

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 26 年 6 月 10 日現在

機関番号：14301

研究種目：基盤研究(B)

研究期間：2011～2013

課題番号：23360048

研究課題名(和文) ボルツマン方程式の移動境界問題の数理的研究

研究課題名(英文) Mathematical and physical study of moving boundary problems for the Boltzmann equation

研究代表者

青木 一生 (AOKI, KAZUO)

京都大学・工学(系)研究科(研究院)・教授

研究者番号：10115777

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 15,900,000円、(間接経費) 4,770,000円

研究成果の概要(和文)：マイクロスケールにおける気体や低圧気体に対して、境界が任意に運動する場合の気体の挙動を、分子気体力学をもとに主として数値解析によって調べた。とくに、境界の運動によって生じる気体分子の速度分布関数の特異性を明らかにし、その特異性を正確に記述できる数値解法を開発した。また、それをもとに、気体中の非線形音波の伝播や、気体中の振子の減衰などの問題を長時間にわたって精密に数値解析し、様々な現象を解明した。

研究成果の概要(英文)：The behavior of a gas in microscales and in low-pressure circumstances when the boundary is moving arbitrarily was investigated numerically on the basis of molecular gas dynamics. In particular, the singularities in the molecular velocity distribution function caused by the motion of the boundary were clarified, and a numerical method that is able to capture the singularities was constructed. The method was applied to various fundamental problems, such as the propagation of nonlinear acoustic waves and the decay of a pendulum in the gas.

研究分野：流体力学

科研費の分科・細目：応用物理学・工学基礎，工学基礎

キーワード：ボルツマン方程式 移動境界問題 クヌーセン層 希薄気体力学

1. 研究開始当初の背景

(1) ボルツマン方程式に基づく分子気体力学(気体分子運動論)は、非平衡統計力学の重要な分野であるとともに、マイクロ流体力学、真空技術、航空宇宙工学などの工学諸分野においても、本質的役割を果たしている。これらの工学諸分野におけるボルツマン方程式の数値解析には、ほとんどの場合DSMC(Direct Simulation Monte Carlo)法と呼ばれる粒子的・確率論的方法が用いられる。この方法は、定常流の解析には極めて有効であるが、非定常流れを非常に苦手とする。これは、定常流の場合、計算粒子系が定常状態に達した後長時間の時間平均をとることによってこの方法固有の統計的ノイズを低減できるのに対し、非定常流の場合その操作が行えないことによる。

(2) 一方、マイクロスケールの流れで実際に重要になる気体流は、流路の膨張・収縮やマイクロ梁の振動などのように、移動境界を含むものが多い。しかし、ボルツマン方程式の移動境界問題は、理論的にも数値的にもほとんど研究されていなかった。このことから、ボルツマン方程式の移動境界問題の理論的理解と、それを正確に扱える数値解法の開発が求められていた。ボルツマン方程式の移動境界問題の難しさは、その未知関数である気体分子の速度分布関数が境界付近で不連続になることによる。この事実は、理論的にも数値的にもほとんど認識されていなかった。研究代表者(青木)はこの点に注目し、高度に希薄で気体分子どうしの衝突が無視できる気体(自由分子気体)における移動境界問題の数値的研究に取り掛かり、世界的にも注目されるいくつかの成果を上げた。

2. 研究の目的

(1) ボルツマン方程式は、マイクロ流体力学、真空技術、航空宇宙工学などの工学諸分野において、重要な役割を果たしている。また、類似の運動論的方程式は近年、生物学、経済学、複雑系などの広い分野における数学モデルの基礎として盛んに研究されている。低圧環境やマイクロスケールにおける気体流に注目すると、実際に重要になる現象は、移動境界を含むものが多い。しかし、ボルツマン方程式の移動境界問題は、理論的にも数値的にもほとんど研究されていなかった。慣用の数値解法であるDSMC法も、非定常問題を苦手とするため、これを移動境界問題の数値解析に応用することはほとんど不可能であ

る。このことから、ボルツマン方程式の移動境界問題の理論的理解とそれを正確に扱える数値解法の開発に取りかかることになった。

(2) 本研究の当初の目的は、マイクロスケールや低圧環境における気体の流れを対象とするボルツマン方程式の移動境界問題を、理論解析と精密な数値解析によって総合的に研究し、その本質を解明することであった。具体的には、次の問題を考察することを考えた。気体分子の平均自由行程が短い場合(連続流極限に近い場合)の流体力学的取り扱い方法の確立とその応用；一般の場合(任意の平均自由行程)に有効な数値解法の構築とその応用。

(3) 本研究の大きな特徴は、工学者と応用数学者の緊密な研究協力により、数学的裏付けのある理論解析・数値解析を展開することであった。

3. 研究の方法

(1) 漸近解析

マイクロ流路内や低圧環境における気体の挙動は、ボルツマン方程式によって支配される。しかし、系のクヌーセン数(気体分子の平均自由行程と系の代表長さの比)が小さいときには、通常の流体力学を少し補正した形で気体の正しい振舞いを記述することができる。その正しい補正を求めるには、ボルツマン方程式に対して、クヌーセン数を微小パラメータとする漸近解析を行う必要がある。流れの場が時間的に変化しない定常問題に対しては、この種の漸近解析は詳細にわたって行われており、正しい補正の形も、考える系の物理的状況に応じて細かく求められている。境界が運動する移動境界問題では、境界がその面内を一定速度で運動する場合を除くと、系は本質的に非定常である。したがって、上述の漸近解析を非定常系に対して拡張しなければならない。板の縦振動による流れなどの非定常流に対して、この拡張を行うのが本研究の一つのアプローチである。

(2) 数値解析

上述の漸近解析の拡張に付随して生じる数値解析を行う。具体的には、非定常問題において新たに現れる境界上での速度のすべりや温度の跳びを求める必要があり、そのためには線形化ボルツマン方程式の半無限領域における境界値問題を数値的に解析しなければならない。これは難しい数値解析であるが、さいわい当研究グループでは、以前に

そのための数値解法を確立しているため、それをもとに精密な数値解析を行うことができる。

本研究の中核をなすのは、移動境界によって生じるボルツマン方程式の解の特異性を理解し、それを正確に記述できる数値解法を開発することである。まずは、この特異性が最も顕著に表れる自由分子気体における移動境界問題を考える。自由分子気体とは、高度に希薄で気体分子どうしの衝突が無視できる気体を指す。この場合には、ボルツマン方程式の厄介な衝突項を扱う必要がないため、非常に精度の高い数値計算が可能であり、これによって解の特異性の性質を見極めることができる。

上述の自由分子気体に対する知見をもとに、気体分子どうしの衝突がある場合の移動境界問題を考え、これに適した数値解法を開発する。具体的には、特性線に沿って方程式を積分する特性曲線法を基本とする。また、それを用いた数値解析により、移動境界によって生じる特異性が分子どうしの衝突の効果によってどのような影響を受けるかを解明する。とくに、速度分布関数の特異性が、密度、流速、温度などの巨視的物理量にどう反映されるかを明らかにする。

4. 研究成果

(1) 漸近解析にもとづく研究

非定常温度場に特有の温度の跳びの研究

境界の温度が時間的にゆっくりと変化するときには、定常問題では見られなかった温度の跳び（境界における気体の温度が境界自身の温度と一致しない現象）が、クヌーセン数の第2次で現れることを見出した。これは線形理論の範囲の現象であるため、移動境界を含むより一般の非定常問題においても同じ形で現れる。この研究は、その後の高田・初鳥によるストークス方程式系とすべり境界条件を非定常系に拡張する研究の基礎となっている。

移動境界に特有の温度の跳びの研究

上述の温度の跳びは、温度変化が小さい場合に、クヌーセン数の2次の程度の大きさで現れるため、その効果は小さい。これに対して、境界がその法線方向に高速運動する場合には、クヌーセン数の1次程度の温度の跳びが現れる。この温度の跳びは、壁が高速縦振動をする場合などに重要となる。圧縮性流体に対するナビエ・ストークス方程式系は、

ある仮定の下でボルツマン方程式の近似解として導かれることが知られている。この近似解をもとに、空間的に1次元の移動境界問題に対して、圧縮性ナビエ・ストークス方程式系に用いるべき速度のすべりと温度の跳びを表す境界条件を導出した。これにより、移動境界を含む一般的非定常問題に対する正しいすべり境界条件を構築する見通しが立った。

(2) 数値解析

漸近解析に付随する数値解析

上で述べた二種類の温度の跳び、すなわち非定常温度場に特有の温度の跳びと移動境界に特有の温度の跳びを定める問題は、いずれも線形化ボルツマン方程式の半無限領域における定常境界値問題に帰着する。これらに対する精密な数値解析を行い、対応する温度の跳びの境界条件を、その係数の数値まで含めて完全に決定した。ここで用いた数値解法は、かなり以前に当研究グループで開発したものをもとにしているが、現在のコンピュータ資源を活用するための技術上の改良を行っている。

移動境界問題の数値解析：自由分子気体

目的および方法の欄で述べたように、本研究の中核は、移動境界によって生じるボルツマン方程式の解の特異性の理解と、それを正確に記述する数値解法の開発である。この特異性は、分子どうしの衝突によって減衰することが予想できるため、まず特異性が最も顕著に現れる自由分子気体（無衝突気体）を考えた。自由分子気体では、ボルツマン方程式の厄介な衝突積分を扱う必要がないため、数値解析が大幅に簡単化される。ここで重点的に取り上げたのは、線状振子の減衰問題である。線状振子とは、フックの法則に従う外力の下で直線上を振動する物体を指す。まわりの気体が物体に及ぼす抵抗によって振子は時間とともに減衰するが、この減衰の速さを見出すのがここで考察した問題である。これは、長時間にわたる数値解析を行い、さらに非常に小さくなった振幅を正確にとらえる必要のある非常にチャレンジ性の高い問題である。

その結果、充分時間が経過した後の振子の振幅は、通常考えられているような時間の指数関数ではなく、時間の逆べきに比例して減衰することを明らかにした。より具体的には、時間変数を t とすると、振幅は $t^{-(d+1)}$ に比例して減衰する。ここに、 d は振子を構成する物

体の次元である．この遅い逆べき減衰の原因は，時間の経過とともに局在化するが消滅はしない速度分布関数の不連続によって生じるメモリ効果であると考えられる．実際，背景に分布する粒子群と衝突する仮想的な気体（一種のローレンツ気体）を考えると，振幅の減衰は時間について指数関数的に速いことが確かめられた．

これらの研究は，古典統計力学の基本的問題を現代的数値解析によって検討し，それらに対する新たな知見を得たという点で，学術上の価値は高い．これらの数値的成果は，厳密な数学的理論の発展につながるものである．

移動境界問題の数値解析：分子間衝突のある気体

次に，気体分子どうしの衝突がある場合の希薄気体に対して，移動境界問題を考えた．目的は，上記において自由分子気体に対して明らかにした速度分布関数の不連続の伝播と局在化が，分子どうしの衝突によってどのような影響を受けるかを明らかにすることである．ボルツマン方程式における分子衝突項のモデルとしては，BGK モデルを用い，方程式の特性線（気体分子の運動経路に対応する）に沿って方程式を数値的に積分する特性曲線法を用いた．ここでの新しい点は，境界の過去の軌跡に接する特性線に沿って不連続が伝播することに着目し，その伝播と減衰を正確に捉える数値解法（不連続捕獲特性線法）を開発した点にある．また，この方法を用いて，平板の正弦振動による希薄気体中の波動伝播の問題を数値解析した．具体的には，半無限領域における非線形音波の伝播と有限領域における定在波の形成を詳しく調べた．とくに前者では，1 周期平均を取った物理量の振舞いが，境界温度が急激に上昇した場合の気体の振舞いと酷似していることを見出した．

次に，上記からの宿題である問題，すなわち（分子どうしの衝突のある）通常の希薄気体中の線状振子の減衰率を求める問題に取り組んだ．先に述べたように，この問題では非常に長い時間が経過した後の気体と振子の運動を正確に求める必要があり，しかもその時には振子の振幅がきわめて小さくなっているため，数値計算が非常に難しい．上記の仮想的ローレンツ気体は，分子どうしの衝突のある気体のトイモデルとして考えたもので，その結果から，衝突のある気体の場合，振り子の振幅が時間に関して指数関数

的に減衰することを予想していた．しかし，予備的計算の結果，振子は予想に反して時間の逆べきに比例してゆっくりと減衰するらしいということが分かった．それを確かめるため，1 次元問題（ $d=1$ に対応）に集中して，注意深い計算を行った．その過程で，本研究で開発した不連続捕獲特性線法は，精度は高いが長時間にわたる計算では計算負荷が高くなりすぎることが分かった．これに替わる解法として，時間ステップごとに特性線に沿って積分するセミ・ラグランジュ法を用いることにした．この方法では不連続の伝播を記述することはできないが，振子の減衰については十分精度の高い結果が得られることを確認し，長時間に及ぶ本格的計算を行った．その結果，振子の振幅は，充分時間が経過した後は $t^{3/2}$ に比例して減衰することが分かった．

この一連の研究は，移動境界に起因するボルツマン方程式の解の特異性について，これまで知られていなかった多くの事実を明らかにしたもので，学問的価値の高いものである．これらは純粋に数値的な研究であるが，その結果は厳密な数学理論に対して方向性と道筋を与えるものである．また，運動するマイクロ要素まわりの気体の挙動を理解するうえでも重要な情報を与える．

5．主な発表論文等

（研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線）

〔雑誌論文〕(計 18 件)

T. Tsuji and K. Aoki, Decay of a linear pendulum in a collisional gas: Spatially one-dimensional case, *Phys. Rev. E*, **89**, 052129: 1-14 (2014). [査読有]

T. Tsuji and K. Aoki, Gas motion in a microgap between a stationary plate and a plate oscillating in its normal direction, *Microfluid. Nanofluid.*, **16** (2014) (掲載予定). DOI 10.1007/s10404-014-1374-2. [査読有]

T. Tsuji and K. Aoki, Moving boundary problems for a rarefied gas: Spatially one-dimensional case, *J. Comp. Phys.*, **250**, 574-600 (2013). DOI 10.1016/j.jcp.2013.05.017. [査読有]

青木一生, 低圧気流の数値シミュレーション, *シミュレーション*, **32**, 63-69 (2013). [査読なし, 招待論文]

青木一生, 辻徹郎, 分子気体力学における移動境界問題の数値解析, *ながれ*, **32**, 233-238 (2013). [査読なし, 招待論文]

S. Taguchi and K. Aoki, A simple model for flows around moving vanes in Crookes

radiometer, in 28th International Symposium on Rarefied Gas Dynamics 2012, edited by M. Mareschal and A. Santos (AIP, Melville), **1501**, 786-793 (2012). [査読有]

T. Tsuji and K. Aoki, Numerical analysis of nonlinear acoustic wave propagation in a rarefied gas, in 28th International Symposium on Rarefied Gas Dynamics 2012, edited by M. Mareschal and A. Santos (AIP, Melville), **1501**, 115-122 (2012). [査読有]

G. A. Radtke, N. G. Hadjiconstantinou, S. Takata, and K. Aoki, On the second-order temperature jump coefficient of a dilute gas, *J. Fluid Mech.*, **707**, 331-341 (2012). [査読有]

S. Takata, K. Aoki, M. Hattori, and N. G. Hadjiconstantinou, Parabolic temperature profile and second-order temperature jump of a slightly rarefied gas in an unsteady two-surface problem, *Phys. Fluid*, **24**, 032002: 1-15 (2012). [査読有]

T. Tsuji and K. Aoki, Decay of a linear pendulum in a free-molecular gas and in a special Lorentz gas, *J. Stat. Phys.*, **146**, 620-645 (2012). [査読有]

K. Aoki and Y. Abe, Stagnation-point flow of a rarefied gas impinging obliquely on a plane wall, *Kinetic Related Models*, **4**, 935-954 (2011). [査読有]

[学会発表](計 23 件)

K. Aoki, Decay of a linear pendulum in a collisional gas: Spatially one-dimensional case (Invited Lecture), 6th International Workshop on Kinetic Theory & Applications, Karlstad University, Karlstad, Sweden (May 12-14, 2014).

K. Aoki, Rarefied gas flows between two coaxial rotating cylinders at small Knudsen numbers: DSMC and slip flow theory (Graeme A. Bird Keynote Lecture), Direct Simulation Monte Carlo 2013: Theory, Methods and Applications, Santa Fe, USA (October 20-23, 2013).

K. Aoki, Some recent topics in classical kinetic theory of gases (Invited Lecture), Tullio Levi-Civita Lectures, Dipartimento di Matematica Guido Castelnuovo, Università di Roma "La Sapienza", Roma, Italy (October 16, 2013).

K. Aoki, Decay of a linear pendulum in a rarefied gas (Invited Lecture), The 2nd Pacific Rim Mathematical Association Congress, Shanghai Jiao Tong University, Shanghai, China (June 24-28, 2013).

K. Aoki, Some moving boundary problems

in kinetic theory of gases: Spatially one-dimensional problems (Invited Lecture), The 17th International Conference on Waves and Stability in Continuous Media, Levico Terme (Trento), Italy (June 17-21, 2013).

K. Aoki, Moving boundary problems for a rarefied gas: Spatially one-dimensional case (Invited Lecture), Workshop: Issues in Solving the Boltzmann Equation for Aerospace Applications, Institute for Computational and Experimental Research in Mathematics, Brown University, Providence, USA (June 3-7, 2013).

K. Aoki, Moving boundary problems in kinetic theory of gases (Plenary Lecture), The 8th International Conference on Computational Physics, Hong Kong Baptist University, Hong Kong (January 7-11, 2013).

K. Aoki, Kinetic theory approach to microscale gas flows (Plenary Lecture), The 3rd European Conference on Microfluidics, Heidelberg, Germany (December 3-5, 2012).

K. Aoki, Moving boundary problems in kinetic theory of gases (Invited Lecture), Convegno Internazionale: La geometria degli atomi e delle molecole. La Meccanica negli studi di Carlo Cercignani, Istituto Lombardo, Milano, Italy (November 22, 2012).

K. Aoki, Singular and moving boundary problems in kinetic theory. Part 1: Singular boundary, Part 2: Moving boundary (Invited Lectures), Summer School: Methods and Models of Kinetic Theory, Porto Ercole, Grosseto, Italy (June 4-9, 2012).

K. Aoki, Decay of a linear pendulum in a rarefied gas (Invited Lecture), Spring School: Kinetic Theory and Fluid Mechanics, Université Claude Bernard (Lyon 1), Lyon, France (March 26-30, 2012).

K. Aoki, Some considerations on radiometric effects (Invited Lecture), Workshop: Novel Applications of Kinetic Theory and Computations, Institute for Computational and Experimental Research in Mathematics, Brown University, Providence, USA (October 17-21, 2011).

K. Aoki, Some considerations on radiometric effect (Invited Lecture), Non Linear Hyperbolic Systems of Balance Laws in Extended Thermodynamics and Kinetic Theory, Cortona, Italy (September 4-10, 2011).

K. Aoki, Moving boundary problems in collisionless kinetic theory (Invited Lecture), The 8th International

Conference for Mesoscopic Methods in Engineering and Science, Institut National des Sciences Appliquées de Lyon, Lyon, France (July 4-8, 2011).

〔図書〕(計 0 件)

〔産業財産権〕
出願状況(計 0 件)

名称：
発明者：
権利者：
種類：
番号：
出願年月日：
国内外の別：

取得状況(計 0 件)

名称：
発明者：
権利者：
種類：
番号：
取得年月日：
国内外の別：

〔その他〕
ホームページ等

<http://www.mfd.me.kyoto-u.ac.jp/member/aoki/aokij.htm>

6. 研究組織

(1) 研究代表者

青木 一生 (AOKI KAZUO)
京都大学・大学院工学研究科・教授
研究者番号：10115777

(2) 研究分担者

小菅 真吾 (KOSUGE SHINGO)
京都大学・大学院工学研究科・助教
研究者番号：40335188
西畑 伸也 (NISHIBATA SHINYA)
東京工業大学・大学院情報理工学研究科・教授
研究者番号：80279299

(3) 連携研究者 なし
()

研究者番号：

(4) 研究協力者(海外共同研究者)

Francis Filbet
リヨン第1大学・教授(フランス)
François Golse

エコール・ポリテクニク・教授(フランス)
Peter Markowich
ケンブリッジ大学・教授(イギリス)
Mario Pulvirenti
ローマ第1大学・教授(イタリア)
Cedric Villani
アンリ・ポアンカレ研究所・所長(フランス)