

令和元年6月7日現在

機関番号：17102

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2016～2018

課題番号：16K06085

研究課題名(和文) 気泡核群のサイズ分布形成過程に対する大規模MD解析

研究課題名(英文) Large-scale MD analysis on generation process of size distribution of bubble nuclei

研究代表者

津田 伸一 (Tsuda, Shinichi)

九州大学・工学研究院・准教授

研究者番号：00466244

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)：液体アルゴンや液体空気のように単純な分子構造の流体の場合、不純物の混入がない単成分系の流体だけでなく、多成分系の流体においても、十分圧力の低い液体中において自発的に形成される微小気泡群(気泡核と呼ばれる微細な気泡の集団)の代表長さは、空間領域の大きさによらず概ね時間の0.5乗に従って成長する特性(時間スケール則)を示すことがわかった。また、相対的に大きな気泡核は気液界面の蒸発/凝縮によって成長速度が決まる一方、小さな気泡核の挙動は周囲液体の慣性の影響を受けることが新たに示された。

研究成果の学術的意義や社会的意義

非常に小さな空間領域において生じる気液の相変化過程を明らかにする学術的および社会的要請が高まってきている中、本研究では、少なくとも非常に単純な分子モデルで模擬できる流体の場合、空間領域の大きさによらず気泡核群の代表長さが時間の0.5乗に比例した変化を示すことが、単成分系の流体のみならず多成分系の流体においても示された。このことは、非常に小さな空間領域における気泡核のサイズ変化、ひいてはサイズ分布の形態が、これまでに知られているマクロなモデルでも十分説明できることを示しており、既往の知見が微小な空間領域にも概ね適用可能であることを示す大きな意義を有している。

研究成果の概要(英文)：In the case of simple molecular fluids such as liquid argon or liquified air, we have found that a characteristic length of spontaneously generated bubble nuclei (mean diameter of nuclei) in such fluids under sufficiently low pressure condition is scaled by the square root of time independent of spacial scale. In addition, we have newly found that relatively larger bubble nuclei are limited by evaporation/condensation while the smaller nuclei is also affected by liquid inertia surrounding bubble nuclei.

研究分野：流体工学

キーワード：キャピテーション 気泡核 サイズ分布 時間スケール則 蒸発/凝縮 単成分系 二成分系

様式 C - 19、F - 19 - 1、Z - 19、CK - 19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

キャビテーションは、気泡の初生・成長/収縮・蒸発/凝縮・合体/分裂、崩壊など、実に多くの素過程から構成される非常に複雑な気液二相流である。キャビテーションについては、本現象の発見以来、100年以上の研究の歴史を有しており、各々の素過程について数多くの研究が展開され、実際に多くの問題が解明または解決されてきた。しかしながら、素過程の中でも「初生」についてはその物理的メカニズムが十分には解明されておらず、流体工学上の未解決問題の一つとなっている。たとえば、水の場合、初生条件を大きく左右する気泡核は、べき乗則に従うサイズ分布を示すことが既往の実験からわかっている。しかし、なぜこのようなべき乗則に従う分布になるのかについては、まったくわかっていない。また、水以外の流体中の気泡核については、そもそもどのようなサイズ分布になるのかさえ、よくわかっていない状況である。これまでの研究で、主に実験的に明らかにされてきているのは、既に述べた水中における気泡核のサイズ分布の経験則や、初生キャビテーション数の、レイノルズ数や対象形状への依存性に関する経験的相関である。いずれも経験則としての定性的関係が、常温水では認知される程度の知見にとどまっている。これは、対象が液体中の微細な気泡核であるために、計測データのばらつきが大きく定量的知見を非常に得づらいこと、また微細な気泡核の構造や物性がよくわかっていないことに原因がある。このようなこともあり、1990年頃までに上述の定性的関係が水を対象に認識されてからは、実験的研究は大きく影を潜め、1990年頃以降は、新しい理論や数値解析によるアプローチに研究の舞台を移してきているのが、本研究分野の概況である。

さて、1990年代から行われてきているこれらの理論および数値解析的アプローチには、古典核生成理論の改良(特に密度汎関数理論の適用)、モンテカルロ法や分子動力学(Molecular Dynamics, 以下 MD)シミュレーションの適用がある。については、均質核生成と呼ばれるバルク液体からの気泡核の生成速度について、その予測精度を改良する試みである。この研究自体は大きく前進してきているものの、主たる評価対象は気泡核の生成速度にとどまっており、気泡核のサイズ分布予測はほとんどおこなわれていない。一方、については数値解析的アプローチであるが、こちらも気泡核の生成速度の評価を目標とした研究が大半であり、と同様、気泡核のサイズ分布を評価する研究はほとんどなされてきていない。ここで、のアプローチにおいて、気泡核のサイズ分布の評価に最初に着手したのは、研究代表者による過去の研究が世界的にも初めてである(S. Tsuda et al., Fluid Dyn. Res., 2008)。この研究では、それまで単一の気泡核の計算を中心に核生成速度を評価する研究が主であったのに対し、複数の気泡核の成長をMDにより初めてシミュレートするとともに、サイズ分布の情報を含む量に対する時間スケールリング則を見出した。また、この研究以降、さらに大規模なMDシミュレーションにより、サイズ分布の時間変化に注目する研究がH. Watanabeら(J. Phys. D., 2010)やH. Tanakaら(Phys. Rev. E., 2014)を中心とした日本人によって主に進められてきている。しかしながら、先行研究では、計算領域の依存性が評価されておらず、既往の研究成果の成立性は十分に吟味されていない。また、既往の研究ではほとんどの場合が純粋な液体に注目しており、現実の気泡核のサイズ分布を決定するうえで重要となる、不純物の影響には注目していない。水でよく知られているような、気泡核のサイズ分布の決定機構を明らかにするためには、不純物の影響も評価する必要がある。

2. 研究の目的

本研究の目的は、ポンプなどの流体機械でしばしば発生して問題となる、液体から気体への相変化を伴う流動現象(キャビテーション)において、その相変化の初期段階で生じる非常に小さな気泡群(気泡核群)のサイズ分布の形成過程とその支配法則を、MDシミュレーションならびに理論解析によって明らかにすることである。具体的には、

MDシミュレーションによる気泡核群のサイズ分布形成過程の解明

MDシミュレーションの結果を再現可能な気泡核群の形成過程のモデリング

の2点への到達、ないしは肉迫を目的としている。これにより、100年以上に渡るキャビテーションの研究において未だに解決されていない一大難問である、気泡核群のサイズ分布の決定機構の解明を着実に前進させるのが、本研究の狙いである。

3. 研究の方法

MDシミュレーションにより、十分に減圧された液体中における気泡核群の形成過程を模擬する。本研究では、Lennard-Jonesポテンシャルと呼ばれる単純な単原子分子モデルを用いてシミュレーションを行うが、まずは同様の分子モデルを用いた既往の研究成果について、これまで十分な検討がなされていなかったMDの計算空間の大きさへの依存性を明らかにすべく、先行研究とは異なるオーダーの計算空間(約1000万個の分子からなる空間領域)において、不純物を含まない単成分系液体中における気泡核群の形成過程をMDによりシミュレートすることとした。なお、具体的な物質としては、単原子分子から成る液体アルゴンを想定した。

続いて、典型的な二成分系流体の一つである液体空気、すなわち液化した状態の酸素・窒素混合流体における気泡核群の形成過程をMDによりシミュレートした。なお、酸素と窒素は二原子分子であるが、本研究ではあらかじめMDシミュレーションで模擬される液体空気の気液飽和線が実験値を十分に再現するように調整したLennard-Jonesポテンシャルを用いることで整合性を確保する。そのうえで、液体空気中における気泡核群の形成過程をMDシミュレーション

ョンにより模擬した。

以上の単成分系および二成分系の双方のシミュレーション結果に対して、各時刻における単位体積あたりの気泡核数、気泡核径(または気泡核半径)、気泡核表面積、気泡核体積を算出し、これらの比により定義される代表長さの時間変化を解析する。これにより、代表長さの時間スケール則(時間によるスケール指数)を調べる。なお、この指数は、サイズ分布の時間発展則を端的に反映する非常に重要な量である。また、個々の気泡核の半径変化を律速する物理因子を詳細に検討するため、既往の関連研究において気泡核群の律速因子とされている「蒸発/凝縮」のマクロな物理モデルを適用した解析をおこない、MDでシミュレートされた気泡核の半径変化と比較した。また、蒸発/凝縮モデルとMDの両者が良い一致を示さない場合には、周囲液体の慣性に代表される他の物理因子に立脚したモデルを適用し、支配的な物理因子を見出すこととした。

4. 研究成果

まず単成分系の流体の場合、先行研究と同様、オストワルド成長と呼ばれる相対的に大きな気泡核が成長を続ける一方、小さな気泡核は収縮・崩壊に至る気泡核群の時間変化が観察された。また、気泡核群の代表長さ(平均気泡核径)が時間の0.5乗に概ね比例した変化を示すこと、かつ、この性質がMDの計算領域の大きさにほぼ依存することなく成立することを確認した。また、代表長さが時間の0.5乗に比例するという特性(時間スケール則)は、気泡核の表面で生じる蒸発/凝縮が気泡核径の時間変化を支配すると仮定したマクロな物理モデルによって十分に説明可能である一方、非常に小さな気泡核の挙動には、蒸発/凝縮だけでなく、気泡核の周囲液体が有する慣性が影響することがわかった。この知見は、大きな気泡核の時間変化は気液表面の蒸発/凝縮に律速されるのに対して、小さな気泡核の時間変化は気液界面の力学的非平衡の影響を受けることを示すものであり、気泡核の大きさによって物理因子の寄与度が異なることが示された。これは、国内外の気泡核群の成長過程に関する先行研究において未だ指摘されていない点であり、気泡核群のサイズ分布の形成過程に対する新たな物理描像を与えるものである。また、既往の研究で用いられてきた平均気泡核径の定義よりも、気泡核体積と気泡核表面積の比として定義される平均気泡核径(ザウター平均と呼ばれる量)の方が、時間の0.5乗に則ったスケール則をより明確に示すこと、また、この点は上述の通り大きな気泡核の方がより蒸発/凝縮に律速されやすいという物理と整合することもわかった。

以上は単成分系の流体で得られた知見であるが、二成分系流体としての液体空気の場合においても同様にオストワルド成長が観察された。また、気泡核群の代表長さ(平均気泡核径)についても単成分系の場合と同様、時間の0.5乗に概ね従う成長特性(時間スケール則)を示すこと、また、この特性は窒素と酸素の濃度比によらず、概ね成り立つことが確認された。すなわち、少なくとも液体空気の場合、単成分系と同様の気泡核成長、ひいてはサイズ分布の形成が生じ得ることが強く示唆された。これまで、液体空気の場合には、(蒸発/凝縮ではなく)窒素または酸素の物質拡散が気泡核の成長を支配し得ることも予想されていたが、単成分系と概ね変わらない気泡核の成長、ひいてはサイズ分布の形成が生じ得ることを予測した点は、本研究成果の意義の一つとして位置づけられる。

以上の研究により、少なくともLennard-Jonesポテンシャルにより模擬される流体の場合、空間領域(計算領域)の大きさによらず気泡核群の代表長さが時間の0.5乗に比例した変化を示すことが、単成分系のみならず二成分系においても強く示唆された。このことは、相対的に大きな気泡核の時間変化が「蒸発/凝縮」によって律速されることに対応しており、「蒸発/凝縮」がよりマクロな気泡核のサイズ分布を決定づけるであろうことを示している。一方、マクロな気泡核の「蒸発/凝縮」律速が予測するサイズ分布は、水でよく知られている気泡核半径のべき乗則に従う分布とは必ずしも整合しない。したがって、水中における気泡核分布の決定機構については、単純な分子モデルを用いた本研究から明らかにできるものではなく、不純物を含んだ水に対するMDシミュレーションによる同様の研究展開が今後必要である。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕(計 1 件)

津田 伸一, ナノスケール気泡の核生成 成長ならびに崩壊の分子動力学シミュレーション, 混相流, 査読無, 32 巻, 2018, pp. 400-407
DOI:10.3811/jjmf.2018.T009

〔学会発表〕(計 5 件)

津田 伸一, 液体ロケット推進剤のキャビテーション現象に対するマルチスケールアプローチ, 日本航空宇宙学会関西支部第 475 回航空宇宙懇談会, 2019
Yuta Nakano, Shinichi Tsuda, Satoshi Watanabe, Validation of Wagner theory on coarsening process of cavitation bubbles in oxygen-nitrogen mixture system by molecular dynamics simulation, 71st Annual Meeting of the APS Division of Fluid Dynamics, 2018
Shinichi Tsuda, Yuta Nakano, Satoshi Watanabe, Molecular Dynamics Investigation of

Each Bubble Behavior in Coarsening of Cavitation Bubbles in a Finite Space, 70th Annual Meeting of the American Physical Society Division of Fluid Dynamics, 2017
中野 裕太, 津田 伸一, 渡邊 聡, 分子動力学シミュレーションによる微小気泡群の粗大化過程における Wagner 理論の妥当性検証, 日本機械学会 2017 年度年次大会, 2017
中野 裕太, 津田 伸一, 渡邊 聡, 分子動力学シミュレーションによる微小気泡群の成長則の評価, 日本機械学会九州支部第 70 期総会・講演会, 2017

〔図書〕(計 0 件)

〔産業財産権〕

出願状況(計 0 件)

名称：
発明者：
権利者：
種類：
番号：
出願年：
国内外の別：

取得状況(計 0 件)

名称：
発明者：
権利者：
種類：
番号：
取得年：
国内外の別：

〔その他〕

ホームページ等 <http://hyoka.ofc.kyushu-u.ac.jp/search/details/K005500/research.html>

6. 研究組織

(1) 研究分担者

研究分担者氏名：

ローマ字氏名：

所属研究機関名：

部局名：

職名：

研究者番号(8桁)：

(2) 研究協力者

研究協力者氏名：渡邊 聡

ローマ字氏名：(WATANABE, Satoshi)

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、研究者個人に帰属されます。