

Monte-Carlo-Simulation der Strömung eines  
KNUDSEN-Gases unter Berücksichtigung  
der Verweilzeit

(Monte Carlo Simulation of the Flow of a  
KNUDSEN Gas with Due Allowance for the  
Sojourn Time)

R. Gorenflo, M.G. Pacco und B.M.U. Scherzer

IPP 2/41

IPP 6/46

November 1965

**I N S T I T U T F Ü R P L A S M A P H Y S I K**

**G A R C H I N G B E I M Ü N C H E N**



# INSTITUT FÜR PLASMAPHYSIK

IPP 2/41  
IPP 6/46

R. Gorenflo,  
M.G. Pacco,  
B.M.U. Scherzer

Monte Carlo Simulation of the  
Flow of a KNUDSEN Gas with Due  
Sojourn Time  
(in German) November 1965

## GARCHING BEI MUNCHEN

Monte-Carlo-Simulation der Strömung eines  
KNUDSEN-Gases unter Berücksichtigung  
der Verweilzeit

(Monte Carlo Simulation of the Flow of a  
KNUDSEN Gas with Due Allowance for the  
Sojourn Time)

R. Gorenflo, M.G. Pacco und B.M.U. Scherzer

IPP 2/41  
IPP 6/46

November 1965

Further simulation is made to investigate the degree of approximation with which the flow may be regarded as a diffusion process, i.e. the approximation with which the flow may be treated with the aid of the diffusion equation and appropriate initial and boundary conditions. It is found that the flow is not a diffusion process. The deviation is caused by 5 to 9% of the particles (those travelling too far).

*Die nachstehende Arbeit wurde im Rahmen des Vertrages zwischen dem Institut für Plasmaphysik GmbH und der Europäischen Atomgemeinschaft über die Zusammenarbeit auf dem Gebiete der Plasmaphysik durchgeführt.*

IPP 2/41  
IPP 6/46

R. Gorenflo,  
M.G. Pacco,  
B.M.U. Scherzer

Monte Carlo Simulation of the  
Flow of a KNUDSEN Gas with Due  
Allowance for the Sojourn Time  
(in German) November 1965

Seite

ABSTRACT: The initial flow of a KNUDSEN gas through a long, thin tube is discussed. The intention is to determine from the measured intensity of the outflow at the end of the tube the distribution density of the sojourn of the gas molecules on the tube wall. For this purpose an integral equation is formed. Because of the complications involved a numerical solution was not contemplated, an attempt being made instead to approximate the known intensity of the outflow by trial substitution of various sojourn distributions. This was abandoned owing to the enormous computing time required.

Further simulation is made to investigate the degree of approximation with which the flow may be regarded as a diffusion process, i.e. the approximation with which the flow may be treated with the aid of the diffusion equation and appropriate initial and boundary conditions. It is found that the flow is not a diffusion process. The deviation is caused by 5 to 9 % of the particles (those travelling too far).

1.	Einleitung	21
2.	Ergebnisse	26
3.	Tests	28
4.1.	Allgemein	28
4.2.	Rechtwinklige Verteilung	28
4.3.	Richtungsverteilung	29
4.4.	Durchflussdichte	34
5.	Literaturverzeichnis	36

I n h a l t

	Seite
1. Das physikalische Problem	2
1.1. Einleitung	2
1.2. Messung der Verweilzeit nach CLAUSING	3
1.3. Andere Theorien der Anlaufströmung	6
1.4. Prüfungen der Gültigkeit der Diffusionsgleichung	7
2. Wahrscheinlichkeitstheoretische Betrachtungen	8
2.1. Unverzögerte Strömung im stationären Zustand	8
2.2. Anlaufvorgang bei unverzögerter Strömung	9
2.3. Anlaufvorgang bei verzögerter Emission	10
2.4. Zusammenhang zwischen Flugzeitverteilung und Stromintensität	12
3. Monte-Carlo-Simulationen	13
3.1. Simulation eines endlichen Rohres	13
3.2. Simulation eines unendlich langen Rohres	21
3.3. Diskussion des Ergebnisses	26
4. Tests	28
4.1. Allgemeines	28
4.2. Geschwindigkeitsverteilung	28
4.3. Richtungsverteilung	29
4.4. Durchflugswahrscheinlichkeit	34
5. Literaturverzeichnis	36



(s.z.B. [3], [5], [11], [15], [16], [17]). Alle diese  
erweitern 1. Das physikalische Problem Strömungsvorgänge,  
d.h. die lokale Gasdichte ist von der Zeit unabhängig.

### 1.1. Einleitung

Die Theorie der Molekularströmung, die von KNUDSEN [12] und  
von M. v. SMOLUCHOWSKI [14] für sehr lange Rohre sowie  
von P. CLAUSING [2] für Rohre beliebiger Länge aufgestellt  
wurde, enthält eine Reihe von Voraussetzungen, die bei [19]  
vielen praktischen Strömungsproblemen nicht erfüllt  
sind. Solche Voraussetzungen sind z.B.:

- 1) Das Gas soll sich außerhalb der Rohrenden im Gleichgewicht befinden, so daß die Moleküle mit isotroper Richtungsverteilung und der Stromdichte

(1.1.1)  $q = \frac{n \bar{v}}{4}$  ist die CLAUSING [18] verwendete,  
schematisch dargestellt: Zwei Behälter  $B_1$  und  $B_2$  sind durch  
eine durch die Rohröffnung eintreten. Dabei ist  $n$  die Dichte  
vor der Rohröffnung und  $\bar{v}$  die mittlere Geschwindigkeit  
der Gasmoleküle.

- 2) Der Dichtegradient im Rohr sei so klein, daß an jeder Stelle des Strömungskanal die Abweichung vom Gleichgewicht klein ist. Dadurch wird gewährleistet, daß überall im Rohr - dessen axiale Koordinate wir mit  $z$  bezeichnen - die Molekülstromdichte auf die Wand

(1.1.2)  $q(z) = \frac{n(z) \bar{v}}{4}$

ist.

- 3) Beim Verlassen der Wand soll die Richtungsverteilung der Moleküle durch das Cosinusetz gegeben sein.

In letzter Zeit ist es immer mehr üblich geworden, Strömungsprobleme, bei denen eine oder mehrere der obigen Forderungen nicht erfüllt sind, durch Monte-Carlo-Simulation zu behandeln

Statt "Verweilzeit" wird in folgenden oft auch "Haltzeit" gesagt.

(s.z.B. [3], [10], [11], [15], [16], [17]). Alle diese Arbeiten behandeln jedoch nur stationäre Strömungsvorgänge, d.h. die lokale Gasdichte ist von der Zeit unabhängig.

Nach einer Methode von P. CLAUSING [18] ist es möglich, Verweilzeiten<sup>+)</sup>  von Gasmolekülen auf Festkörperoberflächen mit Hilfe der Anlaufströmung zu messen. Da direkte Verweilzeitmessungen äußerst schwierig sind, besitzt die Methode von CLAUSING auch heute noch großes Interesse (s.z.B. [19] und [20]). Im vorliegenden Bericht wird gezeigt, wie weit eine Nachprüfung der Theorie der Anlaufströmung, die CLAUSING zur Berechnung der Verweilzeit aufgestellt hat, mit Hilfe der Monte-Carlo-Simulation möglich ist.

Anordnung zur Messung der Anlaufströmung nach

## 1.2. Die Messung der Verweilzeit nach CLAUSING

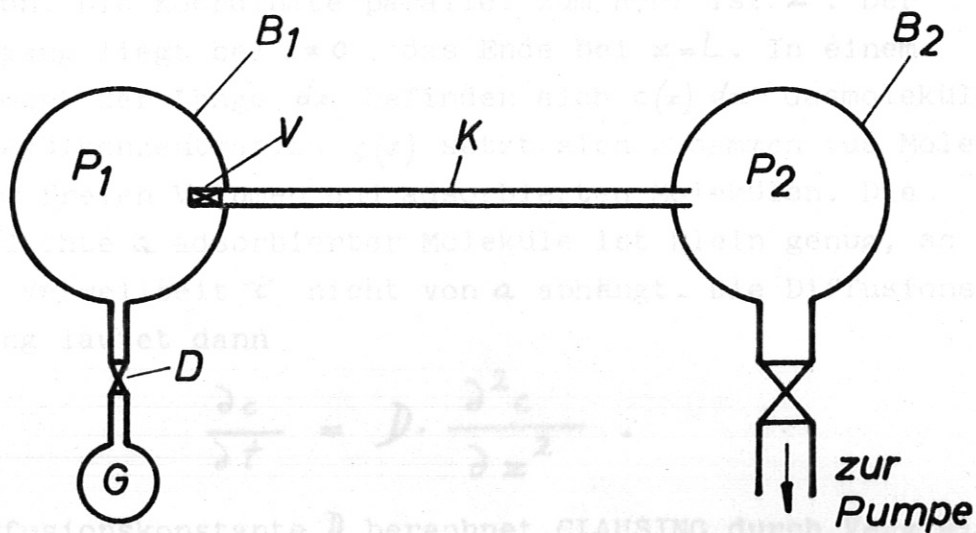
In Figur 1 ist die Anordnung, die CLAUSING [18] verwendete, schematisch dargestellt: Zwei Behälter  $B_1$  und  $B_2$  sind durch eine Kapillare  $K$  der Länge  $L$  miteinander verbunden. Der Einfachheit halber hat die Kapillare kreisförmigen Querschnitt vom Radius  $R$ . Es wird  $R \ll L$  vorausgesetzt. Das Kapillarenende in  $B_1$  ist durch ein schnell öffnendes Ventil  $V$  geschlossen. Rohr und Behälter werden zunächst evakuiert und adsorbiertes Gas von den Wänden entfernt. Dann stellt man bei geschlossenem Ventil  $V$  in  $B_1$  einen Druck  $p_1$  ein, indem man Gas aus dem Vorratsgefäß  $G$  einströmen läßt.  $p_1$  soll viel größer als das Endvakuum sein. Nun wird  $B_2$  von der Pumpe abgesperrt und  $V$  geöffnet. Dabei strömt Gas aus  $B_1$  in das Rohr und in  $B_2$ . Dadurch steigt der Druck  $p_2$  an.  $p_1$  soll konstant gehalten werden, und während der ganzen Messung soll  $p_2 \ll p_1$  gelten. Da die Gasmoleküle wegen ihrer endlichen Flugzeit und der Verweilzeit  $\tau$  eine gewisse Zeit zum Durchlaufen des Rohres brauchen, ändert sich  $p_2$  zuerst langsam und dann immer schneller, bis sich eine konstante Änderungsgeschwindigkeit einstellt (stationärer Zustand). Man vgl. Figur 2.

+) Statt "Verweilzeit" wird im folgenden oft auch "Haftzeit" gesagt.

Schematischer Druckverlauf  $p_2(t)$

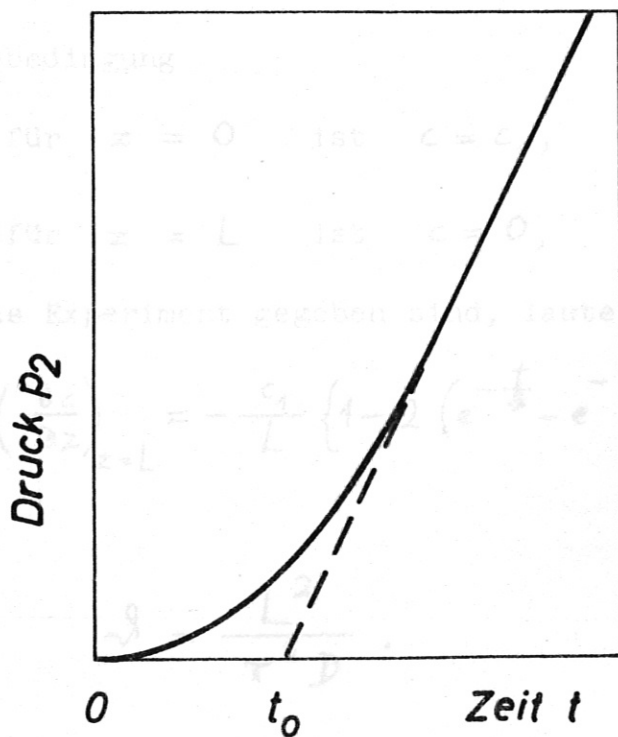


Fig. 1



Anordnung zur Messung der Anlaufströmung nach  
CLAUSING

Fig. 2



Schematischer Druckverlauf  $p_2(t)$

CLAUSING betrachtet die Anlaufströmung als eindimensionale Diffusion. Die Koordinate parallel zum Rohr ist  $z$ . Der Rohreingang liegt bei  $z=0$ , das Ende bei  $z=L$ . In einem Rohrelement der Länge  $dz$  befinden sich  $c(z) dz$  Gasmoleküle. Die Molekülkonzentration  $c(z)$  setzt sich zusammen aus Molekülen im freien Volumen und adsorbierten Molekülen. Die Flächendichte  $a$  adsorbierter Moleküle ist klein genug, so daß die Verweilzeit  $\tau$  nicht von  $a$  abhängt. Die Diffusionsgleichung lautet dann

$$(1.2.1) \quad \frac{\partial c}{\partial t} = D \cdot \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} .$$

Die Diffusionskonstante  $D$  berechnet CLAUSING durch Vergleich mit der stationären Strömungsgleichung nach KNUDSEN [12] zu

$$(1.2.2) \quad D = \frac{4}{3} \frac{R^2}{\frac{2R}{\bar{v}} + \tau} .$$

$\bar{v}$  ist die mittlere Molekulargeschwindigkeit. Die Lösung von (1.2.1) für die Anfangsbedingung

$$(1.2.3) \quad \text{für } t=0 \text{ ist } c=0$$

und die Randbedingung

$$(1.2.4) \quad \text{für } z=0 \text{ ist } c=c_1,$$

$$\text{für } z=L \text{ ist } c=0,$$

die durch das Experiment gegeben sind, lautet (s. CLAUSING)

$$(1.2.5) \quad \left( \frac{\partial c}{\partial z} \right)_{z=L} = -\frac{c_1}{L} \left\{ 1 - 2 \left( e^{-\frac{t}{\tau}} - e^{-\frac{4t}{\tau}} + e^{-\frac{9t}{\tau}} - \dots \right) \right\}$$

mit

$$(1.2.6) \quad \gamma = \frac{L^2}{\tau^2 D} .$$



$c_1$  ist die Konzentration am Rohreingang.

Der Teilchenstrom ist in einem Diffusionsproblem proportional dem Konzentrationsgradienten. Also

$$(1.2.7) \quad J(L, t) = -D \left( \frac{\partial c(z, t)}{\partial z} \right)_{z=L}$$

Und der Druckverlauf in  $B_2$  ist

$$(1.2.8) \quad p_2(t) = \frac{kT}{V} \int_0^t J(L, t) dt.$$

$V$  ist das Volumen von  $B_2$ ,  $k$  der BOLTZMANN-Faktor,  $T$  die absolute Temperatur.

Aus (1.2.5), (1.2.7) und (1.2.8) folgt für großes  $t$

$$(1.2.9) \quad p_2(t) = \frac{kT}{V} \frac{D c_1}{L} (t - t_0)$$

mit die Monte-Carlo-Simulation des Problems erweist sich wegen der Bedingung  $L \gg \lambda$  zu zeitaufwendig.

$$(1.2.10) \quad t_0 = \frac{\pi^2}{6} \mathcal{D}.$$

Somit kann  $\mathcal{D}$  und nach (1.2.6) und (1.2.2) auch  $\tau$  aus dem Schnittpunkt der Asymptoten der Druckfunktion  $p_2(t)$  mit der Zeitachse berechnet werden (Figur 2).

### 1.3. Andere Theorien der Anlaufströmung

Die Berechnung der Verweilzeit nach CLAUSING [18] wurde von BURI [19] kritisiert. Dabei geht es im wesentlichen um die Frage, ob die Konzentration  $c$  überhaupt voll zur Diffusion beiträgt. Nach BURI tun dies nämlich lediglich die Moleküle, die sich im freien Volumen des Rohrs befinden. Die Diffusionsgleichung heißt dann statt (1.2.1)

$$(1.3.1) \quad \frac{\partial n}{\partial t} = D \frac{\partial^2 n}{\partial z^2}.$$

$n$  ist die Teilchendichte im Volumen.

Es ergibt sich dann eine zeitlich veränderliche Diffusionskonstante, und die Auswertung der Meßkurven wird wesentlich komplizierter. BURI's Argumentation ist jedoch nicht überzeugend. Beide Verfahren beruhen ja letzten Endes auf der Annahme, daß die Anlaufströmung ein Diffusionsprozeß ist.

#### 1.4. Prüfungen der Gültigkeit der Diffusionsgleichung

In Abschnitt 2. dieses Berichts wird gezeigt, wie man den Gasstrom  $J(L, t)$  aus statistischen Überlegungen ableiten kann. Vorausgesetzt werden die Gültigkeit des Cosinusetzes und eine exponentiell mit der Zeit abnehmende Verteilung der Verweilzeiten. Eine analytische Lösung der auf diese Weise aufgestellten Gleichung konnte nicht gefunden werden.

Auch die Monte-Carlo-Simulation des Problems erweist sich wegen der Bedingung  $L \gg R$  als zu zeitaufwendig.

Bekanntlich ist jedoch die GAUSS-Verteilung

$$(1.4.1) \quad c(z, t) = \frac{N_0}{2\sqrt{\pi Dt}} \exp\left(-\frac{z^2}{4Dt}\right)$$

die Lösung der Diffusionsgleichung (1.2.1) für die spezielle Anfangsbedingung, daß alle  $N_0$  Moleküle sich zur Zeit  $t=0$  an der Stelle  $z=0$  befinden. In Abschnitt 3 wird die Verteilung der Gasmoleküle in einem Rohr unter Voraussetzung der gleichen Anfangsbedingung durch Monte-Carlo-Simulation gewonnen und mit der GAUSS-Verteilung verglichen.

$$(2.1.1) \quad g(z) = \int_0^L g(\xi) f(|\xi - z|) d\xi + F(z).$$

Die Störfunktion  $F(z)$  berücksichtigt die Teilchen, die aus der Eingangsöffnung kommend direkt die Wand bei  $z$  treffen.

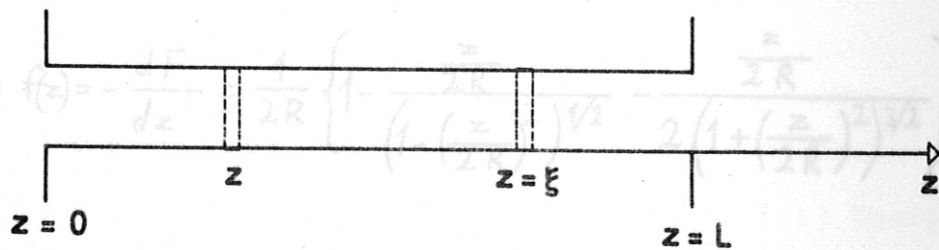


2. Wahrscheinlichkeitstheoretische Betrachtungen

2.1. Unverzögerte Strömung im stationären Zustand

Wir haben ein kreiszylindrisches Rohr mit der Länge  $L$  und dem Radius  $R$ , durch das die Moleküle strömen, und wollen die nur von  $z$  abhängende Auftreffdichte auf die Wand ausrechnen, d.h. die Anzahl der Teilchen pro Zeit und Fläche, die auf die Wand treffen. Wir nehmen außerdem an, daß die Haftzeit an der Wand Null ist. Aus Symmetriegründen können wir das Problem als eindimensional betrachten.

Die Funktion  $f(z)$ , d.h. die Wahrscheinlichkeitsdichte für ein Teilchen, eine Wegkomponente in der  $z$ -Richtung gleich  $z$  zurückzulegen, wird von  $F(z)$  abgeleitet:



2.2. Anlaufvorgang bei unverzögerter Strömung

Die Auftreffdichte  $q(z)$  bestimmt sich aus der Summation der Emissionsdichten  $p(\xi)$  mal der Wahrscheinlichkeit  $f(|\xi - z|) dz$ , daß das Teilchen die Stelle  $\xi$  verläßt und bei  $z$  auftrifft, über den ganzen Zylinder. Dazu muß man noch die Teilchen addieren, die von der Öffnung kommen. Weil die Emissionsdichte  $p$  bei der unverzögerten Strömung gleich der Auftreffdichte  $q$  ist, können wir schreiben:

$$(2.1.1) \quad q(z) = \int_0^L q(\xi) f(|\xi - z|) d\xi + q_0 F(z).$$

Die Störfunktion  $q_0 F(z)$  berücksichtigt die Teilchen, die aus der Eingangsöffnung kommend direkt die Wand bei  $z$  treffen.

$q_0$  ist die Stromdichte in der Öffnung, und  $F(z)$  ist die Wahrscheinlichkeit für ein Teilchen, das die Wand verläßt, eine Wegkomponente in der  $z$ -Richtung größer als  $z$  zurückzulegen. Diese Funktion wurde durch eine geometrische Überlegung von CLAUSING [2] bestimmt und hat folgende Gestalt:

$$(2.1.2) \quad F(z) = \frac{1}{2} \left\{ \left( 1 + 2 \left( \frac{z}{2R} \right)^2 \right) \left( 1 + \left( \frac{z}{2R} \right)^2 \right)^{-\frac{1}{2}} - 2 \frac{z}{2R} \right\}.$$

Daß der Term  $q_0 F(z)$  die Auftreffdichte der von der Öffnung kommenden Moleküle darstellt, sieht man am besten im Gleichgewicht, da dann die Emissionsrate vom Wandelement durch die Öffnung gleich der Auftreffrate auf das Wandelement von der Öffnung her sein muß.

Die Funktion  $f(z)$ , d.h. die Wahrscheinlichkeitsdichte für ein Teilchen, eine Wegkomponente in der  $z$ -Richtung gleich  $z$  zurückzulegen, wird von  $F(z)$  abgeleitet:

$$(2.1.3) \quad f(z) = - \frac{dF}{dz} = \frac{1}{2R} \left\{ 1 - \frac{\frac{z}{2R}}{\left( 1 - \left( \frac{z}{2R} \right)^2 \right)^{1/2}} - \frac{\frac{z}{2R}}{2 \left( 1 + \left( \frac{z}{2R} \right)^2 \right)^{3/2}} \right\}.$$

## 2.2. Anlaufvorgang bei unverzögerter Strömung

Die Auftreffrate hängt jetzt von der Zeit ab.

Die Teilchen, die das Wandelement bei  $z$  zur Zeit  $t$  treffen, müssen die Wand bei  $\xi$  zur Zeit  $t - \frac{|\xi - z|}{v}$  verlassen haben, wenn die Moleküle die Geschwindigkeitskomponente  $v$  in  $z$ -Richtung besitzen.

Die Auftreffdichte  $q(z, t)$  ergibt sich aus der Summation der Emissionsdichte bei  $\xi$  zum Zeitpunkt  $t - \frac{|\xi - z|}{v}$ , also aus  $p(\xi, t - \frac{|\xi - z|}{v})$  mal der Wahrscheinlichkeit  $f(|\xi - z|) d\xi$  mal der Wahrscheinlichkeit  $h(v) dv$  für die Geschwindigkeitskomponente  $v$  in  $z$ -Richtung über alle  $v$  und  $\xi$ . Dazu muß man dann die Zustrahlung aus der Öffnung addieren. Weil bei

unverzögerter Emission:  $p=q$  ist, erhält man

$$q(z, t) =$$

$$(2.2.1) \int_{\xi=0}^L \int_{v=|\xi-z|/t}^{\infty} q(\xi, t - \frac{|\xi-z|}{v}) h(v) dv f(|\xi-z|) d\xi + q_0 F(z) \int_{|z|/t}^{\infty} h(v) dv.$$

Die Flugzeit  $\bar{t}$  der Moleküle muß zwischen 0 und  $t$  variieren:  $0 \leq \bar{t} \leq t$ ; daraus folgen die Integrationsgrenzen für  $v$ .

Für  $t \rightarrow \infty$  müssen wir stationäre Strömung erhalten, d.h. die Gleichung (2.2.1) muß in (2.1.1) übergehen. Wir müssen also voraussetzen, daß

$$(2.2.2) \lim_{t \rightarrow \infty} q(z, t) = q(z).$$

Außerdem ist

$$(2.2.3) \int_0^{\infty} h(v) dv = 1.$$

Damit folgt tatsächlich, daß (2.2.1) in (2.1.1) übergeht.

### 2.3. Anlaufvorgang bei verzögerter Emission

Wenn die Emission verzögert wird, müssen wir die Auftreffdichte  $q(z, t)$  von der Emissionsdichte  $p(z, t)$  unterscheiden. Zwischen beiden besteht die Beziehung

$$(2.3.1) p(z, t) = \int_{t'=0}^t q(z, t') g(t-t') dt',$$

wobei  $g(t-t')$  die Wahrscheinlichkeitsdichte dafür ist, daß das Teilchen die Zeit  $t-t'$  auf der Oberfläche verweilt.

(2.2.1) geht jetzt durch Einführung der Emissionsdichte über in



$$(2.3.2) \left\{ \begin{array}{l} q(z, t) = \\ \int_{z=0}^L \int_{v=|z-z|/t}^{\infty} p(\xi, t - \frac{|z-z|}{v}) h(v) dv f(|z-z|) d\xi + q_0 F(z) \int_{z/t}^{\infty} h(v) dv. \end{array} \right.$$

Durch Einsetzen von (2.3.1) wird hieraus

$$(2.3.3) \left\{ \begin{array}{l} q(z, t) = \int_{z=0}^L \int_{v=|z-z|/t}^{\infty} \int_{t'=0}^{t - \frac{|z-z|}{v}} q(\xi, t') g(t - \frac{|z-z|}{v} - t') dt' h(v) dv. \\ f(|z-z|) d\xi + q_0 F(z) \int_{z/t}^{\infty} h(v) dv. \end{array} \right.$$

Für den Gasstrom  $J(t)$ , der das Rohr auf der Ausgangsseite, also bei  $z=L$  verläßt, d.h. für die in der Zeiteinheit durch den Rohrausgang zur Zeit  $t$  ausströmenden Teilchen, erhalten wir durch Summation der Emissionsdichten über die Wand des Rohrs mal der Wahrscheinlichkeit, daß die Moleküle die Ausgangsöffnung treffen, den Ausdruck

$$(2.3.4) \left\{ \begin{array}{l} J(t) = 2\pi R \int_{\xi=0}^L \int_{v=\frac{L-\xi}{t}}^{\infty} p(\xi, t - \frac{L-\xi}{v}) h(v) dv F(L-\xi) d\xi + \\ q_0 2\pi R \int_{z=L}^{\infty} F(z) dz \int_{v=L/t}^{\infty} h(v) dv. \end{array} \right.$$

Mit (2.3.1) geht (2.3.4) über in

Bei konstantem  $q_0$  gilt also

$$(2.4.2) \quad n(t) = \alpha q_0 \int_0^t h(t') dt' = \alpha q_0 K(t).$$

Hierin ist  $h(t)$  die Verteilungsfunktion der Durchflugszeiten.

$$(2.3.5) \quad \left\{ \begin{aligned} J(t) &= \\ 2\pi R \int_{\xi=0}^L \int_{v=\frac{L-\xi}{t}}^{\infty} \int_{t'=0}^{t-\frac{L-\xi}{v}} q(\xi, t') g\left(t - \frac{L-\xi}{v} - t'\right) dt' \\ &+ q_0 \int_{z=L}^{\infty} F(z) dz \int_{v=L/t}^{\infty} h(v) dv \end{aligned} \right.$$

2.4. Zusammenhang zwischen Flugzeitverteilung und Stromintensität

Es sei  $k(t)$  die Verteilungsdichte der Durchflugzeiten, d.h.  $k(t)dt$  sei die Wahrscheinlichkeit dafür, daß ein das ganze Rohr durchfliegendes Teilchen zum Flug von  $z=0$  bis  $z=L$  eine Zeit zwischen  $t$  und  $t+dt$  benötigt. Ferner sei  $\alpha$  die Wahrscheinlichkeit dafür, daß ein Teilchen, das bei  $z=0$  in das Rohr einfliegt, durch das ganze Rohr durchfliegt, d.h. dieses bei  $z=L$  (und nicht bei  $z=0$ ) verläßt.  $\alpha$  wurde schon von KNUDSEN (s. [2]) berechnet. Die erwartete Stromdichte  $n(t)$  am Rohrausgang ist die mittlere Anzahl der Teilchen pro Zeit und Fläche, die zur Zeit  $t$  bei  $z$  ankommen. Sie ist gleich der Stromdichte an der Öffnung zur Zeit  $t-t'$  mal der Wahrscheinlichkeitsdichte der Durchflugzeit  $t'$  integriert über alle  $t'$  des Intervalls 0 bis  $t$ , mal der Wahrscheinlichkeit  $\alpha$  dafür, daß ein Teilchen überhaupt den Rohrausgang erreicht:

$$(2.4.1) \quad n(t) = \alpha \int_0^t q_0 (t-t') k(t') dt'$$

Bei konstantem  $q_0$  gilt also

$$(2.4.2) \quad n(t) = \alpha q_0 \int_0^t k(t') dt' = \alpha q_0 K(t).$$

Hierin ist  $k(t)$  die Verteilungsfunktion der Durchflugszeiten.

### 3. Monte-Carlo-Simulation

#### 3.1. Simulation eines endlichen Rohrs

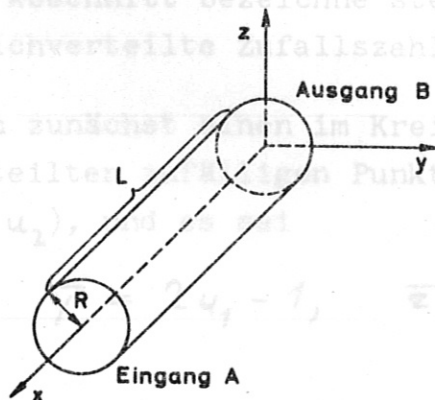
##### 3.1.1. Zweck der Simulation

Das Problem war (siehe 1.) aus der Intensität der Strömung am Rohrende die Verteilung der Wand-Haftzeit zu ermitteln. Hierzu wäre das Integralgleichungssystem  $\{(2.3.3), (2.3.5)\}$  nach  $q$  und  $g$  aufzulösen. Da uns dies aber sowohl analytisch als auch numerisch schwierig erschien, beschlossen wir, den physikalischen Vorgang auf einem elektronischen Digitalrechner (IBM 7090) zu simulieren, und zwar genau entsprechend unserer Modellvorstellung. Durch Vorgabe verschiedener denkbarer Wand-Haftzeit-Verteilungen wollten wir die entsprechenden Flugzeit-Verteilungen und aus diesen nach (2.4.2) Ausströmungsintensitäten  $n(t)$  für den Rohrausgang ermitteln. Diejenige Haftzeit-Verteilung, die für  $n(t)$  die beste Approximation an die experimentell gemessene Ausströmungsintensität ergeben hätte, wollten wir als Näherungslösung akzeptieren.

Eine andere Möglichkeit wäre, direkt in die Integralgleichung probeweise verschiedene Haftzeitverteilungen einzusetzen und durch numerische Integration  $n(t)$  auszurechnen. Diese Methode schlagen wir für zukünftige Untersuchungen vor. Wir verdanken diese Anregung einer Diskussion in einem Seminar über Monte-Carlo-Methoden an der Technischen Hochschule München.

##### 3.1.2. Vorgang

Wir nehmen ein kreiszylindrisches Rohr von der Länge  $L$  und dem Radius  $R$ , dessen Achse die  $x$ -Achse eines orthogonalen Koordinatensystems ist. Die Teilchen fliegen von  $A$  los und erreichen nach ihrem Flug den Rohrausgang  $B$  oder fliegen durch  $A$  zurück.



+) Es ist  $n(t) = J(t) / (\pi R^2)$ .

+) Man vgl. hierzu [1] und [3].



Wir wollen zählen, wieviele Teilchen zu einer bestimmten Zeit  $B$  erreicht haben, und daraus die Verteilung der Flugzeiten bestimmen. Dazu verfolgen wir individuell den Flug jedes einzelnen Teilchens, was zulässig ist, weil die Teilchen keine Wechselwirkung miteinander haben.

Wir nehmen an, die Teilchen seien am Eingang gleich verteilt. Im Kreis  $x=L, y^2 + z^2 \leq R^2$  würfeln wir deswegen einen gleichverteilten Punkt. Danach wird eine Richtung erzeugt, die dem Cosinusetz entspricht, und eine Geschwindigkeit, deren Verteilung die thermische Geschwindigkeitsverteilung ist. Damit macht das Molekül seinen ersten Schritt. Wenn es schon durchfliegt, ist seine Geschichte zu Ende. Die zum Durchflug benötigte Zeit wird berechnet und gespeichert. Andernfalls bestimmen wir die Koordinaten des Auftreffpunktes an der Wand, würfeln eine Haftzeit nach einer vorgegebenen Verteilung und dann eine neue Richtung und einen neuen Wert der Geschwindigkeit. Bei jedem Schritt wird die benötigte Zeit berechnet und abgefragt, ob das Teilchen eine der beiden Öffnungen erreicht hat. Die gesamte für den Flug gebrauchte Zeit wird gespeichert, wenn das Teilchen durchgeflogen ist.

Als Verteilung der Haftzeit werden wir hauptsächlich folgende Funktionen annehmen: 1) konstante Haftzeit  $t = \tau$ , 2) exponential verteilte Haftzeit mit Dichte  $g(t) = \frac{1}{\tau} \exp(-t/\tau)$ , wobei  $\tau$  die mittlere Haftzeit ist.

### 3.1.3. Erzeugung der Ausgangswerte +)

In diesem Abschnitt bezeichne stets  $u_i$  eine im Intervall  $(0, 1)$  gleichverteilte Zufallszahl.

Wir wollen zunächst einen im Kreis  $y^2 + z^2 \leq R^2, x=L$  gleichverteilten zufälligen Punkt finden. Man erzeuge das Paar  $(u_1, u_2)$ , und es sei

$$(3.1.1) \quad \bar{y} = 2u_1 - 1, \quad \bar{z} = 2u_2 - 1.$$

+ ) Man vgl. hierzu [1] und [3].

Wenn

$$(3.1.2) \quad \bar{y}^2 + \bar{z}^2 \leq 1,$$

so hat der Punkt folgende Koordinaten:

$$(3.1.3) \quad x = L, \quad y = \bar{y} R, \quad z = \bar{z} R.$$

Sonst verwerfen wir das Paar und würfeln ein neues, bis die Bedingung (3.1.2) erfüllt ist.

Die Richtungsverteilung gemäß dem Cosinusetz wird auf folgende Weise erzeugt. Es sei die  $z$ -Achse die Normale zur Fläche, aus der das Teilchen emittiert wird. Dann lauten die Richtungs-cosinusse so:

$$(3.1.4) \quad \mu_1 = \cos \varphi \sin \vartheta, \quad \mu_2 = \sin \varphi \sin \vartheta, \quad \mu_3 = \cos \vartheta.$$

Hierbei ist  $\varphi$  gleichverteilt, und

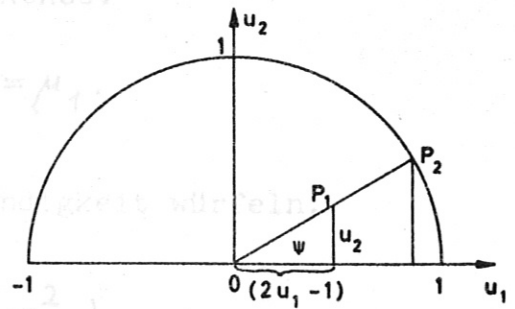
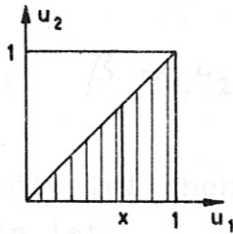
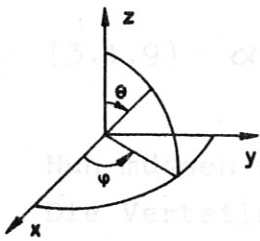
$$(3.1.5) \quad f(w) = 2w \quad \text{in } 0 \leq w \leq 1, \quad f(w) = 0 \quad \text{sonst}$$

ist die Verteilungsdichte von  $w = \cos \vartheta$ .

Durch folgendes Verfahren erzeugt man Zufallszahlen mit der Verteilungsdichte (3.1.5). Das Paar  $(u_1, u_2)$  wird gewürfelt. Wenn  $u_1 \geq u_2$ , so ist  $\cos \vartheta = u_1$ . Sonst würfelt man ein anderes Paar. Daß  $u_1$  die Verteilungsdichte (3.1.5) besitzt, sieht man geometrisch ein:

$$(3.1.6) \quad P(u_1 \leq x | u_1 \geq u_2) = \frac{P(u_2 \leq u_1 \leq x)}{P(u_1 \geq u_2)} \\ = 2 P(u_2 \leq u_1 \leq x) = 2 \cdot \frac{x^2}{2} = x^2.$$

Folgende Formeln entsprechen einer durchgeführten Transformation der  $x$ -Achse in die negative  $x$ -Achse.



Eine andere Siebmethode liefert uns Sinus und Cosinus eines gleichverteilten Winkels, d.h. einen auf der Kreislinie  $x^2 + y^2 = 1$  gleichverteilten Punkt. Man würfelt so oft Paare  $(u_1, u_2)$ , bis die Bedingung  $(2u_1 - 1)^2 + u_2^2 \leq 1$  erfüllt ist. Der mit dem letzten Paar gebildete Punkt mit den Koordinaten

$$\xi = 2u_1 - 1, \quad \eta = u_2$$

ist gleichverteilt in  $x^2 + y^2 \leq 1, y \geq 0$ . Projektion von  $x=y=0$  aus auf die Kreislinie  $x^2 + y^2 = 1$  ergibt

$$(3.1.7) \quad \cos \psi = \frac{2u_1 - 1}{\sqrt{(2u_1 - 1)^2 + u_2^2}}, \quad \sin \psi = \frac{u_2}{\sqrt{(2u_1 - 1)^2 + u_2^2}}$$

$\psi = \varphi/2$  ist gleichverteilt in  $0 \leq \psi \leq \pi$ , also sind  $\cos \psi = \cos^2 \varphi - \sin^2 \varphi$  und  $\sin \psi = 2 \cos \varphi \sin \varphi$  Cosinus und Sinus eines in  $0 \leq \varphi \leq 2\pi$  gleichverteilten Winkels  $\varphi$ . Man erhält

$$(3.1.8) \quad \cos \varphi = \frac{(2u_1 - 1)^2 - u_2^2}{(2u_1 - 1)^2 + u_2^2}, \quad \sin \varphi = \frac{2(2u_1 - 1)u_2}{(2u_1 - 1)^2 + u_2^2}$$

Der Vorteil dieser Methode besteht darin, daß man sich die Berechnung der Funktionen  $\cos$  und  $\sin$  erspart. Man könnte natürlich sofort gleichverteilte Zufallszahlen im ganzen Kreis erzeugen  $(2u_1 - 1, 2u_2 - 1, (2u_1 - 1)^2 + (2u_2 - 1)^2 \leq 1)$ , müßte dann aber zur Bestimmung von  $\sin$  und  $\cos$  eine Quadratwurzel berechnen. Die Formeln (3.1.8) hingegen sind rational.

Die Gleichungen (3.1.4) liefern nun eine Richtungsverteilung, die dem Cosinusetz in Bezug auf die  $z$ -Achse entspricht.

\*) man vgl. hierzu [3].



Folgende Formeln entsprechen einer durchgeführten Transformation der  $z$ -Achse in die negative  $x$ -Achse.

$$(3.1.9) \quad \alpha = -\mu_3, \quad \beta = \mu_2, \quad \gamma = \mu_1.$$

Nun müssen wir noch die Teilchengeschwindigkeit würfeln. Die Verteilungsdichte ist

$$h(v) = 2 \left( \frac{m}{2kT} \right)^2 v^3 \exp\left(-\frac{mv^2}{2kT}\right).$$

Wir müssen deswegen die Gleichung

$$(3.1.10) \quad u = 1 - \left( \frac{m}{2kT} v^2 + 1 \right) \exp\left(-\frac{mv^2}{2kT}\right)$$

nach  $v$  auflösen.  $u$  stellt, wie immer, eine in  $(0, 1)$  gleichverteilte Zufallszahl dar.

Die Gleichung wurde iterativ mittels der "regula falsi" aufgelöst. Zwecks Verbesserung der Approximation und Verkürzung der Rechenzeit wurden die Werte  $v$  für  $u = 0,1, 0,2, \dots, 0,9$  doppelt genau berechnet, gespeichert und jeweils ein passender von ihnen als Anfangswert benutzt. Das Verfahren konvergiert ziemlich schnell. Bei der Genauigkeit  $10^7$  genügten sehr oft weniger als 10 Iterationen. Nur bei sehr großen oder sehr kleinen Werten von  $u$  wurde die Konvergenz wesentlich langsamer (bis zu 230 Iterationen). In 10 sec Rechenzeit wurde die Gleichung für 1000 Werte  $u$  aufgelöst.

#### 3.1.4 Koordinaten des Auftreffpunktes <sup>+)</sup>

Die Zylindergleichung lautet  $y^2 + z^2 = R^2$ . Eine Gerade durch  $P_0 = (x_0, y_0, z_0)$  mit Richtung  $(\alpha, \beta, \gamma)$  ist

$$(3.1.11) \quad \frac{x-x_0}{\alpha} = \frac{y-y_0}{\beta} = \frac{z-z_0}{\gamma},$$

wobei  $\alpha$  das erste Mal im Intervall  $(-1, 0)$  liegt. Darum ist der Abstand

+) Man vgl. hierzu [3].

$$(3.1.12) \quad S = -\frac{Q}{P} + \left\{ \left( \frac{Q}{P} \right)^2 - \frac{T}{P} \right\}^2$$

mit

$$P = \beta^2 + \gamma^2, \quad Q = \beta y_0 + \gamma z_0, \quad T = y_0^2 + z_0^2 - R^2,$$

und die Koordinaten des ersten Auftreffpunktes sind

$$(3.1.13) \quad x_1 = x_0 + \alpha S, \quad y_1 = y_0 + \beta S, \quad z_1 = z_0 + \gamma S.$$

Mit Hilfe der schon gewürfelten Geschwindigkeit rechnen wir die zu diesem Schritt benötigte Flugzeit aus.

Sollte der Punkt  $P_1$  außerhalb des Zylinders liegen, so wird nur die bis zum Rohrausgang gebrauchte Zeit ermittelt, und die Geschichte des betreffenden Teilchens ist zu Ende. Sonst würfeln wir eine Wandhaftzeit, die zur schon berechneten Flugzeit addiert wird.

Dann bestimmen wir eine andere Richtung, die dem Cosinusetz in Bezug auf die innere Normale zur Wand entspricht. Ihre Komponenten lauten

$$(3.1.14) \quad \alpha = -\mu_2, \quad \beta = (-z_1 \mu_1 - y_1 \mu_3) / R, \quad \gamma = (y_1 \mu_1 - z_1 \mu_3) / R,$$

wobei  $\mu_1, \mu_2, \mu_3$  durch (3.1.4) definiert sind.

Die Koordinaten des neuen Auftreffpunktes sind

$$(3.1.15) \quad x_2 = x_1 + \alpha S, \quad y_2 = y_1 + \beta S, \quad z_2 = z_1 + \gamma S$$

mit  $S = -2Q/P$ .

Das Teilchen setzt seinen Irrflug fort, bis es zu einem Rohrausgang gelangt. Die gesamte Flugzeit wird bestimmt und gespeichert.

Mit Hilfe dieses Satzes können wir ausrechnen, wieviele Versuche durchzuführen sind, um mit einer vorgegebenen Sicherheit einen vorgegebenen Fehler nicht zu überschreiten.

### 3.1.5 Verteilungsfunktion der Flugzeit

Wenn wir den beschriebenen Prozeß für eine große Anzahl von Teilchen wiederholen, können wir numerisch die Verteilungsfunktion der Flugzeit ausrechnen. Es erhebt sich jetzt die Frage, wie gut diese Annäherung ist, oder, wieviele Teilchen aus dem Rohrende kommen müssen, um die wahre Verteilungsfunktion mit einer vorgegebenen Genauigkeit anzunähern. Ein Satz von KOLMOGOROFF gibt uns einen Maßstab, dies mit einer vorgegebenen Sicherheit zu entscheiden.

Der Satz lautet so (s. [7], Seite 406):

"Es seien  $t_1, t_2, \dots, t_n$  die durch Beobachtungen erhaltenen Werte einer Zufallsvariablen, und es seien  $t_1^*, t_2^*, \dots, t_n^*$  dieselben Werte, aber nach wachsender Größe geordnet. Zu diesen Werten gehört die empirische Verteilungsfunktion

$$(3.1.16) \quad F_n(x) = \begin{cases} 0 & \text{für } x \leq t_1^* \\ \frac{k}{n} & \text{für } t_k^* < x \leq t_{k+1}^*, \quad k=1, 2, \dots, n-1 \\ 1 & \text{für } t_n^* < x \end{cases}$$

Wenn die wahre Verteilungsfunktion  $F(x)$  stetig ist, so gilt die Beziehung

$$(3.1.17) \quad \lim_{n \rightarrow +\infty} P \left\{ \sqrt{n} \sup_{-\infty < x < +\infty} |F_n(x) - F(x)| < y \right\} = \begin{cases} K(y) & \text{für } y > 0 \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

wobei

$$K(y) = \sum_{k=-\infty}^{+\infty} (-1)^k e^{-2k^2 y^2}$$

ist."

Die Funktion  $K(y)$  findet man tabelliert: s.z.B. [7], Seite 516. Mit Hilfe dieses Satzes können wir ausrechnen, wieviele Versuche durchzuführen sind, um mit einer vorgegebenen Sicherheit einen vorgegebenen Fehler nicht zu überschreiten.



Ein analoger Satz gilt für den relativen Fehler.

Einige Werte findet man in der Tabelle 3.1.

Tabelle 3.1.

Sicherheit	Maximaler Fehler	Anzahl der Versuche
0.95	0.005	$\geq 73\ 984$
	0.01	$\geq 18\ 496$
	0.05	$\geq 740$
0.99	0.005	$\geq 106\ 276$
	0.01	$\geq 26\ 569$
	0.05	$\geq 1\ 063$

3.1.6 Wahrscheinlichkeit des Durchflugs und Durchführung der Simulation

In [2] hat CLAUSING die Wahrscheinlichkeit  $p$  dafür ausgerechnet, daß ein Teilchen ans Rohrende gelangt. Für ein kreiszylindrisches Rohr gilt näherungsweise

$$(3.1.18) \quad p \approx \frac{8}{3} \frac{R}{L}.$$

Hierbei ist mit  $R$  der Radius und mit  $L$  die Länge des Rohrs bezeichnet. Für  $R \ll L$ , d.h. bei sehr dünnem Rohr, wird  $p$  sehr klein. In diesem Fall ist die Monte-Carlo-Methode praktisch undurchführbar.

Um  $n$  Teilchen zum Rohrende zu schicken, müssen wir nämlich im Mittel  $n/p$  Teilchen erzeugen. Bei einem dünnen Rohr kommt noch dazu, daß die einzelnen Schritte eines Teilchens sehr klein sind und darum die Anzahl der Stöße an die Wand sehr groß ist. Experimentell haben wir festgestellt, daß der Mittelwert des Wegs zwischen zwei Stößen ungefähr  $2R$  ist. Dazu kommt noch die für diffusions- und irrflugartige Vorgänge charakteristische Eigenschaft, daß im allgemeinen ein Teilchen

nur sehr langsam sich von seinem Platz entfernt, da es dauernd ziellos hin und her wandert.

Wir wollten ein Rohr mit  $R/L = 1/2000$  simulieren, und  $n = 10000$  Teilchen zum Rohrausgang schicken, um mit einer Sicherheit von 95 % einen Fehler kleiner als 0.0136 zu begehen. Wir hätten also im Mittel  $\frac{3}{8} \cdot 2000 \cdot 10000$  Teilchen erzeugen und für jedes Teilchen eine ungeheuer große Anzahl von Schritten würfeln müssen. Der hierzu erforderliche Rechenaufwand erwies sich als nicht vertretbar, und wir gaben diese direkte Simulation auf.

### 3.2. Simulation eines unendlich langen Rohrs

#### 3.2.1 Zweck der Simulation

Wir wollen untersuchen, ob sich das Problem durch die Diffusionsgleichung behandeln läßt, d.h. ob schon nach kurzer Zeit eine Normalverteilung der von einer Stelle aus losfliegenden Teilchen zustande kommt, und ob diese sich einstellt innerhalb von Werten der Zeit und der Länge, die klein sind gegen die Länge  $L$  des gegebenen endlichen Rohres und die im Mittel zum Durchfliegen des endlichen Rohres benötigte Zeit. Der zentrale Grenzwertsatz legt die Vermutung nahe, daß sich die Moleküle in Bezug auf den zurückgelegten Weg nach wenigen Stößen an die Wand normal verteilen. Betrachten wir aber die Sache näher, so sehen wir, daß die Voraussetzungen des zentralen Grenzwertsatzes nicht erfüllt sind. Es gibt nämlich immer Teilchen, die im Vergleich zu den meisten anderen Teilchen zu selten an die Wand stoßen und deshalb diesen Voraussetzungen nicht genügen.

#### 3.2.2 Vorgang

Jetzt nehmen wir ein unendlich langes kreiszylindrisches Rohr  $-\infty < x < +\infty$ ,  $y^2 + z^2 \leq R^2$ , dessen Achse die x-Achse ist, und lassen ein Teilchen bei der Abszisse  $x=0$  losfliegen. Der Irrflug des Moleküls läuft so ab, wie wir in 3.1.2 schon beschrieben haben, es wird allerdings nach einer gewissen

Zeit abgestoppt. Die vom Teilchen erreichte Abszisse wird ausgerechnet und gespeichert. Diesen Prozeß wiederholen wir für eine große Anzahl von Molekülen, so daß wir die empirische Verteilungsfunktion der Abszissen bestimmen können.

Dann wollen wir durch den KOLMOGOROFFSchen Satz die Null-Hypothese untersuchen, daß diese Verteilungsfunktion eine Normalverteilung ist. Der KOLMOGOROFFSche Test ist in 4.2 beschrieben. Um ihn durchführen zu können, müssen wir aber die Parameter der Normalverteilung kennen. Der Mittelwert ist offenbar  $\mu = 0$ , weil der Irrflug symmetrisch ist, die Schwierigkeit entsteht aber bei der Bestimmung der Varianz  $\sigma^2$ . Sie ist besonders wichtig, weil sie uns Aufschluß über die Länge gibt, innerhalb der die Normalverteilung zustande kommt, und weil wir durch sie die Diffusionskonstante  $D$  (falls es sich um einen Diffusionsprozeß handelt) bestimmen können.

Es ist

$$(3.2.1) \quad D = \frac{\sigma^2}{2t},$$

wenn mit  $t$  die seit dem Abflug des Teilchens verstrichene Zeit bezeichnet wird.

### 3.2.3 Bestimmung der Varianz der Abszissenverteilung

Aus den beobachteten Werten können wir mit einer gewissen Sicherheit ein Vertrauensintervall für die "standard deviation"  $\sigma$  berechnen. Nimmt man für  $\sigma$  die übliche konsistente Schätzung

$$s = \left\{ \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n (x_j - \mu)^2 \right\}^{1/2}$$

so gilt folgender Satz (s. [5], Seite 344):

Unter der Annahme, daß die a-priorische Verteilungsdichte  $\varphi(s)$  eine beschränkte erste Ableitung besitzt und  $\varphi(s) \neq 0$  ist, können wir unter Vernachlässigung von Größen der Ordnung  $1/\sqrt{n}$  behaupten, daß bei gefundenen Meßwerten  $x_1, x_2, \dots, x_n$



und gegebenem Mittelwert  $\mu$  mit der Wahrscheinlichkeit. Ver-

(3.2.1)  $\frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^z e^{-t^2} dt$

die Ungleichung

(3.2.2)  $s \cdot \left(1 - \frac{z}{\sqrt{n}}\right) < \sigma < s \cdot \left(1 + \frac{z}{\sqrt{n}}\right)$

gilt.

Beim KOLMOGOROFFSchen Test ist die Größe

$\theta = \sqrt{n} \sup_{-\infty < x < +\infty} |F_n(x) - F(x)|$

entscheidend. Wir bestimmen durch den zitierten Satz das Vertrauensintervall für  $\sigma$ , das der Sicherheit 99 % entspricht. Innerhalb dieses Intervalls wollen wir dann den Wert  $\sigma_m^*$  heraussuchen, für den die Größe  $\theta$  minimal wird. Außerdem suchen wir in  $\sigma \geq 0$ , nicht beschränkt auf das Vertrauensintervall, den Wert  $\sigma_m$ , dem das kleinste  $\theta$  überhaupt entspricht. Wir möchten, daß diese zwei Werte übereinstimmen oder wenigstens nicht weit voneinander entfernt liegen.

Wie sich bei unseren Rechnungen herausstellte, liegt aber  $\sigma_m$  links außerhalb des Vertrauensintervalls.

Diese Feststellung führte zu folgenden Überlegungen. Da die Varianz quadratisch von den Abszissen abhängt, tragen die sehr weit fliegenden Teilchen besonders stark zu ihrer Größe bei. Bei der Auswertung der empirischen Verteilungsfunktion haben hingegen alle Moleküle den gleichen Einfluß. Um die Abweichung von einer Normalverteilung festzustellen, kann man so vorgehen: Man läßt schrittweise einen immer größeren Prozentsatz der Teilchen, die "Ausreißer", weg und wendet auf den Rest der Teilchen den KOLMOGOROFFSchen Test an. Durch dieses Vorgehen nähern sich die Werte  $\sigma_m$  und  $\sigma_m^*$  einander, bis beide

$n = 10\ 000 - n_1, D_{max} = \sup |F_n(x) - F(x)|$

Mit  $I$  (99 %) ist das 99 %-Vertrauensintervall

im Vertrauensintervall liegen und einander gleich sind. Vernachlässigt man nun noch mehr Teilchen, so entfernen sich die beiden Werte wieder voneinander; jetzt liegt aber der Wert  $\sigma_m$ , dem das minimale  $\Theta$  entspricht, rechts außerhalb des Vertrauensintervalls. Im ersten Fall sind die Schwänze der empirischen Verteilung zu lang, im zweiten werden sie zu stark abgeschnitten.

Man betrachte jetzt den kleinsten und den größten Wert  $\sigma_m$  der Standardabweichung, die noch im Vertrauensintervall liegen. Das sind die Grenzen des Intervalls  $I_\sigma$ , das wir nun wohl mit guter Sicherheit als ein Intervall ansehen können, in dem der wahre Wert  $\sigma$  liegt. Wenn der KOLMOGOROFFSche Test in diesem Intervall gute Ergebnisse liefert, sagen wir folgendes aus:

Unter Vernachlässigung eines gewissen Prozentsatzes von Teilchen (nämlich derjenigen Teilchen, die zu weit fliegen) ist die Verteilung normal und die Standardabweichung  $\sigma$  liegt im Intervall  $I_\sigma$ .

Wir erhalten so auch ein Maß für die Genauigkeit unserer Rechnungen.

### 3.2.4 Numerische Ergebnisse

Die Resultate dreier Simulationen sind in Tab. 3.2 - 3.4 dargestellt. Wir simulierten jeweils  $10^4$  Teilchen und stoppten den Flug jedes Teilchens zur Zeit  $t_{\text{end}}$ , die im 1. Fall  $0.3 \cdot 10^{-4}$  sec, im 2. Fall  $0.6 \cdot 10^{-4}$  sec, im 3. Fall  $1.2 \cdot 10^{-4}$  sec betrug. Dies entspricht im Mittel ungefähr 25, 50 oder 100 Stößen an die Wand. Die Wandhaftzeit wurde als exponentialverteilt mit Mittelwert  $\tau = 10^{-6}$  sec angenommen. Es wurde der SHARE-Zufallsgenerator RDM (beschrieben in [8]) verwendet. Im Kopf der Tabelle 3.2 bedeutet  $w$  die Anzahl der weggelassenen Teilchen, mit  $\bar{u}$  ist jeweils die Überschreitungswahrscheinlichkeit bezeichnet. Es ist

$$n = 10000 - w, \quad D_{\max} = \sup_{-\infty < x < +\infty} |F_n(x) - F(x)|, \quad \Theta = \sqrt{n} D_{\max}.$$

Mit  $I$  (99 %) ist das 99 %-Vertrauensintervall für  $\sigma$  bezeichnet.

$w$ wt. %	$s$	$D_{max}$	$\theta$ $\ddot{u}$	$I(99\%)$	$\sigma_m^*$	$D_{max}$ $\theta$ $\ddot{u}$	$\sigma_m$	$D_{max}$ $\theta$ $\ddot{u}$
0	0.1092	0.05143	5.143 0%	(0.1072; 0.1112)	0.1072	0.04769 4.769 0%	0.0930	0.02073 2.073 0%
200 2%	0.09323	0.02466	2.441 0%	(0.09151, 0.09495)	0.09151	0.02093 2.071 0%	0.0853	0.01823 1.805 0.3%
400 4%	0.08647	0.01475	1.445 3%	(0.08486, 0.08809)	0.08486	0.01157 1.178 12%	0.08454	0.01171 1.147 14%
500 5%	0.08379	0.01197	1.167 13%	(0.08222, 0.08537)	<u>0.08253</u>		<u>0.08253</u>	<u>0.01069</u> 1.042 23%
600 6%	0.08135	0.01048	1.016 25%	(0.07982, 0.08289)	<u>0.08074</u>		<u>0.08074</u>	0.009825 0.9526 33%
800 8%	0.07704	0.01152	1.104 18%	(0.07557, 0.07851)	<u>0.07822</u>		<u>0.07822</u>	0.009376 0.8993 39%
1000 10%	0.07333	0.01441	1.367 5%	(0.07192, 0.07475)	<u>0.07446</u>		<u>0.07446</u>	0.01182 1.122 16%
1200 12%	0.07002	0.01816	1.704 0.6%	(0.06865, 0.07138)	<u>0.07111</u>		<u>0.07111</u>	0.01446 1.356 5%
1400 14%	0.06703	0.02175	2.017 0%	(0.06570, 0.06835)	<u>0.06808</u>		<u>0.06808</u>	0.01798 1.667 0.8%
1600 16%	0.06429	0.02484	2.276 0%	(0.06301, 0.06557)	<u>0.06532</u>		<u>0.06532</u>	0.02136 1.958 0.1%
1800 18%	0.06176	0.02797	2.532 0%	(0.06051, 0.06301)	0.06301	0.02371 2.147 0	0.06326	0.02301 2.083 0%

Tabelle 3.2,  $t_{end} = 0.3 \cdot 10^{-4}$  sec



$w_1$ $w_1$ in %	$s$	$D_{max}$	$\theta$ $\bar{u}$	$I(99\%)$	$\sigma_m^*$	$D_{max}$ $\bar{u}$	$\sigma_m$	$D_{max}$ $\bar{u}$
0 0 %	0.1665	0.04867	4.867 0 %	(0.1635; 0.1696)	0.1635	0.045 4.5 0 %	0.1400	0.02008 2.008 0 %
100 1 %	0.1510	0.03225	3.209 0 %	(0.1482; 0.1538)	0.1482	0.0289 2.873 0 %	0.1400	0.01876 1.867 0 %
200 2 %	0.1434	0.02526	2.501 0 %	(0.1407; 0.1460)	0.1407	0.02186 2.168 0 %	0.1350	0.01665 1.649 0.85 %
300 3 %	0.1379	0.02053	2.022 0 %	(0.1354; 0.1405)	0.1354	0.01657 1.680 0.7 %	0.1350	0.01655 1.630 1 %
400 4 %	0.1334	0.01670	1.637 0.9 %	(0.1309; 0.1359)	0.1309	0.01314 1.287 7.4 %	0.1304	0.01242 1.217 10.2 %
500 5 %	0.1294	0.01331	1.297 6.8 %	(0.1270; 0.1319)	0.1275		0.1275	0.01109 1.081 20 %
800 8 %	0.1193	0.01075	1.031 6.8 %	(0.1170; 0.1216)	0.1202		0.1202	0.009785 0.9386 34 %
1000 10 %	0.1136	0.01321	1.254 8.8 %	(0.1114; 0.1157)	0.1144		0.1144	0.01146 1.087 18.6 %
1200 12 %	0.1084	0.01790	1.679 0.7 %	(0.1063; 0.1105)	0.1101		0.1101	0.01431 1.342 5.5 %
2000 20 %	0.09147	0.03101	2.773 0 %	(0.08959; 0.09334)	0.09334	0.02612 2.336 0 %	0.09446	0.02330 2.084 0 %

Tabelle 3.3,  $t_{end} = 0.6 \cdot 10^{-4}$  sec

$w, w_{in} \%$	$s$	$D_{max}$	$\Theta \ddot{u}$	$I(99\%)$	$\omega_m^*$	$D_{max} \Theta \ddot{u}$	$\sigma_m$	$D_{max} \Theta \ddot{u}$
0	0.2693	0.05427	5.427 0%	(0.2643; 0.2742)	0.2643	0.05054 5.054 0%	0.2233	0.01859 1.859 0.2%
200 2%	0.2283	0.02513	2.488 0%	(0.2241; 0.2325)	0.2241	0.02212 2.189 0%	0.2143	0.01596 1.580 0.4%
400 4%	0.2112	0.01718	1.684 0.7%	(0.2073; 0.2152)	0.2073	0.01577 1.545 1.7%	0.2049	0.01430 1.401 4%
500 5%	0.2045	0.01480	1.443 3.2%	(0.2006; 0.2083)	<u>0.2014</u>		<u>0.2014</u>	0.01325 1.292 7%
600 6%	0.1987	0.01308	1.268 8%	(0.1949; 0.2024)	<u>0.1972</u>		<u>0.1972</u>	0.01229 1.191 12%
800 8%	0.1884	0.01269	1.213 11%	(0.1848; 0.1920)	<u>0.1892</u>		<u>0.1892</u>	0.01097 1.052 22%
900 9%	0.1838	0.01535	1.465 2.8%	(0.1803; 0.1874)	<u>0.1867</u>		<u>0.1867</u>	0.01200 1.145 15%
1000 10%	0.1795	0.01789	1.697 0.6%	(0.1761; 0.1830)	0.1830	0.01394 1.322 6%	0.1837	0.01344 1.275 8%
1200 12%	0.1716	0.02241	2.103 0%	(0.1682; 0.1749)	0.1749	0.01798 1.687 0.7%	0.1769	0.01691 1.586 1.3%
1400 14%	0.1643	0.02634	2.442 0%	(0.1611; 0.1676)	0.1676	0.02178 2.020 0%	0.1695	0.01925 1.786 0.3%

Tabelle 3.4,  $t_{end} = 1.2 \cdot 10^{-4} \text{ sec}$

Jedesmal ist eine gleiche Anzahl  $w/2$  von Ausreißern in negativer und positiver Richtung weggelassen.

Die Erzeugung der 10 000 Abszissenwerte  $x$  und ihre Sortierung der Größe nach erforderten eine Rechenzeit von ungefähr 90 min (IBM 7090, programmiert in FORTRAN II).

Als Intervall  $I_0$  erhält man näherungsweise (0.187, 0.201) bei Vernachlässigung von 5 % bis 9 % der Moleküle. Als wahren Wert der Standardabweichung nehmen wir also  $\sigma = 0.194 \pm 0.007$  an. Der relative Fehler  $7/194$  ist ungefähr 3 %.

Bei  $\sigma = 0.190$  ist  $\theta = 1.052$  und  $\bar{u} = P\{\theta \geq 1.052\} \approx 22\%$ . D.h. durch das Abschneiden von 5 % bis 9 % der Ausreißer erhalten wir eine recht gute Normalverteilung. Andererseits erhalten wir für die vollständige Verteilung (ohne Vernachlässigung von Teilchen;  $w=0$ ) die Werte

$$\begin{aligned}\sigma_m^* &\approx 0.264, & \theta(\sigma_m^*) &\approx 5.05, & P(O \geq 5.05) &< 3 \cdot 10^{-8}, \\ \sigma_m &\approx 0.223, & \theta(\sigma_m) &\approx 1.86, & P(O \geq 1.86) &\approx 0.2 \cdot 10^{-2}.\end{aligned}$$

Im Falle einer Normalverteilung wären dies extrem unwahrscheinliche Resultate.

Zu Kontrollzwecken führten wir die ganze Simulation für  $t_{end} = 0.6 \cdot 10^{-4}$  ein zweites Mal (mit einem anderen Zufallsgenerator, RANDM, ebenfalls in [8] beschrieben) durch und erhielten ähnliche Ergebnisse.

### 3.3. Diskussion des Ergebnisses

Die durch die Monte-Carlo-Methode ermittelte Verteilung der Moleküle, die zur Zeit  $t=0$  von einem vorgegebenen Punkt eines unendlich langen Rohres ausgegangen sind, weicht nach Ablauf einer gewissen Zeit  $t$  von der erwarteten Normalverteilung ab. Im speziellen Beispiel war  $t = 7.2 \cdot 10^{-4} \text{ sec}$  bei einer mittleren Verweilzeit an der Wand von  $\tau = 10^{-6} \text{ sec}$ . Im Mittel erlebte jedes Teilchen etwa 100 Stöße mit der Wand.

Das Ergebnis läßt sich so interpretieren, daß die Moleküle zwei Gruppen bilden, von denen die eine ( $\approx 91\%$  bis  $95\%$ ) eine



Normalverteilung hat; die zweite ( $\approx 5\%$  bis  $9\%$ ) besteht aus "Ausreißern", die große Wege zurückgelegt haben.

Die Zeit  $t$  ist allerdings sehr kurz, verglichen mit der mittleren Aufenthaltszeit  $\bar{t} = 2 \text{ sec}$  eines Moleküls im Rohr, die sich nach CLAUSING [18] für das obige  $\tau$ ,  $R = 0.5 \cdot 10^{-2} \text{ cm}$ ,  $L = 20 \text{ cm}$ ,  $T = 300^\circ \text{ K}$  und das Molekulargewicht  $M = 28$  ergibt.

Die drei durchgeführten Simulationen mit verschiedenen langen Flugzeiten  $t_{\text{end}}$  zeigen, daß sich der Mindestanteil der Moleküle ( $5\%$ ), die zu weit fliegen, mit wachsender Zeit nicht verkleinert, dagegen zeigt die obere Grenze mit wachsender Zeit eine fallende Tendenz ( $12\%$  für  $t_{\text{end}} = 0.3 \cdot 10^{-4} \text{ sec}$ ,  $12\%$  für  $t_{\text{end}} = 0.6 \cdot 10^{-4} \text{ sec}$ ,  $9\%$  für  $t_{\text{end}} = 1.2 \cdot 10^{-4} \text{ sec}$ ). Wie groß die Abweichung einer reellen Molekularströmung von der Diffusionsgleichung ist, läßt sich aus diesen Werten nicht erkennen. Für einen "random walk"-Prozeß ist jedoch die Abweichung von der Normalverteilung nach im Mittel 100 Stößen in diesem Fall extrem hoch. Wir vermuten daher, daß die Abweichungen von der Diffusionsgleichung zumindest in der gleichen Größenordnung liegen.

In unserem Ansatz stecken ja noch weitere Unsicherheiten, die eine Vergrößerung der Fehler bewirken. Einmal wurde von DAVIS, LEVENSON und MILLERON [11] gezeigt, daß das Cosinusetz der Emission von Molekülen von der Wand in vielen Fällen nicht gut erfüllt ist. Die Abweichungen, die sich dadurch gegenüber Rechnungen ergeben, die unter der Annahme des Cosinusetzes durchgeführt wurden, betragen mehrere Prozent. Zweitens ist das exponentielle Verteilungsgesetz der Haftzeiten

$$g(t) = \frac{1}{\tau} e^{-t/\tau}$$

aus rein statistischen Überlegungen abgeleitet und experimentell noch nie genau nachgeprüft worden.

Aus all diesen Punkten ziehen wir den Schluß, daß die Methode der Bestimmung der Verweilzeit nach CLAUSING auch unter Anwendung der besten zur Zeit verfügbaren experimentellen Methoden nur größenordnungsmäßig richtige Werte für  $\tau$  liefert.

## 4. Tests

### 4.1. Allgemeines

Bei Monte-Carlo-Simulationen ist die Erzeugung von Zufallszahlen mit guten statistischen Eigenschaften sehr wichtig. Ein schlechter Zufallsgenerator kann in die Resultate systematische Fehler hineinbringen. Wir haben deshalb unseren Zufallsgenerator sorgfältig geprüft (s. [8]). Bei den im hier vorliegenden Bericht durchgeführten Simulationen wurden durch komplizierte Rechnungen aus den erzeugten Zufallszahlen ganz spezielle Verteilungen realisiert, die wir auch testeten, um uns zu vergewissern, daß die angewandten Methoden die Simulation nicht verfälschen. Speziell haben wir die Geschwindigkeitsverteilung und die Richtungsverteilung untersucht.

### 4.2. Geschwindigkeitsverteilung

Dieser Test hatte hauptsächlich den Zweck, festzustellen, ob das numerische Lösungsverfahren der Gleichung  $u = H(v)$  (siehe 3.1.) Fehler in die Simulation hineinbringt.

Dazu haben wir den KOLMOGOROFFSchen Satz (s. 3.1.5) angewandt. Zum Test der Null-Hypothese, ob eine Zufallsvariable, deren empirische Verteilungsfunktion  $F_n(x)$  bekannt ist, eine bestimmte stetige Verteilungsfunktion  $F(x)$  besitzt, verfährt man so: Man bestimmt die Größe

$$\Theta = \sqrt{n} \sup_{-\infty < x < +\infty} |F_n(x) - F(x)|$$

und erhält  $\theta = \theta_0$ . Hierbei ist  $n$  die Anzahl der Versuche (bzw. der vorliegenden "Meßwerte"). Aus einer Tabelle (s. [7], S. 516) ermittelt man die Überschreitungswahrscheinlichkeit

$$(4.2.1) \quad P(\Theta \geq \theta_0) = 1 - K(\theta_0).$$

Ist diese ziemlich groß, so nimmt man die Null-Hypothese an, sonst verwirft man sie. Es ist üblich, sie zu akzeptieren,

wenn  $P \geq 5\%$  ist. Die Werte, die den Schwellen  $5\%$  und  $1\%$  entsprechen, sind

$$(4.2.2) \quad \begin{cases} \theta_0 = 1.36 & \text{für } P = 5\% \\ \theta_0 = 1.63 & \text{für } P = 1\% \end{cases}$$

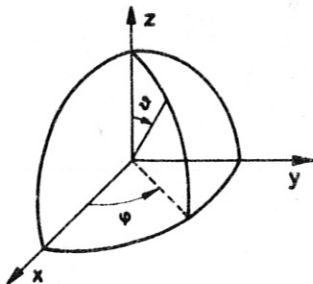
Wir erweiterten den KOLMOGOROFFSchen Test zu einem  $\chi^2$ -Test. Die Größe  $\theta$  kann nur positive Werte annehmen. Zwecks Bestimmung der Klassen des  $\chi^2$ -Tests teilten wir die positive Achse in 10 Intervalle ein, derart, daß die Wahrscheinlichkeit dafür, daß  $\theta$  in ein bestimmtes Intervall hineinfällt, ungefähr  $1/10$  ist. Der KOLMOGOROFFSche Test wird  $N$  mal wiederholt. Wird mit  $m_i$  die Anzahl der im Intervall  $y_{i-1} \leq y < y_i$  liegenden Werte  $\theta$  bezeichnet, so ist

$$(4.2.3) \quad \chi^2 = \sum_{i=1}^{10} \frac{\{m_i - N(K(y_i) - K(y_{i-1}))\}^2}{N(K(y_i) - K(y_{i-1}))}$$

Tabelle 4.1. zeigt die Ergebnisse. Man sieht auf den ersten Blick, daß zuviele Werte ins erste Intervall fallen, d.h. daß die Verteilung besser approximiert wird als zu erwarten wäre. Ähnliches ergab sich aber auch beim Testen des Zufallsgenerators auf Gleichverteilung: es liegt deswegen am Zufallsgenerator selbst, oder, wie wir vermuten, daran, daß die Anzahl  $n = 50$  der Versuche zu klein ist, d.h. daß  $n$  zu klein ist, als daß man in (3.1.17) den Grenzfall  $n \rightarrow \infty$  als realisiert ansehen könnte. Man vgl. hierzu [8], § 3.7.3.

### 4.3. Richtungsverteilung

#### 4.3.1 $\chi^2$ -Test





Wir betrachten eine Cosinusverteilung in Bezug auf die  $z$ -Achse. Der Winkel  $\varphi$  muß im Intervall  $(0, 2\pi)$  gleichverteilt sein. Der Winkel  $\vartheta$  muß so verteilt sein, daß die Zufallsvariable  $\omega = \cos \vartheta$ , deren Werte im Intervall  $(0, 1)$  liegen, die Dichte

$$(4.3.1) \quad f(\omega) = 2\omega$$

hat. Ein  $\chi^2$ -Test der für die Simulation erzeugten Richtungsverteilung lieferte ganz befriedigende Ergebnisse (s. Tabelle 4.2.). Jedesmal wurden 100 Werte  $\varphi$  und 100 Werte  $\vartheta$  "gewürfelt". Das  $\varphi$ -Intervall  $(0, 2\pi)$  wurde in 12 gleichgroße Teilintervalle, das  $\omega$ -Intervall  $(0, 1)$  wurde in 10 gleichgroße Teilintervalle zerlegt.

Die Anzahl der Freiheitsgrade für die Verteilung von  $\vartheta$  ist  $n=50$ , die Anzahl der Freiheitsgrade von  $\varphi$  ist  $\nu=100$ . Für  $\chi^2$  hat man 9 Freiheitsgrade.  $\alpha$  bedeutet die Überschneidungswahrscheinlichkeit.

$\chi^2$ Ü-Intervall	Anzahl der Werte $\theta$ die in die Intervalle $(\gamma_{j-1}, \gamma_j)$ fallen ( $j=1, 2, \dots, 10$ ), $\gamma_{10} = \infty$									
20.60 (1%, 2.5%)	22	13	10	6	8	11	4	5	12	9
27.12 (0.1%, 0.5%)	22	14	15	6	7	6	4	11	4	11
38.92 (0, 0.05%)	28	4	12	12	7	12	10	3	6	6
15.70 (5%, 10%)	20	12	11	14	10	8	6	6	8	5
44.12 (0, 0.05%)	29	9	7	13	7	9	14	5	5	2
43.40 (0, 0.05%)	31	10	7	9	6	7	7	11	6	6
32.51 (0, 0.05%)	27	11	8	11	12	8	7	3	6	7
30.84 (0, 0.05%)	26	8	14	11	11	7	5	5	7	6
16.00 (5%, 10%)	21	10	12	12	6	4	8	9	8	10
30.24 (0, 0.05%)	27	9	8	7	12	11	9	6	5	6
$\gamma_{i-1}$	0	0.58	0.65	0.71	0.77	0.83	0.90	0.98	1.08	1.23
$N(K_i - K_{i-1})$	11.04	9.76	9.75	10.09	9.74	10.35	10.07	9.82	9.68	9.70

Tabelle 4.1

Test der Geschwindigkeitsverteilung

Die Anzahl der Versuche für jede Bestimmung von  $\theta$  ist  $n=50$ , die Anzahl der Bestimmungen von  $\theta$  ist  $N=100$ . Für  $\chi^2$  hat man 9 Freiheitsgrade,  $\alpha$  bedeutet die Überschreitungswahrscheinlichkeit.

$\chi_p^2$	$\ddot{u}$	$\chi_{1-p}^2$	$\ddot{u}$
12.8	30 % < $\ddot{u}$ < 40 %	9.4	40 %
8.0	70 % < $\ddot{u}$ < 80 %	6.6	60 % < $\ddot{u}$ < 70 %
9.4	40 % < $\ddot{u}$ < 50 %	10.5	30 %
13.3	20 % < $\ddot{u}$ < 30 %	4.8	80 % < $\ddot{u}$ < 90 %
17.8	5 % < $\ddot{u}$ < 10 %	6.2	70 % < $\ddot{u}$ < 80 %
14.5	20 %	3.3	95 %
21.7	2.5 %	5.1	80 % < $\ddot{u}$ < 90 %
17.1	10 % < $\ddot{u}$ < 20 %	4.2	90 %
9.4	50 % < $\ddot{u}$ < 60 %	12.5	10 % < $\ddot{u}$ < 20 %
13.0	30 %	7.9	50 % < $\ddot{u}$ < 60 %

Tabelle 4.2

Test der Richtungsverteilung

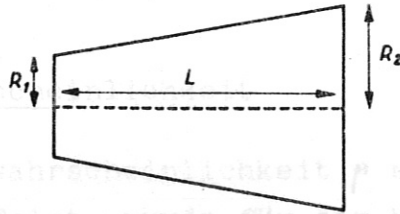
$\ddot{u}$  = Überschreitungswahrscheinlichkeit.  $\chi_p^2$  hat 11 Freiheitsgrade,  $\chi_{1-p}^2$  hat 9 Freiheitsgrade.

4.3.2 Simulationsbeispiel zum Cosinusetz

Man betrachte eine kreisförmige Blende, von der Teilchen dem Cosinusetz gemäß losfliegen. Wir wollen durch Simulation ein Vertrauensintervall ermitteln für die Wahrscheinlichkeit, daß ein Molekül eine zur Blende parallele kreisförmige Scheibe erreicht; die Verbindungsstrecke der Mittelpunkte von Blende und Scheibe stehe senkrecht auf beiden. Dies ist ein geometrisches



tlische Wert gemäß (4.3.1) ist  $p = 0.0385$ . Man hat also gute Übereinstimmung.



Problem, nur die Richtungsverteilung der Teilchen spielt eine Rolle. Wir verdanken den Hinweis auf dieses Beispiel Fräulein H. SCHULZE. Seine exakte Lösung (man vgl. [2]) lautet

$$(4.3.1) \quad p = \frac{\sqrt{L^2 + 2(R_1^2 + R_2^2) + L^{-2}(R_1^2 - R_2^2)^2} - L - L^{-1}(R_1^2 - R_2^2)}{\sqrt{L^2 + 2(R_1^2 + R_2^2) + L^{-2}(R_1^2 - R_2^2)^2} + L - L^{-1}(R_1^2 - R_2^2)}$$

Der Vergleich von  $p$  mit dem Vertrauensintervall ist ein Test für die Qualität der Simulation des Cosinusetzes.

Der physikalische Prozeß läßt sich sehr einfach simulieren; und man erhält als Schätzwert für die unbekannte Wahrscheinlichkeit das Verhältnis  $p^*$  der Anzahl der angekommenen Teilchen zur Anzahl der abgeflogenen Teilchen. Der wahre Wert  $p$  liegt dann mit von  $g$  abhängiger Sicherheit näherungsweise innerhalb der Grenzen

$$(4.3.2) \quad p_{\pm} = \frac{p^* n + \frac{1}{2} g^2 \pm g (p^*(1-p^*) n + \frac{1}{4} g^2)^{1/2}}{n + g^2}$$

Man vgl. [9], Seite 30. Für die Sicherheit 99 % ist  $g \approx 2.58$ . Die Näherung (4.3.2) ist gut brauchbar, wenn  $p^* n \geq 4$  und  $(1-p^*) n \geq 4$  ist.

Das Experiment haben wir für 10 000 Teilchen,  $R_1 = 1$ ,  $R_2 = 4$ ,  $L = 20$  durchgeführt und benötigten dafür 2' 11" Rechenzeit. Es ergab sich  $p^* = 0.03779$ . Das der Sicherheit 99 % entsprechende Vertrauensintervall ist  $0.03597 < p < 0.03969$ . Der theore-

tische Wert gemäß (4.3.1) ist  $p = 0.0385$ . Man hat also gute Übereinstimmung.

#### 4.4. Durchflugswahrscheinlichkeit

Die Durchflugswahrscheinlichkeit  $p$  eines Teilchens, das dem Cosinusetz folgt, wurde für ein kreiszylindrisches Rohr vom Radius  $R$  und von der Länge  $L$  von CLAUSING (s. [2]) berechnet. Näherungsweise ist

$$p = \frac{1-2\alpha}{3R^2L} \left\{ 4R^3 + (L^2 - 2R^2)\sqrt{L^2 + 4R^2} - L^3 \right\} + \alpha +$$

(4.4.1)

$$+ \frac{1-\alpha}{2R^2} \left\{ L^2 - L\sqrt{L^2 + 4R^2} + 2R^2 \right\},$$

wobei

$$\alpha = \frac{\beta \left\{ \beta^2 + 4(R/L)^2 \right\}^{1/2} - \beta^2 - (1-\beta) \left\{ (1-\beta)^2 + 4(R/L)^2 \right\}^{1/2} + (1-\beta)^2}{\left\{ (1-\beta)^2 + 4(R/L)^2 \right\}^{1/2} - \frac{\beta^2 + (1-2\beta) \left\{ \beta^2 + 4(R/L)^2 \right\}}{\left\{ \beta^2 + 4(R/L)^2 \right\}^{1/2}}}$$

(4.4.2)

$$\beta = \frac{2R\sqrt{7}}{3L + 2R\sqrt{7}}.$$

$\alpha$  wurde so gewählt, daß (4.4.1) für lange Rohre ( $R/L \ll 1$ ) in

$$(4.4.3) \quad p \approx \frac{8R}{3L}$$

übergeht.

Diese Wahrscheinlichkeit haben wir für einige Verhältnisse sowohl durch Simulation geschätzt als auch gemäß obiger Formel berechnet. Es ergab sich gute Übereinstimmung.

Für Diskussionen danken wir Herrn Dr. E.W. Blauth und Herrn Dr. F. Hertweck, IPP Garching, sowie Herrn Dr. J.N. Chubb, Culham Laboratory, England. Für Mithilfe bei den Programmierungsarbeiten und Durchführung numerischer Rechnungen auf der Garchinger IBM 7090 danken wir Frau H. Geißler und Fräulein C. Raschewa.

- 2) K. GEISSLER, Über die Verteilung sehr verdünnter Gase durch kleine beliebig geformte Öffnungen.  
Ann. d. Phys. 12, 7 (1963) (1964).
- 3) D.H. DAVIS, Non-linear Calculations of Molecular Flow Rates Through a Cylindrical Orifice and Pipes of other Shapes.  
J. Appl. Phys. 31, 10 (1960).
- 4) K. GEISSLER, Von einer effizienten Kryopumpe, Teil I: Theoretische Betrachtungen.  
Bericht IPP 4/18 (1963) des Instituts für Plasmaphysik, München-Garching.
- 5) B.S. GUMENIK, Methoden der Wahrscheinlichkeitsrechnung. Übersetzung aus dem Russischen, Akademie-Verlag, Berlin 1962.
- 6) B.S. IVANOV, V.S. TRITCHEV, Formation of Directivity Patterns of Molecular Beams.  
Sov. Phys. Tech. Phys. 8, 293-308 (1963).
- 7) A. HENYI, Wahrscheinlichkeitsrechnung.  
Deutscher Verlag der Wissenschaften, Berlin 1962.
- 8) F. GORENFLO, M. PACCO, Einige Testmethoden für Zufallsgeneratoren.  
Bericht IPP 6/47 (1964) des Instituts für Plasmaphysik, München-Garching.



5. Literaturverzeichnis

- 1) E.D. CASHWELL, C.J. EVERETT, Monte Carlo Method for Random Walk Problems. *Physics Laboratory, Liverpool*, Pergamon Press 1959.
- 2) P. CLAUSING, Über die Strömung sehr verdünnter Gase durch Rohre beliebiger Länge. *Ann. d. Phys.* 12, 961-989 (1932).
- 3) D.H. DAVIS, Monte Carlo Calculations of Molecular Flow Rates Through a Cylindrical Elbow and Pipes of other Shapes. *J. Appl. Phys.* 31, 1169-1176 (1960).
- 4) K. GEISSLER, Eine zylinderförmige Kryopumpe, Teil I: Theoretische Betrachtungen. *Report, Nr. 8-1302*, Bericht IPP 2/18 (1963) des Instituts für Plasmaphysik, München-Garching.
- 5) B.W. GNEDENKO, Lehrbuch der Wahrscheinlichkeitsrechnung. Übersetzung aus dem Russischen, Akademie-Verlag, Berlin 1962.
- 6) B.S. IVANOV, V.S. TROITSKII, Formation of Directivity Patterns of Molecular Beams. *Sov. Phys. Tech. Phys.* 8, 365-368 (1963).
- 7) A. RENYI, Wahrscheinlichkeitsrechnung. *Deutscher Verlag der Wissenschaften, Berlin 1962.*
- 8) R. GORENFLO, M. PACCO, Einige Testmethoden für Zufalls-generatoren. *Bericht IPP 6/47 (1966) des Instituts für Plasmaphysik, München-Garching.*

- 9) B.L. VAN DER WAERDEN, Mathematische Statistik. Messung  
Springer-Verlag 1957.
- 10) L.L. LEVENSON, N. MILLERON, D.H. DAVIS, Molecular  
Flow Conductance. Messung der Absorptionseffektivität verschie-  
UCRL 6253 (Lawrence Radiation Laboratory, Livermore,  
California) (1961).
- 11) D.H. DAVIS, L.L. LEVENSON, N. MILLERON, Effect of  
"Rougher than Rough" Surfaces on Molecular Flow  
through Short Ducts. J. Appl. Phys. 35, 529-532 (1964).  
UCRL 6787 und J. Appl. Phys. 35, 529-532 (1964).
- 12) M. KNUDSEN, Die Gesetze der Molekularströmung und der  
inneren Reibungsströmung der Gase durch Röhren.  
Ann. d. Phys. 28, 75-130 (1909).
- 13) W.C. DE MARCUS, The Problem of Knudsen Flow.  
Union Carbide Nuclear Company Report, Nr. K-1302,  
Oak Ridge 1956.
- 14) M. VON SMOLUCHOWSKI, Transpiration und Diffusion ver-  
dünnter Gase.  
Ann. d. Phys. 33, 1559-1570 (1910).
- 15) J.N. CHUBB, Die Berechnung der Molekularströmung mit  
Hilfe der Monte-Carlo-Methode.  
III. Internationaler Vakuumkongreß, Stuttgart 1965.
- 16) J.O. BALLANCE, Die Bestimmung der Übergangswahrschein-  
lichkeit mit Hilfe der Bewegung der Masse und der mitt-  
leren freien Weglänge.  
III. Internationaler Vakuumkongreß, Stuttgart 1965.
- 17) L.L. LEVENSON, N. MILLERON, D.H. DAVIS, The Optimization  
of Molecular Flow Conductance.  
Trans. VII. Nat. Symp. Vac. Tech., Cleveland, 372-377 (1960).

- 18) P. CLAUSING, Über die Absorptionszeit und ihre Messung durch Strömungsversuche.  
Ann. d. Phys. 7, 489-520 (1930).
- 19) H. BURI, Direkte Messung der Absorptionszeit verschiedener Gase an einer Glasoberfläche.  
Diss. Heidelberg 1954.
- 20) H.L. ESCHBACH, R. JAECKEL, D. MÜLLER, Molekulare Strömung bei sehr niedrigen Drucken.  
Trans. 8th Vacuum Symp., 1110 (1961).