

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 26 年 6 月 12 日現在

機関番号：14401

研究種目：基盤研究(A)

研究期間：2011～2013

課題番号：23246034

研究課題名(和文) 気液界面の分子動力学と分子気体力学の包括的統合による非線形非平衡流体力学の新展開

研究課題名(英文) Development of nonlinear nonequilibrium fluid mechanics through comprehensive integration of molecular dynamics of vapor-liquid interface and molecular gas dynamics

研究代表者

矢野 猛 (Yano, Takeru)

大阪大学・工学(系)研究科(研究院)・教授

研究者番号：60200557

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 25,900,000円、(間接経費) 7,770,000円

研究成果の概要(和文)：蒸発・凝縮をともなう気液界面およびその近傍に対する分子動力学と、それを取り囲む大きなスケールの非平衡現象を記述する分子気体力学との包括的統合を行い、非線形非平衡流体力学を確立することが本研究の目的であった。これを実現すべく、1.凝縮相と接する蒸気の非定常非平衡流動に対する一般的な定式化、2.線形化されたBoltzmann方程式に内在する双対性に関する理論研究の非定常問題への深化、3.ナノスケールの液体の流動現象への巨視的流体力学の適用可能性の問題の精密化、4.混合流体の気液界面の分子動力学解析などを行なって、重要な成果を得た。これらの成果を基礎として、非線形非平衡流体力学の構築を継続している。

研究成果の概要(英文)：The ultimate goal of this research is to break a new ground of nonlinear nonequilibrium fluid mechanics by a comprehensive integration of molecular dynamics at the vapor-liquid interface and molecular gas dynamics based on the theory of Boltzmann equation. To this end, we have performed several specific analyses: 1. General formulation of nonequilibrium unsteady vapor motions accompanied with evaporation or condensation at the interface; 2. Establishment of reciprocity among elemental relaxation and driven-flow problems for a rarefied gas; 3. Careful investigation of applicability of macroscopic fluid mechanics to some nano-scale flows.

研究分野：工学

科研費の分科・細目：機械工学・流体工学

キーワード：流体力学 分子動力学 分子気体力学 非平衡統計力学 気液界面 気液2相流 蒸発・凝縮

1. 研究開始当初の背景

機械工学におけるナノ・マイクロスケールの流体现象解明への期待は増大する一方である。これに関わる分子気体力学研究には長い歴史があり、また、最近の分子動力学研究の進展も著しいものがある。しかし、分子スケール(ナノスケール)の流体现象の工学への応用を意図するとき重要なことは、分子スケールの領域へ作用させる力の(広い意味での)起点がそれを取り囲む巨視的スケールの時空間領域にあること、および、分子スケールの流体现象から抽出される巨視的な情報はそれを取り囲む巨視的な時空間スケールで受け取られることである。それゆえ、分子スケールの現象と巨視的スケールの現象を統合する考え方の枠組みが提供されなければ、現象に対する十分な理解を得ることはできないし、現象を適切に応用することもできない。

気液界面の非平衡現象(蒸発・凝縮)に対しては、これまでに多くの分子動力学による分子スケールからの解析と、分子気体力学による界面に接する非平衡気体流の解析が行われてきた。多くの工学的問題において、巨視的な気体の流れの代表スケールは気体分子の平均自由行程に比べて十分に大きく、また、気液界面の内部構造のスケールと液体分子の平均自由行程のスケールはともに気体分子の平均自由行程に比べて十分に小さい。この事実によって、巨視的な流れと気液界面近傍の非平衡現象の空間スケールの分離が可能となり、それぞれ個別に発展してきた流体力学と分子気体力学と分子動力学の接続によって新たな知見を獲得できることへの期待が高まってきた。

しかしながら、分子動力学と分子気体力学のふたつの解析結果を、単に数値的に接続することを試みても、必ずしもうまく行かない。なぜなら、気液界面では密度や圧力などが分子サイズの空間スケールで著しく変化するために、たとえ界面の内部で局所的に統計的平衡状態であっても、界面内部構造を記述する熱力学が存在していないからである。結果として、個々の応用問題の解析には、依然として平衡の条件式あるいは経験式が使われているのが現状である。

2. 研究の目的

蒸発・凝縮をともなう気液界面およびその近傍に対する分子動力学と、それを取り囲む大きなスケールの非平衡現象を記述する分子気体力学との包括的統合を行い、非線形非平衡流体力学の基盤創成を目指す。すなわち、気液界面における蒸発・凝縮・拡散を支配する法則を、微視的な原理に基づいて、応用に資する形に定式化し、これらの作業をとおして、ひとつの新しい学問領域としての非線形非平衡流体力学を提示することが究極の目的である。

3. 研究の方法

以下に述べる研究組織の相互密接な連携をとおして所期の目的を達成した。

研究代表者：矢野 猛

分子動力学解析と分子気体力学解析による気液界面を含む気体と液体における質量・運動量・エネルギー輸送と濃度分布を明らかにした。

研究分担者：青木一生

Boltzmann 方程式の数値解析と漸近解析を駆使して、非平衡非正常な気体の振る舞いを明らかにした。

研究分担者：高田 滋

Boltzmann 方程式に内在する双対性を利用する非平衡現象の数学解析と詳細な数値解析を行った。

研究分担者：渡部正夫

非線形非平衡流体力学理論の検証実験として、蒸気・液滴系あるいは液体・気泡系などの気液 2 相系の流体力学的実験の検討を行った。

4. 研究成果

非線形非平衡流体力学の基盤創成のために、分子動力学と分子気体力学を用いた精密な理論解析と注意深い数値解析を行い、下記のような成果を得た：

1. 様々な非正常非平衡な気体の振る舞いを Boltzmann 方程式に対する数値解析によって明らかにした。その中でもとくに、木星の食にともなう惑星 Io の急激な蒸発と凝縮がもたらす Io の大気構成の時間変化と非正常流れを明らかにする成果は重要である(発表論文 2)。

2. 巨視的な流れの代表的時間スケールに対する気体分子の平均自由時間の比が、巨視的な流れの代表的空間スケールに対する気体分子の平均自由行程の比(Knudsen 数)と同程度の線形問題を一般的に議論した(発表論文 3, 学会発表 2)。より詳しく述べると、凝縮相と接する蒸気 of 非正常運動に対する一般的な定式化を、線形 Boltzmann 方程式の境界値問題の厳密な漸近解析をとおして実行し、気体の運動を支配する巨視的方程式系とこれの解を決定するための巨視的境界条件の系を導出し、それらの数学的構造を明らかにした。とくに、非正常な Knudsen 層の境界値問題が、線形理論の枠組みの中で、適切な変数変換によって定常問題に帰着することを見出したことによって、理論的に厳密な取扱いが可能となったことは重要である。さらに、高次の効果としてエネルギーの非等分配性が巨視的方程式系に組み込まれる数理的仕組みも明らかになっている。

3. 線形 Boltzmann 方程式に内在する双対性に関する理論的研究を推し進めて、定常問題のみならず、緩和現象に代表されるゆっくりと変動する非正常問題においても、双対性を利用した現象の深い理解が可能であることを明らかにした(発表論文 1, 学会発表

1,3,4)。

4. ナノスケールの液柱の静止状態の力学的特徴を、分子動力学計算によって、詳細に調べた。これによって、液柱の表面の2つの主曲率に対応する2つの異なる表面張力が定義され得ること、静止液柱の安定性が巨視的流体力学に基づく中立限界によって定量的に予測できることなどが明らかになった(学会発表 8, 投稿準備中)。本成果は、気液界面近傍と液体側内部の微視的分子運動が支配する巨視的な力学の一層の理解のために、今後有効に活用され得る。

5. 上記の成果 2 を弱非線形問題に拡張し、界面における蒸発・凝縮の効果が気体の巨視的な運動に及ぼす影響を記述可能な一般的な理論を構成した(学会発表 5, 7, 投稿準備中)。得られた理論を例題に適用して、蒸発・凝縮をともなう非線形音響共鳴現象における衝撃波形成条件を求めた。

6. 気液界面を含む気体と液体の大規模な分子動力学計算を実行し、定常な非平衡状態を実現して、界面を横切る質量・運動量・エネルギー流束を求めた(学会発表 6, 投稿準備中)。

7. 数値精度の不足のためにこれまで議論できなかった熱力学状態量間の関係を定量的に議論することを目的として、Ar と Ne の混合液体とその蒸気の気液 2 相系の分子動力学計算を長時間行って多数のサンプルを蓄積した(学会発表 9, 投稿準備中)。

以上の成果は、新しい学問的枠組みとしての非線形非平衡流体力学を提示するという究極の目的に照らして、極めて有意義なものであり、これらを基礎とする新しい枠組みの構築を現在も継続中である。

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 3 件)

1. Shigeru Takata and Masashi Oishi, "Numerical demonstration of the reciprocity among elemental relaxation and driven-flow problems for a rarefied gas in a channel," *Physics of Fluids* **24**, 012003 (2012).

2. Shingo Kosuge, Kazuo Aoki, and Takeshi Inoue, David B. Goldstein, and Philip L. Varghese, "Unsteady flows in Io's atmosphere caused by condensation and sublimation during and after eclipse: Numerical study based on a model Boltzmann equation," *Icarus* **221**, 658-669 (2012).

3. Masashi Inaba, Takeru Yano, and Masao Watanabe, "Linear theory of sound waves with

evaporation and condensation," *Fluid Dynamics Research* **44**, 025506 (2012).

[学会発表](計 9 件)

1. Shigeru Takata, "Reciprocity among elemental relaxation and driven-flow problems for a rarefied gas," Workshop on Boltzmann Models in Kinetic Theory (招待講演), 2011 年 11 月 7 日 - 11 日, Brown University, USA.

2. Masashi Inaba, Takeru Yano, and Masao Watanabe, "General linear theory for sound waves accompanied with evaporation and condensation," 64th Annual Meeting of the APS Division of Fluid Dynamics, 2011 年 11 月 20 日 - 22 日, Baltimore, USA.

3. Shigeru Takata, "Reciprocity among elemental relaxation and driven-flow problems in the kinetic theory of gases," 8th East Asia Conference on Partial Differential Equations (招待講演), 2011 年 12 月 19 日, POSTECH, Korea.

4. Shigeru Takata, "Reciprocity among elemental relaxation and driven-flow problems in the kinetic theory of gases," Spring School on Kinetic Theory and Fluid Mechanics (招待講演), 2012 年 3 月 26 日, Lyon, France.

5. Masashi Inaba, Takeru Yano, Kazumichi Kobayashi, and Masao Watanabe, "Nonlinear resonant gas oscillation accompanied with evaporation and condensation," 28th International Symposium on Rarefied Gas Dynamics (招待講演), 2012 年 7 月 9 日 - 13 日, Zaragoza, Spain.

6. Takeru Yano, "Molecular dynamics study of nonequilibrium processes of evaporation and condensation at a vapor-liquid interface," 28th International Symposium on Rarefied Gas Dynamics, 2012 年 7 月 9 日 - 13 日, Zaragoza, Spain.

7. Takeru Yano, "Kinetic theory of linear and weakly nonlinear sound wave problems with evaporation and condensation," Conference on Kinetic Theory and Related

Fields: Theoretical and Numerical
Approaches (招待講演), 2012年9月24日
- 28日, Kyoto, Japan.

8. Takeru Yano and Taichi Murakami,
“Molecular dynamics study of instability
of nano-liquid column,”
66th Annual Meeting of the APS Division of
Fluid Dynamics, 2013年11月24日 - 26日,
Pittsburgh, USA.

9. 山口恭平, 稲葉匡司, 矢野 猛,
“Ar-Ne 混合系の気液平衡状態に関する分子
動力学計算,”
日本流体力学会年会 2013, 2013年9月12日
- 14日, 東京.

〔図書〕(計0件)

〔産業財産権〕
なし

〔その他〕
なし

6. 研究組織

(1) 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

(2) 研究分担者

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

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

渡部正夫 (WATANABE, Masao)
北海道大学・大学院工学研究院・教授
研究者番号: 30274484