

二成分混合気体における種々の輸送係数の 数値計算とそのデータベース

Computation of various transport coefficients arising in binary gas mixtures and their database

高田滋, ○ 安田修悟, 青木一生

京大・工・航空宇宙 〒 606-8501 京都市左京区吉田本町 E-mail: kaoki2@ip.media.kyoto-u.ac.jp

Shigeru Takata, Shugo Yasuda, and Kazuo Aoki

Dept. of Aeronautics and Astronautics, Graduate School of Eng., Kyoto Univ., Kyoto 606-8501, Japan

Various transport coefficients occurring in the fluid-dynamic type equations that describe the density and temperature distributions in a gas at rest in the continuum limit (the limit where the Knudsen number vanishes) are considered in the case of a binary mixture of hard-sphere gases. The database that provides the numerical values of these coefficients immediately for an arbitrarily specified state of the mixture is constructed by solving the corresponding integral equations numerically. The database makes the fluid-dynamic type equations applicable to practical problems.

1. はじめに

古典流体力学によれば, 圧力一定で静止した気体 (例えば, 外力が働いていない場合の任意の壁面温度分布をもつ静止した容器内の気体) 中の温度場は, 定常な熱伝導方程式によって記述される. しかし, 古典流体力学が成り立つと考えられている連続体極限 (Knudsen 数 $\rightarrow 0$; Knudsen 数は気体分子の平均自由行程と系の代表長の比) においても, 実は熱伝導方程式は正しい温度場を与えない. これは, 連続体極限で消滅する気体の希薄化効果による流れが, この極限の温度場に有意の影響を与えることによる. 曾根らは, Boltzmann 方程式の系統的漸近解析により, この事実を指摘するとともに, 温度場を正しく記述する流体力学的方程式・境界条件を導いた^[1]. また, この効果は幽霊効果 (ghost effect) と名付けられた (文献 [2]-[4] 参照.) これはその後, 高田・青木により二成分混合気体に対して拡張された^[5]. すなわち, Boltzmann 方程式の系統的な漸近解析により, 連続体極限における静止した混合気体中の温度・密度分布を正しく記述する流体力学的方程式とその境界条件が形式的に導かれ, 混合気体における幽霊効果の要因が明らかにされた.

上述の流体力学的方程式には, 様々な輸送係数 (粘性係数, 拡散係数など) が含まれる. これらは, Boltzmann 方程式の衝突積分作用素を用いて定義される積分方程式の解およびそれらに衝突積分を施して得られる関数をさらに積分することによって得られる. 輸送係数は一般に, 混合気体の局所的な温度・密度および各成分気体の局所的な濃度の関数であるが, 特に濃度依存性を陽な形で求めることができない. しかし, これが分からないと, 流体力学的方程式を具体的問題に応用することができない. これが混合気体におけるやっかいな点である.

空間一次元問題の場合^{[6][7]}, 解析に必要な輸送係数は, 粘性係数, 熱伝導係数, 熱拡散係数, 相互拡散係数として

知られるものである. これらは従来, 上述の積分方程式の, Sonine 多項式展開の初項のみ (場合によっては数項) を用いた近似解に基づいて求められていた^[8]. しかしこの方法による輸送係数の精度は曖昧である. そこで最近, 柴田は剛体球分子に対して, Sonine 多項式展開を用いず, 積分方程式を直接数値解析し, その数値解を積分することによって上述の四つの輸送係数を正確に求めた^[9]. ここでは, これら輸送係数の成分濃度の関数としての関数形を数値的に構築している.

一方, 多次元問題を解析する場合, 先の輸送係数だけでは不十分で, さらに熱応力項の係数, 濃度応力項の係数が必要となる. そこで本研究では, これらの係数を (成分濃度の関数として) 正確に求めることを試みる.

濃度関数形の構築については, 様々な濃度に対して輸送係数を求めそれらの補間等で関数形を近似する方法が考えられるが, 本研究では, 文献 [9] 同様の方法を採用する. すなわち, 輸送係数を濃度についてのべき級数で展開し, その展開係数を求めて保存することにより, データベースを構築する. さらに, これと文献 [9] のデータベースを用いて, 局所濃度に対する全輸送係数の値を与えるプログラムを作成する. これにより, 文献 [5] の流体力学的方程式を具体的問題に応用することができる.

まず, 第 2 節では, 文献 [5] の流体力学的方程式, 及びその中に含まれる様々な輸送係数を求めるための方程式を示し, 第 3 節で数値計算の為の予備的解析を行う. 第 4 節では, 輸送係数の濃度関数形の数値的構築方法として濃度によるべき級数展開を導入する. 輸送係数を求める計算は Boltzmann 方程式の衝突積分項を扱う複雑な積分計算を含む. その数値計算法を第 5 節で示す. 第 6 節ではその結果を, 柴田により求められている輸送係数と合わせて示し, 計算精度についても吟味する.

2. 問題と基礎方程式

まずはじめに次の基準量を導入する； L_0 ：系の代表長， T_0 ：基準温度， n_0 ：基準分子数密度， $p_0(=kn_0T_0)$ ：基準圧力， m_0 ：基準分子質量， d_0 ：基準分子直径．ここで， k は Boltzmann 定数である．

文献 [5] では，まず以下の仮定 i)，ii) のもとで，Boltzmann 方程式（二成分混合気体）の Knudsen 数が小さい場合の系統的漸近解析を行い，次にそれをもとに連続体極限における気体の定常的振舞を記述する流体力学方程式・境界条件を導出している．

i) 各成分気体は剛体球分子気体ある．

ii) 気体の流れのマッハ数が Knudsen 数程度 [$O(\text{Kn})$] である．

ここで， Kn は Knudsen 数で，直径 d_0 の分子からなる気体が，数密度 n_0 の静止平衡状態にあるときの平均自由行程 $l_0 (= 1/[\sqrt{2}\pi d_0^2 n_0])$ を用い， l_0/L_0 で定義される．特に， $\text{Kn} \rightarrow 0$ を連続体極限と呼ぶ．仮定 ii) は，連続体極限で気体が静止することを意味する．この仮定は，静止した通常の境界まわりの混合気体，あるいは静止した凝縮相まわりの蒸気と非凝縮性気体の混合気体（無限領域の場合には，無限遠で気体は静止しており，圧力は一様とする）において満たされるものである [5]．

以下の文中や式中で現れる「 α 気体」なる表現や α なる添え字は， A または B を表すものとする．また，以後，特に断りのない限り \sum_{β} は $\sum_{\beta=A,B}$ を表すものとする．

2.1 流体力学方程式

空間直交座標を X_i ， α 気体分子の質量と直径をそれぞれ m^α ， d_m^α とする．さらに連続体極限 ($\text{Kn} \rightarrow 0$) での α 気体の数密度を n^α ，密度を ρ^α ，圧力を p^α ，混合気体全体の数密度を n ，密度を ρ ，圧力を p ，温度を T とする．ここで，次のような無次元変数を導入する．

$$\left. \begin{aligned} x_i &= X_i/L_0, & \hat{n}^\alpha &= n^\alpha/m_0, & \hat{d}_m^\alpha &= d_m^\alpha/d_0, \\ \hat{n}^\alpha &= n^\alpha/n_0, & \hat{\rho}^\alpha &= \rho^\alpha/\rho_0, & \hat{p}^\alpha &= p^\alpha/p_0, \\ \hat{n} &= n/n_0, & \hat{\rho} &= \rho/\rho_0, & \hat{p} &= p/p_0, \\ \hat{T} &= T/T_0, \end{aligned} \right\} \quad (2.1)$$

文献 [5] で導出された流体力学方程式（境界条件は除く）を無次元変数で書き下すと，

$$\frac{\partial \hat{p}}{\partial x_i} = 0, \quad (2.2)$$

$$\frac{\partial}{\partial x_i} (\hat{n}^\alpha \Lambda_i^\alpha) = 0, \quad (2.3)$$

$$\begin{aligned} \hat{\rho} \Lambda_i \frac{\partial \Lambda_j}{\partial x_i} &= -\frac{1}{2} \left\{ \frac{\partial \Pi}{\partial x_j} - \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\hat{\mu} \hat{T}^{1/2} \frac{\partial \Lambda_i}{\partial x_j} \right) \right. \\ &+ \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\hat{\gamma}_1}{\hat{p}} \frac{\partial \hat{T}}{\partial x_i} \frac{\partial \hat{T}}{\partial x_j} \right) + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{1}{\hat{n}} \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\hat{\gamma}_2 \frac{\partial \hat{T}}{\partial x_j} \right) \right) \\ &+ \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\hat{\gamma}_3 \frac{\hat{T}}{\hat{n}} \frac{\partial X^A}{\partial x_i} \frac{\partial X^A}{\partial x_j} \right) + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\hat{\gamma}_4}{\hat{n}} \frac{\partial X^A}{\partial x_i} \frac{\partial \hat{T}}{\partial x_j} \right) \\ &\left. + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\hat{T}}{\hat{n}} \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\hat{\gamma}_5 \frac{\partial X^A}{\partial x_j} \right) \right) \right\}, \quad (2.4) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\hat{\lambda} \hat{T}^{1/2} \frac{\partial \hat{T}}{\partial x_i} \right) - \frac{\partial}{\partial x_i} [k_T \hat{p} (\Lambda_i^A - \Lambda_i^B)] \\ - \frac{5}{2} (\hat{n}^A \Lambda_i^A + \hat{n}^B \Lambda_i^B) \frac{\partial \hat{T}}{\partial x_i} = 0, \quad (2.5) \end{aligned}$$

$$\Lambda_i^A - \Lambda_i^B = -\frac{\hat{T}^{1/2}}{\hat{n}} \frac{\hat{D}_{AB}}{X^A X^B} \left(\frac{\partial X^A}{\partial x_i} + k_T \frac{\partial \ln \hat{T}}{\partial x_i} \right). \quad (2.6)$$

ここで，

$$\overline{A_{ij}} = A_{ij} + A_{ji} - (2/3) A_{kk} \delta_{ij}. \quad (2.7)$$

これらの変数の間には，

$$\left. \begin{aligned} \hat{p}^\alpha &= \hat{n}^\alpha \hat{T}, & \hat{p} &= \sum_{\beta} \hat{p}^\beta, & \hat{\rho}^\alpha &= \hat{m}^\alpha \hat{n}^\alpha, \\ \hat{\rho} &= \sum_{\beta} \hat{\rho}^\beta, & \hat{n} &= \sum_{\beta} \hat{n}^\beta, & \hat{\rho} \Lambda_i &= \sum_{\beta} \hat{\rho}^\beta \Lambda_i^\beta, \end{aligned} \right\} \quad (2.8)$$

の関係がある．さらに， X^α は数密度で定義される各成分気体の濃度を表し，

$$X^\alpha = \hat{n}^\alpha / \hat{n}, \quad \left(\sum_{\beta} X^\beta = 1 \right). \quad (2.9)$$

式中の Λ_i^α ， Π は連続体極限では現れない関数で，物理的には次の意味をもつ．今， $0 < \text{Kn} \ll 1$ の場合（連続体極限近傍）を考え，このときの各成分気体の流速を v_i^α ，混合気体の圧力を p' とし， $\epsilon = (\sqrt{\pi}/2)\text{Kn}$ とおくと， v_i^α ， p' は，

$$\left. \begin{aligned} (2kT_0/m_0)^{-1/2} v_i^\alpha &= \Lambda_i^\alpha \epsilon + O(\epsilon^2), \\ p'/p_0 &= \hat{p} + \hat{p}_* \epsilon + \Pi \epsilon^2 + O(\epsilon^3), \end{aligned} \right\}$$

と表される（ \hat{p}_* はやはり定数で，問題によって決まる）．すなわち， Λ_i^α は流速の ϵ 展開の 1 次の係数， Π は圧力の ϵ 展開の 2 次の係数である．従って，連続体極限 ($\epsilon \rightarrow 0$) では $v_i^\alpha \rightarrow 0$ ， $p'/p_0 \rightarrow \hat{p}$ となり， Λ_i^α ， Π はこの極限では物理的意味を持たない．(2.2) よりこのとき気体は圧力一定で静止する．第 1 節冒頭でも述べように，曾根らは単成分気体に対する Boltzmann 方程式の系統的漸近解析を行い，圧力一定で静止した気体を考えたとき古典流体力学から導かれる熱伝導方程式では温度場を正しく記述できない（幽霊効果）ことを指摘するとともに，正しい流体力学方程式・境界条件を導いた．(2.2)-(2.6) の方程式はこれを二成分混合気体へ拡張したもので，連続体極限では現れ

ない物理量 Λ_i^α , Π (幽霊) が, その極限での物理量に影響を及ぼす幽霊効果を正しく記述するものである.

また, 方程式中に現れる $\hat{\mu}, \hat{\lambda}, k_T, \hat{D}_{AB}, \hat{\Upsilon}_1, \hat{\Upsilon}_2, \hat{\Upsilon}_3, \hat{\Upsilon}_4, \hat{\Upsilon}_5$ は (\hat{m}^A, \hat{m}^B) , $(\hat{d}_m^A, \hat{d}_m^B)$ に依存する濃度 X^A の関数である. 特に $\hat{\mu}, \hat{\lambda}, k_T, \hat{D}_{AB}$ はそれぞれ, 粘性係数, 熱伝導係数, 熱拡散比, 相互拡散係数として知られている輸送係数に対応し, 後述の (2.10)-(2.12) の積分方程式の解を積分することで求められる. 柴田は (2.10)-(2.12) の積分方程式を解く際, Sonine 多項式展開を用いてその初項 (あるいはせいぜい数項) で打ち切る従来からの方法 [8] によらず, 直接数値的に解くことで精確な輸送係数を求めた. これにより, 従来の Sonine 多項式展開を用いた方法の精度も検証された. 一次元定常問題は, 柴田によって求められた $\hat{\mu}, \hat{\lambda}, k_T, \hat{D}_{AB}$ のデータを数値計算に組み込むことで解析することができる. しかし, 多次元定常問題を扱う場合には上記の係数の他に熱応力項や濃度応力項の係数 $\hat{\Upsilon}_1, \hat{\Upsilon}_2, \hat{\Upsilon}_3, \hat{\Upsilon}_4, \hat{\Upsilon}_5$ が必要となる.

2.2 輸送係数を求める方程式系

まず関数 $A^\alpha(\zeta), B^\alpha(\zeta), D^{(\beta)\alpha}(\zeta)$ を導入する. ここで独立変数 ζ はベクトル $\zeta = (\zeta_1, \zeta_2, \zeta_3)$ の長さ, すなわち $\zeta = (\zeta_i^2)^{1/2}$ である. これらは次の積分方程式の解として定義される.

$$\sum_{\beta} \hat{K}^{\beta\alpha} X^\beta \tilde{L}^{\beta\alpha} [\zeta_i A^\beta, \zeta_i A^\alpha] = -\zeta_i (\hat{m}^\alpha \zeta^2 - \frac{5}{2}), \quad (2.10a)$$

$$\text{付帯条件: } \sum_{\beta} \hat{m}^\beta X^\beta I_4^\beta (A^\beta) = 0. \quad (2.10b)$$

$$\sum_{\beta} \hat{K}^{\beta\alpha} X^\beta \tilde{L}^{\beta\alpha} [c_{ij} B^\beta, c_{ij} B^\alpha] = -2\hat{m}^\alpha c_{ij}, \quad (2.11a)$$

$$c_{ij} = \zeta_i \zeta_j - \frac{1}{3} \zeta^2 \delta_{ij}. \quad (2.11b)$$

$$\sum_{\beta} \hat{K}^{\beta\alpha} X^\alpha X^\beta \tilde{L}^{\beta\alpha} [\zeta_i D^{(\gamma)\beta}, \zeta_i D^{(\gamma)\alpha}] = -\zeta_i (\delta_{\alpha\gamma} - \frac{\hat{\rho}^\alpha}{\hat{\rho}}), \quad (2.12a)$$

$$\text{付帯条件: } \sum_{\beta} \hat{m}^\beta X^\beta I_4^\beta (D^{(\gamma)\beta}) = 0. \quad (2.12b)$$

つぎに関数 $A_1^\alpha(\zeta), A_2^\alpha(\zeta), D_1^{(\gamma,\kappa)\alpha}(\zeta), D_2^{(\gamma,\kappa)\alpha}(\zeta), D_{A_1}^{(\gamma)\alpha}(\zeta), D_{A_2}^{(\gamma)\alpha}(\zeta)$ を導入する. これらは次の積分により求められる.

$$\begin{aligned} \sum_{\beta} \hat{K}^{\beta\alpha} X^\beta \tilde{J}^{\beta\alpha} (\zeta_i D^{(\gamma)\beta}, \zeta_j D^{(\kappa)\alpha}) \\ = \zeta_i \zeta_j D_1^{(\gamma,\kappa)\alpha} + D_2^{(\gamma,\kappa)\alpha} \delta_{ij}, \end{aligned} \quad (2.13)$$

$$\sum_{\beta} \hat{K}^{\beta\alpha} X^\beta \tilde{J}^{\beta\alpha} (\zeta_i A^\beta, \zeta_j A^\alpha) = \zeta_i \zeta_j A_1^\alpha + A_2^\alpha \delta_{ij}, \quad (2.14)$$

$$\begin{aligned} \sum_{\beta} \hat{K}^{\beta\alpha} X^\beta [\tilde{J}^{\beta\alpha} (\zeta_i A^\beta, \zeta_j D^{(\kappa)\alpha}) + \tilde{J}^{\beta\alpha} (\zeta_i D^{(\gamma)\beta}, \zeta_j A^\alpha)] \\ = \zeta_i \zeta_j D_{A_1}^{(\gamma)\alpha} + D_{A_2}^{(\gamma)\alpha} \delta_{ij}. \end{aligned} \quad (2.15)$$

ここで,

$$\hat{J}^{\beta\alpha}(f, g) = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \int (f_*^{\beta\alpha} g^{\beta\alpha} - f_* g) |e \cdot \hat{V}| d\Omega(e) d\zeta_*, \quad (2.16)$$

$$\tilde{L}^{\beta\alpha}(f, g) = [\hat{J}^{\beta\alpha}(f E^\beta, E^\alpha) + \hat{J}^{\beta\alpha}(E^\beta, g E^\alpha)] / E^\alpha, \quad (2.17)$$

$$\tilde{J}^{\beta\alpha}(f, g) = \hat{J}^{\beta\alpha}(f E^\beta, g E^\alpha) / E^\alpha, \quad (2.18)$$

$$I_n^\alpha(F) = \frac{8\pi}{15} \int_0^\infty \zeta^n F(\zeta) E^\alpha(\zeta) d\zeta, \quad (2.19)$$

$$E^\alpha(\zeta) = \left(\frac{\hat{m}^\alpha}{\pi}\right)^{3/2} \exp(-\hat{m}^\alpha \zeta^2) \quad (2.20)$$

$$\left. \begin{aligned} \zeta^{\beta\alpha} &= \zeta + \frac{\hat{\mu}^{\beta\alpha}}{\hat{m}^\alpha} (e \cdot \hat{V}) e, \\ \zeta_*^{\beta\alpha} &= \zeta_* - \frac{\hat{\mu}^{\beta\alpha}}{\hat{m}^\beta} (e \cdot \hat{V}) e, \\ \hat{V} &= \zeta_* - \zeta, \\ \hat{K}^{\beta\alpha} &= \left(\frac{\hat{d}_m^\alpha + \hat{d}_m^\beta}{2}\right)^2, \quad \hat{\mu}^{\beta\alpha} = \frac{2\hat{m}^\alpha \hat{m}^\beta}{\hat{m}^\alpha + \hat{m}^\beta}, \\ f_*^{\beta\alpha} &= f(\zeta_*^{\beta\alpha}), \quad g^{\beta\alpha} = g(\zeta_i^{\beta\alpha}), \quad f_* = f(\zeta_{*i}). \end{aligned} \right\} \quad (2.21)$$

(2.16) は Boltzmann 方程式の衝突積分項であり, ζ_* は ζ に対応する積分変数, $d\zeta_* = d\zeta_{*1} \zeta_{*2} \zeta_{*3}$ で, e は単位ベクトル, $d\Omega(e)$ は e 方向の立体角素を表す. 積分は e の全方向, ζ_* の全空間で行う. (2.10a)-(2.15) では, 制限 $X^A + X^B = 1$ [(2.9)] を用いていない. すなわち, A^α, B^α 等は任意の $X^A, X^B (>0)$ に対して定義されており, それらの関数である.

上で導入された関数を用いて $\hat{\mu}, \hat{\lambda}, k_T, \hat{D}_{AB}, \hat{\Upsilon}_1, \hat{\Upsilon}_2, \hat{\Upsilon}_3, \hat{\Upsilon}_4, \hat{\Upsilon}_5$ は次の計算から求められる.

$$\begin{aligned} \hat{D}_{AB} &= X^A X^B (\hat{\Delta}_{AA} + \hat{\Delta}_{BB} - \hat{\Delta}_{AB} - \hat{\Delta}_{BA}), \\ \hat{D}_T &= X^A X^B (\hat{D}_{TA} - \hat{D}_{TB}), \quad \hat{\mu} = \sum_{\beta} \hat{m}^\beta X^\beta I_6^\beta (B^\beta), \\ \hat{\lambda}' &= \frac{5}{2} \sum_{\beta} X^\beta I_4^\beta ([\hat{m}^\beta \zeta^2 - \frac{5}{2}] A^\beta), \\ k_T &= \frac{\hat{D}_T}{\hat{D}_{AB}}, \quad \hat{\lambda} = \hat{\lambda}' - k_T \frac{\hat{D}_T}{X^A X^B}, \\ \hat{\Upsilon}_1 &= \frac{1}{2} \sum_{\beta} X^\beta I_6^\beta (B^\beta [A_1^\beta + (\hat{m}^\beta \zeta^2 - 3) A^\beta - \frac{\zeta}{2} \frac{\partial A^\beta}{\partial \zeta}]), \\ \hat{\Upsilon}_2 &= \frac{1}{2} \sum_{\beta} X^\beta I_6^\beta (A^\beta B^\beta), \\ \hat{\Upsilon}_3 &= \hat{\Upsilon}_3^{(A,A)} + \hat{\Upsilon}_3^{(B,B)} - \hat{\Upsilon}_3^{(A,B)} - \hat{\Upsilon}_3^{(B,A)}, \\ \hat{\Upsilon}_4 &= \hat{\Upsilon}_4^{(A)} - \hat{\Upsilon}_4^{(B)}, \quad \hat{\Upsilon}_5 = \hat{\Upsilon}_5^{(A)} - \hat{\Upsilon}_5^{(B)}. \end{aligned} \quad (2.22)$$

ここで,

$$\begin{aligned} \hat{\Delta}_{\alpha\beta} &= \frac{5}{2} I_4^\alpha (D^{(\beta)\alpha}), \quad \hat{D}_{T\alpha} = \frac{5}{2} I_4^\alpha (A^\alpha), \\ \hat{\Upsilon}_3^{(\alpha,\gamma)} &= \frac{1}{2} \sum_{\beta} X^\beta X^\beta I_6^\beta (B^\beta D_1^{(\alpha,\gamma)\beta} - D^{(\alpha)\beta} \frac{\partial B^\beta}{\partial X^\gamma}), \\ \hat{\Upsilon}_4^{(\alpha)} &= \frac{1}{2} \sum_{\beta} X^\beta I_6^\beta (B^\beta [D_{A_1}^{(\alpha)\beta} + (\hat{m}^\beta \zeta^2 - 2) D^{(\alpha)\beta} \\ &\quad - \frac{\zeta}{2} \frac{\partial D^{(\alpha)\beta}}{\partial \zeta}] - A^\beta \frac{\partial B^\beta}{\partial X^\alpha}), \\ \hat{\Upsilon}_5^{(\alpha)} &= \frac{1}{2} \sum_{\beta} X^\beta I_6^\beta (B^\beta D^{(\alpha)\beta}). \end{aligned} \quad (2.23)$$

方程式 (2.4)-(2.6) と整合をとるため, (2.22), (2.23) の結果において制限 $X^A + X^B = 1$ を用いる必要がある.

先述のように, $\hat{\mu}, \hat{\lambda}, k_T, \hat{D}_{AB}$ は既に柴田が積分方程式 (2.10)-(2.12) を直接数値的に解き, その解 $A^\alpha, B^\alpha, D^{(\beta)\alpha}$ を積分することにより求めている. 残りの係数のうち $\hat{\Upsilon}_2, \hat{\Upsilon}_5$ については, 同じ解 $A^\alpha, B^\alpha, D^{(\beta)\alpha}$ を積分することで求めることができる. 一方, $\hat{\Upsilon}_1, \hat{\Upsilon}_3, \hat{\Upsilon}_4$ の計算には, (2.13)-(2.15) の Boltzmann 方程式の衝突積分項を

扱う、複雑な積分計算を要する。その数値計算の方法については5節において詳しく説明する。

また、これらの係数は、(2.10)-(2.15)に X^α が掛かっていることから分かるように気体中の局所的な成分濃度の関数であるが、関数形は陽ではない。そこでこれらの係数の濃度関数形を数値的に構築することが必要となる。その方法の詳細は4節において示す。

3. 積分の変形

ここでは数値計算の準備として、式(2.13)-(2.15)で扱う積分の変形を行う。まず、式(2.18)の $\tilde{j}^{\beta\alpha}(f, g)$ を次のように分解する。

$$\tilde{j}^{\beta\alpha}(f, g) = \tilde{G}^{\beta\alpha}(f, g) - g\tilde{\nu}^\beta(f), \quad (3.1)$$

$$\tilde{G}^{\beta\alpha}(f, g) = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \int E_*^\beta f_*^{\beta\alpha} g^{\beta\alpha} |e \cdot \hat{V}| d\Omega(e) d\zeta_*, \quad (3.2)$$

$$\tilde{\nu}^\beta(f) = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \int E_*^\beta f_* |e \cdot \hat{V}| d\Omega(e) d\zeta_*, \quad (3.3)$$

$$E_*^\alpha = E^\alpha(\zeta_{i*}) \quad (3.4)$$

(3.2), (3.3)は、適当な積分変数の変換を施し、実行できる積分を実行すると、次のような形に変形できる。

$$\tilde{G}^{\beta\alpha}(f, g) = \frac{1}{2\sqrt{2\pi}} \left(\frac{\hat{m}^\alpha}{\hat{\mu}^{\beta\alpha}} \right)^2 \int_{\zeta_*} d\xi \frac{\exp(\hat{m}^\alpha(\zeta^2 - \xi^2))}{\sqrt{\xi^2 + \zeta^2 - 2\xi \cdot \zeta}} g(\xi) \times \int_{|\eta_i^{\beta\alpha}|} d\eta \int_0^{2\pi} d\psi_\eta \eta E^\beta(\eta) f(\eta), \quad (3.5)$$

$$\tilde{\nu}^\beta(f) = \frac{\sqrt{\pi}}{2\sqrt{2}} \int_{\zeta_*} d\xi |\xi - \zeta| E^\beta(\xi) f(\xi). \quad (3.6)$$

ここで、

$$\eta = \eta_i^{\beta\alpha} \mathbf{a} + \eta_n^{\beta\alpha} (\mathbf{b} \cos \psi_\eta + (\mathbf{a} \times \mathbf{b}) \sin \psi_\eta),$$

$$\mathbf{a} = \frac{\xi - \zeta}{|\xi - \zeta|}, \quad \mathbf{b} = \frac{\zeta - (\zeta \cdot \mathbf{a})\mathbf{a}}{|\zeta - (\zeta \cdot \mathbf{a})\mathbf{a}|},$$

$$\eta_i^{\beta\alpha} = \frac{1}{2} |\xi - \zeta|^{-1} \left\{ \left(1 - \frac{\hat{m}^\alpha}{\hat{m}^\beta}\right) \xi^2 - \left(1 + \frac{\hat{m}^\alpha}{\hat{m}^\beta}\right) \zeta^2 + 2 \frac{\hat{m}^\alpha}{\hat{m}^\beta} \xi \cdot \zeta \right\},$$

$$\eta_n^{\beta\alpha} = \sqrt{\eta^2 - (\eta_i^{\beta\alpha})^2}, \quad \xi = (\xi_i^2)^{1/2}.$$

(2.13)-(2.15)で実際に必要となるのは、 $f(\zeta_i)$ が $\zeta_i F(\zeta)$ 、 $g(\zeta_i)$ が $\zeta_i G(\zeta)$ のような形の場合である。そこでこれらを(3.1)に代入し、(3.4)、(3.5)を参照してさらに実行できる積分を実行すると、

$$\tilde{j}^{\beta\alpha}(\zeta_i F, \zeta_j G) = \zeta_i \zeta_j \tilde{J}_1^{\beta\alpha}(F, G) + \delta_{ij} \tilde{J}_2^{\beta\alpha}(F, G), \quad (3.7)$$

と簡略化できる。ここで、

$$\tilde{J}_1^{\beta\alpha}(F, G) = \frac{\pi^{3/2}}{\sqrt{2}\zeta^2} \left\{ \left(\frac{\hat{m}^\alpha}{\hat{\mu}^{\beta\alpha}} \right)^2 \int_0^\infty d\xi \xi^3 \exp(\hat{m}^\alpha(\zeta^2 - \xi^2)) G(\xi) \times \int_{-1}^1 dy \left(\frac{3\xi y^2 - 2\zeta y - \xi}{\xi^2 + \zeta^2 - 2\xi\zeta y} \right) X_i^{\beta\alpha} \times \int_{|X_i^{\beta\alpha}|} d\eta \eta E^\beta(\eta) F(\eta) - G(\zeta) \int_0^\infty d\xi E^\beta(\xi) F(\xi) \left[-\frac{\xi^2}{3} ((\xi + \zeta)^3 + |\xi - \zeta|^3) + \frac{\xi}{15\zeta} ((\xi + \zeta)^5 - |\xi - \zeta|^5) \right] \right\}, \quad (3.8)$$

$$\tilde{J}_2^{\beta\alpha}(F, G) = \frac{\pi^{3/2}}{\sqrt{2}} \left(\frac{\hat{m}^\alpha}{\hat{\mu}^{\beta\alpha}} \right)^2 \int_0^\infty d\xi \xi^4 \exp(\hat{m}^\alpha(\zeta^2 - \xi^2)) G(\xi) \times \int_{-1}^1 dy \left(\frac{1 - y^2}{\xi^2 + \zeta^2 - 2\xi\zeta y} \right) X_i^{\beta\alpha} \times \int_{|X_i^{\beta\alpha}|} d\eta \eta E^\beta(\eta) F(\eta), \quad (3.9)$$

$$X_i^{\beta\alpha}(\zeta, \xi, y) = \frac{(1 - \frac{\hat{m}^\alpha}{\hat{m}^\beta})\xi^2 - (1 + \frac{\hat{m}^\alpha}{\hat{m}^\beta})\zeta^2 + 2\frac{\hat{m}^\alpha}{\hat{m}^\beta}\xi\zeta y}{2\sqrt{\xi^2 + \zeta^2 - 2\xi\zeta y}}, \quad (3.10)$$

である。この結果、 $\hat{Y}_1, \hat{Y}_3, \hat{Y}_4$ を求める際に必要となる関数 $D_1^{(\beta, \gamma)\alpha}, A_1^\alpha, D_{A1}^{(\gamma)\alpha}$ は(3.7)および(2.13)-(2.15)より次の積分から求められることが分かる。

$$D_1^{(\gamma, \kappa)\alpha}(\zeta, X^A, X^B) = \sum_\beta \hat{K}^{\beta\alpha} X^\beta \tilde{J}_1^{\beta\alpha}(D^{(\gamma)\beta}, D^{(\kappa)\alpha}), \quad (3.11)$$

$$A_1^\alpha(\zeta, X^A, X^B) = \sum_\beta \hat{K}^{\beta\alpha} X^\beta \tilde{J}_1^{\beta\alpha}(A^\beta, A^\alpha), \quad (3.12)$$

$$D_{A1}^{(\gamma)\alpha}(\zeta, X^A, X^B) = \sum_\beta \hat{K}^{\beta\alpha} X^\beta [\tilde{J}_1^{\beta\alpha}(A^\beta, D^{(\gamma)\alpha}) + \tilde{J}_1^{\beta\alpha}(D^{(\gamma)\beta}, A^\alpha)]. \quad (3.13)$$

ここでは X^α を独立変数として陽に示した。 $A^\alpha, D^{(\beta)\alpha}$ は(2.10), (2.12)の積分方程式の解で、 $D_1^{(\beta, \gamma)\alpha}, A_1^\alpha, D_{A1}^{(\gamma)\alpha}$ は、 \hat{m}^κ と \hat{t}^κ に依存する X^κ と ζ の関数である。 $(\kappa = A, B)$

4. 濃度による展開

輸送係数の濃度関数形を数値的に構築する方法について説明する。2.2節で示した輸送係数を求める方程式系では、各成分気体の濃度 X^α をパラメータとして与えると、その濃度における輸送係数が定まる。そこで様々な X^α をパラメータとして与え、濃度に対して離散的に輸送係数を求めておき、それらの内挿等で濃度関数形を近似する方法もあるが、本研究ではそれは用いない。本研究では以下に示すように、輸送係数を濃度について展開し、その濃度関数形を数値的に構築した。

まず、 X^α の代わりにパラメータ σ

$$\sigma = X^A - \frac{1}{2} = -X^B + \frac{1}{2}, \quad (0 \leq \sigma \leq \frac{1}{2}), \quad (4.1)$$

を導入する^{注)}。 σ で $A^\alpha, B^\alpha, D^{(\beta)\alpha}$ を展開する。即ち、

$$A^\alpha(\zeta, X^A, 1 - X^A) = \sum_{n=0}^\infty A_n^\alpha(\zeta) \sigma^n, \quad (4.2)$$

$$B^\alpha(\zeta, X^A, 1 - X^A) = \sum_{n=0}^\infty B_n^\alpha(\zeta) \sigma^n, \quad (4.3)$$

$$\bar{D}^{(\beta)\alpha}(\zeta, X^A, 1 - X^A) = \sum_{n=0}^\infty \bar{D}_n^{(\beta)\alpha}(\zeta) \sigma^n, \quad (4.4a)$$

$$\bar{D}^{(\beta)\alpha} = D^{(\beta)\alpha} / \left(\frac{1 - X^\beta}{X^\alpha} \right). \quad (4.4b)$$

これらを積分方程式 (2.10) ~ (2.12) に代入し整理すると、展開係数 A_n^α , B_n^α , $\bar{D}_n^{(\beta)\alpha}$ に対する積分方程式が得られる。柴田はその積分方程式を解き、展開係数を求めデータベースとして保存した (積分方程式の具体形、及びその解法の詳細は文献 [9])。 (3.11) ~ (3.13) に A^α , $D^{(\alpha)\beta}$ の濃度展開形 (4.2), (4.4) を代入し整理すると、 $D_1^{(\beta,\gamma)\alpha}$, A_1^α , $D_{A1}^{(\gamma)\alpha}$ は次のように σ の展開形で表すことができる。

$$A_1^\alpha(\zeta, X^A, 1 - X^A) = \sum_{n=0}^{\infty} A_{1n}^\alpha(\zeta) \sigma^n, \quad (4.5a)$$

$$A_{1n}^\alpha = \begin{cases} \sum_{\beta} \hat{K}^{\beta\alpha} \frac{1}{2} \tilde{J}_{1(0)}^{\beta\alpha}(A_p^\beta, A_q^\alpha), & (n=0), \\ \sum_{\beta} \hat{K}^{\beta\alpha} \left[\frac{1}{2} \tilde{J}_{1(n)}^{\beta\alpha}(A_p^\beta, A_q^\alpha) \right. \\ \quad \left. + \delta_{\beta} \tilde{J}_{1(n-1)}^{\beta\alpha}(A_p^\beta, A_q^\alpha) \right], & (n=1, 2, \dots), \end{cases} \quad (4.5b)$$

$$\bar{D}_1^{(\gamma,\kappa)\alpha}(\zeta, X^A, 1 - X^A) = \sum_{n=0}^{\infty} \bar{D}_{1n}^{(\gamma,\kappa)\alpha}(\zeta) \sigma^n, \quad (4.6a)$$

$$\bar{D}_{1n}^{(\gamma,\kappa)\alpha} = \sum_{\beta} \hat{K}^{\beta\alpha} \tilde{J}_{1(n)}^{\beta\alpha}(\bar{D}_p^{(\gamma)\beta}, \bar{D}_q^{(\kappa)\alpha}), \quad (n=0, 1, 2, \dots), \quad (4.6b)$$

$$\bar{D}_1^{(\gamma,\kappa)\alpha} = D_1^{(\gamma,\kappa)\alpha} / \left\{ \frac{(1-X^\gamma)(1-X^\kappa)}{X^\alpha} \right\}, \quad (4.6c)$$

$$\bar{D}_{A1}^{(\gamma)\alpha}(\zeta, X^A, 1 - X^A) = \sum_{n=0}^{\infty} \bar{D}_{A1n}^{(\gamma)\alpha}(\zeta) \sigma^n \quad (4.7a)$$

$$\bar{D}_{A1n}^{(\gamma)\alpha} = \begin{cases} \sum_{\beta} \hat{K}^{\beta\alpha} \left[\frac{1}{2} \tilde{J}_{1(0)}^{\beta\alpha}(A_p^\beta, \bar{D}_q^{(\gamma)\alpha}) \right. \\ \quad \left. + \tilde{J}_{1(0)}^{\beta\alpha}(\bar{D}_q^{(\gamma)\beta}, A_p^\alpha) \right], & (n=0), \\ \sum_{\beta} \hat{K}^{\beta\alpha} \left[\frac{1}{2} \tilde{J}_{1(n)}^{\beta\alpha}(A_p^\beta, \bar{D}_q^{(\gamma)\alpha}) \right. \\ \quad \left. + \delta_{\beta} \tilde{J}_{1(n-1)}^{\beta\alpha}(A_p^\beta, \bar{D}_q^{(\gamma)\alpha}) \right. \\ \quad \left. + \frac{1}{2} \tilde{J}_{1(n)}^{\beta\alpha}(\bar{D}_p^{(\gamma)\beta}, A_q^\alpha) \right. \\ \quad \left. + \delta_{\alpha} \tilde{J}_{1(n-1)}^{\beta\alpha}(\bar{D}_p^{(\gamma)\beta}, A_q^\alpha) \right], & (n=1, 2, \dots), \end{cases} \quad (4.7b)$$

$$\bar{D}_{A1}^{(\gamma)\alpha} = D_{A1}^{(\gamma)\alpha} / \left(\frac{1-X^\gamma}{X^\alpha} \right). \quad (4.7c)$$

ここで、

$$\tilde{J}_{1(n)}^{\beta\alpha}(F_p, G_q) = \sum_{i=0}^n \tilde{J}_1^{\beta\alpha}(F_i, G_{n-i}), \quad (4.8)$$

$$\delta_\alpha = \begin{cases} +1, & (\alpha = A), \\ -1, & (\alpha = B). \end{cases} \quad (4.9)$$

(4.5b), (4.6b), (4.7b) から求められる、展開係数 $\bar{D}_{1n}^{(\beta,\gamma)\alpha}$, A_{1n}^α , $\bar{D}_{A1n}^{(\beta)\alpha}$ を保存しておけば任意の濃度に対する $D_1^{(\beta,\gamma)\alpha}$, A_1^α , $D_{A1}^{(\gamma)\alpha}$ を (4.5a), (4.6a), (4.7a) により即座に求めることができる。

本研究では、 $\bar{D}_{1n}^{(\beta,\gamma)\alpha}$, A_{1n}^α , $\bar{D}_{A1n}^{(\beta)\alpha}$ から (2.22), (2.23) により各輸送係数の σ による展開の展開係数を求め、データベースとして保存した。さらに、任意の濃度に対する輸

送係数の値を与えるプログラムを作成した。これにより、気体中の局所的な濃度分布に応じた高精度の輸送係数の値を即座に引き出すことができる。

5. 数値計算の方法

(3.8) の F, G に $A^\alpha, D^{(\beta)\alpha}$ の濃度展開係数を代入することで (4.5b), (4.6b), (4.7b) により $D_1^{(\beta,\gamma)\alpha}$, A_1^α , $D_{A1}^{(\gamma)\alpha}$ の濃度展開係数が求まる。 $\tilde{J}_1^{\beta\alpha}$ は Boltzmann 方程式の衝突積分項から導かれた複雑な非線形の積分作用素である。この $\tilde{J}_1^{\beta\alpha}$ の計算を効率よく高精度で行うため、本研究では元々の Boltzmann 方程式の衝突積分項を求めるために開発された数値積分核法^{[10][11]}を参考にした。その方法を以下に示す。まず、(3.8) を次のように分解しておく。

$$\tilde{J}_1^{\beta\alpha}(F, G) = \tilde{G}_1^{\beta\alpha}(F, G) - G(\zeta) \tilde{\nu}_1^\beta(F). \quad (5.1)$$

ここで、

$$\begin{aligned} \tilde{G}_1^{\beta\alpha}(F, G) &= \frac{\pi^{3/2}}{\sqrt{2}\zeta^2} \left(\frac{\hat{m}^\alpha}{\hat{\mu}^{\beta\alpha}} \right)^2 \int_0^\infty d\xi \xi^3 \exp(\hat{m}^\alpha(\zeta^2 - \xi^2)) G(\xi) \\ &\quad \times \int_{-1}^1 dy \left(\frac{3\xi y^2 - 2\xi y - \xi}{\xi^2 + \zeta^2 - 2\xi\zeta y} \right) X_t^{\beta\alpha} \\ &\quad \times \int_{|X_t^{\beta\alpha}|}^\infty d\eta \eta E^\beta(\eta) F(\eta), \end{aligned} \quad (5.2a)$$

$$\begin{aligned} \tilde{\nu}_1^\beta(F) &= \frac{\pi^{3/2}}{\sqrt{2}\zeta^2} \int_0^\infty d\xi E^\beta(\xi) F(\xi) \left[-\frac{\xi^2}{3} ((\xi + \zeta)^3 + |\xi - \zeta|^3) \right. \\ &\quad \left. + \frac{\xi}{15\zeta} ((\xi + \zeta)^5 - |\xi - \zeta|^5) \right]. \end{aligned} \quad (5.2b)$$

(5.2a), (5.2b) に含まれる関数 $F(\zeta)$, $G(\zeta)$ が、 ζ の離散点 (格子点) でのみ値が求まっている場合について、(5.2a), (5.2b) を計算する [F, G に代入する $A^\alpha, D^{(\beta)\alpha}$ は積分方程式 (2.10), (2.12) の数値解であり、離散点でのみ値が求まっていることに注意]。 ζ の範囲はもともと $[0, \infty]$ であるが、 F, G の値は有限区間 $[0, \zeta_{max}]$ における格子点 $\zeta^{(l)}$ ($l = 0, 1, \dots, 2J$, $\zeta^{(0)} = 0$, $\zeta^{(2J)} = \zeta_{max}$) において既知とする。

・ $\tilde{G}_1^{\beta\alpha}$ について

関数 $F(\zeta)$ については、次の形を仮定する。

$$F(\zeta) = \sum_{n=0}^{M_F} a_n(F) L_n(\zeta^2). \quad (5.3)$$

ここで、 $L_n(y)$ は n 次の Laguerre 多項式

$$L_n(y) = \sum_{m=0}^n \frac{(-1)^m}{m!} y^m, \quad (5.4)$$

で、直交関係

$$\int_0^\infty L_m(y) L_n(y) \exp(-y) dy = \delta_{mn}, \quad (5.5)$$

を満たす。(5.3) の展開係数 $a_n(F)$ は

$$a_n(F) = \int_0^\infty 2\zeta F(\zeta) L_n(\zeta^2) \exp(-\zeta^2) d\zeta, \quad (5.6)$$

により求められる．ここでは，格子点 $\zeta = \zeta^{(l)}$ での F の値を用い，Simpson 則により (5.6) の計算を行う．(5.3) を ζ^2 の級数に並びかえると， F は次の形に書ける．

$$F(\zeta) = \sum_{m=0}^{M_F} \bar{a}_m(F) \zeta^{2m}. \quad (5.7)$$

一方， $G(\zeta)$ については，区間 $[\zeta^{(2j-2)}, \zeta^{(j)}]$ の各々で，格子点上の値を用いて ζ の 2 次関数で補間する．すなわち，

$$G(\zeta) = a^{(j)}(\zeta) G^{(2j-2)} + b^{(j)}(\zeta) G^{(2j-1)} + c^{(j)}(\zeta) G^{(2j)}, \quad (j = 1, 2, \dots, J). \quad (5.8)$$

ここで，

$$G^{(j)} = G(\zeta^{(j)}), \quad (5.9a)$$

$$a^{(j)}(\zeta) = \frac{(\zeta - \zeta^{(2j-1)})(\zeta - \zeta^{(2j)})}{(\zeta^{(2j-2)} - \zeta^{(2j-1)})(\zeta^{(2j-2)} - \zeta^{(2j)})}, \quad (5.9b)$$

$$b^{(j)}(\zeta) = \frac{(\zeta - \zeta^{(2j-2)})(\zeta - \zeta^{(2j)})}{(\zeta^{(2j-1)} - \zeta^{(2j-2)})(\zeta^{(2j-1)} - \zeta^{(2j)})}, \quad (5.9c)$$

$$c^{(j)}(\zeta) = \frac{(\zeta - \zeta^{(2j-2)})(\zeta - \zeta^{(2j-1)})}{(\zeta^{(2j)} - \zeta^{(2j-2)})(\zeta^{(2j)} - \zeta^{(2j-1)})}. \quad (5.9d)$$

以上の (5.7)，(5.8) を (5.2a) に用いると， η に関する積分が解析的に行える．結果的に (5.2a) は次のように整理できる．

$$\tilde{G}_1^{\beta\alpha}(F, G) = \sum_{m=0}^{M_F} \sum_{l=0}^{2J} \bar{a}_m(F) G^{(l)} \Omega_{lm}^{\beta\alpha}(\zeta). \quad (5.10)$$

ここで，

$$\Omega_{lm}^{\beta\alpha}(\zeta) = \frac{\sqrt{\hat{m}^\beta}}{2\sqrt{2}} \left(\frac{\hat{m}^\alpha}{\hat{\mu}^{\beta\alpha}} \right)^2 \times \begin{cases} \Phi_a^{\beta\alpha(0,m)}, & (l=0), \\ \Phi_b^{\beta\alpha(j,m)}, & (l=2j-1; j=1, 2, \dots, J), \\ \Phi_a^{\beta\alpha(j+1,m)} + \Phi_c^{\beta\alpha(j,m)}, & (l=2j; j=1, 2, \dots, J-1), \\ \Phi_c^{\beta\alpha(J,m)}, & (l=2J), \end{cases} \quad (5.11a)$$

$$\Phi_H^{\beta\alpha(j,m)}(\zeta) = \int_{\xi^{(2j-2)}}^{\xi^{(2j)}} H^{(j)}(\xi) \Phi^{\beta\alpha(m)}(\xi, \zeta) d\xi, \quad (5.11b)$$

($H=a, b, c$)

$$\Phi^{\beta\alpha(m)}(\xi, \zeta) = \int_{-1}^1 dy \frac{\xi^3 (3\xi y^2 - 2\xi y - \xi)}{\zeta^2 (\xi^2 + \zeta^2 - 2\xi\zeta y)} e^{-\frac{\hat{m}^\beta}{4} Q^{\beta\alpha}} \times \sum_{l=0}^m \frac{m!}{(\hat{m}^\beta)^m} \frac{(\hat{m}^\beta)^l}{l!} (X_l^{\beta\alpha})^{2l+1}, \quad (5.11c)$$

$$Q^{\beta\alpha} = \left\{ \frac{\xi^2 - \zeta^2}{\sqrt{\xi^2 + \zeta^2 - 2\xi\zeta y}} + \frac{\hat{m}^\alpha}{\hat{m}^\beta} \sqrt{\xi^2 + \zeta^2 - 2\xi\zeta y} \right\}^2. \quad (5.11d)$$

(5.7) の形の $F(\zeta)$ を (5.2b) に代入し積分を実行すると，

$$\tilde{\nu}_1^\beta(F) = \sum_{m=0}^{M_F} \bar{a}_m(F) \Pi_m^\beta(\zeta). \quad (5.12)$$

ここで，

$$\Pi_m^\beta(\zeta) = \frac{m!}{15\sqrt{2}(\hat{m}^\beta)^{m+\frac{1}{2}}} \left[\zeta^{-2} \frac{\Gamma(m+\frac{7}{2})}{m!} (\zeta^{-1} \text{erf}(\zeta_\beta) - \frac{2}{\sqrt{\pi}} e^{-\zeta_\beta^2}) - 5\zeta_\beta^{-1} \Gamma(m+\frac{5}{2}) \text{erf}(\zeta_\beta) + \exp(-\zeta_\beta) \sum_{l=0}^m C_{lm} \zeta_\beta^{2l} \right], \quad (5.13a)$$

$$\left. \begin{aligned} \text{erf}(\zeta) &= \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^\zeta \exp(-x^2) dx, \\ \zeta_\beta &= \sqrt{\hat{m}^\beta} \zeta, \quad \Gamma(s) = \int_0^\infty \exp(-x) x^{s-1} dx, \\ C_{lm} &= \frac{l-5m-5}{l!} - \frac{\Gamma(m+\frac{5}{2})}{m!} \cdot \frac{(m-5l-5)}{\Gamma(l+\frac{5}{2})}. \end{aligned} \right\} \quad (5.13b)$$

以上のように，(5.10)，(5.12) により (5.1) が計算できる．ここで $\Omega_{lm}^{\beta\alpha}(\zeta)$ ， $\Pi_m^\beta(\zeta)$ は (5.11)，(5.13) から既知関数の積分によって求められる．また，そのパラメータは唯一 (\hat{m}^A, \hat{m}^B) で，(\hat{d}_m^A, \hat{d}_m^B) 及び関数 $F(\zeta)$ ， $G(\zeta)$ には依存しない．従って，(\hat{m}^A, \hat{m}^B) を指定して， $\Omega_{lm}^{\beta\alpha}(\zeta)$ ， $\Pi_m^\beta(\zeta)$ を一度求めれば，様々な (\hat{d}_m^A, \hat{d}_m^B) 及び関数 $F(\zeta)$ ， $G(\zeta)$ に対して (5.1) の積分が計算できる．

6. 計算結果

6.1 結果

本研究では基準の分子直径 d_0 ，基準の分子質量 m_0 として，気体 A の分子直径 d_m^A ，分子質量 m^A を用いて計算を行った．即ち， \hat{d}_m^A, \hat{m}^A は 1 で， \hat{d}_m^B, \hat{m}^B はそれぞれ気体 A と気体 B の分子の直径比 d_m^B/d_m^A ，質量比 m^B/m^A を表す．作成したデータベースは，直径比 d_m^B/d_m^A については 0.5, 1, 2 でそれぞれの直径比に対して質量比 m^B/m^A が 1, 2, 3, 4, 5 の計 15 種類である．すべてのパラメータについて， $\hat{\mu}$ (粘性係数に対応)， $\hat{\lambda}$ (熱伝導係数に対応)， \hat{D}_{AB} (相互拡散係数に対応)， k_T (熱拡散比に対応)，及び熱応力項と濃度応力項の係数 $\hat{Y}_1, \hat{Y}_2, \hat{Y}_3, \hat{Y}_4, \hat{Y}_5$ を X^A の関数として，Fig. 1-Fig. 3 にまとめた．Fig. 1 は直径比 d_m^B/d_m^A が 0.5 の結果，Fig. 2 は直径比 d_m^B/d_m^A が 1 の結果，Fig. 3 は直径比 d_m^B/d_m^A が 2 の結果である．直径比が変わると輸送係数の濃度依存性が大きく変わることが分かる．特に，Fig. 1 の直径比 d_m^B/d_m^A が 0.5 の場合，他の二つに比べて値が大きくなることが分かる．Fig. 2 の直径比 d_m^B/d_m^A が 1，質量比 m^B/m^A が 1，即ち，気体分子が力学的同等の場合，

$$\hat{\mu} = 1.270042, \quad \hat{\lambda} = 2.402855, \quad \hat{D}_{AB} = 0.764215 \\ \hat{Y}_1 = 0.094600, \quad \hat{Y}_2 = 0.973953, \quad k_T = \hat{Y}_3 = \hat{Y}_4 = \hat{Y}_5 = 0$$

の定数となる。また、熱拡散比 \hat{k}_T 、濃度応力項の係数 $\hat{\gamma}_3, \hat{\gamma}_5$ 、熱・濃度応力項の係数 $\hat{\gamma}_4$ は気体中の局所濃度に応じて符号が変る。

6.2 計算精度

$\hat{\mu}, \hat{\lambda}, \hat{D}_{AB}, \hat{D}_T, \hat{\gamma}_2, \hat{\gamma}_5$ の計算精度は計算した全てのパラメータに対して有効数字 6 桁の精度が得られた。また、 $\hat{\gamma}_1, \hat{\gamma}_3, \hat{\gamma}_4$ に対する計算の精度は数値積分核法の計算における精度と濃度に関する展開における精度の 2 つを考えた。

・数値積分核法の計算における精度

(5.13) の Π_m^β の計算では $\zeta_\beta = 0$ 近傍で誤差が大きくなる為、それを抑えるために $0 \leq \zeta_\beta \leq 0.1$ の区間で、 ζ_β の 8 次までとった Taylor 展開を行った。(5.11) $\Omega_{lm}^{\beta\alpha}$ の計算では、積分変数 y に関してその領域を N_y 区間に分割し、各区間において Legendre 多項式の零点を 64 点用いて Gauss-Legendre 積分を行った。積分変数 ξ に関しては、 $\xi_{max} = 10, 2J = 800$ と固定し各区間での積分には、Legendre 多項式の零点を N_ξ 点用いて Gauss-Legendre 積分を行なった。また、 $\xi/\zeta = 0$ 近傍で誤差が大きくなる為、それを抑えるために $0 \leq \xi/\zeta \leq 0.1$ の区間で、 ξ/ζ の 8 次までとった Taylor 展開を行った。

本研究では、上記の N_ξ, N_y 、及び $A^\alpha, \bar{D}^{(\alpha)\beta}$ を Laguerre 多項式を用いて近似する際の次数 $M_{A^\alpha}, M_{\bar{D}^{(\alpha)\beta}}$ [式 (5.3)] を変えて計算精度を評価した。その評価方法は、様々な X^α に対し 2 つの格子系 $[N_y, N_\xi, M_{A^\alpha}, M_{\bar{D}^{(\alpha)\beta}}], [N'_y, N'_\xi, M'_{A^\alpha}, M'_{\bar{D}^{(\alpha)\beta}}]$ を用いて得た輸送係数の絶対誤差で評価した。実際評価に用いた格子系は、 $[N_y, N_\xi, M_{A^\alpha}, M_{\bar{D}^{(\alpha)\beta}}]$ が $[10, 32, 40, 30], [20, 32, 40, 30], [20, 64, 40, 30], [20, 32, 35, 30], [20, 32, 40, 25]$ である。この結果、直径比 d_m^B/d_m^A が 0.5 に対する全ての輸送係数は 1×10^{-4} 以下、直径比 d_m^B/d_m^A が 1, 2 に対する全ての輸送係数は 1×10^{-5} 以下の絶対誤差に抑えられている。

・濃度に関する展開における精度

実際の計算では展開は有限の項数で打ち切る。本研究では、計算を行った全てのパラメータに対して 71 項までの展開とした。これによる計算精度の評価は、濃度についての展開をしないで式 (2.10)-(2.23) に直接に様々な X^A を与えて得た輸送係数と、展開を行った場合の輸送係数とを比較し絶対誤差で評価した。この比較の結果、 $(\hat{d}_m^A, \hat{d}_m^B)$ が (1, 1), (\hat{m}^A, \hat{m}^B) が (1, 5) の場合、全ての輸送係数は 1×10^{-5} 以下の絶対誤差に抑えられている。

7. まとめ

本研究では、二成分混合気体の輸送係数のうち、粘性係数、熱伝導係数、相互拡散係数、熱拡散係数、及び熱応力項の係数、濃度応力項の係数を、剛体球分子について、精度の曖昧な Sonine 多項式展開を用いずに、積分方程式そのものを数値的に解きその解を積分することで求めた。また、気体中の局所濃度に対する輸送係数が即座に引き出せるようデータベースを構築した。このデータベースを数値解析に組み込むことにより、文献 [5] で導出された二成

分混合気体の流体力学的方程式が正確な輸送係数の下で解析できるようになる。

参考文献

1. Y. Sone et al., Phys. Fluids **8**, 628 (1996). ; Erratum, Phys. Fluids **8**, 841 (1996)
2. Y. Sone, in *Rarefied Gas Dynamics*, edited by C. Shen (Peking University Press, Beijing, 1997), p. 3.
3. Y. Sone, Annu. Rev. Fluid Mech. **32**, 779 (2000).
4. Y. Sone, *Kinetic Theory and Fluid Dynamics*, Modeling and Simulation in Science, Engineering and Technology (Birkhäuser, Basel) (to be published).
5. S. Takata and K. Aoki, Transp. Theor. Stat. Phys. **30**, 205 (2001)
6. S. Takata and K. Aoki, Phys. Fluids **11**, 2743 (1999).
7. S. Takata, K. Aoki, and T. Muraki, in *Rarefied Gas Dynamics*, edited by R. Brun et al. (Cépaduès-Éditions, Toulouse, 1999), Vol. I, p. 479.
8. S. Chapman and T. G. Cowling, *The Mathematical Theory of Non-Uniform Gases*, 3rd Ed. (Cambridge University Press, Cambridge, 1995).
9. 柴田, 修士論文 (京大・工・航空宇宙, 1999)
10. Y. Sone, T. Ohwada, and K. Aoki, Phys. Fluids A **1**, 363 (1989)
11. T. Ohwada, Phys. Fluids **5**, 217 (1993)

注) 式 (4.1) で σ を導入するにあたって、濃度に対する制限 $\sum_\beta X^\beta = 1$ を用いている。従って、(2.22) に現れる B^β の濃度 X^γ 微分 $\frac{\partial B^\beta}{\partial X^\gamma}$ は σ の展開形 (4.3) から直接求めることはできない。本研究では、直接、積分方程式 (2.11) を濃度 X^γ で微分し、 $\frac{\partial B^\beta}{\partial X^\gamma}$ に対する新たな積分方程式を導き、 $\frac{\partial B^\beta}{\partial X^\gamma}$ を濃度展開形で求めた。

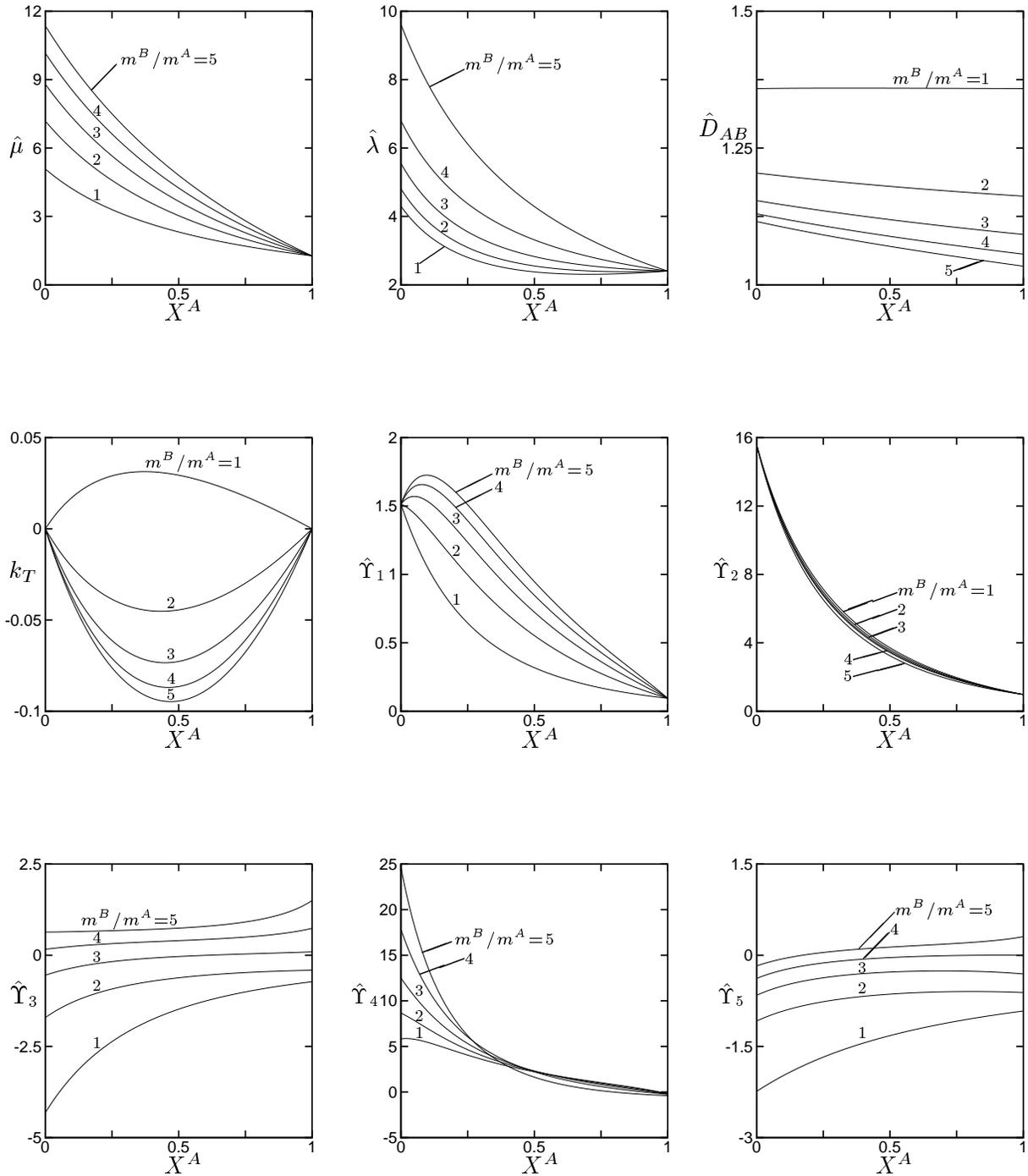


Fig. 1: 直径比 $d_m^B/d_m^A = 0.5$ の場合の $\hat{\mu}$ (粘性係数に対応), $\hat{\lambda}$ (熱伝導係数に対応), \hat{D}_{AB} (相互拡散係数に対応), \hat{k}_T (熱拡散比に対応), 熱応力項の係数 \hat{Y}_1, \hat{Y}_2 , 濃度応力項の係数 \hat{Y}_3, \hat{Y}_5 , 熱・濃度応力項の係数 \hat{Y}_4 のグラフ. 各図に質量比 $m^B/m^A = 1, 2, 3, 4, 5$ の結果を掲載.

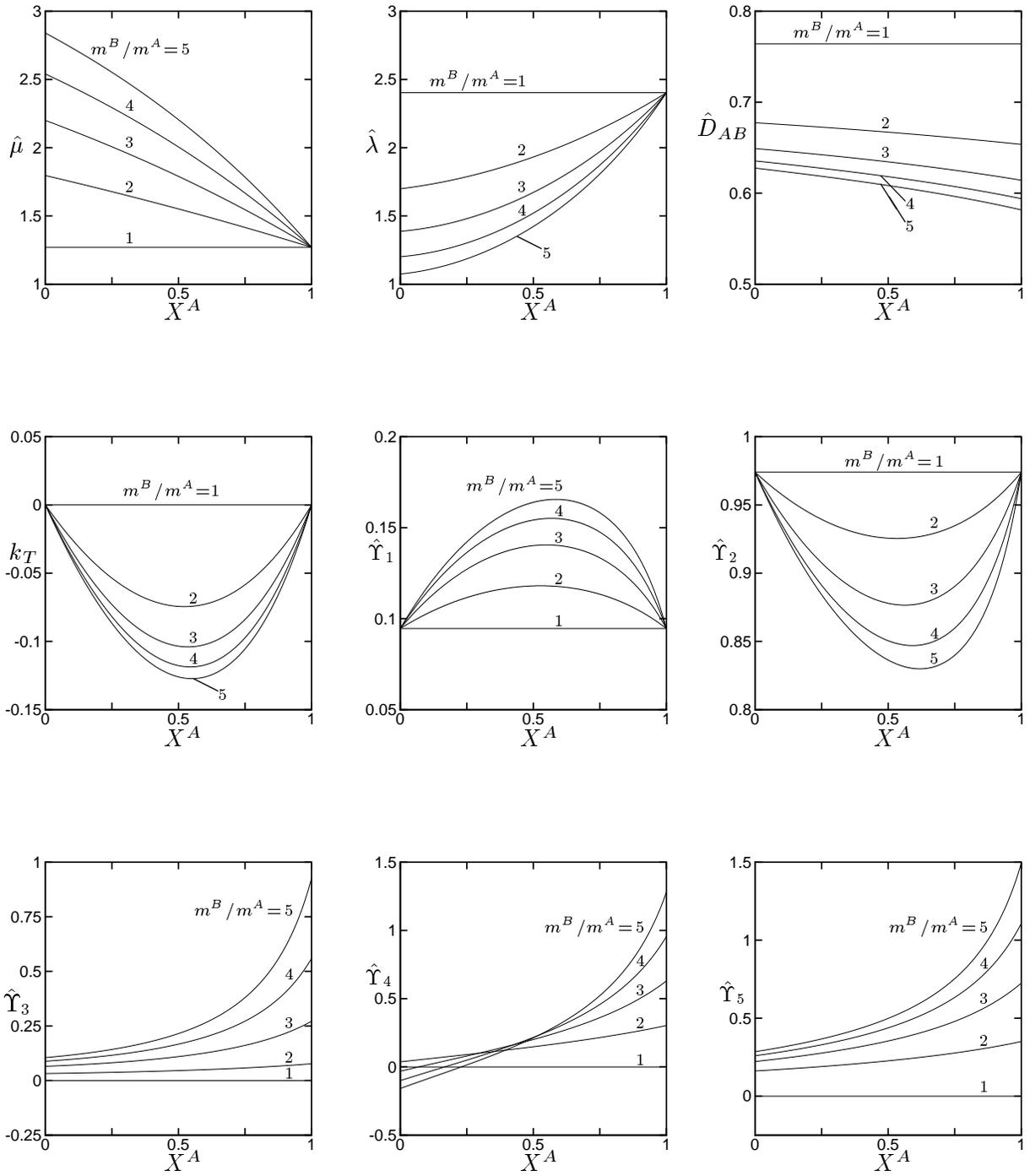


Fig. 2: 直径比 $d_m^B/d_m^A = 1$ の場合の $\hat{\mu}$ (粘性係数に対応), $\hat{\lambda}$ (熱伝導係数に対応), \hat{D}_{AB} (相互拡散係数に対応), \hat{k}_T (熱拡散比に対応), 熱応力項の係数 \hat{Y}_1, \hat{Y}_2 , 濃度応力項の係数 \hat{Y}_3, \hat{Y}_5 , 熱・濃度応力項の係数 \hat{Y}_4 のグラフ. 各図に質量比 $m^B/m^A = 1, 2, 3, 4, 5$ の結果を掲載.

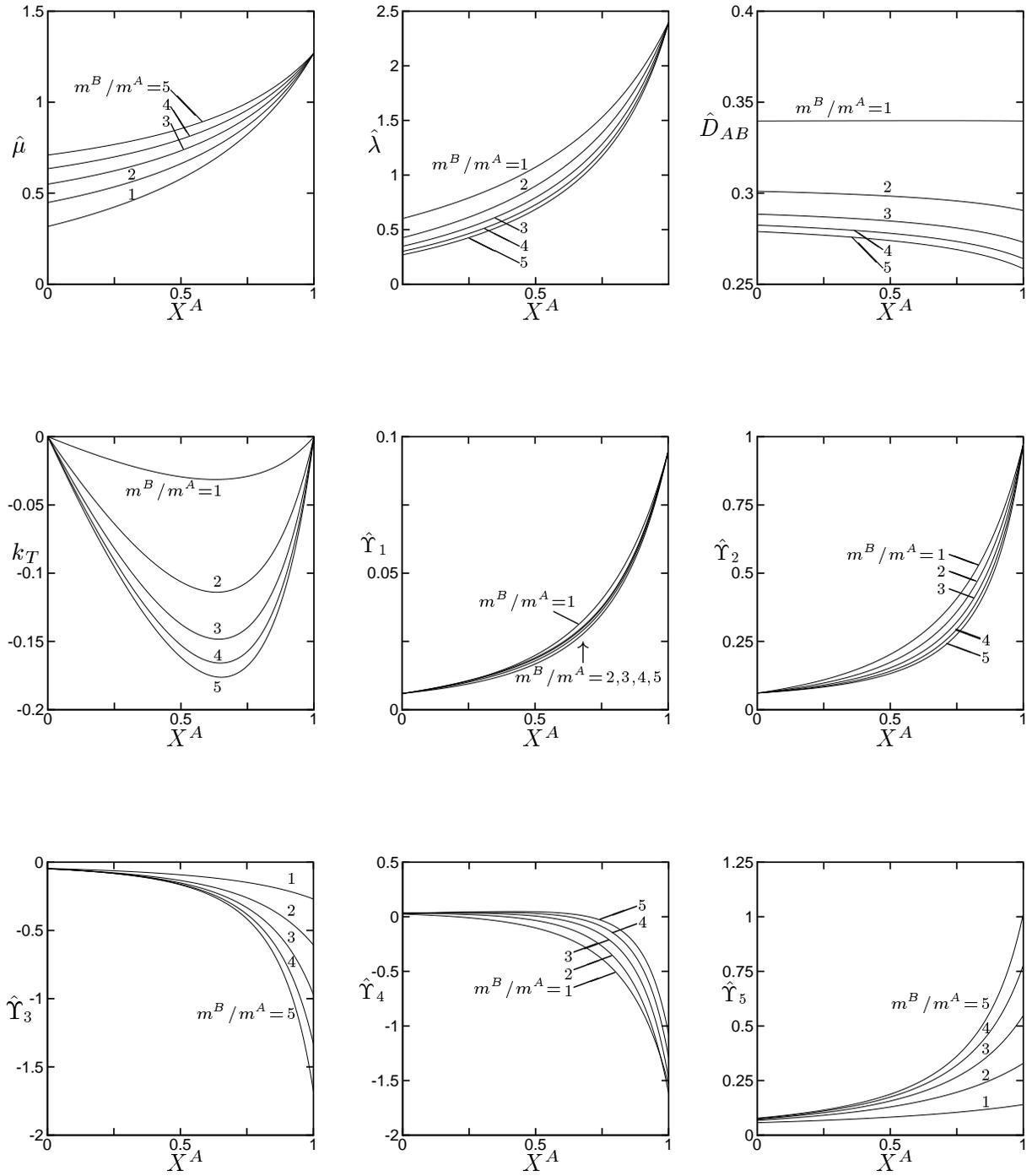


Fig. 3: 直径比 $d_m^B/d_m^A = 2$ の場合の $\hat{\mu}$ (粘性係数に対応), $\hat{\lambda}$ (熱伝導係数に対応), \hat{D}_{AB} (相互拡散係数に対応), \hat{k}_T (熱拡散比に対応), 熱応力項の係数 \hat{Y}_1, \hat{Y}_2 , 濃度応力項の係数 \hat{Y}_3, \hat{Y}_5 , 熱・濃度応力項の係数 \hat{Y}_4 のグラフ. 各図に質量比 $m^B/m^A = 1, 2, 3, 4, 5$ の結果を掲載.