 4.5837 \times 10^{-10} \text{ (m)} \end{aligned}$$

となり、 $d_{12}$  は

$$d_{12} = \frac{d_1 + d_2}{2} = \frac{3.6326 \times 10^{-10} + 4.5837 \times 10^{-10}}{2} = 4.10815 \times 10^{-10} \text{ (m)}$$

となる。

換算質量  $m_r$  は、アルゴンガス分子、炭酸ガス分子それぞれの質量  $m_1, m_2$  から

$$m_r = \frac{m_1 + m_2}{m_1 m_2} = \frac{6.633526 \times 7.308004 \times 10^{-52}}{(6.633526 + 7.308004) \times 10^{-26}} = 3.477225 \times 10^{-26} \text{ (kg)}$$

となる。

以上より  $D_{12}$  は

$$\begin{aligned} D_{12} &= \frac{3\sqrt{2}}{16 \times 1.207154 \times 10^{20} \times (4.10815 \times 10^{-10})^2} \times \left( \frac{1.380658 \times 10^{-23} \times 300}{\pi \times 3.477225 \times 10^{-26}} \right)^{1/2} \\ &= 2.5344 \text{ (m}^2/\text{s)} \end{aligned}$$

と算出される。

DSMC 計算による拡散係数  $D$  の理論値  $D_{12}$  との相対誤差は

$$\frac{2.5597 - 2.5344}{2.5344} \times 100 = +0.998 \text{ (%)}$$

である。

#### • 文献

- [1] Chapman,S. and Cowling,T. : The Mathematical Theory of Non-Uniform Gases : Cambridge University Press,Cambridg(1953),p.165.