拡散方程式の定常解に基づく分子流コンダクタンス値*

松田七美男^{*1}・佐藤 吉博^{*2}・齊藤 芳男^{*2}

Calculation of Molecular Conductance Based on the Stationary Solution of Diffusion Equation

Namio MATUDA^{*1}, Yoshihiro SATO^{*2} and Yoshio SAITO^{*2}^{*1}Department of Physics, Tokyo Denki University 2-2 Kanda-Nisiki-cho, Chiyoda-ku, Tokyo 101-8457, Japan^{*2}KEK-High Energy Accelerator Research Organization 1-1 Oho, Tsukuba, Ibaraki 305-0801, Japan

(Received October 28, 2009, Accepted January 21, 2010)

In this report we derive approximation of the transmission probability K for a cylindrical pipe which is usually given with computational calculation by using Monte Carlo technique nowadays, with rather old fashioned diffusion theory. Same results as Dushman's approximation is given based on the stationary solution of the one-dimensional diffusion equation with adopting the special boundary condition, that is the boundary of Dirichlet condition $n=0$ (n : number density of molecules) placing at the outer side of the real boundary (exit of the pipe). Transmission probability of the serially connected cylindrical ducts of different size is also given by those theory of diffusion.

1. はじめに

一様円形導管内の気体の流れは分子流領域においては次のような一次元拡散方程式で記述できることが知られている。

$$J = -D \frac{\partial n}{\partial x} \left[D = \frac{\bar{v}}{3} \right] \quad (1)$$

ここに J は流束, n は分子密度, x は位置座標である。系を特徴づける拡散定数 D は, 管内平均自由行程 λ (円形導管では直径 d に等しい) と気体の平均速度 $\bar{v}$ の積に比例し, その係数が $1/3$ であることが気体分子運動論から導かれる。真空工学の教科書¹⁾²⁾では, ここで両端の圧力を p_1, p_2 とおき, さらに定常解が直線であることよりコンダクタンスを導き, 以下の通過確率 K を得る (Knudsen³⁾の式と呼ばれる)。

$$K = \frac{4d}{3L} \quad (2)$$

そしてこれは管の長さ L が無限長で正しく, 有限の長さでは補正が必要であるとして, いろいろな近似方法が説明されるのである。Table 1 に近似の名称と近似式, Fig. 1 にそれらのプロットを比較して示す。Cole の数値計算結果⁴⁾が最も信頼できる値であると認められている。なお, Berman⁵⁾と Santeler⁶⁾の式は Fig. 1 では重なって見え区別できない。

このように, 有限長さの導管の分子流コンダクタンスを理解するには多少回り道しなければならない。一方, コンピュータを利用してモンテカルロ法により通過確率を数値計算すれば, 短い管の分子流コンダクタンスが直接数値として得られる⁷⁾。実用上は数値が得られれば十分であるが, 数理モデルによる解析もまた重要である。筆者らは, モンテカルロ法による衝突回数分布の数値解を拡散方程式により解析する試みを行ってきたが^{8,9)}, その過程で通過確率も比較的直接的に説明できることに気づいた。今回, その通過確率の算出方法について報告する。

Table 1 Approximations of the transmission probability of cylindrical pipes.

name	approximation $K(x) [x \equiv L/d]$
Kennard	$(1+x)^{-1}$
Dushman	$\left(1 + \frac{3}{4}x\right)^{-1}$
Santeler	$\left(1 + \frac{3}{4}x'\right)^{-1}, \quad x' = x \left(1 + \frac{1}{3 + \frac{6}{7}x}\right)$
Berman	$1 + x^2 - x\sqrt{x^2+1} - \frac{2[(2-x^2)\sqrt{x^2+1} + (x^3-2)]^2}{9[x\sqrt{x^2+1} - \ln(x + \sqrt{x^2+1})]}$
Cole	Discrete values by calculating the Clausius integral equation with variational method

Fig. 1 Comparison of several approximation curves for the transmission probability of cylindrical pipe.

的に説明できることに気づいた。今回, その通過確率の算出方法について報告する。

2. 理論的背景及びコンダクタンス計算への応用

モンテカルロ法の結果を拡散モデルで解析する場合には,

* 平成21年11月4日 第50回真空に関する連合講演会で発表

^{*1} 東京電機大学工学部物理系列 (〒101-8457 東京都千代田区神田錦町2-2)^{*2} 高エネルギー加速器研究機構 (〒305-0801 茨城県つくば市大穂1-1)

その境界条件が問題となる。実は、両端を固定値とする境界条件を与えてシミュレートすることは簡単にはできない。単に入り口からランダムに気体分子を入射させ出口から出る確率を計算する方法においては、**Fig. 2**に示されるように出口を過ぎた直後分子は消失する、すなわち管の外側で急激に値が0となるという境界条件を与えたことになる。このような有限領域における自由粒子の流れの非定常流問題は、原子炉の中性子の拡散問題として原子力工学の分野では教科書的な扱い方が確立している¹⁰⁾。それは、仮想的に値がゼロである境界を外側 $2\lambda/3$ の位置に設定して解くというものである。また、円形導管の分子流の角度分布を考慮して同様の結果を導いた報告もある¹¹⁾。

この扱いが定常流の解析においても活きているとして、単管および異径導管の直列接続時の分子流コンダクタンスを算出してみる。

有限長さの円形導管

円形の単管の場合には、長さが実効的に $L + 4/3 \cdot \lambda$ となったとして解析すればよい。**Fig. 3**より明らかに、

$$JA = -D \frac{\partial n}{\partial x} A = \frac{\lambda \bar{v}}{3} \frac{n_1 - 0}{L + \frac{4}{3} \lambda} \frac{\pi d^2}{4} = \frac{\bar{v}}{4} \frac{n_1 - 0}{1 + \frac{3L}{4d}} \frac{\pi d^2}{4} \quad (3)$$

$$Q = AJkT = \frac{\bar{v}}{4} A \cdot \frac{1}{1 + \frac{3L}{4d}} \cdot (p_1 - 0) = C_0 K \Delta p \quad (4)$$

Fig. 2 Schematics of two solutions for the number density of molecules near the boundary: true one (solid line) and one by diffusion equation (broken line).

Fig. 3 Stationary solution for the number density of molecules n in a finite cylindrical duct at molecular flow region by diffusion equation. Virtual Dirichlet boundary places out side of the duct with distance of $2/3\lambda$, where λ indicates geometrical mean free path in the pipe.

$$\therefore K = \frac{1}{1 + \frac{3L}{4d}} \quad (5)$$

を得る。これは、Dushman の式である。

異径導管の直列接続

異なる径 d_1, d_2 の円形導管 (長さは L_1, L_2) を直列接続した場合には、接続部での密度を n として解けばよい。これも **Fig. 4**より明らかに、

$$JA = \frac{d_1}{3} \bar{v} \frac{n_1 - n}{L_1 + \frac{2}{3} d_1} \frac{\pi d_1^2}{4} = \frac{d_2}{3} \bar{v} \frac{n - 0}{L_2 + \frac{2}{3} d_2} \frac{\pi d_2^2}{4} \quad (6)$$

$$\Rightarrow n = \frac{d_1^3 \left(L_2 + \frac{2}{3} d_2 \right)}{d_1^3 L_2 + d_2^3 L_1 + \frac{2}{3} d_1 d_2 (d_1^2 + d_2^2)} n_1 \quad (7)$$

$$Q = AJkT = \frac{\bar{v}}{4} \frac{4}{3} \frac{\pi d_2^2}{4} \frac{d_1^3 d_2 \Delta p}{d_1^3 L_2 + d_2^3 L_1 + \frac{2}{3} d_1 d_2 (d_1^2 + d_2^2)} \\ = \frac{d_2^2}{d_1^2} C_0 \frac{1}{\frac{3L_2}{4d_2} + \frac{d_2^2}{d_1^2} \frac{3L_1}{4d_1} + \frac{1}{2} \left(1 + \frac{d_2^2}{d_1^2} \right)} \Delta p \quad (8)$$

$$\therefore \frac{1}{K} = \frac{3L_1}{4d_1} + \frac{d_1^2}{d_2^2} \frac{3L_2}{4d_2} + \frac{1}{2} \left(1 + \frac{d_1^2}{d_2^2} \right) \\ = \frac{1}{K_1} + \frac{d_1^2}{d_2^2} \frac{1}{K_2} - \frac{1}{2} \left(1 + \frac{d_1^2}{d_2^2} \right) \quad (9)$$

となり、直列接続の公式が算出される。ここに、 K_1, K_2 は導管 1, 2 が接続されていない場合のそれぞれ単独の通過確率 (Dushman の式) である。この式は、通過の多重効果を繰り込んだ式とは異なる。しかし、面積をかけてコンダクタンスに正比例する量を計算すると、

$$\frac{d_1^2}{\frac{1}{K_1} + \frac{d_1^2}{d_2^2} \frac{1}{K_2} - \frac{1}{2} \left(1 + \frac{d_1^2}{d_2^2} \right)} \\ = \frac{1}{\frac{1}{d_1^2 K_1} + \frac{1}{d_2^2 K_2} - \frac{1}{2} \left(\frac{1}{d_2^2} + \frac{1}{d_1^2} \right)} \quad (10)$$

となり、対称式を得る。すなわち、向きを変えても値が変わ

Fig. 4 Stationary solution for the number density of molecules n in a serially connected two pipes with different length and diameter.

Fig. 5 Schematics of serially connected cylindrical pipes with the same length of L and different diameter of $d_1=1$, $d_2<1$ respectively.

Fig. 6 Comparison of the transmission probability of serially connected two pipes using Dushman's approximation as a transmission probability when pipes are isolated: reference values by Monte Carlo technique (●), by considering multiple reflection (broken line), by diffusion theory (solid line).

らない。従って、向きによらずコンダクタンスが等しいという性質は少なくとも満たしている。

通過確率を与える近似式の比較

直列接続した異径一様円形導管の通過確率は、多重効果を繰り込む理論に基づいた場合、径の大きい管から小さい管に向かって以下の近似式で与えられる。

$$\frac{1}{K_m} = \frac{1}{K_1} + \frac{d_1^2}{d_2^2} \frac{1}{K_2} - 1 \quad (11)$$

Fig. 5 のように、長さ L の等しい円形導管 1, 2 を直列接続した場合の通過確率をモンテカルロ法により正確に求め、2 つの近似式 (9) (11) による値と比較する。管 1 の直径を $d_1=1$ に固定し、長さ L を 1, 2, 5, 10、管 2 の直径を $d_2<1$ の範囲で変えた。単管の通過確率の近似式に Dushman の式を用いた場合の結果を **Fig. 6** に示す。式 (9) は元々 Dushman の式を前提にした場合の表現であるが、これを形式的に Santeler の式でも成立するとして用いた場合の結果を **Fig. 7** に示す。

単管の通過確率に Dushman の式を用いた場合には、両者とも真値よりも大きな値が算出されるが、多重効果の式の方が誤差が少ない。Santeler の式を用いた場合には、多重効果の式は真値より小さくなる。誤差は同程度に見える。

Fig. 7 Comparison of the transmission probability of serially connected two pipes using Santeler's approximation as a transmission probability when pipes are isolated: reference values by Monte Carlo technique (●), by considering multiple reflection (broken line), by diffusion theory (solid line).

3. 結 論

拡散モデルによる一様円形導管の通過確率の近似式の求め方は、多重効果を繰り込む説明よりも簡便であると思う。得られた近似式は、単管の通過確率として Dushman の式を用いた場合には、多重効果の繰り込みに比べ若干誤差が多い。多重効果の式は、単管の通過確率としてどのような式を用いるかは自由であり、実際に精度の高い Santeler の式を用いると直列接続の近似式の精度も高くなる。拡散モデルは元々 Dushman の式に基づく式であり、単管の通過確率を自由に選ぶことはできないが、Santeler の式を形式的に用いてみると、多重効果の式と同程度の誤差に収まった。

理論としての整合性は多重効果に敵わないが、拡散モデルは直感的に理解し易く、Santeler の式を形式的に適用すると精度も悪くないので、近似式として認められても良いのではないかと思う。

〔文 献〕

- 1) H. Kumagai, G. Tominaga: *Sinkuu no Buturi to Ouyou* (Physics and Application of Vacuum), (Shokabo, Tokyo) pp. 106 [in Japanese].
- 2) S. Dushman and J. M. Lafferty: *Scientific Foundations of Vacuum Technique* (Jhon Wiley, 2nd ed. 1962) p. 87.
- 3) M. Knudsen: *Ann. Physik*, **28** (1909) 75.
- 4) R. J. Cole: *J. inst. Math. Appl.*, **20** (1977) 107.
- 5) A. S. Berman: *J. Appl. Phys.*, **36** (1965) 3356.
- 6) D. J. Santeler: *J. Vac. Sci. Technol. A*, **4** (1986) 338.
- 7) L. L. Levenson, N. Milleron and D. H. Davis: *Le Vide*, **103** (1963) 42.
- 8) Y. Saito, Y. Sato and N. Matuda: *Shinku*, **50** (2007) 366.
- 9) N. Matuda, Y. Sato and Y. Saito: Annual Conference 2009, JSFM, Tokyo, DVD-R Extended abstracts 16013. pdf [in Japanese].
- 10) T. Ishimori ed.: *Gensirobuturi* (Physics of nuclear reactor) (Baifukan, Tokyo, 1973), pp. 14–36 [in Japanese].
- 11) E. Garelis and T. E. Wainwright: *Phys. Fluids*, **13** (1972) 476.