

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 28 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：2013～2015

課題番号：25820038

研究課題名(和文) 気体分子運動論による気液二相流体の高精度計算手法の構築と界面ダイナミクスへの展開

研究課題名(英文) Numerical method for vapor-liquid two phase flows based on kinetic theory of gases and development of interfacial dynamics

研究代表者

小林 一道 (Kobayashi, Kazumichi)

北海道大学・工学(系)研究科(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)：本研究は気体分子運動論を用いて気液界面の気体論境界条件(Boltzmann方程式に対する気液界面の境界条件)を決定することを目的としている。更に、本申請研究により得られた気体論境界条件を用いて、キャビテーション気泡の崩壊などに代表される気液二相流の数値解析を行う。本申請研究にて、Enskog-Vlasov方程式を基とした数値計算(Enskog-DSMC法)を行うことで、蒸発・凝縮が起きている気液界面の気体論境界条件が液体温度のみで指定されることを示した。更にこの結果を用いて、流体力学方程式に適用可能な気液界面の境界条件を提案した。

研究成果の概要(英文)：The aim of this study is to determine the kinetic boundary condition for the Boltzmann equation at a vapor-liquid interface during net evaporation or condensation. By using the constructed kinetic boundary conditions in the present study, we simulate vapor-liquid two-phase flows with net evaporation or condensation, e.g., cavitation bubble collapse with phase change. From this results, we shows that the kinetic boundary conditions at vapor-liquid interfaces during net evaporation and condensation are the functions of liquid temperature based on the numerical analysis of the Enskog-Vlasov equation (Enskog-DSMC method). Furthermore, we propose the boundary condition for the fluid-dynamic-type equations at a vapor-liquid interface during net evaporation and condensation.

研究分野：流体工学

キーワード：気体論境界条件 蒸発・凝縮 気液界面 Boltzmann方程式 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、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、キャビ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果たすことが知られている(Fujikawa & Akamatsu, 1980)。また、近年では高速液滴を含む蒸気噴流による半導体洗浄装置の開発が行われており(真田ら, 2010)、液滴界面の蒸気の凝縮効果が洗浄効率の向上に寄与していると予想されている。

蒸発・凝縮現象は、気液界面近傍における蒸気分子群の運動の非平衡性によって引き起こされる現象である。このような分子運動の非平衡性を持つ現象に対して、速度分布関数の支配方程式である Boltzmann 方程式を基とする分子気体力学は非常に有用であり、これを用いて蒸発・凝縮を伴う気体の流れについて多くの研究がなされてきた(Sone, 2007)。ここで分子気体力学には気液界面における境界条件(以下、「気体論境界条件」)が存在するが、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・凝縮係数と呼ばれている(蒸発・凝縮係数とも0以上1以下の値をもつ)。

これまでも多くの研究者が蒸発係数・凝縮係数の値を求めてきたが、得られた値はほぼ0というものから1に十分近いというものまであり、そのばらつきは大きい(例えば水の蒸発係数・凝縮係数に関するレビュー論文: Marek & Straub, 2001)。また、近年でも多くの研究者が、分子動力学法によってこの蒸発係数や凝縮係数の値の決定を行ってきたが、未だその論争に決着はついていない。このため、気液界面において、工学で重要な物理量である質量・運動量・エネルギーの輸送量を理論の枠組みのみで正確に見積もるこ

とは現在のところ困難な状況である。

2. 研究の目的

「1. 研究開始当初の背景」にて述べたように、現在のところ気体論境界条件に含まれる蒸発係数・凝縮係数の正確な値がわかっていない。この背景には、蒸発・凝縮現象が分子運動の非平衡性に起因しているため、実験を用いた測定の困難さがあげられる。また、個々の分子運動を数値解析することが可能な分子動力学法も、現在のところ取り扱える分子数には限りがあり(一般的なハイパフォーマンス コンピュータ程度で数万個程度)、正確な蒸発係数・凝縮係数の値の決定が難しい状況にあると言える。ここで研究申請者は、気体分子運動論に着目し、シンプルな分子(Sutherland ポテンシャルで記述される単原子分子)ではあるが、数百万個程度のサンプル分子を用意に取り扱うことができる Enskog-Vlasov 方程式系を基とした Enskog-DSMC 法を用いて蒸発係数・凝縮係数の決定を行うことで、気体論境界条件の決定を行うことを第一の目的としている。さらに、得られた結果を用いて、界面相変化現象を伴う気泡・液滴ダイナミクスの解析を行うことを第二の目的としている。この研究によって、分子動力学計算では容易に取り扱うことのできないマイクロ秒(μs)、マイクロメートル(μm)オーダーの時空間スケール現象を取り扱うことが可能となる(例えば、キャビテーション気泡の激しい崩壊現象や蒸気雰囲気中の高速液滴衝突現象などの工業上有用な物理現象)。つまり、申請者は多様な時空間スケールの物理が内包される混相流体のダイナミクスに対して、分子スケールと連続体スケールを一意的に取り扱うことが可能な計算手法を構築し、混相流体の力学に対して新たなマルチスケール展開を切り開くことを最終的な目的としている。

3. 研究の方法

(1) ここでは気体分子運動論を用いた気液界面における気体論境界条件の決定法について述べる．以下に本研究の問題設定の模式図を示す．

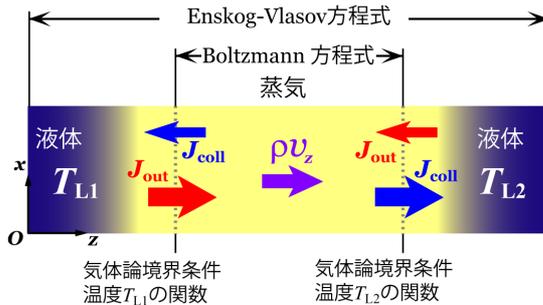


図 1：本研究の問題設定

図の左側には高温の液体(T_{L1})があり，図の右側に低温の液体(T_{L2})があり，中央には蒸気で満たされた領域がある問題を考える．この 2 つの液体は温度差があるため($T_{L1} > T_{L2}$)，この温度差によって，高温液滴の界面では液体の蒸発が起こり，低温液滴の界面では蒸気の凝縮が起こる．蒸発・凝縮によって，蒸気の領域には左から右に向かう蒸気の流れが起こる．通常，蒸発・凝縮によって液体の温度は変化するが，この問題では一定として取り扱うため，蒸気の流れは定常となり，高温液体から低温液体に運ばれる単位時間・単位面積当たりの質量 (ρv_z)は蒸気中で一様となる．

(2) 上述(1)の問題に関して 液体と気体の双方に対して，Enskog-Vlasov 方程式を用いて数値解析を行う．計算手法は，数値解析法の一つである Enskog-DSMC 法を用いて行う．この数値解析より，高温液体から低温液体へ運ばれる単位時間・単位面積当たりの質量(質量流束： ρv_z)の情報を取得する．次に，この Enskog-Vlasov 方程式で得られた質量流束 (ρv_z)を用いて，蒸気領域に対して Boltzmann 方程式の解析を行う(図 1 参照)．この際，Enskog-Vlasov 方程式で得られた質量流束 (ρv_z)は，気液界面の質量保存則を考慮し，Boltzmann 方程式に対する気液界面の境界

条件として使用する．この Boltzmann 方程式の解析で得られた結果(気体の速度分布や温度分布など)と Enskog-Vlasov 方程式で得られた結果とを比較することで，Boltzmann 方程式の境界条件の妥当性の検証をしながら，蒸発係数および凝縮係数の決定を含めた気体論境界条件の構築を行う．

4. 研究成果

(1) Enskog-Vlasov 方程式の計算から得られた気体の巨視量の空間分布

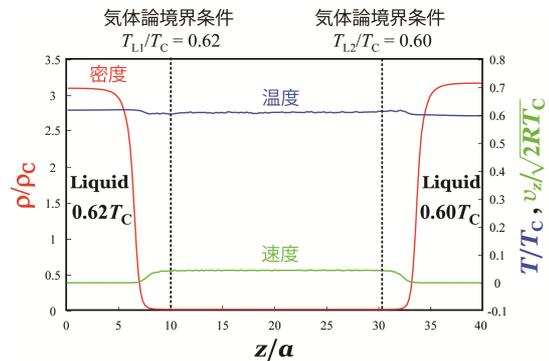


図 2：Enskog-Vlasov 方程式計算から得られた液体・気体の巨視量の分布

図 2 に Enskog-Vlasov 方程式から得られた液体・気体の巨視量の空間分布を示す．赤い線が密度分布，青い線が温度分布，そして緑の線が速度分布を示している．左側の密度が高い領域が高温の液体($T_{L1}/T_c=0.62$, T_c は臨界温度)であり，右側の密度が高い領域が低温の液体($T_{L1}/T_c=0.60$)を示している．この温度差によって，高温液体側界面では液体の蒸発が起こり，低温側界面では蒸気の凝縮が起こる．また，これら蒸発・凝縮によって，高温側界面から低温側界面に向かい蒸気の流れが起こる．このため，各液体に挟まれた蒸気の領域には，正の値の速度分布があることがわかる．また，蒸気中には温度や密度にも分布が生じていることがわかる．温度場については，蒸発・凝縮界面に挟まれた蒸気領域中で見られる特殊な分布となっており，その温度分布は逆温度勾配現象と呼ばれているが，これに関しては本研究の対象外となっているため

に、これ以上の言及はしない。この結果より、蒸気領域中において ρv_z の空間分布を調べたところ、すべての場所で ρv_z の値は一樣となっており、計算系が定常状態となっていることが確認された。高温液体および低温液体の温度を変えて、このような計算を多数行い、色々な温度差における ρv_z の値を取得した。

(2) Enskog-Vlasov 方程式の計算から得られた質量流束と非平衡度との関係

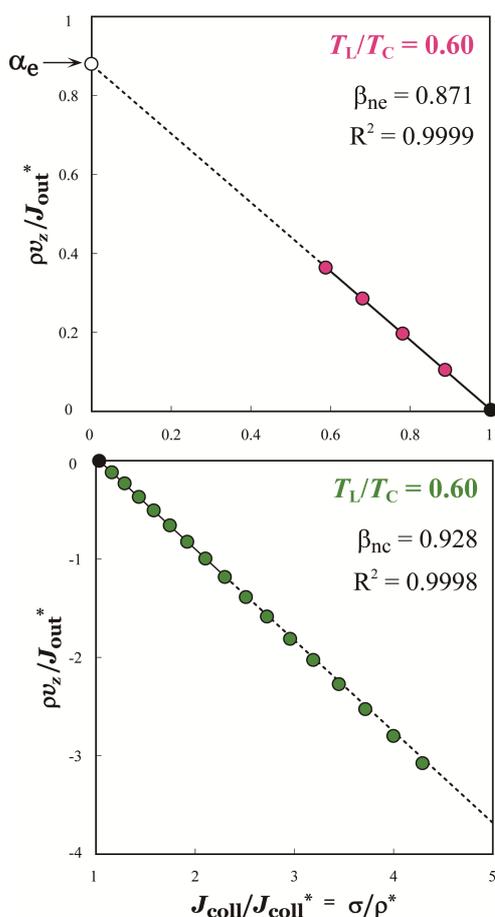


図 3: Enskog-Vlasov 方程式計算から得られた質量流束と非平衡度との関係

図 3 に非平衡度(横軸: σ/ρ^*)と質量流束(縦軸: ρv_z)の関係を示す。図 3 の上の図および下の図の横軸の値は非平衡度 ($= \sigma/\rho^*$) と呼ばれており、気液非平衡状態に蒸気から気液界面に入射する分子の質量流束と平衡状態に蒸気から気液界面に入射する分子の質量流束の比を表したものである。この比が 1 の

場合、気液平衡状態である。図 3 上の図は気液界面で蒸発が起きている界面での質量流束と非平衡度の関係を示したものであり(このときの液体温度は $T_L/T_C=0.60$)、下の図は界面で凝縮が起きている状態での質量流束と非平衡度の関係を示したものである(このときの液体温度は $T_L/T_C=0.60$)。各点は、図 2 に示した温度差がある 2 液膜の蒸発・凝縮現象を解析して得られるものであり、1 つの温度差について 2 つの点(蒸発側界面と凝縮側界面)の値が得られる。この図より、蒸発界面(上図)および凝縮界面(下図)において、非平衡度と質量流束には強い線形性(R^2 値で 0.9998-0.9999 程度)があることがわかった。また、蒸発界面および凝縮界面でその傾きは若干異なり、蒸発界面では $\beta_{ne}=0.871$ 、凝縮界面では $\beta_{nc}=0.928$ となる。この結果を用いて、気体論境界条件は、蒸発係数および凝縮係数を使わずに、以下のように記述されることがわかった。

$$\text{蒸発界面: } f_{out} = [\beta_{ne} \rho^* + (1 - \beta_{ne}) \sigma] F_{out} \quad (1)$$

$$\text{凝縮界面: } f_{out} = [\beta_{nc} \rho^* + (1 - \beta_{nc}) \sigma] F_{out} \quad (2)$$

ここで、 ρ^* は飽和蒸気密度で液体温度の関数であり、 σ は Boltzmann 方程式と式(1)もしくは式(2)とを連立して解くことで値が得られるパラメータであり、 F_{out} は規格化された Maxwell 分布で液体温度の関数である。また、図 3 では β_{ne} および β_{nc} は $T_L/T_C=0.60$ の値であるが、これが液体温度の関数として与えられることを示した。

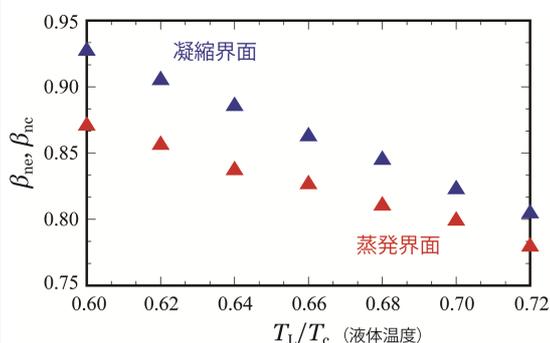


図 4: β_{ne} および β_{nc} の液体温度依存性

図4に β_{nc} および β_{nc} の温度依存性を示す。この結果は、 β_{nc} および β_{nc} の値はどちらも液体温度の増加によって減少すること、および常に $\beta_{nc} > \beta_{nc}$ の関係があることを示している。更に、この結果より、上述の式(1)または式(2)は、液体温度を指定するだけで、気液界面の気体論境界条件が完全に指定されることを意味している。これより、蒸発・凝縮が生じている気液界面での熱・物質の輸送量を正しく決定することができ、キャピテーション気泡の崩壊など、様々な気液界面を含む流れの解析に応用することができると考えている。また、本申請研究より、気体論境界条件のみならず、流体力学方程式に対する気液界面の境界条件を提案した。さらに、蒸発・凝縮現象の理解の深化を目指し、分子動力学法を用いた数値解析も本申請研究にて行った。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕(計6件)

Misaki Kon, Kazumichi Kobayashi, Masao Watanabe, Liquid temperature dependence of kinetic boundary condition at vapor-liquid interface, International Journal of Heat and Mass Transfer, 査読有, Vol. 99, 2016, 317-326

Doi: 10.1007/s00231-015-1700-6

Kazumichi Kobayashi, Kazumasa Hori, Misaki Kon, Kiyofumi Sasaki, Masao Watanabe, Molecular dynamics study on evaporation and reflection of monatomic molecules to construct kinetic boundary condition in vapor-liquid equilibria, Heat and Mass Transfer, 査読有, First online, 2015, 1-9

Doi: 10.1007/s00231-015-1700-6

Misaki Kon, Kazumichi Kobayashi, Masao Watanabe, Method of determining kinetic boundary condition in net evaporation/condensation, Physics of Fluids, 査読有, Vol. 26, 2014, 1-17

Doi: 10.1063/1.4890523

〔学会発表〕(計14件)

今美沙紀, 小林一道, 渡部正夫, 非定蒸発・凝縮下の気体論境界条件に関する数値計算, 日本流体力学会年会 2015, 2015年9月28日, 東京工業大学(東京都, 目

黒区)

Kazumichi Kobayashi, Kazumasa Hori, Hisao Yaguchi, Masao Watanabe, Molecular dynamics simulation on evaporation molecules in a vapor-liquid equilibrium state, 29th international Symposium on Rarefied Gas Dynamics, 2014年7月16日, Hilton Xian Hotel, (Xian, China)

Misaki Kon, Kazumichi Kobayashi, Masao Watanabe, Numerical analysis of kinetic boundary condition at net evaporation/condensation interfaces in various liquid temperature based on mean-field kinetic theory, 29th international Symposium on Rarefied Gas Dynamics, 2014年7月14日, Hilton Xian Hotel, (Xian, China)

Misaki Kon, Kazumichi Kobayashi, Masao Watanabe, Numerical analysis of nonequilibrium phase change phenomena between two-liquid slabs with different temperature, 13th UK Heat Transfer Conference, 2013年9月3日, Imperial College(London, UK)

〔図書〕(計0件)

〔産業財産権〕

出願状況(計0件)

取得状況(計0件)

〔その他〕

ホームページ等

<http://labs.eng.hokudai.ac.jp/labo/fluid/>

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・准教授
研究者番号: 80453140