

## 科学研究費助成事業 研究成果報告書

令和 5 年 5 月 18 日現在

機関番号：10101

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2020～2022

課題番号：20K04277

研究課題名(和文) 混合気体に接した非平衡気液界面相変化機序の解明と分子混相流体力学への展開

研究課題名(英文) Elucidation of non-equilibrium phase change at gas-liquid interface mechanism for mixture gas and its application to molecular multi-phase fluid dynamics

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) 3,200,000円

研究成果の概要(和文)：本研究では、混合気体(蒸気分子と非凝縮性気体分子)に接した液体表面における気体論境界条件について、分子動力学法や分子運動論解析を用いて、特に気液非平衡状態における蒸発係数や凝縮係数の値を決定し、気体論境界条件の決定を行った。

この結果、凝縮係数や蒸発係数の値は、気液平衡状態・非平衡状態に関わらず非凝縮性気体分子の数の影響を受けることが確認された。この理由の一つとして、非凝縮性気体が気相中に多い場合、気液界面近傍における非凝縮性気体の数も増加する。その結果、液体から蒸発した蒸気分子が非凝縮性気体分子と衝突を起こしやすくなり、後方散乱することで再度液体に戻る効果があることが示唆された。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本研究は、気液界面における熱・物質輸送について重要な因子となる蒸発・凝縮係数を分子シミュレーションを用いて求めた。特に、これまで未解明であった非平衡状態における混合気体に接した液面上の蒸発・凝縮係数の値を決定し、混相流体力学にその知見を展開することを目指している。本研究結果より、平衡状態・非平衡状態に関わらず、蒸発係数や凝縮係数の値は液体温度と非凝縮性気体分子の数で整理できることが明らかとなった。これは、様々な種類の分子について蒸発係数や凝縮係数の値が必要となった場合、気液平衡系のみを解析することで蒸発係数や凝縮係数を決定できることを示唆しており、応用上重要な知見である。

研究成果の概要(英文)： In this study, the kinetic boundary conditions at liquid surfaces in contact with gas mixtures (condensable gas and non-condensable gas) were determined by using molecular dynamics and mean-field kinetic theory analysis to determine the values of the evaporation and condensation coefficients, especially in the gas-liquid non-equilibrium state.

As a result, it was confirmed that the values of condensation and evaporation coefficients are affected by the number of non-condensable gas molecules regardless of the gas-liquid equilibrium or nonequilibrium state. One reason for this is that the number of non-condensable gas molecules near the gas-liquid interface increases when there is a large amount of non-condensable gas in the gas phase. As a result, vapor molecules evaporating from the liquid are more likely to collide with non-condensable gas molecules, and backscattering is suggested to have the effect of returning to the liquid again.

研究分野：流体力学

キーワード：気体論境界条件 蒸発係数 凝縮係数 分子動力学 分子運動論 Enskog-Vlasov方程式

## 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、様々な分野においても重要な素過程の一つである。

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。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蒸発係数・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。しかし、特に蒸気(凝縮性気体)と気体(非凝縮性気体)から成る混合気体については、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。

## 2. 研究の目的

本研究では、混合気体に接した液体表面における気体論境界条件について、分子動力学法や分子運動論解析を用いて、特に気液非平衡状態における蒸発係数や凝縮係数の値を決定し、気体論境界条件の決定を行うことを目的の一つとしている。また、これら研究から得られた知見を用いて、キャピテーション気泡の崩壊に代表される混相流体力学への展開を行うことも目的の一つとしている。

## 3. 研究の方法

### (1). 分子動力学法による蒸発係数の決定

蒸気と非凝縮性気体からなる混合気体に接した液体の蒸発現象について、非平衡分子動力学解析を行った。計算系を図1に示す。緑色は非凝縮性気体分子を示し、青色は凝縮性気体を示している。計算系には蒸気分子から構成される液相があり(図1左側)、それに接して蒸気分子と非凝縮性分子から構成される気相がある。このような計算系を構築し、液相から出ていく分子の運動に注目することで蒸気分子の蒸発係数の値を取得した。蒸発係数は、液相近傍の蒸気相に仮想面を設定し、その位置を通過した分子数を数え、そこから蒸発分子の質量流束を求めることで取得した。蒸気気体としては Ar 分子を用いており、非凝縮性気体は Ne 分子を用いた。系の温度は 85K とし、バルク液相およびバルク気相には各相の温度が一定となるよう温度制御を用いて計算を行った。本計算系では、気相と液相の温度が一樣に 85K の結果について示すが、この計算では液相と気相の温度が異なる場合の計算も可能となっており、多様な非平衡系を実現することができる。

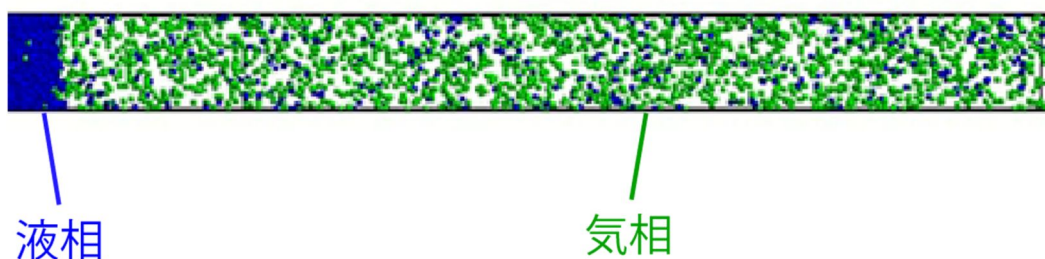


図1. 気液非平衡分子動力学シミュレーション。 は非凝縮性気体分子を示し、 は蒸気(凝縮性気体分子)を示している。

### (2). 分子運動論解析による蒸発係数・凝縮係数の決定

分子運動論解析を用いた解析(Enskog-Vlasov 方程式を用いた解析)より、蒸気分子および非凝縮性気体分子から成る多成分系の解析を行った。計算系の模式図を図2に示す。図の左側に高温の液膜があり、気相を挟んで右側に低温の液膜があるものとする。青丸は非凝縮性気体分子を示し、赤丸は蒸気分子を示す。これら液膜の温度差によって、高温液膜表面では液体の蒸発が起こり、低温液膜では蒸気の凝縮が起こる。この蒸発と凝縮によって、液体に挟まれた気相中には高温から低温へと流れが起こる。つまり、左側の液体から右側の液体へと質量が輸送される。このような系を設定し、各液膜温度や気相中に含まれる非凝縮性気体分子の数を変えることで、様々な非平衡状態を実現しシミュレーションを行い、蒸発係数や凝縮係数の決定を行った。

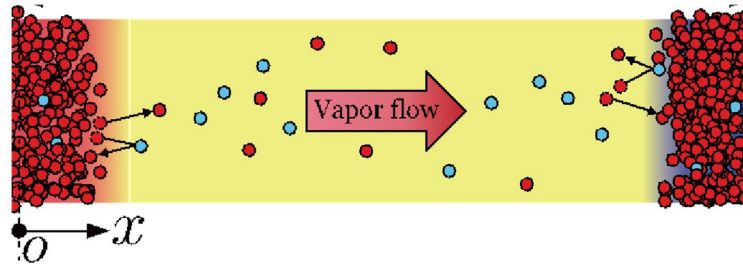


図2. 気液非平衡分子動力学シミュレーション. は非凝縮性気体分子を示し, は蒸気分子を示している.

### 3. 研究成果

#### (1). 分子動力学法による蒸発係数の決定

図1で示した計算系について, 気相中の非凝縮性気体分子の数や蒸気分子の数を様々変え, 分子動力学シミュレーションを行った. その結果, 気相中の凝縮性気体分子の数を変えても, 蒸発係数の値は変わらないことが確認された. また, 気相中の非凝縮性気体分子の数を多くすると, その数に応じて蒸発係数の値は減少することが確認された. この結果より, 今回指定した温度において(85K), 蒸発係数の値は, 気液平衡状態・非平衡状態に関わらず非凝縮性気体分子の数の影響を受けることが確認された. この理由の一つとして, 気相中の非凝縮性気体分子数が多いとき, 当然ながら気液界面近傍における非凝縮性気体分子の数が増加する. その結果, 液体から蒸発した蒸気分子が非凝縮性気体分子と衝突を起こしやすくなり, 後方散乱を起こすことで再度液体に戻る効果があることが示唆された. この結果の詳細については Molecular dynamics simulation of evaporation coefficient of vapor molecules during steady net evaporation in binary mixture system, International Journal of Heat and Mass Transfer, 188 122663 (2022)の論文を参照されたい.

#### (2). 分子運動論解析による蒸発係数・凝縮係数の決定

図2で示した計算系について, 分子運動論解析を用いたシミュレーションを用いた結果, 上述の(1)の研究と同様に, 気相中の非凝縮性気体分子の数を多くすると, その数に応じて凝縮係数・蒸発係数の値は減少することが確認された. また, 液体温度も変更し計算を行ったところ, 液相温度が高くなるほど, 凝縮係数・蒸発係数の値は減少することが確認された. これより, 蒸発係数は液相温度と気液界面近傍における非凝縮性気体の数の影響を受けることがわかった. この結果の詳細については, Mean-field kinetic theory analysis of vapor flow between evaporating and condensing interfaces in the presence of non-condensable gas molecules, Physics of Fluids 33 122017 (2021)の論文を参照されたい.

更に, キャピテーション気泡の崩壊問題に代表されるような超音速で移動する液面上においても上記結果が使用できるかについて, 分子運動論解析を用いたシミュレーションを行い確認した. この解析の結果, 上記(1), (2)で得られた知見は, 高速で移動する液面上においても成立することが確認された. この結果については, Vapor condensation induced by fast-moving liquid film in the presence of noncondensable gas molecules, International Communications in Heat and Mass Transfer 142 106622 (2023)の論文を参照されたい. また, 気体が超高压になった場合, 蒸気分子の蒸発や凝縮はほぼ完全に抑制され, あたかも非凝縮性気体分子として振る舞うことが確認された. これについては, Evaporation coefficient and condensation coefficient of vapor under high gas pressure conditions, Scientific Reports 10 8143 (2020)の論文を参照されたい. 更に, 気液界面における多数の分子の運動を追跡しデータ解析を行うことで, 凝縮する分子や気液界面で反射する分子の特徴を調べた. これについては, Molecular dynamics study on characteristics of reflection and condensation molecules at vapor-liquid equilibrium state, PLOS ONE 16 e0248660 (2021) の論文を参照されたい.

## 5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計5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 4件）

1. 著者名 Ohashi Kotaro, Kobayashi Kazumichi, Fujii Hiroyuki, Watanabe Masao	4. 巻 33
2. 論文標題 Mean-field kinetic theory analysis of vapor flow between evaporating and condensing interfaces in the presence of non-condensable gas molecules	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Physics of Fluids	6. 最初と最後の頁 122017 ~ 122017
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/5.0073118	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, Fujii Hiroyuki, Watanabe Masao	4. 巻 188
2. 論文標題 Molecular dynamics simulation of evaporation coefficient of vapor molecules during steady net evaporation in binary mixture system	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 International Journal of Heat and Mass Transfer	6. 最初と最後の頁 122663 ~ 122663
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2022.122663	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 Ohashi Kotaro, Kobayashi Kazumichi, Fujii Hiroyuki, Watanabe Masao	4. 巻 10
2. 論文標題 Evaporation coefficient and condensation coefficient of vapor under high gas pressure conditions	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Scientific Reports	6. 最初と最後の頁 8143 ~ 8143
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41598-020-64905-5	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 Tabe Hirofumi, Kobayashi Kazumichi, Fujii Hiroyuki, Watanabe Masao	4. 巻 16
2. 論文標題 Molecular dynamics study on characteristics of reflection and condensation molecules at vapor-liquid equilibrium state	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 PLOS ONE	6. 最初と最後の頁 e0248660
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1371/journal.pone.0248660	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 Ohashi Kotaro, Kobayashi Kazumichi, Fujii Hiroyuki, Watanabe Masao	4. 巻 142
2. 論文標題 Vapor condensation induced by fast-moving liquid film in the presence of noncondensable gas molecules	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 International Communications in Heat and Mass Transfer	6. 最初と最後の頁 106622 ~ 106622
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.icheatmasstransfer.2023.106622	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 -

〔学会発表〕 計12件 (うち招待講演 1件 / うち国際学会 2件)

1. 発表者名 青木 康汰、田部 広風海、小林 一道、藤井 宏之、渡部 正夫
2. 発表標題 壁と液体に挟まれた希薄クエット流 れに関する分子動力学解析
3. 学会等名 日本流体力学会 年会2022
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 青木 康汰、田部 広風海、小林 一道、藤井 宏之、渡部 正夫、奈良 駿希、高嶋 英巖
2. 発表標題 せん断応力が作用する液面の気体論境界条件に 関する分子動力学解析
3. 学会等名 第36回数値流体力学シンポジウム
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Kotaro Ohashi, Kazumichi Kobayashi, Hiroyuki Fujii, Masao Watanabe
2. 発表標題 Condensation Induced by Rapidly Moving Liquid Film Surrounded by Vapor and Non-condensable Gas
3. 学会等名 32nd International Symposium on Rarefied Gas Dynamics (RGD32) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 村松 幹大、大橋 広太郎、小林 一道、藤井 宏之、渡部 正夫
2. 発表標題 混合気体を挟んだ二液膜の衝突・分離に関する数値解析
3. 学会等名 第35回数値流体力学シンポジウム
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 青木康汰、大橋 広太郎、小林 一道、藤井 宏之、渡部 正夫
2. 発表標題 希薄気体のクエット流れと液面気体論境界条件 に関する分子動力学解析
3. 学会等名 第35回数値流体力学シンポジウム
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 大橋 広太郎、小林 一道、藤井 宏之、渡部 正夫
2. 発表標題 平均場運動理論に基づいた蒸気と非凝縮性気体から成る二成分系の二液膜問題の数値解析
3. 学会等名 日本機械学会 2021年度年次大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Kotaro Ohashi, Kazumichi Kobayashi, Hiroyuki Fujii, Masao Watanabe
2. 発表標題 Mean-Field Kinetic Theory Analysis of Evaporation Coefficient and Condensation Coefficient of Vapor
3. 学会等名 Pre-RGD32 Workshop (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 小林 一道
2. 発表標題 相変化を伴う気液界面ダイナミクスのマルチスケール解析
3. 学会等名 水の先進理工学第183委員会（招待講演）
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 村松 幹大、小林 一道、藤井 宏之、渡部 正夫
2. 発表標題 レーザーアブレーション中に発生する気泡の膨張/収縮に関する数値解析
3. 学会等名 日本機械学会 第98期 流体工学部門 講演会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 田部 広風海、小林 一道、藤井 宏之、渡部 正夫
2. 発表標題 非凝縮性気体が液膜の非平衡蒸発へ与える影響に関する分子動力学解析
3. 学会等名 日本機械学会 第98期 流体工学部門 講演会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 大橋 広太郎、小林 一道、藤井 宏之、渡部 正夫
2. 発表標題 平均場運動論に基づいた温度の異なる二液膜間の混合気体流れに関する数値シミュレーション
3. 学会等名 日本流体力学会 年会2020
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 田部 広風海、小林 一道、藤井 宏之、渡部 正夫
2. 発表標題 多成分混合系における液膜の非平衡蒸発 に関する分子動力学解析
3. 学会等名 第34回数値流体力学シンポジウム
4. 発表年 2020年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

北海道大学 工学研究院 熱流体物理学研究室 <a href="https://tfp.eng.hokudai.ac.jp/">https://tfp.eng.hokudai.ac.jp/</a>
--

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
研究分担者	藤井 宏之  (Fujii Hiroyuki)  (00632580)	北海道大学・工学研究院・准教授    (10101)	
研究分担者	渡部 正夫  (Watanabe Masao)  (30274484)	北海道大学・工学研究院・教授    (10101)	

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
---------	---------