

弱希薄気体のすべり流理論と Knudsen 層解析 I

Generalized slip-flow theory and its related Knudsen-layer analysis for a slightly rarefied gas I

初鳥匡成 (Masanari Hattori)¹, 高田滋 (Shigeru Takata)²

¹ 京都大学・機械理工学専攻 (Department of Mechanical Engineering and Science, Kyoto University)

² 京都大学・航空宇宙工学専攻及び高等研究院流体基礎工学研究部門
(Department of Aeronautics and Astronautics & Advanced Research
Institute of Fluid Science and Engineering, Kyoto University)

Abstract

A systematic asymptotic analysis of the Boltzmann equation shows that the overall behavior of a gas can be described by fluid-dynamic-type equations with the appropriate slip/jump boundary condition when the Knudsen number is small [the generalized slip-flow theory (Sone, Molecular Gas Dynamics, 2007)]. Near the boundary, a non-fluid-dynamic correction (the Knudsen-layer correction) to the overall solution is required. Although the generalized slip-flow theory has been established up to the second order of the Knudsen number expansion, the data of those corrections have been completed only for the BGK model. Completing the corresponding data for the Boltzmann equation has been demanded. In the present work, partial results of completing the data for a hard-sphere gas under the diffuse reflection condition are reported.

1 まえがき

低圧な気体や微小な系の気体の振舞いは、通常の流体力学では正確に記述できない。これは、気体分子の平均自由行程が系の代表長と同程度となり、局所平衡の仮定が破綻するからである。そのような系の気体を希薄気体という。気体分子の平均自由行程と系の代表長の比は気体の希薄の度合いをあらわす重要なパラメータであり、Knudsen 数とよばれている。

幸いにして、Knudsen 数が小さい場合には、気体の振舞いは通常の流体力学を適切に補正することで調べられることがボルツマン方程式の系統的な漸近解析によって明らかにされている (曾根の一般すべり流理論 [1, 2, 3])。一般すべり流理論によれば、気体の振舞いは大域的には流体力学の方程式と所定の適切な「とび・すべり」の境界条件で記述できる。ここで「とび・すべり」とは、物体表面で、気体と物体の温度が異なる (温度のとび) こと、流速が物体の移動速度に一致しない (流速のすべり) ことをいう。境界近傍では、平均自由行程程度の厚みの層内で上述の大域的な記述に非流体力学的な補正 (Knudsen 層補正) を施す必要がある。

一般すべり流理論は Knudsen 数展開の 2 次まで構築されているが、Knudsen 層補正のデータはボルツマン方程式を単純化した BGK モデル方程式の場合にしか完備されていなかった [1, 2]。本来のボルツマン方程式の場合の対応する結果が必要とされている。本報は、拡散反射条件下の剛体球分子気体に対し、未知の Knudsen 層補正を求める取り組みの第一報である。

2 問題と仮定

境界の形状が十分滑らかであること以外任意な領域を占める希薄気体を考える。ここで次の仮定をおく。(i) 気体の振舞いは剛体球分子気体に対するボルツマン方程式により記述される。(ii) 気体分子は物体表面で拡散反射則にしたがって散乱される。(iii) 気体の状態の密度 ρ_0 , 温度 T_0 の基準静止平衡状態からのずれは小さく, 方程式・初期条件・境界条件の線形化が許される。(iv) 基準静止平衡状態における気体分子の平均自由行程 ℓ_0 は系の代表長 L に比べ十分短い。(v) 気体領域は時間と共に変形しない。(vi) 初期時刻に気体は基準静止平衡状態にあり, 周囲環境は気体中の拡散現象と同程度の時間尺度でゆっくりと変化する。

3 記号

位置を Lx_i , 時間を $t_0 t$ で表す。 t_0 は系の代表時間で, 拡散現象の特性時間にとる [仮定 (vi), $t_0 \sim \rho_0 L^2 / \mu_0$, μ_0 は基準静止平衡状態での粘性係数で $\mu_0 = O(\ell_0 / L)$]。気体の密度を $\rho_0(1 + \omega)$, 流速を $(2RT_0)^{1/2} u_i$, 温度を $T_0(1 + \tau)$, 圧力を $p_0(1 + P)$ で表す。ここに R は気体の単位質量当たりの気体定数, $p_0 = \rho_0 RT_0$ である。境界の移動速度を $(2RT_0)^{1/2} u_{iw}$, 温度を $T_0(1 + \tau_w)$ で表す。Knudsen 数 Kn を $Kn = \ell_0 / L$, 定数 ε を $\varepsilon = (\sqrt{\pi}/2)Kn$ で定める。

4 非定常系の一般すべり流理論 [3, 4]

2 節で述べた気体の振舞いは大域的には流体力学的な方程式によって記述でき, それに境界近傍の平均自由行程程度の厚みの層 (Knudsen 層) 内で補正を施して表すことができる (一般すべり流理論)。各巨視量 h ($h = \omega, u_i, \tau, P$) の流体力学的部分を h_H , Knudsen 層内部での補正を h_K と表す: $h = h_H + h_K$ 。

このとき, 気体の大域的な振舞いは次の流体力学的方程式 [と後述の境界条件 (2a)–(2c)] により ω_H, u_{iH}, τ_H について ε の 2 次まで, P_H について定数分の不定性を除いて ε の 3 次まで正しく記述される:

$$\frac{\partial u_{iH}}{\partial x_i} + \varepsilon \frac{\partial \omega_H}{\partial t} = 0, \quad (1a)$$

$$\frac{\partial u_{iH}}{\partial t} + \frac{1}{2\varepsilon} \frac{\partial P_H^*}{\partial x_i} - \frac{1}{2} \gamma_1 \frac{\partial^2 u_{iH}}{\partial x_j^2} + \frac{\varepsilon^2}{4} (\gamma_1 \gamma_{10} - 2\gamma_6) \frac{\partial^4 u_{iH}}{\partial x_j^2 \partial x_k^2} = 0, \quad (1b)$$

$$\frac{\partial \tau_H}{\partial t} - \frac{2}{5} \frac{\partial P_H}{\partial t} - \frac{1}{2} \gamma_2 \frac{\partial^2 \tau_H}{\partial x_j^2} + \frac{\varepsilon^2}{10} \left(\gamma_2 \gamma_3 - \frac{13}{2} \gamma_{11} \right) \frac{\partial^4 \tau_H}{\partial x_j^2 \partial x_k^2} = 0, \quad (1c)$$

$$P_H^* = P_H - \frac{\varepsilon^2}{6} (\gamma_2 \gamma_1 - 4\gamma_3) \frac{\partial^2 \tau_H}{\partial x_j^2} + \frac{\varepsilon^2}{5} \gamma_1 \frac{\partial P_H}{\partial t}, \quad (1d)$$

$$P_H = \omega_H + \tau_H. \quad (1e)$$

ここで, 式 (1b) の $\partial P_H^* / \partial x_i$ の項には $1/\varepsilon$ が現れているが, これは P_H^* の空間変化が ε の 1 次からはじまる (ε の 0 次では P_H^* は x_i に依らない) ことを意味する。

γ_i は無次元の輸送係数で, BGK モデルの場合 $\gamma_i = 1$, 剛体球分子気体の場合 $\gamma_1 = 1.270042427$, $\gamma_2 = 1.922284066$, $\gamma_3 = 1.947906335$, $\gamma_6 = 1.419423836$, $\gamma_{10} = 1.63607346$,

$\gamma_{11} = 2.7931173$ である.

方程式系 (1) に対するとび・すべりの境界条件と Knudsen 層内の補正は次で与えられる:

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} u_{iH} n_i \\ u_{iK} n_i \end{bmatrix} = & \varepsilon^2 \left[2\bar{\kappa} \frac{\partial \tau_H}{\partial x_i} n_i - \frac{\partial^2 \tau_H}{\partial x_i \partial x_j} (\delta_{ij} - n_i n_j) \right] \begin{bmatrix} \int_0^\infty Y_2^{(1)}(z) dz \\ - \int_\eta^\infty Y_2^{(1)}(z) dz \end{bmatrix} \\ & + \frac{\varepsilon^2}{2} \frac{\partial}{\partial x_i} \frac{\partial \overline{u_{jH}}}{\partial x_k} n_i n_j n_k \begin{bmatrix} \int_0^\infty Y_1^{(1)}(z) dz \\ - \int_\eta^\infty Y_1^{(1)}(z) dz \end{bmatrix}, \end{aligned} \quad (2a)$$

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} (u_{iH} - u_{iw}) t_i \\ u_{iK} t_i \end{bmatrix} = & \varepsilon \frac{\partial u_{iH}}{\partial x_j} n_i t_j \begin{bmatrix} b_1^{(1)} \\ Y_1^{(1)}(\eta) \end{bmatrix} + \varepsilon \frac{\partial \tau_H}{\partial x_i} t_i \begin{bmatrix} b_2^{(1)} \\ Y_2^{(1)}(\eta) \end{bmatrix} \\ & + \varepsilon^2 \frac{\partial^2 \tau_H}{\partial x_i \partial x_j} n_i t_j \begin{bmatrix} b_3^{(1)} \\ Y_3^{(1)}(\eta) \end{bmatrix} + \varepsilon^2 \frac{\partial}{\partial x_i} \frac{\partial \overline{u_{jH}}}{\partial x_k} n_i n_j t_k \begin{bmatrix} b_4^{(1)} \\ Y_4^{(1)}(\eta) \end{bmatrix} \\ & + \varepsilon^2 \bar{\kappa} \frac{\partial u_{iH}}{\partial x_j} n_i t_j \begin{bmatrix} b_5^{(1)} \\ Y_5^{(1)}(\eta) \end{bmatrix} + \varepsilon^2 \kappa_{ij} \frac{\partial u_{jH}}{\partial x_k} n_k t_i \begin{bmatrix} b_6^{(1)} \\ Y_6^{(1)}(\eta) \end{bmatrix} \\ & + \varepsilon^2 \kappa_{ij} \frac{\partial \tau_H}{\partial x_i} t_j \begin{bmatrix} b_7^{(1)} \\ Y_7^{(1)}(\eta) \end{bmatrix} + \varepsilon^2 \bar{\kappa} \frac{\partial \tau_H}{\partial x_i} t_i \begin{bmatrix} b_8^{(1)} \\ Y_8^{(1)}(\eta) \end{bmatrix}, \end{aligned} \quad (2b)$$

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} \tau_H - \tau_w \\ \omega_K \\ \tau_K \end{bmatrix} = & \varepsilon \frac{\partial \tau_H}{\partial x_i} n_i \begin{bmatrix} c_1^{(0)} \\ \Omega_1^{(0)}(\eta) \\ \Theta_1^{(0)}(\eta) \end{bmatrix} + \varepsilon \frac{\partial u_{iH}}{\partial x_i} \begin{bmatrix} c_5^{(0)} \\ \Omega_5^{(0)}(\eta) \\ \Theta_5^{(0)}(\eta) \end{bmatrix} \\ & + \varepsilon^2 \frac{\partial^2 \tau_H}{\partial x_i \partial x_j} (\delta_{ij} - n_i n_j) \begin{bmatrix} c_2^{(0)} \\ \Omega_2^{(0)}(\eta) \\ \Theta_2^{(0)}(\eta) \end{bmatrix} + \varepsilon^2 \frac{\partial^2 \tau_H}{\partial x_j^2} \begin{bmatrix} c_6^{(0)} \\ \Omega_6^{(0)}(\eta) \\ \Theta_6^{(0)}(\eta) \end{bmatrix} \\ & + \varepsilon^2 \frac{\partial}{\partial x_i} \frac{\partial \overline{u_{jH}}}{\partial x_k} n_i n_j n_k \begin{bmatrix} c_3^{(0)} \\ \Omega_3^{(0)}(\eta) \\ \Theta_3^{(0)}(\eta) \end{bmatrix} + \varepsilon^2 \bar{\kappa} \frac{\partial \tau_H}{\partial x_i} n_i \begin{bmatrix} c_4^{(0)} \\ \Omega_4^{(0)}(\eta) \\ \Theta_4^{(0)}(\eta) \end{bmatrix}, \end{aligned} \quad (2c)$$

$$P_K = \omega_K + \tau_K, \quad (2d)$$

$$\bar{\kappa} = \frac{1}{2}(\kappa_1 + \kappa_2), \quad \kappa_{ij} = \kappa_1 \ell_i \ell_j + \kappa_2 m_i m_j. \quad (3)$$

ここで, $\overline{f_{ij}} = f_{ij} + f_{ji} - (2/3)f_{kk}\delta_{ij}$. 式 (2) では添え字 H または w のついた量は境界面上の (無次元) 位置 x_{iw} における値をとるものとする. t_i および n_i は x_{iw} での境界面への単位接ベクトルおよび気体領域に向けられた単位法線ベクトルである. 添え字 K のついた量は, x_{iw} と η に依存する. ここで, η は x_{iw} を原点とする境界法線方向の引き伸ばされた座標で, Knudsen 層内の位置 x_i は $x_i = x_{iw} + \varepsilon \eta n_i$ と表される. κ_1/L および κ_2/L は境界面の 2 つの主曲率で, それらの符号は対応する曲率中心が気体側にあるとき負にとる. ℓ_i および m_i はそれぞれ κ_1 および κ_2 に対応する主方向の方向余弦である. $\partial u_{iH}/\partial x_i$ は ε の 1 次の量である [式 (1a) を参照] ため, 式 (2c) の $\varepsilon \partial u_{iH}/\partial x_i$ に比例する項の大きさは ε の 2 次であることを述べておく. $c_1^{(0)} - c_6^{(0)}$, $b_1^{(1)} - b_8^{(1)}$, $\int_0^\infty Y_1^{(1)}(z) dz$, $\int_0^\infty Y_2^{(1)}(z) dz$ はとび・すべり係数, $\Omega_1^{(0)}(\eta) - \Omega_6^{(0)}(\eta)$, $\Theta_1^{(0)}(\eta) - \Theta_6^{(0)}(\eta)$, $Y_1^{(1)}(\eta) - Y_8^{(1)}(\eta)$ は Knudsen 層関数とよばれている. これ

らの量 $(c_\alpha^{(0)}, \Omega_\alpha^{(0)}(\eta), \Theta_\alpha^{(0)}(\eta)), (b_\beta^{(1)}, Y_\beta^{(1)}(\eta))$ は、それぞれ所定の線形化ボルツマン方程式の空間 1 次元の半無限問題を解くことによって決まる。

式 (2) では ε^2 に比例する項のいくつかに $\bar{\kappa}$, κ_{ij} が現れている。これは境界の曲率効果である。境界の曲率効果を陽に抜き出し、Knudsen 層内の解析を平面境界に隔された半無限領域の要素問題に帰着させているのが、一般すべり流理論の一つの特徴である。

拡散反射条件下の BGK モデルに対しては、全ての要素問題が解かれ、とび・すべり係数および Knudsen 層関数のデータが完備されている [1, 2]。しかし、拡散反射条件下の剛体球分子気体に対しては、これまでに解かれた要素問題は ε の 1 次で現れる $(c_1^{(0)}, \Omega_1^{(0)}, \Theta_1^{(0)})$, $(b_1^{(1)}, Y_1^{(1)})$, $(b_2^{(1)}, Y_2^{(1)})$ と、2 次の $(b_3^{(1)}, Y_3^{(1)})$, $(c_6^{(0)}, \Omega_6^{(0)}, \Theta_6^{(0)})$ の問題のみ [5, 6, 7, 8] *1 であり、これ以外のデータは利用できなかった。幸いにして、最近、線形化ボルツマン方程式の対称関係 [9] を利用して、全てのとび・すべり係数を既に解かれた ε の 1 次の問題に現れる量に関係付けることでその精確な値が得られた [4]。しかし、Knudsen 層関数 $(\Omega_2^{(0)}, \Theta_2^{(0)})$ – $(\Omega_5^{(0)}, \Theta_5^{(0)})$, $Y_4^{(1)}$ – $Y_8^{(1)}$ は依然得られておらず、これらを得るためにはその要素問題を解く必要がある。本稿では、未解決の問題のうち、境界の曲率効果に関係しない $(\Omega_2^{(0)}, \Theta_2^{(0)})$, $(\Omega_3^{(0)}, \Theta_3^{(0)})$, $(\Omega_5^{(0)}, \Theta_5^{(0)})$, $Y_4^{(1)}$ の問題を扱う。これらの問題の解は有限差分法による計算 (文献 [7]) でも求めることは可能である。しかし、本研究ではボルツマン方程式の積分形を利用した新たな解法を用いる。その形式はボルツマン方程式の解の特異性の研究 [10, 11] で有力だったものである。解法を取り換える主な動機は、残る曲率効果に関係する要素問題が非常に微妙な性質を含んでおり、数値解法に新しい工夫を要することにある。

5 Knudsen 層問題

$(2RT_0)^{1/2}\zeta$ を分子速度, $\zeta = \sqrt{\zeta_1^2 + \zeta_2^2 + \zeta_3^2}$, $\mu = \zeta_i n_i / \zeta$ とおく。このとき、半無限問題の要素問題は一般に次の 2 つの形式のいずれか一方に帰着される：

$$\mu\zeta \frac{\partial \phi_\alpha}{\partial \eta} = -\nu(\zeta)\phi_\alpha + C[\phi_\alpha] - \mathcal{I}_\alpha(\eta, \mu, \zeta), \quad (4a)$$

$$\phi_\alpha = -\sigma_\alpha^{(0)} - c_\alpha^{(0)}\zeta^2 + g_\alpha(\mu, \zeta), \quad (\mu\zeta > 0, \eta = 0), \quad (4b)$$

$$\phi_\alpha \rightarrow 0, \quad \text{as } \eta \rightarrow \infty, \quad (4c)$$

$$\mu\zeta \frac{\partial \psi_\beta}{\partial \eta} = -\nu(\zeta)\psi_\beta + C^S[\psi_\beta] - \mathcal{I}_\beta^S(\eta, \mu, \zeta), \quad (5a)$$

$$\psi_\beta = -2b_\beta^{(1)} + g_\beta^S(\mu, \zeta), \quad (\mu\zeta > 0, \eta = 0), \quad (5b)$$

$$\psi_\beta \rightarrow 0, \quad \text{as } \eta \rightarrow \infty. \quad (5c)$$

ここに

$$\nu(\zeta) = \frac{1}{2\sqrt{2}} \left[\exp(-\zeta^2) + \left(2\zeta + \frac{1}{\zeta} \right) \int_0^\zeta \exp(-\xi^2) d\xi \right],$$

である。 C は ζ の関数に対する積分作用素であり、すぐ後で定義する。 g_α , $\mathcal{I}_\alpha$, g_β^S , $\mathcal{I}_\beta^S$ は既知関数である。 $\mathcal{I}_\alpha$, $\mathcal{I}_\beta^S$ は η に関してすみやかに減衰するものとする。解 ϕ_α (または

*1 $(\Omega_1^{(0)}, \Theta_1^{(0)}, \eta)$ は文献 [5] の (Ω, Θ, x_1) に, $(Y_1^{(1)}, Y_2^{(1)}, \eta)$ は文献 [6] の (S, C, x_1) に対応している。 $Y_3^{(1)} = -Y_{a4} - c_1^{(0)} Y_2^{(1)}$, $c_1^{(0)} = 2.4001$ であり, Y_{a4} は文献 [7] で求められた。 $(\Omega_6^{(0)}, \Theta_6^{(0)})$ は文献 [8] の $(\Omega^{(2)}, \Theta^{(2)})$ に対応している。

ψ_β ($\alpha = 1, \dots, 6; \beta = 1, \dots, 8$) は η, μ, ζ の関数である. 与えられた各 $(\mathcal{I}_\alpha, g_\alpha)$ [または $(\mathcal{I}_\beta^S, g_\beta^S)$] に対し, 解 ϕ_α (または ψ_β) は定数 $\sigma_\alpha^{(0)}, c_\alpha^{(0)}$ (または $b_\beta^{(1)}$) と同時にきまる [12]. 作用素 $\mathcal{C}$ は次で定義される:

$$\begin{aligned}\mathcal{C}[\phi] &= \int [k_1(\zeta, \xi) - k_2(\zeta, \xi)] \phi(\xi) d\xi, \\ k_1(\zeta, \xi) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}|\zeta - \xi|} \exp\left(-|\xi|^2 + \frac{|\xi \times \zeta|^2}{|\xi - \zeta|^2}\right), \\ k_2(\zeta, \xi) &= \frac{|\zeta - \xi|}{2\sqrt{2\pi}} \exp(-|\xi|^2).\end{aligned}$$

$\mathcal{C}$ の球対称性および軸対称性により $\mathcal{C}[\phi_\alpha]$ は μ, ζ (と η) の関数となり, $\phi_\alpha(\eta, \mu, \zeta)$ の形の解が適合する. $\mathcal{C}^S$ は μ, ζ (と η) の関数に対し, $\mathcal{C}$ の n_i 方向の軸対称性により次で定義される:

$$\zeta_i t_i \mathcal{C}^S[\psi_\beta] = \mathcal{C}[\zeta_i t_i \psi_\beta].$$

このため, やはり $\psi_\beta(\eta, \mu, \zeta)$ の形の解が適合する. 解が得られれば, $\Omega_\alpha^{(0)}(\eta), \Theta_\alpha^{(0)}(\eta), Y_\beta^{(1)}(\eta)$ はそのモーメントとして得られる:

$$\Omega_\alpha^{(0)}(\eta) = \langle \phi_\alpha \rangle, \quad \Theta_\alpha^{(0)}(\eta) = \frac{2}{3} \langle (\zeta^2 - \frac{3}{2}) \phi_\alpha \rangle, \quad (6)$$

$$Y_\beta^{(1)}(\eta) = \frac{1}{2} \langle \zeta^2 (1 - \mu^2) \psi_\beta \rangle. \quad (7)$$

ここに, $\langle f \rangle = \int f(\xi) E(|\xi|) d\xi$, $E(z) = \pi^{-3/2} \exp(-z^2)$. 本研究で扱う $\alpha = 2, 3, 5$, $\beta = 4$ の場合, $(\mathcal{I}_\alpha, g_\alpha)$, $(\mathcal{I}_\beta^S, g_\beta^S)$ は次で与えられる:

$$\mathcal{I}_2 = \frac{1}{2} \zeta^2 (1 - \mu^2) \psi_2(\eta, \mu, \zeta), \quad (8a)$$

$$g_2 = 2\mu\zeta \int_0^\infty Y_2^{(1)}(z) dz + \frac{1}{2} \zeta^2 (1 - 3\mu^2) [b_2^{(1)} B(\zeta) + F(\zeta)], \quad (8b)$$

$$\mathcal{I}_3 = -\frac{1}{4} \zeta^2 (1 - \mu^2) \psi_1(\eta, \mu, \zeta), \quad (8c)$$

$$\begin{aligned}g_3 &= -\mu\zeta \int_0^\infty Y_1^{(1)}(z) dz - \frac{1}{4} b_1^{(1)} \zeta^2 (1 - 3\mu^2) B(\zeta) \\ &\quad - \frac{1}{2} \mu\zeta [D_1(\zeta) - \zeta^2 (1 - 2\mu^2) D_2(\zeta)],\end{aligned} \quad (8d)$$

$$\mathcal{I}_5 = 0, \quad g_5 = -\frac{1}{3} \zeta^2 (1 - 3\mu^2) B(\zeta), \quad (8e)$$

$$\mathcal{I}_4^S = 0, \quad g_4^S = -[D_1(\zeta) + \mu^2 \zeta^2 D_2(\zeta)]. \quad (8f)$$

ここに, ψ_1, ψ_2 はそれぞれ, 問題 (5) において

$$\mathcal{I}_1^S = 0, \quad g_1^S = \mu\zeta B(\zeta), \quad \mathcal{I}_2^S = 0, \quad g_2^S = A(\zeta),$$

として与えられる境界値問題の解で, これらは既に求められている [6]. $(b_1^{(1)}, Y_1^{(1)})$, $(b_2^{(1)}, Y_2^{(1)})$ はそれぞれ ψ_1, ψ_2 の問題のすべり係数と Knudsen 層関数である. $\mathcal{I}_2, \mathcal{I}_3$ は

これらの補正解 ψ_2, ψ_1 を用いて与えられており、実際に η についてすみやかに減衰する。 A, B, F, D_1, D_2 は、次の積分方程式

$$\begin{aligned}\mathcal{L}[\zeta_i A(\zeta)] &= -\zeta_i(\zeta^2 - 5/2) \text{ with } \langle \zeta^2 A(\zeta) \rangle = 0, \\ \mathcal{L}[\zeta_{ij} B(\zeta)] &= -2\zeta_{ij}, \quad \mathcal{L}[\zeta_{ij} F(\zeta)] = \zeta_{ij} A(\zeta), \\ \mathcal{L}[(\zeta_i \delta_{jk} + \zeta_j \delta_{ki} + \zeta_k \delta_{ij}) D_1(\zeta) + \zeta_i \zeta_j \zeta_k D_2(\zeta)] \\ &= \gamma_1(\zeta_i \delta_{jk} + \zeta_j \delta_{ki} + \zeta_k \delta_{ij}) - \zeta_i \zeta_j \zeta_k B(\zeta) \text{ with } \langle 5\zeta^2 D_1(\zeta) + \zeta^4 D_2(\zeta) \rangle = 0,\end{aligned}$$

の解である。ここに、 $\mathcal{L}[f] = -\nu(\zeta)f + C[f]$, $\zeta_{ij} = \zeta_i \zeta_j - (1/3)\zeta^2 \delta_{ij}$. A, B, F, D_1, D_2 は既に求められており、その信頼できるデータが存在する。

6 数値解析

Knudsen 層関数を求めるには問題 (4), (5) を解けばよい。4 節の最後に述べたように、ここでは (4), (5) の積分形に基づいた数値解法を用いる。

6.1 積分形への変換

問題 (4), (5) は、両辺に $E(\zeta)$ を乗じ、文献 [10] にならって両辺を η で積分すればともに次の積分形の問題に変換できる：

$$\begin{aligned}\Phi(\eta, \mu, \zeta) &= G(\mu, \zeta) \exp\left(-\frac{\nu(\zeta)\eta}{\mu\zeta}\right) + \frac{1}{\mu\zeta} \int_0^\eta C[\Phi](s, \mu, \zeta) \exp\left(\frac{\nu(\zeta)(s-\eta)}{\mu\zeta}\right) ds \\ &\quad + \frac{1}{\mu\zeta} \int_0^\eta C[\Psi](s, \mu, \zeta) \exp\left(\frac{\nu(\zeta)(s-\eta)}{\mu\zeta}\right) ds, \quad (\mu\zeta > 0),\end{aligned}\tag{9a}$$

$$\begin{aligned}\Phi(\eta, \mu, \zeta) &= \frac{1}{\mu\zeta} \int_\infty^\eta C[\Phi](s, \mu, \zeta) \exp\left(\frac{\nu(\zeta)(s-\eta)}{\mu\zeta}\right) ds \\ &\quad + \frac{1}{\mu\zeta} \int_\infty^\eta C[\Psi](s, \mu, \zeta) \exp\left(\frac{\nu(\zeta)(s-\eta)}{\mu\zeta}\right) ds, \quad (\mu\zeta < 0),\end{aligned}\tag{9b}$$

with

$$\Phi(\eta, \mu, \zeta) \rightarrow 0, \text{ as } \eta \rightarrow \infty,\tag{9c}$$

$$\Psi(\eta, \mu, \zeta) = \begin{cases} -\frac{1}{\mu\zeta} \int_0^\eta I(s, \mu, \zeta) \exp\left(\frac{\nu(\zeta)(s-\eta)}{\mu\zeta}\right) ds, & (\mu\zeta > 0), \\ -\frac{1}{\mu\zeta} \int_\infty^\eta I(s, \mu, \zeta) \exp\left(\frac{\nu(\zeta)(s-\eta)}{\mu\zeta}\right) ds, & (\mu\zeta < 0). \end{cases}\tag{9d}$$

ここで、 Φ, C, I, G は、問題 (4) に対しては $\Phi = \phi_\alpha E - \Psi$, $C[f] = C[fE^{-1}]E$, $I = I_\alpha E$, $G = (-\sigma_\alpha^{(0)} - c_\alpha^{(0)}\zeta^2 + g_\alpha)E$ ($\alpha = 2, 3, 5$) を、問題 (5) に対しては $\Phi = \psi_\beta E - \Psi$, $C[f] = C^S[fE^{-1}]E$, $I = I_\beta^S E$, $G = (-2b_\beta^{(1)} + g_\beta^S)E$ ($\beta = 4$) を表す。 I は η についてすみやかに減衰するため、 Ψ もまたそうであることを述べておく。式 (9) では、元の解 $\phi_\alpha E$ および $\psi_\beta E$ は既知部分 Ψ と未知部分 Φ に分解されている。 Φ に対する方程式は $C[\Psi]$ を非斉次項にもつ線形化ボルツマン方程式の積分形である。条件 (9c) は $\Psi \rightarrow 0$ as $\eta \rightarrow \infty$ より式 (4c),

(5c) から得られる。(9c) は、もしこれを課さなければ定数 $\sigma_\alpha^{(0)}$, $c_\alpha^{(0)}$, $b_\beta^{(1)}$ が一意に決まらない [12] ため、必要である。

C は積分作用素なので $C[f]$ は引数の f よりもずっとなめらかである。したがって、上の積分形では Φ の μ - ζ 面での急峻な変化が陽に表されている。 $\Phi = \phi_2 E - \Psi$ あるいは $\Phi = \phi_3 E - \Psi$ の場合、 I は ψ_2 あるいは ψ_1 を含んでおり、 Ψ の μ - ζ 面での急峻な変化は Φ のそれに比べて一見、明瞭でない。しかし、 ψ_1 , ψ_2 が (5) の解であることから、 Ψ の μ - ζ 面での急峻な変化が陽になるように変形できる。 $\Phi = \phi_2 E - \Psi$ の場合、 Ψ は次のように表せる：

$$\Psi = -\frac{1-\mu^2}{2\mu}\zeta\left\{(-2b_2^{(1)} + g_2^S)E(\zeta)\eta\exp\left(-\frac{\nu(\zeta)\eta}{\mu\zeta}\right) + \frac{1}{\mu\zeta}\int_0^\eta(\eta-s)C[\psi_2 E](s, \mu, \zeta)\exp\left(\frac{\nu(\zeta)(s-\eta)}{\mu\zeta}\right)ds\right\}, \quad (\mu\zeta > 0), \quad (10a)$$

$$\Psi = -\frac{1-\mu^2}{2\mu^2}\int_\infty^\eta(\eta-s)C[\psi_2 E](s, \mu, \zeta)\exp\left(\frac{\nu(\zeta)(s-\eta)}{\mu\zeta}\right)ds, \quad (\mu\zeta < 0). \quad (10b)$$

ここに、 $C[\psi_2 E] = C^S[\psi_2]E$ 。 $\Phi = \phi_3 E - \Psi$ の場合、 Ψ は上の $(-2b_2^{(1)} + g_2^S)$ と ψ_2 をそれぞれ $(-1/2)(-2b_1^{(1)} + g_1^S)$ と $(-1/2)\psi_1$ でおきかえたもので与えられる。

このように、積分形式を利用することで解の μ - ζ 面での急峻な変化が半解析的に把握でき、分布関数の詳細な情報（特に境界近くの情報）が必要なときに特に有利になる。

6.2 計算の方針

問題 (9) を解く計算では、まず式 (9d) により $C[\Psi]$ の精確なデータを準備する。次に、条件 (9c) は捨て、式 (9a), (9b) で G を $\tilde{G} \equiv (-\tilde{\sigma} - \tilde{c}\zeta^2 + g_\alpha)E$ [または $(-2\tilde{b} + g_\beta^S)E$] でおきかえたものを解く。ここで、 $\tilde{\sigma}$, $\tilde{c}$ (または $\tilde{b}$) は与えられた定数である。この手順で得られる解を $\tilde{\Phi}$ と表す。 $\tilde{\sigma}$, $\tilde{c}$ (または $\tilde{b}$) と $\sigma_\alpha^{(0)}$, $c_\alpha^{(0)}$ (または $b_\beta^{(1)}$) との差に応じて、 $\tilde{\Phi}$ は、 $\eta \rightarrow \infty$ で $\tilde{\Phi} \rightarrow (\sigma_\alpha^{(0)} - \tilde{\sigma})E + (c_\alpha^{(0)} - \tilde{c})\zeta^2 E$ [または $2(b_\beta^{(1)} - \tilde{b})E$] となる。この性質を利用し、 $\sigma_\alpha^{(0)}$, $c_\alpha^{(0)}$ (または $b_\beta^{(1)}$) を次式から決められる：

$$\begin{aligned} \sigma_\alpha^{(0)} &= \tilde{\sigma} - 2\pi \int_0^\infty \int_{-1}^1 \zeta^2 \left(\zeta^2 - \frac{5}{2}\right) \tilde{\Phi}(\eta \rightarrow \infty, \mu, \zeta) d\mu d\zeta, \\ c_\alpha^{(0)} &= \tilde{c} + \frac{4\pi}{3} \int_0^\infty \int_{-1}^1 \zeta^2 \left(\zeta^2 - \frac{3}{2}\right) \tilde{\Phi}(\eta \rightarrow \infty, \mu, \zeta) d\mu d\zeta, \\ &\left[\text{または } b_\beta^{(1)} = \tilde{b} + \pi \int_0^\infty \int_{-1}^1 \zeta^4 (1 - \mu^2) \tilde{\Phi}(\eta \rightarrow \infty, \mu, \zeta) d\mu d\zeta. \right] \end{aligned}$$

そして、 Φ は次式から決められる：

$$\Phi = \tilde{\Phi} - (\sigma_\alpha^{(0)} - \tilde{\sigma})E - (c_\alpha^{(0)} - \tilde{c})\zeta^2 E. \quad \left[\text{または } \Phi = \tilde{\Phi} - 2(b_\beta^{(1)} - \tilde{b})E. \right]$$

実際の計算では、境界からの十分大きな有限の距離 d を導入する。 $\eta > d$ では $\tilde{\Phi}$ は無限遠でのそれと等しく、 Ψ は η に関する速やかな減衰のために無視できる (6.1 節の第一段落を

参照) ものとする. このとき, $\tilde{\Phi}$ に対する問題は次のようになる:

$$\begin{aligned}\tilde{\Phi}(\eta, \mu, \zeta) = & \tilde{G}(\mu, \zeta) \exp\left(-\frac{\nu(\zeta)\eta}{\mu\zeta}\right) + \frac{1}{\mu\zeta} \int_0^\eta C[\tilde{\Phi}](s, \mu, \zeta) \exp\left(\frac{\nu(\zeta)(s-\eta)}{\mu\zeta}\right) ds \\ & + \frac{1}{\mu\zeta} \int_0^\eta C[\Psi](s, \mu, \zeta) \exp\left(\frac{\nu(\zeta)(s-\eta)}{\mu\zeta}\right) ds, \quad (\mu\zeta > 0),\end{aligned}\quad (11a)$$

$$\begin{aligned}\tilde{\Phi}(\eta, \mu, \zeta) = & \tilde{\Phi}(d, -\mu, \zeta) \exp\left(\frac{\nu(\zeta)(d-\eta)}{\mu\zeta}\right) \\ & + \frac{1}{\mu\zeta} \int_d^\eta C[\tilde{\Phi}](s, \mu, \zeta) \exp\left(\frac{\nu(\zeta)(s-\eta)}{\mu\zeta}\right) ds \\ & + \frac{1}{\mu\zeta} \int_d^\eta C[\Psi](s, \mu, \zeta) \exp\left(\frac{\nu(\zeta)(s-\eta)}{\mu\zeta}\right) ds, \quad (\mu\zeta < 0).\end{aligned}\quad (11b)$$

また, $\eta > d$ の Ψ を無視することは $\eta > d$ の I を無視することを意味するから, 式 (9d), (10b) の ∞ も d へ置き換える. こうして, 全ての計算が有限領域 $0 \leq \eta \leq d$ 内のものに帰着する. 式 (11b) で $\tilde{\Phi}(d, -\mu, \zeta)$ が現れているのは, d が十分に大きければ $\eta \rightarrow \infty$ での $\tilde{\Phi}$ の漸近形から $\tilde{\Phi}(d, \mu, \zeta) = \tilde{\Phi}(d, -\mu, \zeta)$ が成り立つためである. 与えられた d に対し, 問題 (11) を逐次近似法で数値的に解く. つまり, 任意に与えた $\tilde{\Phi}$ の初期値を用いて $C[\tilde{\Phi}]$ を評価し, 式 (11a) を最初に解く. すると式 (11b) 中の $\tilde{\Phi}(d, -\mu, \zeta)$ のデータが得られ, (11b) を次に解くことができる. こうして更新された $\tilde{\Phi}$ を用いて $C[\tilde{\Phi}]$ を評価しなおす. 数値解が収束の基準を満たすまで同じ手順を繰り返す. d の値が適切かどうかは, 複数の大きな d に対して得られた数値解が d の値によらず確定していることを確認して判断する.

6.3 離散化と数値計算法

E の寄与があるため, $\tilde{\Phi}$ は ζ が ∞ に向かうにつれてすみやかに減衰する. このため, 実際の計算では ζ の領域を有限領域に限り, $0 \leq \eta \leq d$, $-1 \leq \mu \leq 1$, $0 \leq \zeta \leq Z$ (Z : 与えられた定数) における $\tilde{\Phi}$ の数値計算を行う. 領域打ち切りの妥当性は, 複数の Z の値に対して得られた数値解が Z の値によらず確定しているかどうかで判断する. $\tilde{\Phi}$ の急峻な変化をとらえるため, 不等間隔の離散化を行う. 分子速度空間の変数 (μ, ζ) の格子は 2 種類のものを組み合わせる: 1 つは滑らかな関数 $C[\tilde{\Phi}]$ (と $C[\Psi]$) を十分に解像するためのもの (主格子) で, もう 1 つは $C[\tilde{\Phi}]$ (と $C[\Psi]$) を精確に計算するために $\tilde{\Phi}$ (と Ψ) を十分に解像できるもの (副格子) である. 副格子は主格子よりも密にとる.

空間座標 η については, $2N_\eta + 1$ 個の格子点 $\eta^{(i)}$ ($i = 0, 1, \dots, 2N_\eta$) を $0 \leq \eta \leq d$ に配置する:

$$0 = \eta^{(0)} < \eta^{(1)} < \dots < \eta^{(2N_\eta)} = d. \quad (12)$$

関数 $\tilde{\Phi}, \Psi$ はこれらの点で評価される. 式 (11) 中の s に関する積分を実行する際は, $C[\tilde{\Phi}]$, $C[\Psi]$ を格子点 $\{\eta^{(i)}\}$ でのデータを用いた区分的な 2 次関数で補間する.*2 計算すべき積分

*2 2 次補間は, 境界上の $\mu\zeta = -0$ での $\tilde{\Phi}$ の $\mu\zeta$ に関する勾配の対数的発散 [11] をとらえることはできないが, 積分形式を用いているため, Knudsen 層関数の η に関する勾配の対数的発散はとらえることができる [11]. 7 節の最後から 2 番目の段落を参照.

は次の形に表される：

$$T[F](\eta, \mu, \zeta) = \begin{cases} \frac{1}{\mu\zeta} \int_0^\eta C[F](s, \mu, \zeta) \exp\left(\frac{\nu(\zeta)(s-\eta)}{\mu\zeta}\right) ds, & (\mu\zeta > 0), \\ \frac{1}{\mu\zeta} \int_d^\eta C[F](s, \mu, \zeta) \exp\left(\frac{\nu(\zeta)(s-\eta)}{\mu\zeta}\right) ds, & (\mu\zeta < 0). \end{cases} \quad (13)$$

ここで、 $F = \tilde{\Phi}$ または Ψ である。 $C[F]$ を s に関して区分的な 2 次関数で補間すると、 $T[F]$ は次式で求められる：

$$T[F](\eta^{(i)}, \mu, \zeta) = \sum_{r=0}^{2N_\eta} S_{i,r}(\mu, \zeta) C[F](\eta^{(r)}, \mu, \zeta). \quad (14)$$

ここに

$$S_{i,r}(\mu, \zeta) = \begin{cases} \frac{1}{\mu\zeta} \int_0^{\eta^{(i)}} Y_r^\eta(s) \exp\left(\frac{\nu(\zeta)(s-\eta^{(i)})}{\mu\zeta}\right) ds, & (\mu\zeta > 0), \\ \frac{1}{\mu\zeta} \int_d^{\eta^{(i)}} Y_r^\eta(s) \exp\left(\frac{\nu(\zeta)(s-\eta^{(i)})}{\mu\zeta}\right) ds, & (\mu\zeta < 0), \end{cases} \quad (15)$$

であり、 Y_r^η は次の区分的な 2 次関数である：

$$Y_{2r}^z(y) = \begin{cases} \frac{(y - z^{(2r+2)})(y - z^{(2r+1)})}{(z^{(2r)} - z^{(2r+2)})(z^{(2r)} - z^{(2r+1)})}, & (z^{(2r)} < y < z^{(2r+2)}), \\ \frac{(y - z^{(2r-2)})(y - z^{(2r-1)})}{(z^{(2r)} - z^{(2r-2)})(z^{(2r)} - z^{(2r-1)})}, & (z^{(2r-2)} < y < z^{(2r)}), \\ 0, & \text{otherwise}, \end{cases}$$

$$Y_{2r+1}^z(y) = \begin{cases} \frac{(y - z^{(2r)})(y - z^{(2r+2)})}{(z^{(2r+1)} - z^{(2r)})(z^{(2r+1)} - z^{(2r+2)})}, & (z^{(2r)} < y < z^{(2r+2)}), \\ 0, & \text{otherwise}. \end{cases} \quad (16)$$

$S_{i,r}$ の関数形は陽に得られるので、数値的に得られたデータを用いて精密な計算をすることができる。 $C[\tilde{\Phi}](\eta^{(i)}, \mu, \zeta)$ と $C[\Psi](\eta^{(i)}, \mu, \zeta)$ のデータを用いて、式 (14), (11) により格子点 $\{\eta^{(i)}\}$ 上の $\tilde{\Phi}$ を得ることができる。^{*3}

本節の第 1 段落で述べたように、分子速度空間の格子は 2 種類用意する。主格子として、 $(4N_\mu + 1) \times (2N_\zeta + 1)$ 個の格子点 $(\mu^{(j)}, \zeta^{(k)})$ ($j = -2N_\mu, \dots, 2N_\mu; k = 0, \dots, 2N_\zeta$) を $-1 \leq \mu \leq 1, 0 \leq \zeta \leq Z$ に配置する：

$$0 = \mu^{(0)} < \mu^{(1)} < \dots < \mu^{(2N_\mu-1)} < \mu^{(2N_\mu)} = 1, \quad (17a)$$

$$\mu^{(-j)} = -\mu^{(j)}, \quad (1 \leq j \leq 2N_\mu), \quad (17a)$$

$$0 = \zeta^{(0)} < \zeta^{(1)} < \dots < \zeta^{(2N_\zeta)} = Z. \quad (17b)$$

この格子系は、滑らかな関数 $C[F]$ を十分に解像できるようにとる。このとき、 $C[F](\eta^{(i)}, \mu, \zeta)$ は任意の μ, ζ に対して $C[F]_{(i,j,k)} \equiv C[F](\eta^{(i)}, \mu^{(j)}, \zeta^{(k)})$ の区分的 2 次補間

^{*3} Ψ を計算するとき、式 (10) で ∞ を d で置きかえた積分は同様に計算する。このとき、区分的 2 次補間は $C[\psi_2 E]$ に対して行う。

により精確に回復できる。したがって、式 (11) により任意の μ, ζ に対する $\tilde{\Phi}(\eta^{(i)}, \mu, \zeta)$ が精確に得られる。これは $\Psi(\eta^{(i)}, \mu, \zeta)$ にもあてはまる。^{*4}

$C[F]_{(i,j,k)}$ を得るには、文献 [5] ではじめて提案された数値核法を用いる。この方法では、関数 F を F の離散的なデータから補間を用いて近似するので、 F を十分解像するために副格子は主格子よりも密にとる必要がある。 $(4N_M + 1) \times (2N_\xi + 1)$ 個の格子点 $(M^{(l)}, \xi^{(m)})$ ($l = -2N_M, \dots, 2N_M; m = 0, \dots, 2N_\xi$) を μ - ζ 空間に配置する：

$$0 = M^{(0)} < M^{(1)} < \dots < M^{(2N_M-1)} < M^{(2N_M)} = 1, \quad (18a)$$

$$M^{(-l)} = -M^{(l)}, \quad (1 \leq l \leq 2N_M), \quad (18b)$$

$$0 = \xi^{(0)} < \xi^{(1)} < \dots < \xi^{(2N_\xi)} = Z. \quad (18b)$$

$N_M > N_\mu$, $N_\xi > N_\zeta$ であり、副格子上的 $F_{[i,l,m]} \equiv F(\eta^{(i)}, M^{(l)}, \xi^{(m)})$ は、前段落で説明した方法で得られることを述べておく。本研究では、 F に対し次の区分的 2 次補間を採用する：

$$F(\eta^{(i)}, M, \xi) = \sum_{m=0}^{2N_\xi} \sum_{l=0}^{2N_M} (F_{[i,l,m]} B_{l,m}^+(M, \xi) + F_{[i,-l,m]} B_{-l,m}^-(M, \xi)). \quad (19a)$$

ここに

$$B_{l,m}^\pm(M, \xi) = Y_l^M(M) \chi[0, 1](\pm M) Y_m^\xi(\xi) \chi[0, Z](\xi), \quad (19b)$$

$$\chi[a, b](y) = \begin{cases} 1, & (a < y < b), \\ 0, & \text{otherwise.} \end{cases} \quad (19c)$$

$C[F]_{(i,j,k)}$ は次のように計算する：

$$C[F]_{(i,j,k)} = \sum_{m=0}^{2N_\xi} \sum_{l=0}^{2N_M} (C_{j,k,l,m}^+ F_{[i,l,m]} + C_{j,k,-l,m}^- F_{[i,-l,m]}), \quad (20a)$$

$$C_{j,k,l,m}^\pm = C[B_{l,m}^\pm](\mu^{(j)}, \zeta^{(k)}). \quad (20b)$$

ここで、式 (19) 中の関数の引数として、 $\mathcal{C}$ の定義中に現れる ξ 由来の積分変数 $\xi (\equiv |\xi|)$, $M (\equiv \xi_i n_i / \xi)$ を ζ , μ の代わりに用いた。 $C_{j,k,l,m}^\pm$ を $\mathcal{C}$ の数値核とよぶ。式 (19b) の $\chi[0, 1](\pm M)$ は、 F が境界 $\eta = 0$ において $M = 0$ で不連続になりうる (7 節を参照) ことを反映する量である。式 (19a) および (20a) 中で、 $i = l = 0$ のとき $F_{[i,l,m]}$ と $F_{[i,-l,m]}$ とは異なる 2 つの値を表す。 $B_{l,m}^\pm$ は $l \leq 0$ に対し 0 となり、 $B_{l,m}^\pm$ の区別は $l = 0$ のとき有意である。また、 $C_{j,k,l,m}^\pm$ は半分の積分範囲 $M \geq 0$ に対する積分核に対応し、 $l \leq 0$ に対し $C_{j,k,l,m}^\pm$ は 0 になる。式 (20b) の $C_{j,k,l,m}^\pm$ は既知関数の積分で、式 (11) を解く反復計算の前にあらかじめ計算しておける。実は、 $C_{j,k,l,m}^\pm$ の計算は積分核 k_1 に含まれる特異性を取り除くために慎重な扱いと変数変換を要するが、ここではその詳細 ([6, 5] を参照) は省略する。

ここで、次の 2 点を注意しておく。(i) 積分核 $k_1(\zeta, \xi) - k_2(\zeta, \xi)$ はその形から明らかなように変換 $(\zeta, \xi) \rightarrow (-\zeta, -\xi)$ に対して不変である。そして、本計算では μ の格子点を $\mu = 0$ に関して対称に配置しているため、数値核 $C_{j,k,l,m}^\pm$ に対して $C_{j,k,l,m}^- = C_{-j,k,-l,m}^+$ なる関係が成り立つ。これにより、必要な数値核のデータのサイズを半分にできる。(ii) もし有限差分法を用いる場合には、計算の全ての手順で副格子を要するため、数値核のデータのサイズが $(N_M \times N_\xi)^2$ 程度になる。本研究ではこれに対し、 $(N_\mu \times N_\zeta) / (N_M \times N_\xi)$ の分だけデータのサイズが小さくてすむ。

^{*4} Ψ を精確に計算するために、主格子は $C[\psi_1 E]$ および $C[\psi_2 E]$ も十分解像できる必要がある。

7 結果

分布関数 $\phi_2 E$, $\phi_3 E$, $\phi_5 E$, $\psi_4 E$ の振舞いを Fig. 1-4 に示す. これらをみると, 全ての場合で, 境界上 ($\eta = 0$) では直線 $\mu\zeta = 0$ に沿って不連続がある. この直線は, 分子速度が境界面と平行になる方向に対応する. [正 (負) の $\mu\zeta$ の値は, 境界を離れる (または境界に入射する) 分子速度に対応することを述べておく.] 気体領域 ($\eta > 0$) では不連続は消滅し, ほとんどの点 (μ, ζ) で解の形は変わらない. ただし, $\mu\zeta$ が小さい領域では, $\eta = 0$, $\mu\zeta = 0$ に生じていた不連続の間をつなぐように, 解が急激に変化している [Fig. 1-4 で (a) $\eta = 0.0 \rightarrow$ (b) $\eta = 0.015$]. この $\mu\zeta \sim 0$ での局所的な変形は, 小さい法線速度 ($\mu\zeta \sim 0$) をもって境界から注目点へとやってきた分子は, 注目点に達するまでに接線方向に長い距離を動き, 他の分子と衝突する可能性が高くなるためだと理解できる. 境界からの距離が増大するにつれて分布はなめらかになり, μ の正および負の領域での形状の違いを保ちながら 0 へと減衰していく. なお, $\phi_2 E$, $\phi_3 E$, $\phi_5 E$ ではその値が正および負になる領域の両方が存在するが $\psi_4 E$ の値はほとんどの領域で正であり, 傾向が異なる.

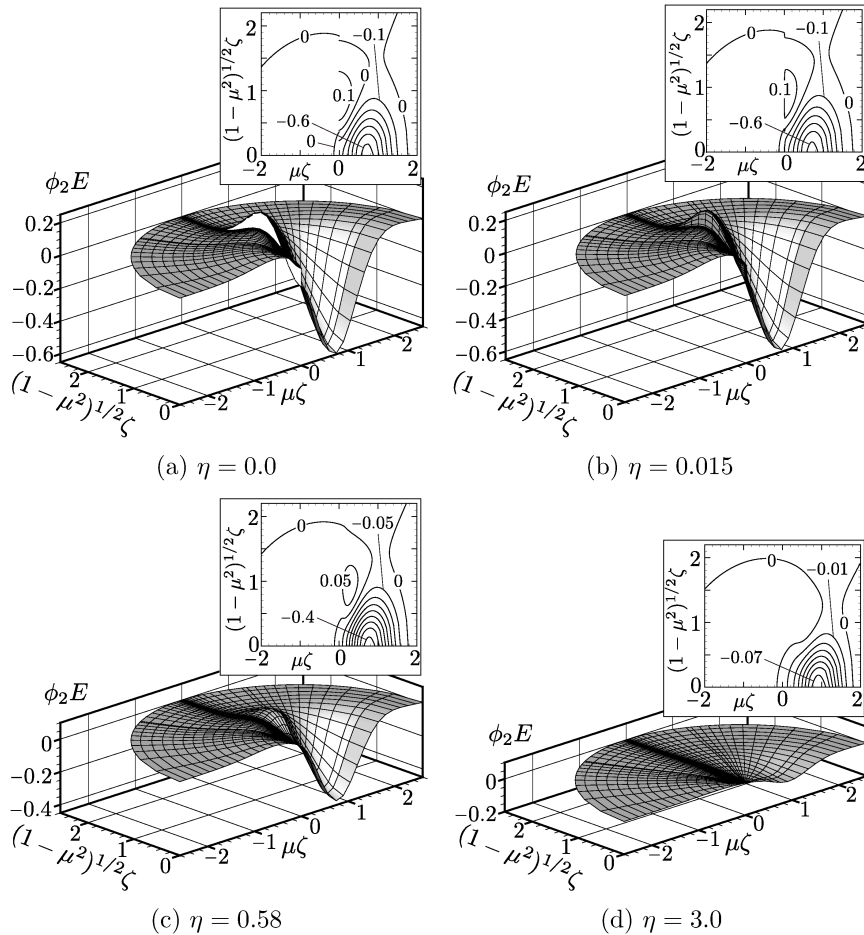


Fig. 1: Solution $\phi_2 E$ and its contour plots. (a) $\eta = 0.0$, (b) $\eta = 0.015$, (c) $\eta = 0.58$, and (d) $\eta = 3.0$. In the contour plots, the curves are drawn with the intervals 0.1 in (a) and (b), 0.05 in (c), and 0.01 in (d).

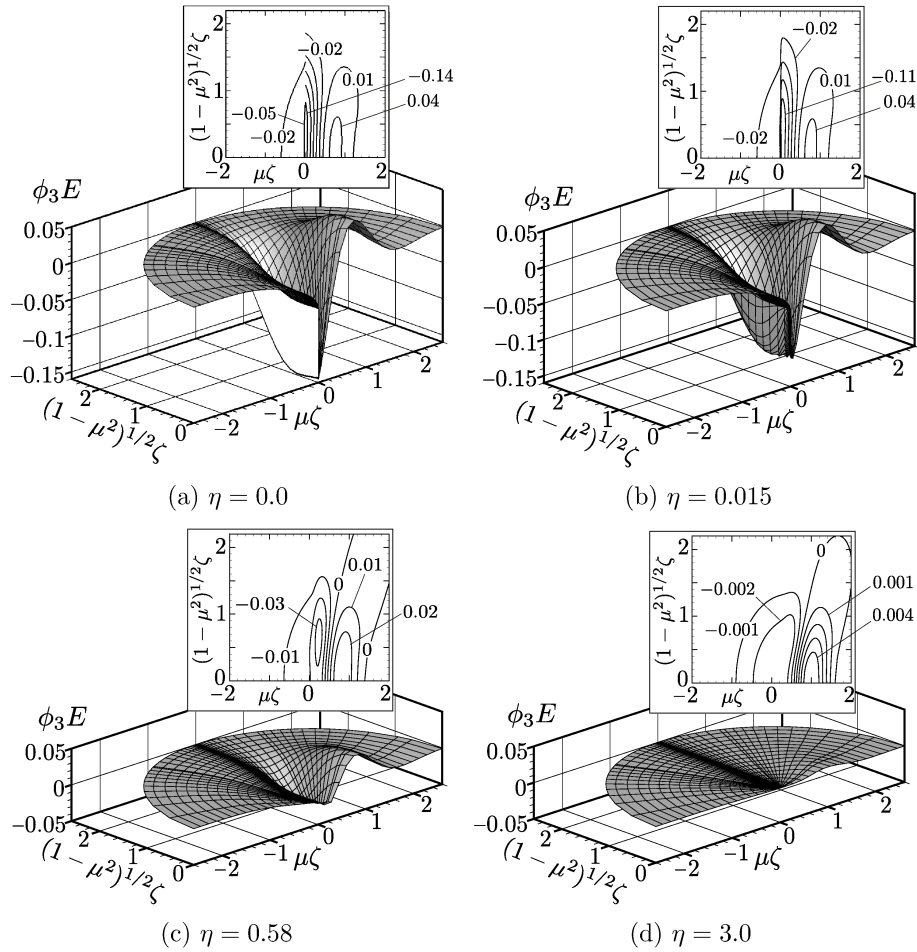


Fig. 2: Solution $\phi_3 E$ and its contour plots. (a) $\eta=0.0$, (b) $\eta=0.015$, (c) $\eta=0.58$, and (d) $\eta=3.0$. In the contour plots the curves are drawn with the intervals 0.03 in (a) and (b), 0.01 in (c), and 0.001 in (d).

Knudsen 層関数を Fig. 5 および Table 1 に示す. どの関数もおおむね境界からの距離が増大するにつれて速やかに 0 に近づき, 平均自由行程の数倍程度の領域内でのみ有意である (Table 1 から分かるとおり, $\Theta_3^{(0)}$ と $\Theta_5^{(0)}$ はわずかに単調ではない). Table 1 より, Knudsen 層の 90% 厚さは, η の単位で $\Omega_2^{(0)}$ と $\Theta_2^{(0)}$ に対し約 3 ~ 3.5, 他のものでは約 1.5 ~ 2 であり, 最大でも平均自由行程の 3 倍程度であることが分かる.

拡散反射条件下の BGK モデルの場合には $c_2^{(0)} = 0$, $\Omega_2^{(0)} = \Theta_2^{(0)} = 0$ となることが知られている [但し $\phi_2 E$ は零ではない. 式 (8a), (8b) を参照]. しかし, 剛体球分子気体の場合, $c_2^{(0)}$, $\Omega_2^{(0)}$, $\Theta_2^{(0)}$ は零ではない. このように, 一般には, BGK モデルの場合に完全なキャンセレーションにより縮退していた温度のとびと Knudsen 層補正が現れる.

巨視量は境界 $\eta = 0$ で $\eta \ln \eta$ の特異性を持つことがはじめ BGK モデルによる解析で示され [13], 後に剛体球分子気体の場合にも同様に示されている [11]. そこで, 本計算で求めた Knudsen 層関数に対し, フィッティング曲線 $a + b\eta \ln \eta + c\eta$ の係数 a, b, c の値を最小 2 乗法により求めた. 本稿では $\Omega_3^{(0)}$, $\Theta_3^{(0)}$ の係数の値を Table 2 に示す. 結果は近似に用いる区間の選択に大きく依存しておらず, 特に, $\eta \ln \eta$ の係数 b の値は有効数字 3 桁程度まで収斂している. このように本計算では, Knudsen 層の構造をその特異な性質まで含めてとらえることができている.

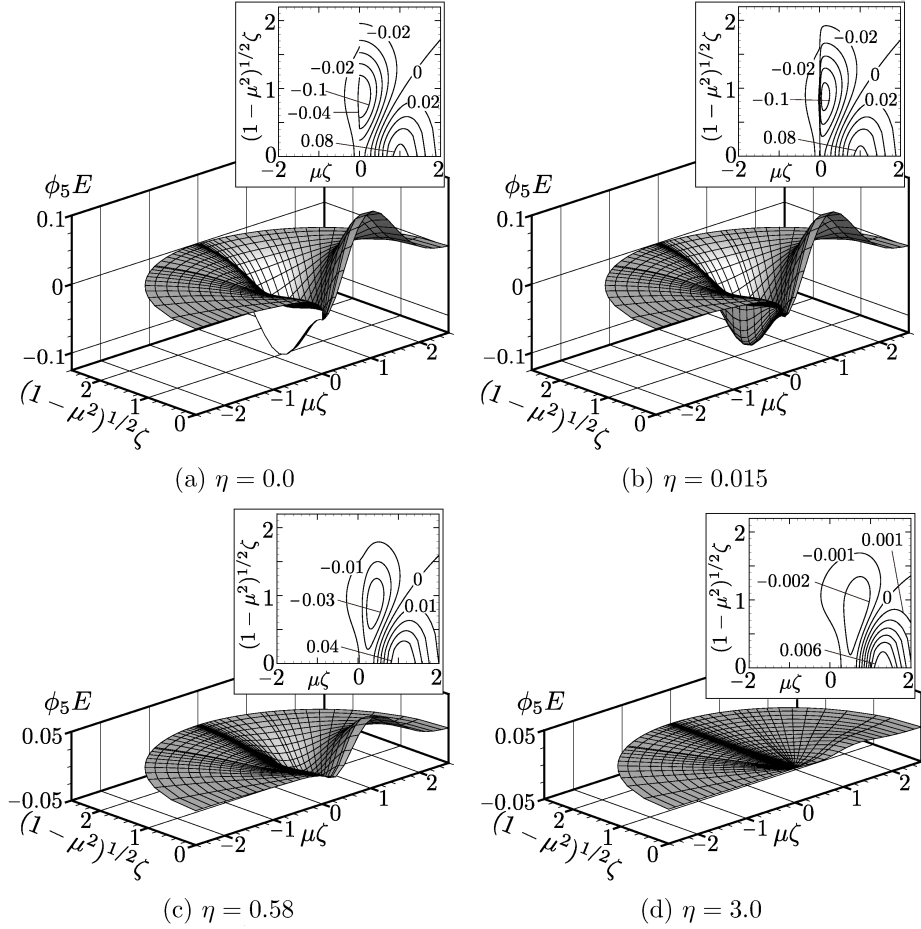


Fig. 3: Solution $\phi_5 E$ and its contour plots. (a) $\eta=0.0$, (b) $\eta=0.015$, (c) $\eta=0.58$, and (d) $\eta=3.0$. In the contour plots the curves are drawn with the intervals 0.02 in (a) and (b), 0.01 in (c), and 0.001 in (d).

8 計算の精度

η が小さい場合には, 上の結果でもみたように解は $\mu\zeta$ の小さい領域で急峻に変化する. $(\eta, \mu, \zeta) = (0, 0, 0)$ は解の特異点であり, どの方向からこの点に近づくかによって極限值は異なる. このような解の構造をとらえるには, 特異点近傍で方向についてバランスのとれた離散格子点を用意する必要がある. 実際, 文献 [14] と同程度の格子系を用いて差分法で $\phi_3 E$ を計算すると, 小さな η に対し分子速度の原点近傍の格子点が不足し (η と同程度もしくはそれよりも小さい $\mu\zeta$ をとるような分子速度の格子点数が少なかった), $\phi_3 E$ が十分に解像できなかった. また, $\Omega_3^{(0)}$, $\Theta_3^{(0)}$ の境界近傍での精確なデータも得られなかった (前節の最終段落でみた Knudsen 層関数の特異性はこのデータからは読み取れない).

空間格子系は次のものを用いた. 格子点 $\eta^{(i)}$ は, $\eta = 0$ の周りでは 7.3×10^{-7} , $\eta = d = 44.46$ の周りでは 0.69 の幅で非一様に配置した. 区間 $0 \leq \eta \leq d$ に 251 個の格子点 $\eta^{(i)}$ が存在する. この格子系を S1 とよぶ. その他に次の格子系を用意した: S1 に比べて点数を約 3/2 倍に増やした格子系 S2, S1 に比べて領域を $d = 53.04$ と広げた格子系 S3.

分子速度格子系は次のものを用いた. 衝突項を表現する主格子の点 $(\mu^{(j)}, \zeta^{(k)})$ は, μ に対

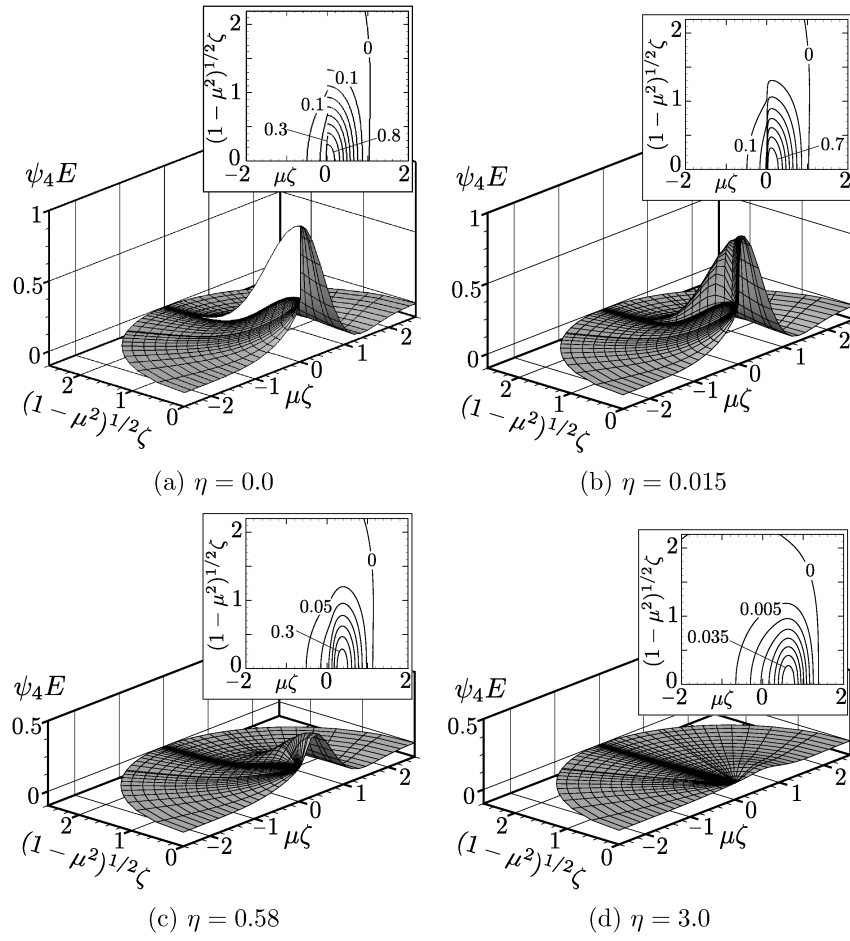


Fig. 4: Solution $\psi_4 E$ and its contour plots. (a) $\eta = 0.0$, (b) $\eta = 0.015$, (c) $\eta = 0.58$, and (d) $\eta = 3.0$. In the contour plots the curves are drawn with the intervals 0.1 in (a) and (b), 0.05 in (c), and 0.005 in (d).

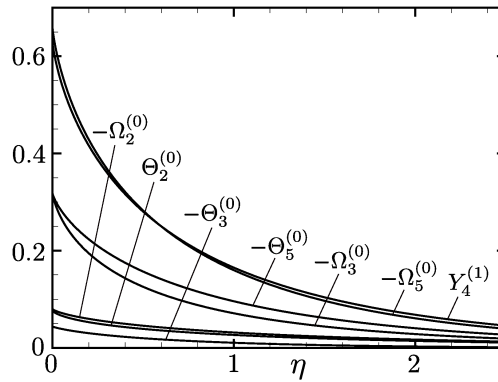


Fig. 5: Knudsen-layer functions for the hard-sphere gas under the diffuse reflection condition.

Table 1: Knudsen-layer functions for the hard-sphere gas under the diffuse reflection condition.

η	$-\Omega_2^{(0)}$	$\Theta_2^{(0)}$	$-\Omega_3^{(0)}$	$-\Theta_3^{(0)}$	$-\Omega_5^{(0)}$	$-\Theta_5^{(0)}$	$Y_4^{(1)}$
0.00000	0.07965	0.07610	0.31803	0.04368	0.65823	0.31749	0.62894
0.02348	0.07508	0.07019	0.28692	0.04108	0.60555	0.29707	0.58003
0.05165	0.07153	0.06590	0.26406	0.03872	0.56413	0.28044	0.54166
0.09881	0.06693	0.06064	0.23601	0.03547	0.51105	0.25858	0.49254
0.15009	0.06290	0.05623	0.21276	0.03253	0.46540	0.23928	0.45030
0.19315	0.05999	0.05316	0.19673	0.03038	0.43311	0.22536	0.42042
0.30336	0.05380	0.04689	0.16463	0.02578	0.36657	0.19589	0.35876
0.40911	0.04897	0.04220	0.14146	0.02224	0.31708	0.17323	0.31279
0.58327	0.04252	0.03618	0.11301	0.01763	0.25470	0.14363	0.25459
0.79673	0.03628	0.03059	0.08822	0.01340	0.19900	0.11603	0.20221
0.98271	0.03187	0.02674	0.07228	0.01059	0.16263	0.09728	0.16769
1.19037	0.02776	0.02323	0.05863	0.00814	0.13118	0.08051	0.13752
1.41884	0.02400	0.02007	0.04715	0.00606	0.10458	0.06582	0.11167
1.58214	0.02170	0.01814	0.04061	0.00488	0.08938	0.05719	0.09672
1.84260	0.01856	0.01554	0.03230	0.00340	0.07008	0.04592	0.07747
2.02594	0.01667	0.01399	0.02764	0.00259	0.05931	0.03945	0.06657
2.51495	0.01263	0.01067	0.01860	0.00109	0.03855	0.02654	0.04506
3.04221	0.00947	0.00807	0.01245	0.00019	0.02469	0.01748	0.03014
3.48717	0.00748	0.00642	0.00901	-0.00022	0.01716	0.01236	0.02171
4.06758	0.00554	0.00481	0.00603	-0.00049	0.01082	0.00790	0.01433
4.91724	0.00362	0.00319	0.00345	-0.00059	0.00565	0.00412	0.00795
6.06059	0.00207	0.00186	0.00172	-0.00050	0.00245	0.00171	0.00370
8.07087	0.00081	0.00074	0.00056	-0.00028	0.00063	0.00034	0.00101
10.06348	0.00032	0.00030	0.00020	-0.00013	0.00018	0.00005	0.00029
13.81166	0.00006	0.00006	0.00003	-0.00003	0.00002	-0.00001	0.00003
15.00856	0.00004	0.00003	0.00002	-0.00002	0.00001	-0.00001	0.00002
20.05147	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
25.14669	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000

し、 $\mu = 0$ の周りでは 1.2×10^{-4} 、 $\mu = \pm 1$ の周りでは 0.025 の幅で非一様に、 ζ に対し、 $\zeta = 0$ の周りでは 1.6×10^{-4} 、 $\zeta = Z = 5.0$ の周りでは 0.12 の幅で非一様に配置した。ここで、 μ - ζ 平面には 36237 個の点 $(\mu^{(j)}, \zeta^{(k)})$ が存在する。一方で、分布関数を表現する副格子の点 $(M^{(l)}, \xi^{(m)})$ は、 M に対し、 $M = 0$ の周りでは 2.4×10^{-10} 、 $M = \pm 1$ の周りでは 0.025 の幅で非一様に、 ξ に対し、 $\xi = 0$ の周りでは 5.1×10^{-10} 、 $\xi = Z = 5.0$ の周りでは 0.12 の幅で非一様に配置した。ここで、 $|M| \leq 1.0 \times 10^{-4}$ に 193 個、 $|M| > 1.0 \times 10^{-4}$ に 256 個の点 $M^{(l)}$ が存在し、 $0 \leq \xi \leq 1.0 \times 10^{-4}$ に 21 個、 $\xi > 1.0 \times 10^{-4}$ に 140 個の点 $\xi^{(m)}$ が存在する。 M - ξ 平面には、 $(\mu^{(j)}, \zeta^{(k)})$ の約 2 倍の 72289 個の点 $(M^{(l)}, \xi^{(m)})$ が存在する。この格子系を M1 とよぶ。その他に次の格子系を用意した：M1 に比べて $|M| \leq 1.0 \times 10^{-4}$ の $M^{(l)}$ の点数を 4/3 倍に増やした格子系 M2、M1 に比べて $\zeta^{(k)}, \xi^{(m)}$ の点数を約 4/3 倍に増やした格子系 M3、M1 に比べて $|\mu| > 1.0 \times 10^{-4}$ の $\mu^{(j)}$ および $|M| > 1.0 \times 10^{-4}$ の $M^{(l)}$ の点数を約 4/3 倍に増やした格子系 M4、M1 に比べて $\mu^{(j)}, M^{(l)}, \zeta^{(k)}, \xi^{(m)}$ の点をより原点の近くまで配置した格子系 M5、M1 に比べて $\zeta^{(k)}, \xi^{(m)}$ の領域を $Z = 5.8$ と広げた格子系 M6、M1 に比べて $\mu^{(j)}, M^{(l)}$ の点数を約 3/4 倍、 $\zeta^{(k)}, \xi^{(m)}$ の点数を約 2/3 倍に減らした格子系 M7。ここで、M5 では $\mu^{(j)}, M^{(l)}, \zeta^{(k)}, \xi^{(m)}$ は対応する変数の原点の周りで、それぞれ 1.8×10^{-5} , 3.1×10^{-11} , 1.8×10^{-5} , 9.3×10^{-12} の幅で点を配置した。

前節の結果は全て格子系 (S1, M1) で得られたものである。

Table 2: Coefficients of the fitting curves for the Knudsen-layer functions $\Omega_3^{(0)}$ and $\Theta_3^{(0)}$ near the boundary determined by the method of least squares using the data in the interval in the second column.

	Interval of η	a	b	c
$\Omega_3^{(0)}$	$[0, 4.64(-6)^*]$	-0.3180275	-0.40544	-0.2540
	$[0, 6.02(-5)]$	-0.3180275	-0.40515	-0.2506
	$[0, 5.49(-4)]$	-0.3180275	-0.40351	-0.2361
	$[0, 4.70(-3)]$	-0.3180263	-0.39604	-0.1857
$\Theta_3^{(0)}$	$[0, 4.64(-6)]$	-0.04368332	-0.015334	0.05834
	$[0, 6.02(-5)]$	-0.04368332	-0.015363	0.05802
	$[0, 5.49(-4)]$	-0.04368333	-0.015515	0.05667
	$[0, 4.70(-3)]$	-0.04368343	-0.016154	0.05234

*Read as 4.64×10^{-6} .

Table 3: A comparison of $c_2^{(0)}$, $c_3^{(0)}$, $c_5^{(0)}$, $b_4^{(1)}$ among the different lattice systems. The data obtained by using the symmetry relation are also shown.

Lattice system	$c_2^{(0)}$	$c_3^{(0)}$	$c_5^{(0)}$	$b_4^{(1)}$
(S1,M1)	-0.4992519	0.0087359	0.4595723	-0.9039300
(S1,M2)	-0.4992519	0.0087359	0.4595723	-0.9039300
(S1,M3)	-0.4992695	0.0087344	0.4595690	-0.9039293
(S1,M4)	-0.4992535	0.0087370	0.4595721	-0.9039303
(S1,M5)	-0.4992519	0.0087359	0.4595723	-0.9039300
(S1,M6)	-0.4992532	0.0087358	0.4595722	-0.9039301
(S1,M7)	-0.4991404	0.0087413	0.4595929	-0.9039335
(S2,M1)	-0.4992531	0.0087359	0.4595723	-0.9039288
(S3,M1)	-0.4992519	0.0087359	0.4595723	-0.9039300
Symmetry relation	-0.4992	0.0087	0.4596	-0.9039

ζ -および η -空間の領域打ち切りの妥当性は、比 $F(d, \cdot, \cdot)/F_{\max}$, $F(\cdot, \cdot, Z)/F_{\max}$ の値により判断する。ここで、 $F = |\phi_2 E|, |\phi_3 E|, |\phi_5 E|, |\psi_4 E|$ であり、 $F_{\max}$ は全ての格子点上の F の最大値である。格子系 (S1,M1) の場合、2つの比はそれぞれ 8.9×10^{-11} , 1.4×10^{-9} 以下であった。速度分布関数は計算領域を打ち切った点で十分に減衰している。

とび・すべり係数の値を対称関係による結果も合わせて Table 3 に示す。まず、半無限問題を直接解いて得られたとび・すべり係数の値は、対称関係により既知の量から厳密に求められた値とよく一致している。これは本計算の確からしさを間接的に保証している。Table 3 中の異なる格子系の結果の比較は格子系による誤差の情報を与える。 ζ -空間の格子が結果に最も影響し、その傾向は $c_2^{(0)}$ で最も顕著である [(S1,M1), (S1,M3), (S1,M7) の結果を比較されたい。M3, M1 はそれぞれ M7 の 2 倍, 3/2 倍の点数の格子系である]。衝突和不変量については、 $C = ECE^{-1}$ に対し $C[(1, \mu\zeta, \zeta^2)E] = (1, \mu\zeta, \zeta^2)\nu E$, $C = EC^S E^{-1}$ に対し $C[E] = \nu E$ が成り立つ。格子系 M1 の場合、これらの等式はそれぞれ 9.1×10^{-8} , 1.7×10^{-8} , 6.6×10^{-8} , 8.9×10^{-9} の誤差の範囲内で成り立っていた。一方で、 $(1, \mu\zeta, \zeta^2)\nu E$ の最大値はそれぞれ 0.13, 0.064, 0.062 であった。これは衝突積分の計算精度の目安である。

問題 (4), (5) では保存量が存在する。式 (4a) の両辺に $E(\zeta)$, $\mu\zeta E(\zeta)$ あるいは $(\zeta^2 - 5/2)E(\zeta)$ を、式 (5a) の両辺に $(1 - \mu^2)\zeta^2 E(\zeta)$ を乗じて全 ζ で積分し、さらに η で積分す

Table 4: A comparison of the coefficients of the fitting curve for the Knudsen-layer function $\Omega_3^{(0)}$ near the boundary among the different lattice systems. The coefficients are determined by the method of least squares using the data in the interval $0 \leq \eta \leq 4.64 \times 10^{-6}$.

Lattice system	a	b	c
(S1,M1)	-0.3180275	-0.4054408	-0.253979
(S1,M2)	-0.3180275	-0.4054408	-0.253979
(S1,M3)	-0.3180279	-0.4054409	-0.253979
(S1,M4)	-0.3180281	-0.4054408	-0.253979
(S1,M5)	-0.3180275	-0.4054408	-0.253979
(S1,M6)	-0.3180276	-0.4054408	-0.253979
(S1,M7)	-0.3180234	-0.4054397	-0.253981
(S2,M1)	-0.3180273	-0.4054338	-0.253900
(S3,M1)	-0.3180275	-0.4054408	-0.253979

ると次の等式が得られる：

$$\begin{aligned} \langle \mu \zeta \phi_2 \rangle &= \int_{\eta}^{\infty} Y_2^{(1)}(z) dz, \quad \langle \mu^2 \zeta^2 \phi_2 \rangle_+ = -\langle \mu^2 \zeta^2 \phi_2 \rangle_-, \\ \langle \mu \zeta (\zeta^2 - \frac{5}{2}) \phi_2 \rangle &= \int_{\eta}^{\infty} H_2^{(1)}(z) dz, \end{aligned} \quad (21a)$$

$$\begin{aligned} \langle \mu \zeta \phi_3 \rangle &= -\frac{1}{2} \int_{\eta}^{\infty} Y_1^{(1)}(z) dz, \quad \langle \mu^2 \zeta^2 \phi_3 \rangle_+ = -\langle \mu^2 \zeta^2 \phi_3 \rangle_-, \\ \langle \mu \zeta (\zeta^2 - \frac{5}{2}) \phi_3 \rangle &= -\frac{1}{2} \int_{\eta}^{\infty} H_1^{(1)}(z) dz, \end{aligned} \quad (21b)$$

$$\langle (\mu \zeta, \mu^2 \zeta^2, \mu \zeta^3) \phi_5 \rangle_+ = -\langle (\mu \zeta, \mu^2 \zeta^2, \mu \zeta^3) \phi_5 \rangle_-, \quad (21c)$$

$$\langle \mu (1 - \mu^2) \zeta^3 \psi_4 \rangle_+ = -\langle \mu (1 - \mu^2) \zeta^3 \psi_4 \rangle_-. \quad (21d)$$

ここに、 $H_{\beta}^{(1)}(\eta) = (1/2) \langle \zeta^2 (\zeta^2 - 5/2) (1 - \mu^2) \psi_{\beta} \rangle$, ($\beta = 1, 2$), $\langle f(\zeta) \rangle_{\pm} = \langle f(\zeta) \chi[0, 1](\pm \mu) \rangle$. 格子系 (S1,M1) の場合, (21a) 中の式はそれぞれ 3.2×10^{-8} , 8.1×10^{-7} , 6.8×10^{-7} の誤差の範囲内で成り立っていた. ここで左辺の最大値はそれぞれ 0.48, 0.11, 1.3 であった. (21b) 中の式はそれぞれ 4.3×10^{-7} , 7.8×10^{-8} , 1.3×10^{-6} の誤差の範囲内で成り立っていた. ここで左辺の最大値はそれぞれ 0.11, 0.055, 0.076 であった. (21c) 中の式はそれぞれ 6.4×10^{-7} , 6.3×10^{-7} , 4.7×10^{-6} の誤差の範囲内で成り立っていた. ここで左辺の最大値はそれぞれ 0.085, 0.071, 0.29 であった. 式 (21d) は 3.6×10^{-6} の誤差の範囲内で成り立っていた. ここで左辺の最大値は 0.14 であった. これは本計算により得られるモーメント (とくに Knudsen 層関数) の精度の目安になる.

異なる格子系での $\Omega_3^{(0)}$ のフィッティング曲線の係数 a, b, c (7 節の最終段落を参照) を区間 $0 \leq \eta \leq 4.64 \times 10^{-6}$ のデータから最小 2 乗法により求めた. その結果を Table 4 に示すが, 格子系の違いによる誤差は小さく, 特異性に関わる係数 b が前節の Table 2 でみた程度の精度を有していることが示唆されている.

謝辞

本研究は JSPS 科研費 23360083, 13J01011 の助成を受けたものです.

参考文献

- [1] Y. Sone, in *Rarefied Gas Dynamics*, edited by L. Trilling and H. Y. Wachman, (Academic, New York, 1969), Vol. I, pp. 243–253.
- [2] Y. Sone, in *Rarefied Gas Dynamics*, edited by D. Dini, (Editrice Tecnico Scientifica, Pisa, 1971), Vol. II, pp. 737–749.
- [3] Y. Sone, *Molecular Gas Dynamics* (Birkhäuser, Boston, 2007).
- [4] S. Takata and M. Hattori, J. Stat. Phys. **147**, 1182–1215 (2012).
- [5] Y. Sone, T. Ohwada, and K. Aoki, Phys. Fluids A **1**, 363 (1989).
- [6] T. Ohwada, Y. Sone, and K. Aoki, Phys. Fluids A **1**, 1588 (1989).
- [7] T. Ohwada and Y. Sone, Eur. J. Mech. B/Fluids **11**, 389–414 (1992).
- [8] S. Takata, K. Aoki, M. Hattori, and N.G. Hadjiconstantinou, Phys. Fluids **24**, 032002 (2012).
- [9] S. Takata, J. Stat. Phys. **136**, 751–784 (2009).
- [10] S. Takata and H. Funagane, J. Fluid Mech. **669**, 242–259 (2011).
- [11] S. Takata and H. Funagane, J. Fluid Mech. **717**, 30–47 (2013).
- [12] C. Bardos, R.E. Caflisch, and B. Nicolaenko, Comm. Pure Appl. Math. **39**, 323–352 (1986).
- [13] Y. Sone, J. Phys. Soc. Japan **19**, 1463–1473 (1964).
- [14] S. Yasuda, S. Takata, and K. Aoki, Phys. Fluids **16**, 1989 (2004).