

平成 26 年 6 月 16 日現在

機関番号：13601

研究種目：若手研究(B)

研究期間：2012～2013

課題番号：24760132

研究課題名(和文) 超微小気泡群の熱的非平衡挙動の探求

研究課題名(英文) Exploration of Thermally Non-equilibrium Behavior of Nano-scale Bubbles

研究代表者

津田 伸一 (TSUDA, Shinichi)

信州大学・工学部・講師

研究者番号：00466244

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 2,800,000円、(間接経費) 840,000円

研究成果の概要(和文)：1億分の1メートル程度の大きさの超微小気泡群の挙動に対する熱的な影響の解明を目的として、分子シミュレーションによる研究を展開した。その結果、少なくとも低圧場での気泡挙動については、熱的な影響は非常に小さい。気泡群の成長機構を特徴づける指数(成長速度指数と呼ばれる)が熱的な影響を直接考慮せずともマクロな状態量を用いたモデルから定量的に予測できる、という2つの知見が得られた。これらは、超微小気泡群に対する正確な挙動予測が工学的に求められているなか、その予測を可能とするための一里塚となる成果である。

研究成果の概要(英文)：The aim of this study is the clarification of the thermal effect on the dynamic behavior of nano-scale bubbles using molecular simulation. Two important results were obtained for the behavior in low pressure field: (I) the thermal effect is little, (II) a characteristic exponent, which reflects the growth mechanism of bubbles (called growth exponent), can be estimated from a model expressed by macroscopic quantities without the direct consideration of the thermal effect. These results are very useful for the construction of an accurate prediction method of the dynamic behavior of nano-scale bubbles because such method has been recently required in the engineering field.

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：気泡力学

1. 研究開始当初の背景

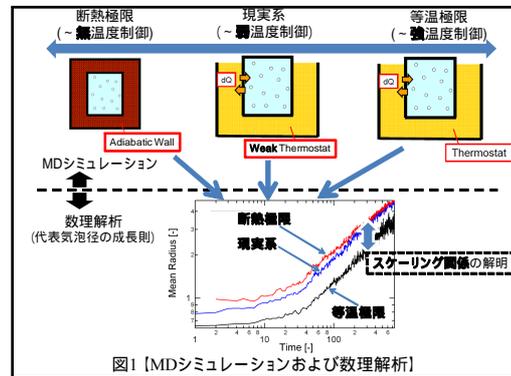
微小液滴や微小気泡に代表される“小さな分散相(液相や気相)”の“大きな威力”が、様々な産業や医療応用の場で実証されている。具体的には、例えば薬品を使わずに半導体などの表面を洗浄する技術や、微小気泡の発熱効果を利用したがん細胞の焼灼技術などである。また、大型計算機に限らず、今後はパソコンのCPU冷却でさえも、1,000-10,000 W/cm²というロケットエンジンのノズル部冷却とほぼ同等の高い冷却能力が必要とされており、微細空間内での相変化を利用した高い熱伝達率を活かす(相変化を利用しない場合よりも1万倍以上の効果も期待)以外に対処の手段はないと考えられてきている。

このような背景のなか、強非平衡下の相変化や微小気泡群などの詳細挙動の解明が、熱流体輸送促進の観点で需要を増しているが、その特性時間はナノ秒、空間スケールはナノメートルのオーダーにもなり得る。そのため、現象の実験的解明は容易ではない。この意味で計算力学への期待は大きく、分子動力学(MD)法などに代表される微視的手法の適用が国内外で積極的に進んでいる。しかし、強非平衡の系では、対象場の熱力学的状態を明確に規定できないため、信頼に足る定量的な知見を得るのが極めて難しい。この点は、本研究分野における最大の困難となっている。

これまでの研究では、近似的に熱力学的な場を規定するという立場から、主に「等温系」と「断熱系」の設定が適用されてきた。ただし、急激な気液相変化などを伴う場合には容易に温度変化が生じるため、等温系の設定は現実的ではなく、この意味では断熱系の方が適している。しかしながら、現実の系が周囲の固体壁面や流体との熱的相互作用を伴わないこともまた考えにくい。むしろ、注目する現象の非平衡度(現象の速さ)に応じて、現実の系は断熱系と等温系の間に幅広く存在し得ると認識するのが妥当である。しかしながら、このような認識を明確に示す研究自体が皆無となっていたのが、研究開始当初の現状である。

2. 研究の目的

ナノスケールの超微小気泡群を対象に、その現実系での非平衡ダイナミクスを探索可能とする新しい数理関係を提示する。具体的には、単原子分子流体を対象に、断熱極限と等温極限、およびこの2つの極限系の間に幅広く存在する弱温度制御系における超微小気泡群の成長則を明らかにする。これら3つの系での成長則を介して、現実の非平衡系(断熱系と等温系の間に存在)における超微小気泡群の挙動を捉え得る、数理関係を構築する。以上が研究開始当初における研究目的である。



3. 研究の方法

(1) 分子シミュレーションの対象と方法

研究対象は、Lennard-Jones ポテンシャルと呼ばれる単原子分子モデルからなるモデル流体である。このモデル流体に対して、

- (A) 断熱系
- (B) 等温系
- (C) 弱温度制御系

の3つの系に対するMDシミュレーション(図1参照)を適用する。ただし、(C)については、あくまでも(A)と(B)のシミュレーション結果に大きな差異がある場合にのみ実施する。なお(A)・(B)・(C)の各系の特徴は、次のとおりである。

(A) 断熱系・・・Newtonの運動方程式を解くことで各分子の運動を求める系(全分子数 N 、体積 V 、全エネルギー E が一定となる系)

(B) 等温系・・・“Nosé-Hoover 熱浴”と呼ばれる温度制御用の熱浴を適用した運動方程式を解くことで各分子の運動を求める系(全分子数 N 、体積 V 、温度 T が一定となる系)

(C) 弱温度制御系・・・“Weak-coupling”と呼ばれる、ある緩和パラメータ τ (熱流を制御する速さに相当)を有する熱浴を課した運動方程式を解くことで、各分子の運動を求める系

以上の3種類の系に対して、既に申請者が構築してきている超微小気泡群の非平衡挙動を再現するMD手法(Tsuda et al., Fluid Dyn. Res., 2008)を適用することで、断熱系と等温系を見通し良く繋ぐことがシミュレーションレベルで可能となる。

(2) シミュレーション結果に対する数理解析

以上の各系に対するシミュレーション結果に対して、本研究では、気泡群などの成長機構を特徴づける指数として古くから知られている「成長速度指数」を評価することによる数理解析を実施する。ここで成長速度指数とは、気泡群に対する代表長さの時間変化が、時間のべき乗に従う場合の指数のことであり、この指数は成長機構を支配する物理を

反映すると考えられる、非常に重要な因子である。この成長速度指数が、断熱系・等温系・弱温度制御系という熱的影響の異なる系においてどのような変化を示すのかに注目し、その変化の程度を数理的に表現することができれば、超微小気泡群に対する熱的影響の定式化も可能になると考えられる。なお、図1は、上述のシミュレーションと数理解析との対応関係を示している。

また、各シミュレーション系において得られる成長速度指数の理論的導出も試みる。これが成功すれば、超微小気泡群の成長機構を具体的に特定できるだけでなく、超微小気泡群の非平衡挙動を予測するための大きな指針を得ることが期待できる。以上が、研究開始当初における研究計画（方法）である。

4. 研究成果

(1) 得られた主な結果

断熱系と等温系の比較結果

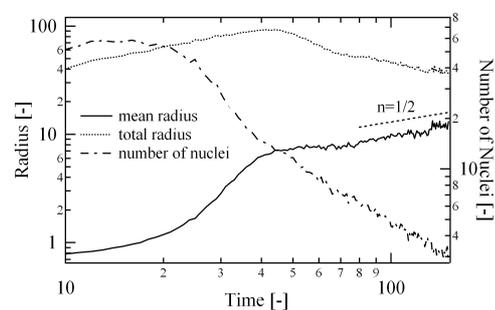
まず、断熱系と等温系の比較結果を述べる。ここでは、低温低圧場で生じる気泡群の生成・成長現象を想定した結果を示す。図2において、実線（mean radius）は断熱系と等温系における気泡群の代表長さの時間変化（対数プロット）を示している。これより、まず双方の系においてある時間を経過すると時間のべき乗に従う傾向を見せていることがわかる。またその傾きが成長速度指数となるが、この指数を評価すると、どちらの系でも約0.5となることがわかった。

この解析結果は、第3の系として当初予定していた弱温度制御系の解析をおこなうまでもなく、少なくとも低温低圧場を想定した気泡群の生成・成長においては、熱的影響が非常に小さいことを示している。すなわち、熱的影響を直接考慮せずとも、超微小気泡群の成長過程を数理的に表現し得ることが示された。

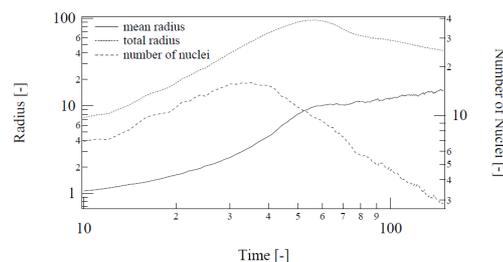
低温場と高温場の比較結果

の結果から、熱的影響は非常に小さいことが明示されたわけであるが、これは温度の空間勾配の影響が小さいことを示しただけである。したがって、温度そのものの影響についても評価しておく必要があると考えられる。そこで、当初の研究計画とは異なるが、次の段階として、同じ断熱系のもとで低温低圧場と高温高圧場のシミュレーションをおこない、その結果を詳細に評価した。なお、以下では前者を低温場、後者を高温場と略して表現する。

図3は低温場と高温場における可視化結果例を示したものである（灰色のプロット群が気泡の領域となっている）。これより、低温場では球形に近い気泡群が現れているのに対して、高温場では球形からは大きくずれた気泡群が生じていることがわかる。これは高温場では熱ゆらぎの影響が大きいこと、また

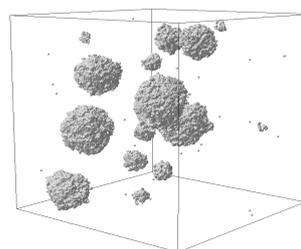


(a) 断熱系

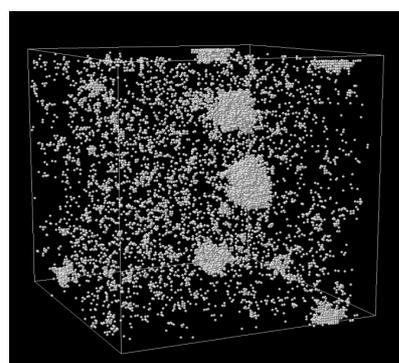


(b) 等温系

図2 【断熱系と等温系の結果比較】



(a) 低温場



(b) 高温場

図3 【低温場と高温場の可視化結果】

表面張力の値が小さいことに起因している。

さて、低温場では球形気泡の仮定がじゅうぶんに成り立つことから、気泡群の代表長さは気泡体積を評価することで算出できる。いっぽう、高温場の系では図3(b)のように球形

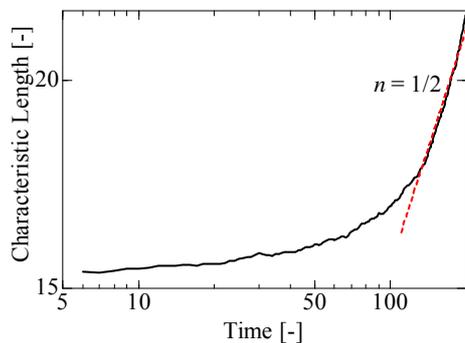


図4 【代表長さの時間変化（高温場）】

の仮定が成立しにくいことから、単純に気泡体積から代表長さを算出することは妥当ではない。そこで、高温場の系に対しては、分子の存在位置から局所の密度を波数空間において定義し、その自己相関を評価することで代表長さを算出した。この方法では、分子の存在位置の情報から、気泡に相当する低密度領域の大きさを直接評価できるため、球形気泡でなくても代表長さの算出が可能である。この方法による、代表長さの時間変化の評価結果（対数プロット）を図4に示す。

これより、高温場においてもある時間を経過すると時間のべき乗に従う傾向を見せること、またその傾きである成長速度指数が約0.5となることがわかった。すなわち、低温場と高温場では気泡の形状には大きな違いがあるものの、得られる成長速度指数にはほとんど差異がないことがわかった。

理論解析

上述のととの結果から、少なくとも低圧場での超微小気泡群の非平衡挙動において、熱的影響は非常に小さいこと、また低温場と高温場では気泡形状の差異は表れるものの、気泡群の成長機構を反映すると考えられる成長速度指数には（熱的影響だけでなく）温度依存性もほとんど表れないことがわかった。そこで、成長速度指数に表れている成長機構を定量的に検討するため、ここでは気液界面における蒸発/凝縮が気泡成長を駆動していると仮定したうえで、下記の2通りの理論解析をおこない、成長速度指数（指数値0.5）の導出を試みた。

- (A) 気泡群のサイズ分布を考慮しない解析
- (B) 気泡群のサイズ分布を考慮した漸近解析

なお、熱的影響が小さいという分子シミュレーションの結果を受けて、(A)(B)の理論解析ではともに熱的影響は考慮せず、空間的に平均化した温度場の影響のみを考慮するようにしている。その結果、(A)(B)の双方の解析において、ともに成長速度指数0.5の数値を得ることに成功した。すなわち、気液表面における蒸発/凝縮が、超微小気泡群の成長を

駆動している可能性が高いことが示された。

また、加えて重要なことは、本理論解析で適用した蒸発/凝縮速度を表すモデルは、「古典的簡略化モデル」と呼ばれる、マクロな状態量を用いて定式化したモデルとなっている点である。すなわち、本研究で対象とした1億分の1メートル程度の気泡群の成長を、マクロな状態量によるモデルによっても予測し得ることが示された点も、意義のある結果として位置づけられる。

(2) 本研究成果の国内外における位置づけ

分子シミュレーションによる超微小気泡の生成過程に関する研究は、1990年代後半から盛んにおこなわれてきている。しかしながら、そのほとんどは単一の球形気泡を対象としたものであり、本研究のように複数の超微小気泡群を対象とした研究はほとんど展開されてきていない。また、気泡に限らず、複数の分散体を対象とした類似の研究は多数おこなわれてきているが、そのすべては熱力学的に不安定な状態（気泡や液滴の生成速度がほぼ無限大となる理想化された状態）からの状態の変化を対象としている。いっぽう、本研究では熱力学的に準安定な状態（気泡や液滴の生成速度が有限となるより現実的な状態）からの相変化を対象としており、この点で世界的にも初めての研究および成果となっている。

このような位置づけのもとで、(I)超微小気泡群の成長過程では熱的影響が非常に小さいこと、(II)気泡群の成長機構を特徴づける指数（成長速度指数）が熱的な影響を直接考慮することなくマクロな状態量によるモデルから定量的に予測できること、を示せた意義は非常に大きい。特に、ナノテクノロジーの進展に伴い、超微小気泡群に対する正確な挙動予測が工学的に求められているなかで、本研究で得られた知見はこれを可能とするための明確な指針を示すものとして特徴づけられる。

(3) 今後の課題

本研究では、気液界面における蒸発/凝縮機構が気泡成長を駆動していると仮定した理論解析から、成長速度指数0.5を得ることに成功している。しかしながら、場合によっては、他の成長機構を仮定した場合にも同一の指数が得られる可能性がある。他の成長機構による定式化の可否についても検討しておく必要がある、この点が今後の課題の一つである。

また、本研究では理想化された気液の系を対象としたが、現実の超微小気泡群の生成成長過程を理解するためには、固体壁面が及ぼす影響についても検討する必要がある。そのためには、固体壁面と液体分子との相互作用の大きさとの関係にも注目したうえで、固体壁面が成長速度指数に及ぼす影響を明らかにしていく必要がある。

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 1 件)

S. Tsuda, T. Hirata, and H. Tanaka, A Molecular Dynamics Analysis of Homogeneous Bubble Nucleation with a Noncondensable Gas in Cryogenic Cavitation Inception, 査読有, Molecular Simulation 40, (2014), pp. 320-326. DOI コード: 10.1080/08927022.2013.805413

〔学会発表〕(計 3 件)

津田 伸一, 田中 亮太, 分子動力学シミュレーションによる超微小気泡群の成長機構の評価, 日本機械学会 2014 年度年次大会, 2014 年 9 月 8 日~9 月 10 日, 東京電機大学

田中 亮太, 津田 伸一, 高温場における気泡核の生成-成長過程の分子動力学シミュレーション, 第 27 回数値流体力学シンポジウム, 2013 年 12 月 17 日~19 日, 名古屋大学

田中 亮太, 津田 伸一, 高温場における気泡核の生成-成長過程の分子動力学解析, 混相流シンポジウム, 2013 年 8 月 9 日~8 月 11 日, 信州大学工学部

6．研究組織

(1)研究代表者

津田 伸一 (TSUDA, Shinichi)
信州大学・工学部・講師
研究者番号: 00466244