パイプコンダクタンスの対称性について(II) 鏡面反射

楠 本 淑 郎^{*1}

On the Symmetry of Molecular Flows through the Pipe of an Arbitrary Shape (II) Specular Reflection

Yoshiro KUSUMOTO^{*1}

ULVAC Inc., 2500 Hagisono Chigasaki 253-8543 Kanagawa

(Received March 14, 2005, Accepted July 1, 2006)

Mathematical consideration is given to the symmetry of free molecular flows through the pipe of an arbitrary shape. In the previous paper (I), it was shown that the diffuse reflection based on a stochastic model conserves the symmetry if and only if it obeys cosine law. To explore whether a specular reflection conserves the symmetry, a new framework including both the stochastic and deterministic models was developed. Using this unified framework it immediately follows that the specular reflection conserves the symmetry, even when arbitrarily mixed with the cosine law reflection. In contrast with the stochastic model, the deterministic model allows innumerable symmetry-preserving reflection rules.

1. はじめに

固体壁での気体分子の反射則には、入射方向の情報が完全に初期化されてランダムに再放出される統計論的モデルと、入射方向により反射方向が一意に決まる決定論的モデルがある。ここでは統計論的モデルを拡散反射、決定論的モデルをビーム反射と総称する。余弦則反射は拡散反射に属し、鏡面反射はビーム反射に属する。

先の論文¹⁾(以降 I と表記)において、拡散反射を行う任意形状パイプのコンダクタンスが対称であるためには、壁での反射側が余弦則を満たすことが必要十分であることを見た。ここでは Clausius の積分方程式²⁾を拡張して、ビーム型と拡散型を統一的に扱える共通な枠組を作り、鏡面反射がパイプコンダクタンスの対称性を保存する事、対称性を保存するビーム反射則は無数に存在する事を示す。(ただし鏡面反射以外は全て数学的虚構である。)

その際、前提条件として以下の仮定をおく。

- (A) 壁での粒子束の保存則がなりたつ。
- (B) ビームパスは合流も分岐もしない。

条件(A)は I と同様である。(B)はビーム反射のためだけに付加された条件で、ビーム反射を写像とみなした際の単射性を要請することに等しい。

なお読者の便宜のため、しばしば定義無しで慣用的に使用される数学記号の一覧表を **Table 2** として付した。

2. 計算の規則

I と同様の問題設定を行う。有界な連結領域 $\Omega \subset \mathbb{R}^3$ を考え、区分的に滑らかな境界を $\partial\Omega$ とする。 $\partial\Omega$ は壁 W と平面の一部を成す孔 $H_k (k=1, 2, \dots, N)$ よりなる。 H_k の非連結和を H とする。面法線が定義できない点は W の零集合だから予め除外してよい。(I (Fig. 1) 参照)

孔 k は熱分子圧力 ϖ_k (入射頻度と同じ) の一様等方なりザバーに連結されている。この状態を $\varpi = (\varpi_1, \varpi_2, \dots, \varpi_N)$ と表記し、特に $\varpi = (1, 1, \dots, 1)$ の時、 $\varpi = \mathbf{1}_N$ と略記する。

点 $x \in \partial\Omega$ で方向 (θ_x, φ_x) を持つビーム流束を $(\zeta_i, \zeta_e)(x, \theta_x, \varphi_x)$ と書く。添字 i, e はそれぞれ Ω から $\partial\Omega$ への入射、 $\partial\Omega$ から Ω への放射 (または反射) を表す。 (θ_x, φ_x) は x 近傍に付随した局所座標系で、 $\theta_x \in [0, \pi/2)$ は内向き面法線方向から測った極角、 $\varphi_x \in [0, 2\pi) \bmod 2\pi$ は x 接平面毎に定められた方向から測った方位角である。付随する近傍が明らかでない場合は引数と添字の x を省略する。入射角と反射角を区別する必要があるときには (θ, φ) に添字 i, e を付す。(以降、添字が i または e のとき、 $i(e)$ と略記する。)

$\zeta_{i(e)}$ の定義域として、視野球 (面) $S_{i(e)}(x)$ を導入する。視野球は点 x を南極に、面法線を地軸に持つ面積 1 の球面で、入射球と反射球が二重に重なったものと定義する。但し南極点は除く (**Fig. 1**)。

計算には以下の規則を適用する。

[規則 1] x における全流束 $\sigma_{i(e)}(x)$ は

$$\sigma_{i(e)}(x) = \langle \zeta_{i(e)}(x, \theta_{i(e)}, \varphi_{i(e)}) \rangle (x), \quad (1)$$

で与えられる。ただし

$$\langle \cdot \rangle (x) \equiv \pi^{-1} \oint_0^1 \int_0^{2\pi} \cdot \cos \theta_{i(e)} d(\cos \theta_{i(e)}) d\varphi_{i(e)},$$

である。 $\sigma_{i(e)}$ は、 $\zeta_{i(e)}$ の $S_{i(e)}$ 上での面平均に他ならない。

[規則 2] 孔の点 $x \in H_k$ では以下の関係が成り立つ。

$$\zeta_e(x, \theta, \varphi) = \sigma_e(x) = \varpi_k \in \mathbb{R}_{\geq 0}. \quad (2)$$

[規則 3] 壁の点 $x \in W$ で全流束は保存量である。

$$\sigma_e(x) = \sigma_i(x) = \sigma(x) \quad (3)$$

[規則 4] 並進 $(y, \theta_y, \varphi_y) \mapsto (x, \theta_x, \varphi_x)$ の下でビーム流束は保存される。即ち $\overline{xy}$ が視線であるとき

$$\zeta_i(x, \theta_x, \varphi_x) = \zeta_e(y, \theta_y, \varphi_y), \quad (4)$$

ここで、 θ_x, θ_y は $\overline{xy}$ が点 x, y での面法線と成す極角、 φ_x, φ_y は $\overline{xy}$ が x, y 接平面に落とす影の方位角であり、独立変数ではない。

^{*1} 株式会社アルバック (〒253-8543 神奈川県茅ヶ崎市萩園2500)

Fig. 1 The specular reflection rotates $S_i(x)$ by 180 degree on its axis, while the cosine law reflection redistributes the averaged incident flux uniformly over $S_e(x)$.

[規則 5] ビーム反射 B とは

$$B: (\theta_i, \varphi_i, \zeta_i) \mapsto (\theta_e, \varphi_e, \zeta_e)$$

で定義され、壁でのビーム流束は保存される。即ち立体角 ω を $d\omega_{i(e)} = d \cos \theta_{i(e)} d\varphi_{i(e)}$ で定義して

$$\zeta_e(x, \theta_e, \varphi_e) \cos \theta_e d\omega_e = \zeta_i(x, \theta_i, \varphi_i) \cos \theta_i d\omega_i. \quad (5a)$$

特に鏡面反射に対しては

$$(\theta_e, \varphi_e) = (\theta_i, \varphi_i + \pi), \quad (5b)$$

$$\zeta_e(x, \theta_e, \varphi_e) = \zeta_i(x, \theta_i, \varphi_i) \quad (5c)$$

[規則 6] 拡散反射 $D(\theta_e, \varphi_e)$ とは

$$\zeta_e(x, \theta_e, \varphi_e) = \sigma(x) D(\theta_e, \varphi_e) \quad (6a)$$

で定義され、(3) を満たす。即ち

$$\langle D(\theta_e, \varphi_e) \rangle = 1. \quad (6b)$$

特に余弦則のときは

$$D(\theta_e, \varphi_e) = 1, \quad (6c)$$

である。□

便宜上規則 5 と 6 は別々に与えたが両者は $\mathbb{S}^2 \times \mathbb{R}_{\geq 0}$ からそれ自身への写像として統一的に扱う事ができる。

例えば、 $S_i(x)$ 上で左半球が昼 ($\zeta_i = 1$)、右半球が夜 ($\zeta_i = 0$) であるとすれば、鏡面反射では $S_e(x)$ 上で昼夜が反転し、余弦反射では $S_e(x)$ は全面薄暮 ($\zeta_e = 1/2$) となる (Fig. 1)。

ここで上の定義と規則が well-defined である事を余弦反射則の場合に確かめておく。Clausing の積分方程式は

$$\sigma_i(x) = \int_{y \in V(x)} K(x, y) \sigma_e(y) dy, \quad (7)$$

であった。ここで $K(x, y)$ は y から x に粒子が飛ぶ確率、 $V(x)$ は x と 1 本の視線で連結できる可視領域 ($\partial\Omega$ の部分集合) である。余弦則の場合

$$K(x, y) = \frac{1}{\pi} \frac{\cos \theta_x \cos \theta_y}{r_{xy}^2} \quad (8)$$

積分測度 dy は

$$dy = r_{xy}^2 (\cos \theta_y)^{-1} d(\cos \theta_x) d\varphi_x, \quad (9)$$

だから、(8) (9) を (7) に代入して

$$\begin{aligned} \sigma_i(x) &= \int_{S_i(x)} \pi^{-1} \sigma_e(y \in V(x)) \cos \theta_x d(\cos \theta_x) d\varphi_x \\ &= \int_{S_i(x)} \pi^{-1} \zeta_e(y \in V(x), \theta_y, \varphi_y) \cos \theta_x \\ &\quad \times d(\cos \theta_x) d\varphi_x \\ &= \langle \zeta_i(x, \theta_x, \varphi_x) \rangle(x) = \sigma_i(x), \end{aligned}$$

となり無矛盾である事が示された。2 番目の等号には (2) と (6a, c) を、3 番目の等号には (4) を、最後の等号には (1) を用いた。

3. 対称性を保存する反射則

命題 1 鏡面反射はパイプコンダクタンスの対称性を保存する (証明)

余弦則反射を行う壁 W でできたパイプを考え、 $\varpi = \mathbf{1}_N$ とする。この時 I の命題 3 より、壁上至るところで $\sigma(\forall x \in W) = 1$ 、かつコンダクタンスの対称性が成り立っている。(6a, c), (4), (2) より壁の任意の点 $x \in W$ で

$$\zeta_i(x, \theta_x, \varphi_x) = 1 \quad a.e. \text{ on } S_i(x), \quad (10)$$

$$\zeta_e(x, \theta_x, \varphi_x) = 1 \quad a.e. \text{ on } S_e(x). \quad (11)$$

が成り立つ。ここで任意の近傍 $U(x) \subset W$ を余弦反射壁から鏡面壁に置換する。鏡面反射は、地軸の周りに 180° 回転させた入射球を反射球とする写像だから、(3) を満たし、かつ反射則 (10) $\mapsto$ (11) は上の置換により不変である。(正確には (11) に (a.e.) がつくのは鏡面反射のときだけ。) 任意近傍 $U(x)$ で余弦反射壁と鏡面壁は等価だから壁全面を鏡面壁で置換してよい。□

命題 1 は $\varpi = \mathbf{1}_N$ のとき余弦反射と鏡面反射が全く区別できない事を主張しているのだから、次の系が成り立つ。

系 2 鏡面反射と余弦反射が任意比率で混合した混合反射壁 (比率は場所毎にまたは時間によって変化してもよい) でできたパイプのコンダクタンスは対称である。

(証明)

上の議論より明らか。□

系 2 と同等の結果については全く別のアイデアに基づいた証明が知られている³⁾。

より強く次の定理が主張できる。

定理 3 条件 (A) (B) のもとで、任意形状のパイプコンダクタンスが対称であるためには、壁で次の反射則が成り立つ事が必要十分である。

$$\zeta_i(x, \theta_i, \varphi_i) = 1 \mapsto \zeta_e(x, \theta_e, \varphi_e) = 1 \quad \text{for } \forall x \in W \quad (12)$$

即ち等方的な入射に対して等方的な反射を行う。

(証明)

十分性は命題 1 より明らかなので必要性の証明を行う。

I-命題 5 より、コンダクタンス対称性と

$$\sigma_i(\forall y \in H) = 1 \quad \text{for } \varpi = \mathbf{1}_N, \quad (13)$$

は同値であった。この同値性は条件 (A) からの直接の帰結であり、壁での反射則とは無関係に成り立つ。 W を三角形分割 (Δ_k , ($k=1, 2, \dots, M$)) して、 $\partial\Omega$ を多面体表面で近似しよう。(I-Fig. 2 参照。) 全ての Δ_k を孔と見なして圧力 1 のリザーバーを連結する。($\Delta_k = H_{N+k}$, $\varpi = \mathbf{1}_{N+M}$) この時、 $\partial\Omega$ の殆ど至る所で $\zeta_i = \zeta_e = 1$ が成り立っている。

任意の点 $x_0 \in \Delta_1$ の近傍 $U(x_0) \subset \Delta_1$ を取り $U(x_0)$ を反射則 $(\theta_i, \varphi_i, \zeta_i) \mapsto (\theta_e, \varphi_e, \zeta_e)$ を持つ壁に置換する. $U(x_0)$ は平面だから $x_1 \in U(x_0)$ での ζ_i, ζ_e の値は x_1 に依らない. ζ_i に関しては(4)と(2)より

$$\zeta_i(x_1, \theta_i, \varphi_i) = 1 \quad a.e. \quad \text{on } S_i(\forall x_1 \in U(x_0)),$$

が成り立つ. x_0 から任意の方向 $\omega_0 = (\theta_0, \varphi_0)$ へ延ばした視線の先を点 $y \in H$ とする. ω_0 近傍 $\tilde{U}(\omega_0)$ を, x_1 が $U(x_0)$ 内を限なく動くとき視線 $\overline{x_1 y}$ が $S_e(x_1)$ から切り取る領域と定義する. この時 $U(x_0)$ を壁で置換することにより生ずる, y での入射流束の変化量 $\delta\sigma_i(y)$ は

$$\delta\sigma_i(y) = \int_{\tilde{U}(\omega_0)} (\zeta_e(x_1, \theta_e, \varphi_e) - 1) \cos \theta \, d\cos \theta \, d\varphi$$

で与えられる. (13)より $\delta\sigma_i(y) = 0$ を要請して, $U(x_0)$ の変形により $\tilde{U}(\omega_0)$ を任意に変形させ得ることを考慮すれば,

$$\zeta_e(x_1, \theta_e, \varphi_e) = 1 \quad a.e. \quad \text{on } \tilde{U}(\omega_0), \quad (14)$$

でなくてはならない. y を動かせば $\tilde{U}(\omega_0)$ で $S_e(x_1)$ を被覆できるから, (14)は (*a.e. on $S_e(\forall x_1 \in U(x_0))$*) に拡張できる. 更に x_0 の選び方は任意だから (*a.e. on $S_e(\forall x_0 \in \Delta_1)$*) まですべて拡張できて, Δ_1 のあらゆる点で(12)を満たす必要がある. 次に Δ_2 を壁で置換する状況を考えて. 違いは既に壁 Δ_1 が存在する事である. しかし Δ_2 の置換によって, 孔部分ばかりでなく Δ_1 上の入射流束を変える事も許されない. なぜなら Δ_1 に圧力1のリザーバーに連結したモニター用の孔を開けて, そこでのコンダクタンス対称性 ($\sigma_i = 1$) を要求することはいつでも可能だからである. モニター孔の存在によって惹起される流束の変化がない事は, 任意の観測点の周りでモニター孔を自由に變形させても観測点での流束が変化しないことから分かる. モニター孔面積を充分小さく取れば, モニター孔への入射流束はモニター孔がない壁への入射流束に漸近する. 従って Δ_2 の置換にも同じ反射則の壁材を用いなくてはならない. 以下帰納的に $\Delta_k (k > 2)$ を壁に置換し, $M \rightarrow \infty$ (の極限を取って元のパイプを復元すれば, 題意の必要性が証明された. □

定理3は, パイプコンダクタンスという非局所的な対称性が, 局所的な反射則の等方性に還元できる事を示している. (12)と条件(A)は与えられた反射則が対称性を保存するか否かを判定するばかりでなく, 反射モデルを特定すればそれから対称性を保存する反射則を生成することもできる. 例えば拡散反射では(12)が満たされれば(6b)は自動的に満足され, 対称性を保存する反射則は(6c)に一意に決まる. 一方, ビーム反射では (θ_e, φ_e) が (θ_i, φ_i) の関数であるため, 個々の反射則について(12)と(5a)が同時に成り立つ事を検証しなくてはならない.

系4 対称性を保存するビーム反射則は無数に存在する.
(証明)

(12)を(5a)に代入して

$$|\cos \theta_e \, d\omega_e| = |\cos \theta_i \, d\omega_i|. \quad (15)$$

(15)を満たす反射は視野球の面積要素を保存する保測変換である. 連続な写像としては地軸周りの任意角回転, 地軸を含む任意平面による鏡映, 赤道面に関する鏡映, 及びその組み合わせがある. □

厳密には, 南極点は反射球から除外しなければならない.

しかし条件(B)より南極を反射点として持つ入射点は1点だけだから, 次節で見るように南極を不動点としない反射則を用いても実際の計算では特に問題を生じない.

4. モンテカルロ計算

定理3の証明からコンダクタンス対称性の同値条件(13)は入射球面上でより精密化できる事がわかる.

系5 条件(A)(B)の下で, 任意形状パイプのコンダクタンスが対称である事と, 孔の各点で

$$\zeta_i(y, \theta_i, \varphi_i) = 1, \quad (a.e. \quad \text{on } S_i(\forall y \in H)) \quad \text{for } \varpi = \mathbf{1}_N, \quad (16)$$

が成り立つ事は同値である.

(証明) 定理3の証明より, $\varpi = \mathbf{1}_N$ の時, 孔から見える点では殆ど至るところで $\zeta_e = 1$ であるから, (16)は(4)より直ちに導かれる. □

系5は全ての孔が等圧である時, 孔に入射する粒子(他の孔からの透過粒子と, その孔自身から発した反射粒子の合算)は余弦則に従う事を主張している. 対称性の議論だけでは透過粒子と反射粒子の入射球面上の分布は分からない. 透過粒子と反射粒子の寄与を分離するため(15)(16)の検証を兼ねて簡単な数値実験を行う.

中央部に小さな衝突を持つ, 非対称な2次元流路を考える(Fig. 2). 左右の開口をそれぞれ孔1, 2 (H_1, H_2) とし, 左右孔から各々 10^6 個の粒子を余弦則で発射して, H_1, H_2 に入射する粒子をカウントする. 横軸を規格化された入射座標, 縦軸を入射方向と面法線がなす余弦に取り, 透過粒子を青, 反射粒子を赤でマッピングしたものが Fig. 3 である. マップ左のヒストグラムは $[0, 1]$ を100分割した区間に余弦値が入る全入射粒子の累積数, 同じくマップ下のヒストグラムは入射座標に関する累積数である. 但し H_1, H_2 から出発した粒子をカウントする際にはそれぞれ粒子1個当たり1, γ を加算するものとする. ここで γ は $|H_2|/|H_1|$ で定義される面積比で, Fig. 2 では2.5にとってある.

反射則としては以下の5種を適用した.

- $D(\theta_e) = 1$,
- $\theta_e = \theta_i, \varphi_e = \varphi_i + \pi$,
- $\theta_e = \theta_i, \varphi_e = \varphi_i + 3\pi/2$,
- $\theta_e + \theta_i = \pi/2, \varphi_e = \varphi_i + \pi$,
- $\sqrt{\theta_e} + \sqrt{\theta_i} = \sqrt{\pi/2}, \varphi_e = \varphi_i + \pi$.

Fig.2 An asymmetric 2-dimensional channel with a small partition was used for Monte Carlo calculation. Let the left and right openings be H_1 and H_2 , from which 10^6 test particles emanate inward according to the cosine law.

Fig. 3 The particles impinging on H_1 and H_2 are mapped in a plane with the abscissa of normalized incident position, and with the ordinate of incident cosine value, where blue and red points denote the transmitted and reflected particles, respectively. The left histogram represents the distribution of cosine values, and the bottom histogram represents the distribution of incident positions.

a)は余弦則反射, b)は鏡面反射, c)は地軸周りの270°回転 (左折), d)は球中心に関する点対称変換 (赤道面に関する鏡映+地軸周りの180°回転), e)は球面から球面への全単射だが(15)を満たさない例である。(ここでのモンテカルロ

Table 1 The transmission probabilities T_{12} and T_{21} obtained from the Monte Carlo calculation are listed for five reflection rules, together with a symmetry index $\gamma T_{21}/T_{12}$

Rule	T_{12}	T_{21}	$\gamma T_{21}/T_{12}$
a	0.550130	0.220368	1.001436
b	0.718983	0.286843	0.997392
c	0.630150	0.252078	1.000071
d	0.834919	0.333727	0.999280
e	0.790922	0.116555	0.368415

Table 2 Commonly used symbols

Symbol	Definition
$\mathbb{R}^3$	3-dimensional Euclidean space
$\mathbb{R}_{\geq 0}$	non-negative real number
$\mathbb{S}^2$	2-dimensional sphere surface
<i>a.e.</i>	almost everywhere = excluding null set
$\rightarrow$	map (between domains)
$\mapsto$	map (between elements)
$\forall x$	for all x
$\square$	Q.E.D.

計算では反射に際し粒子個数は保存されるとしている。これはビーム流束のビームパスに沿っての保存(5c)を仮定することに等価だから、一般的な(5a)の代わりに(15)が使える。) a), b)はレファランズとして, c)は時間反転に対して粒子パスが不変でない例として, d)は入射角と反射角が異なる例として挙げた。e)はd)の極角の式の冪を1から1/2に変更したもので, 1/2に特別の意味はない。d), e)は南極点を不動点としない変換の例でもある。

Table 1に H_1 から H_2 , H_2 から H_1 への各透過確率 T_{12} , T_{21} と対称性の指標 $\gamma T_{21}/T_{12}$ を掲げた。e)のみが対称性を満たさない。対称性を満たすa)~d)では, Fig. 3のヒストグラムから, 孔のどの点にも一様に粒子が入射すること, 入射方向が余弦則分布することが分かる。ヒストグラムの単純さにも拘わらず, 透過粒子と反射粒子はマップ中で複雑に入り混じり, ビーム反射則はときに不思議な縞模様を生成する。任意の反射則が与えられたとき, 方程式系(1)~(6)の解が持つ性質については対称性以外ほとんど何も分かっていない。

5. おわりに

対称性を保存する反射則は無数にあるといっても, それはあくまでも特殊なクラス((5a)の制限の下, (12)を満たす)に属する反射則であり, そうでないもののほうが選択肢としては圧倒的に多い。一方, Iでも述べたようにコンダクタンスの対称性が破れていれば第1種永久機関ができてしまう。個々の気体分子が壁と衝突する際, 永久機関を作らないよう特殊なクラスの反射則を選択しているとは思えないから, これは一種のパラドクスである。しかし「特殊なクラス」の含意を検討すれば, (5a)は物質の保存則に他ならない

し，反射則(12)が要請するのは等方的な入力に対し等方的な出力を行うブラックボックスの存在である．換言すれば，優先される特別な方向・空間等方性を破る特別な物理的機構が存在しなければ反射則は等方的にならざるを得ないともいえる．

Clausing の積分方程式も，その拡張である規則 1～6 も時間依存性を顕には含まない．即ち巨視的時間平均としての定常状態を記述する．微視的時間スケール（～衝突周波数の逆数）で見れば，一様な真空中におかれたパイプ内部にも刻々流れが生じている．しかし巨視的時間に亘ってその平均をと

れば，正味の流れはゼロであり，壁の各点ではあたかも反射則(12)が成立しているように見えるのであろう．

〔文 献〕

- 1) Y. Kusumoto: J. Vac. Soc. Jpn, **48**(11) (2005) 592 [in Japanese].
- 2) P. Clausing: Ann. Physik, **12** (1932) 961; republished in J. Vac. Sci. Technol., **8**(5) (1971) 636.
- 3) Y. Sone, K. Aoki: *Bunshi Kitai Rikigaku (Molecular Gas Dynamics)* (Asakura, Tokyo, 1997) 2nd. Ed. Chap. 2.5E p. 54 [in Japanese].