

Enskog-Vlasov DSMC 法を用いた蒸気分子の蒸発・凝縮挙動に与える 高密度非凝縮性気体の影響の検討

Investigation of high-density non-condensable gas effect on evaporating and condensing vapor molecules using Enskog-Vlasov DSMC method

- 大橋 広太郎, 北大院, 札幌市北区北 13 条西 8 丁目
- 小林 一道, 北大, 札幌市北区北 13 条西 8 丁目, E-mail : kobakazu@eng.hokudai.ac.jp
- 渡部 正夫, 北大, 札幌市北区北 13 条西 8 丁目
- 藤井 宏之, 北大, 札幌市北区北 13 条西 8 丁目

Kotaro Ohashi, Hokkaido University, Kita-ku, Kita13 Nishi8, Sapporo
Kazumichi Kobayashi, Hokkaido University, Kita-ku, Kita13 Nishi8, Sapporo
Masao Watanabe, Hokkaido University, Kita-ku, Kita13 Nishi8, Sapporo
Hiroyuki Fujii, Hokkaido University, Kita-ku, Kita13 Nishi8, Sapporo

We investigate high-density non-condensable gas effects on evaporating and condensing vapor molecules using the Enskog-Vlasov DSMC method. As a result of equilibrium simulations, we find evaporation and condensation of vapor tend not to occur as non-condensable gas increases, because vapor collides with high-density non-condensable gas in vapor/gas-liquid interface.

1. 緒言

蒸発・凝縮という現象は物理的な素過程および工業的な応用の側面から見ても重要な現象である。蒸発・凝縮が起きるとき、気液界面を通してどれだけの質量・運動量・エネルギーが輸送されるかは連続体力学に基づく Navier-Stokes 方程式系ではわからない。蒸発・凝縮を伴う蒸気の流れは Boltzmann 方程式を用いる分子気体力学において研究されており、多数の重要な知見が得られてきた。Boltzmann 方程式を解く際には気液界面における蒸発・凝縮を表す気体論境界条件 (Kinetic boundary condition, 以降では KBC と呼ぶ) が必要である。蒸気の単成分系における KBC は多くの研究がなされているが、多成分系の研究は少ない。Kobayashi らはアルゴンとネオンからなる系の平衡状態の KBC を分子動力学法により調べた。これは蒸気であるアルゴンと非凝縮性気体 (Non-condensable gas, 以降では NC ガスと呼ぶ) であるネオンの 2 成分系である。その結果ネオンの気相密度が高くなるほどアルゴンの蒸発・凝縮は起きにくくなるということがわかった。つまり NC ガスが蒸気の蒸発・凝縮を阻害する。しかし NC ガスが非常に高密度となることは、分子動力学法の計算負荷によりわかっていないのが現状である。また Kobayashi らは蒸気と NC ガスからなる気泡の挙動を分子気体力学により解析した。その結果、NC ガスが気泡壁面に高密度の層を作り、蒸気の蒸発・凝縮に大きな影響を与える可能性を示している。本研究の目的は分子動力学法では計算できない NC ガスが非常に高密度となるときの蒸気の蒸発・凝縮挙動を Enskog-Vlasov DSMC 法を用いて調べ、KBC として表すことである。

Fig. 1 に気液界面を通過する分子の質量流束を表す。 J_{coll}^{ω} は気相から液相に向かう質量流束、 J_{cond}^{ω} はそのうち凝縮する質量流束で J_{ref}^{ω} はそのうち気液界面で反射する質量流束、 J_{evap}^{ω} は蒸発する質量流束で、 J_{ref}^{ω} と合わさって J_{out}^{ω} として出て行く。上添字 ω は蒸気 (V) か NC ガス (G) を表す。

これら質量流束の関係を式で表すと次のようになる。

$$J_{\text{out}}^V = J_{\text{evap}}^V + J_{\text{ref}}^V, \quad J_{\text{coll}}^V = J_{\text{ref}}^V + J_{\text{cond}}^V, \quad (1a)$$

$$J_{\text{out}}^G = J_{\text{evap}}^G + J_{\text{ref}}^G, \quad J_{\text{coll}}^G = J_{\text{ref}}^G + J_{\text{cond}}^G. \quad (1b)$$

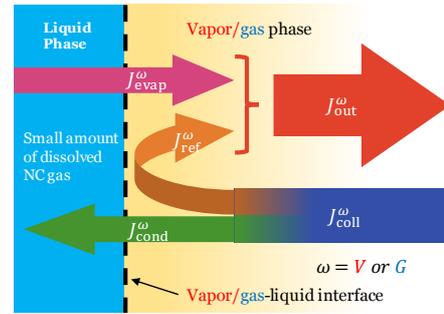


Fig. 1: Mass fluxes across the vapor/gas-liquid interface.

ここで KBC について説明する。KBC は次式で表される。

$$f_{\text{out}}^V = \frac{\alpha_e^V \rho^{V*} + (1 - \alpha_c^V) \tau^V}{(2\pi R^V T_L)^{3/2}} \exp\left(-\frac{\xi_x^2 + \xi_y^2 + \xi_z^2}{2R^V T_L}\right), (\xi_x > 0), \quad (2a)$$

$$f_{\text{out}}^G = \frac{\alpha_e^G \rho^{G*} + (1 - \alpha_c^G) \tau^G}{(2\pi R^G T_L)^{3/2}} \exp\left(-\frac{\xi_x^2 + \xi_y^2 + \xi_z^2}{2R^G T_L}\right), (\xi_x > 0). \quad (2b)$$

ρ^{V*} は飽和蒸気密度、 ρ^{G*} 平衡状態の密度、 R^{ω} はガス定数、 T_L は液相温度、 ξ は分子の速度で下添字は方向を表す。 x は気液界面に垂直方向な速度で、 y, z は平行方向である。また τ^{ω} は次式で表される。

$$\tau^V = -\sqrt{\frac{2\pi}{R^V T_L}} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^0 \xi_x f_{\text{coll}}^V d\xi_x d\xi_y d\xi_z, \quad (3a)$$

$$\tau^G = -\sqrt{\frac{2\pi}{R^G T_L}} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^0 \xi_x f_{\text{coll}}^G d\xi_x d\xi_y d\xi_z. \quad (3b)$$

ここで f_{coll}^{ω} は気相から気液界面に向かう分子の速度分布関数であり Boltzmann 方程式を解くことにより得られ

る。KBC である式 (2) は温度 T_L の half-Maxwellian であり、密度は $\alpha_e^\omega \rho^{\omega*} + (1 - \alpha_c^\omega) \tau^\omega$ であるといえる。 $\alpha_e^\omega \rho^{\omega*}$ が蒸発する成分で、 $(1 - \alpha_c^\omega) \tau^\omega$ が反射する成分である。 τ^ω は気液界面で分子が全て反射しその速度分布関数を half-Maxwellian と仮定する条件から導かれる。ここで α_e^ω は蒸発係数、 α_c^ω は凝縮係数と呼ばれるパラメータであり次のように定義される。

$$\alpha_e^V = \frac{J_{\text{evap}}^V}{J_{\text{out}}^V}, \quad \alpha_c^V = \frac{J_{\text{cond}}^V}{J_{\text{coll}}^V}, \quad (4a)$$

$$\alpha_e^G = \frac{J_{\text{evap}}^G}{J_{\text{out}}^G}, \quad \alpha_c^G = \frac{J_{\text{cond}}^G}{J_{\text{coll}}^G}, \quad (4b)$$

これら係数によって KBC は蒸発・凝縮を表すことができる。

2. Enskog-Vlasov DSMC

Enskog-Vlasov DSMC 法 (以降では EVDSMC 法と呼ぶ) は Enskog-Vlasov 方程式を基にしている粒子法で Frezzotti によって提案された (文献 5 参照)。これは Boltzmann 方程式の数値解法である Direct simulation Monte Carlo 法を拡張したものである。この計算方法は分子動力学法に比べて同じ粒子数で 100 倍程度計算が速いという利点がある。Enskog-Vlasov 方程式について要点を説明する。詳細は文献 6, 7 を参照されたい。

Enskog-Vlasov 方程式において分子は次の Sutherland ポテンシャルで相互作用する。

$$\psi^{VV} = \begin{cases} +\infty & (r \leq \sigma) \\ -\phi^{VV} \left(\frac{\sigma}{r}\right)^\gamma & (r > \sigma). \end{cases} \quad (5a)$$

$$\psi^{GG} = \begin{cases} +\infty & (r \leq \sigma) \\ -\phi^{GG} \left(\frac{\sigma}{r}\right)^\gamma & (r > \sigma). \end{cases} \quad (5b)$$

$$\psi^{VG} = \psi^{GV} = \begin{cases} +\infty & (r \leq \sigma) \\ -\phi^{VG} \left(\frac{\sigma}{r}\right)^\gamma & (r > \sigma), \end{cases} \quad (5c)$$

上添字は成分間の相互作用を表す。 ϕ と γ はポテンシャル井戸に関連する定数である。 σ は分子直径で本計算においては蒸気と NC ガスで同じとする。

Enskog-Vlasov 方程式は次の形をとる。

$$\frac{\partial f^V}{\partial t} + \xi \cdot \frac{\partial f^V}{\partial \mathbf{x}} + \frac{\mathbf{F}^V}{m} \cdot \frac{\partial f^V}{\partial \xi} = C_E(f^V, f^V) + C_E(f^V, f^G), \quad (6a)$$

$$\frac{\partial f^G}{\partial t} + \xi \cdot \frac{\partial f^G}{\partial \mathbf{x}} + \frac{\mathbf{F}^G}{m} \cdot \frac{\partial f^G}{\partial \xi} = C_E(f^G, f^G) + C_E(f^G, f^V). \quad (6b)$$

f^ω は分子の速度分布関数で、 t は時間、 \mathbf{x} 空間位置、 ξ は分子の速度、 m は分子 1 個の質量、 \mathbf{F}^ω は平均場と呼ばれ分子間引力を近似的に表す項である。 C_E は衝突項と呼ばれ分子の衝突による f の変化を表す。本計算においては m は蒸気と NC ガスで同じとする。

この式を解き f^ω が求まると、これを速度空間で積分することにより数密度 $n^\omega(\mathbf{x}, t)$ 、速度 $\mathbf{v}^\omega(\mathbf{x}, t)$ 、温度 $T^\omega(\mathbf{x}, t)$ といった巨視量が得られる

3. 改良 Interphase Boundary 法

蒸発係数・凝縮係数を求めるため、Fig. 1 に示す分子の質量流束を求める必要がある。このため Kobayashi らが提案した改良 Interphase Boundary 法を EVDSMC 法においても用いる。密度分布から液相境界と気相境界を決め、その境界を通過するサンプル分子を数えることにより質量流束を決定する。詳細は文献 3 を参照されたい。

4. 計算結果

計算結果を説明する。Fig. 2 が蒸気の数密度分布で Fig. 3 が NC ガスの数密度分布である。計算は NC ガスの粒子数を変えて 8 ケース行った。Case 1 が最も NC ガス粒子数が少なく、逆に Case 8 が最も多い。Case 8 では NC ガスは非常に高密度で液体に近いことが図からわかる。

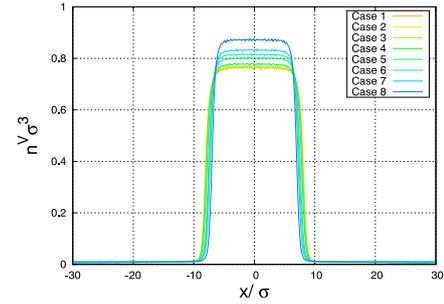


Fig. 2: Number density distribution of vapor (Normalized).

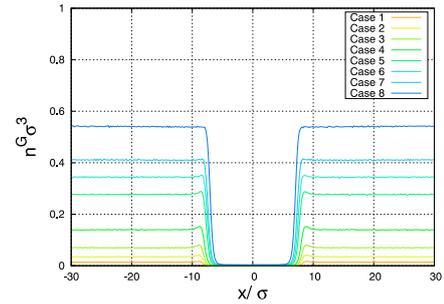


Fig. 3: Number density distribution of NC gas (Normalized).

Fig. 4 に改良 Interphase Boundary 法により得られた蒸気の質量流束を示す。Case 1 8 を液相に溶解している NC ガスのモル分率 μ で整理した。 μ が高いほど、つまり NC ガスの密度が高いほど J_{evap}^V 、 J_{cond}^V は低下し、蒸発・凝縮は起きにくくなる。

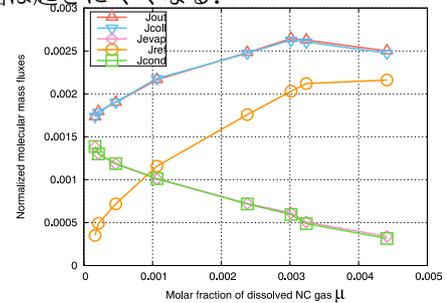


Fig. 4: Mass fluxes of vapor across the vapor/gas-liquid interface (Normalized).

質量流束により蒸気の蒸発係数・凝縮係数を求めた結果を Fig. 5 に示す。 μ が大きくなり NC ガスの密度が高

くなるとこれら係数は低下し 0 に近づいていった。

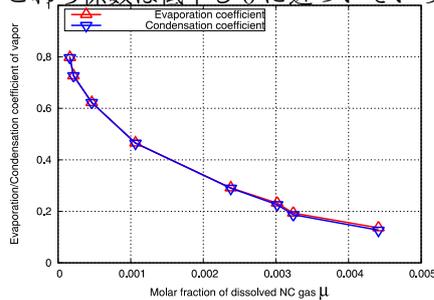


Fig. 5: Evaporation and condensation coefficients of vapor.

最後に蒸発係数・凝縮係数が低下する理由を考察する。Fig. 6 は改良 Interphase Boundary 法による、気液界面において気相から入り気相側への反射する蒸気分子の位置を示している。NC ガスの密度が低い Case 1 では反射位置は界面全域にわたっているのに対して、NC ガスの密度が高い Case 8 では気相境界で多く反射している。つまり NC ガスが高密度になると、蒸気は気液界面内の高密度 NC ガスに衝突してすぐに反射する。この反射により蒸発・凝縮が起きにくくなり、蒸発係数・凝縮係数が低下する。

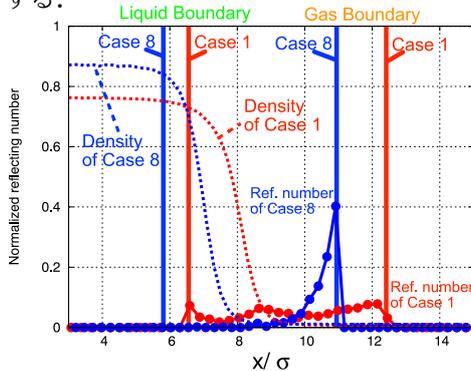


Fig. 6: Reflecting position of vapor. Comparison of Case 1 and Case 8.

5. 結言

EVDSMC 法を用い、2 成分系の気液平衡状態において蒸気の蒸発・凝縮に与える NC ガスの影響を調べた。NC ガスが高密度になるほど、蒸気の蒸発・凝縮は起きにくくなり蒸発係数・凝縮係数は低下した。またその理由は蒸気が気液界面内の NC ガスに衝突するためだということがわかった。

参考文献

- (1) 曾根良夫, 青木一生, "分子気体力学" (朝倉新書, 1994)
- (2) Fujikawa, S., Yano, T., Watanabe, M., "Vapor-Liquid interfaces, bubbles and droplet" (Springer, 2011)
- (3) Kobayashi, K., Hori, K., Kon, M., Fujii, H. and Watanabe, M., "Kinetic Boundary Conditions for vapor-gas binary mixture" Microfluid Nanofluid, 21, (2017), pp. 1-13.
- (4) Kobayashi, K., Nagamaya, T., Watanabe, M., Fujii, H. and Kon, M., "Molecular gas dynamics analysis on condensation coefficient of vapour during gas-vapor bubble collapse" J. Fluid Mech., 856, (2018), pp. 1045-1063.

- (5) Frezzotti, A., "A Particle scheme for the numerical solution of the Enskog equation" Phys. Fluids 9, 1329 (1997), pp. 1329-1335.
- (6) Frezzotti, A., Gibelli, L. and Lorenzani, S., "Mean field kinetic theory description of evaporation of a fluid into vacuum" Phys. Fluids 17, 012102 (2005), pp. 1-12
- (7) Frezzotti, A., Gibelli, L., Lockerby, D.A. and Sprittles, J.E., "Mean-field kinetic theory approach to evaporation of a binary liquid into vacuum" Phys. Review 3, 054001 (2018), pp. 1-17
- (8) Kobayashi, K., Ohashi, K., Watanabe, M., "Numerical analysis of vapor-liquid two-phase system based on the Enskog-Vlasov equation" AIP Conference Proc. 1501 (2012), pp. 1145-1151