

## 科学研究費助成事業 研究成果報告書

令和 5 年 5 月 29 日現在

機関番号：14401

研究種目：挑戦的研究（萌芽）

研究期間：2021～2022

課題番号：21K18692

研究課題名（和文）分子動力学に基礎づけられた「ゆらぎの流体力学」の創成

研究課題名（英文）Fluid dynamics of fluctuation and molecular dynamics

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

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 4,900,000円

研究成果の概要（和文）：熱流体力学の前提条件である局所平衡の仮定が成立しない程度の小さなスケールにおいて、詳細かつ精密に分子運動を解析することをおして、「ゆらぎの流体力学」の基礎を構築することを目標とした。ゆらぎの詳細な力学を論じる際、従来はLiouville方程式が基盤となっていたが、これを分子動力学に置き換えることを目指して、理論整備を行った。Liouville方程式の分布関数は位相空間の解軌道だが、現実の（小さい）系の観測は、有限粒子数・有限時間の軌道の平均によってなされる。分子動力学計算をおして、有限粒子数・有限時間の軌道の平均を実観測量に変換するための理論をおおむね構築できたと考えている。

研究成果の学術的意義や社会的意義

揺動散逸定理に代表される「ゆらぎの統計」の研究は少なくない。Landau やPrigogineらは、局所平衡を天下一に仮定するゆらぎの流体力学を提唱した。しかしながら、どのような時空間スケールのゆらぎが、どのような根拠をもって、局所平衡の仮定と両立するのかについては、十分な議論はなされていない。本研究は、このような観点に立って、ある時刻にある位置に現れた変動成分が、次の時刻に何処でどのように振る舞うのかを分子レベルから議論するための理論的枠組みを、分子動力学に基礎づけられた「ゆらぎの流体力学」と名付けて、これを創成するための基礎的ではあるが萌芽的かつ挑戦的な課題に取り組むことを目的とする。

研究成果の概要（英文）：We have executed several equilibrium and non-equilibrium molecular-dynamics simulations, and studied the fluid dynamics for fluctuation from the molecular-dynamics simulation. We emphasize that the fluctuation observed in molecular dynamics simulation is the origin of those in the Landau-Lifshitz-Navier-Stokes (LLNS) equation, which assumes Gaussian noise. To discuss the relation between the molecular fluctuation and the LLNS equation, we have proposed the new conservation equations constructed without average operations.

研究分野：流体力学

キーワード：分子動力学 ゆらぎ 流体力学 非平衡

## 1. 研究開始当初の背景

古典分子動力学は、多数の分子に対する Newton の運動方程式を解いて分子の運動状態を決定する。分子動力学の目的は、創薬の分野などでは分子構造そのものの解明であるが、熱流体工学の分野では、流体の質量・運動量・エネルギー輸送を分子運動のレベルから明らかにし、工学的に予測あるいは制御可能なレベルの知見に変換することである。近年では、百億を超える分子数の分子動力学計算が行なわれているが、それでも、Avogadro 数には到底届かない。むしろ、分子動力学計算の意義は、熱流体力学の前提条件である局所平衡の仮定が成立しない程度の小さなスケールにおいて、詳細かつ精密に分子運動を解析できる点にあると考えるべきであろう。そのような小さなスケールでは、「ゆらぎ」が相対的に顕著となる。

「ゆらぎ」は、応用を目指す多くの分子動力学計算において、平均時間、分子数、体積などの極限で消滅するものとして、無視されるかあるいは多数のサンプルを重ね合わせて平均することによって消去されてきた。しかし、現代の熱流体工学は小さな時間・空間スケールの熱流動を扱うことが求められている。そのような熱流動においては、たとえ平衡状態であっても、有意の振幅、波長および周期をもつ変動成分がかならず存在する。そのような変動成分は、同程度の振幅、波長、周期をもつ非平衡流れと容易に区別できず、それを、消去されるべき「ゆらぎ」であると断定するための一般的なルールはない。したがって、分子スケールにおいて、時々刻々の変動成分に注目して、「ゆらぎ」の取り扱いを確立することが重要である。

さらに、以下に述べるように、分子運動に基づいて「ゆらぎ」に注目することは、平衡状態とは何か、非平衡状態からどのような過程を経て平衡状態に達するのか、などの根本的な問いに向かい合うことに他ならない。この意味で、流体力学の理解のために極めて重要な課題であると言える。

## 2. 研究の目的

揺動散逸定理に代表される「ゆらぎの統計」の研究は少なくない。揺動散逸定理と類似の立場から、Landau や Prigogine らは、局所平衡を天下一に仮定し、ガウス雑音型のゆらぎをとともなう流体力学を提唱した (Landau and Lifshitz, Fluid Mechanics (Pergamon, 1959))。これに基づく様々な解析も行われている (たとえば、Bell, Garcia, and Williams (2010))。しかしながら、どのような時空間スケールのゆらぎが、どのような根拠をもって、局所平衡の仮定と両立するのか (すなわち Landau のゆらぎをとともなう流体力学の導出) については、十分な議論はなされておらず、それゆえその応用も制限されざるを得ない。本研究は、このような観点に立って、ある時刻にある位置に現れた変動成分が、次の時刻に何処でどのように振る舞うのかを、分子レベルから議論するための理論的枠組みを、分子動力学に基礎づけられた「ゆらぎの流体力学」と名付けて、これを創成するための基礎的ではあるが萌芽的かつ挑戦的な課題に取り組むことを目的とする。

本研究の目指す「ゆらぎの流体力学」を用いれば、Rayleigh-Plateau 不安定や Rayleigh-Taylor 不安定などを誘起する擾乱の起源、および気泡核の初生などに対して、確率的・統計的ではなく、分子運動に基づく決定論的な解析が可能になると期待できるし、さらには、本研究の成果によって、現在数多く行われている界面の非平衡現象に関わる熱流体工学的問題 (表面張力、濡れ、接触角、速度すべり、蒸発・凝縮など) に関する分子動力学研究に対して、一層の理解と応用の促進が期待できる。

さらには、平衡状態とは何か、非平衡状態からどのような過程を経て平衡状態に達するのか、などの根本的な問いに対する答えに近づくための重要な手がかりとなるはずである。

## 3. 研究の方法

まず、分子動力学計算を実行し、計算結果を時空間基礎データとして集積する。時空間基礎データの集積のために、100 万粒子規模の気体・液体の古典分子動力学計算を、様々な温度の平衡系と様々な温度勾配と速度勾配の非平衡定常・非定常系に対して実行する。

次に、時空間基礎データに対して、計算領域内に任意の有限な検査体積を設定して、この検査体積内の分子集団に関する質量と運動量とエネルギーの保存方程式を新たに導出する。この保存方程式は、Newton の運動方程式から厳密に導出されて、任意の検査体積と任意の検査時間に対して成立することが本質的に重要である。

さらに、保存量と流束を未知変数とすると、連立方程式として閉じてはいないが、他の分子動力学計算のようにアンサンブル平均や時間平均を用いてゆらぎを消去することなく、保存量と流束およびそれらに対するゆらぎの時空間発展を、定量的に精密に算出することを可能とする。

#### 4 . 研究成果

本研究の提案する保存方程式は、任意の検査体積と任意の検査時間に対して成立し、また、保存量と流束を未知変数とするとき、連立方程式として閉じてはいないが、他の分子動力学計算のようにアンサンブル平均や時間平均を用いてゆらぎを消去することなく、保存量と流束およびそれらに対するゆらぎの時空間発展を、定量的に精密に算出することを可能とする。これまでに、たとえば Kirkwood らのグループによって流体力学型の保存方程式が Liouville 方程式から導かれているが (Irving and Kirkwood (1950))、それらは平均時間、分子数、体積などの何らかの極限操作を含んでおり、任意の検査体積と任意の検査時間に対して成立するとは言えない (そもそも Liouville 方程式に極限操作が含まれている)。それゆえ、時々刻々のゆらぎの力学の議論のためには、本研究のように、平均操作を含まず、任意の検査体積と任意の検査時間に対して成立する保存方程式の構築が本質的な意義をもつ。

この保存方程式の適用する系の検査体積と検査時間を大きくして行く極限は、(1) かならず流体力学の保存方程式 (ナビエ-ストークス方程式系) でなければならない。また、(2) この極限の過程に、Landau が提唱したゆらぎの流体力学 (たとえば、Bell, Garcia, and Williams, 2010) を経由するはずである。これらの 2 点を検証することは今後の研究課題であるが、その検証のための基盤的重要性をもつ保存方程式の構築を達成したことは、本研究の重要な成果であると言える。

さらなる研究成果として、上記の 2 点の検証のうちの (1) の検証のために、「平板の面内振動によって誘起される希薄気体流れの ES-BGK モデル方程式にもとづく数値解析」と「ES-BGK モデル方程式にもとづく線形分散関係」について、これまでになされたことのない高精度の数値計算と精密な理論計算を行った。これらの ES-BGK モデルに解析の結果は、本研究の保存方程式に関する今後の研究の進展のために活用される。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計0件

〔学会発表〕 計2件（うち招待講演 0件 / うち国際学会 0件）

1. 発表者名 上井 勇人、稲葉 匡司、矢野 猛
2. 発表標題 平板の面内振動によって誘起される希薄気体流れの ES-BGKモデル方程式にもとづく数値解析
3. 学会等名 日本機械学会関西支部第98期定時総会講演会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 松原 佑樹、稲葉 匡司、矢野 猛
2. 発表標題 ES-BGKモデル方程式にもとづく線形分散関係
3. 学会等名 日本機械学会関西支部第98期定時総会講演会
4. 発表年 2023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
研究協力者	青木 一生  (Aoki Kazuo)		

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
---------	---------