

平成22年5月10日現在

研究種目：基盤研究 (B)

研究期間：2007～2009

課題番号：19360077

研究課題名 (和文) 分子非線形音響学を創成し、マイクロスケールの質量・運動量・エネルギー輸送を切り拓く

研究課題名 (英文) The establishment of the foundation of molecular nonlinear acoustics and the resolution of mass, momentum and energy transports in microscales

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

研究成果の概要 (和文)：

非線形効果と非平衡効果が共存し、かつそれらの間に相互作用が存在する基本問題を取り上げて、現象の理解のために質量・運動量・エネルギー輸送を解明することが重要であることを実証すべく理論解析と数値解析を行って、下記の成果を得た：(1) Boltzmann 方程式に基づく漸近解析による気体の非線形音響共鳴振動の解明。(2) 分子動力学による微小液滴の平衡・非平衡状態の解明。(3) 蒸気と液体の界面での音の反射と透過への蒸発・凝縮の効果の解明。

研究成果の概要 (英文)：

It is important to investigate the mass, momentum, and energy transports for the understanding of nonlinear and nonequilibrium phenomena in fluid mechanics. To establish the foundation of the theory that addresses the abovementioned topics, i. e., molecular nonlinear acoustics, we have carried out several theoretical and numerical studies: (1) Asymptotic analysis of nonlinear resonant gas oscillation based on the Boltzmann equation. (2) Molecular dynamics study of equilibrium and nonequilibrium states of nano-droplet surrounded by its vapor. (3) Analysis of the effect of evaporation/condensation on the sound reflecting and transmitting a vapor-liquid interface.

交付決定額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2007年度	5,000,000	1,500,000	6,500,000
2008年度	4,200,000	1,260,000	5,460,000
2009年度	2,600,000	780,000	3,380,000
総計	11,800,000	3,540,000	15,340,000

研究分野：非線形非平衡流体力学

科研費の分科・細目：機械工学・流体力学

キーワード：流体力学、非線形波動、非平衡現象、蒸発・凝縮、ボルツマン方程式、非平衡統計力学、分子動力学、音響

## 1. 研究開始当初の背景

### (1) マイクロスケールの流体力学

近年、マイクロスケールの機械工学デバイスの開発に多大な努力が注がれている。デバイスの超小型化による省エネルギー化に加えて知的かつ能動的な制御が実現されれば、これによる恩恵が大きいことは言うまでもない。しかしながら、(電気浸透などではなく)純粹に流体力学的な効果がマイクロスケールのデバイスの主役となった例は少ないように見受けられる。その最大の理由は、スケールの減少にともなう流れによる体積力が減少する一方で、相対的に増大する面積力によって流れが支配されるからであると言われる。

### (2) 音波の非線形効果

申請者はマイクロスケールの世界に音波特有の非線形効果を導入することを提案する。大きなスケールの世界においては、これまでも様々な技術に対して音波の非線形効果による質量・運動量・エネルギー輸送の応用が考えられてきた。しかし、音波の非線形効果は本質的に小さいため、注目されるほどの成功例が少ないのが実情である。たしかに音波の非線形効果は音響マッハ数(流体粒子の振動速度のマッハ数)の2次のオーダーであり小さい。しかし、

- ① 質量・運動量・エネルギー輸送の大きさを決定するのは音響マッハ数であって装置のサイズや管路の直径などではない
- ② 超小型デバイスの中で必要とされる質量・運動量・エネルギー輸送は、そもそも大きいものである必要がない
- ③ 音波の質量・運動量・エネルギー輸送は純粹に流体力学的な効果である

このような考えのもとに、申請者は、音波の非線形効果の導入によってマイクロスケール世界の輸送問題に新展開をもたらす、「マイクロスケールの輸送現象を支配するパラメータをレイノルズ数から音響マッハ数へ変換する」ことを目指す。

## 2. 研究の目的

前項でも述べたように、音波特有の非線形効果は分子気体力学や分子動力学を用いて研究されたことはほとんどない。しかしながら、高周波数の超音波であれば分子運動の効果は決して少なくない。たとえば、6MHzの超音波を常温常圧の気体中に放射したとき、

Knudsen 数は 0.001 程度である。この値は十分に小さいように思われるかもしれない。しかし、これは通常の音源から放射される超音波の音響マッハ数と同程度であるので、音波の伝播過程におよぼす分子運動の効果は無視できない。流体力学が適用可能であるためには、単に Knudsen 数が小さいというだけでなく、流体の運動を特徴付ける他のすべての量に比べて小さくしなければならないのである。音響マッハ数と Knudsen 数が同程度の場合には、音波の伝播過程に分子運動の効果が無視できない影響を与える。

以上のことを踏まえて、まず、平面進行波、平面定在波、球面波、円筒波などの線形および非線形伝播の理論解析と数値シミュレーションを行い、その効果を実験的に検証する。

以上の研究により、音波の非線形効果のマイクロスケールへの応用の有効性を実証する。

## 3. 研究の方法

研究目的の欄で述べたように線形および非線形伝播過程に関する基礎的知見の集積を目的として、平面波の問題に対して、理論解析と数値シミュレーションを行い、その実験的検証のための方法論の構築を行う。

理論解析：研究目的の欄で述べたように、Knudsen 数と音響マッハ数が同程度の大きさでともに 1 に比べて小さい場合に対して、Boltzmann 方程式の漸近解析を行い、そこから音波の伝播過程を支配する微分方程式系と境界で満たされるべき境界条件の導出を行う。導かれる方程式の数学的性質から波動伝播過程の特徴がわかるので、この漸近解析は後に行う予定の数値シミュレーションのための情報として不可欠である。

数値シミュレーション：超音波の周波数が数 10MHz に達すれば、もはや Knudsen 数は小さいとはみなせなくなる。そのような問題は Boltzmann 方程式の数値解を求めることによってしか調べることができない。本研究では、Boltzmann 方程式の数値解法として有名な DSMC 法ではなく、差分解法を利用する。DSMC 法は確率的解法であるので統計的処理にともなう誤差が大きく、振幅の小さい音波の解析には不向きであるからである。なお、最近、格子ボルツマン法という計算方法が音波の伝播過程を精度よく解くことができるとして注目されているが、格子ボルツマン法は非平衡な分子運動の効果を調べる目的には使用できない。

#### 4. 研究成果

(1) 高周波数の音が気体中を伝播する過程は、周波数が高くなるにつれ、局所平衡の理論に基づく流体力学による記述が適切性を失ってゆく。Boltzmann 方程式に基礎をおく気体分子運動論による解析は線形理論が適用可能な小振幅の音の伝播に限られていた。本研究では、大振幅の極超音波の気体中の伝播過程を、大規模な分子動力学計算を実行して初めて明らかにした。（〔学会発表〕の(1)(2)(3)）

(2) 液面と音源面ではさまれた空間内の蒸気の線形および非線形音響共鳴振動の問題に対して、Boltzmann 方程式の漸近解析を行って、気液界面での蒸発と凝縮の効果が及ぼす影響を正確に予測する理論を構築した、（〔雑誌論文〕の(6)(10)(16)および〔学会発表〕の(4)）

(3) ひとつのナノメートルサイズの微小液滴が同一種分子の蒸気中に浮遊している問題を分子動力学法を用いて詳細に調査した。とくに、非線形非平衡流体力学の観点から、液滴半径が1ナノメートル程度まで小さいと、液滴と蒸気からなる系が力学的に平衡状態にあっても、熱力学による気液平衡の条件が成立しないことを示した。（〔雑誌論文〕の(1)(3)(4)）

(4) 上記の成果(2)を実験的に検証するための方法論を提案し、その実現に向けての問題点の整理を行った。そこでは、音の非線形効果により励起される2次高調波を利用した精度の高い新しい計測方法の実現を目指している。（〔雑誌論文〕の(2)(5)および〔学会発表〕の(7)）

#### 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）

- (1) H. Yaguchi, T. Yano, and S. Fujikawa, “Molecular Dynamics Study of Vapor-Liquid Equilibrium State of an Argon Nanodroplet and Its Vapor,” *J. Fluid Sci. Tech.* 5, 180-191 (2010). (査読有)
- (2) S. Nakamura, T. Yano, M. Watanabe, and S. Fujikawa, “The sound wave method for measurement of evaporation coefficient,” *J. Fluid Sci. Tech.* 5, 26-34 (2010). (査読有)

- (3) 矢野猛, 矢口久雄, 藤川重雄, “蒸発・凝縮をともなう気液界面の分子動力学,” *日本流体力学会誌「ながれ」* 28, 223-240 (2009). (査読有, 解説論文)
- (4) 矢口久雄, 矢野猛, 藤川重雄, “アルゴンのナノ液滴と蒸気の気液平衡状態の分子動力学,” *日本機械学会論文集(B編)* 75, 658-667 (2009). (査読有)
- (5) S. Nakamura, T. Yano, M. Watanabe, and S. Fujikawa, “A novel sound resonance method for measurement of evaporation coefficient,” *Proceedings of 7th World Conference on Experimental Heat Transfer, Fluid Mechanics and Thermodynamics* (2009). (査読有)
- (6) M. Inaba, T. Yano, M. Watanabe, and S. Fujikawa, “Resonant gas oscillation with evaporation and condensation at vapor-liquid interface,” *Proceedings of The Sixth International Conference on Flow Dynamics* (2009). (査読有)
- (7) T. Kanagawa, T. Yano, M. Watanabe, and S. Fujikawa, “Weakly nonlinear analysis of dispersive waves in mixtures of liquid and gas bubbles based on a two-fluid model,” *Proceedings of 7th International Symposium on Cavitation* (2009). (査読有)
- (8) T. Yano, “Half-space problem for gas flows with evaporation or condensation on a planar interface with a general boundary condition,” *Fluid Dyn. Res.* 40, 474-484 (2008). (査読有)
- (9) T. Yano, “Resonant gas oscillation of cylindrical waves in a non-uniformly heated resonator,” *Proceedings of 18th International Symposium on Nonlinear Acoustics* (2008). (査読有)
- (10) M. Inaba, S. Fujikawa, and T. Yano, “Molecular gas dynamics on condensation and evaporation of water induced by sound waves,” *Proceedings of 26th International Symposium on Rarefied Gas Dynamics*, American Institute of Physics (2008). (査読有)
- (11) H. Yaguchi, T. Yano, and S. Fujikawa, “Dependence of saturated vapor pressure and surface tension coefficient on radius for an argon nano-droplet,” *Proceedings of XXIII International Congress of Theoretical and Applied Mechanics* (2008). (査読有)

- (12) K. Koshiyama, T. Kodama, T. Yano, and S. Fujikawa, "Molecular dynamics simulation of structural changes of lipid bilayers induced by shock waves: Effects of incident angles," *Biochimica et Biophysica Acta Biomembranes* **1778**, 1423-1428 (2008). (査読有)
- (13) H. Yaguchi, T. Yano, and S. Fujikawa, "A molecular dynamics study of vapor flow induced by evaporation from a nano-droplet," *Proceedings of 7th JSME-KSME Thermal and Fluids Engineering Conference* (2008). (査読有)
- (14) S. Nakamura, T. Yano, and S. Fujikawa, "The sound wave method for measurement of evaporation coefficient," *Proceedings of 7th JSME-KSME Thermal and Fluids Engineering Conference* (2008). (査読有)
- (15) 矢野猛, "蒸発あるいは凝縮をとまなう気体の流れ," *生産と技術* **60**, pp. 61-65 (2008) (査読無, 解説論文)
- (16) M. Inaba, K. Kobayashi, T. Yano, and S. Fujikawa, "Condensation and evaporation induced by a standing sound wave," *Proceedings of 6th International Conference on Multiphase Flow* (2007). (査読有)
- (17) H. Yaguchi, T. Yano, and S. Fujikawa, "Molecular dynamics study of evaporation of nanodroplets," *Proceedings of 6th International Conference on Multiphase Flow*, (2007). (査読有)
- (18) K. Kobayashi, S. Watanabe, D. Yamano, T. Yano, and S. Fujikawa, "Condensation coefficient of water in a weak condensation state," *Proceedings of 1st International Colloquium on Dynamics, Physics and Chemistry of Bubbles and Gas-Liquid Boundaries*, (2007). (査読有)
- (2) T. Yano, "Molecular simulation of sound propagation," 62nd Annual Meeting of the APS Division of Fluid Dynamics November 22-24, 2009, Minneapolis, Minnesota, USA.
- (3) M. Inaba, T. Yano, M. Watanabe, and S. Fujikawa, "Molecular Gas Dynamics on Evaporation and Condensation Induced by Nonlinear Gas Oscillation," 62nd Annual Meeting of the APS Division of Fluid Dynamics November 22-24, 2009, Minneapolis, Minnesota, USA.
- (4) T. Kanagawa, T. Yano, M. Watanabe, and S. Fujikawa, "Two Types of Equations for Nonlinear Wave Propagation in a Liquid Containing Microbubbles," 62nd Annual Meeting of the APS Division of Fluid Dynamics November 22-24, 2009, Minneapolis, Minnesota, USA.
- (5) T. Yano, "Molecular simulation of sound propagation in a gas," 158th Meeting Acoustical Society of America, 26-30 October 2009, San Antonio, Texas, USA.
- (6) H. Yaguchi, T. Yano, and S. Fujikawa, "A Molecular Dynamics Study of Vapor Flow Induced by Evaporation from a Nanodroplet," The 7th JSME-KSME Thermal and Fluids Engineering Conference, October 16, 2008, Sapporo, Japan.
- (7) S. Nakamura, T. Yano, M. Watanabe, and S. Fujikawa, "The sound wave method for measurement of evaporation coefficient," The 7th JSME-KSME Thermal and Fluids Engineering Conference, October 16, 2008, Sapporo, Japan.

## 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

[学会発表] (計 7 件)

- (1) T. Yano, "Molecular dynamics of nonlinear and nonequilibrium effects in sound propagation." 159th Meeting Acoustical Society of America and NOISE-CON 2010, 19-23 April 2010, Baltimore, Maryland, USA.