

科学研究費助成事業 研究成果報告書

令和 元年 6月 21日現在

機関番号：14401

研究種目：基盤研究(B) (一般)

研究期間：2016～2018

課題番号：16H04267

研究課題名(和文) 分子動力学によるナノスケールの非線形非平衡音響学

研究課題名(英文) Nonlinear nonequilibrium acoustics in nanoscales

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) 5,200,000円

研究成果の概要(和文)：音波を利用すれば、大域的な一方向流動を伴うことなく流体中に運動量とエネルギーを輸送できる。周波数が高いほどエネルギー輸送量が大きくなり、波長が短くなってエネルギー輸送の目標点の精度を高めることができる。しかし、波長が分子の平均自由行程程度に短くなると流体力学理論の局所平衡の前提が破綻して流体力学が適用できなくなるので、高周波数の非線形音波伝播過程を予測できる理論は存在しない。この事実が応用技術の発展を阻害している。本研究は高周波数の非線形音波伝播過程に対して質的に非定常かつ非平衡な大規模分子動力学計算を実行し、気体の自由空間中の平面進行波における運動量とエネルギーの輸送過程の理解に取り組んだ。

研究成果の学術的意義や社会的意義

ナノメートル程度の波長をもつ超音波による運動量輸送とエネルギー輸送の予測と制御が可能となれば、非接触で微粒子の位置を精密に制御する技術や微細で精巧な加工技術の新しい発展を導くことが予想される。また、ナノメートル程度の波長をもつ超音波とナノメートル程度の厚さをもつ気液界面との非平衡な相互作用の過程が明らかになれば、超音波霧化だけでなく、新しい界面化学現象の発見やその応用技術への発展なども期待される。このように、音波による運動量輸送とエネルギー輸送をナノスケールの世界に導入すること、すなわち「非線形非平衡音響学」を創出することは、流体力学的应用研究の新展開を刺激し得るという意味でその意義は大きい。

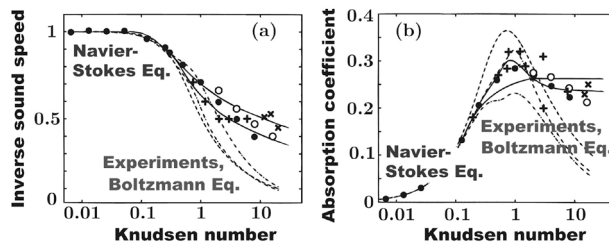
研究成果の概要(英文)：Sound waves can convey the momentum and energy in gases without unidirectional flows. We can examine the transport properties of sound by solving the system of Navier-Stokes equations, if the wavelength is sufficiently large compared with the mean free path of gas molecules and the frequency is sufficiently small compared with the mean collision frequency of gas molecules. The propagation properties of short-wavelength sound have been studied by the kinetic theory of gases based on the Boltzmann equation and several discrepancies have been found between the predictions by Navier-Stokes and Boltzmann equations. However, the kinetic theory is subject to the crucial constraint that a molecule must be negligibly small compared with any other length scales concerned, and hence sound waves with wavelength of nanometers cannot be treated in the kinetic theory. We therefore consider the application of molecular dynamics to the problems of propagation of sound with wavelength of nanometers.

研究分野：流体力学

キーワード：分子動力学 非線形音響学 ボルツマン方程式

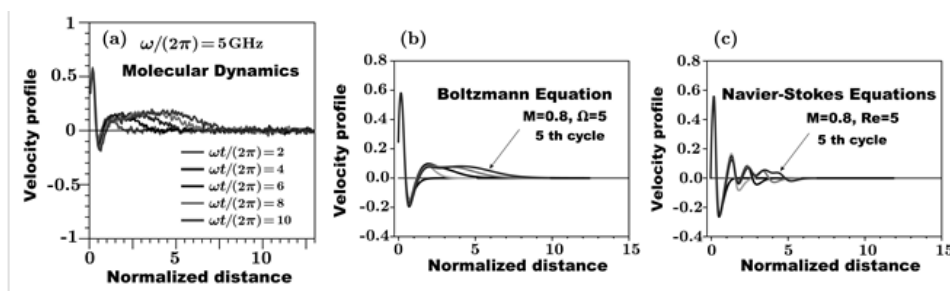
1. 研究開始当初の背景

希薄気体中の線形平面音波に関する研究は1950年代から活発に行われており、分子の平均自由行程が波長より長い場合（非平衡問題）の理論・実験・計算研究が多数存在する（右図）。しかし、それらの成果はボルツマン方程式を基礎としており、(i)波長に比べて十分小さい長さ d とし、 d の3乗の微小体積中に分子の速度分布関数が定義できるほどに多数の分子が存在すること、(ii)実効的な分子間力到達半径が d よりさらに小さいこと、(iii)周期に比べて十分短い時間よりも分子間の相互作用時間がさらに短いことという3つの前提条件を必要とする（分子気体力学の限界）。このため、周波数はあまり高くなく、したがって波長もあまり短くはないが、分子の平均自由行程は波長よりも長いという低圧気体にも適用可能である。すなわち、波長に対する平均自由行程の比（クヌーセン数）が同じ大きさであっても、波長自体が短い場合には適用できない。分子動力学計算であれば上記の3つの前提に縛られることはないが、時間平均を用いてデータ解析を行う方法が主流であるため、音波に代表される本質的に非定常な問題への取り組みはほとんど存在しない。本研究は、これらの諸問題を克服して応用研究を推進すべく「非線形非平衡音響学」という新しい枠組みを提案するものとして位置づけられる。



図：線形の平面進行音波の伝播特性。実験データ（シンボル）、線形化ボルツマン方程式の数値解と近似解（実線）、および線形化 Navier-Stokes 方程式の解析解（破線）の比較。（Garcia & Hajiconstantinou, Phys. Fluids 2001 から編集）。実験は低圧で行われている。

研究代表者は、平成 19～21 年度に基盤研究(B)の、平成 22 年に挑戦的萌芽研究の、平成 23～25 年度に基盤研究(A)などの交付を受けて、希薄気体力学と分子動力学に基づいて非線形非平衡音波に関わる流体力学現象の解明に取り組んできた（たとえば文献(1)(2)）。これらの研究の過程で、分子動力学による気体中の平面進行音波の計算（下図）を行い、上記(i)(ii)(iii)の制約が、ナノスケールの非平衡音響伝播に対する正しい知見とそれに基づく発展を阻んでいることを認識した。これは、現時点の分子流体力学には、ナノスケールの非平衡非定常流動を取り扱うための十分に正しい理論的枠組みが備わっていないことを意味する。このような現状を打破するために、分子動力学による「非線形非平衡音響学」を冠する基盤的基礎研究への取り組みが必要であるという結論に達した。



図：非線形性が強く非平衡性が比較的弱い場合の、平面進行音波の伝播過程の数値解析例。横軸（無次元座標）がゼロの位置にある音源から右向きに進む音波が放射されている。(a):分子動力学計算、(b):ボルツマン方程式の数値解、(c):Navier-Stokes 方程式の数値解。非平衡性が比較的弱い場合、分子動力学計算結果(a)とボルツマン方程式の計算結果(b)は定性的に良く一致する。

分子動力学は、古典力学の制限と分子間力モデルの制限を別にして、流体力学の前提条件である局所平衡性や、分子気体力学の前提となる速度分布関数の定義可能性などの制約に縛られることはない。流体力学の前提条件が成立せず、分子気体力学の前提条件も成立しない状況において、非平衡で非定常な流動現象はどのように整理されてどのように体系化されるだろうか。このような根本的な問題に対して、徒に考察対象を一般化することなく、工学的応用を見据えた基本的現象に絞り込んで詳細な解析を行い、広い範囲の工学的事象に応用可能な「非線形非平衡音響学」を提出しようとするのが本研究である。このような研究は他に類を見ないであろう。これこそが本研究の学術的な特色であり、独創的な点である。

文献

- (1) T. Yano, "Molecular Dynamics Study of Sound Propagation in a Gas," in Nonlinear Acoustics State-of-the-Art and Perspectives: AIP Conference Proceedings 1474, edited by T. Kamakura and N. Sugimoto (AIP, Melville, 2012), pp.75-78 (2012).
- (2) T. Yano, "Molecular Simulation of Sound for Development of Nanoacoustics," in Proceedings of the Acoustics 2012 Nantes Conference.

2. 研究の目的

流体の一方方向流動を利用すると、非接触で、運動量やエネルギーを所望の場所へ輸送することができる。しかしながら、これは必然的に質量輸送をもともなうので、開放空間では有効であるが閉鎖空間への適用は制限される。これに対して、もし音波を利用できるならば、大域的な一方方向流動すなわち質量輸送をもともなく、流体中に運動量とエネルギーを輸送できる。周波数が高いほど、エネルギー輸送量が大きくなり、波長が短くなってエネルギー輸送の目標点の精度を高めることができる。しかし、気体中の音波において、波長が気体分子の平均自由行程程度に短くなると、局所平衡の前提が破綻して流体力学が適用できなくなる。このため、高周波数の非線形音波伝播過程を流体力学によって予測することはできない。さらに周波数が高くなって、波長に比べて分子の大きさを無視できなくなると、ボルツマン方程式を基礎とする気体分子運動論さえも適用できなくなる。そのような高周波数の音波の伝播を記述する理論は存在しない。これらの事実が、高周波数大振幅音波の応用技術の発展を阻害している。本研究は、気体中の高周波数の音波の非線形伝播過程を、分子動力学計算によって解明することを目的とする。本質的に非定常かつ非平衡な大規模分子動力学計算を実行し、流体力学による予測とボルツマン方程式による予測との対比をとおして、非線形非平衡音響学の創出を目指す。流体力学による予測とボルツマン方程式による予測も、いずれも高精度の数値解を求めることによってなされる。

また、本研究の進展にともなって、新たな視点が追加されて、ナノスケールの非線形非平衡音響学の意義を一層高めることが期待できるようになってきた。ここで言う新たな視点とは、分子運動による巨視的変数のゆらぎの伝播である。定常問題や平衡問題であれば平均操作によってゆらぎを消去できるが、本質的に非定常かつ非平衡な分子動力学計算においては、ゆらぎそのものの振る舞いに対する理解を軽んじることはできない。ゆらぎの振る舞いを理解することは、本研究の当初の目的には含まれておらず、また本報告書作成時点で完了していないが、これに対する取り組みが本研究の意義を高めることは明白である。

3. 研究の方法

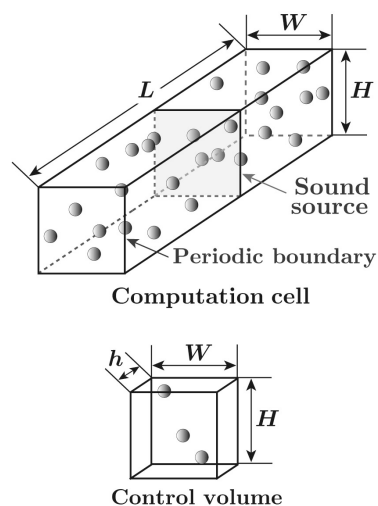
【分子動力学計算】レナード・ジョーンズ分子間力に従う単一種・単原子分子系の古典分子動力学計算を行う。研究代表者は過去に、自らの手で計算コードを書いて、気体中の平面音波の非定常分子動力学計算と気液界面における蒸発・凝縮の定常非平衡分子動力学計算を行っている。本研究の分子動力学計算は、基本的には、これらの計算方法の素直な拡張である。平面波の問題を例にとれば、右図のような直方体計算セルに N 個の分子を入れて、6つの側面すべてに周期境界条件を課してニュートンの運動方程式を数値積分する。

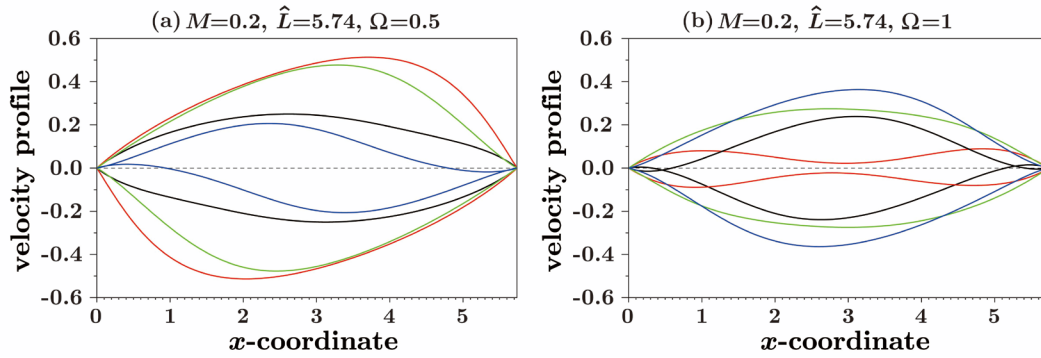
【流体力学計算と分子気体力学計算】本研究は、流体力学も分子気体力学もどちらも適用できないナノスケールの現象の解明を目的とするが、その特徴を明らかにするために、圧縮性 Navier-Stokes 方程式を解く流体力学計算とボルツマン方程式を解く分子気体力学計算の結果との対比は重要である。研究代表者は過去に、圧縮性 Navier-Stokes 方程式の差分法による数値解も求めているし、ボルツマン方程式の差分法による高精度の数値解も求めている。

【平衡状態のまわりのゆらぎの分子動力学計算】「研究の目的」の項目の第2段落で述べたとおり、ゆらぎの振る舞いに対する理解を深めることは、本研究課題のナノスケールの非線形非平衡音響学の意義を高めるために重要である。そこで、当初の研究目的には含まれていなかったが、大規模な分子動力学計算による平衡状態まわりのゆらぎの抽出とその解析も行う。

4. 研究成果

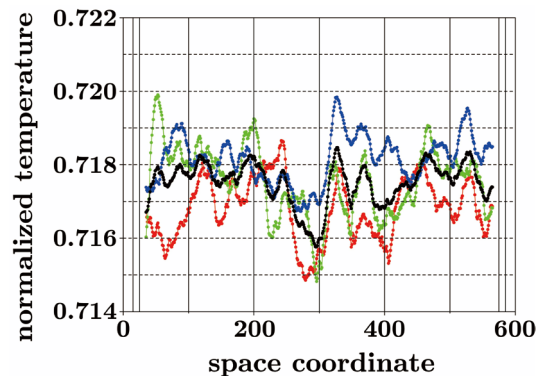
上の図に示すような長い直方体の計算セルを用いて、平面進行波、平面定在波、および非平面進行波の分子動力学計算を実行した。それらの計算結果の特徴を明確にするために、それぞれに対応する流体力学計算と分子気体力学計算も同時に行った。これらの結果は、本報告書作成時点で発表準備中である。一例として、平面定在波の問題に対して得られたボルツマン方程式の数値解を次頁に示す。





上左図は基本モードの固有振動数の音源によって励起された気体の共鳴音波の1周期分の速度波形である。上右図は、基本モードの固有振動数の2倍の周波数の音源によって励起された音波であるが、これは共鳴音波ではない。いずれも音響マッハ数 $M=0.2$ の場合であり、非線形効果は無視できない。

平衡状態のまわりのゆらぎの分子動力学計算の結果も示しておく。右図は、 $H=W=10\text{nm}$ で $L=600\text{nm}$ の計算セル内に約3万個のレナード・ジョーンズ分子を入れて、 1000ns (10億計算ステップ) 以上の分子動力学計算を実行して、温度場のゆらぎを図示したものである。100nmより長い波長成分のゆらぎが存在することが明確に示されている。



5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 (計0件)

〔学会発表〕 (計2件)

(1) T. Yano, “Numerical Study of High Frequency Nonlinear Gas Oscillation,” Inter-Noise 2019, Madrid, June 16-19, 2019.

(2) 矢野 猛, “気液2相の分子動力学における平衡状態まわりのゆらぎ,” 第65回理論応用力学講演会, 札幌, 6月28日-30日, 2019.

〔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〕

ホームページ等なし

6. 研究組織

(1) 研究分担者なし

(2) 研究協力者なし

※科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属されます。