

## 분자드래그펌프의 압축 및 배기특성 해석

이영규 · 이진원\*

포항공과대학교 기계공학과  
(1995년 9월 11일 접수)

### Direct Simulation of Compression and Pumping Characteristics for a Gaede-Type Drag Pump

Young-Kyu Lee and Jin-Won Lee\*

Department of Mechanical Engineering, Pohang University of Science and Technology,  
Pohang 790-784, Korea

(Received September 11, 1995)

**요 약** - 계데형 분자드래그펌프의 배기특성을 강구(hard sphere) 분자모델과 NTC(No Time Counter) 충돌 scheme을 이용한 직접모사 법의 하나인 DSMC(direct simulation Monte Carlo) 방법을 이용하여 해석하였다. 해석에 사용된 모델은 높이가 일정하고, 길이가 높이의 1~3000배 사이인 이차원 채널이다. 자유분자영역으로부터 연속체 영역까지의 영역에서 최대압축비와 배기속도를 계산하였다. 계산결과 기존의 최대압축비 이론 결과는 채널내의 압력변화가 클 때는 큰 오차를 유발하는 것을 알 수 있었고, 유동방향의 기체분자의 통과확률은 채널 길이와 출구압력에 관계없이 거의 일정한 값을 갖는다는 것을 발견하였다.

**Abstract** - The pumping and compression characteristics for a Gaede-type drag pump model are simulated by the direct simulation Monte Carlo(DSMC) method using the hard sphere molecular model and No Time Counter(NTC) collision scheme. Model geometry is a 2-D channel of constant height, with the length-to-height ratio of the channel varied over 1 to 3000. Maximum compression ratio and throughput are calculated in the flow regime ranging from free molecular to continuum. The calculation results show that the existing theories for maximum compression ratio give inaccurate results when the pressure variation in the channel is large, and also that the transmission probability of the pumped gas molecules in the flow direction remains nearly constant irrespective of the channel length and the exhaust pressure under normal operating conditions.

## 1. 서 론

1900년대 초에 계데(W. Gaede)에 의해 처음 개념이 도입된 분자드래그펌프(molecular drag pump)는 기체분자를 한 방향으로 고속운동하는 고체면과의 충돌에 의해 고체면의 운동방향으로 운동량이 증가되게 함으로써 역류를 억제하고 순방향의 유동을 촉진하는 운동량전달 방식(momentum transfer type)의 펌프이며, 일반펌프 중에서 점성펌프(viscous pump)라고 불리는 것과 같은 원리이지만 점성펌프가 대개 액체를 다루는데 비해서 분

자펌프는 진공 중의 기체를 다루는 것이 차이이다. 초기의 분자드래그펌프들은  $10^{-6}$  torr 정도의 당시로서는 매우 높은 고진공을 달성하여 고진공 펌프로써 많은 관심을 끌었으나, 배기속도가 극히 낮다는 단점 때문에 유체산펌프에 밀려 거의 사용이 특수한 분야에 국한되었다. 그러나 최근들어 집적회로나 반도체 등의 박막산업의 발달과 더불어 청정진공펌프에 대한 요구가 증대되고 있는 시점에서, 분자드래그펌프는 작동영역이 연속체유동영역까지 펼쳐있고 오일 역류가 없다는 장점 때문에 다시 관심이 고조되고 있다.

분자드래그펌프의 구조는 터보분자펌프와 연결하여

\*To whom all correspondence should be addressed

압축비를 증대시키려는 목적으로 사용되는 경우 등 응용분야에 따라 그 형상과 배열이 다양하지만 대부분 사각단면의 홈(grooved) 채널을 기본형으로 한다. 따라서 복잡한 형상의 드래그펌프의 배기특성을 정확하게 이해하기 위해서는 가장 단순한 계데형의 분자드래그펌프의 특성을 이해하는 것이 선행되어야 한다. 계데형의 드래그펌프는 기하학적 형태가 단순함에도 불구하고 아직까지 만족할만한 이론이 없는 실정이어서, 계데형 펌프에 관한 가장 일반적인 이론은 최대 압축비가 유동채널의 길이/높이의 비와 벽면속도에 따라서 지수함수적으로 증가한다는 것이며, 기하학적 특성이 고려된 몇 가지의 변화된 이론이 있기는 하지만 모두 지수함수적 압축비 변화를 근간으로 하고 있다.

자유분자유동에 대한 이 이론은 채널 내부의 전 영역에서 평균충돌거리가 일정하다는 가정을 기본으로 하고 있으나, 실제로는 유동의 출구방향으로 갈수록 기체분자의 밀도가 증가함으로, 드래그펌프에서와 같이 긴 채널에서는 Liu and Pang[1]이 예측한 마치 beaming 효과가 중요해진다. 또한 드래그펌프 후단으로 갈수록 유동은 압축에 의해서 천이(transition) 또는 연속체 영역이 되어 기존의 이론으로는 그 성능을 정확히 예측하는 것이 불가능하다. 따라서 본 연구에서는 자유분자유동에서부터 연속체영역까지의 유동을 가지는 드래그펌프의 압축과 배기특성에 관한 실질적인 모델을 세우기 위해서 DSMC 방법을 이용하여 단순화된 계데형 분자드래그펌프 내부유동을 해석하였다. 유동채널은 4개면으로 이루어진 4각형 채널대신에 2차원 채널을 택하였으며, 이는 유동특성은 유지되면서 계산시간을 최소화하기 위한 것이다.

## 2. 분자드래그펌프 해석이론

계데형 분자드래그펌프에서 회전자와 외부 실린더 몸체 사이의 틈새는 실린더 원주에 비해서 무시할 수 있을 만큼 작으므로, 펌프내부의 유동을 밀폐된 채널 내부의 유동으로 무리없이 가정할 수 있으며, 따라서 Fig. 1과 같이 윗면이 일정속도로 움직이는 채널 내부의 기체유동을 기준으로 생각한다. 자유분자유동에서처럼 채널 높이  $H$ 가 평균자유행로보다 작은 값을 갖는다면 채널 내부의 기체유동에는 벽과의 충돌만이 중요하고 기체분자 사이의 충돌을 무시할 수 있다고 가정할 수 있다. 이 경우에 채널 폭 방향의 압력변화를 무시하면 채

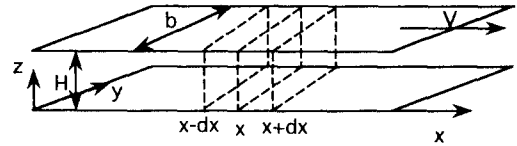


Fig. 1. Schematic to show the operation of a molecular pump.

널 내부의 평균 흐름속도는 벽속도의 절반값을 갖는다고 생각할 수 있으므로, 평판과의 충돌에 의해 유발되는 분자유속(flux)는 다음과 같이 쓸 수 있다.

$$\dot{N}_p = \frac{1}{2} nVbH \quad (1)$$

여기에서  $n$ 은 분자수밀도(molecular number density)를 나타낸다.

채널 입구에서 출구쪽으로 갈수록 압축으로 인해서 압력이 증가하게 되고, 따라서 채널 내부에는 압력구배 즉 밀도구배가 발생하며 이 때문에 반대방향의 역류가 발생하게 된다. 분자수 밀도가  $n$ 인  $x$  지점의  $y$ - $z$ 면에 대해서 보면, 이  $y$ - $z$ 면을 통하여 운동벽면과의 충돌에 의해 오른쪽 방향으로 유발되는 단위 면적당 단위시간당 분자유속은 식 (1)과 같이 쓸 수 있으며, 같은 면에서 기체분자의 밀도구배와 분자의 열운동에 의해 유발되는 반대방향의 분자유속  $\dot{N}_{th}$ 는 분자운동이론을 이용하면 다음과 같이 쓸 수 있다.

$$\dot{N}_{th} = \frac{1}{4} \bar{v}bH(n(x+\Delta x) - n(x-\Delta x)) = \frac{1}{2} \bar{v}bH \frac{dn}{dx} \Delta x \quad (2)$$

여기에서  $\bar{v}$ 는 평균분자열속도(mean molecular thermal speed)이다. 위의 식에 사용된  $\Delta x$ 는  $x$  지점에 도달하는 기체분자가 마지막 충돌이 일어나는 지점으로부터  $x$  지점까지의 평균거리로서, 주위에 벽이 없는 경우에는 평균자유경로에 해당한다. 벽이 있고 평균자유경로가 채널높이보다 훨씬 큰 경우에는 대략적으로  $\Delta x = \alpha H$ 로 나타낼 수 있으므로,  $x$  지점에서의 정미분자유속(net molecular flux)는 다음과 같이 나타낼 수 있다.

$$\dot{N} = \frac{1}{2} nVbH - \alpha bH^2 \frac{1}{2} \bar{v} \frac{dn}{dx} \quad (3)$$

정미분자유속은 압력구배가 없을 때 최대값을 가지며, 최대압축비  $K_0$ 는 정미분자유속이 0이 되는 경우이므로, 식 (3)으로부터 다음과 같은 식을 얻을 수 있다[2].

$$K_0 = \exp\left(\frac{V}{v} \frac{L}{\alpha H}\right) \quad (4)$$

즉 최대압축비는 채널 길이  $L$ 과 벽속도  $V$ 에 따라 지수적으로 증가한다. 위 식에 의하면  $K_0$ 는 압력에 무관하고, 벽속도가 증가함에 따라 계속하여 지수적으로 증가하는 것을 보여준다. 같은  $K_0$  표현식을 주지만 유도 과정이 조금 다른 이론도 존재한다[3].

식 (3)은  $y$ - $z$ 면 상에서 기체분자의 유속이 완전히 등방성(isotropic)이라는 가정을 이용한 것인데, 긴 채널중간의 기체유동에서는 벽면의 형상계수(view factor)의 비대칭성 때문에 분자유속이 비등방성이 되며, 완전한 산란형(random) 분포에 비하여 축방향으로 모여있는 방향성을 갖는다. 유속분포가 비등방성이 되면  $\alpha$ 값은 달라지며, 특히 기체유동이 천이유동이나 연속체유동이 되면 기체밀도변화가 심한 출구부에서는 기체밀도의 구배로 인하여  $\alpha$ 값도 구배를 갖는다. 기존의 이론인 식 (4)는 따라서 매우 제한된 영역에서만 유효하며, 기체밀도변화에 따른  $\alpha$ 의 변화는  $\alpha$ 를 기체밀도의 함수로 표현한 후(평균자유경로처럼) 뒷식을 이용할 때 적절히 채널의 길이를 나누어 구간별로 적용하면 되지만, beaming으로 인한 비등방성 효과는 구간별로 나누는 식으로는 해결되지 않고 전체 채널을 직접 해석하는 수 밖에는 없다. 이것이 본 연구를 수행해야하는 이유이다.

### 3. 연구방법

#### 3.1. 직접모사기법 및 해석모델

드래그펌프 내부의 유동은 연속체유동, 천이유동, 자유분자유동으로 구성된 비평형 유동이다. 이러한 종류의 유동은 볼츠만 방정식에 의해서만 기술되는데, 볼츠만 방정식의 수학적 접근은 극히 단순한 기하학적 형상을 제외하고는 불가능하다. 따라서 볼츠만 방정식의 해를 얻기 위해서는 분자 각각의 운동을 컴퓨터로 모사하는 직접적인 모사법(direct simulation)에 의존할 수밖에 없다. 이러한 직접모사 방법 중 현재 가장 널리 사용되는 것이 Bird[4]에 의해서 개발된 DSMC(direct simu-

lation Monte Carlo)법이다.

본 연구에서는 분자모델로서 강구(hard sphere) 모델을 택하고, 충돌계산을 벡터화하기 위해서는 Bird에 의해 개발된 NTC(No Time Counter) 충돌기법[5]을 이용하였다. DSMC 계산에서 결과의 정확도를 높이기 위해서는 모사분자수를 가능한 한 많게, 격자의 크기는 국부적인 평균자유경로보다 작게, 분자의 운동과 충돌계산을 분리하기 위하여 사용되는 시간간격  $\Delta t_m$ 은 평균충돌 시간보다 작게 해야 한다. 몇 가지 최대압축비 계산에서 출구 근처를 제외한 본 연구의 모든 계산에서 격자 크기는 국부적인 평균자유경로보다 작은 값을, 시간간격  $\Delta t_m$ 은 펌프 출구조건을 기준으로 계산한 평균충돌 시간보다 작은 값을 사용하였다.

계대형 분자드래그펌프의 해석모델로는 한쪽 벽이 움직이는 2차원 채널을 사용하였고(Fig. 2) 계산영역은 많은 점격자(point cell)들로 이루어져 있으며, 각 점격자의 면적은 주위의 8개의 점격자의 위치를 이용하여 Monte Carlo 방법으로 계산하였다. 그림에서 아랫첨자 1, 2는 각각 펌프 입구와 출구를 나타내고,  $H$ 는 채널높이를,  $L$ 은 채널길이를 나타낸다.

본 연구에서는 계산영역의 열린경계(펌프 입구와 출구)를 통과한 기체유동은 평형유동(equilibrium flow)을 가정하였다. 따라서 각 시간 단계마다 열린 경계를 통과하는 기체분자수와 이 분자들의 속도성분들은 기체압력, 평균온도, 그리고 평균 유동속도를 알면 볼츠만 분포함수로부터 계산할 수 있다[4]. 본 연구에서는 펌프 입구와 출구를 통과하여 펌프 내부로 들어오는 기체압력을 각각  $P_1$ 과  $P_2$ 로 가정하였고 평균유동속도는 없는 것으로 가정하였다.

펌프입구와 출구를 통하여 들어오는 기체분자의 평균온도와 모든 벽의 온도는 상온(300 K)을 가정하였다. 모사되는 기체분자는 표준공기(standard air)를 가정하였고, 벽과 충돌하는 모든 분자는 벽과 열적 평형상태를 이룬 후에(full thermal accommodation) 방사조건(cosine law)을 만족하며 반사되는 것으로 가정하였다.

계산과정중, 경계조건을 만족하면서 열린경계를 통과

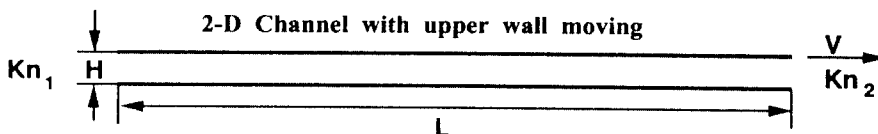


Fig. 2. Schematics of Gaede type molecular drag pump model.

하는 기체분자는 계속하여 계산영역 내부로 들어오게 되고, 내부의 기체분자 또한 이 경계를 통하여 밖으로 나가기도 하면서 시간이 지남에 따라 유동장이 형성되어진다. 모든 정상상태 계산에서 정상상태 도달조건 선정은 매우 중요하다. 본 연구에서는 다음과 같이 일정한 시간 동안 계산영역 내부로 들어오는 기체분자수  $N_i$ 와 외부로 나가는 분자수  $N_o$ 의 상대적인 차이가 0.5% 미만으로 내려가는 조건을 정상상태 도달조건으로 선택하였다.

$$\left| \frac{N_i - N_o}{N_i} \right| \leq 0.005 \quad (5)$$

**3.2. 배기속도와 통과확률**

일반적으로 진공펌프의 성능특성을 나타내는 변수로 배기속도  $S$ 와 유량(throughput)  $Q$ 가 주로 쓰이지만, 때때로 내부의 유동현상을 이해하는데는 펌핑확률의 개념을 이용하는 것이 편리하며, 특히 펌핑확률을 유동방향과 유동의 역방향의 성분으로 나뉘서 구할 수 있으면 기본현상의 이해 뿐만 아니라 시스템의 설계에도 유용하다. 펌프 입구와 출구에서 압력이 균일할 경우, 배기속도는 유동방향과 유동의 역방향의 통과확률을 이용하면 다음과 같이 나타낼 수 있다.

$$S = (C_1 P_1 Tr_1 - C_2 T_2 Tr_2) / P_1 = C_1 Tr_1 - C_2 Tr_2 (P_2 / P_1) \quad (6)$$

여기에서  $C_1$ 과  $C_2$ 는 펌프입구와 출구면적을 기준으로하는 aperture 컨덕턴스를,  $P_1$ 과  $P_2$ 는 펌프의 입구와 출구

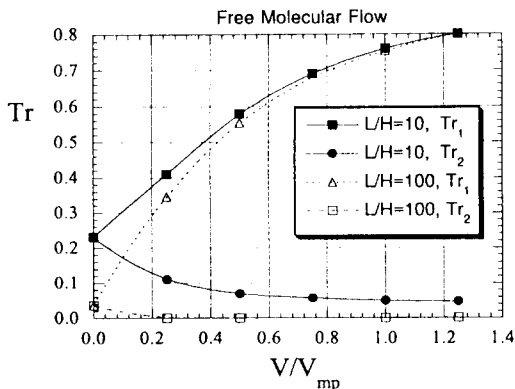
의 압력을,  $Tr_1$ 과  $Tr_2$ 는 펌프입구와 출구의 면적을 기준으로 하는 유동방향과 유동역방향의 기체통과확률을 나타낸다. 따라서 주어진 작동조건에서 각 방향의 통과확률이 주어질 경우 배기속도는 쉽게 계산된다. 자유분자 유동영역에서의 기체분자의 통과확률은 펌프형상만의 함수이지만, 일반적으로 자유분자유동이 아닐 경우 펌프 입구와 출구 압력에 따라 변할 수 있다.

본 연구에서도 해석은 통과확률과 압축비를 기준으로 하여 행하였으며, 유동방향 기체의 통과확률  $Tr_1$ 은 펌프 입구를 통하여 들어오는 분자수에 대한 펌프출구를 통하여 나가는 분자수의 비로 정의하였고, 유동 역방향의 통과확률  $Tr_2$ 도 같은 방법으로 정의하였다.

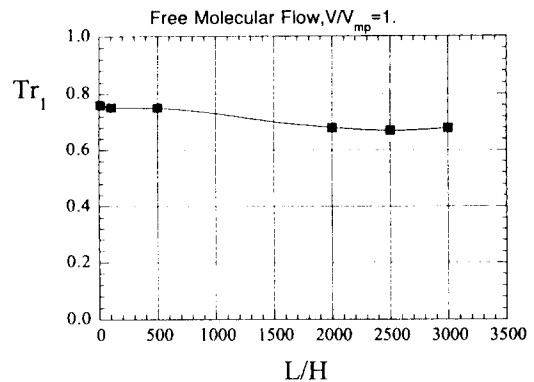
**4. 결과 및 고찰**

보통의 운전조건하에서 분자드래그펌프내의 기체유동은 출구 근처의 좁은 영역을 제외하고는 대부분이 자유분자유역에 속하며, 대기압으로 배기를 행하는 경우에도 대부분의 영역은 분자유동이 형성되면서 출구 근처에서 매우 빠른 속도로 압축비가 증가한다. 펌프의 입구를 통하여 들어오는 기체분자는 움직이는 벽과의 충돌에 의해서 유동방향의 운동량을 받게되고, 계속해서 펌프 출구쪽으로 움직여서 마침내 출구를 통과한 경우 배기펌프(backing pump)에 의해서 제거된다.

채널 내부의 기체분자와 구동면과의 충돌은 항상 분자의 운동방향을 한쪽(고체면의 이동방향)으로 쏠리게 하는 현상(beaming effect)을 유발하게 되고, 이러한 현상은 분자들의 유동방향으로의 통과확률은 벽이 움직이



**Fig. 3.** Effect of the wall velocity on the transmission probability of gas flow in two opposite flow directions for free molecular conditions.



**Fig. 4.** Effect of the channel length on the transmission probability in the flow direction.

지 않는 경우에 비하여 증가시키는 결과를 가져오게 하는 반면, 펌프 출구를 통하여 들어오는 유동역방향 기체 분자의 운동방향을 되돌려 놓는 효과가 있어서 결국 통과확률을 감소시키는 결과를 유발한다.

기체의 유동이 자유분자영역일 경우, 펌프내부의 기체의 흐름은 출구의 기체압력에 영향을 받지 않으므로, 벽의 속도가 없는 경우 양 방향 기체 통과확률은 같은 값을 가지게 되지만, 벽의 속도가 증가함에 따라 유동방

향의 통과확률은 증가하면서 유동역방향의 통과확률은 급격하게 감소하게 된다(Fig. 3, 4). 이 그림에서 중요한 발견은 벽 속도가 최빈열속도(most probable thermal speed)  $V_{mp}$ 보다 커지면 유동방향의 통과확률  $Tr_1$ 의 증가율이 급격히 둔화되어 채널 길이에 거의 관계없이 1보다 작은 일정한 값으로 접근한다는 것이다.  $Tr_2$ 에 대해서도 같은 경향을 보이지만, 벽 속도가 큰 경우 그 값이 채널 길이에 크게 의존하며,  $L/H > 100$ 이면  $Tr_2 \sim 0$ 이 된다. Liu and Pang[1]은 자유분자유동영역에서의 배기확률을 행렬확률법(matrix-probability method)으로 계산하여 이와 같은 경향을 확인한 적이 있다. 배기속도 관점에서 보면, 역유동의 통과확률은 실질적으로 0으로 볼 수 있으며, 따라서 총배기속도는 유동방향의 통과확률에 의해 결정되고, 채널길이가 일정치 이상이 되면 유동방향의 통과확률이 채널 길이에 무관하게 거의 일정하게 유지되므로, 채널의 최적 길이는 압축비 조건에서 결정된다는 것을 의미한다.

만약 펌프출구압력이 증가되어 더 이상 자유분자영역이 아닐 경우에는 기체의 흐름 즉 기체의 유동방향 통과확률은 펌프 출구에서 출발하는 기체와의 충돌에 의해 영향을 받는다. 따라서 출구압력의 영향은 입구와 출

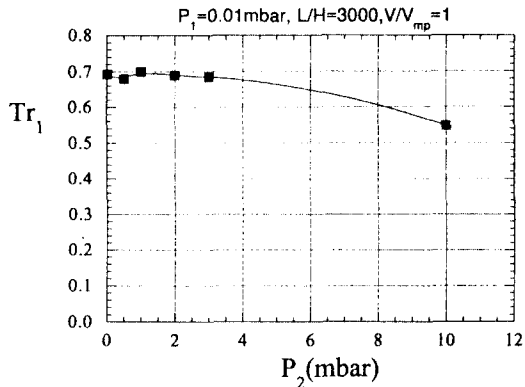


Fig. 5. Effect of the back pressure on the transmission probability in the flow direction.

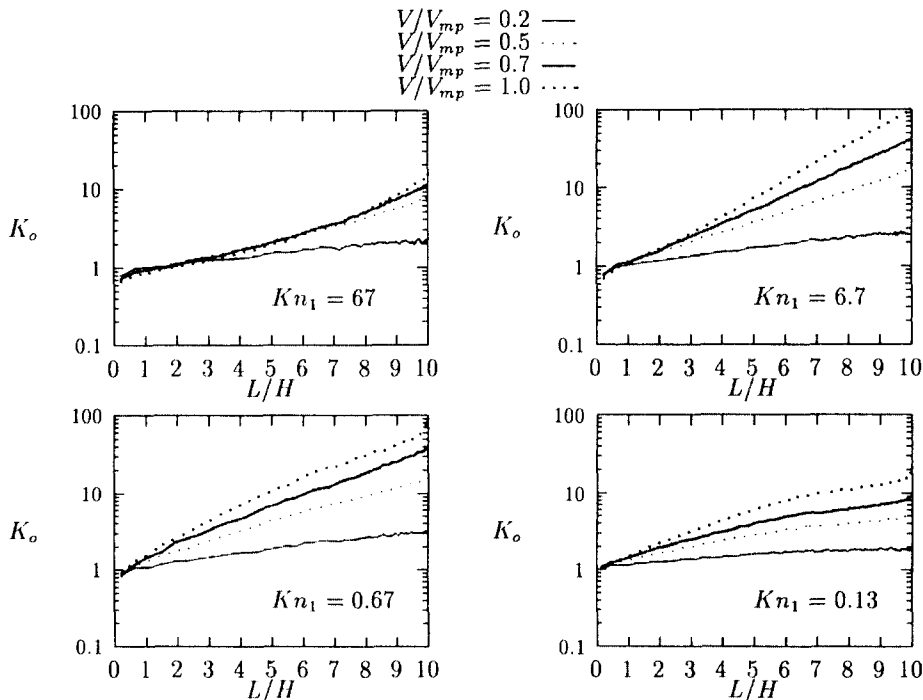


Fig. 6. Effect of the channel length on maximum compression ratio.

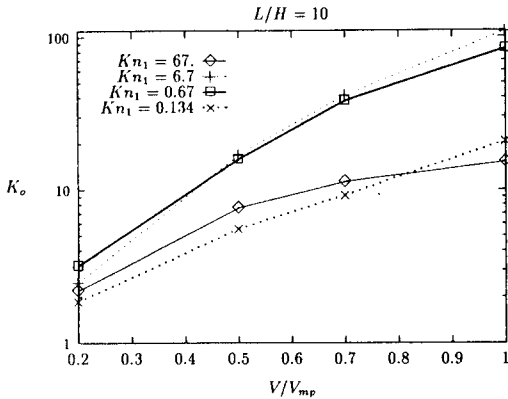


Fig. 7. Effect of the wall velocity on maximum compression ratio for various inlet Knudsen numbers.

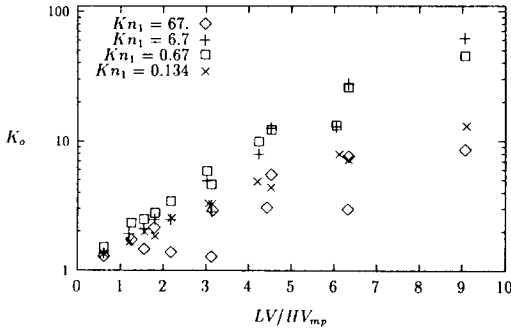


Fig. 8. The validity of the existing theory for maximum compression ratio.

구의 압력비가 아닌 출구압력 절대값의 함수가 된다. 유동방향의 통과확률에 대한 출구압력의 영향을 구해 보면, 채널 길이가 짧은 경우에는 큰 영향을 주지만, 일반적으로 출구압력이 수 torr까지는 거의 일정하다가 그 이상으로 출구 압력이 증가하면 서서히 감소한다(Fig. 5). 이와 같은 경향은  $L/H > 10$ 인 영역에서는  $L/H$ 에 거의 무관하게 얻어지고 있으며, 따라서 분자드래그펌프의 작동조건을 고려하면 출구압에 의한 유동역방향의 통과확률이 입구압력에는 무관하므로, 전통과확률 즉 펌핑확률은 출구압력의 일정수준까지는 출구압력에 관계없이 일정한 값을 갖는다고 생각할 수 있다. 이것은 배기속도 또는 유량(throughput) 또한 이 범위내에서 채널 길이에 관계없이 일정한 값을 갖게 된다는 것을 의미한다.

최대압축비  $K_0$  계산은 펌프 출구를 벽으로 간주하면 쉽게 계산된다. 최대압축비는 지금까지 펌프입구의 압

력에 관계없이 채널 길이/높이의 비와 움직이는 벽의 속도  $V$ 에 따라 지수적으로 증가하는 것으로 생각되어 왔다. 이 이론은 채널 내부의 유동이 자유분자영역이라는 가정을 기본으로 하고 있다. 그러나 분자간의 충돌이 있을 경우, 이러한 충돌은 역방향으로 흐르는 기체의 흐름을 방해하여 천이 유동영역으로 갈수록 최대압축비가 증가하지만, 유동이 연속체영역이 되면서 벽과 충돌한 기체분자들이 멀러가지 못하고, 벽의 영향이 벽 근처에만 국한되어 다시 압축비가 감소되는 효과가 있다(Fig. 6, 7). 그림에서  $K_0$ 가, 이론에서 예측한 것처럼,  $L/H$ 에 따라서는 대략 지수적으로 변화한다고 생각할 수 있으나(로그 그래프에서 직선으로 나타남), 벽속도에 따라서는 지수적으로 변화하지 않는 것을 알 수 있다. 따라서 최대압축비를 이론의 변수조합으로 그릴 경우 그 값이 조합의 방법에 따라서 상당한 산포도가 존재하게 된다(Fig. 8).

여러 변수조합에 따라 계산을 수행한 결과에 의하면, 드래그펌프의 성능은 속도비  $V/V_{mp}$ , 채널길이비  $L/H$ , 입구압력  $Kn_1$ , 그리고 출구압력  $Kn_2$ 의 4개 변수만에 의해 좌우된다. 여기서 기하학적 변수인  $L$ 과  $H$ 가 하나의 조합  $L/H$ 로 묶일 수 있다는 것은 앞으로 해석이나 실험에 매우 큰 의미를 갖는다.

### 5. 결 론

계대형 분자드래그펌프의 배기 및 압축특성을 강구분자모델과 벡터화된 충돌기법을 도입한 DSMC 방법을 이용하여 해석하였다. 이러한 해석 결과 다음과 같은 결론을 얻을 수 있었다.

- (1) 유동방향 기체분자의 통과확률은 벽 속도에 따라서 증가하게 되지만 1보다 작은 일정한 값에 접근하게 된다.
- (2) 펌핑확률의 변화는 벽 속도에 크게 의존하지만 채널 길이에는 별로 영향을 받지 않는다. 채널 길이가 극히 작을 경우 펌프 출구의 압력은 유동방향의 통과확률에 영향을 주지만, 일반적인 작동조건인 경우 유동방향의 통과확률은 펌프 출구압력에 거의 영향을 받지 않는다.
- (3) 일반적으로 역유동의 통과확률은 0으로 볼 수 있으며, 따라서 드래그펌프의 배기속도는 유동방향 통과확률에 의해서만 결정된다.
- (4) 최대압축비는 작동되는 유동영역에 따라서 크게 영향을 받음으로, 기존의 이론을 유동영역을 고려하지

않고 사용할 경우 큰 오차가 발생할 수 있다.

### 참고문헌

1. N. Liu and S.J. Pang, *Vacuum* **41**, 2015 (1990).
2. A. Roth, *Vacuum Technology*, (North-Holland, Amsterdam, 1976).
3. M. Wutz, H. Adam and W. Walcher ed., *Theory and Practice of Vacuum Technology* (Friedr. Vieweg & Sohn, Braunschweig/Wiesbaden, 1989).
4. G.A. Bird, *Molecular Gas Dynamics* (Univ. Oxford Press, Clarendon, Oxford, 1976).
5. I. D. Boyd, *J. of Computational Physics* **96**, 411 (1991).