

科学研究費助成事業（科学研究費補助金）研究成果報告書

平成 25 年 6 月 12 日現在

機関番号：14401

研究種目：若手研究(B)

研究期間：2010～2012

課題番号：22760130

研究課題名（和文）

数値流体力学による気液界面への固体粒子吸着現象の解明と予測

研究課題名（英文）

Investigation of solid particle attachment to gas-liquid interface by means of computational fluid dynamics

研究代表者

大森 健史 (Takeshi Omori)

大阪大学・大学院工学研究科・助教

研究者番号：70467546

研究成果の概要（和文）：

本研究を遂行するにあたり、気液界面と固体粒子表面間に形成される液膜流れおよび移動する固気液三重線に対する数値計算手法の開発をそれぞれ行った。開発した計算手法による解析から、固体粒子表面の幾何形状が粒子吸着挙動に支配的な効果を及ぼすことが明らかになった。開発した計算手法の計算コスト軽減および粒子吸着の初期過程で生じる液膜破断の支配因子解明については今後の課題として残されている。計算コードの再利用性を高めるため、計算手法の実装はテンプレート、仮想関数および演算子多重定義を用いて行った。

研究成果の概要（英文）：

It was elucidated that the surface geometry of the solid particles has a dominant influence on the particle attachment to the gas-liquid interface by the numerical analyses, which were performed with the numerical methods developed in this project. The development of the numerical method was focused on the description of the moving three-phase contact line and the liquid film flow between the gas-liquid interface and the solid surface. On the reduction of computational cost and the elucidation of the dominant physical factors in the liquid film rupture is required more study in the future. To enhance the reusability of the code, the numerical methods were implemented with template, virtual function and operator overloading.

交付決定額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2010年度	700,000	210,000	910,000
2011年度	500,000	150,000	650,000
2012年度	500,000	150,000	650,000
年度			
年度			
総計	1,700,000	510,000	2,210,000

研究分野：数値流体力学

科研費の分科・細目：機械工学・流体工学

キーワード：数値流体力学、界面、濡れ性、混相流、固気液、オープンソース・ソフトウェア

1. 研究開始当初の背景

| 固体粒子の気液界面への吸着が起きるため

には、粒子表面と気液界面間の液膜が自発的に破断する厚さになるまで、粒子が流体中を運動し気液界面に接近する必要がある。Yoon(2000)は実験的研究により、吸着現象において流体力学的効果が化学ポテンシャルの影響と共に支配因子であることを示しており、液膜破断の解析には異相界面間の動的な流体力学を考慮することが不可欠であるとわかる。従来の解析は、界面の変形や固体粒子の誘起する流れを考慮しない静的なものにとどまっておき、現象の有用な予測とはなっていない。

そこで申請者は、気液界面の変形と粒子運動を連成させる手法を開発し、解析精度の検証を行ってきた。その結果、粒子回りの解像度を上げることで液膜流れの解析結果が一定値に収束し、従来の手法との比較が行える静的な条件では解析結果が厳密解との良好な一致を示すという成果を得た。この手法は気液界面の解析精度が高いために、液膜破断に対する界面間化学ポテンシャルの影響を調べられるよう、拡張させることが可能である。また、適用範囲についてなるべく一般性を失わないよう設計してあるため、多数粒子と気液界面の相互作用を解析することが可能であり、粒子の気液界面上での運動(吸着および離脱)を解析可能な手法へと発展させることができる。濡れや動的接触角については、近年、分子動力学法(MD)による研究が盛んに行われているが、工学的応用として興味深いのは、流れに乗った固体粒子(群)の気液界面への吸着というマクロな現象であり MD で扱える時空間スケールではない。本研究において、濡れモデルをマクロな現象論として構成し、数値流体力学による吸着現象の解析手法を開発することは意義がある。

界面を利用した生産・分離技術としては、新材料の生産プロセスとして近年着目されているマイクロリアクタや既に幅広く使用されている浮遊選鉱が代表例として挙げられる。これらの工業プロセスでは、固体微粒子の吸着を含めた気液(液液)界面の制御が技術的核心であり、高効率化へのブレークスルーや新技術創出のためには、本研究で供するような物理法則に基づいた現象の予測が不可欠である。

2. 研究の目的

流れの中での、気液(液液)界面に対する固体粒子(群)の吸着は、界面を利用した工業プロセス(一例として、近年新たな生産形態が活発に研究されているマイクロリアクタが挙げ

られる)の成否を決する重要な物理現象である。コンピュータを用いた吸着現象の解明・予測(詳細な現象解析による理由付けは実験では困難)は、界面を利用した新たな生産・分離技術の創案につながると考えられる。吸着は、固液・気液界面間の液膜破断をとめない、従来の手法では正確な解析が困難である。本研究では、気液(ないし液液、以下同様)界面変形の高い解析精度と複数の移動固体周り流れの解析能を兼ね備えた、新しい混相流の数値解析手法を開発する。

3. 研究の方法

(1) 気液(液液)界面との相互作用問題への適用を前提とした埋め込み境界(IB)法の開発

申請者は、多数の固体粒子周りの流れと気液界面の流体力学的相互作用の解明を目的とした埋め込み境界法(IB法)を開発している。この手法では、固液界面近傍において固体を計算セル内の体積率を用いて擬似流体的に取り扱う。気液界面と固体粒子が近接するときには解析精度は向上するものの、固体粒子が計算格子の粗い領域にあるときの解析精度が課題である。

IB法における解像度不足への対処として、例えばPHYSALIS法(Prosperettiら, 2001)を応用することが考えられる。しかし、この手法は固体表面近傍の流れをストークス近似するもので、変形する気液界面が固体粒子の近傍にある場合に適用できるか疑問である。本研究では、一般化有限差分法(Ilievら, 2002)に基づくサブグリッド計算手法を構築する。一般化有限差分法は、他のメッシュフリー法とは異なり、微分演算子の離散化に特別な仮定を用いない。したがって、適用範囲の限定されない、より普遍的な計算手法を構築することができる。

(2) 界面間ポテンシャルの評価

気液(液液)界面の相互作用を考える際に重要な界面間ポテンシャルは、静電ポテンシャル、van der Waals分散ポテンシャル、疎水性ポテンシャルの3種である。これらのポテンシャル式は全ての物質について明らかになっているわけではないが、 10^{-5} mol/L DAH水溶液中におけるシリカ・空気気泡間についてはYoon(2000)により示されている。まず、準静的に固体粒子と気液界面を近づけたときについて、Yoonの実験結果を比較対象として計算手法の検証を行う。次に流体力学的効果が支配的になるケース(例え

ば、上昇する気泡が上方壁面に衝突する問題)における解析により、界面間ポテンシャルが、流れにおけるマクロな界面相互作用に及ぼす影響を明らかにする。

(3) 吸着に対する計算手法の開発

吸着が起こる際に固体表面と気液界面間の液膜が破断するのは、(2)で考慮した界面間ポテンシャルによる引力が気液界面における表面張力および流体力を上回るためであると考えられる。さらに、吸着が起こり、三相界線が存在する状況下での動力学を解析するために、近年 Qian(2003)により提案されたナビエ条件(GNBC, 三相界線が静止しているときと移動しているときの、固体表面にかかる応力の差を与える)を応用して、固体表面の濡れのヒステリシスをモデル化する。

4. 研究成果

本研究を遂行するにあたり気液界面の移動・変形と固体粒子運動の相互作用を解析するための新規計算手法が必要であり、気液界面と固体粒子表面間に形成される液膜流れおよび移動する固気液三重線に対する数値計算手法の開発をそれぞれ行った。

本研究を完遂するためには、数値流体モデルに親和する形での濡れの現象論的モデル作成が最も本質的な課題の一つであるとの認識から、その点について重点的に研究を行った。関連して、計算格子を気液界面に沿って形成する場合(当初計画)だけでなく固体表面に沿って形成する場合に適した計算手法も開発したが、本研究の成果内では、固体表面での濡れ性解析を重視する場合や気液界面が大変形する場合においては後者の枠組みが有利であった。開発した計算手法による解析から、マイクロリアクタのように気液界面積が作動流体積に対して相対的に大きくなる場においては固体粒子表面の幾何形状が粒子吸着挙動に支配的な効果を及ぼすことが明らかになった。開発した計算手法の計算コスト軽減および粒子吸着の初期過程で生じる液膜破断の支配因子解明については今後の課題として残されている。

数値計算に関する研究成果公開の方法としてソースコードの公開が考えられるが、発展的な効果を期待するならば個別の動作プログラムの公開では不十分で、分散開発を前提としたコード設計に基づいた実装ライブラリの公開が求められる。このような問題意識に基づき、本研究においてはテンプレート、仮想関数および演算子多重定義を用いて任

意多面体格子に対応した連続体力学ソルバを開発した。今後、SourceForge などにおける公開を予定している。

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1件)

- (1) 得津、大森、梶島、上昇する気泡周りの流れと物質移動に関する数値シミュレーション、混相流、査読有、24-5、(2011)、pp. 539-547

[学会発表] (計22件)

- (1) T.Ochiai, T.Omori and T.Kajishima, Numerical Investigation of Droplet Motions on Heterogeneous Surfaces, International Conference on Multiphase Flow, 2013.5.28, Jeju (Korea)
- (2) S.Kawamoto, T.Omori and T.Kajishima, Development of Interface Capturing Method for Dissolving Bubbly Flow, International Conference on Multiphase Flow, 2013.5.27, Jeju (Korea)
- (3) 藤田、大森、梶島、濡れ性を有する固体壁面に対する衝突液滴の数値解析、数値流体力学シンポジウム、2012.12.18、東京
- (4) 清水、大森、梶島、翼近傍の気液二相流の数値解析、数値流体力学シンポジウム、2012.12.18、東京
- (5) T.Omori and T.Kajishima, Templated and Object-Oriented Design for Shared Multiphysics Software Development, 4th International Conference on Computational Methods, 2012.11.26, Gold Coast (Australia)
- (6) K.Shibata, T.Omori and T.Kajishima, Numerical Analysis of Gas-Liquid Interface Instability due to Impinging Jet, The Eighth KSME-JSME Thermal and Fluids Engineering Conference, 2012.3.20, Incheon (Korea)
- (7) 清水、大森、梶島、境界適合格子におけるVOF法を用いた自由界面近傍の物体に作用する流体力の解析、数値流体力学シンポジウム、2011.12.21、大阪
- (8) 伊東、大森、梶島、分子気体力学に基づく相界面条件を考慮した圧力ベース解法による蒸発流の数値計算、数値流体力学シンポジウム、2010.12.21、横浜
- (9) S.Matsuoka, T.Omori and T.Kajishima,

Finite-Element Formulation of Fluid Flow with Moving Boundaries on Dynamically Distributed Nodes, International Symposium on Transport Phenomena, 2010.11.4, Kaohsiung (Taiwan)

- (10) J. Itoh, T. Omori and T. Kajishima, A Pressure Based Method for Multi-phase Thermo-fluid flow with Phase Change, World Congress on Computational Mechanics, 2010.7.21, Sydney (Australia)
- (11) T. Omori, M. Taniguchi, S. Ueno and T. Kajishima, Numerical Simulation of Gas-Liquid Flows with Three-Phase Contacts, World Congress on Computational Mechanics, 2010.7.21, Sydney (Australia)
- (12) 上野、大森、梶島、動的濡れ性を考慮した 3D-VOF 法による固体表面に落下する液滴の挙動の数値シミュレーション、日本混相流学会、2010.7.17、浜松
- (13) T. Omori, Z. Tukovic and T. Kajishima, Interface Resolving Simulation of Bubble-Wall Collision Dynamics, International Conference on Multiphase Flow, 2010.6.2, Tampa, Florida (USA)

6. 研究組織

(1) 研究代表者

大森 健史 (Takeshi Omori)
大阪大学・大学院工学研究科・助教
研究者番号：70467546

(2) 研究分担者

()

研究者番号：

(3) 連携研究者

()

研究者番号：