境界要素法による自由分子流解析*

稲室 隆二^{*1}, 足立 武司^{*1}

Free Molecular Flow Analysis by Boundary Element Method

Takaji INAMURO and Takeshi ADACHI

A numerical method for calculating free molecular flows is developed. An integral equation for the mass flux of incident molecules on walls is used. The integral equation is solved by using the boundary element method. The advantage of the present method over Monte Carol calculation is that results are noise free and there are no sampling errors. As examples of practical engineering applications, the flows in a vacuum vapor deposition chamber and a cryopump are studied. The desired results can be obtained with limited computation time.

Key Words: Free Molecular Flow, Rarefied Gas Flow, Boundary Element Method, Cryopump, Vacuum Vapor Deposition

1. 緒 言

宇宙技術, 機能材製造技術, 真空技術などの先端技術分野において, 希薄気体(分子気体)の流れの解析が重要になってきている。たとえば, PVD(Physical vapor deposition)やCVD(Chemical vapor deposition)などの薄膜製造装置の高性能化, 高効率化には, 真空装置内の気体分子の挙動を把握する必要がある。また, ターボ分子ポンプやクライオポンプなどの真空ポンプの設計では, ポンプ内の希薄気体流解析が不可欠である。

このような希薄気体流れは, 連続流体に対して成立する Navier-Stokes 方程式では記述できず, 気体分子の微視的挙動を取扱う Boltzmann 方程式によって支配される。Boltzmann 方程式は, 非線形の複雑な衝突項を含む微積分方程式であるため, 解析的にはもちろん数値的にも解くことが非常に困難である。希薄度が大きく分子間衝突が無視できる一般の系(凸でない物体あるいは種々の物体群から成る系や外壁で囲まれ

た系)の自由分子流に対しては, Boltzmann 方程式は境界上の反射分子の速度分布関数に対する積分方程式に帰着できる⁽¹⁾。種々の定常な温度分布をもつ静止物体群のまわりの自由分子流(ただし, 物体上の境界条件は Maxwell 型)に対しては, 曾根によって境界の温度場の効果を解析する一般的方法が提案されており, 系の一般的性質や種々の応用例が示されている^{(2)~(6)}。

管内流のような内部領域の自由分子流(ただし, 壁面の境界条件は実際問題で良く用いられる拡散反射条件を仮定)に対しては, 円筒管のような簡単な流路形状については近似解析的に解けるものの⁽⁷⁾, 複雑な形状に対しては解くのが困難であるため, 古くからテスト粒子モンテカルロ法を用いた数値計算が行われている⁽⁸⁾。この方法は複雑な流路形状にも容易に適用できることから, 積分方程式を用いる方法より有利とされてきた。

しかしながら, 近年発展が目ざましい境界要素法⁽⁹⁾を用いれば, 積分方程式を用いる方法も容易に複雑な領域に適用できると考えられる。テスト粒子モンテカルロ法に比べて積分方程式を用いる方法の利点は, 解の揺らぎがなくサンプリング誤差が生じないことである。したがって, 精度の良い解を求めることができる。

* 平成2年10月29日 第3回計算力学講演会および平成3年8月27日 流体工学部門講演会において講演, 原稿受付平成3年7月31日。

^{*1} 正員, 三菱重工業(株)基盤技術研究所(〒236 横浜市金沢区幸浦1-8-1)。

本報では、自由分子流に対して成立する積分方程式を境界要素法を用いて解く数値解析法を提案する。さらに、数値計算例として、真空蒸着室内およびクライオポンプ内の気体の挙動を解析し⁽¹⁰⁾、解析法の実用性を示す。

2. 数値解析法

2.1 自由分子流の基礎式 以下に、閉じた二次元領域にある気体を考える。自由分子流の支配方程式は、衝突項のない Boltzmann 方程式である。ただし、定常問題を考えている。

$$\xi_1 \frac{\partial f}{\partial X_1} + \xi_2 \frac{\partial f}{\partial X_2} = 0 \quad \dots\dots\dots (1)$$

ここに、 $f(X_i, \xi_i)$ は気体分子の速度分布関数、 $X_i (i=1, 2)$ は空間座標、 $\xi_i (i=1, 2, 3)$ は分子速度である。

2.2 境界条件 二次元閉領域の境界は、入口、出口および壁から構成されているとし、それぞれの境界条件を以下のように与える。なお、式(1)には境界から離れていく気体分子に対する速度分布関数 f が与えられている形の境界条件が適合する。

(1) 入口および出口 気体の温度 T_0 、密度 ρ_0 が与えられているとし、気体分子の速度分布関数 f は、静止 Maxwell 分布になっているとする。

$$f = \frac{\rho_0}{(2\pi RT_0)^{3/2}} \exp\left(-\frac{\xi_i^2}{2RT_0}\right) \quad \text{for } \xi_i n_i > 0 \quad \dots\dots\dots (2)$$

ここに、 R は気体定数、 $n_i (i=1, 2)$ は境界の法線ベクトル(ただし気体側に向かうもの)の方向余弦である。

(2) 壁面 壁面に当たる気体分子の付着率 α が与えられているとし、入射分子の α 部分が壁面に付着し、残りの $(1-\alpha)$ 部分が拡散反射⁽¹¹⁾するものとする。

2.3 積分方程式の導出 式(1)より気体分子の速度分布関数 $f(X_i, \xi_i)$ は、分子の運動経路に沿って一定値をとることがわかる。したがって、問題は境界へ入射する気体分子の質量流束 $\sigma(X_i)$ (ただし、実際は入射質量流束を $2/\pi$ 倍したもの)に対する次の積分方程式に帰着できる⁽¹¹⁾。

$$\sigma(X_i) = \frac{1-\alpha}{2} \int_{\text{wall}} l_j n_j \sigma(\tilde{X}_i) d\theta + \frac{1}{2} \int_{\text{entr}} l_j n_j \sigma_0 d\theta \quad \dots\dots\dots (3)$$

ここで、

$$\sigma(X_i) = -\frac{2}{\pi} \int_{\xi_i n_i < 0} \xi_j n_j f(X_i, \xi_i) d\xi_1 d\xi_2 d\xi_3 \quad \dots\dots\dots (4)$$

$$\sigma_0 = \frac{(2RT_0)^{1/2}}{\pi^{3/2}} \rho_0 \quad \dots\dots\dots (5)$$

ここに、 $l_i = \xi_i / |\xi_i|$ 、 θ は n_i と $-l_i$ との間の角度、 $\tilde{X}_i$ は境界点 X_i に分子速度 ξ_i をもった気体分子が入射する場合のその気体分子の経路をさかのぼったときに出会う境界点の座標である(図1)。また、 $\int_{\text{wall}}$ は壁からの寄与、 $\int_{\text{entr}}$ は入口からの寄与を表す。ただし、境界は入口と壁から構成されているとしている。式(3)は円筒管に対して得られる Clausing 方程式⁽⁷⁾に相当するものである。

式(3)より、境界へ入射する気体分子の質量流束 $\sigma(X_i)$ は、入口の温度 T_0 にだけ依存し壁の温度には依存しないことがわかる。

2.4 積分方程式の解法 積分方程式(3)を境界要素法⁽⁹⁾を用いて解く。すなわち、領域の境界を多数の線要素に分割し、各要素内で線形変化する未知数 σ を考える(図2)。

$$\sigma(s) = \sigma_k + \frac{s}{s_k} (\sigma_{k+1} - \sigma_k) \quad \dots\dots\dots (6)$$

この σ を式(3)に代入して離散化すると、各節点の未知数 σ_i に対する次の連立一次方程式が得られる。

$$\sigma_i - \sum_{k=1}^{N_p} (1-\alpha_k) (\sigma_k I_{ik} + \sigma_{k+1} J_{ik}) = \sigma_0 \sum_{k=1}^{N_0} (I_{ik} + J_{ik}) \quad l=1, 2, \dots, N_p \quad \dots\dots\dots (7)$$

図1 記号の説明: X_i , $\tilde{X}_i$, n_i , l_i , θ

図2 境界要素(線形要素)

ここに,

$$I_{ik} = \frac{1}{2} [n_{1l}(X_{1l} - X_{1k}) + n_{2l}(X_{2l} - X_{2k})] \\ \times [n_{1k}(X_{1l} - X_{1k}) + n_{2k}(X_{2l} - X_{2k})] \\ \times (-F + \frac{1}{S_k}G) + \frac{1}{2}(n_{1l}n_{2k} - n_{2l}n_{1k}) \\ \times [n_{1k}(X_{1l} - X_{1k}) + n_{2k}(X_{2l} - X_{2k})] \\ \times (G - \frac{1}{S_k}H) \dots\dots\dots (8)$$

$$J_{ik} = -\frac{1}{2} [n_{1l}(X_{1l} - X_{1k}) + n_{2l}(X_{2l} - X_{2k})] \\ \times [n_{1k}(X_{1l} - X_{1k}) + n_{2k}(X_{2l} - X_{2k})] \frac{1}{S_k}G \\ + \frac{1}{2}(n_{1l}n_{2k} - n_{2l}n_{1k}) [n_{1k}(X_{1l} - X_{1k}) \\ + n_{2k}(X_{2l} - X_{2k})] \frac{1}{S_k}H \dots\dots\dots (9)$$

$$F = \frac{2(2s_k + b)}{(4c - b^2)\sqrt{s_k^2 + bs_k + c}} - \frac{2b}{(4c - b^2)\sqrt{c}} \quad (10)$$

$$G = \frac{2(2s_k + 2c)}{(b^2 - 4c)\sqrt{s_k^2 + bs_k + c}} - \frac{4c}{(b^2 - 4c)\sqrt{c}} \\ \dots\dots\dots (11)$$

$$H = \frac{(2b^2 - 4c)s_k + 2bc}{(4c - b^2)\sqrt{s_k^2 + bs_k + c}} \\ + \log|2s_k + b + 2\sqrt{s_k^2 + bs_k + c}| \\ - \frac{2bc}{(4c - b^2)\sqrt{c}} - \log|b + 2\sqrt{c}| \dots\dots\dots (12)$$

$$b = -2[n_{2k}(X_{1l} - X_{1k}) - n_{1k}(X_{2l} - X_{2k})] \\ \dots\dots\dots (13)$$

$$c = (X_{1l} - X_{1k})^2 + (X_{2l} - X_{2k})^2 \quad \dots\dots\dots (14)$$

である。また、 N_e は壁面上の要素数、 N_0 は入口の要素数、 N_p は節点数、 Σ^* は節点 l を含む要素について和を除くことを表す。

なお、連立一次方程式(7)の係数を求めるとき、以下の4点に注意しなければならない。

(1) 図1に示す θ が $-\pi/2 < \theta < \pi/2$ の場合だけ係数を求める。その他の場合は係数 = 0 となる。

(2) 節点 l と要素 k の両端とを結ぶ三角形が要素 k の法線ベクトルと同じ側にできる場合だけ係数を求める。その他の場合は係数 = 0 となる。

図3 角部の特異点の処理

(3) 角部の特異点は、それぞれ別々の辺に属する2点を考え $\epsilon \rightarrow 0$ の極限をとることにより考慮する(図3)。このとき、式(8)、(9)は次式で与えられる。

$$I_{ik} = \frac{(n_{1l}n_{2k} - n_{2l}n_{1k})^2}{2(1 + n_{1l}n_{1k} + n_{2l}n_{2k})} \dots\dots\dots (15)$$

$$J_{ik} = 0 \quad \dots\dots\dots (16)$$

(4) 節点 l と要素 k の両端とを結ぶ三角形の内部に他の要素が存在する場合、遮られる部分を考慮しなければならない。

以上の4点に注意して連立一次方程式を求め、これを解けば求めたい境界上の入射質量流束 σ が得られる。連立一次方程式の解法には、Gauss の消去法⁽¹²⁾を用いた。

入射質量流束 σ が求めれば、それを用いて運動量流束、エネルギー流束も計算することができる。たとえば、壁面(温度 T_w)に流入するエネルギー流束は(ただし、内部自由度をもたない単原子分子を考えている)。

$$E_{in}(X_i) = - \int_{\xi_i, n_i < 0} \frac{1}{2} \xi_i^2 \xi_j n_j f(X_i, \xi_i) d\xi_1 d\xi_2 d\xi_3 \\ = \frac{\pi}{2} R(1 - \alpha) \int_{\text{wall}} l_j n_j T_w(\bar{X}_i) \sigma(\bar{X}_i) d\theta \\ + \frac{\pi}{2} R \int_{\text{entr}} l_j n_j T_0 \sigma_0 d\theta \quad \dots\dots\dots (17)$$

となる。また、壁面から流出するエネルギー流束は、

$$E_{out}(X_i) = - \int_{\xi_i, n_i > 0} \frac{1}{2} \xi_i^2 \xi_j n_j f(X_i, \xi_i) d\xi_1 d\xi_2 d\xi_3 \\ = - \pi R(1 - \alpha) T_w(X_i) \sigma(X_i) \quad \dots\dots\dots (18)$$

となる。したがって、壁面に正味流入するエネルギー流束は、

$$E(X_i) = E_{in}(X_i) + E_{out}(X_i) \quad \dots\dots\dots (19)$$

となる。

3. 数値計算結果と考察

3.1 真空蒸着室 まず、本数値解析法を図4に

図4 真空蒸着室

図 5 壁面への入射質量流束 ($h/d=1$, $\alpha=1$)
(●: 付着分子, ○: 反射分子)

図 6 壁面への入射質量流束 ($b/d=0.5$, $\alpha=1$)
(●: 付着分子, ○: 反射分子)

図 7 壁面への入射質量流束 ($h/d=0.5$, $b/d=0.5$) (●: 付着分子, ○: 反射分子)

示す真空蒸着室に適用した計算結果を以下に示す。蒸発面 BC から気体分子が蒸発し、付着面 EF に当たった分子の α 部分がそこに付着し、残りの $(1-\alpha)$ 部分は拡散反射するものとする。また、その他の壁面に当たる分子はすべて拡散反射($\alpha=0$)するものと仮定する。なお、蒸発面では、気体の温度 T_0 および飽和蒸気密度 ρ_0 が与えられているとし、気体分子の速度分布関数を式(2)で与えた。壁面の温度は $T_1=T_0$ とした。

壁面への入射質量流束の計算結果を図5～7に示す。図5, 6は蒸着室の寸法を変化させたときの結果、図7は蒸着室の寸法を一定にして付着面の付着率 α を変化させたときの結果である。図5～7中●は付着分子の入射質量流束、○は反射分子の入射質量流束を示す。図8には $b/d=0.5$ の場合の付着面に付着する全入射質量流束を示す。なお、本数値解析法の計算精度を調べるため、図5(c)の形状につき文献(11)の計算結果と本計算結果とを比較した。付着面への入射質量流束についての比較結果を図9に示す。両者の計算結果は非常に良く一致しており、本数値解析法の計算精

度は、文献(11)の方法と同程度であると言える。文献(11)では、積分方程式(3)を複合 Simpson 則で近似して得られる連立一次方程式を解いて入射質量流束 σ を求めている。ここで提案した数値解析法に比べ、連立一次方程式の係数を求める計算が複雑であり、また任意形状に適用するのが困難である。

図5～7より付着面に付着する入射質量流束は、 b/d または h/d が大きくなるか、または付着面の α が小さくなるにしたがって一樣になることがわかる。その中で入射質量流束分布と b/d の関係は明白である。他の二つの関係($\sigma \propto h/d$ および $\sigma \propto \alpha$)は次のように説明できる。付着面に付着する分子は蒸発面 BC からやってくるか、またはその他の壁面 FA, AB, CD, DE からやってくる。その中で、BC からやってくる分子は付着面の中央により多く付着する。一方、その他の壁面からやってくる分子は付着面の両側により多く付着する。さて、 h/d が大きくなるか、または α が小さくなると、付着面には BC からよりもその他の壁面からやってくる分子の数が増える。したがって、付着面に付着する入射質量流束は、 h/d が大きくなるか、または α が小さくなるにしたがい一樣になる。

一方、図8より、付着面に付着する全入射質量流束は、 h/d が大きくなるにしたがい減少することがわかる。これは、 h/d が大きくなるにしたがって FA と DE で反射される分子の数が増え、その一部が BC を通って領域外へ流出するからである。

なお、所要計算時間は図5(a)の場合で IBM 3090 で 11 s であった。

3.2 クライオポンプ 次に、本数値解析法を図10に示すクライオポンプのモデルに適用した計算結果を以下に示す。モデルは温度 $T_1=20$ K のクライオ

図8 付着面に付着する全入射質量流束($b/d=0.5$)

図9 文献(11)の結果との比較($h/d=1$, $b/d=1$)
(—: 文献(11), ●: 本計算結果)

図10 クライオポンプのモデル

パネルと温度 $T_2=80\text{ K}$ のバッフル板から成っている。その他の壁面の温度は $T_2=80\text{ K}$ としている。入口から入る気体分子は、温度 $T_0=288\text{ K}$ の静止 Maxwell 分布になっているとする。なお、バッフル板はポンプの入口から入る高温の気体分子が直接クライオパネルに入射しないように設置されており、クライオポンプに大きな熱負荷がかからないようになっている。

以下では、次の2種類の気体分子を考える。

(1) 分子 A 壁面温度 T が $T \leq 20\text{ K}$ の壁面で凝縮する。

(2) 分子 B 壁面温度 T が $T \leq 80\text{ K}$ の壁面で凝縮する。

すなわち、B タイプの分子はすべての壁面で凝縮する(すべての壁面で $\alpha=1$)が、A タイプの分子はクライオパネルだけで凝縮する(クライオパネルで $\alpha=1$, 他の壁面で $\alpha=0$)。空気中では、分子 A は酸素分子、窒素分子に相当し、分子 B は水蒸気に相当する。

図 11 は A タイプの気体分子に対する計算結果である。図 11(a) は各壁面で凝縮する質量流束、図 11(b) は各壁面上での正味のエネルギー流束である(ただし、 $E_0=\pi RT_0\alpha_0$)。図 11(c) はバッフル板上のエネルギー

流束を拡大して示したものである。計算結果より、入口から入る気体分子の温度が壁面の温度より高いため、クライオパネル以外の壁面上にもエネルギーの出入りがあることがわかる。また、側面の上部およびバッフル板の外側付け根(図 10 の P_1 部分)の熱負荷が高くなることがわかる。なお、本計算結果では、クライオパネル上で凝縮する気体分子の質量は、入口から入る気体分子の全質量の 34.2% となった。残りの気体分子は、バッフル板および側面で反射し入口から流出すると考えられる。

図 12 は B タイプの気体分子に対する計算結果である。図 12(a) は各壁面で凝縮する質量流束、図 12(b) は各壁面上での正味のエネルギー流束である。また、図 12(c) はバッフル板上の質量流束およびエネルギー流束を拡大して示したものである(両者が同じ値をもつ)。計算結果より、B タイプの気体分子はバッフル板に遮られてクライオパネルに到達しないことがわかる。バッフル板は入射分子が直接クライオパネルに当たらないように設置されていることを考えると当然の結果である。また、気体分子は側面の上部およびバッフル板の外側付け根に多く凝縮し、その部分で熱負荷が高くなることがわかる。

図 11 A タイプの気体分子の計算結果

図 12 B タイプの気体分子の計算結果

これらの結果を使えば、ポンプの排気速度や熱負荷を求めることができる。なお、計算時間はおのおののタイプの分子に対して IBM 3090 で 108 s を要した。

4. 結 言

自由分子流に対して成立する積分方程式を境界要素法を用いて解く数値解析法を提案した。真空蒸着室内およびクライオポンプ内の気体の挙動の数値計算結果からわかるように、本数値解析法は、複雑な形状をした二次元領域に容易に適用でき、しかも所要計算時間が非常に短い実用的な手法であると考えられる。また、ここで示した真空蒸着やクライオポンプだけでなく種々の真空装置の自由分子流計算にも適用できると考えられる。今後、本解析法を三次元領域に適用できるように拡張する予定である。

最後に、本研究を進めるにあたりご指導賜った京都大学工学部 曾根良夫教授に感謝します。

文 献

- (1) 曾根・青木, 希薄気体力学(分子気体力学), 流体力学ハンドブック, (1987), 399, 丸善.
- (2) Sone, Y., *J. Meca. Theo. Appl.*, **3**(1984), 315.
- (3) Sone, Y., *J. Meca. Theo. Appl.*, **4**(1985), 1.
- (4) 曾根・ほか 2 名, 日本航空宇宙学会誌, **34**-390(1986), 386.
- (5) Aoki, K., ほか 2 名, Boffi, V. C. and Cercignani, C., eds, *Rarefied Gas Dynamics*, **I**(1986), 236, Teubner, Stuttgart.
- (6) Sone, Y. and Tanaka, S., Boffi, V. C. and Cercignani, C., eds, *Rarefied Gas Dynamics*, **I**(1986), 194, Teubner, Stuttgart.
- (7) Clausing, P., *Ann. Phys.*, **12**(1932), 961.
- (8) Davis, D. H., *J. Appl. Phys.*, **31**(1960), 1169.
- (9) Brebbia, C. A., *The Boundary Element Method for Engineers*, (1978), 1, Pentech Press.
- (10) Inamuro, T., Muntz, E. P., Weaver, D. P. and Campbell, D. H. eds, *Rarefied Gas Dynamics*, **117**(1989), 418, AIAA, Washington D. C.
- (11) 丸山, 京都大学工学部修士論文, (1984).
- (12) 例えば, 森, FORTRAN 77 数値計算プログラミング, (増補版), (1987), 52, 岩波書店.