

平成30年6月19日現在

機関番号：32702

研究種目：若手研究(B)

研究期間：2015～2017

課題番号：15K21452

研究課題名(和文)多成分流体系に対する拡張された熱力学理論の展開と応用

研究課題名(英文)Development of extended thermodynamics of gas mixture and its applications

研究代表者

有馬 隆司(Arima, Takashi)

神奈川大学・工学部・助教

研究者番号：80735069

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,200,000円

研究成果の概要(和文)：多成分流体中の局所的熱平衡の仮定を超える非平衡現象を理解することを目的に、拡張された熱力学(ET)に基づいた研究を行い、主に次の成果を得た。(1)希薄な多原子分子気体で構成される多成分流体を記述可能なETを構築し、系が満たすべき一般的な性質を明らかにした。特に、体積粘性の影響がせん断粘性や熱伝導の影響に比べて大きな気体に対し、場の方程式系を導出し、その特徴を明らかにした。(2)ETの発展に寄与する成果も得た。特に、ETの適用範囲を、実在気体や分子内部自由度緩和が重要となる気体にも広げること成功した。

研究成果の概要(英文)：The aim of the project had been to understand the nonequilibrium phenomena in a gas mixture out of local thermodynamic equilibrium. Based on rational extended thermodynamics (ET), the following results are obtained. (1) We have proposed an ET theory for a rarefied polyatomic gas mixture and obtained its general properties. In particular, we have derived the closed system of the field equations for a gas in which the effect of the bulk viscosity is much larger than the one of the shear viscosity and heat conductivity. We have also clarified the characteristic features of the theory. (2) We have succeeded to develop the ET theory. In particular, we have proposed the ET theories for a dense gases and for a rarefied polyatomic gases with molecular relaxation processes.

研究分野：非平衡熱力学

キーワード：数理工学 流体数理 非平衡物理 拡張された熱力学 多成分流体 分子内部自由度緩和 非平衡温度
非平衡圧力

1. 研究開始当初の背景

多成分流体における非平衡現象は、従来、局所的熱平衡の仮定に基づいた不可逆過程の熱力学の枠組みの中で研究されてきた。しかし、近年発展しているメゾスコピックなスケールでの熱流体工学や航空宇宙工学では、局所的熱平衡の仮定を超えた「強い非平衡」性が本質的に重要な役割を果たすことが明らかになっている。

強い非平衡現象に適用可能な理論として「拡張された熱力学 (E T)」が提案されている。E T 理論は、通常の流体力学的物理量に加えて散逸的物理量 (例えば、粘性応力や熱流束) も独立変数として採り入れ、バランス型方程式系に基づいて、その時間発展を記述する。この理論の主な成果は単原子分子希薄気体に限られていたが、最近、研究代表者らによって、多原子分子希薄気体に適用可能な理論が構築された。超音波や衝撃波解析において、提案された理論の妥当性および有用性が明らかになっている。

多原子分子希薄気体の E T 理論を基にした研究が進んでおり、強い非平衡現象の理解が深まっているが、その対象は単成分流体に限られていた。拡散現象や化学反応などの多彩な非平衡現象を記述するには多成分流体への理論の拡張が求められている。

2. 研究の目的

本研究の目的は、多成分流体中の強い非平衡現象を E T 理論に基づいて理解することである。まず、多原子分子希薄気体の E T を多成分流体に適用するための一般的な枠組みを構築し、その数理構造を明らかにする。具体的なモデルに対する閉じた場の方程式系を導出し、典型的な線形・非線形波動を理論的・数値的に解析する。理論の妥当性を明らかにするとともに、その熱的特性を解明する。

3. 研究の方法

一般論の構築と具体的なモデルの解析を並行して行う。理論構築にあたって、現象論的なアプローチと気体分子運動論的アプローチを組み合わせる。

多成分流体のモデルとして Truesdell による連続体力学的アプローチを採用する。つまり、各成分が成す系 (構成成分系) は、単成分流体の閉じた場の方程式系に従うという仮定の下で、全体系の時間発展を記述する。気体分子運動論でも同様のアプローチが行われている。本研究では、構成成分系の基礎方程式系として、E T に基づく対称双曲型偏微分方程式系を採用し、強い非平衡現象を解析可能な多成分系理論の枠組みを構築する。

多成分流体系の特徴を研究するため、構築した理論的枠組みの中から、シンプルなモデルを構成し、その解析を行う。そこで、構成成分系が、流体力学的物理量と非平衡圧力の 6 変数を独立変数として採用した E T 理論

に従うとする。この理論は、Euler 方程式系の次に単純な双曲型偏微分方程式系であり、水素気体や二酸化炭素気体など、体積粘性の影響がせん断粘性や熱伝導の影響に比べ十分大きい流体に対して有用である。得られた結果を基に、より現実的なモデルの構築も目指す。

典型的な波動伝播における多成分流体系特有の効果を明らかにする。特に、超音波の分散関係を調べる。また、衝撃波や熱伝導といった非線形波動の解析を行う。理論解析と数値解析を統合した手法を用いる。

4. 研究成果

(1) 多成分流体に対する E T 理論の構築と展開

理論的枠組みの構築：

構成成分系の基礎式として一般的な E T の場の方程式系を考える。全体系と構成成分系のバランス方程式系に対して、それぞれに固有の流速に対するガリレイ不変性を課す。この結果として、多成分流体に特有な拡散速度に起因する散逸的物理量と各構成成分系固有の散逸的物理量の関係式の導出に成功した。さらに、エントロピー不等式を拘束条件として課すことで、エントロピー密度・流束・生成が満たすべき条件を求めることが出来た。これらの結果から、多成分流体に対する不可逆過程の熱力学の拡張となる E T の一般的枠組みを構築できたといえる。

6 変数理論の構築：

構成成分系が 6 変数 E T 理論に従う場合の、全体系の閉じた場の方程式を求めた。全体系のせん断応力と熱流束が構成成分系の非平衡圧力と拡散流速の関数として表されることがわかった。さらに、エントロピー密度・流束・生成の具体的表式を導出し、非平衡圧力の寄与を明らかにした。特に、化学反応が無い場合に、温度と非平衡圧力の拡散的流束の交差効果を明らかにした。また、特性速度を導出した。理論の数理的側面の整備として、滑らかな初期条件のもとで大域解が存在することを明らかにした。6 変数理論と同様の方針で、構成成分系のせん断応力や熱流束が全体系に寄与する場合の時間発展を記述可能な理論も構築できる。

波動伝播の解析

多成分流体中を伝播する音波は、振動数に依存して特徴的な吸収緩和をする。つまり、減衰特性が振動数に対して多数のピークを持つことが実験的に報告されている。2 成分系の E T 理論による解析から、この複雑な緩和機構の様子を定性的に表すことが出来ることがわかった。ただし、定量的な実験結果との比較のためには、詳細な研究の継続が必要である。非線形波動については、その解析指針を明らかにすることが出来た。ただし、方程式系が複雑であるため効率的な計算手

法が必要であることと、系全体を特徴づける物性値の系統的な決定手法の確立が課題として残る。今後、定量的結果を求めるための継続的研究が必須である。

(2) E T理論の発展

研究成果(1)より、多成分流体系の非平衡現象を解析可能な理論構築を行うことが出来たが、その適用範囲は限られていた。つまり、実在気体や分子内部自由度緩和が影響する気体に対して十分に適用することが出来ない。これらの流体では、内部自由度間のエネルギー交換過程を詳細に記述する必要がある。そこで、多成分流体に対するE Tを参考に、各種内部エネルギーが互いに混合しながら時間発展するモデルを考えることで、実在気体と分子内部自由度緩和が影響する気体に対して適用可能な理論をそれぞれ提案することに成功した。また、単成分流体に対するE T理論の物理的・数学的特性に関する成果も得た。これらの結果は、本研究課題開始当初は想定していなかったより発展的な結果である。具体的成果を以下に示す。

実在気体に適用可能な理論の構築：

実在気体を構成する分子の各内部自由度が系を成すと仮定し、各系を特徴づける非平衡温度を導入することで、内部自由度のエネルギー交換過程を記述する自然なモデルの提案が出来た。非平衡圧力が並進運動に関する非平衡温度によって記述されることを明らかにした。各内部自由度のエネルギーが従う時間発展方程式系をE Tの現象論的構成理論によって導出することに成功した。系の安定性条件も明らかにした。典型的な例として、van der Waals 流体に適用可能な基礎方程式系の導出を行い、系が広く安定であることを示すことが出来た。本研究で構築された枠組みは、従来の気体分子運動論では適用できない領域にE T理論を展開するものであり、今後の更なる発展が期待される。

分子内部自由度の緩和過程を記述可能なE T理論の構築：

多原子分子希薄気体中の非平衡圧力が分子の並進・回転・振動自由度間のエネルギー交換に起因する量であることを示した。エネルギー交換による緩和過程をE Tの枠組みの中でモデル化し、これまでのE Tによるアプローチでは困難であった超音波吸収の実験結果を良く再現することに成功した。このモデルは気体分子運動論的アプローチと一致することも明らかにした。また、各内部自由度の緩和を特徴づける温度を導入することにも成功した。さらに、成果 の手法を用いることで、このモデルの実在気体への適用方針を構築することが出来た。

E Tにおける非線形構成式の整備と衝撃波波面構造解析への応用：

研究代表者らによって、6変数E T理論が持つ単純な数理構造を利用することで、非線形構成式を導出できることが示されていた。そこで、この結果の数学的側面を整備し直し、さらに、non-polytropicな気体に対し、非線形非平衡エントロピーの具体的表式を導出した。さらに、衝撃波伝播を解析し、Mach数が大きい場合に、構成式非線形性が波面構造に影響を及ぼすことを数値的に示した。また、従来知られていたオーバーシュートする温度が、分子の並進自由度に関する非平衡温度であることを明らかにした。

E Tにおける多原子分子希薄気体と単原子分子希薄気体の記述についての研究：

多原子分子希薄気体と単原子分子希薄気体のE T理論は異なる理論構造を持つ。これは、多原子分子気体に特有な非平衡圧力の存在のためである。分子内部自由度が0になる極限において、多原子分子気体理論が、独立変数が1つ消去される特異極限として、単原子分子気体理論を含むことを一般的に証明した。

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13件)

T. Arima, T. Ruggeri and M. Sugiyama, "Extended Thermodynamics of Rarefied Polyatomic Gases: 15-Field Theory Incorporating Relaxation Processes of Molecular Rotation and Vibration", *Entropy*, 20, 301 (20 pages). (2018). 査読有. DOI:10.3390/e20040301

T. Arima, "Six-field extended thermodynamics models representing molecular energy exchange in a dense polyatomic gas", *Journal of Physics: Conference Series*, 1035, 012002 (2018). 査読有. DOI:10.1088/1742-6596/1035/1/012002

S. Taniguchi, T. Arima, T. Ruggeri and M. Sugiyama, "Shock wave structure in rarefied polyatomic gases with large relaxation time for the dynamic pressure", *Journal of Physics: Conference Series*, 1035, 012009 (2018). 査読有. DOI: 10.1088/1742-6596/1035/1/012009

T. Arima and M. Sugiyama, "Nonequilibrium Pressure and Temperatures in Extended Thermodynamics of Gases with Six Fields", *Ricerche di Matematica* (2018). 査読有. DOI:10.1007/s11587-018-0399-3.

T. Arima and M. Sugiyama, “Extended thermodynamics of dense polyatomic gases: modeling of molecular energy exchange”, *Ricerche di Matematica* (2018). 査読有. DOI:10.1007/s11587-018-0386-8.

T. Arima, T. Ruggeri and M. Sugiyama, “Rational extended thermodynamics of a rarefied polyatomic gas with molecular relaxation processes”, *Physical Review E*, 96, 042143 (20 pages) (2017). 査読有. DOI:10.1103/PhysRevE.96.042143

T. Arima, T. Ruggeri, M. Sugiyama and S. Taniguchi, “Galilean invariance and entropy principle for a system of balance laws of mixture type”, *Rendiconti Lincei Matematica e Applicazioni*, 28, 495-513 (2017). 査読有. DOI:10.4171/RLM/773

T. Arima, T. Ruggeri and M. Sugiyama, “Duality principle from rarefied to dense gas and extended thermodynamics with six fields”, *Physical Review Fluids*, 2, 013401 (22 pages) (2017). 査読有. DOI:10.1103/physrevfluids.2.013401

T. Arima, T. Ruggeri, M. Sugiyama and S. Taniguchi, “Molecular extended thermodynamics: comparison between rarefied polyatomic and monatomic gas closures”, *Ricerche di Matematica*, 66, 1-13, (2017). 査読有. DOI:10.1007/s11587-016-0279-7

S. Taniguchi, T. Arima, T. Ruggeri and M. Sugiyama, “Recent results on nonlinear extended thermodynamics of real gases with six fields. Part II: shock wave structure”, *Ricerche di Matematica*, 65, 279-288 (2016). 査読有. DOI:10.1007/s11587-016-0280-1

T. Arima, T. Ruggeri, M. Sugiyama and S. Taniguchi, “Recent results on nonlinear extended thermodynamics of real gases with six fields. Part I: general theory”, *Ricerche di Matematica*, 65, 263-277 (2016). 査読有. DOI:10.1007/s11587-016-0283-y

T. Arima, T. Ruggeri, M. Sugiyama and S. Taniguchi, “Monatomic gas as a singular limit of polyatomic gas in molecular extended thermodynamics with many moments”, *Annals of Physics*, 372, 83-109 (2016). 査読有. DOI:10.1016/j.aop.2016.04.015

S. Taniguchi, T. Arima, T. Ruggeri and

M. Sugiyama, “Overshoot of the nonequilibrium temperature in the shock wave structure of a rarefied polyatomic gas subject to the dynamic pressure”, *International Journal of Non-Linear Mechanics*, 79, 66-75 (2016). 査読有. DOI:10.1016/j.ijnonlinmec.2015.11.003

〔学会発表〕(計10件)

有馬隆司, T. Ruggeri, 杉山勝, “拡張された熱力学に基づく多原子分子希薄気体中の内部緩和過程の記述”, 日本物理学会第74回年次大会、東京理科大学、2018年3月25日

有馬隆司, T. Ruggeri, 杉山勝, “液体・濃密気体に適用可能な6変数の拡張された熱力学の構築”, 日本物理学会2017年秋季大会、岩手大学、2017年9月24日

T. Arima, T. Ruggeri and M. Sugiyama, “Extended thermodynamics of dense polyatomic gases with nonequilibrium temperatures”, 19th Conference on Waves and Stability in Continuous Media, Bologna (Italy) 2017年6月15日

T. Arima, “Extended thermodynamics with six fields for dense polyatomic gases”, Nonequilibrium thermodynamics and statistical physics: From rational modeling to its applications, Hakata (Japan) 2017年3月16日

T. Arima, “Comparison between extended thermodynamic of rarefied monatomic and polyatomic gases”, Physically-Based Modelling of Polyatomic Gases and Phase Transitions, Okinawa Institute of Science and Technology Graduate University, Okinawa (Japan) 2016年7月14日

有馬隆司, “非平衡熱力学の基礎および最近の発展～不可逆過程の熱力学から拡張された熱力学まで～”, 物性理論コロキウム、信州大学、2015年10月28日

有馬隆司, T. Ruggeri, 杉山勝, 谷口茂, “拡張された熱力学における単原子分子希薄気体と多原子分子希薄気体の記述について”, 日本物理学会2015年秋季大会、関西大学千里山キャンパス、2015年9月17日

S. Taniguchi, T. Arima, T. Ruggeri and M. Sugiyama, “Nonlinear extended thermodynamics of real gases with 6 fields: Part III. shock wave structure”, 18th Conference on Waves and Stability in Continuous Media, Cetraro (Italy) 2015年

6月5日

M. Sugiyama, T. Arima, T. Ruggeri and S. Taniguchi, "Nonlinear Extended Thermodynamics of Real Gases with Six Fields, Part II: Macroscopic Theory and Its Comparison with the Meixner Theory", 18th Conference on Waves and Stability in Continuous Media, Cetraro (Italy) 2015年6月4日

T. Arima, S. Taniguchi, T. Ruggeri and M. Sugiyama, "A singular limit of rarefied polyatomic gas to monatomic gas in molecular extended thermodynamics", 18th Conference on Waves and Stability in Continuous Media, Cetraro (Italy) 2015年6月4日

〔図書〕(計0件)

〔産業財産権〕

出願状況(計0件)

取得状況(計0件)

〔その他〕

なし

6. 研究組織

(1)研究代表者

有馬 隆司 (ARIMA Takashi)

神奈川大学・工学部・機械工学科・助教

研究者番号: 80735069