417 不凝縮性ガスのある気液界面での凝縮過程の DSMC 解析

DSMC Analyses on Condensation at Liquid-Vapor Interface with Non-condensable Gas

○中 百合香 (九工大院)

正 鶴田 隆治 (九工大)

Yurika NAKA and Takaharu TSURUTA

Dept. of Mech. Eng., Kyushu Institute of Technology, 1-1, Sensui-cho, Tobata-ku, Kitakyushu 804-8550

Key Words : Non-Condensable Gas, Condensation Coefficient, DSMC Analysis, Mass Transfer Rate

1. 緒言

気液界面の物質伝達をマクロに記述する際、凝縮係数は重要なパラメータであり、近年分子動力学的研究 (以下 MD 法) によって分子レベルの解明が徐々に進められてきた。このなかで MD 法により求めた凝縮係数が実験により得られた結果と大きく異なる事例が報告されている。例えば低圧から大気圧までの水の場合には、MD 法では 1 に近い値⁽¹⁾⁽²⁾であるのに対し、実験では 0.4 程度⁽³⁾の値が報告されている。分子交換現象⁽⁴⁾を考慮すれば、MD 法による実験結果の解釈が可能であるとする考えもあるが、依然検討を要する課題と思われる。

本研究では、実験から得られた凝縮係数が MD 法の結果よりも小さくなる要因として、気相側の不凝縮性気体の影響に着目した。そこで、直接シミュレーションモンテカルロ法 (以下 DSMC 法) を用い、気液界面とその近傍の不凝縮性気体の挙動を把握し、凝縮特性への影響を明確にすることを目的としている。

Fig.1 Calculation System for DSMC

Table.1 Calculation Conditions at $T_c=300\text{K}$

Φ	S			
	5K	10K	15K	20K
0.00	1.3809	1.7617	2.3716	2.9815
0.02	1.3599	1.7282	2.3244	****
0.05	1.3316	1.6786	2.2528	2.8305
0.08	1.3060	1.6327	2.1850	2.7424
0.10	1.2900	1.6067	2.1388	2.6837
0.13	1.2698	1.5673	2.0716	2.5961
0.17	1.2454	1.5162	1.9876	2.4813
0.20	1.2351	1.4866	1.9283	2.3962

2. 計算手法

2.1 計算系

計算系を図 1 に示す。計算領域は温度 T_c の気液界面から、水蒸気の平均自由行程 λ の 20 倍の位置に温度 T_v の蒸気を設定した 1 次元系で、流れ方向である x 方向に 80 分割した。計算領域には、水蒸気分子及び不凝縮性気体分子を平均存在割合 Φ で均一に初期配置した。混合気体を DSMC 法で取り扱うにあたっては、文献(5)を参考にした。分子モデルは平均衝突直径 $d_{AB}=(d_{\text{water}}+d_n)/2$ を用いた剛体球モデルを使用した。衝突数の計算には混合気体を取り扱った最大衝突数法を用い、各種気体の質量を考慮し弾性衝突させた。

2.2 境界条件

(a) 水蒸気

$x=0$ では凝縮係数 $\alpha=1$ 、すなわち完全凝縮境界条件を適用した。したがって気液界面からの蒸発分子は、Maxwell 分布で系に流入する。 $x=L(=20\lambda)$ では自由流入流出境界条件⁽⁶⁾を適用した。すなわち、分子は $x=L$ での凝縮速度 U を考慮した Maxwell 分布によって流入する。

(b) 不凝縮性気体(空気)

$x=0$ で気液界面の飽和温度 T_c に対する散乱反射とし、 $x=L$ では鏡面反射境界条件を用いた。

以上の境界条件の下に、200,000 回の繰り返し演算を行い、定常状態を確認の後、データサンプリングを行って温度・圧力などを統計的に求めた。表 1 に境界条件をまとめた。界面温度 T_c を 300K とし、蒸気相境界との温度差を 5K, 10K, 15K, 20K に設定し計算した。なお不凝縮ガスの存在割合 Φ 、過飽和度 S 、無次元温度 θ の定義は以下の通りである。

$$\Phi = \frac{n_n}{n_{\text{all},0}} \quad (1) \quad S = \frac{P_v}{P_c} \quad (2)$$

$$\theta = \frac{T - T_c}{\Delta T} = \frac{T - T_c}{T_v - T_c} \quad (3)$$

3. 計算結果・考察

3.1 温度分布・数密度分布

図 2(a)に $\Delta T=5\text{K}$ の時の温度分布を示した。図 2(b),(c)に同じ凝縮量の時の温度分布と数密度分布を示した。界面に近づくにつれて温度が上昇する逆温度勾配現象がみられるが、 Φ が増加するにつれて、界面での温度ジャンプは低下する。逆温度勾配現象は界面鉛直方向速度成分の正方向低速部の確率密度が低くなることにより、他の速度域の分子の存在割合が増加するため起こると考えられている⁽⁷⁾。図 3 に示すように $\Phi=0.2$ の時は、 $\Phi=0$ の時に見られるような低速分子の確率密度の低下は見られない。これは不凝縮性気体が反射分子

Fig.2(a) Temperature Profiles at $\Delta T=5K$ Fig.2(b) Temperature Profiles
at Same Mass Transfer Rate Fig.2(c) Number Density Profiles
at Same Mass Transfer Rate

となり、速度分布関数のこの低速側領域を補ったためと考えられる。また不凝縮性気体の気液界面と $x=L$ での数密度差 h の 98% の位置から不凝縮性気体の厚さ t を求め、計算系の長さ L で除したものを無次元厚さ δ と定義した。図 4 に過飽和度 S と h の関係、図 5 に過飽和度 S と δ の関係を示した。 S に比例して h は増加し、 δ は小さくなった。これは S とともに凝縮速度が大きくなるため、不凝縮性気体分子が気液界面に蓄積されるためである。同じ過飽和度 S では Φ が大きいほど、 h も δ も大きくなった。

3.2 凝縮量

気液界面における凝縮量は、気体分子運動論によって記述され、一般に次のように表される。

$$\dot{m} = \rho U = \zeta \frac{P_v - P_c}{\sqrt{2\pi RT_v}} \quad (4)$$

ここで ρ は水蒸気の密度、 R はガス定数、 P_v は全圧である。係数 ζ に関して、Labuntsov⁽⁸⁾ は式 (5) を導いた。

$$\zeta = \frac{2\alpha}{2 - 0.798\alpha} \quad (5)$$

DSMC 法により得られた凝縮速度 U を用いて、式 (4) から係数 ζ を求め、式 (5) と比較した。図 6 は過飽和度 S と係数 ζ の関係を示したものである。 $\Phi=0$ の時は、過飽和度 S が増加するにつれて係数 ζ の値も増加し、 S に対する依存性のな

Fig.3 Velocity Distributions

Fig.5 δ with Supersaturations S Fig.4 h with Supersaturations S Fig.6 ζ with Supersaturations S

い Labuntsov の式とのずれをみるが、 Φ が増加するにつれて、その依存性が低下してくる。また同じ過飽和度では、 Φ が大きくなるにつれて係数 ζ は $\Phi=0$ の時の値から低下した。図 4.5 から Φ が大きくなると気液界面に滞留する不凝縮性気体の数密度差 h と無次元厚さ δ が大きくなるため、気液界面近傍での凝縮抵抗となり、凝縮速度が低下して凝縮量が減る様子を知ることができる。

以上の結果から、気液界面での凝縮係数が $\alpha=1$ であっても、不凝縮性気体の存在によって凝縮量が減少することが確認された。式 (5) と図 6 の係数 ζ より正味凝縮係数 α_{net} を算出すると、 $\Phi=0.05$ では約 0.9、 $\Phi=0.2$ では約 0.6 程度に低下する。実験で得られた凝縮係数と MD 法で得られた凝縮係数との差のすべてを説明するものではないものの、原因の 1 つに不凝縮性ガスの影響が関係していることが確認された。

4. 結論

DSMC 法を用いて不凝縮性気体の存在する混合気体の凝縮機構を検討し、以下の知見を得た。

1. 不凝縮性気体の存在割合が増加すると気液界面での不凝縮性気体の数密度と厚さが大きくなるため、係数 ζ は減少する。一方、過飽和度 S に対する係数 ζ への影響は見られない。
2. 実験で得られた係数 ζ から凝縮係数 α を求める際に、不凝縮性気体の存在を考慮する必要がある。
3. 不凝縮性気体の存在割合が増加すると、不凝縮性気体分子が気液界面で反射分子の役割を果たし、逆温度勾配現象が緩和される。

参考文献

- (1) Tsuruta, T et. al., Proc. 5th ASME/JSME Therm. Eng. Conf., (1999), AJTE 99-6509
- (2) 長山・鶴田, 計算力学講演会(2000)
- (3) 藤川・Maerefat, 機論(B), 56-525 (1990), 1376.
- (4) Matsumoto, M et. al., Therm. Sci. & Eng., Vol.2, No.1(1994), pp.64-69
- (5) 日本機械学会編, 原子・分子モデルを用いる数値シミュレーション, コロナ社(1996), pp.76-98
- (6) 池川・他 1 名, 機論(B), 54-507 (1988), 3057-3060
- (7) 鶴田・他 1 名, 機論(B), 64-618 (1998), 130-136
- (8) Labuntsov, D.A et. al., Int.J. Heat Mass Transfer, 22-7 (1971), 48.