Japan Society of Fluid Mechanics

表面反応を伴った多孔質体内を流れる気体の熱流動解析

Numerical Analysis of Gas Flow in Porous Media with Surface Reaction

○ 泊川　晃, 東北大院, 仙台市青葉区荒巻字青葉, E-mail:tomarikawa@chapman.ifs.tohoku.ac.jp
米村　茂, 東北大流体研, 仙台市青葉区片平 2-1-1, E-mail:yonemura@ifs.tohoku.ac.jp
徳増　崇, 東北大流体研, 仙台市青葉区片平 2-1-1, E-mail:tokumasu@ifs.tohoku.ac.jp
小井戸　哲也, 本田技術研究所, 和光市中央 1-4-1, E-mail:tetsuya_koido@n.f.rd.honda.co.jp
Ko TOMARIKAWA, Graduate School of Engineering, Tohoku University, Aza-aoba, Aramaki, Aoba-ku, Sendai, 980-8579
Shigeru YONEMURA, Institute of Fluid Science, Tohoku University, Katahira 2-1-1, Aoba-ku, Sendai, 980-8577
Takashi TOKUMASU, Institute of Fluid Science, Tohoku University, Katahira 2-1-1, Aoba-ku, Sendai, 980-8577
Tetsuya KOIDO, Fundamental Technology Research Center, Honda R&D Co., Ltd., Chuo 1-4-1, Wako, 351-0193

Gas flow with surface reaction in porous media appears in various regions of engineering. In porous media with holes as small as a molecular mean free path, Knudsen number Kn of gas flow in the narrow channel is in the order of unity. Therefore, we perform 2D DSMC (the direct simulation Monte Carlo) simulations of such a flow. The shape of narrow channel in porous media is complicated. To reduce complexity, we propose the simplification for porous structures, i. e., we simplify solid bodies in porous media as aggregations of cubes or as aggregations of polyhedra. We perform simulations with and without simplification. We compare results and investigate effects of the simplification.

1．緒言

本研究では，化学反応を伴った多孔質体内の流れの数値シミュレーションを行う．流路を微小な球形粒子をランダムに配置することによって与える．この多孔質体表面を，近似無しに球形粒子の集合として取り扱った場合，球形粒子を細分化して微小な立方体の集合として近似した場合，球形粒子を多面体として近似した場合のシミュレーション結果を比較し，これらの近似が与える影響について調べる．本計算では，流れ場を２次元としたため，上記の立方体近似は正方形近似，多面体近似は多角形近似となる．

2．計算手法

ナノスケールの流れでは分子間衝突の頻度が少なく，流れは非平衡になり連続体として取り扱うことができず，その支配方程式はボルツマン方程式になる．本研究ではボルツマン方程式の確率解法である Direct Simulation Monte Carlo (DSMC)法[1]を用いた．計算領域は x 方向に 180 nm, y 方向に 540 nm である．左右の境界は周期境界とした．上下の境界は自由境界とし，境界外に T_g=293 K, P=101325 Pa, y 方向の流速 v_y=1 m/s の水素があるとして，境界条件を与えた．前述したように，半径 30nm の円柱（球形粒子）の集合によって多孔質体を表現した．この流路を，さらに微小な正方形の集合あるいは多角形により近似した．正方形の大きさは，一辺の長さを d とし，d=18 nm, 9 nm, 4.5 nm の 3 種類とした．また，多角形によって近似する場合は，中心角が基準の θ_0 以下となるように頂点を与える方法を採用した．θ_0=30°, 60°の 2 種類とした．ここでは一個の粒子表面でのみ，確率 P=0.2 で水素分子 H_2 が水素原子 H に解離する反応が起こるものとした．解離した水素原子は，再び空間に放出されるものとした．

3．計算結果

Fig. 1 に多孔質体の固体壁面として球形粒子（円柱）の表面を近似無しにそのまま使って計算した場合の H_2 の数密度の分布を示す．表面反応を起こす粒子の位置も図中に示している．反応により H_2 が消費されていることがわかる．ここでは結果を示さないが，多角形で近似した場合には，H_2 の分布は Fig. 1 の近似無しの場合とほぼ一致した．正方形で近似した場合には，H_2 がより多く消費され，低密度の分布となった．これは，正方形で近似することにより反応に関わる表面積が増加したことが原因であると考えられる．y=268.5 nm の位置における H の数密度分布を Fig. 2 に示す．正方形で近似した場合の正方形のサイズを小さくすると，球形粒子（円柱）の場合の分布にある程度近づくが，一致することはなかった．一方，多角形で近似した場合には，θ_0=30°, 60°のいずれの場合でも球形粒子の場合と良い一致を示した．このことから，表面反応を伴う流れを取り扱う場合には，立方体による近似よりも，多面体による近似がより適していることが分かった．

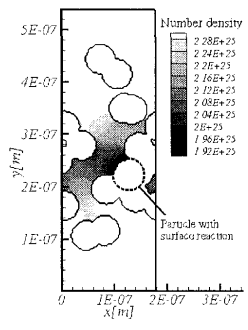

Fig. 1 Number density of H_2. (no approximation).

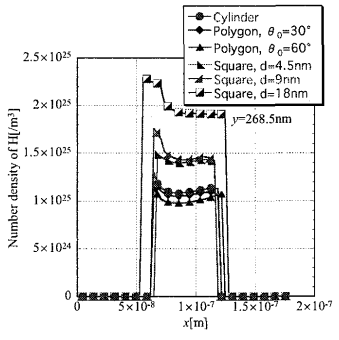

Fig. 2 Effect of simplification on the number densities of H atoms.

4．結言

本研究では多孔質体内の構造を立方体の集合および多面体の集合として近似し，近似の与える影響について調査を行った．表面反応を伴う場合には，立方体による近似の精度が低く，多面体による近似は精度が高いことが明らかとなった．

参考文献

(1) G. A. Bird, *Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows*, Clarendon, Oxford, 1994.

NII-Electronic Library Service