

科学研究費助成事業（科学研究費補助金）研究成果報告書

平成 25 年 5 月 20 日現在

機関番号：10101
 研究種目：若手研究(B)
 研究期間：2010～2012
 課題番号：22760135
 研究課題名（和文） 気液相変化を伴う界面境界条件の構築およびその流体力学への応用
 研究課題名（英文） Constructions of kinetic boundary condition at vapor-liquid interfaces and its application to fluid dynamics
 研究代表者
 小林 一道 (KOBAYASHI KAZUMICHI)
 北海道大学・大学院工学研究院・助教
 研究者番号：80453140

研究成果の概要（和文）：本研究は、分子運動論に基づく解析から、蒸発・凝縮が起こっている気体・液体界面の分子気体力学に対する境界条件を構築し、その知見を流体力学方程式系に応用することである。分子運動論的解析として Enskog-Vlasov 方程式を用いた数値解析を行い、気体論境界条件を求めた結果、液体温度が十分低温の場合には、その速度分布関数は非当方性の正規分布となり、過去に得られた分子動力学解析と同様の傾向を示すことがわかった。また、液体温度が大きくなるほど、速度分布関数は液体温度の Maxwell 分布とのずれが大きくなることがわかった。

研究成果の概要（英文）：In the present study, the kinetic boundary condition (KBC) at vapor-liquid nonequilibrium states was confirmed based on the Enskog-Vlasov Equation. The aim of this study is to construct the KBC and to apply the knowledge of the KBC for the fluid dynamics analysis. The simulation results showed that at a low liquid temperature, the velocity distribution of the KBC obtained by our simulation is anisotropic Gaussian; this result agrees quantitatively with the results of the previous MD simulation. Also, the liquid temperature becomes slightly larger, the magnitude of the anisotropic Gaussian becomes larger.

交付決定額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2010 年度	1,600,000	480,000	2,080,000
2011 年度	1,000,000	300,000	1,300,000
2012 年度	600,000	180,000	780,000
年度	0	0	0
年度	0	0	0
総計	3,200,000	96,000	4,160,000

研究分野：流体力学

科研費の分科・細目：分子流体力学

キーワード：気体論境界条件，分子運動論，蒸発・凝縮係数

1. 研究開始当初の背景

連続体仮説に基づく流体力学方程式は、気相と液相それぞれの流れを正しく記述するが、気液界面での蒸発・凝縮現象を伴う混相二相流れの場合、界面を通過する質量、運動量、

エネルギー輸送量を正確に知ることはできないため、流体力学のみではその流れを正確に記述することは困難である。なぜなら蒸発・凝縮現象は、液相から気相へ移動する分子群と気相から液相へ移動する分子群の各々の運

動に差に起因しており、その正味の値として質量、運動量、エネルギーが気液界面を通して輸送されるからである。このように気液界面における輸送現象は、分子スケールの微視的な解析によってのみその性質を理解することができる。

この問題に対して、Boltzmann方程式に気液界面の境界条件を課して解析的・数値的に解くことで、蒸発・凝縮を伴う気体の流れの詳細が明らかにされており、これまでに多くの重要な結果が得られてきた。

この境界条件は気体論境界条件と呼ばれており、従来は現象論的なモデルが用いられてきたが、その妥当性は確認されていなかった。

2. 研究の目的

分子気体力学の対象は理想気体に限定されており実在気体や液体の運動を正確に予測することはできない。そのため、いまだに蒸発・凝縮現象の包括的理解には至っていない。

一方、Karkheckらは気液二相の運動を記述する近似的モデル式であるEnskog-Vlasov方程式を提案し、Frezza(2004)はその数値計算法を開発し、平衡状態や非平衡蒸発現象について詳細な検証を行ってきた。この計算手法は、分子動力学法と比較すると計算効率が非常に良いため、より大きな時空間スケールの問題に適用可能であると考えられる。

そのため、このEnskog-Vlasov方程式による解析は、蒸発・凝縮現象の包括的理解、ひいてはその応用へとつながる可能性がある。そこで本稿では、Enskog-Vlasov方程式を用いて非平衡凝縮シミュレーションを行い、その数値解析法が非平衡凝縮現象に対して適用可能であるかどうかについて検証した。

3. 研究の方法

本研究では巨視的な意味において空間的に一次元問題を考える。数値計算法にはEnskog-

DSMC法を用いるこれはBoltzmann方程式の数値解法であるDSMC法をEnskog方程式を解くために拡張した方法である。

気体側境界から f_{coll} の分布でサンプル分子を液相へ入射し、気体論境界条件 f_{out} を調べる。ここでは詳しくは述べないが、 f_{coll} 中に含まれる β と γ （適当な非平衡状態の密度を決めるパラメータが β であり、温度を決めるパラメータが γ である）を設定することで、多様な非平衡凝縮状態を実現でき（ $\beta = 1, \gamma = 1$ のとき平衡状態）、今回は $\beta = 1, 2, 3, 4, \gamma = 1, 2, 3, 4$ の16ケースを実行した。液相温度は $T_l = 0.596T_c$ と十分低温の場合とする。ここで T_c は臨界温度である。液相の幅は $10a$ 、気相の幅は分子同士が衝突しないように $25a$ と平均自由行程より小さくとする。数値計算において、空間刻みは $dx = 0.2a$ 、時間刻みは無次元時間の1000分の1とした。気液界面を基準とした座標系で十分定常状態となっている時間からサンプルをとり、巨視量を時間平均した。



4. 研究成果

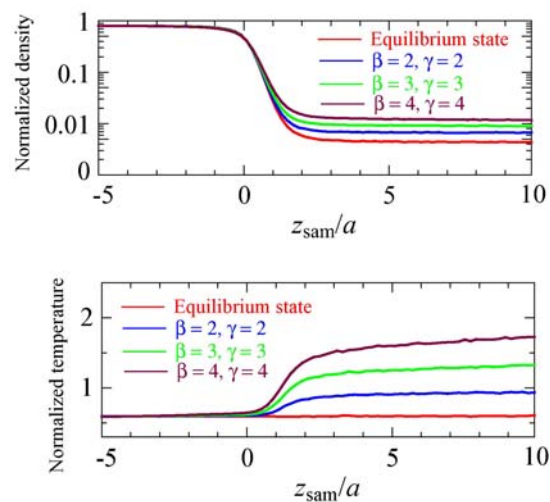


図2 密度分布と温度分布の計算結果

図2に本計算で得られた密度分布（上図）および温度分布（下図）を示す．ここで，各図の左側の密度が高い領域は液体であり，図の右側の低密度領域は気体を示す．また，液体—気体の間には，分子直径程度の遷移層と言われる領域があることがわかる．本結果より， β や γ の値が大きくなるほど気液非平衡

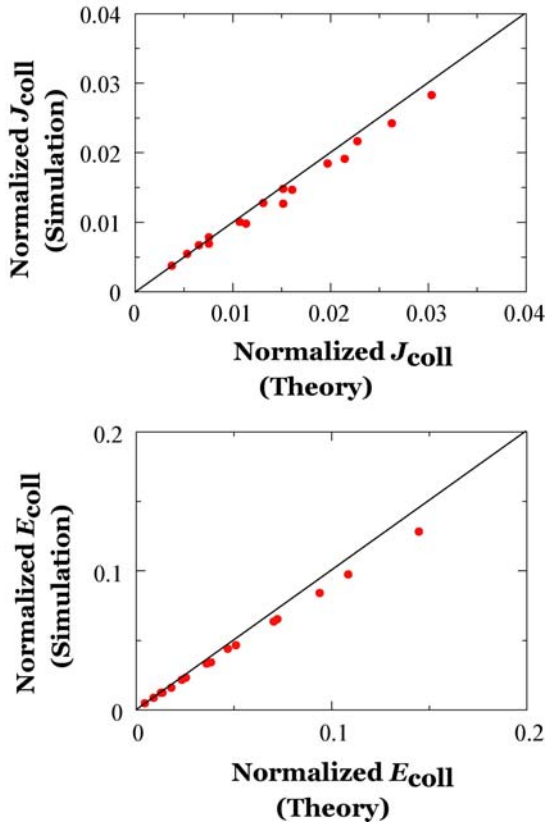


図3 気体側境界条件の検証

状態が大きくなり，気体側の温度や密度がそれらの値に応じて大きくなっていることがわかる．

図3に本計算で使用している気体側境界条件を検証した結果を示す．上図が境界から流入する気体の質量流束であり，上図が境界から流入する気体のエネルギーである．各図とも，横軸は f_{coll} より得られる理論値で，縦軸は数値シミュレーション結果である．図中の実線は理論値とシミュレーション値を等しいと仮定して引かれた線である．また各図とも，横軸・縦軸の値が大きいほど，気液非平衡状態になっている．この図より，平衡状態に近い場合には，シミュレーションから得られる結果はほぼ理論値と等しいことがわかる．しかしながら，系が非平衡状態になる

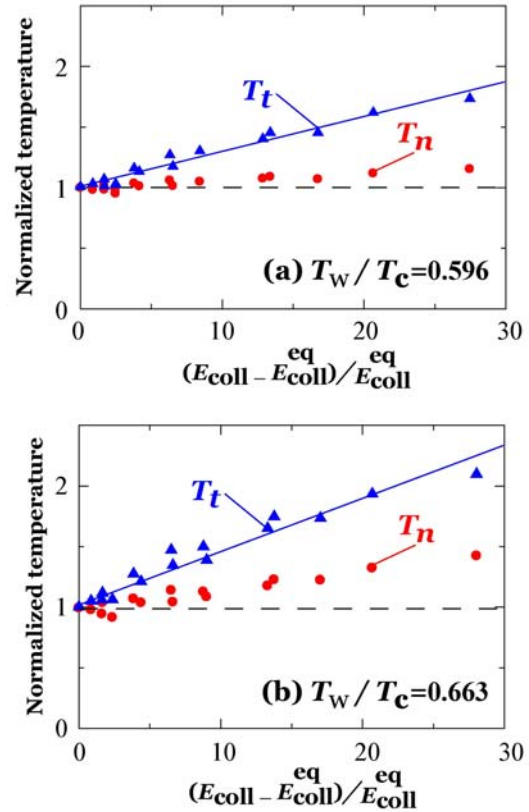


図4 気体論境界条件中に含まれる各温度

につれて，シミュレーション結果と理論値にはずれが生じていることがわかる．これは，非平衡状態になるほど，気体領域で分子衝突が頻繁に起こるようになり，その結果，液体に入射する気体分子のエネルギーがその衝突により減少した結果であると考えている．

図4に本計算で得られた気体論境界条件中の界面接線温度 T_t と法線温度 T_n のエネルギー依存性を示す．上図は液体温度が低温の場合であり，下図は液体温度が比較的高温の場合のものである．各図とも，横軸は気体から液体へ入射するエネルギー流束であり，縦軸が各温度である．

低温の場合の本結果より（上図），気体から液体へ入射するエネルギーが大きいほど，液体から気体へ出ていく分子からなる接線方向温度は大きくなっていることがわかる．また，わずかながら界面法線方向温度も，エネルギーの増加に伴いその値が上昇することが確認できる．次に液体温度が高温になると，界面法線温度の上昇が，低温液体に比べて大きくなる．法線方向温度も同様の傾向を示していることがわかる．

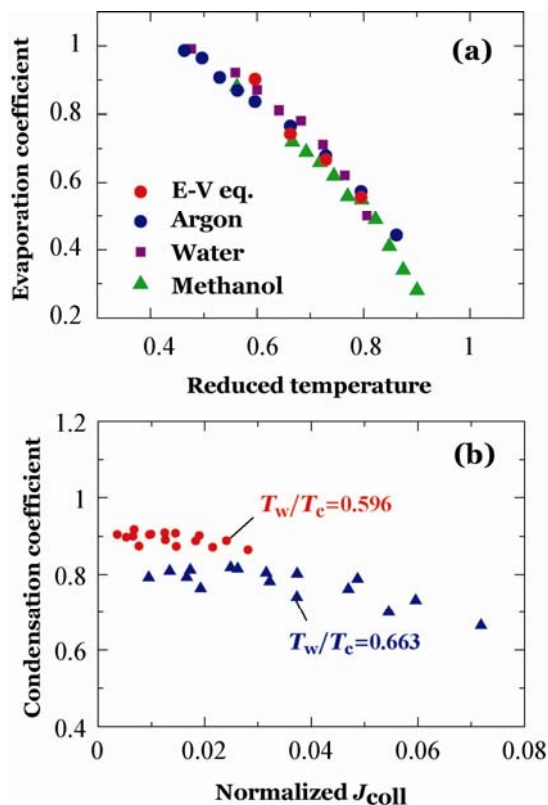


図5 蒸発係数と凝縮係数

最後に本計算結果より得られた蒸発係数と凝縮係数について図5に示す。上図が蒸発係数と液体温度の関係を示し、下図が凝縮係数と気液界面に入射する質量流束との関係を示したものである。まず、蒸発係数から見ていくと、赤丸が本計算結果で得られたものであり、その他はMD計算で過去に得られた結果である。この図より、本計算結果はMDで得られた結果とほぼ一致しており、適切な蒸発係数の値が得られたと考えている。

次に凝縮係数と液体に入射する質量流束の関係を示す。この図より、質量流束が上昇しても、各液体温度で凝縮係数の値はほぼ一定値と成ることがわかる。ただし、この結果はばらつきが多く、更なる検証が必要であると考えている。

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5件)

(1) K. Kobayashi, K. Ohashi, M. Watanabe, Numerical analysis of vapor-liquid two-phase system based on the Enskog-Vlasov equation, AIP Conference Proceedings Vol. 1501, 2012, pp. 1145-1151 (査読有り).

(2) M. Inaba, T. Yano, K. Kobayashi, M. Watanabe, Nonlinear Resonant Gas Oscillation Accompanied with Evaporation and Condensation, AIP Conference Proceedings Vol. 1501, 2012, pp. 53-58 (査読有り).

他3件

〔学会発表〕(計5件)

(1) 小林一道, 大橋広太郎, 稲葉匡司, 渡部正夫, 藤川重雄, Enskog 方程式を用いた高密度気体の Couette 流れに関する数値計算, 日本機械学会 2011 年度年次大会, 2011 年 9 月 13 日, 高知都目黒区, 東京工業大学.

(2) 大橋広太郎, 小林一道, 渡部正夫, Enskog-Vlasov 方程式に基づく非平衡凝縮現象の数値シミュレーション, 日本流体力学会年会 2012, 2012 年 9 月 17 日, 高知県高知市, 高知大学.

(3) 大橋広太郎, 小林一道, 渡部正夫, 平均場運動理論に基づく非平衡凝縮現象の数値シミュレーション, 第 26 回数値流体力学シンポジウム, 2012 年 12 月 18 日, 東京都渋谷区, 国立オリンピック記念青少年総合センター.

他2件

〔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:
取得年月日:
国内外の別:

○取得状況 (計0件)

名称:
発明者:
権利者:
種類:
番号:
取得年月日:
国内外の別:

6. 研究組織

(1) 研究代表者

小林一道 (KOBAYASHI KAZUMICHI)
北海道大学・大学院工学研究院・助教
研究者番号: 80453140