

自由分子流コンダクタンス解析プログラム

TRAP VER. 3.7

概要説明書

株式会社 科学技術ソフトウェア

目 次

1. 概要	1
2. 基本式	2
3. モンテカルロ法	3
4. 入力データ	3
4-1 シミュレーション条件データ	3
4-2 配管系幾何学形状データ	4
5. 出力データ	5
5-1 入力データのエコー	5
5-2 通過確率	5
5-3 コンダクタンス	5
5-4 衝突回数分布	5
5-5 各要素への分子の入射回数, 付着数	5
6. 解析例	6
6.1 シミュレーション回数と解のゆらぎの関係	6
6.2 円管の通過確率	6
6.3 2個のエルボからなる配管系の通過確率	7
6.4 テーパー管の通過確率	7
6.5 両端にオリフィスを有する円管の通過確率	8
6.6 両端にオリフィス, 内部にバッフルを有する円管の通過確率	8
6.7 バタフライバルブの通過確率	9
6.8 丸パイプベンドの通過確率	9
6.9 真空排気系のコンダクタンス	10
7. TRAP で使用できる単位要素	11

1. 概要

TRAP(Transmission Probability Analysis Package) は、1つの入口と1つの出口を持つ配管系の自由分子流コンダクタンスを、モンテカルロシミュレーションにより求めた通過確率から算定するプログラムです。

通過確率 P は、入口から入射した分子の個数 N_{in} と、出口に到達した分子の個数 N_{out} の比 $P = N_{out}/N_{in}$ として定義されます。(通過確率からコンダクタンスを算出する式は2章を、モンテカルロ法については3章を参照して下さい)。

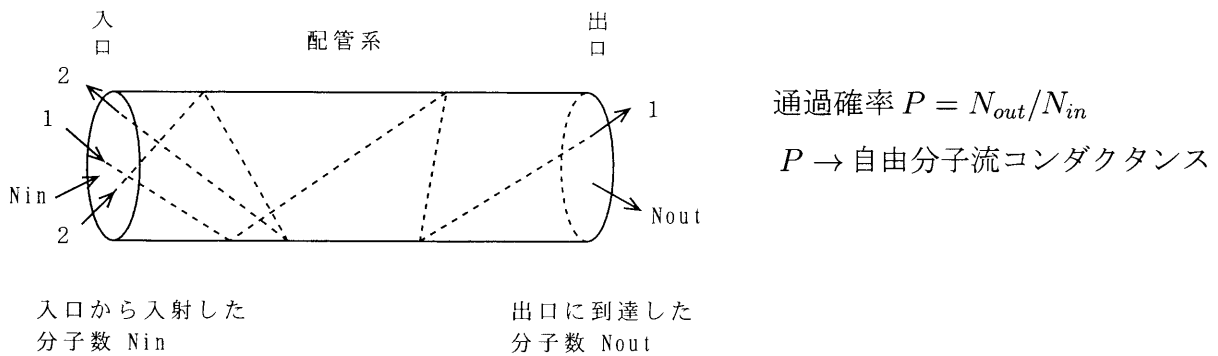


図 1

●特徴

TRAP では解析対象の配管系を単位要素の組合せとして定義するため、複雑な配管系も容易に解析できます。また、反射則、付着率などの気体分子の壁面における挙動を要素ごとに指定できます。

●入力データ

- (1) シミュレーション条件データ
- (2) 配管系幾何学形状データ

具体的には、上記のデータに対応する文字列または数値を固定フォーマット形式で記入したデータファイルを作成します(詳細は4章を参照して下さい)。

●出力データ

- (1) 配管系の通過確率
- (2) コンダクタンス
- (3) 出口に到達した分子の配管壁面との衝突回数の度数分布
- (4) 各要素壁面への分子の入射回数, 付着数

がプリント出力ファイルに出力されます(詳細は5章を参照して下さい)。

- 動作環境

TRAP は、OS が Windows(98,2000,NT,XP,Vista,7) である pentium(または互換品) 搭載のパソコンで動作します。

2. 基本式

気体分子の平均自由行程が配管系の代表寸法に比べて十分大きく自由分子流条件が成立し、配管系温度が一定のとき、配管系の定常な気体流量 Q は、

$$Q = \frac{1}{4} \bar{c} S_A P (p_A - p_B) \quad (\text{Pa} \cdot \text{m}^3/\text{s})$$

と表されます。

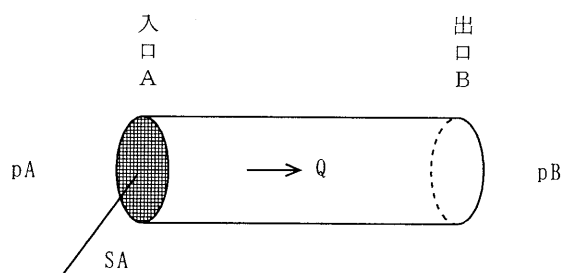


図 2

ここで、 p_A, p_B はそれぞれ入口 A および出口 B における気体の圧力 (Pa)、 S_A は入口 A の断面積 (m^2)、 \bar{c} は気体分子運動の平均速度 (m/s)、 P は通過確率 (無次元) すなわち入口 A から入射した気体分子のうち出口 B に到達したものの割合です。

一般に流量 Q は配管系入口と出口の圧力差 $\Delta p = p_A - p_B$ にコンダクタンス C を掛けた形で

$$Q = C \Delta p$$

と表されます。この式と前掲の式を比較して自由分子流に対するコンダクタンス

$$C = \frac{1}{4} \bar{c} S_A P \quad (\text{m}^3/\text{s})$$

が得られます。ここで分子運動の平均速度 \bar{c} として、分子速度が Maxwell 分布に従うときの

$$\bar{c} = \sqrt{\frac{8\hat{R}T}{\pi M}} \quad (\text{m/s})$$

を用いればコンダクタンス C は、

$$C = \sqrt{\frac{\hat{R}T}{2\pi M}} \cdot S_A \cdot P \quad (\text{m}^3/\text{s})$$

と表されます。ここで、 \hat{R} は一般ガス定数 $8.31451(\text{J}/(\text{K}\cdot\text{mol}))$ 、 T は配管系温度 (K)、 M は気体の分子量 (kg/mol) です。 \hat{R}, T, π, M, S_A は既知ですから通過確率 P が分かれば、コンダクタンス C が算定されることとなります。

3. モンテカルロ法

通過確率 P は、配管系入口から入射した気体分子の運動をモンテカルロ法によりシミュレーションして決定されます。

すなわち、配管系入口における気体分子の位置と運動方向を乱数に基づき決定し、その位置と運動方向から気体分子と配管系の衝突位置を求めます。気体分子は壁面で乱反射されると仮定して、その反射方向を新たな乱数に基づき決定します。次に、この衝突位置と反射方向から分子と配管系の第2の衝突位置を求め、以下同様の手続きを気体分子が出口に到達するか、あるいは再び入口に戻ってくるまで繰り返します。

以上のシミュレーションを多数回行い配管系入口から入射した分子数に対する配管系出口に到達した分子数の比をとれば、それが求める通過確率 P となります。なお、TRAP では壁面における反射の仕方として、鏡面反射、拡散反射および両者の混合の三通りが選択できるようになっています。

4. 入力データ

TRAP の入力データはシミュレーション条件データ、配管系幾何学形状データの2つに大別されます。ユーザーはこれら2種のデータを目的に応じて適宜指定します。

4.1 シミュレーション条件データ

このデータは配管系の幾何学形状以外の解析条件を指定するものです。

- シミュレーション回数

モンテカルロシミュレーションの回数を指定します。指定方法は、入口から入射する分子数を指定する方法と、出口に到達した分子数を指定する方法との2種類があります。

- 気体分子量

気体1モル当りの質量を指定します。

- 配管系温度

TRAP では解析の対象となる配管系の温度は、時間および場所によらず一定であるという仮定を設けていますので、その温度を指定します。

- 反射条件

気体分子の壁面における反射の仕方を指定します。鏡面反射、拡散反射、および両者の混合の三通りが指定できます。また、この反射条件は配管系の要素ごとに指定することがで

きます。

- 付着条件

気体分子が壁面に付着する場合の付着率を指定します。このデータも配管系の要素ごとに指定することができます。

4.2 配管系幾何学形状データ

TRAP では、配管系を一つの入口と一つの出口を持つ単位要素の組み合わせとして定義します。すなわち、一つの単位要素の出口に次の単位要素の入口を接続し、その接続された単位要素の出口にさらに次の単位要素の入口を接続するということを繰り返して配管系全体を定義します。例えば、図3に示す配管系の場合は、

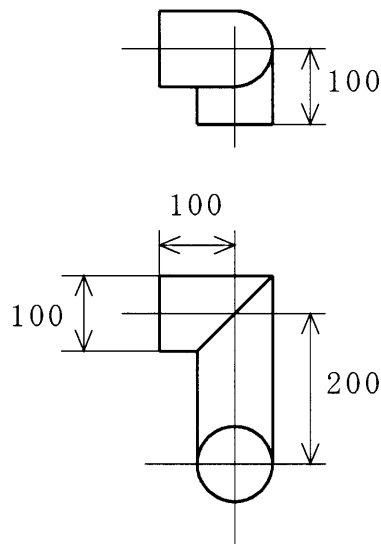


図3 配管系の例

配管系全体を

要素1 内径0.1m, 入口部長さ0.1m, 出口部長さ0.1mのエルゴ要素

要素2 内径0.1m, 入口部長さ0.1m, 出口部長さ0.1mのエルゴ要素

の2要素に分け、要素1の出口に要素2の入口を接続して定義します。この例では配管系全体が軸対称ではありませんから、要素1の出口面と要素2の入口面の回転角度位置関係を指定する必要があります。このような要素相互の回転角度位置関係の指定のためにTRAPでは各要素毎に入口面座標系と出口面座標系が予め定義されており、一つの要素の出口面座標系のX軸と、その要素に接続される要素の入口面座標系のX軸とのなす角を指定するようになっています。この例ではエルゴ要素の入口面座標系, 出口面座標系は図4に示すように定義されていますから、第1のエルゴ要素の出口面座標系のX軸と、第2のエルゴ要素の入口面座標系のX軸とのなす角を -90 度として接続すればよいことになります(図5参照)。

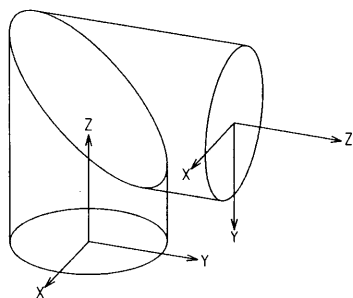


図4 エルゴ要素

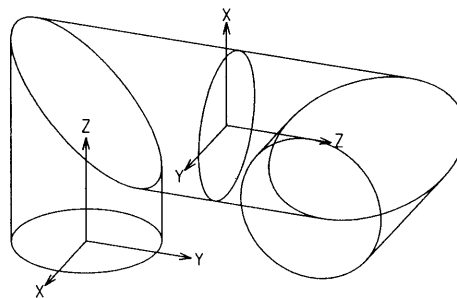


図5 エルゴ要素の組み合わせ

以上より配管系定義データは、要素の寸法, 前要素との回転角度位置関係, 配管壁面性状を定義する要素データの集合として構成されることになります。

TRAP で使用できる単位要素は7章を参照して下さい。

5. 出力データ

TRAP の出力は以下の通りです。

5.1 入力データのエコー

シミュレーション条件, 幾何学形状などの入力データを編集して出力します。

5.2 通過確率

TRAP の主要な出力データで、配管系入口から入射した分子数に対する配管系出口に到達した分子数の比を出力します。

5.3 コンダクタンス

通過確率と気体分子量, 配管系温度, 入口断面積から2章の式によりコンダクタンスを計算して出力します。

5.4 衝突回数分布

配管系を通過した気体分子が出口に到達するまでに配管系と衝突した回数を度数分布表の形で出力します。

5.5 各要素への分子の入射回数, 付着数

気体分子が配管系内を運動する際の分子の配管系への入射回数 (衝突回数) と付着率がゼロでない場合の分子の付着数を要素単位に出力します。

6. 解析例

6.1 シミュレーション回数と解のゆらぎの関係

管長/管径=1の直円管の通過確率とシミュレーション回数の関係を10種類の乱数列初期値について求めた結果を図6に示す。図中2点鎖線はモンテカルロシミュレーションにより得られる通過確率が2項分布に従うとしたときの標準偏差を厳密解に加えた値と差引いた値を示す。

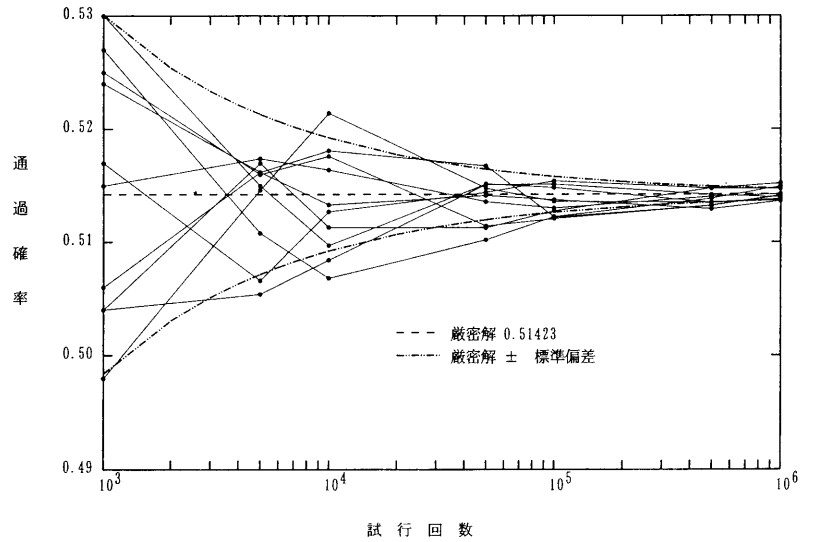


図6 試行回数と通過確率の関係 (管長/直径=1の直円管)

6.2 円管の通過確率

TRAPにより求めた円管の通過確率と理論解との比較を図7に、円管出口に到達した分子の平均衝突回数と管長との関係を図8に示す。

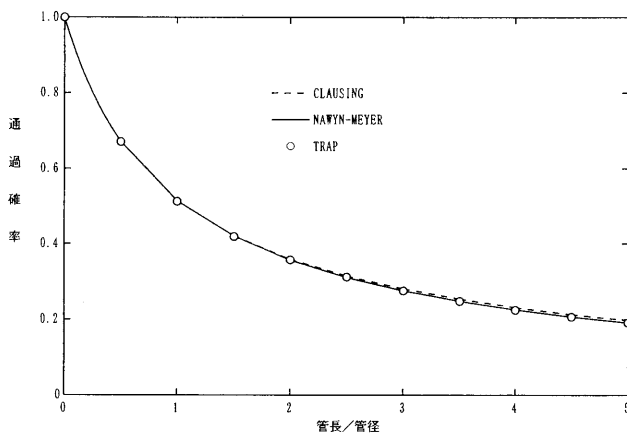


図7 円管の通過確率

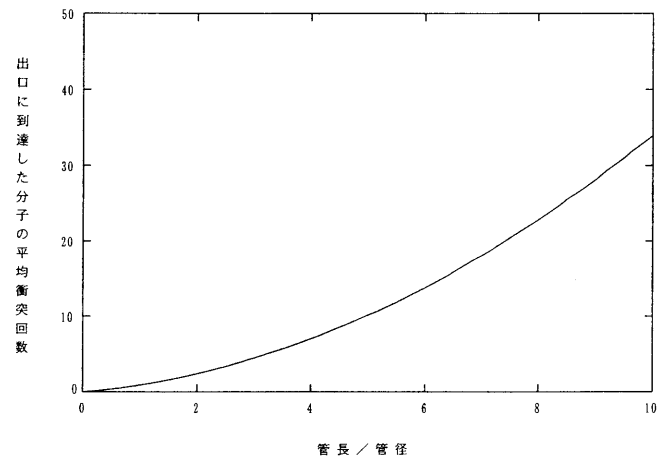


図8 円管出口に到達した分子の平均衝突回数と管長との関係

6.3 2個のエルボからなる配管系の通過確率

図9に示す2個のエルボを組合わせた配管系の通過確率を表に示す。図9において $A/D=1$, $B/D=1, H/D=2$ である。

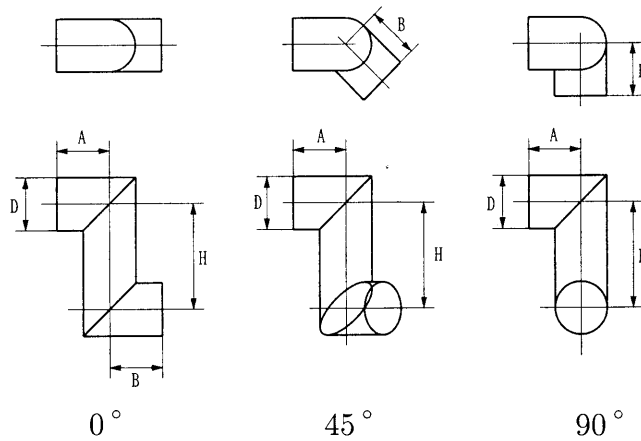


図9 2個のエルボを組合わせた配管系 (組合せ角度 $0^\circ, 45^\circ, 90^\circ$)

組合せ角度	通過確率
0°	0.214
45°	0.214
90°	0.214

参考： $L/D=4$ の直円管の通過確率 0.225

同じ直円管で管壁に一度も衝突せず入口から出口に直接到達する分子を除いた場合の通過確率 0.213

6.4 テーパ管の通過確率

テーパ管の通過確率とテーパ角の関係を TRAP により解析し、文献 [1] と比較した結果を図10に示す。

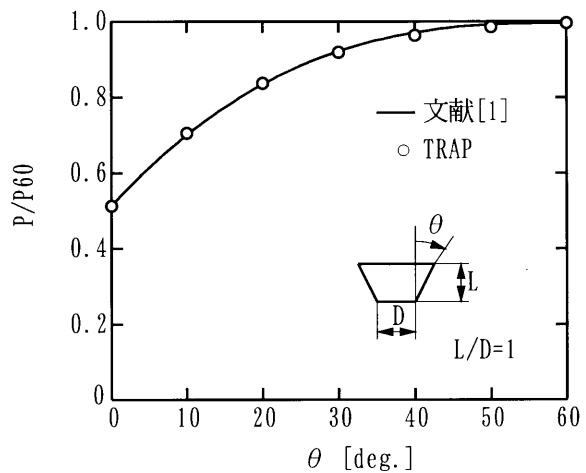


図10 テーパ管の通過確率

参考文献

[1] K.Nanbu and Y.Watanabe: Thickness Distribution of Films Fabricated by the Molecular Beam Epitaxy Technique, Vacuum, Vol.36(1986), pp.349-354.

6.5 両端にオリフィスを有する円管の通過確率

図 11 に示す両端にオリフィスを有する円管の通過確率を TRAP で解析し、その結果を文献 [2] の結果と比較する。解析対象の幾何学形状は TRAP の異径管_1 要素と異径管_2 要素を組合せて定義した。

通過確率	
TRAP	0.451
文献 [2]	0.449



図 11 両端にオリフィスを有する円管

$$L/D1 = 2, (D2/D1)^2 = 1.5$$

参考文献

[2] D.H.Davis: Monte Carlo Calculation of Molecular Flow Rates through a Cylindrical Elbow and Pipes of Other Shapes, J. Appl. Phys., Vol.31(1960), pp.1169-1176.

6.6 両端にオリフィス, 内部にバッフルを有する円管の通過確率

図 12 に示すオリフィスとバッフルを有する円管の通過確率を TRAP で解析し、その結果を文献 [2] の結果と比較する。解析対象の幾何学形状は TRAP の異径管_1 要素, 異径管_2 要素, バッフル要素を組み合わせて定義した。

通過確率	
TRAP	0.232
文献 [2]	0.235

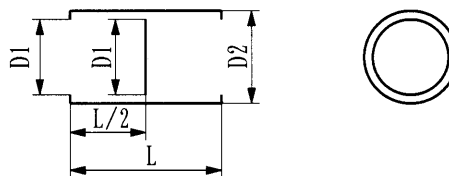


図 12 両端にオリフィス, 内部にバッフルを

有する円管 $L/D1 = 2, (D2/D1)^2 = 1.5$

6.7 バタフライバルブの通過確率

バタフライバルブの弁開度と通過確率の関係を TRAP のバップル要素により解析した結果を図 13 に示す。

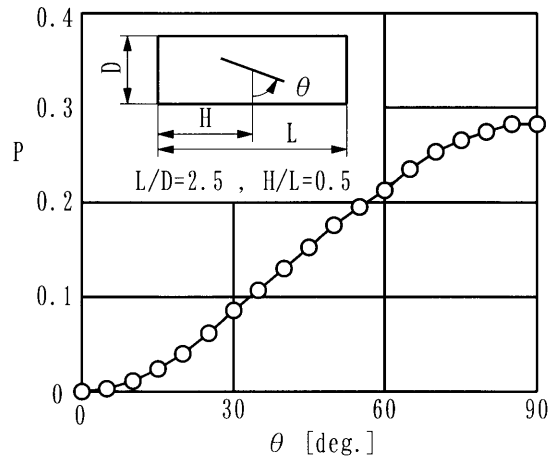


図 13 バタフライバルブの弁開度 θ と通過確率 P の関係

6.8 丸パイプベンドの通過確率

図 14 に示す丸パイプベンドのパイプ直径 D とパイプ中心線曲率半径 R の比 R/D を変化した場合の通過確率 P とベンド曲り角 θ の関係を図 15 に示す。

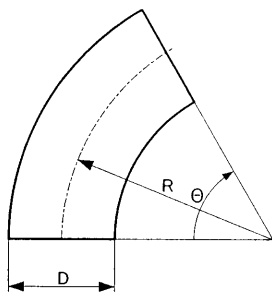


図 14 丸パイプベンド

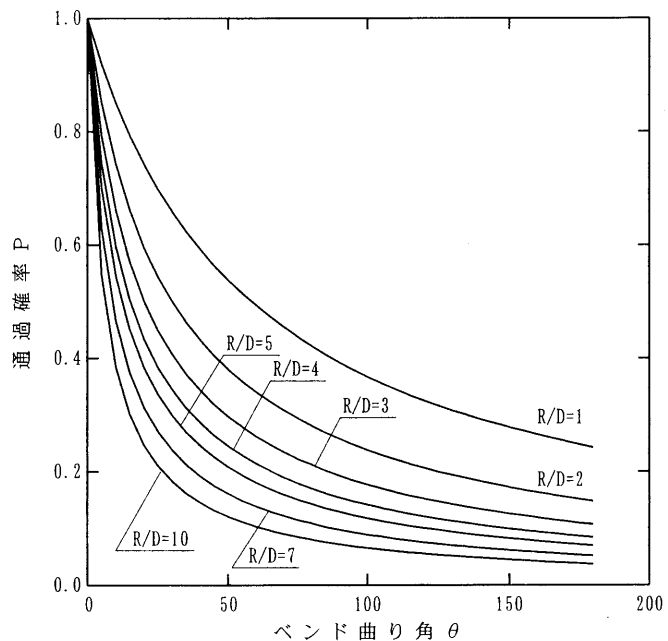


図 15 ベンド曲り角と通過確率の関係

6.9 真空排気系のコンダクタンス

図 16 に示す排気系を以下の要素の組合せとして解析する。

- (1) エルボ要素
- (2) 異径管_2 要素
- (3) 丸パイプ丸孔_1 要素
- (4) ルーバ_1 要素
- (5) パイプ要素
- (6) アングル弁_1 要素
- (7) パイプ要素

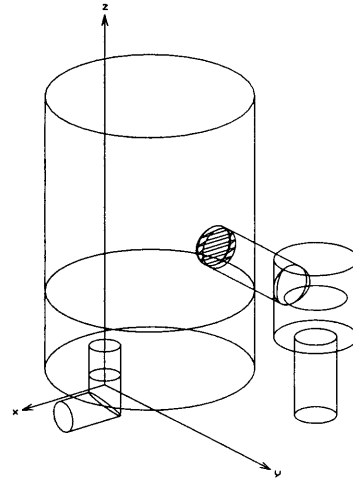


図 16 真空排気系全体図

結果

(1) TRAP により全体系をモンテカルロシミュレーションした場合

通過確率 0.10932

系の温度を 20℃, 気体を空気とした場合のコンダクタンス $C = 223.6\text{l/s}$

(2) 各要素のコンダクタンスを単独に求め、その値から全体系のコンダクタンスを計算した場合

単独要素のコンダクタンス

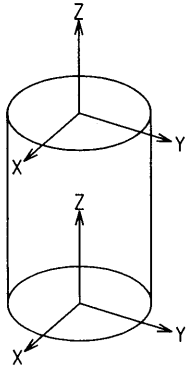
エルボ要素	$C_1 = 588.3\text{l/s}$
異径管_2 要素	$C_2 = 1041.2\text{l/s}$
丸パイプ丸孔_1 要素	$C_3 = 3515.5\text{l/s}$
ルーバ_1 要素	$C_4 = 1311.4\text{l/s}$
パイプ要素	$C_5 = 1059.7\text{l/s}$
アングル弁_1 弁要素	$C_6 = 1741.6\text{l/s}$
パイプ要素	$C_7 = 1300.7\text{l/s}$

上記の単独要素のコンダクタンスから公式

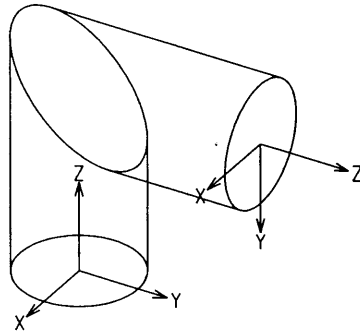
$$\frac{1}{C_a} = \sum_{i=1}^7 \frac{1}{C_i}$$

により計算した合成コンダクタンス $C_a = 166.8\text{l/s}$

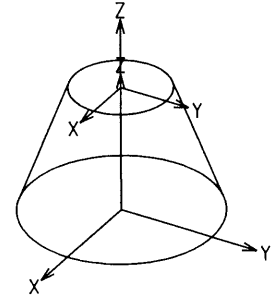
7. TRAPで使用できる単位要素



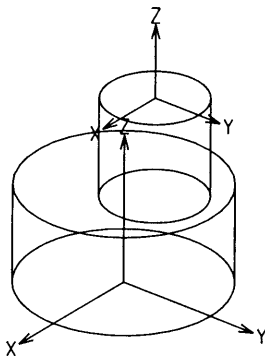
パイプ要素



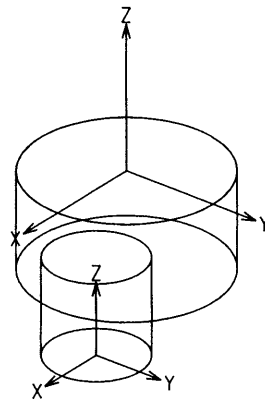
エルボ要素



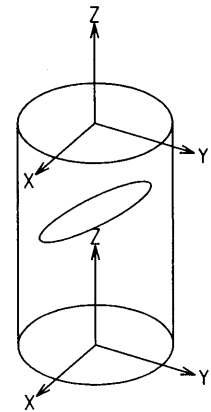
テーパ要素



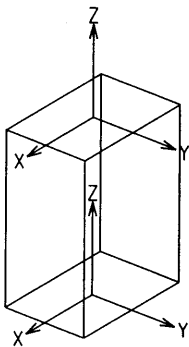
異径管_1 要素 $D1 \geq D2$



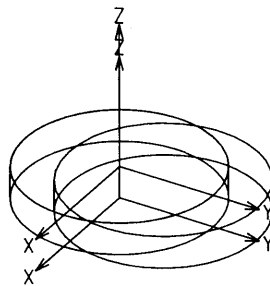
異径管_2 要素 $D1 \leq D2$



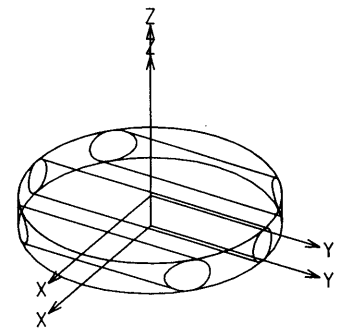
バッフル要素



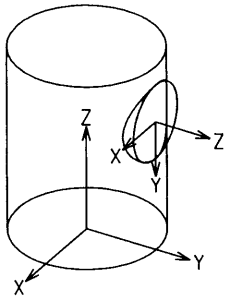
角パイプ要素



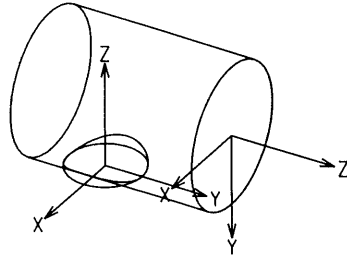
ゲートバルブ要素



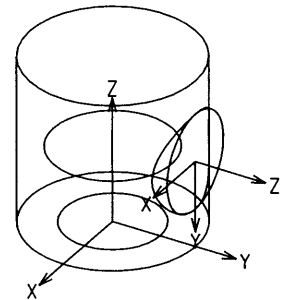
ワイヤーメッシュ要素



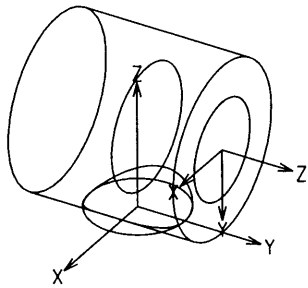
丸パイプ丸孔_1要素



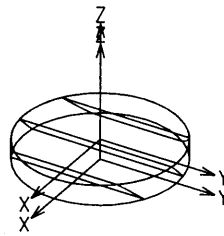
丸パイプ丸孔_1要素



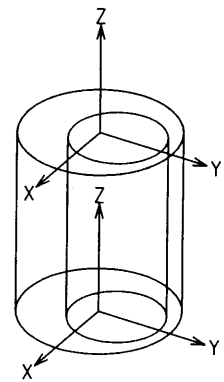
アングル弁_1要素



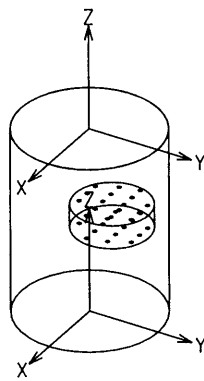
アングル弁_2要素



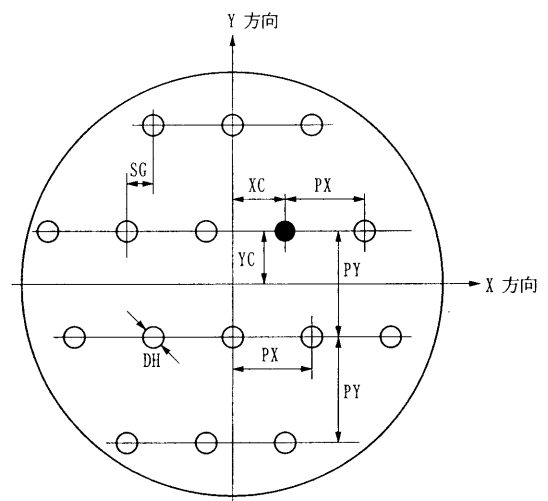
ルーバ_1要素

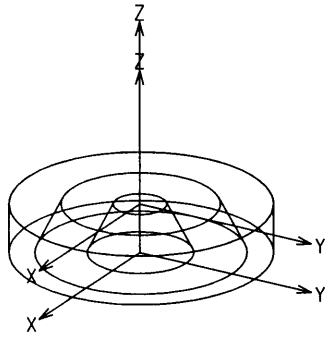


2重管要素

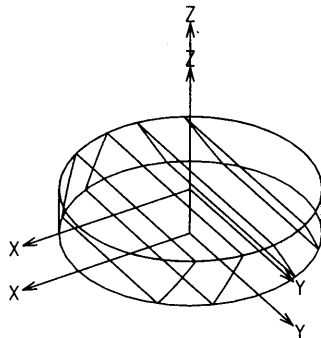


バッフル_2要素 (多孔板バッフル)

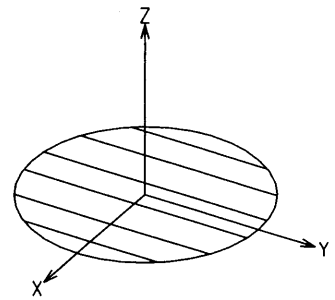




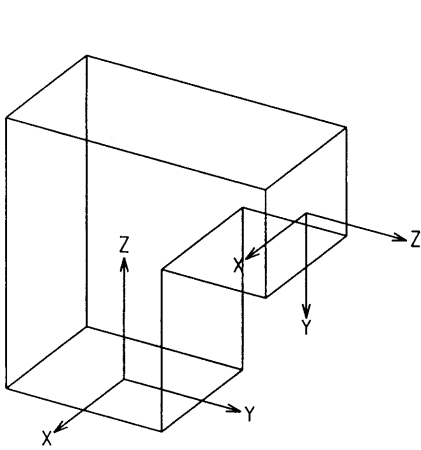
ルーバ_2要素



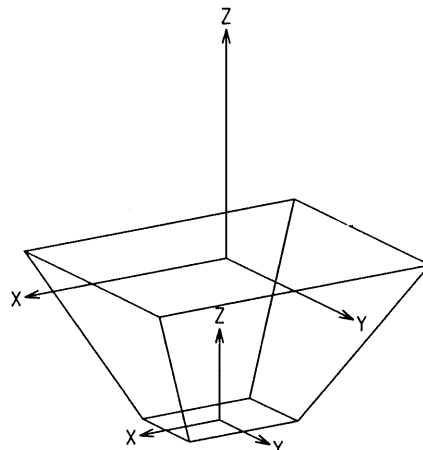
ルーバ_3要素



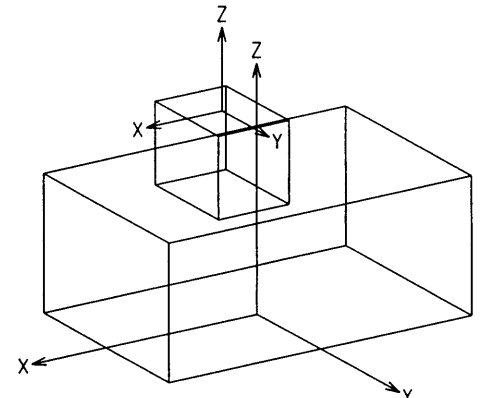
平板格子要素



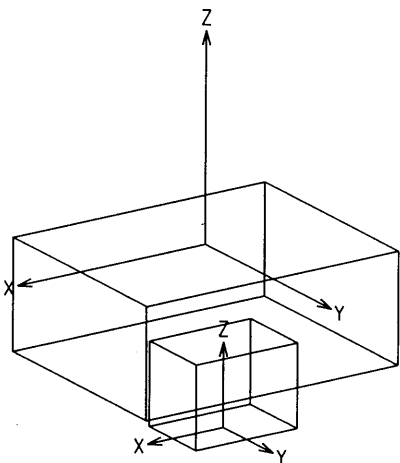
角パイプエルボ要素



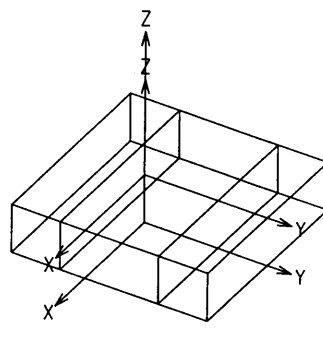
角パイプテーパ要素



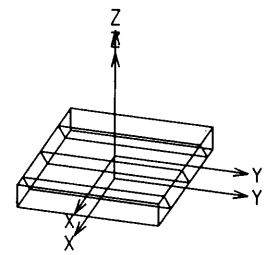
異形角パイプ_1要素



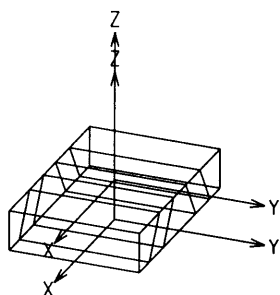
異形角パイプ_2要素



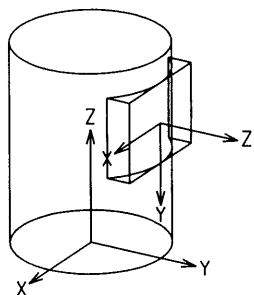
角ゲートバルブ要素



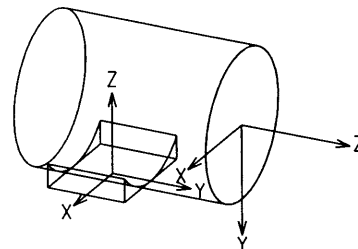
角パイプルーバ_1要素



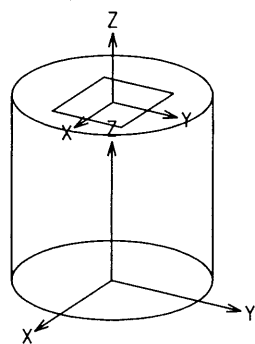
角パイプルーバ_2要素



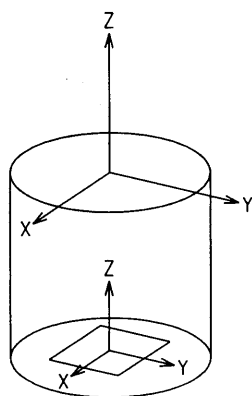
丸パイプ角孔_1要素



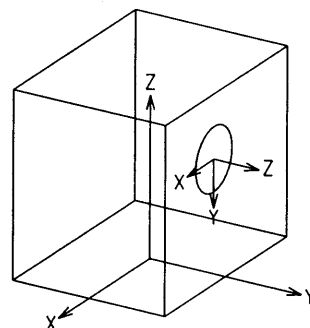
丸パイプ角孔_2要素



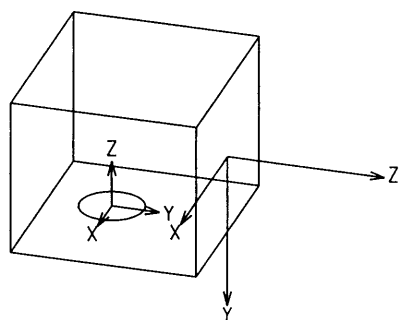
丸パイプ角孔_3要素



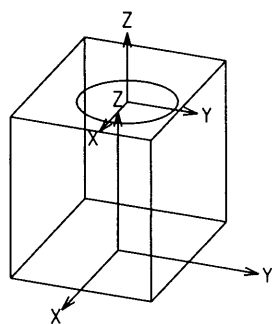
丸パイプ角孔_4要素



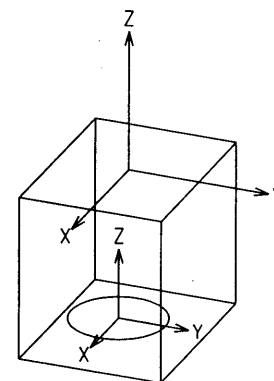
角パイプ丸孔_1要素



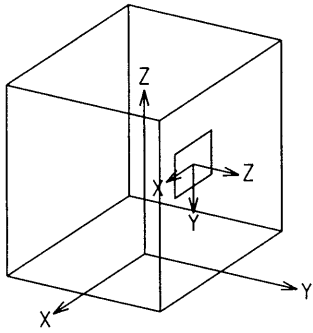
角パイプ丸孔_2要素



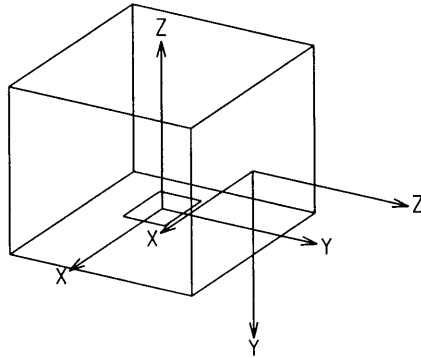
角パイプ丸孔_3要素



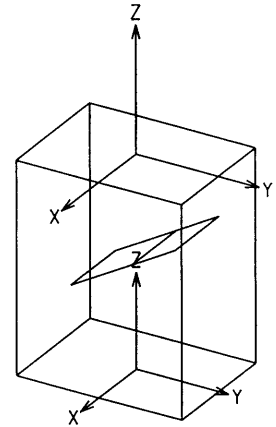
角パイプ丸孔_4要素



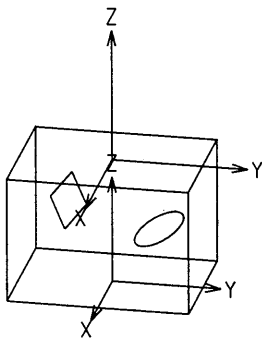
角パイプ角孔_1要素



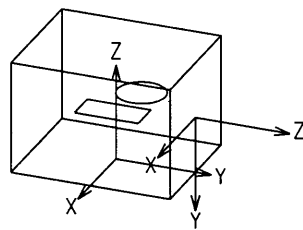
角パイプ角孔_2要素



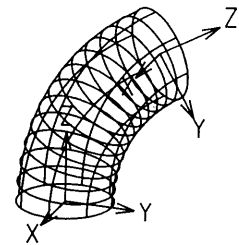
角パイプ角バッフル要素



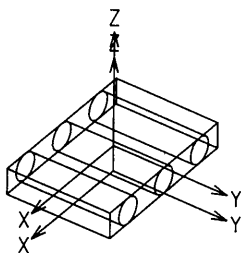
角パイプ+板要素



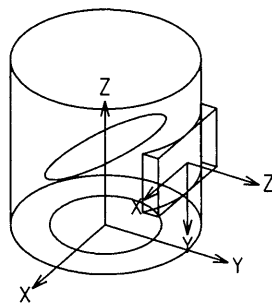
角パイプエルボ+板要素



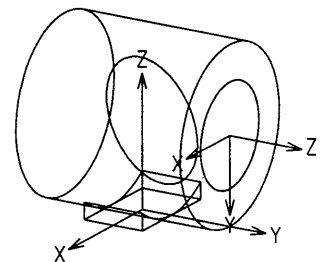
丸パイプバンド要素



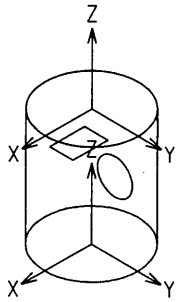
角パイプワイヤメッシュ要素



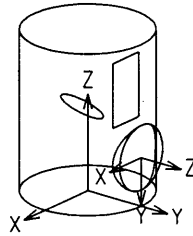
角形開口アングル弁_1要素



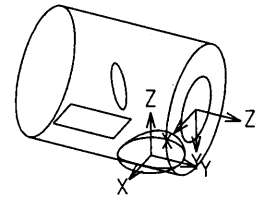
角形開口アングル弁_2要素



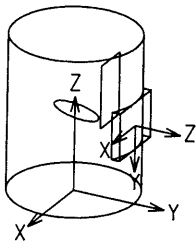
丸パイプ+板要素



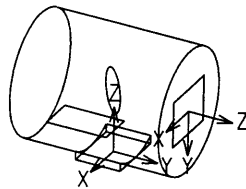
丸パイプ丸孔_1+板素



丸パイプ丸孔_2+板素



丸パイプ角孔_1+板素



丸パイプ角孔_2+板素

株式会社 科学技術ソフトウェア

〒107-0062 東京都港区南青山 2-28-4-301

TEL. 03-3401-6761

FAX. 03-3401-8796