

機関番号：14301

研究種目：基盤研究(B)

研究期間：2008～2010

課題番号：20360046

研究課題名(和文) ボルツマン方程式によるマイクロ・ナノスケール気体流の数理的研究

研究課題名(英文) Mathematical and physical study of micro- and nano-scale gas flows on the basis of the Boltzmann equation

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

研究成果の概要(和文)：流路の幅がその長さに比べて狭い場合のマイクロ・ナノスケール流路内の気体流に対して、分子気体力学をもとに系統的な理論解析を行い、広い範囲の問題に適用できる拡散型の巨視的方程式を導出した。さらに、それを用いて流れの様々な性質(とくに、曲がりくねったマイクロ流路を流れる気体流の性質)を明らかにした。また、流路が狭くない場合については、分子気体力学にもとづく精密な数値解法を開発し、それによって諸現象を解明した。

研究成果の概要(英文)：Diffusion-type equations that describe gas flows through a micro-nano channel with a width much shorter than the length was derived on the basis of molecular gas dynamics by a systematic asymptotic analysis. With the help of the derived equations, the properties of gas flows (in particular, gas flows through a twisty channel) were clarified. In addition, a direct numerical method based on molecular gas dynamics was constructed for wider micro channels.

交付決定額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2008年度	6,700,000	2,010,000	8,710,000
2009年度	3,700,000	1,110,000	4,810,000
2010年度	3,700,000	1,110,000	4,810,000
年度			
年度			
総計	14,100,000	4,230,000	18,330,000

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，気体分子運動論，マイクロ流体力学，移流拡散モデル，応用数学

1. 研究開始当初の背景

(1) マイクロスケールにおける気体の流れの研究は、マイクロ流体力学の重要な研究テーマであり、現在でも盛んな研究が行われている。その基礎方程式であるボルツマン方程式の工学的問題に対する数値解析には、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、高速非平衡気流の解析には極めて有効であるが、固有の統計的ノイズのため、マイクロスケールの流れのような遅い流れを非常に苦手とする。当時、この方法におけるノイズ低減の研究が盛んに行われていたが、数学的に根拠のある方法は提案されていなかった。

(2) 一方、実際問題で重要になるマイクロ

スケールの流れでは、流路幅が流路の長さ比べて小さい場合が多い。その比がゼロとなる極限では、気体の密度が拡散型の方程式に従うことが予想される。実際、気体分子同士の衝突が無視できる高度に希薄な気体に対しては、ボルツマン方程式から拡散方程式の数学的に厳密な導出が、二、三の数学者によって行われていた。代表者（青木）はこの点に注目し、分子同士の衝突を取り入れた形で、流路幅が小さいときのマイクロスケール気体流に対する拡散型方程式を導出する研究に取り掛かった。これは、フランス、トゥールーズ第3大学のP. Degondのグループとの共同研究である。当時、この研究はまだ端緒についたばかりであったが、DSMC法の欠点を克服するマイクロスケール流に対する新しいアプローチとして世界的に注目された。

2. 研究の目的

(1) マイクロ・ナノスケールにおける気体の振舞いを支配するボルツマン方程式および類似の運動論方程式は、その形が極めて複雑であるため、それらを用いて複雑な形状をもつ実際の問題を解析することは、非常に難しい。しかし、対象とする系の特徴（例えば、流路幅に比べて流路が長い、流路が周期的形状をもつ、など）をうまく利用すれば、系統的漸近解析により、巨視的物理量に対する流体力学型あるいは拡散型の方程式を導くことができる。これを用いると、具体的問題の解析は格段に容易になる。

(2) 本研究の当初の目的は、マイクロおよびナノスケールの流路における気体流に対して、ボルツマン方程式および類似の運動論方程式の系統的漸近解析によって、広い範囲の問題に適用できる拡散型の巨視的方程式を構築し、それを用いて流れの性質を明らかにすることであった。具体的には、次の問題を考察することを考えた。① 流路に沿ってその形状が周期的にあるいはほぼ周期的に変化するマイクロ流路における気体の振舞いを記述する移流拡散型方程式の構築とその応用；② 曲がりくねったマイクロ流路における気体流に対する移流拡散型方程式の構築とその応用；③ 気体分子と壁面を構成する分子との相互作用が支配的であるような、ナノスケール以下の流路における気体の挙動を記述する拡散型方程式の構築とその応

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と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

マイクロ流路内の気体の挙動は、ボルツマン方程式によって支配される。流路長さが流路幅に比べて小さい場合には、適当なスケールリングによって、これらの比に対応する微小パラメーターが方程式中に現れる。この微小パラメーターについて、ボルツマン方程式の初期値・境界値問題を系統的に漸近解析する。この解析を高次まで進めることにより、高次方程式の可解条件から、気体密度の主要項に対する非線形移流拡散型の偏微分方程式が得られる。まっすぐな流路に対しても曲がり流路に対しても、得られる移流拡散型の方程式は本質的に同形である。幾何学的形状の違いは、方程式中の2種類の輸送係数に集約される。この輸送係数は、無限に長い直管あるいはリング状の流路におけるポアズイユ流型および熱遷移流型の流れにおける気体の流量に対応している。数値解析によってそれらのデータベースを構築すれば、移流拡散型方程式を具体的問題に適用し、様々なマイクロ流路内の気体の挙動を数値的に求めることができる。これが本研究における主要なアプローチである。

(2) 数値解析

① まずは上記「漸近解析」に付随する数値解析を行う必要がある。輸送係数の決定のためのポアズイユ型および熱遷移流型の流れの解析は、線形化ボルツマン方程式およびそのモデル方程式によるため、数値解法は既に確立されているが、大量のデータが必要なため、効率化が重要になる。また、移流拡散型方程式の数値解析は、例えば太い管と細い管からなるユニットを数百個繋いだような系などの大規模系に対して行うため、精度の保証と効率化が重要なポイントとなる。

② 次に、上述の移流拡散型方程式が適用できない太いマイクロ流路に対して、ボルツマン方程式の直接的数値解析を行う。「研究開始当初の背景」欄で述べたように、マイクロスケール気体流に対して一般に用いられる

DSMC 法は、大規模系における遅い流れに対しては無効である。そのため、ボルツマン方程式の BGK モデルをもとに、有限体積法による数値解法を開発する。この方法は、差分法とは違って、幾何学的形状依存性が小さいという利点がある。さらに、この方法を応用して、蛇行する長い流路における気体の特性を解析する。

③ 高度に希薄な気体（あるいは、極微小領域中の気体）における非定常現象を調べるために、特性曲線法による非常に精密な数値解法を開発する。とくに、移動境界を含む問題、容器内の気体の平衡状態への緩和などに特化した方法を開発し、これによって、長時間経過後の漸近的振舞を明らかにする。

4. 研究成果

(1) 漸近解析による研究

① 拡散型方程式によるマイクロパイプ内の流れの解析

本研究課題以前の研究において、任意断面の直管からなるマイクロ流路に対して、管径が管長に比べて小さい場合に系統的漸近解析を行い、管に沿う気体の密度分布と管内の気体流量を記述する移流拡散型の偏微分方程式を導出した。これは形式的に導かれたもので、具体的問題に応用するには、それに含まれる輸送係数（2 変数の関数）をあらかじめ求めてそのデータベースを用意する必要がある。具体的には、定められた断面をもつ無限に長い管を通して流れるポアズイユ流、熱遷移流における質量流量を、すべての希薄度に対して求めることがそれに対応する。

(i) 円形断面の管に対して、ボルツマン方程式の高度なモデルである ES モデルをもとにこの作業を行い、上述の輸送係数のデータベースを構築した。さらに、それを応用して、細い円管と太い円管を交互に配したクヌーセン・ポンプの特性（排気特性、圧縮率など）を調べた。(ii) 上述の移流拡散型方程式は、単原子分子気体に対して導かれたものであったが、それを多原子分子気体に拡張する研究を行った。基礎方程式としては、多原子分子に対する ES モデルを用いたが、この場合（および単原子分子気体に対する ES モデルの場合）の輸送係数が、簡単な読み替え公式で単原子分子気体の BGK モデルに対する輸送係数に帰着できることを明らかにした。それ

を応用し、2 次元流路からなるクヌーセン・ポンプの定常特性、長い円管の両端に大きな圧力差がある場合の流れ、細い円管と太い円管を交互につないだ直管に対して、両端の圧力差や非一様な壁面温度によって起こる流れの特性などを多原子分子気体に対して明らかにした。

これまでのアプローチでは、たとえば細い管と太い管を交互に数百個繋いだような実用的巨大システムに対する数値シミュレーションは全く不可能であったが、本研究により、そのようなシステムに対する流れの特性の解析が初めて可能になった。これは世界に先駆ける成果で、そのインパクトは極めて大きい。

② 拡散型方程式による曲がりマイクロ流路内の流れの解析

本研究課題以前の研究で導いた、2 次元の狭い曲がりマイクロ流路内の気体の流れを記述する移流拡散型の偏微分方程式を応用し、様々な形状の流路（アルキメデス螺旋、複雑に入り組んだ流路など）に対して、両端の圧力差や非一様な壁面温度によって流れる気体流、両端を閉じたときの圧力分布などを明らかにした。さらに、上述の移流拡散型方程式を、3 次元的に曲がりくねった円管に対して拡張する研究を行った。具体的には、ボルツマン方程式の BGK モデルをもとに、管の径が管に沿っての温度変化や曲率・振り率の変化のスケールに比べて小さいとして、系統的漸近解析を行った。その結果、移流拡散型方程式に含まれる輸送係数は、ドーナツ状の円管を循環して流れるポアズイユ流型および熱遷移流型の流れの質量流量を、すべての希薄度と広範囲のドーナツ半径に対して求めることによって得られることが分かった。

これまでの気体のマイクロ管内流の研究は、ほとんどが直管に対するものに限られ、実用上重要な曲がり流路に対する研究はほとんど行われていなかった。本研究の成果により、広い範囲の複雑に曲がりくねった流路に対する解析が容易に行えるようになった。これは、新たな境地を切り開いた世界をリードする研究である。このアプローチは今後発展し、実用レベルにおいても汎用化されることが期待される。

③ ナノスケール気体流の研究

気体分子と壁面を構成する分子との相互作用が支配的であるような、ナノスケール以下の流路における気体の挙動を、ボルツマン型の運動論方程式をもとに調べ、固体表面近傍に閉じ込められた気体分子の表面に沿っての運動を記述する運動論方程式を導出した。さらに、気体分子の数密度分布を記述する拡散型方程式を、様々な状況に対して導いた。

(2) 数値解析

① 漸近解析に付随する数値解析

上述のように、移流拡散型の偏微分方程式は、2種類の輸送係数を含んでおり、それらはポアズイユ流型の流れと熱遷移流型の流れにおける気体の質量流量に結びついている。とくに曲がり流路や曲がり管におけるこれらの問題は、リング状領域の循環流を数値解析する問題に帰着するため、内壁から発生する速度分布関数の不連続を正確に扱える数値解法が必要となる。そのような解法は既に保有していたが、本問題において、その効率化と高精度化が実現した。また、その結果を数値的に組み込んだ移流拡散型方程式の高精度数値解法を開発した。

② 複雑な流路内の流れに対する直接的数値解析

上述の移流拡散型方程式は非常に強力であるが、流路幅が流路長に比べて小さいときにしか適用できない。それ以外の場合には、直接的数値解析が必要になるが、「研究開始当初の背景」欄で述べたように、その場合に広く用いられている DSMC 法では、遅い流れを正確に捉えることができない。そこで本研究では、ボルツマン方程式の BGK モデルをもとに、曲がった流路に対して遅い流れを正確に記述する有限堆積法による数値解法を開発し、蛇行する太い流路を繋いだ大規模系における流れと、温度場によるポンプ効果を明らかにした。

この成果は、比較的少ない計算負荷で形状が複雑な大規模システムを正確に解析したのものとして、高く評価できる。本アプローチをもとにした、より適用性に優れた汎用的コードの開発が望まれる。

③ 高度に希薄な気体に対する数値解析

気体分子同士の衝突が無視できる高度に希薄な気体（あるいは極微小系における気

体）の定常的振舞は、すでに良く理解されている。しかし最近になって、非定常問題においては特有の履歴効果が表れ、初期の状態が長時間経過後の気体の振舞に影響を及ぼすことが分かってきた。高度に希薄な気体に対して、長時間にわたる非常に精密な数値解析を行い、いくつかの基本的問題を数値的に解決した。たとえば、容器内の高度に希薄な気体が容器壁との相互作用によって平衡状態に近づいていく速さは、分子同士の衝突がある場合に比べて非常に遅く、時間の逆べき程度であることを明らかにした。

これらの研究は、応用上すぐに役立つものではないが、統計力学における基本的問題に光を当て、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。今後、これらの成果を踏まえて、厳密な数学的理論が進展していくことを期待したい。

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 S. Kosuge, K. Aoki, S. Takata, R. Hattori, and D. Sakai, Steady flows of a highly rarefied gas induced by non-uniform wall temperature, *Phys. Fluids*, **23**, 030603: 1-13 (2011). [査読有]

② H. Funagane, S. Takata, K. Aoki, and K. Kugimoto, Poiseuille flow and thermal transpiration of a rarefied polyatomic gas through a circular tube with applications to microflows, *Bollettino dell'Unione Matematica Italiana, Ser. 9*, **4**, 19-46 (2011). [査読有]

③ K. Aoki and F. Golse, On the speed of approach to equilibrium for a collisionless gas, *Kinetic and Related Models*, **4**, 87-107 (2011). [査読有]

④ K. Aoki, P. Charrier, and P. Degond, A hierarchy of models related to nanoflows and surface diffusion, *Kinetic and Related Models*, **4**, 53-85 (2011). [査読有]

⑤ K. Aoki, S. Takata, E. Tatsumi, and H. Yoshida, Rarefied gas flows through a curved channel: Application of a diffusion-type equation, *Phys. Fluids*, **22**, 112001: 1-12 (2010). [査読有]

⑥ T. Tsuji, K. Aoki, and F. Golse, Relaxation of a free-molecular gas to equilibrium caused by interaction with vessel wall, *J. Stat. Phys.*, **140**, 518-543

(2010). [査読有]

- ⑦ S. Kosuge, K. Aoki, and M. Hatano, Slow evaporation and condensation on a spherical droplet in the presence of a noncondensable gas, *Phys. Fluids*, **22**, 067101: 1-14 (2010). [査読有]
- ⑧ S. Takata, H. Funagane, and K. Aoki, Fluid modeling for the Knudsen compressor: Case of polyatomic gases, *Kinetic and Related Models*, **3**, 353-372 (2010). [査読有]
- ⑨ K. Aoki, A. Jüngel, and P. A. Markowich, Small velocity and finite temperature variations in kinetic relaxation models, *Kinetic and Related Models*, **3**, 1-15 (2010). [査読有]
- ⑩ K. Aoki, T. Tsuji, and G. Cavallaro, Approach to steady motion of a plate moving in a free-molecular gas under a constant external force, *Phys. Rev. E*, **80**, 016309: 1-13 (2009). [査読有]
- ⑪ K. Aoki and S. Takata, Fluid models and simulations of internal rarefied gas flows, *Riv. Mat. Univ. Parma, Serie 8*, **1**, 1-69 (2009). [査読有]
- ⑫ M. Groppi, L. Desvillettes, and K. Aoki, Kinetic theory analysis of a binary mixture reacting on a surface, *Eur. Phys. J. B*, **70**, 117-126 (2009). [査読有]
- ⑬ K. Aoki, P. Degond, and L. Mieussens, Numerical simulations of rarefied gases in curved channels: Thermal creep, circulating flow, and pumping effect, *Commun. Comput. Phys.*, **6**, 919-954 (2009). [査読有]
- ⑭ K. Aoki, S. Takata, and K. Kugimoto, Diffusion approximation for the Knudsen compressor composed of circular tubes, in *Rarefied Gas Dynamics*, edited by T. Abe (AIP, Melville), **1084**, 953-958 (2009) [査読有].

[学会発表] (計 23 件)

- ① K. Aoki, Some remarks on collisionless gases (Invited Lecture), Conference in Memory of Carlo Cercignani. Boltzmann equation: Mathematics, Modeling and Simulations, Institut Henri Poincaré, Paris, France (February 9-11, 2011).
- ② K. Aoki, On the asymptotics of the Boltzmann equation and fluid-dynamic limits (Invited Lecture), International Conference on Nonlinear Evolutionary Partial Differential Equations: Theories and Applications, Shanghai Jiao Tong University, Shanghai, China (January

10-15, 2011).

- ③ K. Aoki, On the speed of approach to equilibrium for a collisionless gas (Invited Lecture), International Conference on Nonlinear Partial Differential Equations: Mathematical Theory, Computation, and Applications, National University of Singapore, Singapore (November 29-December 3, 2010).
- ④ K. Aoki, Some basic problems of a collisionless gas: A numerical study (Invited Lecture), NIMS Thematic Program Workshop on Conservation Laws, Plasma and Related Fields, Seoul National University, Korea (October 21-23, 2010).
- ⑤ K. Aoki, Stokes fluid dynamics for a vapor-gas mixture derived from kinetic theory (Invited Lecture), Workshop on Kinetic and Related Models, Northwest University, Xi'an, China (October 16-18, 2010).
- ⑥ K. Aoki, Some decay problems of a collisionless gas: A numerical study (Invited Lecture), Workshop: Fluid-Kinetic Modelling in Biology, Physics & Engineering, Cambridge University, Cambridge, UK (September 6-10, 2010).
- ⑦ K. Aoki, Numerical study of some decay problems of a collisionless gas (Invited Lecture), Workshop on Kinetic and Fluids, Peking University, Beijing, China (July 26-30, 2010).
- ⑧ K. Aoki, Stokes fluid dynamics for a vapor-gas mixture derived from kinetic theory (Invited Lecture), The 5th Pacific Rim Conference on Mathematics, Stanford University, Stanford, USA (June 28-July 2, 2010).
- ⑨ K. Aoki, Some remarks on collisionless gases (Invited Lecture), The 7th East Asia Conference on PDEs, The Chinese University of Hong Kong and City University of Hong Kong, Hong Kong (December 14-18, 2009).
- ⑩ K. Aoki, Some remarks on collisionless gases (Invited Lecture), The 4th Workshop Theory and Numerics of Kinetic Equations, University of Saarland, Saarbrücken, Germany (November 16-18, 2009).
- ⑪ K. Aoki, Kinetic theory of gases and its applications (Basic course), The 34th Summer School of Mathematical Physics, Ravello, Italy (September 14-26, 2009).
- ⑫ K. Aoki, Approach to steady motion of a plate moving in a collisionless gas under a constant external force (Invited Lecture), Workshop and Summer School on

Topics in Kinetic Theory, University of Victoria, Victoria, Canada (June 29-July 3, 2009).

⑬ K. Aoki, Fluid dynamics for a vapor-gas mixture derived from kinetic theory (Invited Lecture), Workshop on Theory and Applications of Classical and Quantum Kinetic Theory, Banff International Research Station, Banff, Canada (June 22-26, 2009).

⑭ K. Aoki, Fluid dynamics for a vapor-gas mixture derived from kinetic theory (Invited Lecture), IPAM Workshop II - The Boltzmann Equation: DiPerna-Lions Plus 20 Years, University of California, Los Angeles, Los Angeles, USA (April 15-17, 2009).

⑮ K. Aoki, Some considerations on collisionless gases (Invited Lecture), 2009 Workshop on Kinetic Theory, Institute of Mathematics, Academia Sinica, Taipei, Taiwan (March 21-23, 2009).

⑯ K. Aoki, Diffusion approximation for rarefied gas flows in a curved channel (Invited Lecture), International Conference on Conservation Laws and Kinetic Equations 2008, Shanghai, China (December 12-15, 2008).

⑰ K. Aoki, Slow flows of a vapor-gas mixture with large density and temperature variations in the near-continuum regime (Invited Lecture), Oberwolfach Mini-Workshop, Numerics for Kinetic Equations, Mathematisches Forschungsinstitut Oberwolfach, Oberwolfach-Walke, Germany (November 16-22, 2008).

⑱ K. Aoki, Molecular gas dynamics and the Boltzmann equation (Mini-Course), The 3rd International Conference on the Boltzmann Equation and Related Topics, Wuhan, China (October 7-10, 2008).

[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

高田 滋 (TAKATA SHIGERU)
京都大学・大学院工学研究科・准教授
研究者番号：60271011

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)

Pierre Charrier
ボルドー第1大学・教授 (フランス)

Pierre Degond
トゥールーズ第3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)

Tai-Ping Liu
スタンフォード大学・教授 (アメリカ)

Peter Markowich
ケンブリッジ大学・教授 (イギリス)