

科学研究費助成事業（学術研究助成基金助成金）研究成果報告書

平成25年4月16日現在

機関番号：10101
研究種目：挑戦的萌芽研究
研究期間：2011～2012
課題番号：23656122
研究課題名（和文）分子速度分布関数と平均場運動論理論による超臨界混合界面における輸送現象の解明
研究課題名（英文）Study on Transport phenomena at supercritical mixture interface by molecular velocity distribution function and mean field kinetic theory
研究代表者
渡部 正夫（WATANABE MASAO）
北海道大学・大学院工学研究院・教授
研究者番号：30274484

研究成果の概要（和文）

液体燃料ロケットエンジンの信頼性の向上のために、燃料混合気の濃度分布の高精度予測のための、気液混合界面での輸送現象の解明を目的としている。相変化が存在する気液界面における輸送現象を評価するために、平均場運動論理論から得られる Enskog-Vlasov 方程式を用いることにより、界面の物理特性を評価するために数値解析手法を解析し、分子動力学シミュレーション結果と比較することにより、混合界面での熱・物質輸送現象を検討する。

研究成果の概要（英文）

Transport phenomena on vapor-liquid mixture interface is studied for the accurate prediction of fuel mixture concentration, which leads to the development of highly reliable liquid fuel rocket engine. Numerical simulations for vapor-liquid two-phase systems were performed by using the mean field kinetic theory. The kinetic boundary condition (KBC) at the interface was investigated. We also execute molecular dynamics simulations of two-component vapor-liquid equilibrium systems of binary system to investigate heat/mass transport phenomena on mixture interface.

交付決定額

（金額単位：円）

	直接経費	間接経費	合計
交付決定額	3,000,000	900,000	3,900,000

研究分野：工学

研究費の分科・細目：機械工学・流体工学

キーワード：分子気体論, Enskog-Vlasov 方程式, 分子動力学, 平均場運動論理論, 速度分布関数, 輸送現象

1. 研究開始当初の背景

(1) 液体燃料ロケットエンジンが抱える課題の一つとして、燃料と酸化剤の混合気の濃度分布を正確に予測し、それに基づいて適切に燃焼を制御することが挙げられる。しかし、燃料と酸化剤の界面における物質輸送に重要な役割を果たす蒸発・凝縮に関しては、その物理解析モデルの構築に未だ多くの課題が残されている。

(2) 気液二相の流れにおいて、巨視的な視点に基づく流体力学方程式は、気相、液相それぞれの運動を正しく記述するが、気液界面における質量、運動量、エネルギー輸送量を正確に知ることはできない。気液界面における輸送現象は、分子が気液界面を通過することに起因するものである。具体的には分子が液相から気相へ移動することを蒸発、逆に気相から液相へ移動することを凝縮と呼び、この両者に差が生じたとき、気液界面において質量、運動量、エネルギーが輸送される。このように気液界面における輸送現象は、界面近傍における分子群の非平衡性に起因するものであり、微視的な理論によってのみその性質を理解することができる。

(3) 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・凝縮を伴う期待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。そこで Ishiyama らは、分子動力学法による気体論境界条件を求めた。しかしながら、分子動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出来ない。そのため、いまだに蒸発・凝縮現象の包括的理解にはいたっていない。

(4) さらに、二成分系に関しては手つかずに近い状態である。これは、界面での非平衡性と分子間相互作用が顕著であり、物質輸送や界面構造の解析には分子レベルの複雑さを本質的にもなうためである。

(5) このような中、数値シミュレーション手法のひとつである分子動力学解析による研究が先行している。たとえば、石山らは一成分系における蒸発分子の速度分布関数や蒸発係数などを詳細に明らかにしている。また、Frezzotti はアルゴン・クリプトンの二成分系における蒸発について分子動力学解析を行い、密度遷移層のモル分率によって蒸発量が変化することを示唆している。しかし、Frezzotti の他に二成分系の蒸発・凝縮を扱った例は少なく、密度遷移層のモル分率と蒸発・凝縮の関係を本質的に理解するためにも、二成分系の蒸発係数や速度分布関数の定量的評価が求められる。

2. 研究の目的

(1) 本研究では、Karkhech らが提案した、気液二相の運動を記述する近似的モデル式である Enskog-Vlasov 方程式に着目した。Frezzotti はその数値計算法を開発し、平衡状態および非平衡蒸発現象について詳細な検討を行ってきた。この方程式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、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、気体論境界条件を調べることで、この方程式が非平衡凝縮現象に対して適用可能であるかについて検証した。

(2) また、本研究では Frezzotti の結果を踏まえながら、二成分系における蒸発・凝縮について分子動力学解析を行い、密度遷移層のモル分率と蒸発係数がどのような関係にあるのかを定量的に解明することも目的としている。その基礎として、アルゴン液膜とアルゴン・ネオン混合蒸気の気液平衡系における密度遷移層に着目する。二成分気液二相系では揮発性の強い成分が液体表面に溜まる表面吸着が見られ、これらが蒸発・凝縮に影響を及ぼすことが予想されるためである。今回は、系に含まれるアルゴン分子の個数は固定し、アルゴンに比べ揮発性の強いネオン分子の個数のみを変化させたときに、密度遷移層の厚さとモル分率

がどのように変化するかを明らかにするとともに、これらとネオン分子の表面吸着の関連について考察した。

3. 研究の方法

(1) Enskog-Vlasov 方程式シミュレーション

① 本研究では、Sone らが提案した気体論境界条件を用いた。本境界条件では、液相から気相へ向かう分子の速度分布関数が、液相温度に依存する液相から気相へ蒸発する分子の速度分布関数と、気相から液相へ衝突する分子の速度分布関数と液相温度に依存する反射する分子の速度分布関数の線型和として表される。

② Enskog-Vlasov 方程式は Sutherland ポテンシャルで相互作用する単原子分子の速度分布関数に対して、その時空間発展を近似的に記述する気体論的方程式である。この方程式は気液二相の運動を扱うことが可能である。

③ 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。気体側境界から規定された分布でサンプル分子を液相へ入射し、気体論境界条件を調べる。流入境界条件のパラメータを変化させることにより、多様な非平衡凝縮状態を実現できる。液相温度は2通り用いた。

(2) 分子動力学シミュレーション

① アルゴン液膜とアルゴン-ネオン混合蒸気の気液平衡系に関する分子動力学シミュレーションを行う。液相とその蒸気成分にはアルゴン、非凝縮気体成分にはネオンを想定している。アルゴンとネオンはともに単原子分子であり、このような単純な物質を用いることで、現象に関する基礎的かつ本質的な知見を得ることを目指す。系の全分子数 N 、体積 V 、全エネルギー E は一定である。計算セルの x, y, z の全方向に対して周期境界条件を課す

② 図1に系の様子の一部を示す。赤色の粒子はアルゴン分子、黄色の粒子はネオン分子を表している。全ての系でアルゴンの分子数は 2000 個に固定し、ネオンの分子数のみを各系で変える。アルゴンとネオンの分子数をそれぞれ N_{Ar} 、 N_{Ne} とし、アルゴンに対するネオンのモル比 X_{Ne} をパラメータの6種類の系について分子動力学解析を行う。

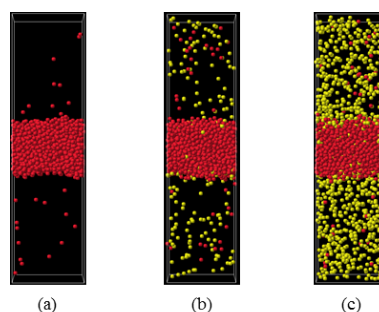


図1 典型的な系の様子

③ 分子間力ポテンシャルは 12-6 Lennard-Jones ポテンシャルとする。なお、アルゴン-ネオン間のポテンシャルパラメータ σ_{Ar-Ne} および ϵ_{Ar-Ne} は Lorentz-Berthelot 則に基づいて決定している。ここで添字の Ar と Ne はそれぞれアルゴンとネオンを表す。

④ 運動方程式の数値積分アルゴリズムには蛙跳び法を用い、時間刻み Δt は 5 fs とする。まず、速度スケールリング法⁴⁾による温度制御を行いながら 200 ns の平衡化を行う。その後、温度制御をせず、さらに 200 ns に渡る NVE 一定の分子動力学計算を行い、長時間平均することで巨視的物理量(密度、温度)を得る。なお、図1に示すように、液膜中心を原点とした直行座標系 (x, y, z) で $z = 0$ を中心とする上下領域はほぼ同様の状態となっていることから巨視的物理量の算出は $z > 0$ の領域についてのみ行う。

4. 研究成果

(1) Enskog-Vlasov 方程式シミュレーション

① 凝縮係数を気相から液相へ衝突する分子の質量流束 J_{coll} の関数として整理したものを図2に示す。凝縮係数は、気相から液相へ衝突する分子の質量流束と、液相へ凝縮する分子の質量流束の比として与えられる。図5より凝縮係数は低温液相のときには J_{coll} によらずほぼ一定の値を持つことがわかる。これは Ishiyama らと同様の傾向である。高温液相で非平衡の度合いが大きい場合、凝縮係数は低下するが、これは凝縮による液相表面の温度上昇が影響していると考えられる。

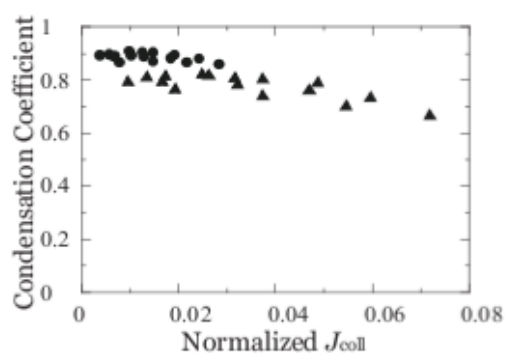


図2 凝縮係数

② 図3,4は界面法線方向温度 T_n 、界面接線方向温度 T_t とエネルギー流束 E_{coll} との比較である。これらの温度は気体論境界条件中に含まれる温度であり、 T_n , T_t が液相温度から離れると気体論境界条件は非平衡性を示すことに成。 T_n , T_t は液相温度 T_l で無次元化されており、 E_{coll} は傾向状態でのエネルギー流束を表す。

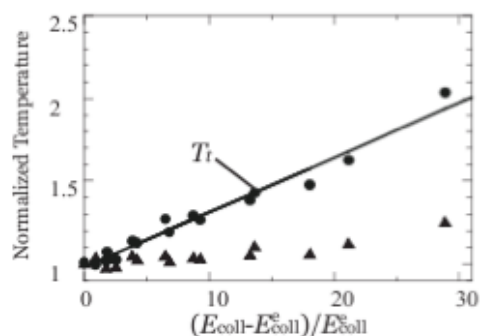


図3 法線方向温度と接線方向温度(低温)

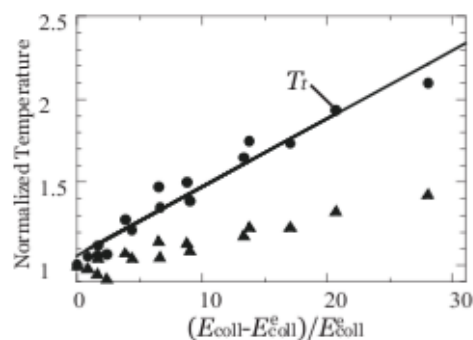


図4 法線方向温度と接線方向温度(高温)

③ 図3より T_t はエネルギー流束が大きくなるほど、その値が大きくなっていることがわかる。この T_t のエネルギー流束依存性は Ishiyama らの結果と定性的に一致している。 T_n も非平衡の度合いが大きくなるほど、わずかながらその値が変化していることが確認でき、非平衡の度合いが小さい場合、液相温度より低くなる領域があり単純な比例関係であるか不明である。図4は高温液相の場合で、エネルギー流束が増加すると T_n , T_t ともに低温液相の場合より変化することが分かる。

④ Enskog-Vlasov 方程式に基づき非平衡凝縮シミュレーションを行った結果、気液界面の気体論境界条件は Ishiyama らの結果と定性的に一致することが示された。また気体論境界条件は液相温度が高温の時、低温の場合より強い非平衡性を示した。

(2) 分子動力学シミュレーション

① 系が静止平衡状態となっているかの判断は、系内の各微小領域において、速度分布関数から確認する。図5に $X_{Ne}=0.1$ における速度分布関数を示す。液相、気相の両領域において温度 85 K の静止平衡分布(静止 Maxwell 分布)によく一致している。また、全ての系において、同様の結果が得られている。したがって、全ての系が静止平衡状態であると判断する。

② 図5に $X_{Ne}=0.1$ における密度 ρ の z 方向分布を示す。また、破線によってモル分率 M の分布もあわせて示す。モル分率は各検査体積に存在す

るアルゴンとネオンを合わせた分子数のうち、各成分の分子数が占める割合を表す。図の赤色の丸はアルゴンの密度である。左側の ρ が高い領域が液相、右側の ρ が低い領域が蒸気相、その間の密度が連続的に変化する領域が密度遷移層である。ここで、密度遷移層を定量的に評価するため、10-90 thickness によって遷移層厚さ δ を定義し、各系で δ の比較を行う。

③図 6 において青色の丸はネオンの密度を表しており、遷移層付近で極大値をとっていることがわかる。この極大値を ρ_{peak} 、極大値をとる位置を z_{peak} とする。モル比 X_{Ne} の増加にともない、アルゴンの密度遷移層厚さ δ は増加する。これは系に存在するネオンが増加することによって、ネオン分子がアルゴン液相の表面により多く吸着するためと考えられる。また、 X_{Ne} の増加とともに液相におけるアルゴンのモル分率は低下しているが、これは気相でネオンの分子数が増加することで気相圧力が高くなり、その結果として、液相に溶解するネオンの量が増加するためと考えられる。さらに、 X_{Ne} の増加とともにアルゴンの蒸気密度が高くなっていくことが確認できる。ただし、 $X_{Ne}=0.1$ の系は、温度が 85 K よりも若干高いために、 $X_{Ne}=0.2$ の系よりも蒸気密度が高くなっている。

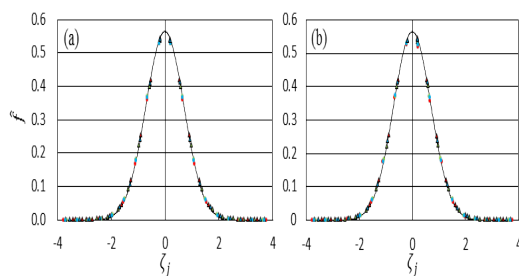


図 5 平衡状態の速度分子関数
(a) 液相, (b) 蒸気相

④次に、蒸発係数を求める際に必要となる平衡状態におけるアルゴンの質量流束を求める。文献(1)の定義にしたがい、液相から気相に向かうアルゴン分子の質量流束を J_{out} 、気相から液相に向かうアルゴン分子の質量流束を J_{coll} とする。系の蒸気相領域 $z^*=(z-Z_m)/\delta=3.0$ の位置において検査面を通過するアルゴン分子の個数から直接的に J_{out}

を求めた結果を表 4 に示す。なお、これらの結果はバルク蒸気相領域における検査面位置にはよらないこと、全ての系が平衡状態であるために $J_{out}=J_{coll}$ となることを確認している。

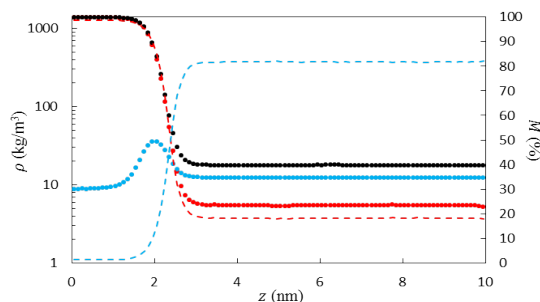


図 6 密度分布関数と分子数比

⑤ X_{Ne} の増加にともない、 J_{out} が増加していることを確認した。これは X_{Ne} の増加とともにアルゴンの蒸気密度が増加し、検査面を通過する分子数が増加するためである。実際、アルゴンの蒸気密度 ρ_v を用いて求めた J_{out} の理論値と分子運動から直接的に求めた J_{out} はよく一致しており、蒸気密度の増加が J_{out} の増加を引き起こしていることが理解できる。

⑥本研究では二成分系の蒸発・凝縮の研究に関する基礎として、アルゴン液膜とアルゴン-ネオン混合蒸気的二成分気液二相系の静止平衡状態に関する分子動力学シミュレーションを行った。モル比 $X_{Ne}=0.0, 0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5$ の6種類の系について密度遷移層やモル分率に関する検討を行った結果、モル比 X_{Ne} の増加にともない、ネオンの表面吸着によってアルゴンの密度遷移層厚さは増加し、遷移層におけるアルゴンのモル分率は低下することがわかった。また、モル比の増加によりアルゴンの蒸気相密度が増加し、その結果、液相から気相に向かうアルゴン分子の質量流束 J_{out} も増加することがわかった。

5. 主な発表論文等

[雑誌論文](計0件)

[学会発表](計4件)

- ① 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
年会講演会, 高知大学朝倉キャンパス, 高知
(2012年9月17日)
- ② 矢萩嵩人, 矢口久雄, 小林一道, 渡部正夫,
アルゴン液膜とアルゴン-ネオン混合蒸気の
気液平衡系に関する分子動力学解析, 日本
流体力学会年会講演会, 高知大学朝倉キャン
パス, 高知 (2012年9月18日)
- ③ 芳仲倫太郎, 小林一道, 渡部正夫, 円柱凝縮
相を過ぎる高速蒸気流の抗力に関する
DSMC シミュレーション, 日本流体力学会年
会講演会, 高知大学朝倉キャンパス, 高知
(2012年9月18日)
- ④ 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,
国立オリンピック記念青少年総合センター,
東京 (2012年12月18日)

6. 研究組織

(1) 研究代表者

渡部 正夫 (WATANABE MASAO)
北海道大学・大学院工学研究院・教授
研究者番号: 30274484

(2) 研究分担者

小林 一道 (KOBAYASHI KAZUMICHI)
北海道大学・大学院工学研究院・准教授
研究者番号: 80453140
矢口 久雄 (YAGUCHI HISAO)
群馬工業高等専門学校・機械工学科・助教
研究者番号: 20568521