

出國報告（出國類別：學術研討會）

赴日本參加 The 14th International
Conference on Fluid Dynamics (ICFD 2017)
返國報告

服務機關：海軍軍官學校

姓名職稱：嚴祖煦 教授

派赴國家：日本

出國期間：106 年 10 月 31 日至 106 年 11 月 4 日

研討會日期：106 年 11 月 1 日至 106 年 11 月 3 日

摘要

計畫主持人於 2017 年 10 月 31 日（週二）早上由高雄小港國際機場出關前往日本仙台 (Sendai, Japan)。31 日(週二)中午到達東京後，即搭乘新幹線轉往仙台。11 月 1 日早上前往會場聽取大會專題演講，並於之後的時間聽取與會學者的提報。11 月 2 日下午發表論文，題目為 Investigate the Effects of Gas Adsorption on Interfacial Nanobubble by using Molecular Dynamics Simulation，內容是以分子動力模擬的計算結果，探討表面氣泡中的氣體吸附性質。並且以氣體在介面上的吸附為主軸，進而解釋介面氣泡的一些獨特行為。此篇內容分別探討了氣體與固體表面之間的介面以及氣體與水分子之間的介面性質。以分子計算的角度，來探討 Langmuir 定理以及 Henry 定理的適用性。報告後有與會學者發問與發表建言，討論熱烈。

會議期間，主持人和與會學者一起討論流體模擬隨著電腦計算能力的發展，在不同領域上的挑戰與應用。

目次

摘要.....	1
目次.....	2
本文.....	3
一、目的.....	3
二、過程.....	3
三、心得與建議.....	5
四、發表論文.....	6
附錄：活動照片.....	8

出席國際會議心得報告

一、目的：

與國際學者討論交流有關流場的計算與應用，並發表個人論文。

二、過程：

本人此次參加第十四屆國際流體動力會議(International Conference on Flow Dynamics, ICFD2015)。此一國際會議地點為日本仙台，會議期間為 2017 年 11 月 1-3 日。考慮到台灣直飛仙台的班機較少且需至桃園搭乘，採取了往返仙台經由東京轉新幹線的方式，在時間安排上較為便利。

國際流體動力會議(International Conference on Flow Dynamics, ICFD2017)，由日本東北大學(Tohoku University)主辦。日本東北大學為日本傳統名校，其流體力學研究部門在國際上享有盛名。此次會議在議程安排上，有大會專題演講、各分組專題報告。此一會議的目標是建立一個平台，使得世界各國從事與流體力學相關研究的學者得以面對面的討論與交流，以促進此一學門的新發展。此會議並且提供了年輕研究者與學生在國際場合的發表機會。

會議的領域包含了流體與傳輸現象。傳輸的物質包含了分子、電子以及奈米尺度粒子。涵蓋了連續流體、多相物理以及多尺度多效應的不同介質問題。現今的流體力學研究與相當多的自然現象與問題有關，從生物、氣象、大小尺度電磁場（地球尺度到微流），幾乎涵蓋了所有我們日常生活可能遭遇的問題。在會議中，經由與會者從不同面相的討論，激發了相當多有建設性的想法。本次會議包含了 19 個分組。本人投稿的組別為複雜流體(Oral Session 13, complex fluid)組。召集人為交通大學的陳慶耀教授與劉耀仁教授。

計畫主持人週二（31 日）下午到達東京後，即搭乘新幹線前往仙台。次日聽取大會專題演講。大會的專題演講包括了瑞士聯邦理工的 Patrick 教授、東北大學的 Adadri 教授以及紐約大學的 Driscoll 教授。

Patrick Jenny 教授的專題演講題目為：「From high pressure to vacuum Fokker-Planck/DSMC method for gas dynamics at all Knudsen number」。主要內容為 Patrick 教授在氣體動力模擬的研究成果。同一個演算法可以適用在全範圍的氣體密度(由稀薄氣體到加壓器體)。所提出計算法的主要機制是將 DSMC(直接數值蒙地卡羅法)中的碰撞過程，轉換成 Fokker-Planck 演算法。而來自日本東北大學的 Koshi Adadri 教授則是研究超低阻力的摩擦表面。在絕大多數的接觸狀況下，經由一段時間的穩定操作後，低摩擦表面會改變其初始狀況，進而大幅增加介面間的摩擦。Adadri 教授以表面材料的自我形成機制，將摩擦過程中形成多尺度的表面，進而維持其超低摩擦的性質。Driscoll 教授則是發表了以流體動力完成自我組裝的成果。在他們的研究中考慮了微尺度結構、界面的型態與大尺度流體動力性質之間的關連性。從微尺度到大尺度，微渦輪在背景流體下，受到了磨擦力、黏滯性以及重力的

作用。說明了因旋轉葉片的角度造成的 shock、fingering 不穩定等特性，可以應用在流體動力自我組裝，在未來應用上具有相當潛力。

本人在第二天下午的會議中提報了論文：「以分子動力模擬探討氣體吸附性質對表面奈米氣泡的影響(Investigate the Effects of Gas Adsorption on Interfacial Nanobubble by using Molecular Dynamics Simulation)」。作者是本人以及中央研究院物理所的陳彥龍教授、陳奕先研究生。奈米氣泡的應用廣泛，包含有減阻潤滑、低壓氣體儲存、生物醫學等各領域。在此篇報告中，我們首先介紹了表面奈米氣泡(INB)令人驚訝的獨特性質，特別是其極高的穩定性以及其獨特的接觸角。然後介紹了目前文獻上對於表面奈米氣泡穩定性的解釋。並且說明了其中最被廣泛接受的是由 Henry 定律、擴散方程以及 Laplace 壓力等數個基礎理論推導，所得到的氣體過飽和穩定機制。但此一解釋仍有相當多無法滿足實驗觀察的問題點。在我們目前的分子動力模擬中，我們先檢驗了氣體富含區以及圓頂的密度，然後模擬了氣泡不同位置的氫鍵以及勢能分布。結果顯示了表面奈米氣泡具有相當多的特殊性質，包括了氣體分子在表面的聚集行為、氫鍵以及勢能在液氣介面上的分布等，扮演了對於介面奈米氣泡高穩定性的關鍵角色。此篇報告都吸引了相當多的討論，與會者對於分子動力模擬受到電腦計算能力限制的課題尤感興趣，對於無網格的 Lagrange 粒子追蹤方法如何對應到連續體尺度的各項傳輸係數，以及長距離作用力採用快速傅立葉(FFT)的計算法也提出了相當多的討論。

在複雜流體組的論文報告中，有相當多的精彩論文發表。清華大學的王翔郁教授介紹了她們在微生物溫度量測的跨國合作計畫結果。由於微生物的生長受到溫度的影響很大，但傳統的溫度量測可能造成破壞、干擾以及不準確等結果。王教授引進了螢光分子，並且計算其布朗運動。可以很準確的提供微生物的所處溫度。為溫度量測提供了另一個方向。來自東京農業與技術大學的 Nagatsu 教授介紹了他在流體動態介面受到物理化學效應影響的研究。在他的報告中介紹了 viscous fingering 的不穩定性，以及受到物理化學效應影響的實驗。交通大學的劉耀先教授也說明了採用 OpenFOAM 開放軟體，開發衝擊冷卻在基材上的溫度模擬。由於開放軟體的物件導向特性，有助於研究人員發展特定的模組。雲林科技大學的許立傑教授則說明了譜元素法數值模擬，搭配渦度誤差之自適應性網格的數值方法。並且展示了在具有攻角的孔洞圓柱體流場模擬。台大應力所的李雨教授介紹了他在奈米流體中電導性的理論與實驗研究。李教授的研究中發現了奈米流體水溶液中的氫離子濃度，對於電導性有決定性的影響。從實驗以及理論的角度得到了驗證，是相當重要的發現。會後我和與會學者討論了叢集電腦以及 GPU 影像計算單元運用到快速傅立葉演算法的一些問題。

會議結束後次日，即 11 月 4 日搭機返國，於 4 日下午返抵國門。

三、心得與建議：

此次參加 14th ICFD 會議，研討內容是流體力學為主題。除了有機會與世界上流體力學領域的頂尖學者就近討論，會議中的論文相當比例具有實驗與理論並重的特徵。而個人的另一個感想，則是與會學者所提出的問題，多與基礎理論有關。這顯示了相關計算流體力學的發展，還是要有透澈的理論基礎。此次個人參加此國際學術研討會，深感除了本身的研究之外，更需要在平日多下工夫，提升以英文將研究結果清楚表達的能力。建議可多鼓勵本校教師多爭取科技部的研究經費赴國外研習，吸收新知，並將其應用於教學內容。

四、論文發表：

Investigate the Effects of Gas Adsorption on Interfacial Nanobubble by using Molecular Dynamics Simulation

Tsu-Hsu Yen^{1*}, Yi-Xian Chen^{2,3}, Yeng-Long Chen^{2,3}

¹Department of Marine Science, R. O. C. Naval Academy, Kaohsiung, Taiwan, R.O.C., *corresponding author

²Department of Physics, National Taiwan University, Taipei, Taiwan, R.O.C

³Institute of Physics, Academia Sinica, Taipei, Taiwan, R.O.C

Although the existence was doubted, the stable interfacial nanobubble (INB) has been verified in a large number of experimental observations. In addition, the unique properties of INB attract lot of investigations, especially for its extremely long lifetime and large contact angle (from the water side) compared with water droplets on the same substrate. Two categories may roughly divided the explanations of INB's stability, one deals with the substrate's effects which consider the water-solid and gas-solid interfaces and another one focus on the molecular interaction on gas-water interface. On the first category, some explanations were established. More recently, the contact line pinning, provided and sustained by both experimental observation and theorem calculation, is considered as a critical factor to stabilize the INB. Base on the fixed basement, the Laplace pressure will balanced by the curvature radius of INB, surface tension and pressure outside the nanobubble. On the second category dealing with gas-liquid interface, some of explanations were provided such as electric field on interface and gas oversaturation. Most recently, the gas oversaturation provide a reasonable explanation of stability mechanism from several basic theorems including Henry's law, diffusion equation and Laplace pressure .

However, some questions may arise, first, the gas-water "shell" created by hydrogen bonding (HB) network may deviate the prediction of gas flux on interface by diffusion equation and Henry's law. Second, some properties difference between cap region and interfacial gas enrichment (IGE) region including pressure and density were not considered as a dominate factor [2]. In present work, a quasi-2 dimensional domain of channel fluid is simulated by using MD simulations. Periodic boundary conditions were used in x and y directions. The bottom substrate was fixed during the simulations. The position of upper substrate was adjusted to maintain a constant pressure. The INB consist of argon molecules among the substrate and water molecules are simulated. As an initial condition, cubic containing water molecules mixed with argon molecules are arranged on the middle segment. In present study, we first examined the relation of density between IGE and cap region of nanobubble and then investigated the HB and potential energy distributions of the nanobubble. The results shows several unique behaviours including the aggregation of gas particles on surface, HB on gas-water interface and potential energy distribution nearby the nanobubble play critical effect to stabilize the nanobubble.

介面奈米氣泡受到氣體吸附效應機制之分子動力模擬研究

嚴祖煦^{1,*}、陳奕先^{2,3}、陳彥龍^{2,3}

海軍軍官學校海洋科學系¹

國立臺灣大學物理系²

中央研究院物理研究所³

雖然固液介面奈米氣泡(INB)的穩定存在曾被質疑，但目前已經被大量的實驗觀測結果所證實。由於介面奈米氣泡(INB)具有相當高的應用潛力以及其令人驚訝的獨特性質，特別是其極高的穩定性以及其相當大的接觸角（由液態側計算）吸引了相當多的研究團隊投入。目前文獻上對於 INB 的穩定性解釋可以約略分為兩類，第一是探討固體表面的效應（包含了液固以及氣固介面）；另一類則是針對液氣介面上水分子與氣體分子的交互作用。在第一類研究中，最被廣泛接受的是氣泡三相線與固體表面間的釘住效應。基於此一效應，固定的固氣接觸面使得氣泡內高 Laplace 壓力得以與介面曲度、表面張力以及氣泡外壓力平衡。而第二類的液氣介面研究中，有介面電場以及氣體過飽和狀態等理論被提出。而最近較為被接受的理論是由 Henry 定律、擴散方程以及 Laplace 壓力等數個基礎理論推導，所得到的氣體過飽和穩定機制。

然而這些穩定性的解釋會帶來一些新的問題。第一是液氣介面區域上，氫鍵所造成的結構將造成擴散方程以及 Henry 定律的預測失效。第二則是實驗觀察到氣泡的圓頂區以及底部的氣體富含區，有壓力與密度等性質差異，而這些差異並未列入考慮。在我們目前的分子動力模擬中，採用 x、y 方向週期邊界的準二維構型。底部的固體表面在模擬中保持固定，而上版則可調整位置以維持液體的壓力在固定值附近震盪。模擬中的介面氣泡由氫原子所形成。在目前的模擬中，我們先檢驗了氣體富含區以及圓頂的密度，然後模擬了氣泡不同位置的氫鍵以及勢能分布。結果顯示了表面奈米氣泡具有相當多的特殊性質，包括了氣體分子在表面的聚集行為、氫鍵以及勢能在液氣介面上的分布等，扮演了對於介面奈米氣泡高穩定性的關鍵角色。

一、附錄：活動照片 活動照片



本人在會場報到入口



本人於 14th ICFD 研討會發表論文(11 月 2 日)



本人與複雜流體組召集人陳慶耀教授合影

14:40			14:10-14:30 OS7-7 Oxygen Partial Pressure in False-negative NO Lymph Nodes <u>R. Kikuchi, S. Horie,</u> <u>S. Mori, T. Kodama</u>	14:10-14:30 GS1-21 Spray Characteristics of Alternative Aviation Fuel Blend of Camelina and Isopropyl Biofuels from Aircraft Engine Atomizers <u>D. Subramaniam,</u> <u>R. Subrahmanam,</u> <u>B. N. Raghunandan,</u> <u>J. T. C. Hu</u>					14:03-14:16 OS13-31 Numerical Simulation on Miscible Viscous Fingering Involving Viscosity Changes of the Displacing Fluid by Chemical Reactions <u>K. Omeri, T. Nagata</u> 14:16-14:29 OS13-32 The Estimation of Wavy- velocity in Wavy-annular Flow <u>F.-J. Kuo, Y.-S. Cheng,</u> <u>H.-J. Lin, M.-S. Lin,</u> <u>S.-W. Chen, J.-D. Lee,</u> <u>J.-R. Wang, C. Shih,</u> <u>B.-S. Pei</u>	14:40	
BREAK											14:40
14:50	Exhibition Bldg. MEETING ROOM 1	Exhibition Bldg. MEETING ROOM 2	Exhibition Bldg. MEETING ROOM 3	Exhibition Bldg. MEETING ROOM 4-B	Conference Bldg. MEETING ROOM 1	Conference Bldg. MEETING ROOM 2	Conference Bldg. TACHIBANA	Conference Bldg. MEETING ROOM 4	Conference Bldg. SHIRAKASHI 1	Conference Bldg. SHIRAKASHI 2	14:50
	OS17: The 13th International Students / Young Birds Seminar on Multi-scale Flow Dynamics	OS2: The 10th International Symposium on Innovative Energy Research II International Workshop on Combustion Technology and Fundamentals SIP Special: OS27 at Chair: M. Tsuboi	OS7: Bilateral Programs between South Africa and Japan Chairs: <u>S. P. Sengco &</u> <u>A. Komjath</u>	GS1: General Session Material and Molecules Chairs: <u>G. Kitagawa</u> <u>&</u> <u>T. Okada</u>	OS15: International Workshop on Functional Plasma Flows and their Innovative Applications: None-Balanced Plasma 2 Chair: <u>N. Tsubouchi &</u> <u>S. Uehara</u>	OS14: Vortex Motion: Stability, Nonlinear Dynamics, and Turbulence Turbulence 1 Chair: <u>D. Binar</u>	OS18: IFS Collaborative Research Forum (AFI-2017)	OS6: Advanced Physical Stimuli and Biological Responses Chair: <u>K. Yano</u>		OS13: Complex Thermofluid System Complex Fluid Flows Chair: <u>C.-G. Li</u>	
13:30- (15:00) OS17-49 - OS17-73 Short Oral Presentation (15:00-16:30) OS17-49 - OS17-73 Poster Presentation	14:50-15:20 OS2-23 Invited topical Autoignition and Detonation Development due to Reactivity Non- Uniformity <u>Z. Chen</u> 15:20-15:50 OS2-24 Invited topical Pressure Wave Developments with Hot- spot Formation and Autoignition in End-gas Region during Knocking Combustion <u>H. Terashima</u>	14:50-15:10 OS7-8 Gelatin Stabilized CdTe/CdS/ZnS Quantum Dots for Improved Stability and Biocompatibility <u>S. Parani, K. Pandian,</u> <u>O. S. Olawafemi</u> 15:10-15:30 OS7-9 A Development of An Early Stage Diagnosis For Lymph Node Metastasis Using Lymphangiography <u>R. Iwamura, S. Horie,</u> <u>S. Mori, T. Kodama</u>	14:50-15:10 GS1-22 Considering of V-trough Concentrator and Compound Parabolic Concentrator (CPC) for Concentrating Photovoltaic Applications <u>A. Ullahgale,</u> <u>M. Alqahtani</u>	14:50-15:20 OS15-12 Invited Electric Field Measurements in Nanosecond Pulse Discharges in Air and in Hydrogen Flame <u>M. S. Senei,</u> <u>E. Barati,</u> <u>C. Zhang,</u> <u>K. Frederickson,</u> <u>I. Adamovich</u> 15:20-15:40 OS15-13 Computational Simulation on Fundamental Characteristics of Nano- second Pulsed Discharge and Its Application to Combustion Assist <u>H. Takano,</u> <u>I. V. Adamovich,</u> <u>H. Nishiyama</u>	14:50-15:10 OS14-18 Identification of Three- Dimensional Vortical Structure of a Spiral Vortex in Wind Turbine with Phase Two- Dimensional Velocity Fields at Different Azimuthal Angles <u>K. Nakamura,</u> <u>T. Maeda</u> 15:10-15:30 OS14-19 Experimental Characterization of the Dynamics of Localized Turbulence in Transitional Shear Flow <u>K. Tamai, M. Sano</u>	14:50-16:20 CRF-61 to CRF-92, CRF-R4, CRF-R5 Poster Session	14:50-15:20 OS6-7 Invited Diagnostics of ROS in Atmospheric Plasmas and its Application to Plant Biology <u>S. Kawanaka</u> <u>S. Mohamed, S. Alamine,</u> <u>R. Ichiki, M. Kocik</u> 15:20-15:50 OS6-8 Invited Effects of Plasma Irradiation on Artificial Cell Membranes <u>R. Tero, Y. Saka,</u> <u>F. Oike, Y. Hirose,</u> <u>H. Kariya</u>	14:50-15:10 OS13-33 Invited Numerical Method for Two Phase Flow in T- Junction Channel <u>S.-T. Lin, R.-J. Wu</u> 15:10-15:30 OS13-34 Invited Investigate the Effects of Gas Adsorption on Interfacial Nanobubble by using Molecular Dynamics Simulation <u>T.-H. Yen, Y.-X. Chen,</u> <u>F.-L. Chen</u> 15:30-15:43 OS13-35 Numerical Simulation of Ignition in a Helmholtz- type Valveless Self- excited Pulse Combustor <u>M. Zhu, Z. Wang,</u> <u>L. Guo, Y. Xu,</u> <u>T. Zhang, P. Dong, Q. Li</u>			

本人提報場次為最右欄 1450 開始的場次，第二篇邀請論文