温度場によって誘起される希薄気体の流れを用いた気体分離装置*

杉元 宏^{*1}・篠遠 晃^{*1}

Gas Separator with the Rarefied Gas Flow Induced by a Temperature Field

Hiroshi SUGIMOTO^{*1} and Akira SHINOTOU^{*1}^{*1}Department of Aeronautics and Astronautics, Kyoto University, Kyoto 606-8501, Japan

(Received October 30, 2009, Accepted March 9, 2010)

A gas separator that utilizes the thermal transpiration phenomena in a rarefied gas is proposed. The separator is devised to work without intermission and the device itself does not contain moving parts. One of its minimal implementation, which consists of an array of micro-channels with temperature gradient along the channel, is investigated numerically on the basis of the Boltzmann equation for binary gas mixture. It is shown that the separator generates a difference of molar concentration between its two exits when a gas flow with finite Mach number is supplied to the device.

1. はじめに

低圧の気体やマイクロチャンネル内部の気体（希薄気体）では、気体分子の平均自由行程の効果が現れる。その一つの例は、外力が無くても、温度場が圧力勾配や気体流を誘起する熱遷移現象である¹⁾。多成分混合気体に見られる分離・拡散現象も、気体分子の移動によるものであり、結局は、平均自由行程の効果である。近年、この2点を組み合わせ、熱遷移現象を混合気体の分離に応用する研究が行われている²⁻⁴⁾。これらの解析および実験では、熱遷移現象を応用した熱駆動ポンプ（Knudsen ポンプ、熱尖端ポンプ）^{1,5)}において、ポンプが発生する流れを堰き止めた時、ポンプ両端に混合気体の濃度差が生じることが示されている。ただ、現段階では、分離あるいは濃縮した気体を連続的に装置外部に取り出す方法は確立していない。本研究では、濃縮した混合気体を連続的に取り出す気体分離装置を実現できるか、希薄気体の基礎方程式（Boltzmann 方程式）に基づく数値解析を用いて検証する。

2. 気体分離装置

最初に、熱遷移現象による気体分離効果の例を示そう。簡単のため、熱駆動ポンプではなく、温度勾配を持つチャンネルに二成分混合気体を入れ、両端を封鎖した場合を考える。チャンネルの幅は気体の平均自由行程の程度とする。Fig. 1 は、この時の定常状態の数値計算例であり、混合気体の温度 T 、全圧 p 、軽い気体のモル濃度 χ の分布を色分けで示している。チャンネル壁面の温度勾配によって気体に温度勾配が生じ、この温度勾配による熱遷移現象により、高温側において圧力が上昇するとともに、軽い気体のモル濃度が約 5% 上昇する。この種の濃度差を連続的に外部に取り出すことが、本研究の目的である。

分離装置の概要を Fig. 2 (a) に示す。2つの流路 H, C を、気体分離効果を持つデバイス S によって接続してある。本装置の目標は、流路 H, C に材料となる混合気体を流

し、デバイス S の分離効果を H, C の下流側で取り出すことである。分離された気体が上流の材料気体に拡散・混合するのではなく、装置の生成物となる下流側に流出することが望ましい。流体力学的に考えれば、拡散は粘性と同じく平均自由行程に比例する効果だから、流路 H, C で十分な大きさの Reynolds 数（大きな流速・流路幅等）が必要になる。一方、デバイス S の分離能力は有限だから、流路の Reynolds 数を

Fig. 1 Steady behavior of binary mixture of gases confined in a channel with a temperature gradient. The case for molar mass ratio 10 and same number of molecules for both gases. The distribution of (a) temperature T , (b) pressure p of the mixture, and (c) molar concentration χ of smaller molecule. The distributions are shown by the difference of shades, which scales are shown at the right end of each panel. The mean free path l of the gas at reference state (T_c, p_c) is equal to d .

Fig. 2 (a) Concept of present gas separator. (b) Gas separator that utilizes an array of micro-channels M as the separation device S.

* 平成21年11月4日 第50回真空に関する連合講演会で発表

^{*1} 京都大学航空宇宙工学専攻 (〒606-8501 京都市左京区吉田本町)

増やすにつれ、下流で得られる濃度差は減少するだろう。今回の研究の目標は、このシステムで、有意な濃度差および流量が得られるケースを見いだすことである。Reynolds 数の効果（従って非線形の効果）が重要なため、本問題を解析的に取り扱うことは難しい。本稿では直接シミュレーション・モンテカルロ (DSMC) 法^{1,6)}を用い、剛体球分子に対する Boltzmann 方程式の直接的な数値解析を行う。

デバイス S は希薄気体の効果で動作するため、デバイス S 内の流路幅は、気体分子の平均自由行程 l の程度だろう。一方、流路 H, C では十分な大きさの Reynolds 数が必要だが、気体の動粘性係数が音速と l の積の程度だから、流路の幅は l に比べてずっと大きくなるだろう。両者の長さのスケールが異なるため、計算量が増える。このため、本稿では、デバイス S としてマイクロチャンネル列 [Fig. 2(b)中の M] を用い、流路 H, C の間に温度・圧力の差を与えて気体濃縮効果を得ることにし、装置形状を簡単化している。

混合気体は A (分子質量 m^A), B (m^B) の二成分混合気体とし、計算モデルは二次元とする。計算モデルの詳細を Fig. 2(b)を用いて説明しよう。流路 H, C は共に幅 D 、長さ L であり、それぞれの壁面の温度を $T_H, T_C (< T_H)$ とする。マイクロチャンネル列 M は、10本の幅 d 、長さ l の流路を間隔 d で並べたものであり、その壁面の温度は流路 H, C の温度の間で線形に変化する。流路およびマイクロチャンネル壁面では、Boltzmann 方程式の境界条件として拡散反射を用いる。流路 H, C 内に流れを与えるために、流入側および流出側を仮想的な蒸発・凝縮界面とし、蒸気圧の差によって平面 Poiseuille 流を発生させる。具体的には、基準の圧力 p_c を用いて、流路 C の流入側の A 気体に対する蒸気圧を $p_c \chi_0$ 、B 気体の蒸気圧を $p_c(1 - \chi_0)$ 、流出側ではこれらの値の r_p 倍とする。なお、 χ_0, r_p は共に 0 以上 1 以下の定数である。流路 H では、流路 C の対応する壁面の r_T 倍の圧力を用いる。また、流路 H, C の幅方向の中央で対称条件 (鏡面反射条件) を課し、各流路の幅 $D/2$ の範囲を数値解析する。これによ

り Fig. 2(b)を多数並列した系を解析することになるが、この気体分離装置の実現可能性を少ない計算量で検討できる。なお、以下の説明では流路 H, C に沿う方向に X 座標を採り、原点をマイクロチャンネル列 M の上流端とする。

3. 解析方法

解析に用いた DSMC 法は、希薄気体の分野で標準的な手法の一つであり、説明を省く。計算モデルに含まれる各種のパラメータは、次の手順で決定した。まず、流路およびマイクロチャンネルの形状、温度比 T_H/T_C 、マイクロチャンネル列における希薄度 $Kn (= l/d, l$: 圧力 p_c の静止平衡状態における A 気体の平均自由行程)、界面の蒸気分圧比 χ_0 を指定する。Fig. 1 の状況に近づけるため、マイクロチャンネル列 M を通り抜ける気体が少なくなるように流路 H, C の圧力比 r_T を選ぶ。流路 H, C 内部の流速は r_p の値で調節する。本稿では流路の両端で蒸発・凝縮の条件を用いたため、流路内部の A 気体の濃度が蒸気分圧比 χ_0 の値と一致しない。そこで、マイクロチャンネル列 M が無い場合の定常な濃度分布と、M を設置した場合の定常な濃度分布をそれぞれ求め、両者の結果を比較しマイクロチャンネル列 M の効果を調べる。

4. 結果

本稿では、 $t/d=3, T_H/T_C=3, m^B/m^A=10$ に固定して解析を進める。まず、 $L/d=150, D/d=100, Kn=0.5, r_p=0.55, r_T=1.19$ のケースを Fig. 3 に示す。流入側界面は $X/d=-30$ に、流出側界面は $X/d=120$ にある。図には、マイクロチャンネル列周囲の混合気体の温度 T 、A 気体のモル濃度 $\chi [= n^A/(n^A+n^B)]$ (n^α : α 気体の数密度、 $\alpha=A, B$) とともに、 α 気体の流速ベクトル (u^α, v^α) が矢印により示してある。流路 H, C の間の温度差および圧力差の結果、軽い A 気体を選択的に流路 C から流路 H に移動している様子が分かる。また、マイクロチャンネル出口で濃度が変化し、その濃

Fig. 3. Steady behavior of the gas mixture around the array of micro-channels. The case for $t/d=3, T_H/T_C=3, m^B/m^A=10, L/d=150, D/d=100, Kn=0.5, r_p=0.55$ and $r_T=1.19$. (a) Temperature T of the mixture, (b) molar concentration χ of gas-A, (c) flow velocity (u^A, v^A) of gas-A and (d) (u^B, v^B) for gas-B. In (a) and (b), the distributions are shown by the difference of shades. The arrows in (c) and (d) represent the flow velocity at their starting points, and the scales are shown at the bottom of each panel.

Fig. 4 The distribution of averaged molar concentration $\bar{\chi}$ of gas-A along channels H and C. The values for the case shown in Fig. 3. (a) Channel H and (b) channel L. —: The case with the array of micro-channels M; ·····: the case without M. The arrow $\longleftrightarrow$ represents the position of M.

度変化が下流側に及ぶ様子が見られる。濃度の X 方向の変化を **Fig. 4** に示す。図では、流路 H, C 各々について、流路断面にわたっての平均モル濃度 $\bar{\chi}$ の分布を、Fig. 3 のケースに対応する値を実線で、マイクロチャンネル列 M を取り除いたケースの結果を点線で表している。マイクロチャンネル列下流 ($X > 0$) の両者の分布を比較すると、マイクロチャンネル列が在るケースの濃度が、流路 H で高く、流路 C で低くなる。これが、マイクロチャンネル列 M から取り出された混合気体濃縮効果である。両者の $\bar{\chi}$ の値の差を $0 < X/d < 40$ の範囲で平均した値を $\Delta\bar{\chi}_H$ (流路 H), $\Delta\bar{\chi}_C$ (流路 C) と定義すれば、 $|\Delta\bar{\chi}_H| + |\Delta\bar{\chi}_C| = 0.014$ である。流路 H, C 内における X 方向の混合気体の平均流速は、Fig. 3 のケースで $0.15(2\kappa T_H/\bar{m})^{1/2}$ [流路 H, κ : Boltzmann 定数, $\bar{m} = (m^A + m^B)/2$], $0.16(2\kappa T_C/\bar{m})^{1/2}$ (流路 C) であり、これが濃縮気体の単位時間・単位断面積当たりの生成量に対応する。

分離装置に流入する A 気体の濃度と濃縮効果の関係を調べるため、 χ_0 の値を変えて計算を行った。計算量の制約上、これらの計算は流路 H, C を $L/d=100$, $D/d=50$ に縮小し、流路 H, C 内部の流速が同程度になるように $r_p=0.7$ 変更した。得られた $|\Delta\bar{\chi}_H| + |\Delta\bar{\chi}_C|$ の値を、比較のためのスケールファクター $1/\chi_0 + 1/(1-\chi_0)$ を用いて **Table 1** に示す。Kn の値が不統一であるため、その値も共に示した。この比較では、どの濃度 χ_0 でも同程度の濃縮効果が現れている。

流路 H, C の幅 D の影響についても調べた。 $L/d=100$, $\text{Kn}=0.5$, $\chi_0=0.5$, $r_p=0.7$, $r_T=1.19$ の場合、 $D/d=20, 50, 100$ の 3 ケースの結果を **Fig. 5** に示す。流路 H 内のモル濃度 $\bar{\chi}$ の分布を、マイクロチャンネル列 M が在る場合と無い場合について示してある。いずれのケースでも、計算領域の下流側の半分程では濃度変化が大きい、これは下流端に配置した蒸気分圧比 χ_0 の仮想的な凝縮層界面の影響である。マイクロチャンネル列近傍の濃度分布から、流路幅 D/d つ

Table 1 The effect of micro-channel on the molar concentration of gas-A for various values of molar concentration in channels H and C. The value $|\Delta\bar{\chi}_H| + |\Delta\bar{\chi}_C|$ with scale factor $1/\chi_0 + 1/(1-\chi_0)$ versus χ_0 . The case for $t/d=3$, $T_H/T_C=3$, $m^B/m^A=10$, $L/d=100$, $D/d=50$, $r_p=0.7$ and $r_T=1.19$. The values of Kn are shown in the table.

	χ_0				
	0.10	0.30	0.50	0.70	0.90
$\left(\frac{1}{\chi_0} + \frac{1}{1-\chi_0}\right) (\Delta\bar{\chi}_H + \Delta\bar{\chi}_C)$	0.12	0.13	0.13	0.11	0.10
Kn	0.90	0.70	0.50	0.70	0.90

Fig. 5 The effect of the width D of channels H and C. The distribution of molar concentration $\bar{\chi}$ of gas-A along channel H. The distributions of two cases with and without M for each value of $D/d=20, 50$ and 100 . The case for χ_0 and $\text{Kn}=0.5$ (see the caption of Table 1 for other parameters).

まり流路を流れる混合気体の総量が小さくなるほど、マイクロチャンネル列 M による濃度差が大きく現れることが分かる。また、M が無い場合に明確のように、流路幅 D/d が小さくなるにつれ、流路下流の状況が流路全体に拡散する様子が見られる。

DSMC 計算のパラメータを示しておく。セルサイズは、Fig. 1 以外、一辺 $d/2$ の正方形である。計算粒子の個数は温度 T_C 、圧力 p_C の平衡状態で両成分の合計が 200 個/セルとした。時間発展を、ケースに応じて時刻 $5 \times 10^3 t_c \sim 8 \times 10^3 t_c$ [$t_c = (2\kappa T_C/m^A)^{-1/2} d$] まで追った後、 $10^3 t_c$ 間の時間平均量を定常状態として採用した。なお、時間ステップは $10^{-3} t_c$ である。Fig. 3 のケースについてはセルの一辺を $d/4$ に変えた計算も行ったが、平均モル濃度 $\bar{\chi}$ の分布には DSMC 計算に付随するばらつき程度の影響しか見られない。

5. おわりに

熱駆動流の持つ混合気体分離効果を、外部に連続的に取り出す可能性について数値解析を行った。本稿の結果から、約 5% の濃度差が得られるマイクロチャンネルを用いた時、1 ~ 3% の濃度差を外部に取り出せることが分かる。マイクロチャンネルの数、Knudsen 数、流路 H, C 内の流速を選ぶことで、より多くを取り出せる可能性もある。もちろん、本稿で用いたマイクロチャンネル列を、Knudsen ポンプ・熱尖

端ポンプに置き換えれば，大きな濃度差が得られるだろう．これらのデバイスは多段接続が可能であり，温度比を小さく保ったままでも，デバイス両端の濃度差を自由に増やせるためである．

〔文 献〕

- 1) Y. Sone: *Molecular Gas Dynamics, Theory, Techniques, and Applications* (Birkhäuser, Boston, 2007).
- 2) H. Sugimoto, S. Takata and S. Kosuge: in *Rarefied Gas Dynamics*, ed. M. S. Ivanov and A. K. Rebrov (Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences, Novosibirsk, 2007) p. 1158.
- 3) S. Takata, H. Sugimoto and S. Kosuge: *Eur. J. Mech. B/Fluids*, **26** (2007) 155.
- 4) H. Sugimoto: in *Rarefied Gas Dynamics*, ed. T. Abe (AIAA, NY, 2008) p. 1123.
- 5) H. Sugimoto: *Sinku*, **49** (2006) 481 [in Japanese].
- 6) G. A. Bird: *Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows* (Clarendon, Oxford, 1994).