

令和 3 年 6 月 28 日現在

機関番号：52301

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2018～2020

課題番号：18K03959

研究課題名(和文)キャビテーション初生解析用非平衡MD・気泡力学融合モデルのための蒸発係数決定

研究課題名(英文)Evaluation of evaporation coefficient on vapor-liquid interface of bubble nuclei for non-equilibrium MD/bubble dynamics coupled model of cavitation

研究代表者

矢口 久雄 (YAGUCHI, Hisao)

群馬工業高等専門学校・機械工学科・准教授

研究者番号：20568521

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,400,000円

研究成果の概要(和文)：キャビテーションは液体の局所的圧力低下で気泡が初生し、周囲圧力の回復とともに圧潰する現象である。流体機械に損傷を与える有害な現象として知られる一方で、超音波洗浄での利用や癌細胞への薬導入の素過程としても注目される。本研究ではキャビテーション初生に関する新しい解析モデルの構築に向けて、ナノサイズの気泡核における蒸発係数と呼ばれる重要な物性値の界面曲率依存性について分子動力学シミュレーションを用いて解明した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

キャビテーション初生を正しく予測できる理論の構築は、ポンプなどの流体機械のようにキャビテーションを抑制する立場から重要であるばかりでなく、超音波洗浄などの有効利用や医療分野への先進的応用といった立場からも大きな意味を持つ。本研究で得られた蒸発係数や表面張力などの物性値はキャビテーション初生理論における主要パラメータであり、今後の分子動力学と気泡力学を融合させた新しい解析モデルの構築に向けて基礎的かつ重要な知見が得られたと言える。

研究成果の概要(英文)：Cavitation is a phenomenon that fine bubbles are formed due to a reduction of pressure in liquid and are rapidly crushed as the pressure recovers. While it causes erosion of fluid machines, it is applied in ultrasonic cleaning, and recently attract attention as drug delivery system into cancer cells. Evaporation coefficient is known as an important parameter which describe mass, momentum and energy transfer on vapor-liquid interface. In this study, we clarified dependence of evaporation coefficient on curvature of vapor-liquid interface between a bubble nuclei and its surrounding liquid using molecular dynamics simulation.

研究分野：分子流体力学

キーワード：蒸発係数 キャビテーション 気液界面 表面張力 Kelvin効果

1. 研究開始当初の背景

キャビテーションは液相の局所的圧力低下で気泡が初生し、周囲圧力の回復とともに圧潰する現象である。初生とは、液相の温度・圧力条件が満たされたときに気泡核が自発的に成長する現象をいう^①。気泡圧潰時の衝撃波やマイクロジェットは流体機器の壊食や異常振動を引き起こす。その一方で、超音波洗浄での利用や、最近では癌細胞への薬導入の素過程としても注目される^②。キャビテーションを抑制する立場からも活用する立場からも、その原因となる気泡核生成と初生の解明が重要である。気泡核は実験による観測が困難で、その詳細はわかっていない。気泡核の初生過程では気液界面に連続体力学は成り立たず、気泡核直径が蒸気分子の平均自由行程よりもはるかに小さいために分子気体力学も適用できない。唯一、気泡核の内部と気液界面を正しく扱うことのできる解析手段は、分子一つひとつの運動を扱う分子動力学法である。ただし、気泡周囲の液相には流体力学（気泡の場合は気泡力学）が適用できる。このような考えに基づき、Schanz らは気泡内部にMDを用い、液相側に気泡力学の Rayleigh-Plesset の式による解析を行った^③。しかし、気液界面における質量輸送速度を特徴づける蒸発係数 α （後述）についてはパラメータ計算にとどまり、課題を残した。江頭らは非平衡蒸発を考慮したキャビテーション初生モデルを提案した^④。しかし、分子気体力学解析には平面液相での境界条件を用いており、気泡核はかなり大きなもの（平均自由行程程度）を扱わざるを得なかった。ここで注目すべきは、Schanz ら、江頭らのどちらの解析でも気液境界条件に蒸発係数 α なる物性値が含まれており、気液界面曲率や液相圧力などに依存しながらキャビテーション初生に影響することである。蒸発係数 α の決定は過去約1世紀の大きな課題であった^⑤。Ishiyama らが分子動力学シミュレーションによる蒸発係数 α の決定法を確立したことで進展が見られたが^{⑥, ⑦}、気泡核のような曲率を有する気液界面における蒸発係数 α は未解明である。

2. 研究の目的

本研究は気泡核界面の蒸発係数 α の界面曲率依存性を解明するとともに、キャビテーション初生解析のための新しい「分子動力学・気泡力学融合モデル」を構築することを目的とする。図1に気泡核の分子動力学シミュレーションと気液界面での質量流束の模式図を示す。蒸発係数 α は

$$\alpha = \frac{J_{\text{evap}}}{\rho_v \sqrt{RT_\ell / (2\pi)}} \quad (1)$$

と定義される^⑧。ここで、 ρ_v は飽和蒸気密度、 R は気体定数、 T_ℓ は液相温度である。また、 J_{evap} は図1に示すように液相から自発蒸発する分子の質量流束である（蒸発質量流束）。蒸発係数 α は気液平衡状態において液相側から気相側に向かう分子の質量流束 $J_{\text{out}} (= \rho_v \sqrt{RT_\ell / (2\pi)})$ を基準として、そこに含まれる蒸発質量流束 J_{evap} の比率を与える物性値である。ま

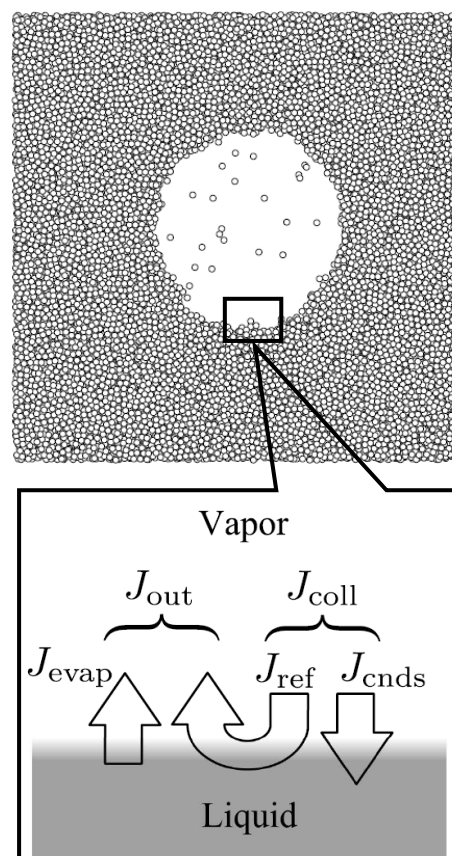


図1 気泡核の分子動力学シミュレーションの様子と気液界面における質量流束の模式図

た、液面に衝突する分子の質量流束 J_{coll} のうち、実際に凝縮する分子の質量流束 J_{cnds} の比率を与える物性値は凝縮係数と呼ばれる。蒸発質量流束 J_{evap} は実験困難な真空蒸発($J_{\text{coll}} = 0$)を分子動力学シミュレーションで実現することで求められ、式(1)の定義から蒸発係数 α の界面曲率依存性を決定できる。蒸発係数 α がわかると気泡内部気体に対して界面から気泡内部に向かって分子を射出する微視的条件や気液界面に衝突した分子が反射する確率が決まる。これにより、気泡内部を分子動力学シミュレーションで正しく再現できる。さらに、気液間の質量・運動量・エネルギー輸送を記述することができ、周囲液相に対する圧力や温度などの巨視的境界条件も得られる。以上より、気泡核の気液界面における蒸発係数 α を適切な形で気泡力学に組み入れた「分子動力学・気泡力学融合モデル」を構築できる。

3. 研究の方法

対象物質であるアルゴンの分子間相互作用は 12-6Lennard-Jones ポテンシャルで与え、ポテンシャルパラメータは $\sigma = 0.3405$ nm, $\varepsilon/k = 119.8$ K (k は Boltzmann 定数) を用いる。各分子の Newton の運動方程式を Leap-frog 法で数値積分することで、全分子の位置と速度の時間発展を求める。ここで、時間刻みは $\Delta t = 5.0$ fs とする。系は 1 辺の長さ 10 nm の立方体とし、境界条件に周期境界条件を用いる。気液平衡シミュレーションは温度 90 K ($= T_\ell$) で 1000 万 step (50 ns) の計算を実行する。ここで、気泡壁を構成する液相分子を抽出し、それらの重心を気泡核の中心として系の中心 (原点座標) に一致させている。真空蒸発シミュレーションでは気液平衡系における気泡核の中心から半径 R_v の位置に球面状の真空境界条件を与え、気泡核内部に仮想的な真空状態 ($J_{\text{coll}} = 0$) を実現する。ここで、半径 R_v については、後述する気液密度遷移層における中心位置の半径 R_m と 10-90 厚さ δ を用いて $R_v = R_m - 2\delta$ とする。後述する密度分布から半径 R_v よりも内側の領域がバルク気相と判断できるためである。また、真空蒸発にともなって液相からは蒸発潜熱が奪われていくため、気泡核近傍のバルク液相領域 (半径 $R_m + 2\delta \sim R_m + 5\delta$) に含まれる分子に対して速度スケーリング法による温度制御を行い、液相温度 T_ℓ を 90 K に維持する。真空蒸発シミュレーションは初期条件として分子数 $N = 19250$ の気液平衡系のコンフィギュレーションを用い、分子数 $N = 17000$ となるまで計算を行う。また、サンプル数を補う目的で初期条件に 10 万 step (0.5 ns) 以上離れた時刻における気液平衡系を 5 つ用意し、巨視的物理量の計算においてはこれらの結果を重ね合わせ平均する。

4. 研究成果

図 2 は分子数 $N = 18500$ の系の気液平衡シミュレーションで得られた動径 r 方向の密度分布である。密度の低い領域がバルク気相、密度の高い領域がバルク液相で、その間で密度が連続的に変化している領域は遷移層である。遷移層に以下のフィッティング関数を用いる：

$$\frac{\rho_\ell + \rho_v}{2} + \frac{\rho_\ell - \rho_v}{2} \tanh\left(\frac{r - R_m}{0.455\delta}\right) \quad (2)$$

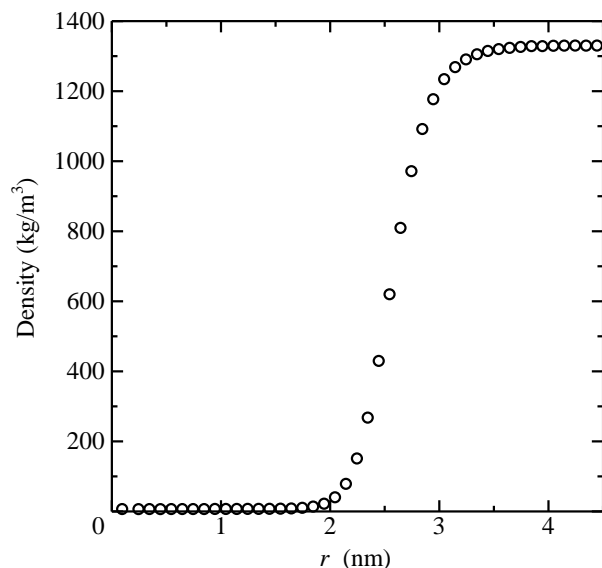


図 2 密度分布 ($N=18500$, $R_m=2.58$ nm)

ここで、 ρ_v はバルク気相密度（気泡核内の飽和蒸気密度）、 ρ_ℓ はバルク液相密度、 R_m は遷移層の中央位置、 δ は10-90厚さである。なお、本研究では気泡核半径として R_m を用いる。

図3に気泡核内の飽和蒸気密度 ρ_v と気泡核半径 R_m の関係を示す。ここで、図中の破線は平面液相に対する飽和蒸気密度である^⑨。気泡核半径 R_m が小さくなるほど飽和蒸気密度 ρ_v が小さく、Kelvin効果が確認できる^⑧。

図4は動径 r 方向の圧力分布である。圧力計算は著者らの先行研究^⑨の方法を採用している。気泡核中心を原点とする球座標系 (r, θ, ϕ) で気液界面の法線方向にあたる r 方向成分を p_r 、接線方向にあたる θ 方向成分と ϕ 方向成分の平均を p_T としている。 p_r は動径 r の増加とともに負圧側に減少して $r = 2.4$ nm付近で極小値をとり、そこからバルク液相圧力まで上昇している。このような接線方向圧力 p_T の微視的分布を巨視的に表したものが表面張力にほかならない。

図5に気泡核の気液界面に作用する表面張力を示す。気泡核が小さいほど表面張力 γ_s が大きくなっている。なお、本研究では力のつり合いと力のモーメントのつり合いから導出される以下の式から表面張力 γ_s を求めている^⑩：

$$\gamma_s^3 = \frac{3(p_v - p_\ell)^2}{8} \int_0^{R_\ell} r^2 (p_r - p_v) dr \quad (3)$$

ここで、 R_ℓ はバルク液相における任意の位置である。

図6に気泡核の気液界面における蒸発係数 α を示す。ここで、初期条件である $N=19250$ の系に対応する $R_m = 1.74$ nmについては気液平衡から真空蒸発に移行する段階のため結果は得られていない。気泡核の蒸発係数 α は1.0に近い値をとっており、気泡核半径 R_m が小さくほど蒸発係数 α が大きくなっている。これは、気泡核半径 R_m が小さくなる場合に飽和蒸

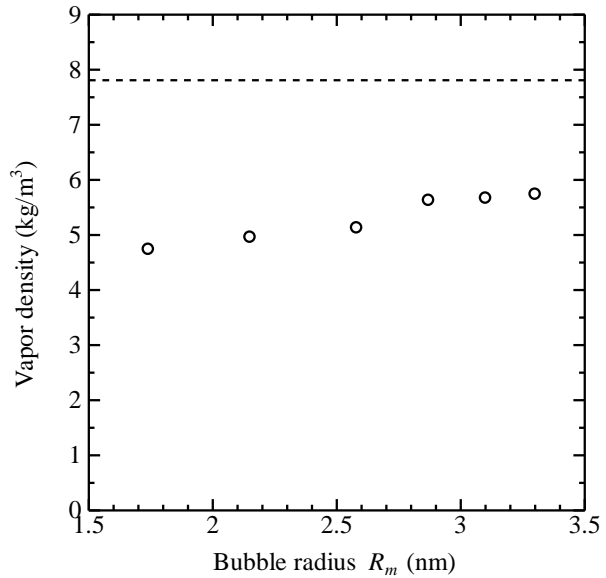


図3 気泡核内の飽和蒸気密度
(破線は平面液相に対する飽和蒸気密度^⑨)

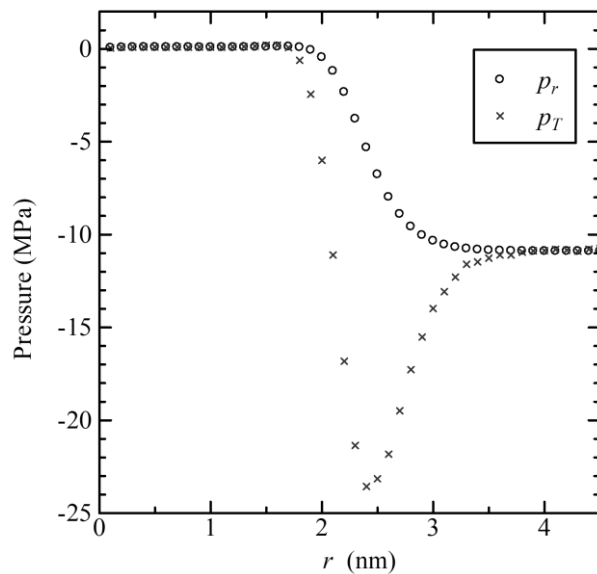


図4 圧力分布 ($N=18500$, $R_m=2.58$ nm)

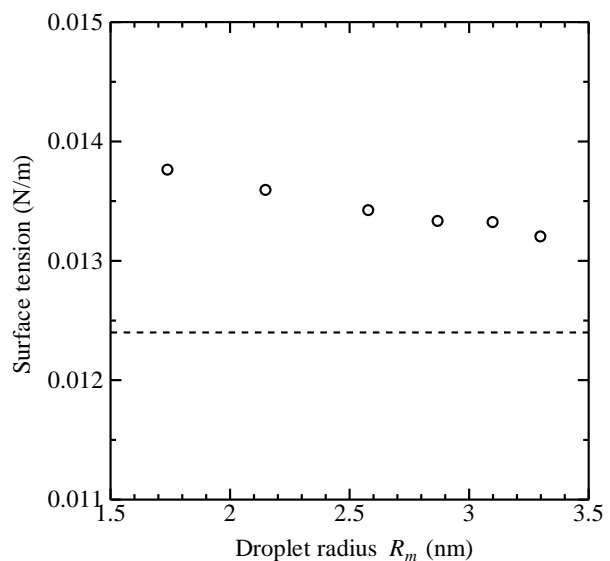


図5 気泡核における表面張力
(破線は平面液相における表面張力^⑨)

気密度 ρ_v の Kelvin 効果を相殺するように蒸発質量流束 J_{evap} が小さくなるためである。また、平面液相における温度 90 K の蒸発係数 $\alpha = 0.835$ から (破線) ⑥, 気泡核半径 R_m が小さくなるにつれて $\alpha = 1.0$ に向かって大きくなることが示唆される。

以上、本研究の取り組みによって得られた蒸発係数 α や表面張力 γ_s などの物性値はキャビテーション初生理論における主要パラメータであり④、⑥、今後の分子動力学と気泡力学を融合させた新しい解析モデルの構築に向けて基礎的かつ重要な知見が得られたと言える。

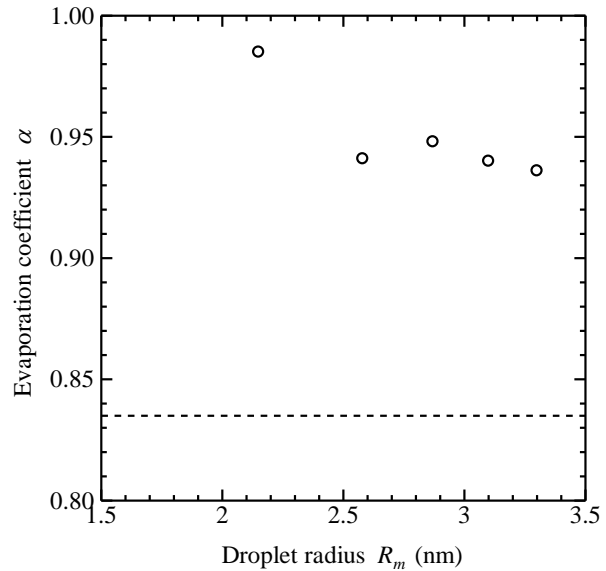


図 6 蒸発係数
(破線は平面液相における蒸発係数⑥)

<引用文献>

- ① 加藤洋治(編著)ほか, 新版キャビテーション, 森北出版, 2017.
- ② T. Kodama, Y. Tomita, Y. Watanabe, K. Koshiyama, T. Yano, S. Fujikawa, Cavitation bubbles mediated molecular delivery during sonoporation, Journal of Biomechanical Science and Engineering, Vol. 4(1), 2009, pp. 124-130.
- ③ D. Schanz, B. Metten, T. Kurz, W. Lauterborn, Molecular dynamics simulations of cavitation bubble collapse and sonoluminescence, New Journal of Physics, Vol. 14, 2012, 113019.
- ④ 江頭竜, 藤川俊秀, 藤川重雄, 非平衡蒸発を伴う蒸気泡のキャビテーション初生に関する理論と数値解析, 日本機械学会論文集(B編), 第82巻, 第837号, 2016, pp. 1-12.
- ⑤ S. Fujikawa, T. Yano, M. Watanabe, Vapor-Liquid Interfaces, Bubbles and Droplets, Springer, 2011.
- ⑥ T. Ishiyama, T. Yano, S. Fujikawa, Molecular dynamics study of kinetic boundary condition at an interface between argon vapor and its condensed phase, Physics of fluids, Vol 16, No. 8, 2004, pp. 2899-2906.
- ⑦ T. Ishiyama, T. Yano, S. Fujikawa, Kinetic Boundary Condition at a Vapor-Liquid Interface, Physical Review Letters, Vol. 95, 2005, 084504.
- ⑧ 小野周, 表面張力 (物理学 one point 9), 共立出版, 1980.
- ⑨ H. Yaguchi, T. Yano and S. Fujikawa, Molecular Dynamics Study of Vapor-Liquid Equilibrium State of an Argon Nanodroplet and Its Vapor, Journal of Fluid Science and Technology, Vol. 5, No. 2, 2010, pp. 180-191.
- ⑩ 矢口久雄, 藤川重雄, 矢野猛, 渡部正夫, ナノ液滴と蒸気の一成分気液二相系における平衡条件の検討, アンサンブル, 第13巻, 第1号, 2011, pp. 7-11.
- ⑪ 藤川俊秀, 江頭竜, 矢口久雄, 藤川重雄, 有限時間持続する張力下とその後の大気圧下でのキャビテーション初生のパラメータ分類と予測法, ターボ機械, 第47巻, 第2号, 2019, pp. 116-124.

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計9件（うち査読付論文 5件/うち国際共著 0件/うちオープンアクセス 5件）

1. 著者名 Tabe Hirofumi、Kobayashi Kazumichi、Yaguchi Hisao、Fujii Hiroyuki、Watanabe Masao	4. 巻 150
2. 論文標題 Levitation mechanism of impacting nanodroplet on heated wall	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 International Journal of Thermal Sciences	6. 最初と最後の頁 106203
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1016/j.ijthermalsci.2019.106203	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Tabe Hirofumi、Kobayashi Kazumichi、Yaguchi Hisao、Fujii Hiroyuki、Watanabe Masao	4. 巻 55
2. 論文標題 Influence of liquid-solid intermolecular force on levitation of impacting nanodroplet	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Heat and Mass Transfer	6. 最初と最後の頁 993 ~ 1003
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1007/s00231-018-2474-4	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 藤川 俊秀、江頭 竜、矢口 久雄、藤川 重雄	4. 巻 47
2. 論文標題 有限時間持続する張力下とその後の大気圧下でのキャビテーション初生のパラメータ分類と予測法	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 ターボ機械	6. 最初と最後の頁 116 ~ 124
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.11458/tsj.47.2_116	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 -
1. 著者名 Egashira R、Fujikawa T、Yaguchi H、Fujikawa S	4. 巻 51
2. 論文標題 Low Reynolds number flows in a microscopic and tapered tube with a permeability	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Fluid Dynamics Research	6. 最初と最後の頁 025504 ~ 025504
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1088/1873-7005/aaed57	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 岡本邦夫、矢口久雄	4. 巻 38
2. 論文標題 ICTを活用した同時多軸NC加工教育の実践的展開	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 群馬高専レビュー	6. 最初と最後の頁 71～77
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 金子忠夫、矢口久雄、浅見博、岡本邦夫、黒澤拓未	4. 巻 38
2. 論文標題 擬似的な同時5軸加工に関する基礎的検討	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 群馬高専レビュー	6. 最初と最後の頁 15～22
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Ryu Egashira, Toshihide Fujikawa, Hisao Yaguchi, Shigeo Fujikawa	4. 巻 50(3)
2. 論文標題 Low Reynolds number flows in a microscopic and tapered tube with a permeability	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Fluid Dynamics Research	6. 最初と最後の頁 35502
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1088/1873-7005/aab578	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 矢口久雄、岡本邦夫、浅見博、須永修司、金子忠夫	4. 巻 37
2. 論文標題 群馬高専ものづくり人材育成講座における機械加工シミュレーションの活用	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 群馬高専レビュー	6. 最初と最後の頁 pp. 103-108
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 岡本邦夫, 矢口久雄, 浅見博, 須永修司, 金子忠夫	4. 巻 37
2. 論文標題 機械加工シミュレーションを用いた多軸加工教育の展開	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 群馬高専レビュー	6. 最初と最後の頁 pp. 109-114
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

〔学会発表〕 計9件 (うち招待講演 0件 / うち国際学会 2件)

1. 発表者名 Hirofumi Tabe, Kazumichi Kobayashi, Hisao Yaguchi, Hiroyuki Fujii, Masao Watanabe
2. 発表標題 Molecular Dynamics Study on Influence of Liquid-solid Intermolecular Force on Levitating Mechanism of Impacting Nanodroplet on Heated Wall
3. 学会等名 Surface Wettability Effects on Phase Change Phenomena (SWEP) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 田部広風海, 小林一道, 矢口久雄, 藤井宏之, 渡部正夫
2. 発表標題 分子動力学法を用いた高温壁への液滴衝突シミュレーション
3. 学会等名 日本機械学会第97期流体工学部門講演会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 岡本邦夫, 黒澤拓未, 浅見博, 須永修司, 矢口久雄, 金子忠夫
2. 発表標題 CNCシミュレーションを活用した人材育成講座
3. 学会等名 令和元年度全国高専フォーラム
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 矢口久雄, 大島伸行
2. 発表標題 拡張されたピリアル定理を用いた気液界面の接線方向圧力分布の計算
3. 学会等名 第32回数値流体力学シンポジウム
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 藤川俊秀, 江頭 竜, 矢口久雄, 藤川重雄
2. 発表標題 有限時間持続する負圧下でのキャピテーション初生のパラメータ分類と予測法
3. 学会等名 日本学術会議第19回キャピテーションシンポジウム
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 矢口久雄, 藤川俊秀, 江頭竜, 藤川重雄
2. 発表標題 微小テーバ円管の低レイノルズ数流れの理論
3. 学会等名 日本機械学会2018年次大会講演会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Hirofumi Tabe, Kazumichi Kobayashi, Hisao Yaguchi, Hiroyuki Fujii, Masao Watanabe
2. 発表標題 Influence of surface roughness of high temperature wall on levitation of impacting droplet based on molecular dynamics simulation
3. 学会等名 Surface Wettability Effects on Phase Change Phenomena (SWEPP) workshop (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 柳田佳輝, 奥村圭介, 藤川俊秀, 白岩寛之, 矢口久雄
2. 発表標題 PIV計測とCFD解析による輸送用車両車体まわりの流れ場の可視化
3. 学会等名 日本実験力学会2018年度年次講演会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 岡本邦夫, 矢口久雄, 浅見博, 金子忠夫
2. 発表標題 多軸加工機における機械シミュレーション教育への試み
3. 学会等名 平成30年度全国高専フォーラム
4. 発表年 2018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

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