

令和 5 年 6 月 29 日現在

機関番号：50102

研究種目：若手研究

研究期間：2018～2022

課題番号：18K13471

研究課題名(和文) 実在気体・液体中の非平衡現象に対する拡張された熱力学の展開

研究課題名(英文) Development and Application of Rational Extended Thermodynamics of Dense Gases and Liquids

研究代表者

有馬 隆司 (Arima, Takashi)

苫小牧工業高等専門学校・創造工学科・准教授

研究者番号：80735069

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,200,000円

研究成果の概要(和文)：局所的熱平衡の仮定を超えて実在気体・液体中の非平衡現象を理解することを目的に、拡張された熱力学(RET)に基づく理論の構築とその超音波伝播解析への応用を行った。主に次の成果を得た。

- (1) 体積粘性が支配的な役割を果たす多原子分子実在気体を記述するRETを構築した。閉じた場の方程式系の特性速度も導出した。特に、van der Waals気体に対して、特性速度の取りうる範囲や密度・温度依存性を明らかにした。
- (2) (1)で求めた理論を用いて超音波の分散関係を解析した。特に、二酸化炭素液体中の音波吸収の実験結果を従来の流体力学に比べてよく再現できることを明らかにし、理論の妥当性を示すことに成功した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

航空宇宙工学における衝撃波解析や医療工学における超音波・衝撃波利用など、流体中の時間・空間的に急激な変化を伴う強い非平衡流れの理解と制御が現代の流体科学・工学において求められている。本研究はこのような学術的・社会的要請に資するものである。本研究の成果は、流体物理・流体工学の幅広い分野への応用可能性がある。

研究成果の概要(英文)：The aim of this study was to understand nonequilibrium phenomena in dense gases and liquids, which is described beyond the assumption of local thermodynamic equilibrium. We achieved this by constructing a theory based on Rational Extended Thermodynamics (RET) and applying it to the analysis of sound wave propagation. We obtained the following main results:

- (i) We developed the RET theory for dense polyatomic gases in which the effect of the bulk viscosity is significant. We derived characteristic velocity and specifically investigated its upper and lower bounds, density dependence, and temperature dependence for van der Waals gases.
- (ii) Using the derived RET theory, we analyzed the dispersion relation of sound waves. In particular, we successfully demonstrated that the experimental data of sound absorption in liquefied carbon dioxide can be well described by RET compared to conventional hydrodynamics theory, thereby validating the theory.

研究分野：非平衡熱力学

キーワード：流体物理 非平衡流れ 拡張された熱力学 多原子分子実在気体 分子内部自由度緩和 特性速度 分散関係

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、研究者個人に帰属します。

1. 研究開始当初の背景

航空宇宙工学における衝撃波解析や医療工学における超音波・衝撃波利用など、流体中の時間・空間的に急激な変化を伴う強い非平衡現象の理解と制御が現代の流体科学・工学において求められている。この課題に対して、気体分子運動論によるメソスコピックなアプローチや分子シミュレーションによるミクロスコピックなアプローチが希薄な気体に対して進んでいるが、実用上重要となる実在気体に対しては、複雑な素過程のため、その記述が発展途上にある。

一方、マクロスコピックなアプローチは、実在気体に対して有効であるが、従来の流体力学理論である Navier-Stokes-Fourier (NSF) 理論の適用範囲は局所的熱平衡状態に限られる。近年、NSF 理論を超える非平衡熱力学の発展が進んでおり、特に、拡張された熱力学 (Rational Extended Thermodynamics; 以下 RET) [I. Müller & T. Ruggeri (Springer, 1993)] は、エントロピー原理や滑らかな解の大域的な存在など、その物理的・数学的妥当性が確認されている。この理論は、適用範囲が重なる領域に対しては、Boltzmann 方程式に基づくモーメント方程式系と無矛盾な結果を与える。RET の適用範囲はこれまで主に単原子分子希薄気体に限られていたが、研究代表者らによって多原子分子希薄気体に適用できるように理論の拡張が行われてきた [T. Ruggeri & M. Sugiyama (Springer, 2015, 2021)]。特に、分子の回転や振動モードが非平衡緩和過程に及ぼす影響を記述することに成功している。これによって、希薄気体中の強い非平衡流れに対する実験結果の再現や従来の流体力学的・運動論的手法では困難であった流れの包括的記述といった成果が挙げられている。実在気体に対しては、RET の構築が行われておらず、最近、簡単な場合に限って、現象論的な実在気体効果の導入方法が研究代表者らによって提案された状況であった。

2. 研究の目的

本研究の目的は、実在気体効果を含めて流体中の強い非平衡現象を解析できる理論の構築と展開である。より具体的には、研究代表者のこれまでの研究を拡張し、実在気体・液体に対する RET を構築する。さらに、構築した理論を基に典型的な波動現象の解析を行い、その熱的特性を明らかにする。

3. 研究の方法

本研究目的のため、次の3つの研究を進めた。各研究の方法は以下の通りである。

(1) 多原子分子実在気体に対する RET の構築

RET による閉じた場の方程式系の導出の基本的な手順は次のようにまとめることができる：(i) 対象とする流体に対して適切なバランス方程式系と独立な場の量 (流体力学的物理量と散逸的物理量) を設定する。(ii) バランス方程式系に対し、相対性原理を用いて方程式系の速度依存性を明らかにする。(iii) 構成量をエントロピー原理によって独立な場の量によって表す。(iv) 熱力学的な安定性条件 (この条件は、解の存在と一意性、初期条件・境界条件に関する解の連続性を保証する条件と同等である) によって理論の適用領域を明らかにする。実在気体に対する理論において困難な部分は、物理的に意味のある状態空間の領域で手順 (iv) の安定性条件が成立するようなバランス方程式系を手順 (i) で設定する点である。

多原子分子実在気体に対して、分子の回転や振動モードによる緩和過程に加え、分子間ポテンシャルによるマクロなエネルギー緩和を導入したバランス方程式系が研究代表者らによって提案されている。ただし、これは分子の回転や振動モードが一体のものとして扱える場合に限定されていた。そこで、この理論を拡張し、多原子分子気体効果と実在気体効果のそれぞれ詳細な記述に適切なバランス方程式系を提案し、RET の構成理論により閉じた場の方程式系を導出する。

(2) 多原子分子実在気体に対する RET における特性速度の解析

波動伝播の解析において特性速度は重要な役割を果たす。例えば、線形波動における高振動数極限での位相速度や、衝撃波解析における不連続波面が現れるマッハ数は、特性速度によって表される。(1) で構築する理論の特性速度を解析し、場の方程式系が波動伝播において持つ特徴を明らかにする。

(3) 多原子分子実在気体中の超音波伝播の解析

流体中の典型的波動現象として、(1) で構築する理論を用いた超音波伝播の解析を行う。線形化した場の方程式系から分散関係を導出し、位相速度や減衰係数の振動数依存性を調べる。また、実験結果との比較を行い、理論の妥当性の検証を行う。

4. 研究成果

(1) 多原子分子実在気体に対する RET の構築

多原子分子実在気体中の詳細な分子内部自由緩和過程を記述する RET の構築

多原子分子実在気体を対象として RET の構築を行った。分子内部自由緩和過程として、並進およびポテンシャルモード、回転モード、振動モードの3つの過程を考えた。つまり、質量密度、

運動量密度（空間3成分）各モードの非平衡エネルギーという7変数に対するバランス方程式系に対するRETを構築した。これは、多原子分子希薄気体理論で考えていた並進モード、回転モード、振動モードの3つの過程に対する理論の拡張とみなすことができる。実際、気体分子運動論と整合する希薄気体の非平衡エントロピー密度に対して、研究代表者らが提案したDuality principle [T. Arima, T. Ruggeri, M. Sugiyama, Phys. Rev. Fluids, 2 (2017)]を用いることで、エントロピー原理を満たす多原子分子実在気体の非平衡エントロピー密度を提案することに成功した。このエントロピー密度を基に、RETの構成理論を適用することで閉じた場の方程式系を導出した。得られた場の方程式系は、せん断粘性や熱伝導に比べ体積粘性が支配的な場合、より具体的には、せん断応力や熱流束の緩和時間が分子内部自由緩和を特徴づける動圧（圧力の非平衡寄与）の緩和時間に対して小さい場合に有効である。

これらの研究に加え、単原子分子実在気体に特有の非平衡緩和過程も記述可能なRETの構築も進めた。

相対論的流体力学と統合的な高次の散逸的物理量を記述するバランス方程式系の提案

の7変数理論を超えて、せん断粘性や熱伝導が本質的な役割を果たす現象に適用可能なモデルを構築するには、せん断応力や熱流束といった高次の散逸的物理量に対するバランス方程式も必要であるが、その採り方に任意性があることが知られている。

そこで、相対論的な流体に適用可能なRETを参考にした高次の散逸的物理量に対するバランス方程式系の構築手法を提案した。つまり、相対論的なRETにおけるバランス方程式系のテンソル構造が非相対論的な極限において要請するバランス方程式系の階層構造を求めた。具体的には、次の内容である。

(i)多原子分子希薄気体に対するRETを非相対論極限として持つ相対論的な流体方程式 [S. Pennisi & T. Ruggeri, Ann. Phys. 377 (2017)]は、Boltzmann-Chernikov方程式に基づくモーメント方程式系に基づいて提案されているが、そのモーメントの定義に非物理的な要素があった。そこで、物理的に適切なモーメントに対して、モーメント方程式系を再構築した。特に、15変数を独立な場として持つ場合について、最大エントロピー原理を用いて閉じた場の方程式系を導出した。15変数理論の特別な場合（双曲性を保ちながら変数を消去して得られる方程式系；principal subsystemと呼ばれる [G. Boillat & T. Ruggeri, Arch. Rat. Mech. Anal, 137(1997)]）として、14変数および6変数の理論の導出も行った。また、これらの理論の非相対論極限も求めた。

(ii)(i)で構築した理論の非相対論極限と無矛盾な理論をBoltzmann方程式に対するモーメント方程式系に基づいて提案した。これは、多原子分子希薄気体に対するRETの一般化ともいえるものである。ここで、構築したモーメント方程式系が持つべき階層構造は実在気体に対しても拡張可能である。

(2) 多原子分子実在気体に対するRETにおける特性速度の解析

多原子分子実在気体一般に対する特性速度の導出

(1)で構築した理論が対象とする流体は、対応する局所平衡状態の状態方程式によって決定される。多原子分子実在気体一般に対する状態方程式を用いた場合の特性速度を導出した。特に、局所平衡状態での特性速度が、この理論のprincipal subsystemであるEuler方程式系の特性速度よりも大きいという条件（いわゆるsub-characteristic条件）を満たすことを示した。

van der Waals気体に対する特性速度の解析

具体的な状態方程式として、van der Waals気体に対する状態方程式を用いることで、(2)の結果からvan der Waals気体における特性速度を導出した。この特性速度の下限が希薄気体のものであり、上限がスピノーダル曲線（系の安定性条件の境界を表す曲線）上のものであることを証明した。さらに、7変数理論のprincipal subsystemである6変数理論の特性速度についても調べた。7変数理論の特性速度が6変数のものより大きな値を取るというsub-characteristic条件を示し、6変数理論の特性速度の下限と上限が7変数の場合と同様に希薄極限での値とスピノーダル曲線上での値から決まることを証明した。

(3) 多原子分子実在気体中の超音波伝播の解析

多原子分子実在気体一般に対する分散関係

(1)で導出した閉じた場の方程式系を線形化し、多原子分子実在気体中を伝播する平面調和波の分散関係を導出した。さらに、位相速度と減衰係数の振動数依存性を明らかにした。この結果は、せん断粘性・熱伝導による音波吸収が起きる周波数帯よりも低い周波数帯に対して有用である。特に、実験的測定がなされている減衰特性（一波長あたりの減衰係数）のピーク値とそのときの振動数が特性速度の値のみによって決まることを示し、その解析的な表式を導出することに成功した。

van der Waals気体に対する分散関係

van der Waals気体を対象に、超音波の分散関係を(3)の結果から導出した。特に、減衰特性のピーク値が、その希薄極限の値を下限に持ち、スピノーダル曲線上の値を上限に持つことを

示した。位相速度、減衰係数、減衰特性の密度依存性、温度依存性を数値的に明らかにした。

二酸化炭素液体中の超音波の分散関係の実験結果との比較

van der Waals の状態方程式を液体領域においてより精度良く記述するように修正された状態方程式である Peng-Robinson 状態方程式を用いた場合の分散関係の導出を行った。これを用いて二酸化炭素液体中を伝播する超音波の減衰特性を解析し、実験結果と比較した。結果、特に高振動数領域において、NSF 理論に比べ、RET が実験結果をよく再現することを示すことができた。この結果は RET の妥当性を示すものである。

高次の散逸的物理量による音波吸収の解析

対象は多原子分子希薄気体の場合に限られるが、分子内部緩和モードに因る音波吸収とせん断応力・熱流束に因る音波吸収を同時に考慮した、幅広い振動数領域での減衰特性の解析を行った。さらに、(1) で導出した非相対論的な 15 変数理論を用いることで、せん断応力・熱流束の次の高次の散逸的物理量までを考慮した、より高振動数領域での減衰特性の振動数依存性を明らかにした。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計7件（うち査読付論文 7件/うち国際共著 5件/うちオープンアクセス 4件）

1. 著者名 Arima Takashi, Carrisi Maria Cristina, Pennisi Sebastiano, Ruggeri Tommaso	4. 巻 3
2. 論文標題 Relativistic Kinetic Theory of Polyatomic Gases: Classical Limit of a New Hierarchy of Moments and Qualitative Analysis	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Partial Differential Equations and Applications	6. 最初と最後の頁 39
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1007/s42985-022-00173-4	査読の有無 有
オープンアクセス 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 該当する
1. 著者名 Arima Takashi, Carrisi Maria Cristina, Pennisi Sebastiano, Ruggeri Tommaso	4. 巻 24
2. 論文標題 Relativistic Rational Extended Thermodynamics of Polyatomic Gases with a New Hierarchy of Moments	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Entropy	6. 最初と最後の頁 43 ~ 43
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.3390/e24010043	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する
1. 著者名 Arima Takashi, Carrisi Maria Cristina, Pennisi Sebastiano, Ruggeri Tommaso	4. 巻 137
2. 論文標題 Which moments are appropriate to describe gases with internal structure in Rational Extended Thermodynamics?	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 International Journal of Non-Linear Mechanics	6. 最初と最後の頁 103820 ~ 103820
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.ijnonlinmec.2021.103820	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する
1. 著者名 Arima Takashi, Ruggeri Tommaso	4. 巻 6
2. 論文標題 Molecular Extended Thermodynamics of Rarefied Polyatomic Gases with a New Hierarchy of Moments	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Fluids	6. 最初と最後の頁 62 ~ 62
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.3390/fluids6020062	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 Arima Takashi、Ruggeri Tommaso、Sugiyama Masaru	4. 巻 378
2. 論文標題 Rational extended thermodynamics of dense polyatomic gases incorporating molecular rotation and vibration	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences	6. 最初と最後の頁 20190176
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1098/rsta.2019.0176	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている(また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 Arima Takashi	4. 巻 70
2. 論文標題 Characteristic velocity and dispersion relation of linear waves in extended thermodynamics of a van der Waals gas	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Ricerche di Matematica	6. 最初と最後の頁 285 ~ 298
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 有
オープンアクセス 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 -

1. 著者名 Takashi Arima、Masaru Sugiyama	4. 巻 2132
2. 論文標題 Dispersion Relation of a Rarefied Polyatomic Gas with Molecular Relaxation Processes Based on Extended Thermodynamics	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 AIP Conference Proceedings	6. 最初と最後の頁 130007
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 有
オープンアクセス 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 -

〔学会発表〕 計12件(うち招待講演 2件/うち国際学会 2件)

1. 発表者名 有馬隆司, Tommaso Ruggeri
2. 発表標題 新しいモーメントの階層構造に基づく相対論的および非相対論的多原子分子気体に対する拡張された熱力学
3. 学会等名 日本物理学会 第77回年次大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 有馬隆司, Tommaso Ruggeri
2. 発表標題 新しいモーメントの階層構造に基づく多原子分子希薄気体に対する拡張された熱力学
3. 学会等名 日本流体力学会 年会2021
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 有馬隆司
2. 発表標題 Recent Developments of Nonequilibrium Thermodynamic Theories of Gases
3. 学会等名 日本航空宇宙学会関西支部分科会「非平衡流体への運動学的アプローチ」(招待講演)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 有馬隆司
2. 発表標題 拡張された熱力学から多温度モデルへの緩和極限
3. 学会等名 日本流体力学会 年会2020
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 有馬隆司
2. 発表標題 実在気体中の波動伝播に対する体積粘性効果の検証
3. 学会等名 日本物理学会 2020年秋季大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Arima Takashi
2. 発表標題 Dispersion Relation of a Rarefied Polyatomic Gas with Molecular Relaxation Processes Based on Rational Extended Thermodynamics with 15 Fields
3. 学会等名 20th Conference on Waves and Stability in Continuous Media (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 有馬隆司、Ruggeri Tommaso、杉山勝
2. 発表標題 拡張された熱力学に基づく実在気体理論
3. 学会等名 日本流体力学会 年会2019
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 有馬隆司、Ruggeri Tommaso、杉山勝
2. 発表標題 分子内部運動の緩和を伴う多原子分子・希薄気体の力学 - 拡張された熱力学の展開 -
3. 学会等名 第65回理論応力学講演会・第22回土木学会応用力学シンポジウム
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 T. Arima, T. Ruggeri and M. Sugiyama
2. 発表標題 Rational Extended Thermodynamics for Molecular Relaxation Processes in Rarefied Polyatomic Gases
3. 学会等名 31st International Symposium on Rarefied Gas Dynamics (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 有馬隆司、杉山勝
2. 発表標題 多原子分子希薄気体中の分子内部自由度緩和に対する拡張された熱力学とその音波解析への応用II
3. 学会等名 日本物理学会第75回年次大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 有馬隆司、T. Ruggeri、杉山勝
2. 発表標題 多原子分子希薄気体中の分子内部自由度緩和に対する拡張された熱力学とその音波解析への応用
3. 学会等名 日本物理学会2018年秋季大会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 有馬隆司、T. Ruggeri、杉山勝
2. 発表標題 多原子分子希薄気体中の分子回転・振動緩和に対する拡張された熱力学
3. 学会等名 日本流体力学会 年会2018
4. 発表年 2018年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (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			
イタリア	ボローニャ大学	カリアリ大学		
ロシア連邦	サンクトペテルブルク州立大学			