

令和元年5月21日現在

機関番号：10101

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2016～2018

課題番号：16K06064

研究課題名(和文)2成分混合気体の気体論境界条件の決定とその応用

研究課題名(英文) Determination of kinetic boundary conditions for gas-vapor binary mixture and its application

研究代表者

小林 一道 (Kobayashi, Kazumichi)

北海道大学・工学研究院・准教授

研究者番号：80453140

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,700,000円

研究成果の概要(和文)：本研究は蒸気(凝縮性気体)と気体(非凝縮性気体)の混合気体に対する気体論境界条件を決定し、その境界条件を利用して、混相流れの解析、特に気泡の崩壊問題の解析に適用することである。本研究期間では、分子動力学法を用いて平衡状態における混合気体の気体論境界条件を構築した。また、得られた境界条件を用いて、気泡の崩壊問題に適用した。その結果、気泡が崩壊する際には、気液界面近傍に薄い非凝縮性気体の層が形成され、この層の影響で、蒸気の凝縮係数が著しく低くなることが示唆された。また、崩壊時の気泡内部の温度分布は、その内部に含まれるほんのわずかな非凝縮性気体の量に応じて変化することが明らかとなった。

研究成果の学術的意義や社会的意義

これまで蒸気分子の相変化現象に対して、その他の成分の分子の影響(例えば水分子の蒸発・凝縮現象に対する空気分子の影響)は明らかにされてこなかった。本研究より、非凝縮性気体分子が蒸気分子の蒸発・凝縮に大きな影響を及ぼすことが明らかとなった。これは学術的意義のみならず、医療やレーザーアブレーション技術などで見られるキャビテーション気泡崩壊現象の詳細な解析において有用な知見となる。

研究成果の概要(英文)：The aim of this study is to determine the kinetic boundary conditions for vapor (condensable gas) - gas (non-condensable gas) binary mixture. We also apply the boundary conditions for multi phase flow, especially for the analysis of bubble collapse problem.

In the present study period, molecular dynamics method was used to construct the kinetic boundary conditions for vapor-gas mixture at equilibrium. We also solved the problem of the bubble collapse using the boundary conditions obtained from the molecular dynamics simulation. As a result, it was suggested that a thin layer composed of non-condensable gas is formed in the vicinity of the gas-liquid interface when the bubble collapses, and it was indicated that the condensation coefficient becomes extremely low due to the influence of this layer. It was also revealed that the internal temperature field when bubble collapses was affected by a small amount of non-condensable gas contained in the bubble.

研究分野：分子流体力学

キーワード：気体論境界条件 蒸発・凝縮 気泡崩壊現象 キャビテーション 分子動力学 分子気体力学 凝縮係数

様式 C - 19、F - 19 - 1、Z - 19、CK - 19 (共通)

### 1. 研究開始当初の背景

気液界面において液体が蒸気になることを蒸発と呼び、蒸気が液体になることを凝縮と呼ぶ。この蒸発・凝縮現象は私たちの身近に起こる現象であり、理工学のみならず、環境学、化学、医学の分野においても重要な素過程の一つである。例えばキャピテーション気泡の激しい崩壊現象に対して、蒸発・凝縮現象が大きな寄与を与えることが知られている。また、近年のソノケミストリーに関する研究では、気泡の膨張・収縮運動に対して、蒸気の蒸発・凝縮のみならず非凝縮性気体（以下、気体と呼ぶ）の液体中への溶解現象が、その気泡の運動に重要となっていることが示されている。

蒸発・凝縮現象は、気液界面近傍における蒸気分子群の非平衡性によって引き起こされる現象である。このような分子群の非平衡性を持つ現象の解析に対して、速度分布関数を用いて記述される分子気体力学（支配方程式は Boltzmann 方程式）は有用であり、分子気体力学解析を用いて蒸発・凝縮を伴う蒸気の流れについて多くの研究がなされてきた（例えば Sone, *Molecular Gas Dynamics*, 2007）。ここで分子気体力学解析には気液界面における境界条件（以下「気体論境界条件」）が必要となるが、その気体論境界条件には未知パラメータが含まれている。このパラメータは一般に凝縮係数と呼ばれ、気液界面を流入出する質量流束と関係しており、0 以上 1 以下の値として定義されている。近年まで、多くの研究者がこの値について研究してきたが、その凝縮係数の正確な値は決定されておらず、それゆえに気体論境界条件も決定されていなかった。そのため「気体や液体の状態（圧力や温度）が指定された非平衡条件下で、その気液界面を通過する質量・運動量・エネルギー輸送量を求めなさい」という極めてシンプルな学術的問いに対する明確な解答は無かったと言える。

### 2. 研究の目的

本申請課題は、多成分混合気体【凝縮性気体（蒸気）と非凝縮性気体（気体）】に対して、気液界面における蒸気の蒸発・凝縮および気体の溶解を考慮した新しい気体論境界条件を分子動力学法により決定し、混合気体に接した気液界面相変化の物理を解明することを一つ目の目的としている。二つ目の目的は、決定された気体論境界条件を用いて気液二相混相流れに適用することである。本申請課題期間中では蒸気と非凝縮性気体で満たされた気泡の崩壊問題に適用する。

### 3. 研究の方法

本課題研究では2つの研究から成る。これらについて以下に説明する。

課題1：本課題では分子動力学法により、混合気体の気液界面における境界条件（気体論境界条件）の構築を行う。気液界面における気体論境界条件は、速度分布関数の形で指定する必要があり、また、その境界条件は液体から気体に出ていく分子群の情報から構成される。すなわち、蒸気のみ単一成分の場合には、液体から【蒸発】する分子と【反射】する分子の情報が必要となる（図1）。蒸発分子・反射分子・凝縮分子を区別するために、これまで多くの手法や概念が考えられてきた。特に Ishiyama ら (*Phys. Fluids*, 2004) は、蒸発する分子は液体温度のみの影響を受けて、気体側に自発的に蒸発すると

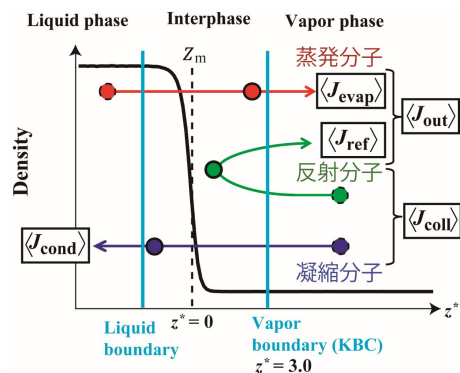


図1：気液界面における分子の選別法  
(図中の KBC は気体論境界条件)

いう概念を提唱した。我々は、この Ishiyama らの真空蒸発のアイデアを基とし、さらに Meland ら (Phys. Fluids, 2005) の方法を取り入れ、蒸発分子と反射分子を見分ける方法を提案した。本研究ではこの方法を用いて混合気体の気体論境界条件の構築を目指す。具体的には以下の形で平衡・非平衡の気体論境界条件は構築されると考えている (上添え字  $v$  は蒸気分子,  $g$  は気体分子)。

$$f^v(T_w, \xi_i, \chi) = [\beta^v(T_w, \xi_i, \chi) \rho^v(T_w, \chi) + (1 - \beta^v(T_w, \xi_i, \chi)) \sigma^v] F(T_w, \xi_i) \quad (1)$$

$$f^g(T_w, \xi_i, \chi) = [\beta^g(T_w, \xi_i, \chi) \rho^g(T_w, \chi) + (1 - \beta^g(T_w, \xi_i, \chi)) \sigma^g] F(T_w, \xi_i) \quad (2)$$

ここで  $f$  は気体論境界条件であり速度分布関数として定義される。 $\beta$  は凝縮係数,  $\rho^v$  は飽和蒸気密度 (上添え字  $g$  の場合は代表密度),  $\sigma$  は反射分子から成る密度,  $F$  は規格化された速度分布関数 (Maxwell 分布) である。これら各量は数値計算により取得可能である。また,  $T_w$  は液体温度,  $\xi_i$  は分子速度 (3 次元), そして  $\chi$  は気体分子の液体への溶解度を示している。

このように、気体論境界条件を、液体温度  $T_w$  のみならず気体の溶解度  $\chi$  の関数と定義して、これらをパラメータとして解析を行うことで、多様な溶解度・液体温度に対する気体論境界条件の決定を行う。本研究のオリジナリティの一つは、気体の溶解を考慮した気体分子に対する境界条件 [式 (2)] を式 (1) と同じ形の関数形として与えることであり、分子気体力学解析の際に容易に取り扱うことが可能となる。本課題では、気液平衡状態において上記関数形を求める。

課題 2: 本課題では、課題 1 で求めた気体論境界条件を用いて、混相流体力学の諸問題へ応用する。1 つ目の例として気泡崩壊問題へ展開する。気体内部気体に対して分子気体力学解析を行い、気泡外部液体に対しては流体力学解析 (気泡力学解析) を行う。問題設定として、物理空間として 1 次元問題を仮定し、単一球形気泡の問題を考える。気体内部の混合気体 (蒸気と非凝縮性気体) に対しては Andries-Aoki-Perthame モデルを用いる。また、気泡壁の運動 (気泡外部液体) に対しては Fujikawa-Akamatsu の式を適用し直接数値解析を行う。本解析を用いて、気泡の崩壊における非凝縮性気体の影響を明らかにする。

#### 4. 研究成果

以下に本研究によって得られた研究成果を示す。

課題 1: 分子動力学法によって得られた気体論境界条件は当初の予定通り上記式 (1) および式 (2) の形で得ることができた。また境界条件中の凝縮係数に関しても、溶解度の関数として取得した。その結果を図 2 に示す。ここでは蒸気分子をアルゴンとし、非凝縮性気体分子をネオンとしている。この結果より、気体中の非凝縮性気体が多くなるほど、言い換えると、液体中の非凝縮性気体の溶解量が多くなるほど、蒸気の凝縮係数が小さくなること

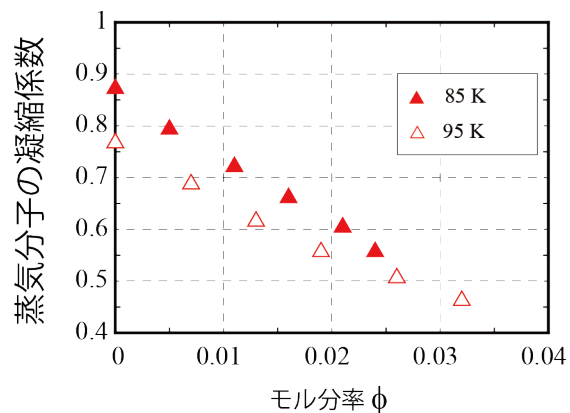


図 2: 液体中の非凝縮性気体のモル分率に対する蒸気の凝縮係数

が明らかとなった。

課題2：課題1で得られた結果を用いて、蒸気と非凝縮性気体で満たされた気泡崩壊の問題に適用した結果を示す。

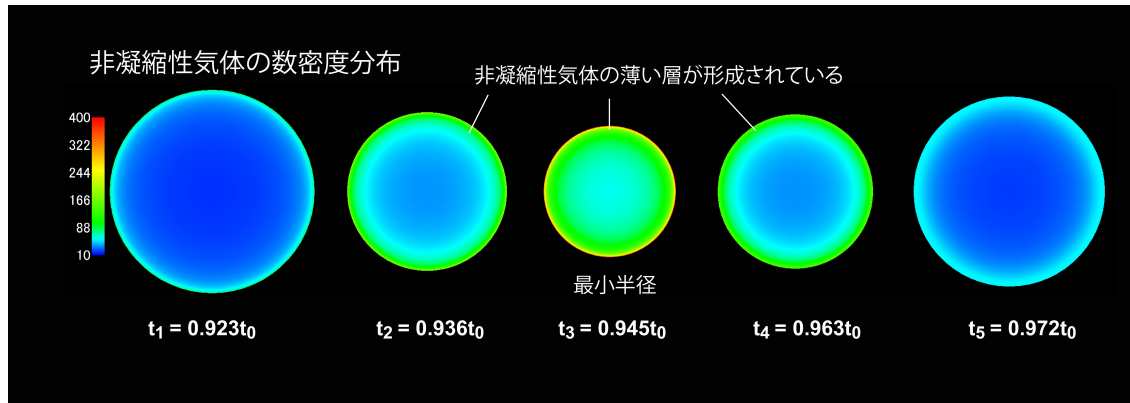


図3：気泡崩壊時における非凝縮性気体の数密度分布

気泡崩壊時の気泡内部における非凝縮性気体の数密度分布を図3に示す。図3より、気泡崩壊時に気液界面近傍に非凝縮性気体が溜まり、薄い層ができていることがわかる。この結果より、課題1の結果と合わせて考えると、気泡崩壊時には非凝縮性気体の影響で、凝縮係数が著しく減少することが示唆される。

また、同じ手法の数値解析によって、蒸気で満たされた気泡にほんのわずかな非凝縮性気体が入っていると、その非凝縮性気体の量に応じて気泡崩壊時の内部温度分布が著しく変化することが明らかとなった。この結果は、崩壊時の気泡内部における衝撃波発生の有無に関する重要な知見となっており、本研究より、ほんのわずかな非凝縮性気体があると、気泡内部には衝撃波が発生しにくくなることが示唆された。

## 5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕(計4件)

Hirofumi Tabe, Kazumichi Kobayashi, Hisao Yaguchi, Hiroyuki Fujii, Masao Watanabe, Influence of liquid-solid intermolecular force on levitation of impacting nanodroplet, Heat and Mass Transfer, 査読有、55 巻、2019、993-1003、DOI: 10.1007/s00231-018-2474-4

Kazumichi Kobayashi, Takahiro Nagayama, Masao Watanabe, Hiroyuki Fujii, Misaki Kon, Molecular gas dynamics analysis on condensation coefficient of vapour during gas-vapour bubble collapse, Journal of Fluid Mechanics, 査読有、856 巻、2018、1045 - 1063 DOI: <https://doi.org/10.1017/jfm.2018.722>

Kazumichi Kobayashi, Kiyofumi Sasaki, Misaki Kon, Hiroyuki Fujii, Masao Watanabe, Kinetic boundary conditions for vapor-gas binary mixture, Microfluidics and Nanofluidics, 査読有、21 巻 53、2017、1 - 13 DOI: 10.1007/s10404-017-1887-6

Kazumichi Kobayashi, Kiyofumi Sasaki, Misaki Kon, Hiroyuki Fujii, Masao Watanabe, Molecular dynamics simulation on kinetic boundary conditions for vapor-gas binary mixture, AIP Conference Proceedings, 査読有、1786 巻、2016、1 - 7 DOI: <https://doi.org/10.1063/1.4967622>

〔学会発表〕(計 10 件)

山本 恭平, 小林 一道, 渡部 正夫, 藤井 宏之, 今 美沙紀, 高比良 裕之、少量の非凝縮性気体を含む蒸気気泡内の非平衡気体流れに関する数値計算、日本流体力学会年会 2018、2018

Kyohei Yamamoto, Kazumichi Kobayashi, Masao Watanabe, Hiroyuki Fujii, Misaki Kon, Hiroyuki Takahira、Molecular Gas Dynamics Analysis of Vapor-Gas Flow inside Collapsing Bubble、31st International Symposium on Rarefied Gas Dynamics、2018

田部 広風海, 小林 一道, 矢口 久雄, 藤井 宏之, 渡部 正夫、高温壁の表面粗さが衝突液滴の浮遊へ与える影響についての分子動力学解析、混相流シンポジウム 2018、2018

田部 広風海, 小林 一道, 矢口 久雄, 藤井 宏之, 渡部 正夫、分子動力学法を用いた高温壁へ衝突するナノ液滴の浮遊メカニズム解析、第 9 回マイクロ・ナノ工学シンポジウム、2018

田部 広風海, 小林 一道, 矢口 久雄, 藤井 宏之, 渡部 正夫、高温壁へ衝突する液滴の浮遊メカニズムに関する分子動力解析、日本機械学会第 96 期流体工学部門、2018

Kazumichi Kobayashi, Misaki Kon, Takahiro Nagayama, Hiroyuki Fujii, Masao Watanabe, Hiroyuki Takahira、Japan-U.S. Seminar on Two-Phase Flow Dynamics 2017、2017

小林 一道、気液界面での熱・物質輸送を考慮したマイクロバブル崩壊現象の分子流体力学解析、日本機械学会年次大会 2017 (招待講演) 2017

Kazumichi Kobayashi, Kiyofumi Sasaki, Misaki Kon, Hiroyuki Fujii, Masao Watanabe、Molecular dynamics simulation on kinetic boundary conditions of gas-vapor binary mixture、30th International Symposium on Rarefied Gas Dynamics、2016

小林 一道、気液界面のナノスケール熱流体力学、日本機械学会 2016 年度年次大会 (招待講演) 2016

森川 昌太郎, 立藏 祐樹, 小林 一道, 藤井 宏之, 渡部 正夫, 佐々木 浩一、蒸発・凝縮を伴う球形気泡の崩壊現象における凝縮係数の影響、第 30 回数値流体力学シンポジウム、2016

〔その他〕

ホームページ等

熱流体力学研究室 HP: <https://labs.eng.hokudai.ac.jp/labofluid/>

6. 研究組織

(1) 研究分担者

研究分担者氏名: 渡部 正夫

ローマ字氏名: (WATANABE, Masao)

所属研究機関名: 北海道大学

部局名: 大学院工学研究院

職名: 教授

研究者番号 (8 桁): 30274484

研究分担者氏名: 藤井 宏之

ローマ字氏名: (FUJII, Hiroyuki)

所属研究機関名: 北海道大学

部局名: 大学院工学研究院

職名: 助教

研究者番号 (8 桁): 00632580

(2) 研究協力者

研究協力者氏名: 今 美沙紀

ローマ字氏名: KON Misaki