

令和 3 年 5 月 3 日現在

機関番号：14301

研究種目：挑戦的研究（萌芽）

研究期間：2017～2020

課題番号：17K18840

研究課題名（和文）熱浴効果が内在する新しい運動論モデリングの開拓

研究課題名（英文）Study on feasibility of the kinetic equation with thermal bath

研究代表者

高田 滋（Takata, Shigeru）

京都大学・工学研究科・教授

研究者番号：60271011

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 4,800,000円

研究成果の概要（和文）：研究成果を大別すると次の3つになる。(1) カーン・ヒリアード型の方程式を流体極限としてもつ簡便な運動論方程式を見出し、時間的に単調減少する汎関数を発見した。この成果を高密度気体の相転移ダイナミクスのモデル化に発展させる研究が進行中である。(2) 多孔質内気体輸送を扱う確率的数値解析コードを開発し、大規模数値データを集積、これをパーコレーション理論と関連付けて広い範囲の充填率に対して印加圧力差への流量応答を予測できる簡便な運動論モデルを構築した。(3) 運動論方程式の境界条件を熱浴効果の観点から見直す試みからCercignani-Lampis模型のLangevin描像を見出すことに成功した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本研究では、「熱浴」という概念を介在させることで、種々の現象をなるべく単純かつ効率よく、統一的に扱う考え方を提案し、一定の成果を収めた。例えば、合金の相分離の模擬に典型的に用いられるカーン・ヒリアード型の方程式を、気体を対象としてきた運動論方程式から導いた報告例はこれまでなかった。このことは、細胞のコロニー形成の運動論モデルを模索する研究者たちにも注目された。また、多孔質内気体輸送では、従前の運動論コミュニティでとられるものとは全く異なるアプローチをとり、別途発展してきたパーコレーション理論との融合により、簡便な運動論モデルを提案することができ、大幅な解析の簡易化に道筋をつけた。

研究成果の概要（英文）：The main findings in the project are classified into three categories: (1) A simple kinetic model that reproduces a Cahn-Hilliard type equation in the fluid-dynamic limit has been found. For this model, a monotonic functional in time is found as well. Thus, the minimization problem can be formulated. The modeling in this direction is being developed to a new simple modeling of the dense gas dynamics. (2) A stochastic numerical code that simulates the gas transport in the porous media has been developed. It is used to accumulate the big data, which are used in the combination with the percolation theory to develop a new simple kinetic model that give a good prediction for the mass flow conductance against a give pressure difference. (3) From the viewpoint of thermal bath concept, the conventional boundary condition for kinetic equation is revisited, which leads to finding a Langevin picture (a stochastic dynamical picture) of the Cercignani-Lampis model.

研究分野：分子気体力学

キーワード：相転移 cahn-Hilliard方程式 ボルツマン方程式 運動論方程式 多孔質 パーコレーション

## 1. 研究開始当初の背景

気体分子運動論は、巨視的記述だけでは十分に反映できない微視的效果を、物理現象の記述に取り入れることを可能にするモデル化の方法である。第一原理の立場からは物理現象を多粒子系として扱う微視的記述が理想だが、同じ現象を連続体の場として捉える巨視的記述のあいだにはいまだに大きな隔りがある。分子運動論はこのギャップを埋めるメソスコピックなモデル化の方法であるが、その適用範囲が二体衝突近似の許される「希薄」な系に限られるという強い先入観に支配されてきた。

本研究では、適度な前提のもとでは、外力項をうまく利用してより制約の少ない実効的なモデリングが可能であることを探求しようとした。提案する新しいモデル化により、二体衝突の制約を超えて相変化、相分離を伴う系や散逸系への運動論的記述の拡張が可能になり、たとえば合金の動的相分離モデルの構成も本研究の視野の内にあると考えた。

## 2. 研究の目的

ボルツマンとマクスウェルにより創始され、その後、宇宙開発計画とともに発展した分子気体力学の新たな可能性を模索することを志して、「熱浴を内在する運動論模型」という単純なコンセプトを骨格とした汎用性の高いモデリング概念の構築を目指した。この大枠へ踏み出す具体的課題として、(A) 多孔体内の拡散現象、(B) 相分離と相転移の動力学、を設定した。また、計画の進展とともに、そもそも分子気体力学における境界条件は熱浴との相互作用効果を表すことから、この条件を定める気体-固体表面間の相互作用を動力的立場から見直すことが強く動機づけられた。そこで、このことにも新たな着想への足掛かりとして取り組んだ。

## 3. 研究の方法

上述の目的に対して、解析および数値解析的な研究を進めた。数値解析としては、報告者が経験を持つ差分解析法、確率的数値解法(モンテ・カルロ法)に加えて、新たに確率微分方程式であるランジュバン型方程式の数値解法に取り組んだ。このことは使用できる数値解析法の幅を広げることにつながり、非常に有益であった。

解析においては、相分離模型に対する最小化問題の構成、線形安定性解析、変分解析、漸近解析をそれぞれ進め、一様平衡状態からの相転移条件、新しい停留状態(二相分離後の状態)の予測法の開発もあわせて行った。こうした種々の解析法の開発は、単なる技術的なことにとどまらず、物理的理解を深めるうえでも有効に機能した。

## 4. 研究成果

### (A) 多孔体内の拡散現象について

気体分子間の衝突がないクヌーセン拡散を想定して、初年度に、確率解法に基づく3次元シミュレーションコードの開発を概ね終わらせた。その後、多孔体の温度を一様とし、圧力差をかけたときに生じる流量特性(圧力差に対する流量応答)の大規模なデータ収集を行った。クヌーセン拡散においては、問題は線形であり、大規模とはいっても非線形問題を扱うより格段に分析の見通しは立てやすい対象である。大規模データの分析をもとに、広い範囲の充填率に対して、負荷圧力に対する流量応答を適切に再現できる単純な運動論模型(灰色模型)の構築を試みた。多くの試行錯誤ののち、パーコレーション理論を援用したデータ分析により、適切な灰色模型のための(気体分子と固相間の衝突に関わる)Knudsen数の換算公式を同定することに成功した。この成果をまとめた論文はPhys. Fluids誌に掲載された。

### (B) 相分離と相転移の動力学について

この課題における最初の重要な成果は、カーン・ヒリアード型方程式を流体極限としてもつ簡便な運動論方程式を見出したことである。カーン・ヒリアード型方程式を極限として回復する運動論模型は、報告者の知る限りこれまでになく、細胞のコロニー形成を運動論的に考察している研究者たちに注目された。ここで構成した運動論方程式の系では、最小化問題が構成でき、実際に時間的に単調減少する汎関数を具体的に示した。また、カーン・ヒリアード型方程式の数値シミュレーションを空間1次元、2次元の場合に行い、一様密度の状態が不安定化し、スピノーダル分解にあたる相変化が生じることを示した。さらに、上記の最小化問題における汎関数の時間推移の単調性と熱力学的な自由エネルギーやエントロピーの非単調性を数値的に

確かめている．これらに加えて，一様状態の線形安定性解析を，運動論方程式とカーン・ヒリアード方程式のそれぞれに対して行い，両者が同じ中立安定条件を与えることを見出している．運動論方程式の数値計算ではセミ・ラグランジュ的な数値解法をとることにより，容易に多次元化が進められるような方針を立てているが，現段階では空間1次元系のコード開発に留まっている．以上の成果は J. Stat. Phys. 誌と Phys. Rev. E 誌に掲載されたほか，国際会議でも招待講演として報告している．

カーン・ヒリアード型方程式を流体極限で回復するモデルは，等温近似という「過度な」簡易化を行い，本来境界条件を通して行われる熱浴との作用を衝突積分に含めたものである．そこで，このやや「過度な」簡易化を緩めて，より現実的な簡易モデルの構成のあり方を検討した．検討は，境界に起因する難点が生まれない周期系を対象にした．

(1) 前述のモデルにおいて平均場近似に取り入れた局所場近似の仮定を緩め，分子間力を具体的に与えた数値シミュレーションを行った．その結果，平均場近似における分子間力ポテンシャルのパラメータとファン・デル・ワールス状態方程式のパラメータとの間で適切な関係を保たなければ，局所場近似に基づくシミュレーション結果が正しく再現できないことが明らかになった．

(2) 前述のモデルを拡張して，より現実的な簡易モデルを構成して境界に起因する難点が生まれない周期系の数値シミュレーションを多数行った．この新しいモデルでは，質量だけでなく，運動量やエネルギーも保存される．さら時間的に単調減少する汎関数が見出され，熱力学的な現象解釈を自然に拡張できることが分かった．さらに相転移シミュレーションを行い，結果の分析において，これまで注目してこなかったスピノーダル分離とバイノーダル分離の区別が明瞭になり，とくに後者の臨界線の予測にめどが立った．これらの成果は論文にまとめ，学術誌へ投稿中である．

以上のほか，エンスコグ理論を検討した結果，高密度気体のプラントル数は2/3を20%弱下回りうることを把握した．このことを念頭において，Ellipsoidal Statistical モデルと呼ばれる拡張型緩和衝突モデルの低プラントル数領域でのエントロピー的な性質を調べた．その結果，この領域で良好なエントロピー性を維持するためには，応力の非等方性に一定の制約が必要であることを定量的に示した．さらに，この制約から生まれる実際上の適用限界を，複数の厳しいテスト問題により具体的に調べた．この成果をまとめた論文は Kinetic and Related Models 誌に掲載された．

#### (C) 運動論方程式の境界条件について

この課題は，研究の進展とともに，そもそも「熱浴」とは何かをよりよく把握したいという動機からスピンアウトしたものである．当初はもっとも古典的な拡散反射条件を動力学的に理解したいと考えたが，この条件を特殊な場合として内包する Cercignani-Lampisの境界条件モデルを対象に調べることにした．この境界条件の背後にある力学的描像を抽出するために，同モデルにおいて固体との相互作用の影響領域下で気体分子が運動する際の軌道（確率過程）を再現する Langevin 描像を同定し，結果として目的とした力学描像の抽出に成功した．この成果は国際会議で招待講演として報告したほか，同じ会議の会議録論文としての掲載も決まっている．なお，野口尚史氏（研究協力者）らの流動層粒子群の挙動分析実験を，関係する研究成果報告として含めてある．

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計2件（うち査読付論文 2件／うち国際共著 0件／うちオープンアクセス 0件）

|   |                         |
|---|-------------------------|
| 1. 著者名<br>Takata Shigeru, Noguchi Takashi   | 4. 巻<br>172             |
| 2. 論文標題<br>A Simple Kinetic Model for the Phase Transition of the van der Waals Fluid | 5. 発行年<br>2018年         |
| 3. 雑誌名<br>Journal of Statistical Physics  | 6. 最初と最後の頁<br>880 ~ 903 |
| 掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子）<br>10.1007/s10955-018-2068-z                                  | 査読の有無<br>有              |
| オープンアクセス<br>オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難  | 国際共著<br>-               |

|  |                     |
|--|---------------------|
| 1. 著者名<br>Takata Shigeru, Matsumoto Takuya, Hirahara Anna, Hattori Masanari                              | 4. 巻<br>98          |
| 2. 論文標題<br>Kinetic theory for a simple modeling of a phase transition: Dynamics out of local equilibrium | 5. 発行年<br>2018年     |
| 3. 雑誌名<br>Physical Review E  | 6. 最初と最後の頁<br>52123 |
| 掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子）<br>10.1103/physRevE.98.052123  | 査読の有無<br>有          |
| オープンアクセス<br>オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難   | 国際共著<br>-           |

〔学会発表〕 計15件（うち招待講演 7件／うち国際学会 6件）

|  |
|--|
| 1. 発表者名<br>Shigeru Takata  |
| 2. 発表標題<br>A revisit to the Cercignani-Lampis model: Langevin picture and its numerical simulation |
| 3. 学会等名<br>INDAM workshop on "Recent advances in kinetic equations and applications"（招待講演）（国際学会）   |
| 4. 発表年<br>2019年  |

|   |
|---|
| 1. 発表者名<br>川村健人, 高田滋  |
| 2. 発表標題<br>Van der Waals流体の相分離に関する分子運動論的解析：局所場近似を外力に用いないモデル |
| 3. 学会等名<br>第2回先端流体理工学研究部門公開セミナー                             |
| 4. 発表年<br>2020年   |

|  |
|--|
| 1. 発表者名<br>Shigeru Takata  |
| 2. 発表標題<br>A construction of kinetic model for nonideal gases                  |
| 3. 学会等名<br>31st International Symposium on Rarefied Gas Dynamics (招待講演) (国際学会) |
| 4. 発表年<br>2018年  |

|   |
|---|
| 1. 発表者名<br>Shigeru Takata   |
| 2. 発表標題<br>Kinetic model for the phase transition of the van derWaals fluid                                 |
| 3. 学会等名<br>12th AIMS Conference on Dynamical Systems, Differential Equations and Applications (招待講演) (国際学会) |
| 4. 発表年<br>2018年   |

|  |
|--|
| 1. 発表者名<br>Shigeru Takata  |
| 2. 発表標題<br>A simple kinetic model for phase transition                               |
| 3. 学会等名<br>International Workshop on kinetic theory and related topics (招待講演) (国際学会) |
| 4. 発表年<br>2018年  |

|   |
|---|
| 1. 発表者名<br>Shigeru Takata   |
| 2. 発表標題<br>Kinetic theory for a simple modeling of phase transition |
| 3. 学会等名<br>慶應大学「非線形解析セミナー」(招待講演)                                    |
| 4. 発表年<br>2018年   |

|   |
|---|
| 1. 発表者名<br>赤曾部成寛  |
| 2. 発表標題<br>Cercignani--Lampis モデルのLangevin 系：力学的描像と数値シミュレーション |
| 3. 学会等名<br>日本流体力学会年会2018                                      |
| 4. 発表年<br>2018年   |

|                               |
|-------------------------------|
| 1. 発表者名<br>平原杏奈               |
| 2. 発表標題<br>相変化記述のための簡単な運動論モデル |
| 3. 学会等名<br>日本流体力学会年会2018      |
| 4. 発表年<br>2018年               |

|   |
|---|
| 1. 発表者名<br>高田滋  |
| 2. 発表標題<br>Cercignani--Lampis モデルのLangevin 系：力学的描像と数値シミュレーション |
| 3. 学会等名<br>第55回中部・関西支部合同秋期大会                                  |
| 4. 発表年<br>2018年   |

|  |
|--|
| 1. 発表者名<br>畠中貴翔  |
| 2. 発表標題<br>多孔質内気体のKnudsen 拡散：粒子シミュレーションと均質化モデルの換算Knudsen 数 |
| 3. 学会等名<br>第1回先端流体理工学研究部門公開セミナー                            |
| 4. 発表年<br>2019年  |

|   |
|---|
| 1. 発表者名<br>S. Takata  |
| 2. 発表標題<br>A kinetic model for the phase transition of the van der Waals fluid              |
| 3. 学会等名<br>Workshop ``Recent advances in kinetic equations and applications'' (招待講演) (国際学会) |
| 4. 発表年<br>2017年   |

|   |
|---|
| 1. 発表者名<br>S. Takata  |
| 2. 発表標題<br>Kinetic model for the phase transition of the van der Waals fluid  |
| 3. 学会等名<br>International Confer- ence on Nonlinear Analysis: Kinetic Theory, Gas Dynamics, and Related Fields (招待講演) (国際学会) |
| 4. 発表年<br>2017年   |

|                                      |
|--------------------------------------|
| 1. 発表者名<br>高田滋, 野口尚史                 |
| 2. 発表標題<br>ファンデルワールス流体に対する相変化の運動論モデル |
| 3. 学会等名<br>第54回日本航空宇宙学会関西・中部支部合同秋期大会 |
| 4. 発表年<br>2017年                      |

|   |
|---|
| 1. 発表者名<br>小山志穂里, 松野友樹, 野口 尚史           |
| 2. 発表標題<br>気流により二次元的に流動化された粒子群の運 動の統計解析 |
| 3. 学会等名<br>第54回日本航空宇宙学会関西・中部支部合同秋期大会    |
| 4. 発表年<br>2017年                         |

|                                    |
|------------------------------------|
| 1. 発表者名<br>小山志穂里, 松野友樹, 野口 尚史      |
| 2. 発表標題<br>気流により流動化した単粒子層の運動の 統計解析 |
| 3. 学会等名<br>日本流体力学会 年会 2017         |
| 4. 発表年<br>2017年                    |

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

| 氏名<br>(ローマ字氏名)<br>(研究者番号) | 所属研究機関・部局・職<br>(機関番号) | 備考 |
|---------------------------|-----------------------|----|
|---------------------------|-----------------------|----|

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

| 共同研究相手国 | 相手方研究機関 |
|---------|---------|
|---------|---------|