

平成 30 年 6 月 12 日現在

機関番号：14401

研究種目：挑戦的萌芽研究

研究期間：2016～2017

課題番号：16K14160

研究課題名(和文) 気液界面の非平衡分子動力学計算に基づく拡張された流体方程式の探求

研究課題名(英文) Study on extended fluid dynamics equations based on molecular dynamics of vapor-liquid interface

研究代表者

矢野 猛 (YANO, TAKERU)

大阪大学・工学研究科・教授

研究者番号：60200557

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 2,800,000円

研究成果の概要(和文)：気液界面に接する蒸気の定常蒸発および定常凝縮に関する分子気体力学研究は多数なされており、とくにSoneによる漸近理論は、その数学的厳密性と広汎な応用への展開可能性において優れているが、非定常な蒸発・凝縮の問題はいまだ不明な点が多く残されている。気液界面近傍の非平衡流動現象を記述可能な拡張された流体方程式の定式化という本研究の目的に照らして、非平衡な遷移現象がどのような法則に支配されるのかを明らかにすることは本質的に重要である。そこで、本研究では、Soneの漸近理論の枠組みに対応する数値解析によって、気液界面に向かう蒸気の定常凝縮流が蒸気の蒸発流へ遷移する過程を明らかにした。

研究成果の概要(英文)：The problem of steady evaporation and condensation flows at vapor-liquid interface have so far been studied by many authors in the framework of the kinetic theory of gases. However, the unsteady problem, where the transition from evaporation to condensation, or vice versa, has remained unresolved. For our purpose of the establishment of extended fluid dynamics equations near the interface, it is essential to clarify unsteady nonequilibrium process of transition between evaporation and condensation states. We investigate the transition from a steady condensation flow to an evaporation flow near a vapor-liquid interface as a result of the reflection of acoustic wave of finite amplitude traveling in a vapor.

研究分野：流体力学

キーワード：分子動力学 気液界面 流体方程式 保存則

1. 研究開始当初の背景

(1) 関連する国内・国外の研究動向及び位置づけ：1980年代後半からナノスケールの流動現象に対する多くの分子動力学計算が行われてきた。とくに気液界面領域と固液界面領域では、各点における熱力学(局所熱平衡)・ニュートン流体の応力テンソル・フーリエ熱伝導則による熱流ベクトルを前提とする通常の流体力学が適用できないため、分子動力学計算によって多数の成果が得られている。しかしながら、それらの成果を見通しよく総括する理論は未だ存在しない。

(2) 研究代表者のこれまでの研究成果を踏まえ着想に至った経緯：液柱と柱状空洞(柱状の“気泡”)の不安定性に関する最初の理論解析は Rayleigh による(1878,1892)。ナノメートル程度の直径の液柱(ナノ液柱)の不安定挙動に関する分子動力学計算は多数なされてきているが(たとえば Koplik & Banavar 1993, Kawano 1998)、Rayleigh による理論との差異とその原因を定量的に論じているものはない。研究代表者は、後述する拡張された流体方程式を分子動力学計算の結果に基づいて導出し、それによってナノ液柱の不安定挙動を定量的に正確に記述できることを示した(2013年米国物理学会講演発表)。応募者が提唱する拡張された流体方程式が、液柱の不安定挙動のみならず、気液界面領域の多様な局所平衡でない流動現象を記述可能であることを実証すべく、本研究課題を着想するに至った。

2. 研究の目的

流体力学的すなわち熱力学と連続体力学を基礎とする巨視的な考え方や方法論は、我々の直観になじみ、それを活用するための環境や装置の構築も容易であるため、極めて有用である。よって、それらをナノスケール流動現象に適用できれば、様々な問題の解決に役立つことは疑いない。これを踏まえて、ナノスケール流動現象を理解すべく、分子動力学計算の結果と流体力学による予測の定性的類似に注目する研究が数多くなされてきた。もちろん両者が類似する流動現象は限られており、類似しない現象の方が多い。なぜなら、流体力学の3つの前提条件すなわち局所熱平衡・ニュートン流体の応力テンソル・フーリエ熱伝導則のすべてが同時に成立することは、ナノスケールの流動においては、一般には期待できないからである。研究代表者はここに注目してきた。すなわち、ナノスケール流動現象に流体力学的考え方を適用することを目指すことは変わらないが、3つの前提条件を満たすナノスケール流動を探すのではなく、3つの前提条件のすべてを同時に満たさないナノスケール流動に対して適用可能なように流体方程式を拡張するという逆転の発想であり、これが本研究の目的である。

3. 研究の方法

(1) 分子動力学計算に基づく方法：主として、最も基礎的な平面状の気液界面を形成する単一分子種の蒸気と液膜の分子動力学計算に注力する。50万分子程度の気液2相の平衡系と定常非平衡系を、1億計算ステップ程度の分子動力学計算によって実現し、平均量の詳細なデータを得る。とくに、応用を意図して気液界面の流動現象を再現するために、気体領域の大きさが気体分子の平均自由行程の10倍以上の大きさとなるような計算系を設定する。これも本研究の分子動力学計算の特徴のひとつである。後述する拡張された流体方程式の定式化のためには十分な計算精度が必要であるので、本研究の分子動力学計算においては、過去の研究代表者の分子動力学計算とは異なり、カットオフ距離において微分が連続な shifted Lennard-Jones ポテンシャルを用いる。

(2) 分子気体力学に基づく方法：気液界面の分子動力学に基づく解析を理論的かつ数学的に補強することを目的として、界面に接する蒸気の非平衡な振る舞いを Boltzmann-Krook-Welander 方程式の境界値問題を数値的に解く研究に取り組む。まず、研究代表者の過去の研究(Fluid Dynamics Research 44, 2008)のデータを、十分な精度に改訂するように再計算を行い、さらに、これまで数値データが得られていなかった小さなマッハ数(0.001~0.0001)に対しても高精度なデータを求める。これをもとに、Boltzmann-Krook-Welander 方程式の亜音速定常蒸発・凝縮解を与える数値関数を構築する。次に、定常凝縮流から定常蒸発流へゆっくりと非平衡的に遷移する問題の数値解析を行い、その結果に対して定常蒸発・凝縮解の数値関数を適用して、非平衡遷移過程を明らかにする。

(3) 拡張された流体方程式の定式化：分子動力学計算に基づいて気液界面の非平衡流動現象を記述可能な平均量に対する方程式を定式化する。気液界面の非平衡流動現象は、非平衡であることに加えて、液相と非平衡領域と気相の3領域にまたがる現象である。3領域を統一的に記述する巨視的で普遍的な物理法則としては、質量・運動量・エネルギー保存則しかない。本研究では、分子動力学の支配方程式であるニュートンの運動方程式から、任意の微小時間と任意の微小体積に関する平均量に対して厳密に成立する保存則を導出し、これを拡張された流体方程式へと定式化する。その際、応力と熱流の精密な再定義を行なう。拡張された流体方程式がナノスケールの流動問題に適用できるためには、応力と熱流を表現する平均量が、分子動力学計算結果の任意の微小時間と任意の微小体積に関する平均によって精度よく表される必要がある。そのためには、分子動力学計算そのものの数値計算精度が十分なものでなければならない。

4. 研究成果

分子動力学計算の結果とそれに基づく拡張された流体方程式の定式化は、現在、公表準備中であるので、以下では、分子気体力学に基づく気液界面近傍の非平衡遷移過程の解析に関する成果を要約する。

気液界面に接する蒸気の定常蒸発および定常凝縮に関する研究は古くから多数なされており、とくに Sone による漸近理論は、その数学的厳密性と広汎な応用への展開可能性において優れたものである。Sone は、その定常問題の理論の非定常問題への応用可能性についても議論しているが、非定常な蒸発・凝縮の問題はいまだ不明な点が多く残されている。気液界面近傍の非平衡流動現象を記述可能な拡張された流体方程式の定式化という本研究の目的に照らして、非平衡な遷移現象がどのような法則に支配されるのかを明らかにすることは本質的に重要である。そこで、本研究では、気液界面に向かう定常凝縮流を初期状態とし、ここに蒸気側からの擾乱を導入して、蒸発状態への遷移が起こる問題を Boltzmann-Krook-Welander 方程式の数値解析によって明らかにする。とくに、初期の定常凝縮流に対する擾乱として、一様流をとまなう単一波を採用するところが他に類を見ない点である。結果を以下に要約する：(i) 初期状態で導入された擾乱は、エントロピー様の単一波として界面に入射し、界面近傍の蒸気速度の符号を負（凝縮流）から正（蒸発流）へと塗り替える。(ii) 界面に入射した単一波が反射されるまでの時間（単一波の巨視的時間スケール）は気体分子の平均自由時間に比べて十分に大きくなるように設定されている。この時間スケールにおいて、界面近傍の非平衡領域(Knudsen 層)内の速度場と圧力場がほぼ定常蒸発解のそれに収束するが、界面近傍の温度場と密度場が定常蒸発解に収束するためには桁違いの時間が必要である。(iii) Knudsen 層を含む界面近傍で速やかに収束した速度場と圧力場は定常蒸発解の数値関数を満たし、これらと入射波の Riemann 不変量を両立させるように反射波が形成され、反射波が界面を離れた後に準定常的な蒸発状態が実現される。(iv) 反射波とともに形成される準定常蒸発流は Boltzmann-Krook-Welander 方程式の定常蒸発解と温度と密度が異なる。単一波の巨視的時間スケールに比べて十分に長い時間が経過した後に、定常蒸発解が確立される。

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 1 件)

1. 村瀬太郎, 稲葉匡司, 矢野 猛, “平面凝縮相の面内振動によって誘起される非定常蒸発・凝縮,” 日本流体力学会誌「ながれ」, 36(2), 117-120 (2017) (査読無).

[学会発表] (計 6 件)

1. Takeru Yano, “Long time behavior of nonlinear resonant gas oscillation with weak shock wave,” Workshop for Kinetic Theory and Fluid Dynamics: From micro to macroscopic modeling, Kyoto, Japan, May 26-28, 2016. (招待講演)

2. Shigeto Nakamura and Takeru Yano, “Behavior of sound waves at the vapor-liquid interface accompanied with evaporation and condensation,” The 13th International Conference on Theoretical and Computational Acoustics, July 30-August 3, 2017, Vienna, Austria. (invited)

3. Takeru Yano, “Numerical study of weak evaporation and condensation at a vapor-liquid interface,” The Ninth JSME-KSME Thermal and Fluids Engineering Conference (TFEC9), October 27-30, 2017, Okinawa, Japan.

4. Taro Murase, Masashi Inaba, and Takeru Yano, “Molecular gas dynamics on unsteady evaporation and condensation induced by oscillation of planar interface,” The Ninth JSME-KSME Thermal and Fluids Engineering Conference (TFEC9), October 27-30, 2017, Okinawa, Japan.

5. Shigeto Nakamura and Takeru Yano, “Determination of the evaporation coefficient of water by sound resonance experiment,” The Ninth JSME-KSME Thermal and Fluids Engineering Conference (TFEC9), October 27-30, 2017, Okinawa, Japan.

6. Takeru Yano, “Half-space problem of weak evaporation and condensation,” 70th Annual Meeting of the American Physical Society Division of Fluid Dynamics, November 19-21, 2017, Denver, USA.

[図書] (計0件)

[産業財産権]

なし

[その他]

なし

6. 研究組織

(1) 研究代表者

矢野 猛 (YANO, Takeru)

大阪大学・大学院工学研究科・教授

研究者番号：60200557