J053021

ナノスケール多孔質体内における輸送特性に関する数値的研究

大嶋 智也^{*1}, 米村 茂^{*2}, 徳増 崇^{*2}

A Numerical Study for Transport Phenomena in Nanoscale Porous Media

Tomoya OSHIMA^{*1}, Shigeru YONEMURA^{*2} and Takashi TOKUMASU^{*2}^{*1} Tohoku Univ., Graduate School of Engineering
Aramaki Aza Aoba 6-6, Aoba-ku, Sendai, Miyagi, 980-8579 Japan^{*2} Tohoku Univ., Institute of Fluid Science
Katahira 2-1-1, Aoba-ku, Sendai, Miyagi, 980-8577 Japan

Gas flows in porous media appear in various regions of engineering, e.g., catalytic converters and fuel cells. In order to improve performance of such devices, it is important to understand transport phenomena in porous media. In porous media with pores as small as a molecular mean free path, we need to consider molecular motions directly instead of treating gas flow as continuum and we also need to consider effects of complicated channels. Therefore, the direct simulation Monte Carlo (DSMC) method is suitable to solve transport phenomena in porous media. We considered gas flows driven by pressure gradient in porous media imitated by locating nano-scale spheres randomly, and performed numerical simulations of gas flow without any surface reaction to clarify transport phenomena in porous media. We investigated effects of pressure gradient, diameter of spheres, and porosity on gas flow rate.

Key Words : Micro-/Nanoscale Flow, DSMC method, and Porous Media

1. 結 言

多孔質体内の気体流れは触媒式排気ガス浄化装置や燃料電池など工業の諸分野でみられ、装置の性能向上のためには、多孔質体内での輸送現象を解明することが重要となる。多孔質体の空孔のスケールが数十ナノメートルと、分子の平均自由行程と同程度まで小さく、クヌッセン数 Kn が 1 程度まで大きい場合には、気体の平衡を乱す分子壁面衝突の頻度が増して、気体の非平衡性が強くなる⁽¹⁾。その支配方程式は Boltzmann 方程式となり、Navier-Stokes 方程式に基づく数値流体力学によって解析することはできない。本研究では多孔質体内のマイクロ・ナノスケール流れを取り扱うために、Boltzmann 方程式の確率解法である Direct Simulation Monte Carlo (DSMC) 法⁽²⁾⁽³⁾を用い、多孔質体内の輸送現象を調査する。

2. 計算手法

本研究ではDSMC法により多孔質体内部のマイクロ・ナノスケール気体流れを取り扱う。この方法では、実分子をサンプル分子に代表させて数値シミュレーションを行い、確率論的に分子間衝突を判定し、追跡するため、分子を決定論的に追跡する分子動力学法と比較して計算負荷が小さい。サンプル分子の挙動を統計平均して流速、密度、温度などの巨視的な物理量を得る。ここでは衝突判定法として最大衝突数法を用い、気体分子はH₂を用いた。分子モデルは剛体球モデルを用いた。

3. 計算結果と考察

本研究ではランダムに球形粒子を配置することで多孔質体を模擬し、圧力勾配によって誘起される流れの数値

^{*1} 正員, 日本機械大学 (〒160-0016 東京都新宿区信濃町 35)

^{*2} 学生員, 日本機械大学 工学部

E-mail: taro@jsme.or.jp

シミュレーションを行った。

図1は上流側境界を1 atmに固定した場合の圧力勾配 dp/dx と気体の質量流束の関係を示している。図1より気体の質量流束は圧力勾配 dp/dx に比例していることがわかる。図2は圧力勾配 dp/dx および粒径 d を固定し、各空隙率にて球の配置を変えた場合の質量流束を示している。この図から質量流束は粒径と空隙率が固定された場合、球の配置の影響をほとんど受けないということがわかる。図3は圧力勾配を固定した場合の、各空隙率における粒径 d と質量流束の関係を示している。計算を行う際、同じ空隙率であれば粒径を変化させる際に球形粒子の位置関係は変化させず、多孔質構造を粒径に合わせて相似的に拡大・縮小させた。つまり、粒径の変化の割合がそのまま流路の変化の割合となる。ただし、粒径=流路ではない。図3からどの空隙率においても粒径が増加するにつれて空隙率が増加している。また右図は両対数にてプロットしたものであるが、空隙率が0.6の場合にはグラフの傾きが1.03であるのに対し、空隙率が0.9の場合には傾きは1.28である。両対数グラフにおける傾き α と質量流速 J は定数 C_0 を用いて以下の関係にある。

$$J = C_0 d^\alpha \quad (1)$$

この関係から、空隙率が大きい場合、質量流束は粒径に対してより曲線的に変化するといえる。また連続流体における円管や2平板間の Poiseuille 流では、質量流束は流れの代表長さの2乗に比例するが、今回取り扱った計算領域では同じ傾向は見られなかった。図4は圧力勾配を固定した場合の、各粒径における空隙率と質量流束の関係である。この図から、空隙率が増加するにつれ質量流束も増加することが分かる。また両対数グラフにプロットした場合には、粒径50nmの場合に傾きは4.90であるのに対し、粒径が100nm, 1000nmの場合では傾きはそれぞれ5.45, 6.24と粒径が大きくなるにつれ傾きが大きくなる。このことから、質量流束は粒径が大きい場合の方が空隙率に対してより高い次数の曲線的に変化するといえる。

4. 結 言

本研究では微細な球形粒子をランダムに配置することで多孔質体を模擬し、DSMCシミュレーションを行うことで、圧力勾配によって誘起される気体流れの輸送特性を調査した。得られた結果は以下の通りである。

1. 質量流束は圧力勾配に比例する。この傾向は連続流体における Poiseuille 流や拡散についての Fick の法則と一致する。
2. 空隙率および粒径が一定値に定まった場合には、質量流束は粒子の配置の影響を受けず一定の値になる。
3. 空隙率一定の条件下では、粒径が増加するにつれて質量流束は増加する。その際、空隙率が大きい場合の方が、質量流束は粒径に対してより曲線的に増加する。また粒径一定の条件下では、空隙率が増加するにつれて質量流束は増加する。その際、粒径が大きい場合の方が、質量流束は空隙率に対してより高い次数の曲線的に増加する。

文 献

- (1) Shigeru Yonemura, "Particle Modeling of High Knudsen Number Flows and Plasmas", *Nano-Mega Scale Flow Dynamics in Highly Coupled Systems*, (2008), Tohoku University Press. pp.57-99.
- (2) G.A.Bird, "Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows", *Clarendon, Oxford*. (1994)
- (3) 南部健一, "ボルツマン方程式の確率解法", 数値流体力学(大宮司久明・保原充編), (1992), 287-324, 東京大学出版会

Fig. 1 Relation between pressure gradient and mass flux
($d = 60$ nm, Porosity=0.803)

Fig. 2 Relation between sphere locations and mass flux
($d = 60$ nm, $dp/dx = -7.51$ Pa/nm)

Fig. 3 Relation between diameter and mass flux ($dp/dx = -0.3378$ Pa/nm)

Fig. 4 Relation between porosity and mass flux ($dp/dx = -0.3378$ Pa/nm)