気体放出源がある一様円形導管から脱出する分子の衝突回数分布

松田七美男^{*1}・佐藤 吉博^{*2}・齊藤 芳男^{*2}

Distribution Function of the Hitting Number per Molecule Which Escapes from a Cylindrical Tube with a Localized Outgassing Source

Namio MATSUDA^{*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 Acceleration Research Organization 1-1 Oho, Tsukuba, Ibaraki 305-0801, Japan

(Received December 24, 2010, Accepted February 20, 2011)

Distribution function of the hitting number per molecule which comes from a localized outgassing source, when molecule exits the long tube of length L , were calculated by Monte Carlo simulation method. Results are compared with the Green's function for the one-dimensional diffusion equation of virtually extended finite region of $L + 4\lambda/3$ with Dirichlet boundary condition (values are zero at both boundaries), where λ is mean free path of the molecules. It is found, that Green's function represents that distribution function well and also is available to estimate average arriving time of molecules from a localized outgassing source at exit.

1. はじめに

1.1 真空排気と衝突回数分布

大型加速器など、非常に長い導管を基本的な構成要素とする真空システムにおいては排気に要する時間は現在でも大きな問題である¹⁾。一般に、真空システムの到達圧力を支配する要因は内壁表面からの気体放出であり、排気時間への影響を定量的に議論する必要がある。Fig. 1のように、長さ L 直径 d の一様な円形導管のある場所 ξ に気体放出源（いわゆるリーク）があり、そこから放出された気体分子の排気に関する時間遅れ τ は、分子の平均速度 $\bar{v}$ 、平均自由行程 λ 、管から気体分子が放出されるまでの内壁での衝突回数の平均値（平均衝突回数） $\bar{N}_h$ および壁面での実効的な平均滞在時間 τ_s^* を用いて以下のように表わされたと考えられる^{2,3,4)}。

$$\tau = \bar{N}_h \left(\frac{\lambda}{\bar{v}} + \tau_s^* \right) \quad (1)$$

上式中、 λ と $\bar{v}$ は、気体の種類と温度を与えれば算出されるが、 $\bar{N}_h$ と τ_s^* は直接に測定する手段がなく間接的に推定するより他ない。さて、平均衝突回数 $\bar{N}_h$ は、分子流領域においては管の形状だけに依存することから、モンテカルロ法により気体分子の飛行シミュレーションを行い、数値的に求める

ことができる。今回、その数値シミュレーションを実際に行った結果をまず報告する。

1.2 拡散方程式のグリーン関数

一方、分子流領域では流れは気体分子数密度 n に対する拡散方程式により記述可能である。特に、一様円形導管の場合は対称性を考慮して、管の中心軸に沿った一次元拡散方程式

$$\frac{\partial n}{\partial t} = D \frac{\partial^2 n}{\partial x^2} \left[D = \frac{\lambda \bar{v}}{3} \frac{\lambda / \bar{v}}{\lambda / \bar{v} + \tau_s^*} = \frac{1}{3} \frac{d^2}{d / \bar{v} + \tau_s^*} \right] \quad (2)$$

で表現される。ところで、偏微分方程式においてはどのような境界条件を与えるかが問題となる。実は境界面が1つの場合（すなわち半無限の真空領域との境界問題）は、原子力工学の原子炉内中性子の拡散問題として研究され、仮想的なDirichlet境界が外側 $y = 2\lambda/3$ または $y = 0.71\lambda$ の位置にあるとみなして解けばよいという結論が得られている^{5,6,7)}。この考え方を、本報告のような系、すなわち両側に真空との境界がある（有限長）場合にも適用可能であるとして、時間 t を含むグリーン関数 $G(x, \xi, t)$ を求めることを考える。グリーン関数は境界条件に依存するので、管が有限長である場合のグリーン関数を具体的に求める必要がある。そこで、無限領域のグリーン関数

$$G^\infty(x, \xi, t) = \frac{1}{2\sqrt{\pi Dt}} \exp \left[-\frac{(x-\xi)^2}{4Dt} \right] \quad (3)$$

を基にして、鏡像法により解を構成する。

境界条件に適合したグリーン関数が得られると、管の端における値 $G(L/2, \xi, t)$ は、時間 t 経過して端に到達した（端から管を脱する）割合を示すものであることはその定義から明らかである。また、時間 t と衝突回数 N_h は、平均速度 $\bar{v}$ 、平均自由行程 λ を用いて

$$t = \frac{\lambda}{\bar{v}} N_h \quad (4)$$

と互いに置換できる。以上より、グリーン関数を N_h の関数、すなわち管から脱出するまでの分子の衝突回数の関数とみなして、数値シミュレーション結果と比較する。

Fig. 1 Long cylindrical tube of length L and diameter d which has a localized outgassing source.

^{*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）

2. 理論及び計算方法

2.1 有限長領域のグリーン関数

長さ L の管の中央から η 離れた位置に気体放出源がある場合について、領域の外側 $y=2\lambda/3$ の位置で、 $n(t) \equiv 0$ であるという境界条件を満たす解を、無限長さに対するグリーン関数 G_0 を用いて構成してみる。

両側に境界がある場合には、1つの鏡像で済ますことができない。すなわち **Fig. 2** に示されるように鏡像の影響を打ち消す鏡像を次々考慮しなければならず、結局無限個の鏡像が必要となり、Dirichlet 境界条件を持つように定めた管の長さを $L^*=L+2\gamma$ として以下のように与えられる。

Fig. 2 Construction of Green's function G^m by image potential method for finite region having Dirichlet boundary condition.

Fig. 3 Comparison of time dependence of G^m with that of G^∞ .

$$G^m(x, t; \eta, L) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} (-)^k G^\infty(x, kL^* + (-1)^k \eta, t) \quad (5)$$

この関数が $-L/2 \leq x \leq L/2$ で収束することは明らかであるが、残念ながら関数形を得ることができない。以降の議論は数値計算に基づくものである。**Fig. 3** に、無限領域のグリーン関数 G^∞ と、無限回鏡像を繰り込んだ有限境界のグリーン関数 G^m との比較を $L=10$, $\gamma=2/3$, $\eta=-2$ の系について示す。管の端の γ 外側、すなわち $5+\gamma \approx 5.67$ で 0 となる境界条件を G^m は確かに満たしている。

実は、端が常に 0 である有限領域の拡散方程式の初期値問題は Fourier 展開により一般解が求まっており、 G^m と同等の関数は、デルタ関数の湧き出しがある場合の解（グリーン関数の定義）として求まる（付録参照）。

3. 結果と考察

3.1 管の中央（すなわち、 $\eta=0$ ）に気体放出源がある場合

長さ $L=10, 20, 50, 100, 200, 500$ の管の中央（すなわち、 $\eta=0$ ）に気体放出源がある場合について最初に述べる。

3.1.1 モンテカルロ法の結果とグリーン関数の比較

衝突回数分布のモンテカルロ法によるシミュレーション結果を **Fig. 4** に示す。また、このときの衝突回数の平均値 $\bar{N}_{hMC}$ を **Table. 1** に示す。

壁面の滞在時間が無視できる場合、管の端への到達時間 t と衝突回数 N_h の間には、式(1)と同様の正比例関係があると考えられるから、以下のような式が成立すると仮定し、

$$t = \frac{\lambda}{\bar{v}} N_h = \frac{d}{\bar{v}} N_h = \alpha N_h \quad (6)$$

Fig. 4 Distribution of hitting number per molecule obtained by Monte Carlo simulation for various tube length of $L=10, 20, 50, 100, 200, 500$ with centered outgassing source. Vertical lines indicate the average of each distribution.

Table 1 Average of hitting number per molecule

L	10	20	50	100	200	500
$\bar{N}_{hMC}$	55	186	1050	4000	15700	95200
$\bar{N}_{hGF}$	47.9	170	988	3850	15200	94300

Table 2 Reduced parameters

L	N_0	α
10	8.80×10^5	2.34×10^{-3}
20	8.80×10^5	2.05×10^{-3}
50	9.30×10^5	2.10×10^{-3}
100	10.0×10^5	2.00×10^{-3}
200	9.65×10^5	2.15×10^{-3}
500	9.80×10^5	2.18×10^{-3}

Fig. 5 Comparison between Green's function G^m and the distribution of hitting number per molecule obtained by Monte Carlo simulation for centered outgassing source. Vertical lines indicate the maximum of each Green's function.

$$N(N_h; L) = N_0 G^m(L/2, \alpha N_h; 0, L) \quad (7)$$

モンテカルロ法により得た入射回数分布に対して、非線形最小二乗法により最適パラメータ N_0, α を推定した結果を Table 2 に示す。

あてはめに用いた G^m の内部パラメータは、 $\lambda = d = 1, \bar{v} = 440$ であるから、

$$\alpha^* = \frac{\lambda}{\bar{v}} = \frac{1}{440} = 2.27 \times 10^{-3} \quad (8)$$

となり、fitting により求めた値にはほぼ等しい。 $\alpha = 2.27 \times 10^{-3}$ を換算係数とした Green 関数が衝突回数分布と一致している様子を Fig. 5 に示す。

すなわち、この中央に気体放出源がある場合の拡散方程式の有限長領域のグリーン関数は、端から気体が脱出するまでの衝突回数分布を旨に記述していると結論できる。

3.1.2 平均到達時間

グリーン関数を分布関数とみなして、平均到達時間（気体分子が放出源から出口に到達するまでの時間の平均） $\bar{t}$ を求めてみよう。すなわち、

$$\bar{t} = \frac{\int_0^\infty t G^m(L/2, t; 0, L) dt}{\int_0^\infty G^m(L/2, t; 0, L) dt} \quad (9)$$

である。さらに、平均衝突回数は平均滞在時間 τ_s が無視できる場合に、式(1)を用いて、 $\bar{t}$ より

Fig. 6 Linearity of obtained $\bar{N}_h$ and N_{hm} to $(L^*/d)^2$: by Monte-Carlo $\circ$, by Green's function $\bullet$.

$$\bar{N}_h = \frac{\bar{t}}{\alpha^*} = \bar{t} \frac{\bar{v}}{\lambda} \quad (10)$$

と算出される。平均到達時間から求めた平均衝突回数 $\bar{N}_{hGF}$ とモンテカルロ法による計算結果から算出した平均衝突回数 $\bar{N}_{hMC}$ を Table 1 に示す。

平均衝突回数 $\bar{N}_h$ は管の形状すなわち、長さとの比 L^*/d の関数である。Fig. 6 に、その対数プロットを示す。拡散方程式のグリーン関数を用いた数値計算結果に対して得られた関係式は、以下のようなものである。

$$\bar{N}_h = 0.375 \left(\frac{L^*}{d} \right)^2 = \frac{3}{8} \left(\frac{L^*}{d} \right)^2 \quad (11)$$

モンテカルロ法の結果は、値の小さい方で僅かに上に乖離する。この式を、(1)式から τ^* を除いた式代入し、 $D = \bar{v}d/3$ なる関係を用いて書き換えると、遅れ時間 τ は

$$\tau = \bar{N}_h \frac{\lambda}{\bar{v}} = \frac{3}{8} \left(\frac{L^*}{d} \right)^2 \frac{d}{\bar{v}} = \frac{3}{8} \left(\frac{L^*}{d} \right)^2 \frac{d}{\frac{3D}{d}} = \frac{1}{8} \frac{(L^*)^2}{D} \quad (12)$$

と表現される。

3.1.3 衝突回数の極大値

実機では、気体放出源から離れた位置での圧力上昇を測定する以外に方法はない。その際、長い時間をかけて分布全体を測定するよりは、代表値として極大値を測定する方が易しい。級数展開の形ではあるが、グリーン関数が求まっているので、関数の極値を算出することができる。具体的には、グリーン関数の端での値 $G^m(L/2, t; 0, L)$ は明らかに上に凸であるから、その極大値を与える時間 t_m は

$$\frac{\partial G^m(L/2, t; 0, L)}{\partial t} = 0 \quad (13)$$

より求まる．数値計算により算出した t_m に，式(8)の換算係数 α^* をかけて衝突回数の極大値 N_{hm} に変換した結果を **Table 3** に示す．また，極大であることは **Fig. 5** に示した縦線から確認できる．平均衝突時間 $\bar{N}_h$ と同様に $(L^*/d)^2$ に比例し (**Fig. 6** 参照)，さらに L^*/D に比例することとなり，その係数はそれぞれ $0.125=1/8$, $1/24$ となっている．

3.2 中央から離れた位置に気体放出源がある場合

長い管 ($L=500$) の中央から $\eta=10, 50, 100, 200$ ，離れた位置に気体放出源がある場合の，右端 $x=L/2(=250)$ における衝突回数分布を **Fig. 7** に示す．中央に気体放出源がある場合と同様のデータ処理を行い，グリーン関数 G^m へのあてはめを行った結果の線も併せて示している．この図からも，グリーン関数 G^m が，衝突回数分布を表現していることが判る．

3.3 解析的な関数との乖離

グリーン関数を用いて，平均衝突回数・平均到達時間を一つの関係式におさめることができた．しかし，管の長さ L が短いところで，乖離が生じている．定性的には以下のような要因が考えられる．

1. 短い場合には，管の端の影響が現れるため一定拡散定数をもつ一次元の流れからはずれてくる．この影響を組み込むには，例えば一次元の扱いはそのままにして，端付近の拡散定数が若干変化するとして，以下のような広義の拡散方程式で定式化することが思い浮かぶ．

$$\frac{\partial}{\partial x} D(x) \frac{\partial}{\partial x} n = \frac{\partial n}{\partial t} \quad (14)$$

$D(x)$ の具体的な関数形が検討課題である．

2. 前項と重複するかもしれないが，実際には断面内の分

Table 3 Maximum of hitting number per molecule N_{hm}

L	10	20	50	100	200	500
N_{hm}	15.83	56.66	329.1	1283	5066	31410

Fig. 7 Comparison between Green's function G^m and the distribution of hitting number per molecule obtained by Monte Carlo simulation for tube length of $L=500$ with various off-centered outgassing source. The distance from the center $\eta=10, 50, 100, 200$.

布があるはずで，その影響を考慮せざるを得ない．特に短い場合には顕著であるから，結局3次元解析が必要になるかもしれない．

4. ま と め

長さ L 直径 d の一様な円形導管に点気体放出源がある場合について，気体分子が管から出るまでの衝突回数分布をモンテカルロ法によりシミュレートした．このシミュレーション結果を，有限長さの一次元拡散問題のグリーン関数を用いて解析し，平均衝突回数 $\bar{N}_h$ 及び平均到達時間 τ を L^*, D の関数として求めた．ここで， L^* は，実際の管の長さ L を仮想的に延長し，ディリクレ境界条件をみたす端があると定式化した場合の管の長さである．

実は，管が長い場合は，モンテカルロ法や他の計算方法の計算時間が非常に長くなってしまいう問題があり，解析的な方法を検討しようということが，元々の動機であったので，その意味でもある程度目的を達したと結論できる．

付録 A 端が 0 である有限領域に対する Fourier 展開

境界を延長して L^* での密度が $n(0, t)=n(L^*, t)=0$ の初期値問題として考えると， $t=0$ で位置 ξ に気体放出がある場合，すなわち初期値 $u(x, 0)=f(x)=d(x-\xi)$ に対する解は，Fourier 展開により，

$$u(x, t) = \frac{2}{L^*} \sum_{k=1}^{\infty} a_k \exp\left(-\frac{k^2 \pi^2 D t}{L^{*2}}\right) \sin \frac{k \pi x}{L^*} \quad (15)$$

$$a_k = \int_0^{L^*} f(\xi) \sin \frac{k \pi \xi}{L^*} d\xi = \sin \frac{k \pi \xi}{L^*} \quad (16)$$

と与えられる．**Fig. 8** に， $L=10$ の管で $\eta=-2$ とした場合の，Fourier 展開式(15)と鏡像を繰り込んだグリーン関数(5)を縦軸を対数目盛にして示した．両者は端付近を含めてほぼ完全に一致している．

〔文 献〕

- 1) N. Ogiwara, M. Kinsho, J. Kamiya, K. Yamamoto, M. Yoshimoto, Y. Hikichi, K. Kanazawa, K. Mio, Y. Takayama, K. Suganuma and Y. Saito: Vacuum, 84 (2010) 723.

Fig. 8 Comparison $u(t, x)$ with $G^m(x, t; \eta, L)$ for $L=10$, $\eta=-2$. Lines represent G^m and marks u .

- 2) Y. Saito, Y. Sato and N. Matuda: *Shinku*, **50** (2007) 366.
- 3) Y. Saito, Y. Sato and T. Kubo: *J. Vac. Sci. Technol. A*, **22** (2004) 2206.
- 4) T. Sugimoto, T. Okano and K. Fukutani: *J. Vac. Soc. Jpn.*, **52** (2009) 141.
- 5) E. Garelis and T. E. Wainwright: *Phys. Fluids*, **16** (1973) 476.
- 6) T. Ishimori: *Gensirobuturi* (Physics of Nuclear Reactor), (Baifukan, Tokyo, 1973) p. 14 [in Japanese].
- 7) K. Terasawa: *Sizenkagakusha no tameno Suugaku Gairon Ouyou Hen* (An Outline of Mathematics for Natural Scientist: Application), (Iwanami, Tokyo, 1960) p. 491 [in Japanese].