一様円形断面導管における 平均衝突回数の管長依存性

松田七美男^{*1}・佐藤 吉博^{*2}・齊藤 芳男^{*3}

On the Dependence of Averaged Surface Hitting Number per Molecule upon the Length for Cylindrical Tubes

Namio MATUDA^{*1}, Yoshihiro SATO^{*2} and Yoshio SAITO^{*3}

^{*1}Department of Physics, Tokyo Denki University, 5 Senju-Asahi-cho, Adachi-ku, Tokyo 120-8551, Japan

^{*2}KEK-High Energy Acceleration Research Organization, 1-1 Oho, Tsukuba-shi, Ibaraki 305-0801, Japan

^{*3}KAGRA Observatory, Institute for Cosmic Ray Research, University of Tokyo, 238 Kamioka-cho, Hida-shi, Gifu 506-1205, Japan

(Received June 20 2017, Accepted September 19, 2017)

Average surface hitting number per molecule $\bar{N}_h$ when it exits vacuum tube has a close relation to pumping delay time. Several $\bar{N}_h$ were calculated using Monte-Carlo simulation method and Clausing's integral equation method for a cylindrical tube that has a point gas emission source. The results from both methods are in good agreement and the dependence of $\bar{N}_h$ on the tube length L are explained almost exactly with Clausing's integral equation.

1. はじめに

真空工学において最も重要な量の一つである分子流コンダクタンスは、電子計算機が発達した今日、モンテカルロシミュレーション（以降 MC と略記する）法を用いて数値計算した通過確率に開口コンダクタンスを乗じて算出するのが一般的である。しかしながら、電子計算機のなかった時代には、一様円形導管のような基本形状の導管については Clausing 積分方程式（以降 IE と略記する）法に基づいて詳細な議論を行っていた¹⁾。実は現在も、そのような研究は続いている^{5-10,12)}。また、筆者らは、管の長さが長い一様円形導管や平行平板間の狭い隙間における分子流の MC 法による数値解析結果を検証し、またその物理的背景を明らかにするために、古典的な拡散方程式による定式化を試みてきた^{11,13)}。特に、排気の遅れの時定数の評価には気体分子が領域から脱出するまでの衝突回数分布 $N(N_h)$ や平均衝突回数 $\bar{N}_h$ が有用な指標となることを示し、壁に気体放出源がある場合には管の長さ L の 2 乗に比例して平均衝突回数が増え、結果排気の時間遅れが生ずるであろうという予測を示した¹⁴⁾。

本報告では、MC 法の数値計算結果および拡散方程式による定式化で確かめられた平均衝突回数の管の長さに対する依存性が、IE 法の近似解によって解析的に導かれることを示す。

2. 計算原理

入射頻度と衝突回数 単位面積に単位時間当たり入射する気

体分子の数が入射頻度 $q(x)$ の定義である。IE 法では定常状態における壁表面での気体入射頻度と気体放出速度とが等しいとしてその値を求めている。一方、定常状態についての MC 法の計算では壁への入射頻度自身ではなく、十分長い時間積算した単位面積あたりの衝突回数、すなわち積算入射頻度とでもいうべき量が計算される。ただし、各部への入射の積算時間が共通であると考えられるから、得られた積算入射頻度分布は入射頻度分布と相似と考えられる。

平均衝突回数 管の長さを L 、直径を D とする。比 $\mu=L/D$ をパラメータとして、管内壁全体の平均入射頻度 $\bar{q}$ は、入射頻度分布 $q(x)$ に対して以下のように定義される。

$$\bar{q} = \frac{1}{\mu} \int_0^\mu q(x) dx \quad (1)$$

管の壁全体への全衝突回数 N_h^q は、 $q(x)$ の壁における面積積分に仮想的な積算時間 δt ($=1$ とおく) をかけたものに等しいから、

$$\begin{aligned} N_h^q &= \delta t \cdot \int_0^\mu q(x) dS = 1 \cdot \int_0^\mu q(x) \pi D d\ell \\ &= \pi D \int_0^\mu q(x) d(Dx) = \pi D^2 \int_0^\mu q(x) dx \end{aligned} \quad (2)$$

と求まる。また、分子 1 個あたりの平均衝突回数は、全衝突回数を気体放出源からの入射総数 N_0 で割って、

$$\bar{N}_h = \frac{N_h^q}{N_0} \quad (3)$$

と算出される。

3. 計算結果

3.1 開口端からの一様入射

管の一方の開口部から気体が単位入射頻度 $\Gamma_0=1$ で入射する場合について、IE 法による定式化の概念を Fig. 1 に示

^{*1} 東京電機大学工学部物理系列（〒120-8551 東京都足立区千住旭町 5 番）

^{*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）

^{*3} 東京大学宇宙線研究所（〒506-1205 岐阜県飛騨市神岡町東茂住 238）

す．この概念に基づき得られる表式は以下の通りである^{1-4,15)}．

$$q(x) = \Gamma(x) + \int_0^\mu q(\xi) G(\xi, x) d\xi \quad (4)$$

$$\Gamma(x) = \frac{x^2 + 1/2}{\sqrt{x^2 + 1}} - x \quad (5)$$

$$G(\xi, x) = 1 - |\xi - x| \frac{2(\xi - x)^2 + 3}{2\{(\xi - x)^2 + 1\}^{3/2}} \quad (6)$$

ここに $\Gamma(x)$ は、一様な入射頻度のある開口部から点 x への到達確率密度を開口部全体で積分した到達確率であり、 $G(\xi, x)$ は、 ξ に位置する微小円環から点 x への到達確率密度である．関数 $\Gamma(x)$ 、 $G(\xi, x)$ を **Fig. 2** に示す．

MC 法および Clausing 積分方程式 (4) の $q(x)$ についての数値計算結果は、ほぼ直線である (**Fig. 3** 参照) ことから、 $q(x)$ として一次関数の近似解

$$q(x) = -\beta \left(x - \frac{\mu}{2} \right) + \frac{1}{2} \quad (7)$$

を仮定すると、

$$\begin{aligned} \bar{q} &= \frac{1}{\mu} \int_0^\mu q(x) dx \\ &= \frac{1}{\mu} \left[\frac{\beta\mu + 1}{2} x - \frac{\beta}{2} x^2 \right]_0^\mu = \frac{1}{2} \end{aligned} \quad (8)$$

Fig. 1 Conceptual drawing of the Clausing's integral equation of a cylindrical tube which has a uniform gas inlet.

Fig. 2 Reaching probability function $\Gamma(x)$ and kernel function $G(\xi, x)$ of Clausing's integral equation for a cylindrical tube which has a uniform gas inlet.

を得る．式 (2)、(8) より、全衝突回数 N_h^q は

$$N_h^q = \pi D^2 \mu \bar{q} = \pi D L \bar{q} = \frac{1}{2} \pi D L \quad (9)$$

一方、入射開口部 (入射頻度 1) における入射総数 (すなわち試行回数) N_0 は、入り口の円の面積 $1/4 \pi D^2$ をかけて

$$N_0 = \pi \left(\frac{D}{2} \right)^2 \cdot 1 = \frac{\pi D^2}{4} \quad (10)$$

と求まる．したがって、平均衝突回数 $\bar{N}_h$ については、

$$\bar{N}_h = \frac{N_h^q}{N_0} = \frac{\pi D L}{2} \cdot \frac{4}{\pi D^2} = 2 \frac{L}{D} = 2\mu \quad (11)$$

という関係が得られる．これは **Table 1** に示すように MC 法の結果と合致する．

この結果は、 $q(x)$ が直線的に変化しかつ管の中心を原点に点対称であることに起因しており、直線の傾き $\beta(\mu)$ には無関係である．しかしながら、 $\beta(\mu)$ は通過確率 K 等を求める上で決定的に重要な値であり、最も精度の高い Berman の近似式は以下のような関数である．

$$\beta(\mu) = \frac{2}{3} \cdot \frac{(\mu^2 - 2)\sqrt{\mu^2 + 1} + 2 - \mu^3}{\log(\mu + \sqrt{\mu^2 + 1}) - \mu\sqrt{\mu^2 + 1}} \quad (12)$$

この傾き $\beta(\mu)$ を用いた $q(x)$ の管の端付近の様子を **Fig. 4** に示す． μ に依存せずにはほぼ端から外側 $2/3$ の位置で $q(x) = 0$ となっている． x は D で規格化した値であるから、 $2/3D$ の位置ということである．一様な円形断面導管の管内平均自由行程 λ^* は、 $\lambda^* = D$ であるから、 $q(x) = 0$ となるのは管の端から外側

Fig. 3 Distribution of surface impinging rate of $q(x)$ in the case of $\mu=5$, where μ represents the ratio of length L to diameter D of the tube ($\mu=L/D$): Monte-Carlo simulation (○: trial numbers = 10^8) and Clausing's integral equation (solid line).

Table 1 Numerical results for average hitting number per molecule $\bar{N}_h$ which depends upon $\mu=L/D$ by using Monte-Carlo simulation: trial numbers are 10^7 .

μ	1	2	5	10	20	50	100	200	500	1000
$\bar{N}_h$	2.000	4.002	9.999	19.98	40.08	100.1	199.9	400.2	998.4	1989

Fig. 4 Surface impinging rate $q(x)$ near the exit of the tube.

$$\frac{2}{3}D = \frac{2}{3}\lambda^* \quad (13)$$

の位置となっていると結論できる。拡散モデルで定式化する場合の境界条件としてこの「管の外側 $2\lambda^*/3$ の位置に $q(x)=0$ (Dirichlet 条件) の仮想境界がある」を採用する具体的な根拠の一つである。

3.2 壁からの一定気体放出

壁のある位置 x_0 に、リーク等の一定量 Q_0 の気体放出源 (角度分布は余弦則に従うものと仮定する) がある場合の IE 法による定式化の概念を Fig. 5 に示す。この概念に基づき得られる表式は、

$$q(x) = Q_0 G(x_0, x) + \int_0^\mu q(\xi) G(\xi, x) d\xi \quad (14)$$

である。 $\mu = L/D = 10$ の管の中央に気体放出源がある場合の Clausing 積分方程式 (14) の数値計算解および MC 法の数値計算結果を Fig. 6 に示す。開口端からの一様入射と同様にほぼ直線であることが判る。そこで、拡散モデルで考えて、端から外側 $2/3\lambda^* = 2/3D$ の位置で値が 0 となるという境界条件を採用し、一次関数で近似されると仮定すると、入射頻度 $q(x)$ は、

$$q(x) = \alpha(\mu) q^*(x) = \begin{cases} q_1(x) & x \leq x_0 \\ q_2(x) & x > x_0 \end{cases} \quad (15)$$

$$q_1(x) = \frac{\alpha(\mu)}{x_0 + \frac{2}{3}} \left(x + \frac{2}{3} \right) = \alpha(\mu) q_1^*(x) \quad (16)$$

Fig. 5 Conceptual drawing of the Clausing's integral equation of a cylindrical tube which has a point gas emission source.

$$q_2(x) = \frac{\alpha(\mu)}{\mu - x_0 + \frac{2}{3}} \left(\mu + \frac{2}{3} - x \right) = \alpha(\mu) q_2^*(x) \quad (17)$$

と表される。定数 $\alpha(\mu)$ は、気体放出量 Q_0 が管の両端からの射出量の和に等しいという条件

$$Q_0 = \pi D^2 \int_0^\mu q(\xi) \Gamma^+(\xi) d\xi + Q_0 \Gamma^+(x_0) \quad (18)$$

より定まる。ここに、

$$\begin{aligned} \Gamma^+(\xi) &= \Gamma(\xi) + \Gamma(\mu - \xi) \\ &= \frac{\xi^2 + \frac{1}{2}}{\sqrt{\xi^2 + 1}} + \frac{(\mu - \xi)^2 + \frac{1}{2}}{\sqrt{(\mu - \xi)^2 + 1}} - \mu \end{aligned} \quad (19)$$

と定義した。 $\alpha(\mu)$ は (18) に (16), (17) を代入し整理して、式

$$\alpha(\mu) = \frac{Q_0 (1 - \Gamma^+(x_0))}{\pi D^2 \int_0^\mu q^*(\xi) \Gamma^+ d\xi} \quad (20)$$

により算出される。分母の積分を I とおいて、やや煩雑な計算により、

$$I = \int_0^\mu q^*(\xi) \Gamma^+(\xi) d\xi \quad (21)$$

$$\begin{aligned} &= \frac{3\mu + 4}{2(3x_0 + 2)(3\mu + 2 - 3x_0)} \\ &\times \left[(\mu + 1)^2 \sqrt{\mu^2 + 1} - \left\{ (\mu - x_0)^2 + 1 \right\}^{\frac{3}{2}} \right. \\ &\left. - \left(x_0^2 + 1 \right)^{\frac{3}{2}} - 3\mu x_0 (\mu - x_0) - 2\mu^2 + 1 \right] \end{aligned} \quad (22)$$

と求まる (A 参照)。この結果を式 (20) に代入すれば $\alpha(\mu)$ の表式が得られる。

管の中央に気体放出源がある場合 特に、気体放出源の位置が中央 $x_0 = \mu/2$ にあるときには、式 (20), (22) において $x_0 = \mu/2$ として、

Fig. 6 Distribution of surface impinging rate of $q(x)$ in a cylindrical tube which has a gas point source ($\mu=10$). Monte-Carlo simulation ($\circ$: trial numbers = 10^8) and Clausing's integral equation (solid line).

$$\alpha = Q_0 \frac{1 - \left(\frac{\mu^2 + 2}{\sqrt{\mu^2 + 4}} - \mu \right)}{\pi D^2 J}$$

$$J = \frac{1}{6\mu + 8} \{ 4(\mu + 1)^2 \sqrt{\mu^2 + 1} - (\mu^2 + 4)^{\frac{3}{2}} - 3\mu^3 - 8\mu^2 + 4 \}$$
(23)

である．この $\alpha(\mu)$ を用いて，入射頻度分布の平均は， $x=0$ から $x_0=\mu/2$ までの台形の面積の計算より，

$$\bar{q} = \frac{1}{2} \left[\frac{2}{3} + \left(\frac{2}{3} + \frac{\mu}{2} \right) \right] \frac{\alpha}{\frac{\mu}{2} + \frac{3}{2}} = \frac{3\mu + 8}{6\mu + 8} \alpha$$
(24)

と算出される．したがって，全衝突回数 N_h^q および平均衝突回数 $\bar{N}_h$ について，それぞれ，

$$N_h^q = \pi D^2 \mu \bar{q} = \pi D^2 \mu \alpha \frac{3\mu + 8}{6\mu + 8}$$

$$= Q_0 \left(1 + \mu - \frac{\mu^2 + 2}{\sqrt{\mu^2 + 4}} \right) (3\mu + 8) \mu$$

$$\left/ \left[4(\mu + 1)^2 \sqrt{\mu^2 + 1} - (\mu^2 + 4)^{\frac{3}{2}} - 3\mu^3 - 8\mu^2 + 4 \right] \right.$$
(25)

$$\bar{N}_h = \frac{N_h^q}{Q_0}$$
(26)

という結果が得られる．また，管の長さが長い場合の極限 $\mu \rightarrow \infty$ では，

$$\bar{N}_h \sim \frac{3\mu^2}{8} = \frac{3}{8} \left(\frac{L}{D} \right)^2$$
(27)

となる．

平均衝突回数 $\bar{N}_h$ に対する，IE 法による解析解(26)，管の長さが長い極限での漸近解 $(3/8)\mu^2$ ，及び漸近解において管の長さを仮想境界までとした，すなわち $\mu^* = \mu + 4/3$ とした場合の漸近解 $(3/8)\mu^{*2} = (3/8)(\mu + 4/3)^2$ ，MC 法（試行回数 10^7 ）による平均衝突回数の数値計算結果の比較を **Fig. 7** に示す．解析解は非常に複雑であるにもかかわらず，仮想境界までの長さを管の長さとした μ^* に対する単純な漸近解表現が良い一致を示している．

4. ま と め

Clausing 積分方程式により得られる入射頻度分布 $q(x)$ と全衝突回数 N_h^q ，および計算の前提として定義した気体放出源からの入射総数 N_0 との関係式(3)を用いて分子流領域における円筒管内壁への気体の平均衝突回数 $\bar{N}_h$ を求め，その管の長さ L への依存性を導いた．依存性自身は，筆者らがすでにモンテカルロシミュレーション法や拡散モデルに基づく解析により示していたが，改めて，円筒管の中央に一定値の気体放出源がある場合について，

(i) 十分長い場合には(27)のような2乗関係があることを

Fig. 7 Dependence of the Average hitting number per molecule $\bar{N}_h$ upon $\mu = L/D$: Comparison between analytical solution with Clausing's integral equation and numerical results from Monte-Carlo simulation.

確認した．

(ii) モンテカルロシミュレーション法の結果が示す短い場合を含めての依存関係を入射頻度 $q(x)$ より導出した．

平均衝突回数は管の内部に気体が留まっている時間に比例すると目される量であり，排気の遅延現象などを説明する上で極めて重要である．実用上は管の長さが長い場合に顕著となるが，短い場合であっても，単純な L^2 依存性よりも大きくなる可能性を示唆しており，気体分子の表面滞在時間が長いような壁を持つ導管では十分に考慮すべき事柄であるといえよう．

〔文 献〕

- 1) P. Clausing: Ann Physik, **12** (1932) 961: republished in J. Vac. Sci. Technol., **8** (1971) 636.
- 2) I. G. Neudachin, B. T. Porodnov and P. E. Suetin: Sov. Phys. Tech. Phys., **17** (1972) 848.
- 3) R. J. Cole: J. Inst. Maths Applies, **20** (1977) 107.
- 4) K. Yamamoto, J. Hara and K. Hirose: J. Phys. Soc. Jpn., **51** (1982) 3729.
- 5) W. Steckelmacher: Rep. Prog. Phys., **49** (1986) 1083.
- 6) N. Matuda: Shinku, **45** (2002) 537 [in Japanese].
- 7) J. Gómez-Góñi and P. J. Lobo: J. Vac. Sci. Technol. A, **21** (2003) 1452.

- 8) N. Matuda: Shinku, **47** (2004) 690 [in Japanese].
- 9) P. J. Lobo, F. Becheri and J. Gómez-Goni: Vacuum, **76** (2004) 83.
- 10) A. Mohan, R. V. Thompson and S. K. Loyalka: J. Vac. Sci. Technol. A, **25** (2007) 758.
- 11) Y. Saito, Y. Sato and N. Matuda: Shinku, **50** (2007) 366.
- 12) N. Matuda: J. Vac. Soc. Jpn., **52** (2009) 407 [in Japanese].
- 13) N. Matuda, Y. Sato and Y. Saito: J. Vac. Soc. Jpn., **53** (2010) 151 [in Japanese].
- 14) N. Matuda, Y. Sato and Y. Saito: J. Vac. Soc. Jpn., **54** (2011) 293 [in Japanese].
- 15) N. Matuda: J. Vac. Soc. Jpn., **58** (2015) 311 [in Japanese].

A 傾き $\alpha(\mu)$ の導出

傾きを定める定数 α を算出する上で必要な積分 I は具体的には, x_0 で積分区間を分割して

$$I = \int_0^\mu q^*(\xi) \Gamma^+(\xi) d\xi \quad (28)$$

$$= \int_0^{x_0} q_1^*(\xi) \Gamma^+(\xi) d\xi + \int_{x_0}^\mu q_2^*(\xi) \Gamma^+(\xi) d\xi \quad (29)$$

$$= \frac{1}{x_0 + \frac{2}{3}} \int_0^{x_0} \left(\xi + \frac{2}{3} \right) \Gamma^+(\xi) d\xi \\ + \frac{1}{\mu - x_0 + \frac{2}{3}} \int_{x_0}^\mu \left(\mu - \xi + \frac{2}{3} \right) \Gamma^+(\xi) d\xi \quad (30)$$

である. $\Gamma^+(\xi)$ は

$$\Gamma^+(\xi) = \Gamma(\xi) + \Gamma(\mu - \xi) \\ = \frac{\xi^2 + \frac{1}{2}}{\sqrt{\xi^2 + 1}} + \frac{(\mu - \xi)^2 + \frac{1}{2}}{\sqrt{(\mu - \xi)^2 + 1}} - \mu \quad (31)$$

であるから, (30) を計算する上で必要な定積分は,

$$A(x) = \int_0^x \frac{\xi^2 + \frac{1}{2}}{\sqrt{\xi^2 + 1}} d\xi = \frac{x\sqrt{x^2 + 1}}{2} \quad (32)$$

$$C(x) = \int_0^x \xi \frac{\xi^2 + \frac{1}{2}}{\sqrt{\xi^2 + 1}} d\xi = \frac{(2x^2 - 1)\sqrt{x^2 + 1} + 1}{6} \quad (33)$$

である. 上式を用いて式(30)の積分の各項は, 定積分の差

$$A1 = \int_0^{x_0} \frac{\xi^2 + \frac{1}{2}}{\sqrt{\xi^2 + 1}} d\xi = A(x_0) = \frac{x_0\sqrt{x_0^2 + 1}}{2} \quad (34)$$

$$A2 = \int_{x_0}^\mu \frac{\xi^2 + \frac{1}{2}}{\sqrt{\xi^2 + 1}} d\xi = A(\mu) - A(x_0) \\ = \frac{\mu\sqrt{\mu^2 + 1} - x_0\sqrt{x_0^2 + 1}}{2} \quad (35)$$

あるいは, $\eta = \mu - \xi$, $d\eta = -d\xi$ なる変数変換により,

$$B1 = \int_0^{x_0} \frac{(\mu - \xi)^2 + \frac{1}{2}}{\sqrt{(\mu - \xi)^2 + 1}} d\xi = \int_{\mu - x_0}^\mu \frac{\eta^2 + \frac{1}{2}}{\sqrt{\eta^2 + 1}} d\eta \\ = A(\mu) - A(\mu - x_0) \\ = \frac{\mu\sqrt{\mu^2 + 1} - (\mu - x_0)\sqrt{(\mu - x_0)^2 + 1}}{2} \quad (36)$$

$$B2 = \int_{x_0}^\mu \frac{(\mu - \xi)^2 + \frac{1}{2}}{\sqrt{(\mu - \xi)^2 + 1}} d\xi = \int_0^{\mu - x_0} \frac{\eta^2 + \frac{1}{2}}{\sqrt{\eta^2 + 1}} d\eta \\ = A(\mu - x_0) = \frac{(\mu - x_0)\sqrt{(\mu - x_0)^2 + 1}}{2} \quad (37)$$

$$D1 = \int_0^{x_0} \xi \frac{(\mu - \xi)^2 + \frac{1}{2}}{\sqrt{(\mu - \xi)^2 + 1}} d\xi \quad (38)$$

$$= - \int_0^{x_0} (\mu - \xi) \frac{(\mu - \xi)^2 + \frac{1}{2}}{\sqrt{(\mu - \xi)^2 + 1}} d\xi \\ + \mu \int_0^{x_0} \frac{(\mu - \xi)^2 + \frac{1}{2}}{\sqrt{(\mu - \xi)^2 + 1}} d\xi \\ = \int_{\mu}^{\mu - x_0} \eta \frac{\eta^2 + \frac{1}{2}}{\sqrt{\eta^2 + 1}} d\eta + \mu B1 \\ = C(\mu - x_0) - C(\mu) + \mu B1 \quad (39)$$

のように求まる.