

平成 21年 6月 1日現在

研究種目：若手研究（スタートアップ）  
 研究期間：2007～2008  
 課題番号：19860063  
 研究課題名（和文） 分子動力学・分子気体力学による蒸発・凝縮係数の決定と新しい気泡力学への展開  
 研究課題名（英文） Determination of evaporation and condensation coefficients and new approach for bubble dynamics using molecular dynamics and molecular gas dynamics  
 研究代表者  
 小林 一道（KOBAYASHI KAZUMICHI）  
 大阪府立大学・大学院工学研究科・助教  
 研究者番号：80453140

## 研究成果の概要：

本研究では、固体壁面上における薄い液膜界面において起こる蒸発・凝縮に対して、分子動力学法を用いて数値計算を行うことで、蒸発係数と呼ばれるパラメータを決定し、気液界面の境界条件の確立を行った。また、分子気体力学と気泡力学を融合し、蒸発・凝縮が起こる気泡に対して数値計算する手法を構築し、気液界面における蒸発・凝縮現象が気泡崩壊現象に対し大きな影響を及ぼすことを明らかにした。

## 交付額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2007年度	1,360,000	0	1,360,000
2008年度	1,330,000	399,000	1,729,000
年度			
年度			
年度			
総計	2,690,000	399,000	3,089,000

## 研究分野：工学

科研費の分科・細目：機械工学・流体力学（細目番号：5004）

キーワード：蒸発・凝縮係数，気泡力学，分子気体力学，分子動力学

## 1. 研究開始当初の背景

分子気体力学には気液界面に対する境界条件（以下、「気体論境界条件」と呼ぶ）が存在するが、その気体論境界条件にはある未知パラメータが含まれている。そのパラメータは一般に凝縮係数と呼ばれ、気液界面に凝縮する分子の質量流束とその界面に衝突する質量流束の比で定義されている0以上1以

下の値をもつ無次元パラメータである。これまで多くの研究者が凝縮係数の値を求めてきたが、得られた値はほぼ0というものから1に十分近いというものまであり、そのばらつきは大きい（例えば水の凝縮係数に関するレビュー論文：Marek & Straub, Int. J. Heat and Mass Trns., 2001）。そのため、現在のところ、気液界面において蒸発・凝縮が起こ

っている場合、工学において重要な物理量である質量・運動量・エネルギー輸送量を理論の枠組みのみでは未だ正確に見積もることができない状況である。上述した気泡力学の分野では、蒸発・凝縮が起こる気泡の運動に対しては多くの仮定を用いて解かなければならない。

## 2. 研究の目的

本研究は、固体、液体、気体の三相からなる系の蒸発・凝縮現象に対して分子動力学シミュレーションを行い、その結果を用いて気体論境界条件に含まれる蒸発・凝縮係数の値を決定し、過去の申請者の結果（例えば Kobayashi et al., Fluid Dyn. Res., 2008）と比較検討する。また、分子気体力学と気泡力学を融合し、キャビテーション気泡など蒸発・凝縮が起こる気泡運動の詳細（気泡内部圧力等）を分子の速度分布関数を用いて正確に予測する方法を確立することを目的としている。

## 3. 研究の方法

本研究方法を以下に示す。

(1) 固体[プラチナ], 液体, 気体[アルゴン]の三相からなる系に対して、分子動力学法を用いて蒸発係数の値を測定する。その結果より凝縮係数の決定を行い、固体壁面上の液膜に対する気体論境界条件の確立を行う。

(2) 分子気体力学と気泡力学を融合した理論の構築と解析手法の確立を行う。また、その解析手法を用いて、蒸発・凝縮が起こる気泡崩壊現象の解明を行う。

## 4. 研究成果

### (1) 固体壁面上における液膜の蒸発・凝縮現象に関する分子動力学計算

本研究の計算例を図1に示す。単一の分子からなる気体とその凝縮相（液体）、そして

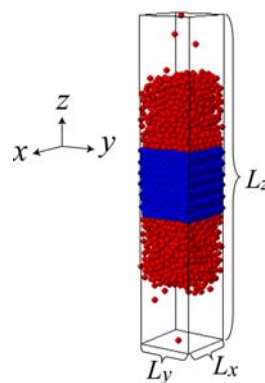


図1 固相・液相・気相からなる分子動力学計算（青：プラチナ，赤：アルゴン）

凝縮基盤（個体）を考える。凝縮相の厚さは数ナノメートル程度であり、その凝縮相は凝縮基盤面上に吸着しているとする。このような系を考え、気液界面上での蒸発・凝縮現象を調べる。本研究は分子動力学計算として気液二相系（アルゴン、水、メタノール）を対象として取り扱っている Ishiyama ら (Phys. Fluids, 2004) の研究を応用する。蒸発する分子は液体の温度のみに依存するという定義から、液体から真空中に蒸発する分子群の計算と気液平衡状態の計算を組み合わせ、従来から広く使われていた気体論境界条件の妥当性を調べる。また、その際に、蒸発係数 [液体から自発的に出て行く質量流束（液体温度を一定に制御した真空蒸発計算で取得）と平衡状態における液体から気体に

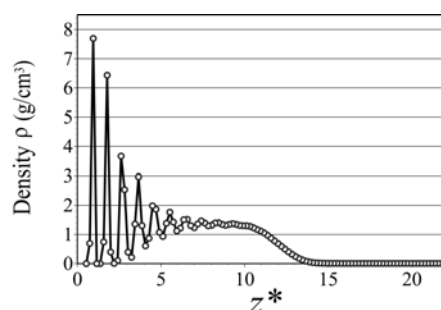


図2 平衡状態における薄い液膜および気相の密度分布

向かう質量流束（気液平衡状態での計算で取得）の比] の値を求めることにより、気体論境界条件の確立を行う。

### ① 平衡状態シミュレーション

図2に温度90Kでの平衡状態シミュレーションによって得られた、気液相の密度分布を示す。このときのアルゴン分子数は最大2000分子であり、固体壁は18層のプラチナ分子で構成されている。

図2の横軸はアルゴンの分子直系で無次元化されている。横軸  $z^*=0$  が固液界面となっている。この図より、固体近傍の液体密度分布が振動していることがわかる。これは固相分子の強い分子間力の影響を受け、液体分子が規則正しく配列していることに起因する。

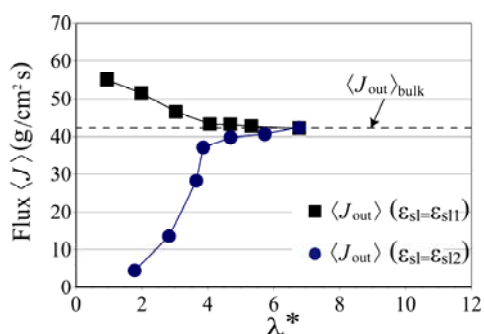


図3 気液界面から気相に向かう質量流束と液膜厚さの関係

図3に気液界面から気相に向かう分子から成る質量流束と液膜厚さの関係を示す。横軸は無次元の液膜厚さであり、アルゴン直径で無次元化されている。黒い四角は固液分子間力が弱い場合、青丸はその分子間力が強い場合の質量流速である。分子間力が強いほど、固液界面で濡れやすいことを示している。この強さは Lenard-Jones ポテンシャルのエネルギーパラメータ値を変えることで実現しており、強い分子間力 ( $\epsilon_{sl}/k_B=855.5$  K) は弱い分子間力 ( $\epsilon_{sl}/k_B=64.8$  K) に比べ13倍ほど大きい値を持つよう設定している。この図より、液

膜が分子直系の6倍ほど大きい厚さであれば、液体から出ていく質量流束は、分子間力の強さにかかわらずほぼ同じ値を取ることがわかる。また、この値はバルク液体の値と一致することを確認している。分子間力が弱い場合、液膜が薄くなるにつれて質量流束は大きくなり、一方、分子間力が強い場合には、液膜厚さが薄くなるにつれてその値は小さくなっていることがわかる。

### ② 真空蒸発シミュレーション

これより、真空蒸発シミュレーションの結果について示す。

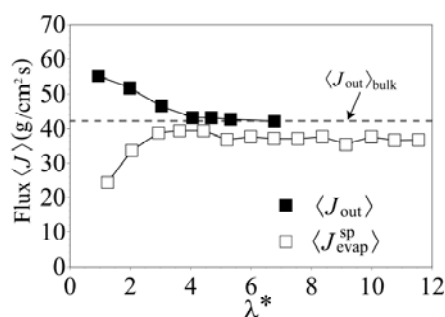


図4 気液界面から自発的に気相に向かう（自発蒸発する）質量流束と液膜厚さの関係（固液分子間力が弱い場合）

図4に気液界面から気相に向かう分子から成る質量流束と液膜厚さの関係を示す。黒い四角は図3に示した気液界面から気相に向かう質量流束の値であり、白抜きの四角が界面から自発的に蒸発する質量流束の値である。これら流束の比が蒸発係数の値となる。これより、界面から自発的に蒸発する流束は、液膜が薄くなるにつれて減少することがわかる。また、十分液膜厚さがある場合（この場合は6分子層以上）、これら流束の値はバルク液体の値とほぼ一致する。これより、液膜が6分子層以上厚い場合には、蒸発係数の値はバルク液体の値と一致し、液膜が薄くなるにつれてその値は減少することがわかる。

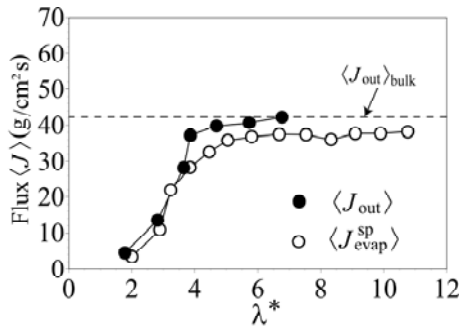


図5 気液界面から自発的に気相に向かう(自発蒸発する)質量流束と液膜厚さの関係(固液分子間力が強い場合)

図5に気液界面から気相に向かう分子から成る質量流束と液膜厚さの関係を示す。黒丸は図3に示した気液界面から気相に向かう質量流束の値であり、白丸が界面から自発的に蒸発する質量流束の値である。これより、界面から自発的に蒸発する流束は、液膜が薄くなるにつれて減少することがわかる。また、十分液膜厚さがある場合(5分子層以上)、これらの値の比はバルク液体の値とほぼ一致することを確認した。これより、固液分子間力が強い場合、液膜が5分子層以上厚い場合の蒸発係数の値はバルク液体の値と一致することを確認した。液膜が薄くなる場合には、分子数が少ないこともあり、精度よく自発蒸発する分子流束を見積もることが困難であった。さらなる計算を行い蒸発係数の値を見積もる必要があるが、両質量流束ともほぼ同じ減少傾向であることがこの図よりわかる。

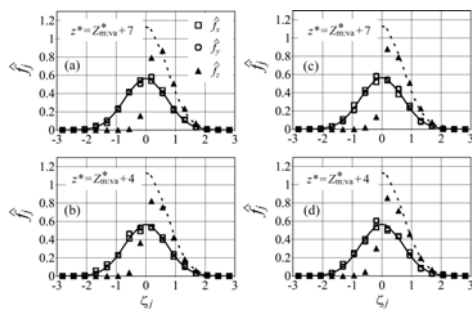


図6 真空蒸発時における気液界面の速度分布関数

また、真空蒸発時における気液界面の速度分布関数は、分子間力の違いにかかわらず、液膜が十分厚い場合にはマクスウェル分布であることを確認している(図6参照)。これら結果より、液膜が6分子層程度あれば、バルク液体の境界条件は固体壁がある場合でも十分適用可能であることが示唆される。

## (2) 分子気体力学と気泡力学を融合した相変化の起こる気泡運動の解析手法の確立

次に述べる研究は、分子気体力学と気泡力学を融合し、気液界面で蒸発・凝縮が起こる気泡の運動の解析を行うものである。本解析では単一の球形気泡を考え、気泡内部には蒸気が存在するものとし、この界面で蒸発・凝縮が起こる場合の気泡の膨脹・収縮問題を考える(図7参照のこと)。気泡の内部には水蒸気のみが存在するものとし解析を行っていく。ここで単一球形気泡の運動方程式は、蒸発・凝縮による質量輸送を考慮した式(Fujikawa & Akamatsu, J. Fluid Mech., 1980)を改良して利用し、液体の温度場を解くため、その液体にはエネルギー方程式を用いることとする。蒸気内部気体に対しては、分子気体力学のモデル方程式である多原子分子に拡張された Gaussian-BGK Boltzmann 方程式を用いて、これら方程式を連立し、数値解析を行う。また、Gaussian-BGK Boltzmann 方程式の境界条件には、蒸発・凝

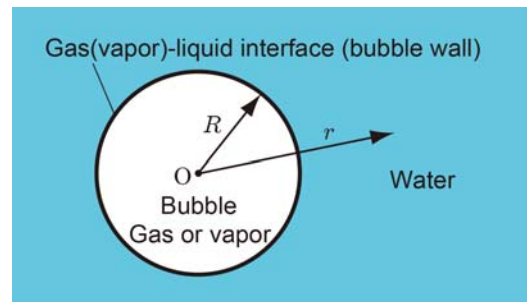


図7 本計算解析のモデル図

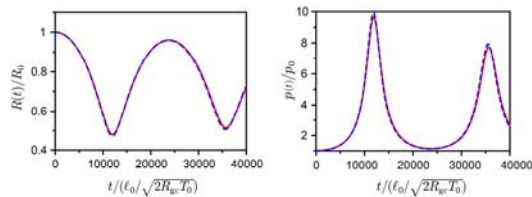


図8 本計算結果と A. Prosperetti ら (1988) との比較；気泡半径の時間変化 (左)；気泡内部圧力の時間変化

縮係数 (0 以上 1 以下の値) が含まれるが、ここではそれらの値を変え計算を行うこととする。

図8に本計算結果 (凝縮および蒸発係数を 0 とした場合の計算結果. 非凝縮性気体に対応) と、熱的減衰効果を考慮した A. Prosperetti ら (1988) との結果を比較した図を示す。このとき、気泡周囲圧力は内部圧力の 2 倍であり、比較的弱い気泡崩壊現象である。図の左が気泡半径の時間変化であり、図の右が気泡内部圧力の時間変化である。赤い実線が本研究の計算結果であり、青い破線が Prosperetti らの結果である。この図からわかるように、本研究結果は Prosperetti の結果と良好な一致を示している。これより、本計算手法は妥当であることを確認した。

図9に蒸発・凝縮係数を変えて計算した場合の図を示す。上の図が気泡半径の時間変化であり、下の図が気泡内部圧力の時間変化である。このとき、赤い実線は凝縮係数の値が 0、青は 0.002、黄緑は 0.006、紫は 0.01、緑は 0.016 の場合の計算結果を示している。このときの気泡周囲圧力も内部圧力の 2 倍としている。この図からわかるように、蒸発・凝縮係数が大きくなるにつれ、気泡崩壊時の最小半径は小さくなっていることがわかる。また、気泡崩壊時の圧力を見ると、蒸発・凝縮係数が多くなるにつれて、気泡内部最大圧力も大きくなることわかる (蒸発・凝縮係数

が 0.016 の場合、最大値は初期圧力の 200 倍程度)。蒸発・凝縮現象の効果が大きいほど (蒸発・凝縮係数が大きいほど)、気液界面における温度境界層の勾配が大きくなり、気体から液体に流入する熱流束は増大し、また、相変化による凝縮潜熱も増大する。結果として界面温度上昇も大きくなる。また、蒸発・凝縮係数が大きいほど、気泡崩壊時の気泡壁面速度は速くなり、気体は激しく圧縮されることとなる。以上より、相変化が起こる場合における気相内部の圧力上昇のメカニズムは、非凝縮性気体の場合とは異なることが示唆される。

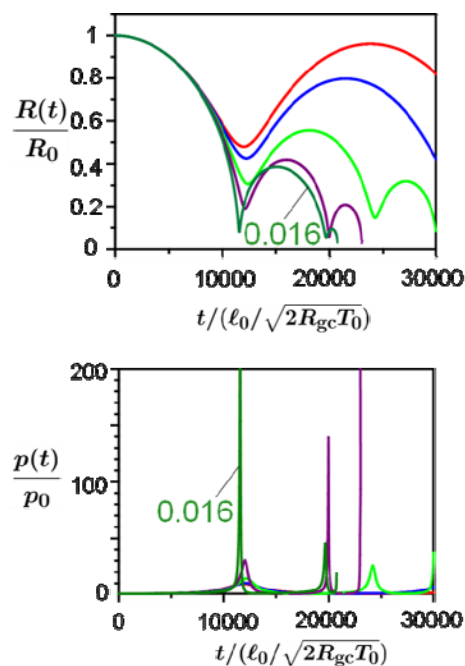


図9 凝縮係数を変えた場合の計算結果；気泡半径の時間変化 (上)；気泡内部圧力の時間変化 (下)

#### 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 15 件)

- (1) 小林一道, 他2名, 固体壁面上における薄い液膜からの蒸発・凝縮現象に関する分子動かしミュレーション,

日本物理学会講演概要集(第2分冊),  
64, 2009, 289, 査読無.

- (2) 山口佳昭, 他2名(2番目), 固体壁面上における薄い液膜の蒸発・凝縮に関する分子動力学的研究, 日本機械学会関西支部 第84期定時総会講演会 講演論文集, 2009, Total 1 Page, 査読無.
- (3) K. Kobayashi, 他4名, Condensation coefficient of water in a weak condensation state, Fluid Dynamics Research, 40, 2008, 585-596, 査読有.
- (4) K. Kobayashi, 他1名, Molecular gas dynamics simulations of the collapse of condensable gas bubbles, Proc. of Cavitation in Turbo-Machinery & Medical Applications, 2008, 204-209, 査読有.
- (5) 小林一道, 他1名, 分子気体力学に基づく相変化を伴う単一球状気泡運動の数値シミュレーション, 日本機械学会第85期流体力学部門講演論文集, No. 07 - 16, 2007, Total 4pages, 査読無.

他 10 件

[学会発表] (計 16 件)

- (1) 小林一道, 他2名, 固体壁面上における薄い液膜からの蒸発・凝縮現象に関する分子動力学シミュレーション, 第64回日本物理学会講演, 2009年3月28日, 東京 立教大学.
- (2) K. Kobayashi, 他4名, Condensation coefficient of water in a weak condensation state, 1st Int. Colloq. on Dynamics, Physics and Chemistry of Bubbles and Gas-Liquid Boundaries, 2007年9月27日, 北海道 ニセコ町.

(3) 小林一道, 他1名, 気液界面での相変化を伴う気泡の崩壊現象に関する分子気体力学に基づく数値シミュレーション, 日本機械学会第85期流体力学部門講演会, 2008年11月18日, 広島県東広島市, 広島大学.

(4) K. Kobayashi, 他1名, Molecular gas dynamics simulations of the collapse of condensable gas bubbles, WIMRC 2nd International Cavitation Forum 2008, 2008年7月7日, Warwick University, Coventry, England.

他12件

[図書] (計 1 件)

- (1) K. Kobayashi, 他1名, Nova Science Publisher, Handbook of Interferometers; Research, Technology and Applications (Chapter 24. Title: An optical interferometer for measurement of the condensation rate of a vapor in a vapor-liquid nonequilibrium state), 2009, Total 9 pages (掲載確定).

## 6. 研究組織

### (1) 研究代表者

小林 一道 (KOBAYASHI KAZUMICHI)  
大阪府立大学・大学院工学研究科・助教  
研究者番号: 80453140