モンテカルロ法による真空配管に対する気体分子の通過確率計算

松本 益明*¹・祐延 悟*²

Calculation of Transmission Probability of Gas Molecule through Vacuum Pipe by Monte-Carlo Method

Masuaki MATSUMOTO*¹ and Satoru SUKENOBU*²*¹Natural Science Division, Tokyo Gakugei University, 4-1-1 Nukuikita-machi, Koganei-shi, Tokyo 184-8501, Japan*²Hakodate National College of Technology, 14-1 Tokura-cho, Hakodate-shi, Hokkaido 042-8501, Japan

(Received May 12, 2015, Accepted June 3, 2015)

In this lecture, calculation of the transmission probability of gas molecule through the vacuum pipe by Monte-Carlo simulation is presented. The basic concepts, the computational method of the distribution of scattering angle that follows the cosine law from the homogeneous random distribution and the flow chart of program are shown. The results by Monte-Carlo simulation for the simple cylindrical pipes with various length/diameter (L/D) ratios are compared with those obtained by the approximation formulas and the analytical results. The effect of specular reflection rate in the scattering at the surface of pipe is also presented.

1. はじめに

真空システムの製作にあたっては、必要な圧力が予算の範囲内で得られるように真空容器、配管、ポンプなどを設計・採用する必要がある。よく知られているように、ポンプの排気速度がどんなに大きくても細長い配管を使用すると圧力を下げることができない。配管に対する気体の通りやすさは排気速度と同じ単位を持つコンダクタンスによって表される。従って、あらかじめ何らかの形で配管のコンダクタンスを求めることが設計の段階で必須である。

単純な円筒配管のコンダクタンスについては、Dushman¹⁾, Cole²⁾, Santeler³⁾らが近似式や解析解を求めており、これらと合成コンダクタンスの公式を用いることで、ある程度高い精度でコンダクタンスを求めることができる。(円筒配管に対するクラウジングの積分方程式理論計算については、松田による解説を参照していただきたい⁴⁻⁶⁾。)しかしながら、通常、配管はそのような単純な円筒だけで構成されることはなく、多くの場合複数の異なる形状の配管の複雑な組合せとなる。そのような場合には上記のような理論的な近似式を用いることができないため、コンピューターを用いたシミュレーションが必要となる。

本講座においては、分子流領域において、配管に対する気体分子の通過確率を求めるコンピューターシミュレーションの計算手法について解説する。後述するように、通過確率が得られれば、配管のコンダクタンスを見積もることができ、ポンプの排気速度および真空容器に流入する気体の流量から真空容器の到達圧力を計算することが可能となる。また、気体分子の運動をアニメーションとして表示できると、高真空中での気体の動きを直感的に理解することができ、さらには配管内の場所による入射頻度の違いから圧力分布を求め、配管形状を最適化する資料にすることも可能となる。

2. シミュレーションに必要な基本事項

本講座で用いる真空に関する用語や基礎的な事項については、2013年に J. Vac. Soc. Jpn. 誌に掲載された真空基礎講座、「気体分子運動論の基礎」⁷⁾、「真空と表面」⁸⁾、「排気と真空ポンプ」⁹⁾に詳しく述べられているので、ここでは概要に限って説明する。必要に応じて上記の講座や真空技術の教科書^{10,11)}を参照していただきたい。

「分子流領域において、配管に対する気体分子の通過確率を求める」と述べたが、ここで分子流領域とは真空容器中の気体分子の平均自由行程が容器の寸法よりも充分大きくなる圧力領域のことである。この圧力領域においては、気体分子は他の分子と衝突することは無く、壁のみと衝突を繰り返していると考えることができる。25°Cの空気における気体分子の平均自由行程は、 10^{-2} Pa 以下の圧力で 1 m 以上あるため、通常の実験室で使用する直径数 cm の配管で高真空ならば、分子流領域にあると言ってよい⁷⁾。

真空容器をポンプで排気する場合、空間に存在する気体分子は速やかに排気されてしまうが、壁には大量に吸着分子が残っていて、かなり長い間少しずつ壁から脱離して空間に出てくる⁸⁾。システムによっては何らかのプロセスで気体を導入する場合もある。これらの気体を配管を通してポンプで排気することになる。気体の流量を Q 、ポンプの実効排気速度を S_{eff} とすると、真空容器の圧力 p は、次の式で与えられる⁹⁾。

$$p = \frac{Q}{S_{\text{eff}}} \quad (1)$$

また、実効排気速度 S_{eff} は、ポンプの排気速度を S 、配管のコンダクタンスを C と書くと、

$$\frac{1}{S_{\text{eff}}} = \frac{1}{S} + \frac{1}{C}, \quad S_{\text{eff}} = \frac{SC}{S+C} \quad (2)$$

と書けるため、 $C \ll S$ ならば、 $S_{\text{eff}} \approx C$ となる。従って、どんなに排気速度の大きなポンプを使用しても、配管のコンダク

*¹ 東京学芸大学教育学部自然科学系物理科学分野 (〒184-8501 東京都小金井市貫井北町 4-1-1)

*² 独立行政法人国立高等専門学校機構函館工業高等専門学校 (〒042-8501 北海道函館市戸倉町14-1)

タンスが小さければ、実効排気速度が小さくなり、期待する圧力が得られないことになる。コンダクタンス C は

$$C = C_0 \cdot K \quad (3)$$

と書ける。ここで、 C_0 は開口コンダクタンスと呼ばれ、長さ 0 の配管（穴）のコンダクタンスであり、穴の面積を A 、体積入射頻度を Γ_V 、気体分子の平均速度を $\bar{v}$ と書くと、

$$C_0 = \Gamma_V A = \frac{1}{4} \bar{v} A \quad (4)$$

と書ける。 K は配管に入った気体分子が出口に到達する確率で、通過確率またはクラウジング係数と呼ばれる。コンダクタンスの計算で大きさに依存するのは A のみで、通過確率 K は大きさに依らず、形状が同じ相似な配管であれば全て同じである。また、 $\bar{v}$ は、ボルツマン定数を k 、気体の温度を T 、質量を m と書くと、

$$\bar{v} = \sqrt{\frac{8kT}{\pi m}} \quad (5)$$

と書けることから、気体分子の種類に依存するが、通過確率 K は気体分子の種類に依存せず計算が簡単になるため、シミュレーションにおいてはこの通過確率 K を求める。

配管に入射した気体分子は、平均自由行程が長いので、他の気体分子とは衝突することなく壁に衝突し散乱される。特別な相互作用を持たない通常の配管の表面での散乱は光のような鏡面反射とはならず、散乱された気体分子の方向分布は余弦則に従うとされている^{7,8)}。図 1 に、散乱点を原点とし壁面を xy 平面として書いた極座標を示す。壁面から垂直方向外向きに z 軸を取り、 z 軸からの角度（極角）を θ とし、壁面内での方位角を ϕ とする。気体分子の散乱が余弦則に従う場合、衝突前の進行方向に関する情報を失うため、放出時の極角及び方位角は入射時のそれらとは無関係であり、 (θ, ϕ) 方向の微小立体角 $d\Omega$ に散乱される確率は $\cos \theta d\Omega$ に比例する。方位角 ϕ については一様にランダムに散乱されるため、 $\phi = 0$ の向きはどう取っても構わない。余弦則は、図 2 のような図で説明される。配管の表面に接する直径 1 の球（図としては円であるが）を描き、表面との接点と球の中心を通る直線を引く。接点から球面上の 1 点に向かって引いた直線は、図 2(a) のように表面法線方向から角度 θ をとると、 $\cos \theta$ の長さを持つ。まず入射について考えると、気体が熱平衡状態にある場合、気体分子が自由空間に一様に分布して様々な方向に運動している（運動方向が等方的である）ので、壁面の 1 点に入射する分子の入射（極）角分布は余弦則に従う。これは、極角 θ の方向から見ると壁面の単位面積が $\cos \theta$ の面積に見えることに基づいている。この様子を表しているのが図 2(b) であり、球と壁の接点から球面までの距離が、その方向から接点に気体分子が入射する頻度に比例している。前述のように、放出角度分布も余弦則に従っていると考えられる（図 2(c)）。気体と真空容器が熱平衡状態にある場合、気体分子が自由空間に一様に分布して様々な方向に運動しているので、入射、放出のどちらについても余弦則が成り立っているというのは自然な考えである。真空

図 1 散乱点を原点とし、表面を xy 平面として書いた極座標。

図 2 気体分子の入射と散乱についての余弦則。

容器を排気する場合の真空配管入り口への入射についても図 2(d) に示すように余弦則に従う。なお、排気中の配管内においては、空間の気体分子の密度や運動方向は一様ではなく、上流と下流で圧力差があるため、入射極角分布は必ずしも余弦則に従っているとは限らず、また入射方位角分布についても一様ではない。しかしながら、散乱された分子は真空配管と熱平衡状態にあると考えられるため放出角度分布は余弦則に従うと考えてよいので、通常のシミュレーション計算においては配管壁についても余弦則に従う散乱を仮定しており、本講座でもそれに従う。

3. シミュレーションに用いるコンピューターおよび言語

近年、コンピューター技術の急速な発展により、以前は大型コンピューターやワークステーションなどでしかできなかったような大量の計算を必要とするシミュレーションがパーソナルコンピューター（パソコン）レベルで容易に可能となってきた。ただし、後述するように、精度を上げるためにはくり返し計算の数（試行回数）を大きくする必要があるため、高速なコンピューターの方が有利である。

最近、欧州原子核研究機構（CERN）において Molflow+ というモンテカルロシミュレーションプログラムが開発された¹²⁾。このプログラムでは、任意の形状の配管データを入力し、気体分子の入り口の面（放出面と放出速度）と出口の面（付着面と付着確率）を指定して通過確率や圧力分布等を求めることが可能である。配管形状の入力ファイルは、最近の 3 次元（3D）プリンター用のデータファイルとしてよく

用いられている STL 形式であり、多くの 3D の CAD ソフトウェアで出力可能な形式であるため、比較的簡単に任意形状の通過確率を計算できる。英語版のみではあるが、Windows 版と Macintosh 版の両方がホームページ¹²⁾から無料でダウンロード可能であるため、これから新たにコンダクタンス計算を始める場合には、まずこれを使ってみると良いだろう。我が国においても日本原子力研究開発機構において任意の形状の真空配管の通過確率を計算可能な KPCalc というモンテカルロシミュレーションプログラムが開発されており、これを用いた成型ペロウズ管の通過確率計算が報告されている¹³⁾。

本講座では、真空に関するシミュレーションの入門として、Molflow+ や KPCalc と同じモンテカルロ法を用いて、単純な円筒配管に対する通過確率を求めるシミュレーション手法について解説し、得られた結果を前述の近似式と比較する。モンテカルロ法は名前が賭け事で有名な都市名に由来していることから分かるように、さいころを振って（実際には乱数を用いて）確率的に起きる事象を決定する手法である。本講座で使用したプログラムは主に C 言語で書かれたものであるが、どの言語を用いても基本的には同じ様な方法で計算を行うことが可能である。計算に利用するパソコンのオペレーティングシステム（OS）として代表的なものには Windows や UNIX 系の Macintosh, Linux があるが、その上で走る様々な言語が存在する。代表的な言語には昔から使われてきた Fortran, C, BASIC などのコンパイラやインタプリタの言語があるが、より高級な科学計算パッケージとして商用の Mathematica, Matlab 等やフリーウェアの Scilab, Octave, Maxima 等も存在する。C 言語等では画像処理が難しい場合があり、その場合には数値計算のみを行うことになるが、OS 依存性が小さいためパソコンの更新時などでの移植は比較的簡単で、ほとんどの場合、コンパイルし直すだけで実行ファイルを作成することが可能である。アプリケーション開発用にパッケージ化された Visual C, Visual C++, Visual Basic 等の言語の場合、画像処理用のコマンドを備えており、計算結果を画像化してアニメーション表示を行うことが比較的容易である。ただし、アニメーション等で OS に特有な機能を使用すると OS の乗換えやアップデートの際にコンパイルし直すだけではなく、ソースプログラムを大幅に改変する必要が生じるので移植が困難であるという難点がある。多くの科学計算パッケージであれば、画像処理用のコマンドも数多く用意されているため、アニメーション化は比較的楽であり、さらに多くの場合 OS の違いはパッケージ側で吸収してくれるため、同じパッケージが用意されている OS 間であれば、特に改変を行わなくても移植は極めて楽に可能である。問題点としては、ものによっては大変高価であることや、パッケージの開発については業者に委ねるしかなく、突然開発が中止されたり、バージョンアップ時に互換性が失われてしまう可能性があるといった点が挙げられる。コンダクタンス計算専用パッケージである Molflow+ もアニメーション機能を持っている。Molflow+ の今後の展開は CERN 次第であり、ホームページ等を見て確認していくことが必要である¹²⁾。

モンテカルロ法では乱数を使用するが、コンピュータで作られる乱数は本当にランダムな訳ではなく、極めて繰り返し周期の長い周期的な数列であり疑似乱数と呼ばれるものである。従って、使用する言語の用意している乱数の繰り返し周期が試行回数に比べて充分長いことを確認する必要がある。例えば、Visual BASIC の Rnd コマンドは周期が 1.7×10^7 回程度しかないため、試行回数を数千万回行うような場合には使用できない。また、C 言語の rand() コマンドは 2^{31} のかなり大きな周期を持つが、乱数の発生にパターンがあるため、モンテカルロ法等に使用してはいけないとされている。UNIX 系の C 言語では以前より drand48() コマンドが標準ライブラリ (stdlib.h) に組み込まれており、rand() コマンドと簡単に置き換えることができる。このコマンドで発生される疑似乱数は $2^{48} \approx 2.8 \times 10^{14}$ の周期を持っているため、かなり大きな試行回数まで用いることが可能で rand() コマンドのようなパターンも存在しない。最近では、さらに周期の長い ($2^{19937} - 1$) Mersenne Twister という高速な乱数発生プログラムがモンテカルロ法用に公開されている¹⁴⁾。

4. モンテカルロ法による配管の通過確率計算方法

分子流領域での通過確率のモンテカルロシミュレーションにおいては次のような仮定の下に計算を行っている。

1. 気体分子同士の衝突は起きない。
2. 気体分子の配管入り口への入射は一様で、入射角は余弦則に従う。
3. 気体分子は直進する。
4. 気体分子の配管壁面での散乱は余弦則に従う。

分子流領域では、前述のように、気体分子同士の相互作用を無視することが可能である。従って、真空容器に存在している多数の気体分子の運動を一度に計算することと、個々の孤立した気体分子の運動を、1 つずつ多数回計算（試行）することは同じ結果をもたらす。後者の方法では試行回数が少ないと本来求めるべき値からずれていて誤差が大きい可能性があるが、試行回数を増やすと、次第に正しい値に近付くと期待される。この方法は、計算機的能力及び許容される計算時間に応じて試行回数だけを調整すればよいので比較的自由度が高い。

本講座で用いているプログラムには現実の時間に関する概念は含まれていない。従って、気体分子の速度や通過に要する時間等を求めることは不可能であり、過渡的な状態も扱うことができないため、充分時間の過ぎた後の定常状態について通過確率を求めている。

図 3 に 1 つの気体分子が配管に入ってから出ていくまでの軌跡を模式的に描いた図を示す。まず最初に気体分子は配管の入り口から入射される。通過確率は入射したという前提の元での確率であるため、入射の確率を計算する必要はない。また、気体の入射は 1 方向からのみ行えばよい。入り口への入射は自由空間から行われるため、入射位置は一様であるとし、入射の角度は余弦則に従うとしてどちらも確率的に決める。気体分子には重力が作用しているため、その運動

の軌道は放物線を描くはずだが、気体分子の平均速度は数百 m/s から数千 m/s と非常に大きく⁷⁾、直径数 cm の配管では空間に存在する時間が極めて短いため、通常は重力による効果は無視でき、気体分子は空間を直線的に移動すると考えてよい。長さが数百 m もあるような長い配管でも径が細い場合には壁に衝突するまでの平均の時間は短くなるため重力の効果はあまり問題にならないと思われる。入射した気体分子の一部は壁面に衝突することなく出口から出てしまうが、多くの気体分子は容器の壁面に衝突し散乱される。壁面に衝突後に散乱される方向は、方位角については一様であるとし、極角については余弦則に従うとして、乱数により確率的に決める。実際の散乱は、気体分子が一旦表面に吸着し、しばらくの間（表面滞在時間）表面に滞在もしくは表面上を拡散した後、熱脱離するといった複雑な過程により構成されている

図3 直径 D 、長さ L の配管内を通過する気体分子の運動の模式図。

が、シミュレーションではそのような複雑な過程は全て省略し、余弦則に従うように拡散反射するとして計算をおこなっている。一旦壁面に衝突してしまうと、気体分子にとって上流と下流の区別は無いので、気体分子は半分の確率で上流側に戻ってしまう。図3で壁に衝突せずに散乱されているように見えるのは、手前か奥の側面に衝突していることを表している。気体分子はこのような直線的な運動と壁面での余弦則に従った散乱をくり返し、入り口もしくは出口から外に放出される。現実の配管では下流から入射する分子もあるが、通過確率計算ではこれについては考慮しない。放出された回数を全入射回数で割れば通過確率を求めることができ、この計算を何万回も繰り返すことで精度を高めることが可能である。

計算上問題となるのは、余弦則に従うような確率を乱数によって発生させる方法である。各種言語に用意されている乱数発生のコマンドでは、0 から 1 までの数字が一様な確率で発生される。従って、この一様乱数から余弦則を実現するような頻度分布を持つ乱数を計算し直さなければならない。そのための方法が2つ報告されている。1つは一様乱数 u の平方根を角度の余弦として用いるというものであり⁴⁾、もう一つは2つの一様乱数 u_1, u_2 を比較して、大きい方を余弦として用いる方法である¹⁵⁾。ここでは前者の方法について述べる。図4に一様乱数から余弦則に従う頻度分布をもつ乱数を求める様子を示す。図では、試行回数が1万回の場合を十

図4 乱数による余弦則の実現。(a)一様乱数(u)の頻度分布、(b)一様乱数の平方根($\sqrt{u}$)の頻度分布、(c)一様乱数の平方根を余弦に持つ角度 ($\theta = \arccos(\sqrt{u})$) の頻度分布の極座標表示、(d)(c)の頻度を $\sin \theta$ によって割って頻度として書き直したグラフ。(a)(b)は平均頻度を、(c)(d)は最大頻度を1として規格化してある。試行回数は(十字)1万回及び(丸)1億回。

字で、1 億回の場合を丸で示しているが、試行回数による違いについては後で述べるため、ここでは 1 億回の結果のみに注目する。図 4(a)に C 言語の `drand48()` コマンドを用いて発生させた一様乱数の発生頻度分布を示す。横軸が発生された乱数の値であり、縦軸がその乱数の発生頻度である。一様乱数では $0 \leq u < 1$ の数が等しい確率で発生されることが分かる。この一様乱数の平方根の頻度分布を図 4(b)に示す。範囲は平方根についても $0 \leq \sqrt{u} < 1$ であるが、この範囲では平方根が元の値よりも大きくなるため、大きな数の頻度の方が大きくなる。さらに $\theta = \arccos(\sqrt{u})$ を計算して、その値の頻度分布を描いたのが図 4(c)である。角度については、縦軸を $\theta = 0$ として右回りの角度が正となるように、また原点からの距離が乱数の発生頻度に比例するように極座標を用いて描いてある。図から分かるように、頻度が最も高い角度は $\theta = 45^\circ$ であり、余弦則に合っていないように思えるが、極角についての頻度分布はこの形で正しい。基本事項で述べたように、角度 (θ, ϕ) 方向の微小立体角 $d\Omega$ に散乱される確率は $\cos \theta d\Omega$ に比例する。図 1 の極座標の図から立体角を求めると $d\Omega = \sin \theta d\theta d\phi$ となるため、散乱の確率は $\cos \theta \sin \theta d\theta d\phi$ に比例する。従って、角度 (θ, ϕ) 方向の $d\theta d\phi$ に散乱される確率は $\cos \theta \sin \theta$ に比例する。図 4(c)で示した頻度はこの確率に比例している。従ってこの頻度を $\sin \theta$ で割ると、図 4(d)に示したように余弦則に従った角度分布が得られる。これは、2 つの経度にはさまれた領域の面積が高い緯度になるほど小さくなることに依っている。つまり面積当たりの散乱確率は極方向が最も大きい、面積が小さいために極方向に散乱されてくる分子は少ないということである。ここで用いられている $\theta = \arccos(\sqrt{u})$ を u について書き直すと $u = \cos^2 \theta$ となる。これは元々 $\cos \theta \sin \theta$ から逆変換法という手法により得られた式であるが、実際に逆変換法により求められるのは $u = \sin^2 \theta$ である⁴⁾。ただ、 $\cos \theta \sin \theta$ の角度分布は図 4(c)に示したように $\theta = 45^\circ$ の線に関して対称であるため、鉛直方向からの角度 θ の代わりに、水平方向からの角度 $(90^\circ - \theta)$ を変数として用いても同じ分布が得られる。その上で $\cos \theta = \sin(90^\circ - \theta)$ の関係式を用いて鉛直方向からの角度に直すと $u = \sin^2(90^\circ - \theta) = \cos^2 \theta$ と書くことができる。以上のように、一様乱数 u を発生させ、 $\theta = \arccos(\sqrt{u})$ の式を用いることにより、余弦則散乱に従う確率で散乱後の極角 θ を求めることができる。このようにわざわざ余弦関数を使うようにしているのは、おそらく余弦則という名前に合わせたためと推察される。

余弦則に従う散乱では方位角についての分布は一様である。従って、一様乱数をそのまま使えばよく、発生させた乱数に 2π をかければ方位角がラジアン単位で求まる。

図 4 の全ての図において、試行回数が 1 万回の結果はばらつきが大きいものに対して、試行回数 1 億回の結果は直線もしくは凹凸の少ない曲線を描いていることが分かる。前述のように、発生させる乱数のばらつきが大きいと最終的に得られる通過確率も計算の度に異なる結果となってばらつくため、正確なシミュレーション結果は得られない。試行回数を N とすると、結果のばらつきを表す標準偏差は $\sqrt{N}/N = 1/\sqrt{N}$ に比例する。実際に図 4(a)の一様乱数について標準

偏差を計算すると、試行回数が 1 万回の場合に 0.09531、試行回数が 1 億回の場合に 0.00102 であり、その比は 93.44 であった。これは試行回数の比 10000 の平方根にほぼ等しい。このように、精度を 10 倍（標準偏差を 1/10）にするためには、100 倍の試行回数が必要であり、結果的に計算時間も 100 倍になるため、許される計算時間と精度とのバランスをうまくとらなければならない。ただし、得られた結果が正しいかどうかはシミュレーションに使用したモデルの正しさに依存しているので、モデルに問題がある場合には試行回数がどんなに大きくても正しい結果が得られることはない。従って、最初は少ない試行回数でモデルの正しさを検証し、その上で試行回数を増やして精度を高めることが必要である。

図 5 に、モンテカルロシミュレーションによる配管通過確率の数値計算に関するフローチャートを示す。シミュレーションを開始すると、まず配管形状を与える関数を読み込む。例えば、図 3 のような配管の場合、上流から下流へ向かう向きに z 軸ととり、入射面を xy 平面とする座標系で配管形状 $f(x, y, z) = 0$ を読み込む。次に試行回数の最大値を入力し、その後は試行回数が最大値になるまで計算を繰り返す。まず、入射点の座標 $(x, y, 0)$ 及び入射角を、一様乱数及び前述の余弦則を与える乱数から決める。これにより気体分子

図 5 配管の通過確率に関するモンテカルロシミュレーション計算のフローチャート。

の運動を表す直線を決定し、その直線の関数と配管形状を与える関数 $f(x, y, z) = 0$ との連立方程式を解いて衝突点の座標 (x, y, z) を求める。複数の交点が存在する場合には z 軸方向の運動の向きから適切な点を選択する必要がある。交点が配管の側面かどうかを判定し、側面の場合には再び乱数を発生させて散乱後の放出角度 (θ, ϕ) を求め、散乱点の座標と合わせて、再び気体分子の運動を表す直線の方程式を求める。この直線と関数 $f(x, y, z) = 0$ の交点として次の衝突点を計算し、入口か出口に到達するまで計算を繰り返す。配管の入口もしくは出口に到達した場合、出口側の場合だけ通過数を1増やす。試行回数が最初に入力された最大の試行回数に達していない場合には試行回数を1増やして再度気体分子を1個入射させ、上記の計算を繰り返す。試行回数が最大値に到達した場合、通過数を試行回数で割って通過確率を計算し出力して計算を終える。図3は一般的なデカルト座標系を用いて描かれているが、散乱における放出角度 (θ, ϕ) から気体分子の運動を表す直線の方程式への変換が簡単になるように形状に合った座標系を選ぶ場合も多い。円筒配管の場合には、円筒座標系を用いることで、回転対称性を利用して計算を単純化し高速化することが可能である。複雑な配管形状に対応できるようにするためには、 $f(x, y, z) = 0$ のような関数の形で与えるのが困難となるので、Molflow+やKPCalcでは配管表面を多数の平面に分割して近似する方法がとられている。その場合、精度と計算時間は壁面の分割数にも依存する。

5. シミュレーション計算結果

ここでは、真空夏季大学のテキストや参考文献⁴⁾に掲載されている数値計算用Cプログラムを用いて計算された円筒配管の通過確率を理論的な近似式で得られた結果と比較する。

理論的な近似式で最も代表的なものは次のDushmanによるものである。図3に示した直径 D 、長さ L の円筒配管の通過確率は、

$$K_D = \frac{1}{1 + \frac{3L}{4D}} \quad (6)$$

と書け、直径に比べて長さが非常に長い場合 ($L \gg D$) には、さらに、

$$K_D \approx \frac{4D}{3L} \quad (7)$$

と近似できる。一般的にこれらの式が円筒配管のコンダクタンスを求める際によく使用されている。Santelerにより導かれた式はDushmanの式よりも精度の高い近似式として知られており、次のように書ける³⁾。

$$K_s = \frac{1}{1 + \frac{3L}{4D} + \frac{1}{\frac{4D}{L} + \frac{8}{7}}} \quad (8)$$

$L/D < 3$ の領域では

$$K = \frac{1}{1 + L/D} \quad (9)$$

という極めて簡単な式も求められている^{3,16)}。このように円筒配管の通過確率は直径に対する長さの比 (L/D 比) のみで決まる。

表1にいくつかの L/D 比について、Dushman ((6)式)¹⁾、Santeler³⁾ および Cole²⁾ による計算値と本講座およびMolflow+のモンテカルロシミュレーションによって得られた結果の比較を示す。本講座のプログラムは数値計算のみなので高速であり、2.6 GHz の Intel Core i5 のパソコンを用いて、シミュレーションの試行回数を1千万回とした場合でも、 L/D 比が5の時に7.5秒、 L/D 比が50の時に60秒で計算が終了した。Molflow+では、自由度を高くしてアニメーション表示もおこなっているため多くの時間がかかる。必要な計算時間は配管をいくつかの平面に分けるかにも依存しており、配管側面を100枚の平面で構成した場合、上と同じパソコンを用いて、 L/D 比が5で試行回数が1千万回の場合に130秒、 L/D 比が50で試行回数が百万回の場合に120秒程度かかった。表1で本講座のプログラムの結果との違いが生じているのはMolflow+での試行回数が少ないためと考えられる。

表1を見ると、Dushmanの近似式以外の結果はかなり良く一致していることが分かる。理論計算の結果としてはColeの結果の精度が最も高いと考えられており、シミュレーションの結果と良く一致している。Dushmanの(6)式による結果は L/D 比の小さな領域では通過確率を10%程度過大評価している。従って、(6)式は L/D 比が10以上の領域で、(7)式は L/D 比が100以上の領域で使うことが望ましいが、(6)式や(7)式のような極めて簡単な式を用いてその程度の誤差で通過確率を求められるのは驚きであり、通過確率以外にも誤差の要因があることを考えると、実用上はDushmanの式を用いてもあまり問題は生じないと思われる。Santelerの(8)式の結果は表1に示されているように、Dushmanの式で誤差の大きな $L/D < 10$ の領域でもシミュレーションの結果と良く一致しているので、 L/D 比の小さな配管で高精度に通過確率を求めたい場合にはこちらを用いる方がよい。

前述のようにモンテカルロシミュレーション計算では、気

表1 円筒配管の気体分子通過確率に関するDushman((6)式)、Santeler ((8)式)、Coleによる理論計算値と本講座でのプログラム(試行回数1千万回)およびMolflow+(試行回数百万回)のモンテカルロシミュレーション結果の比較。

L/D	K (Dushman)	K (Santeler)	K (Cole)	K (simulation)	K (Molflow+)
1	0.5714	0.5143	0.5142	0.5146	0.5143
5	0.2105	0.1899	0.1909	0.1909	0.1907
10	0.1176	0.1093	0.1093	0.1093	0.1095
50	0.0267	0.0254	0.0253	0.0253	0.0252
500	0.0027	0.0026	0.00265	0.0027

図6 円筒配管の通過確率に対する鏡面反射の効果. 横軸は L/D 比の対数表示, 縦軸は通過確率.

体分子の散乱が余弦則に従うと仮定している. しかし, もし気体分子に対して不活性で熱的適応係数の低い極めて平坦な表面を作ることができれば気体分子が光のように鏡面反射される割合は増えるだろうと期待される. モンテカルロシミュレーションであれば確率的に鏡面反射となるか拡散反射となるかを決めて通過確率を計算することができるため, 鏡面反射の起きやすい表面を人為的に作ることが可能となった場合にどのような効果があるかを計算した. ただし, 現実的には鏡面反射が存在する場合には鏡面反射方向からわずかにずれた角度への反射の確率も大きくなると予想されるが, それについては計算に取り入れず, 鏡面反射か拡散反射のどちらかになるとして計算している. 衝突の際に鏡面反射となる割合を50%, 90%, 99%, 100%, と変えて様々な L/D 比でシミュレーションを行い, 全ての分子が拡散反射する (鏡面反射率が0%) の場合と比較した結果を図6に示す. 100%の分子が鏡面反射する場合, 配管がどんなに長くても通過確率が1となり, 入った気体分子が全て出口に到達する理想的な配管になることが分かる. しかし, 拡散反射が1%でも存在すると, 特に L/D 比が大きな領域で通過確率は大きく減少し, $L/D=100$ の場合には通過確率が0.5近くまで落ちる. 拡散反射の割合が増えると通過確率はさらに減少し, L/D 比が10の場合, 鏡面反射の割合が50%あるとしても, 完全に拡散反射の場合の約2倍の0.22に過ぎないという結果が得られた. このようにわずかな拡散反射が通過確率を大きく下げる理由は, 配管が長くなると通過するまでに壁面に衝突する回数が増える結果, 拡散反射の確率が低くても逆方向に散乱される可能性が出てくるためである. 気体分子の円筒配管壁面への衝突回数は L/D 比の約2倍である¹⁷⁾. 従って L/D 比が100以上では, たとえ拡散反射の確率が1%で, 上流に向かう確率はその半分だとしても, 平均1回以上は上流側に散乱されることになる. 一度逆方向に散乱されるとその分子は高い確率で入り口に到達してしまうため, 通過確率は大きく下がってしまう. 鏡面反射確率を高くするためには, 金のように, 質量が大きく, 酸化等の反応が起きにくい物質で壁面を覆って熱的適応係数を小さくした上で, その表面を原

子レベルで平坦にする必要があると予想されるが, 通常の配管表面はそのような状態には無いため, 多少の鏡面反射が起きているとしても, それによる通過確率の上昇はわずかであり, 実質的には拡散反射するというモデルではほぼ問題無いと思われる. ただし, シミュレーションや近似計算の結果はあくまでも前述のような仮定の下で, 配管表面が排気作用を持ったり, 逆に大きなガス放出源になったりすることはないとした理想的な値である. Molflow+ではそのような排気やガス放出を伴う面を設定することも可能であるが, その場合でもその面の排気速度や気体の付着確率に関する情報が無ければ計算できないことに変わりはない. 従って実際に製作した配管の通過確率及びコンダクタンスがシミュレーション等により得られた結果と精度良く一致するとは限らないことには注意が必要である.

6. ま と め

本講座では配管の通過確率をモンテカルロシミュレーションを用いて求める手法について解説し, 近似解の存在する円筒配管の場合について, シミュレーション結果と近似解による結果を比較した. ここでは具体的なプログラムや気体分子の運動の様子を表すアニメーションについては示さなかったが, これらは日本真空学会が主催する真空夏季大学の「画像で見る真空工学」という講義で観ることが可能である¹⁸⁾. アニメーションを観ると分子流領域での気体分子の動きが, 流体としての気体の流れとは全く異なるものであることが直感的に理解できるが, 論文にしにくい部分であるため真空夏季大学に参加してご覧になっていただきたい.

〔文 献〕

- 1) S. Dushman: *Scientific Foundations of Vacuum Techniques*, 2nd ed. (Wiley, New York, 1949) Chap. 2.
- 2) R. J. Cole: *Prog. Astronaut. Aeronaut.*, **51** (1976) 261.
- 3) D. J. Santeler: *J. Vac. Sci. Technol. A*, **4** (1985) 338.
- 4) N. Matsuda: *J. Plasma Fusion Res.*, **76** (2000) 568 [in Japanese].
- 5) N. Matuda: *Shinku*, **47** (2004) 690 [in Japanese].
- 6) N. Matuda: *J. Vac. Soc. Jpn.*, **58** (2015) 311.
- 7) N. Matuda: *J. Vac. Soc. Jpn.*, **56** (2013) 199 [in Japanese].
- 8) K. Fukutani: *J. Vac. Soc. Jpn.*, **56** (2013) 204 [in Japanese].
- 9) J. Yuyama and Y. Suetsugu: *J. Vac. Soc. Jpn.*, **56** (2013) 210 [in Japanese].
- 10) H. Kumagai, G. Tominaga, Y. Tuzi and G. Horikoshi: *Shinku no Butsuri to Oyo* (Shokabo, Tokyo, 1970) [in Japanese].
- 11) G. Horikoshi: *Shinku Gijutsu* (Tokyodaigaku Shuppankai, Tokyo, 1994) 3rd ed. [in Japanese].
- 12) <http://test-molflow.web.cern.ch> (Last accessed: 2015-05-12)
- 13) S. Sukenobu, K. Masaki, K. Ookama and N. Ogiwara: *J. Vac. Soc. Jpn.*, **56** (2013) 142 [in Japanese].
- 14) <http://www.math.sci.hiroshima-u.ac.jp/~m-mat/MT/mt.html> (Last accessed: 2015-05-20) [in Japanese]
- 15) E. Manita and K. Nakayama: *Shinku*, **11** (1968) 46 [in Japanese].
- 16) G. Horikoshi: *Shinku*, **33** (1990) 89 [in Japanese].
- 17) N. Matsuda and Y. Tanimoto: Private communications.
- 18) The Vacuum Society of Japan, <http://www.vacuum-jp.org/> (Last accessed: 2015-05-12)