

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 29 年 4 月 13 日現在

機関番号：14301

研究種目：挑戦的萌芽研究

研究期間：2015～2016

課題番号：15K13870

研究課題名(和文)空隙路を確率的に考慮する多孔質内気体輸送の運動論モデル

研究課題名(英文)Simple kinetic modeling of gas transport in porous media

研究代表者

高田 滋 (Takata, Shigeru)

京都大学・工学研究科・教授

研究者番号：60271011

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 2,600,000円

研究成果の概要(和文)：多孔質内の気体輸送の物理モデルとして、気体分子運動論に基づく、簡易なモデルを提案した。気体分子同士の衝突が無視できる、クヌーセン拡散と呼ばれる状況を主に調べた。通常の印加圧力に対するコンダクタンス特性を調べただけでなく、多孔質に一樣ではない温度分布を与えることで、熱駆動型の流動デバイスとなりうることを数値計算と理論解析により示した。この状況に対しては、とくに電気回路の熱電効果と同様の定式化が可能で、熱駆動型デバイスに関する種々の理論的予測が得られ、数値計算によっても、その予測の妥当性が示された。

研究成果の概要(英文)：We have proposed a simple kinetic model for the gas transport in a porous media.

We have studied not only the conductance against the pressure difference but also the feasibility of the porous media with nonuniform temperature as a thermal pumping device from a view point different from the existing works. Particularly, we have established a theoretical framework for the thermal pumping effect by the analogy to that of the thermo-electricity. We have numerically verified the validity of our theoretical predictions as well.

研究分野：分子気体力学

キーワード：ボルツマン方程式 多孔質 クヌーセン拡散 熱電効果 熱駆動ポンプ

1. 研究開始当初の背景

マイクロ、ナノレベルの空隙構造をもつ多孔質内の気体流れでは、通常の連続体仮定にもとづく流体力学が有効性を失う。これはその理論構成が局所平衡を暗に前提とするからである。この前提の束縛がないマイクロあるいはメソスコピックな立場による現象記述が必要とされる。対象の流れによる質量、熱輸送の理解には、排気触媒や燃料電池（とくに電極付近）など、化学反応を伴う流れへの将来の応用も視野に入れた拡張性の高いモデリングが不可欠である。

分子動力学法や気体分子運動論に基く数値計算法では、多孔質の空隙路（空隙が作る流路）を表現するために周期箱に固相を模擬した単純形状の障害物をおいて力学的、熱的コンダクタンスを調べる方法がよくとられる。実際の多孔質の画像データをみれば空隙の様子は同じ部材でも様々であり、障害物の形や配置を変えてコンダクタンスの統計量を調べるのは効率的でない。また、選んだ障害物の形、配置が実際の空隙路をどう統計的に反映しているかも自明ではない。もっと大胆なダスティガスモデル（乱雑に方向を与えた直管や曲がり管を使ったコンダクタンス評価法）が広く用いられているが、コンセプトにやや無理があり、物性値との対応が自明でないことにならない。

以上のように、たとえ多孔質のサンプル画像データが得られ、空隙路を正確に再現したシミュレーションが行えたとしても、所詮、空隙路はサンプルごとに異なる。空隙路の詳細は、多孔質内の流動特性を決める物性パラメータという統計量（空隙率、部材の表面積、熱伝導性など）を通して反映されるにすぎない。流体が透過できない多孔質内壁の正確な位置予測はそもそも不可能だし、それ自体に意味もない。そこで本研究では、多孔質を散乱子で構成された連続媒質としてモデル化し、気体分子の自由飛行距離を決める散乱子との衝突頻度に空間、速度方向の依存性を与えて統計的な効果を取り入れることを基本コンセプトとする簡易な現象のモデル化を志向した。これは散乱子の連続媒質を考えるとという点で電子伝導、フォノン伝導の緩和型運動論モデルと似ている。この類似性は意図したもので、提案するモデリングの概念、方法論に広い汎用性、拡張性をもたせることを狙ったのであり、伸びしろの大きな枠組みを目指した。

2. 研究の目的

本研究の目的は、電子伝導の運動論モデルにおける散乱子（格子イオン）の役割に注目し、そのアナロジーから簡易で拡張性に優れた多孔質流れの運動論モデルを開発することである。電子伝導、フォノン熱伝導の運動論モデルとしてよく用いられる衝突緩和型モ

デルを基礎として、コンセプトに無理のない簡易な統計的モデルを構築する。コンセプトの単純さと実装の容易さが提案する新しい方法論の急所であり、これを押さえた開発を進める。要所を明確にし将来の拡張性の基礎とするため、本研究では気体分子と多孔質内壁の相互作用が支配的となるパラメータ領域（クヌーセン領域；クヌーセン気体）での輸送現象に対象を絞り込んだ。

3. 研究の方法

本研究は電子伝導、フォノン熱伝導の運動論モデルを参考にした理論構成と差分解析および確率解法に基づく数値シミュレーションによる検証を柱とする。

具体的には以下の4つの細目課題（3, 4は当初計画から軌道修正したもの）に取り組み、志向する運動論モデルの有効性を検討した。

1. クヌーセン気体の熱遷移法則に対する実験データの再現性の検討。
2. 上記法則の多孔質内温度分布に対するロバスト性と普遍性の検討。
3. 易動度の空間依存性による空隙路の再現性。
4. 周期構造によるポンプ効果の可能性の検討。

4. 研究成果

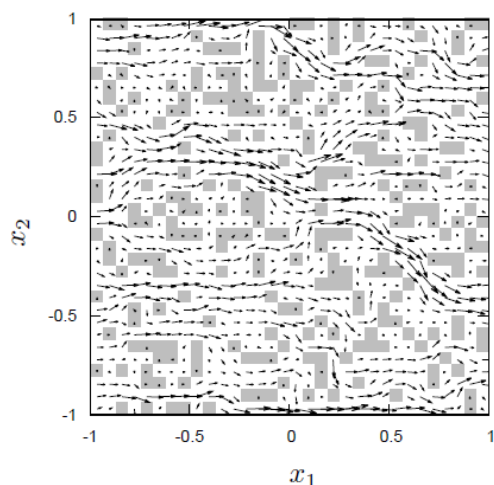
境界との衝突効果を境界条件としてではなく衝突積分として方程式内部に取り入れるのが提案モデルである。

衝突頻度に速度方向依存性を与えないもっとも単純な媒質を想定して、まずクヌーセン気体の熱遷移法則を調べた（細目課題1および2）。これは圧力や温度が異なる2つの貯気槽を毛管や多孔質でつないだとき、圧力駆動と熱駆動の流れが相殺して釣り合うときの圧力比と温度比の間の関係のことである。両者の間に媒質との衝突頻度に応じたべき則が成り立つことを見出した。また、このべき則は媒質の温度分布の詳細にはほとんどよらないロバスト性を示した。これらの検討事項は、提案モデルに対する最初の試金石であり、計画当初に期待された予想に対して肯定的な結果が得られたことを意味する。モデルの有用性に明るい見通しを与えたといえる。

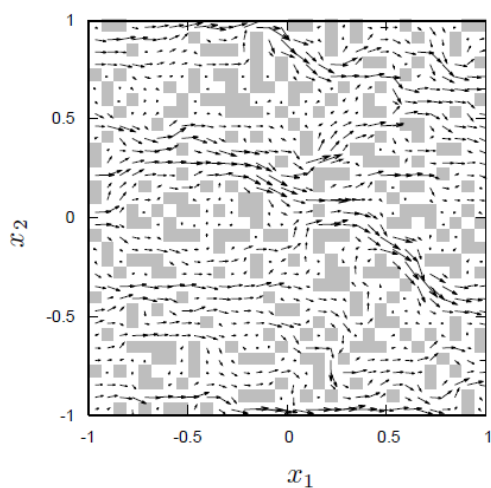
上の結果は提案する運動論モデルを差分法で数値解析した結果に基づいている。この数値解析の結果をさらに詳細に検討するために、媒質との衝突頻度が高い場合の漸近解析を行った。衝突頻度が高い場合には媒質内の濃度分布が拡散方程式に従うこと、また異温度の媒質の接合面に境界層が発達すること、またそこにおける物理量の接続条件を明らかにした。境界層の構造を定める空間一次

元半無限領域の要素問題を特定し、その数値解を求めることで、種々の条件下での密度場を記述する拡散方程式型の縦約モデルを確立した。一方、この要素問題はいわゆる Milne の問題の亜種であるが、その解の数学的な意味での性質の検討は未着手のまま残されている。

つぎに細目課題3および4について述べる。ここで3はおもに模擬粒子を用いた確率解法により従来モデルとの比較による簡易モデルの手法の有効性を調べた。一例を下図に示す。



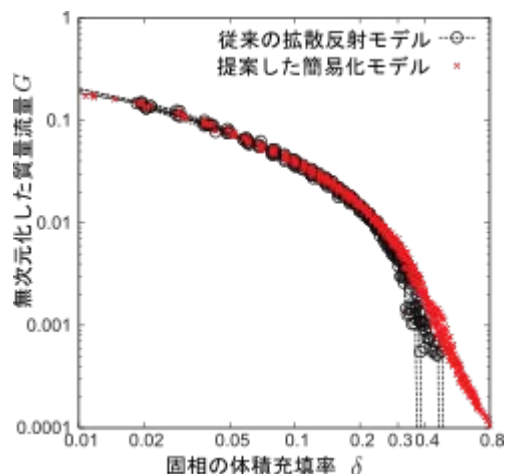
(a) 境界条件を用いた従来モデル化



(b) 境界条件を用いない簡易モデル化

この図は左右に圧力差（左を高圧）を与えたときに起こる気体の流れを→の向きと長さで表したものである。上下面は周期境界として扱っている。図中の網掛け部は多孔質の固相部であり、簡易モデル(b)では固相の表面に通常の固体表面での境界条件を用いる従来のモデル化は行わず、白抜き部との違いは衝突頻度の違いによって表されている。そのような簡易なモデル化を行っても流れの様子は従来のモデル化を施した(a)とほとんど

区別がつかない。簡易モデルの有効性が端的に示されたといえる。このような従来手法の結果との良好な一致は、印加圧力に対するコンダクタンスを見ても確認される。例えば下図は固相が詰まって流路を遮蔽する臨界値（ $\delta \sim 0.4$ 前後；パーコレーション・スレシヨールド）に達するまでの広い範囲の充填率に対して良好な一致が見られることを示している。



細目課題4の検討にあたっては、多孔質と温度分布の周期構造を考え、それに対する理論的考察を電気回路における熱電効果のアナロジーから進めた。主に次の知見が得られている：

- 質量流量の表式において流量をゼロとすると、印可した温度勾配と「釣り合う」気体の圧力勾配が得られる。こうして得られる圧力上昇は切断した電気回路における熱起電力にあたる。この対応に注目して多孔質中の気体に対する「Seebeck 係数」を導入することができる。これは温度だけの関数である。
- 「Seebeck 係数」は混合気体における熱拡散比に対応する量でもある。
- 質量流があるとき、熱流は通常の熱伝導によるものと質量流に比例するものから成る。後者における比例係数は温度だけで決まり、熱電現象では Peltier 係数と呼ばれている。この対応をもとにして多孔質中の気体に対する「Peltier 係数」を定めると、「Seebeck 係数」との間に Thomson (Kelvin) の第一関係式と全く同じ関係が成り立つ。
- 温度勾配を与えて流れを起こすとき、気体と多孔質の間でエネルギー収支が起こる。この中には流れの反転によって発熱・吸熱の向きが逆転する寄与が含まれている。これは熱電現象における Thomson 熱にあたる。この対応によって定義される多孔質内の気体の「Thomson 係数」は「Peltier 係数」、「Seebeck 係数」と簡単な関係で結ばれている。しか

しこの関係は熱電現象における Thomson (Kelvin) の第二関係式とは少し形が違
う。

- 異種多孔質の接合部ではエネルギー流
が連続にならないため、そこで発熱か吸
熱が起こる。これは Peltier 熱に対応す
る。接合部で温度に不連続な跳びがなけ
れば、この熱量は Peltier 係数の差異と
質量流量の大きさの積で決まる。これは
熱電現象の場合と全く同じである。

以上の知見に基づき周期構造を調べた結果、
熱起電力に対応する圧力差の効果はクヌー
セン領域では概して相殺的であった。さらに、
正味の流れが生まれない完全な相殺が起こ
る条件を明らかにした。その副産物として次
の定理を得た：

「単一種の多孔質にいくら温度変化をつけ
ても流れは生じない。」これは熱電現象にお
ける Thomson の定理に対応するが、温度変化
には不連続なとびまでが許されるという意
味で主張の範囲は少し強い。

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者に
は下線)

〔雑誌論文〕 (計 0 件)

〔学会発表〕 (計 2 件)

高田 滋，多孔質内気体流と熱電効果の類似
性について，日本流体力学年会 2016，名古
屋工業大学 御器所キャンパス，2016 年 9
月 26 日－28 日。

笠原史禎，高田 滋，多孔質物体内を流れる
希薄気体の簡易モデルとその粒子法による
解析，京都大学工学研究科附属桂インテック
センター流体基礎工学研究部門 第 4 回 公開
セミナー，京都大学 桂キャンパス，2017
年 3 月 6 日

〔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〕

該当なし

6. 研究組織

(1) 研究代表者

高田 滋 (TAKATA, Shigeru)

京都大学・大学院工学研究科・教授

研究者番号：6 0 2 7 1 0 1 1

(2) 研究分担者
該当なし

(3) 連携研究者
該当なし

(4) 研究協力者
該当なし