

## 科学研究費助成事業 研究成果報告書

令和元年6月20日現在

機関番号：14401

研究種目：挑戦的萌芽研究

研究期間：2016～2018

課題番号：16K13737

研究課題名（和文）水プラズマ廃棄物処理プロセス最適設計のためのマルチフィジックスシミュレータの開発

研究課題名（英文）Development of multi-physics simulator for process optimization of waste treatment by water plasma

研究代表者

茂田 正哉（Shigeta, Masaya）

大阪大学・接合科学研究所・准教授

研究者番号：30431521

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 2,900,000円

研究成果の概要（和文）：水プラズマによる廃棄物無害化処理プロセスを対象とし、1万に及ぶ超高温環境での流動現象と物質分解機構や有害副生成物の再合成・輸送機構を再現・予測できるシミュレータを開発することを目的として研究を遂行した。プラズマと非電離気体が相互作用する領域における渦群形成過程およびその領域で均一核生成・不均一凝縮・粒子間凝集を経て集団的に生成する超微粒子群の反応非平衡・輸送過程をシミュレートすることに成功した。これらは磁場によって制御可能であることも明らかにした。また、金属・スラグ・フラックスが混在する系における溶融・表面変形・溶落ちおよびマランゴニ対流を伴う複雑流動現象のシミュレーションにも成功した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

水プラズマというOHラジカル・酸素ラジカル・水素ラジカルを豊富に含んだ反応流体を用いることで、難分解性の廃棄物を大量処理でき、かつ有害な副生成物も発生しないクリーンな流体プロセスが実現するため、本研究成果は現在の環境問題解決への一助となる大きな社会的意義を有する。また本研究を通して、水プラズマ廃棄物処理プロセスに内在する分解反応、蒸発現象、プラズマ流動現象、エネルギー・物質輸送メカニズム等が普遍的かつ学際的立場から解明されるといふ高い学術的意義を有し、さらに他分野への大きな波及効果も付随する。

研究成果の概要（英文）：The purpose of this study is to develop a comprehensive simulator which can predict flow dynamics and material decomposition in intensively high-temperature environment around 10,000 K and reproduction-transport processes of hazardous by-products in waste detoxification treatments by water plasma. The processes of eddy generation and ultrafine particle formation via homogeneous nucleation, heterogeneous condensation, and interparticle coagulation in the region where plasma and non-ionized gas interact were simulated successfully. The simulation indicated that these processes could be controlled by applying a magnetic field. Furthermore, complicated flows with melting, surface deformation, and Marangoni effect in a mixed system of metal, slag, and flux were simulated as well.

研究分野：流体工学

キーワード：計算物理

## 様式 C - 19、F - 19 - 1、Z - 19、CK - 19 (共通)

### 1. 研究開始当初の背景

難分解性であるため無害化処理が難しい化学物質は従来の塩素やオゾンでも分解できないため、酸化ポテンシャルがより高いOHラジカルによる処理に期待が寄せられている。水はプラズマ状態になると極めて活性の強いOHラジカル・酸素ラジカル・水素ラジカルによって構成された物質相となるため、この水プラズマを用いた有害廃棄物分解は他の手法を凌ぐプロセスであると言える。しかし、同時にプラズマ周囲の中低温領域で有害な副生成物の再合成も起こるといった問題も抱えている。この領域はプラズマが周囲の空気と複雑に混合する乱流領域であり、分子スケール・ピコ秒オーダーの再合成反応からミリメートルスケール・ミリ秒オーダーの乱流渦による物質輸送に及ぶ時空間マルチスケール過程をシミュレートできない限りメカニズムは解明されず、現象予測に基づいたプロセスの最適設計は達成できない。

### 2. 研究の目的

水プラズマによる廃棄物無害化処理プロセスを対象とし、1万 に及ぶ超高温環境での流動現象と物質分解機構や有害副生成物の再合成・輸送機構を再現・予測できるシミュレータを開発することを目的とする。難分解性物質の大量処理が可能という水プラズマの優位性を活かしつつ、有害な副生成物を発生させない低環境負荷かつ安全性も確保したプラズマ流動場を実現するための制御法の探索も行う。

### 3. 研究の方法

物質輸送の化学的非平衡性および流体力学的不安定性による渦群形成を表現できる高次精度のプラズマ乱流の数値計算コードと活性種の生成・再結合反応速度を考慮した数値モデルを組み合わせた非平衡プラズマ反応・輸送シミュレータを開発する。プラズマの物性値(粘性係数・熱伝導率・導電率など)を、プラズマを構成する分子・原子・イオンの衝突断面積データを使って算出するモジュールを作成し、約180倍の密度差の混合系にも適用可能な熱流体計算モジュールと電磁場計算モジュールを統合したプラズマ流動シミュレータに実装する。

粒子法の一つであるSPH(Smoothed Particle Hydrodynamics)法とDEM(Distinct Element Method)を基盤として、対象物の溶融に伴う流動および蒸発や分解による界面移動をシミュレートできる数値計算コードを開発する。現有の溶融金属流動シミュレータを熱伝達・表面変形・界面移動のみならず温度差に起因する表面張力勾配が駆動するマランゴニ対流も表現できるように機能拡張を行う。

界面プラズマ反応による分解過程や蒸発過程および運動量交換・エネルギー交換を数学的に記述し、情報を橋渡しするための数値計算モジュールを作成し、統合することで物質-プラズマ相互作用も考慮された当該目的のシミュレータ完成を図る。

### 4. 研究成果

超高温のプラズマと低温の非電離気体が共存し相互作用する環境において発現する流体力学的不安定性による渦群形成過程を高次精度でシミュレートするための計算手法を考案した。これにより、超高温のプラズマジェット領域に大きな渦が形成され、一方でその周囲の離れた領域に低温の小さな多数の渦群が誘起されることを、初めて明らかにすることに成功した(図1)。同時に、その領域で均一核生成・不均一凝縮・粒子間凝集を経て集団的に生成・成長する超微粒子群の反応非平衡・輸送過程も明らかにすることができた(図2)。さらには外部磁場を印加することで、そのような現象をコントロール可能であることも示した。

またプラズマを構成するイオンや中性原子といった重粒子の温度と電子の温度が異なる二温度性を考慮した数値シミュレーションを行った。その結果、特にプラズマ外縁部において熱非平衡性が顕著となり、重粒子温度と電子温度が異なることを明らかにした(図3)。

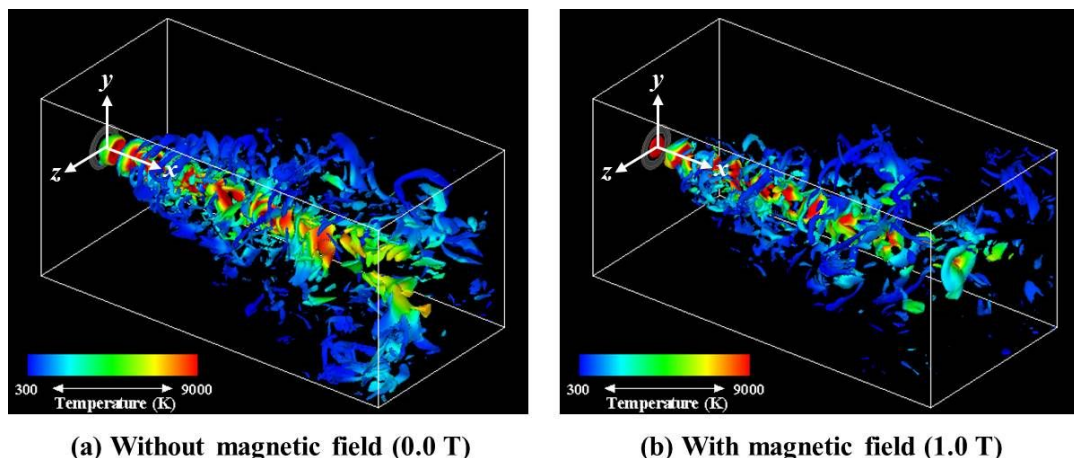
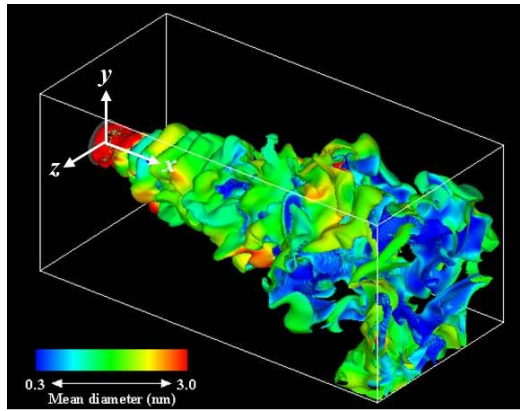
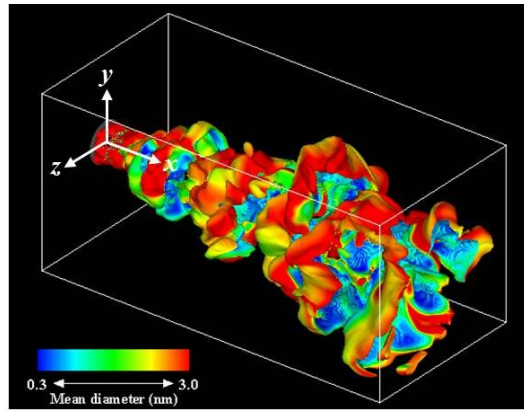


図1 プラズマジェットにより形成される渦構造

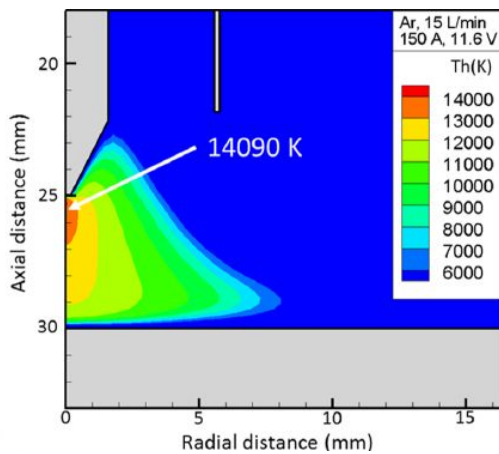


(a) Without magnetic field (0.0 T)

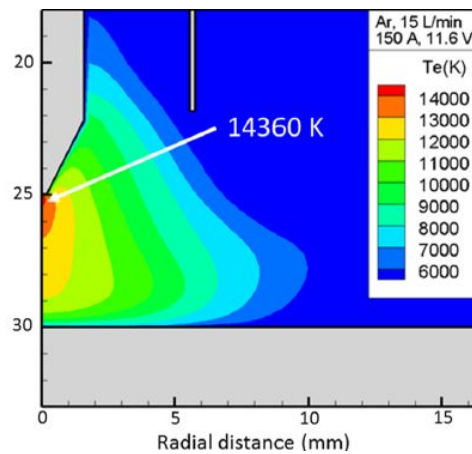


(b) With magnetic field (1.0 T)

図2 プラズマジェット周囲の超微粒子群の分布



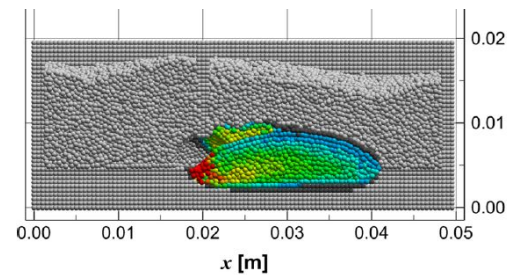
(a)重粒子温度



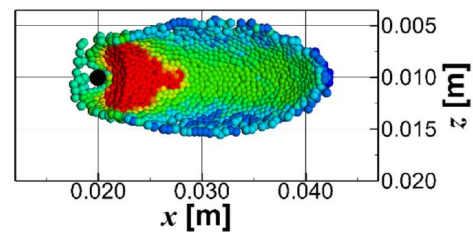
(b)電子温度

図3 アークプラズマの温度分布

固液混合物質の分解・流動シミュレータの実現を目指してDEM(Distinct Element Method)とSPH(Smoothed Particle Hydrodynamics)法を組み合わせた粒子法を用いた連成計算コードを開発した。これにより、金属・スラグ・フラックスといった物質が混在する系における溶融・表面変形・溶落ちおよび温度差に起因する表面張力勾配が駆動するマランゴニ対流を伴う複雑流動現象のシミュレーションに成功した(図4)。また高温のプラズマによって発生したフラックスの蒸気が溶融金属を押し上げることで変形をもたらし、それがプラズマと相互作用する系の数値シミュレーションにも成功した。



(a)中心断面の温度分布



(b)スラグ裏面の温度分布

図4 粒子法連成シミュレーション結果

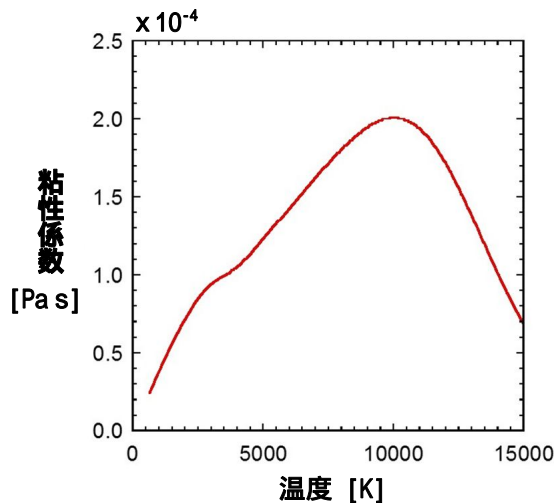


図5 水プラズマの粘性係数の温度依存性

加えて、常温からプラズマ温度領域に渡る水の輸送係数および熱力学特性といったマクロスケールの物性値を原子・分子スケールから算出することに成功した。例えば、その粘性は約10,000 Kにおいて最大値を示すことなどが明らかとなった(図5)。

#### 5. 主な発表論文等

[雑誌論文](計7件)

Masaya Shigeta, Modeling and Simulation of a Turbulent-like Thermal Plasma Jet for Nanopowder Production, IEEJ Transactions on Electrical and Electronic Engineering, 査読有, Vol. 14, 2019, 16 - 28 (招待論文)

DOI: 10.1002/tee.22761

Masaya Shigeta, Numerical Study of Axial Magnetic Effects on a Turbulent Thermal Plasma Jet for Nanopowder Production Using 3D Time-Dependent Simulation, Journal of Flow Control, Measurement & Visualization, 査読有, Vol. 6, 2018, 107 - 123

DOI: 10.4236/jfcmv.2018.62010

Hisaya Komen, Masaya Shigeta, Manabu Tanaka, Mitsuyoshi Nakatani, Yohei Abe, Numerical simulation of slag forming process during submerged arc welding using DEM-ISPH hybrid method, Welding in the World, 査読有, Vol. 62, Issue 6, 2018, 1323 - 1330 (招待論文)

DOI: 10.1007/s40194-018-0655-x

Hisaya Komen, Masaya Shigeta, Manabu Tanaka, Numerical simulation of molten metal droplet transfer and weld pool convection during gas metal arc welding using incompressible smoothed particle hydrodynamics method, International Journal of Heat and Mass Transfer, 査読有, Vol. 121, 2018, 978 - 985

DOI: 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2018.01.059

古免 久弥, 松井 翔, 小西 恭平, 茂田 正哉, 田中 学, 加茂 孝浩, サブマージアーク溶接現象のモデル化とその熱源特性に関する実験的検討, 溶接学会論文集, 査読有, Vol. 35, No. 2, 2017, 93 - 101

DOI: 10.2207/qjws.35.93

K. Konishi, M. Shigeta, M. Tanaka, A. Murata, T. Murata, A. B. Murphy, Numerical study on thermal non-equilibrium of arc plasmas in TIG welding processes using a two-temperature model, Welding in the World, 査読有, Vol. 61, Issue 1, 2017, 197 - 207

DOI: 10.1007/s40194-016-0391-z

Masaya Shigeta, Turbulence modelling of thermal plasma flows, Journal of Physics D: Applied Physics, 査読有, Vol. 49, No. 49, 2016, 493001 (18 pages) (招待論文)

DOI: 10.1088/0022-3727/49/49/493001

[学会発表](計19件)

Hisaya Komen, Masaya Shigeta, Manabu Tanaka, Yohei Abe, Takahiro Fujimoto, Mitsuyoshi Nakatani, Numerical Simulation of Slag and Weld pool Formation Process in Submerged Arc Welding Using Three-Dimensional DEM-ISPH Hybrid Method, Joint Intermediate Meeting of IIW Comm. I, IV, XII and SG212, 2019

茂田 正哉, アーク溶接シミュレーションへの粒子法の適用, Prometec Simulation Conference 2018 joint with GPU Computing Workshop for Advanced Manufacturing, 2018 (招待講演)

- Masaya Shigeta, Modelling for Thermal Plasma Flow Dynamics, 19th International Congress on Plasma Physics (ICPP2018), 2018 (招待講演)
- H. Komen, M. Shigeta, M. Tanaka, M. Nakatani, Y. Abe, T. Fujimoto, Simulation of Weld Pool Convection in Submerged Arc Welding Using DEM and ISPH method, 71st IIW Annual Assembly and International Conference, 2018
- Masaya SHIGETA, Manabu TANAKA, Simulation of ambient gas entrainment into a thermal plasma flow, 70th IIW Annual Assembly and International Conference, 2017 (招待講演)
- 茂田 正哉, 熱プラズマ流動シミュレーションの最前線, 日本学術振興会 第153委員会 第131回研究会『産業応用に役立つプラズマ計算科学～ニーズと挑戦～』, 2017 (招待講演)
- Masaya Shigeta, Numerical Investigation of Axial Magnetic Effects on a Turbulent Thermal Plasma Jet with Nanopowder Using 3D Time-Dependent Simulation, Fourteenth International Conference on Flow Dynamics (ICFD2017), 2017
- Hisaya Komen, Masaya Shigeta, Manabu Tanaka, Numerical Simulation of Molten Metal Behavior in Gas Metal Arc Welding by Three-dimensional Incompressible SPH Method, Fourteenth International Conference on Flow Dynamics (ICFD2017), 2017
- Hisaya Komen, Masaya Shigeta, Manabu Tanaka, Numerical Analysis of Molten Metal Convection during Gas Metal Arc Welding using Three-dimensional Incompressible SPH Method, PARTICLES, 2017
- M. Shigeta, T. Fujimoto, H. Komen, M. Tanaka, N. Mukai, R. Suzuki, Smoothed-particle-hydrodynamics modeling of droplet detachment in flux-cored arc welding, 70th IIW Annual Assembly and International Conference, 2017
- H. Komen, M. Shigeta, M. Tanaka, M. Nakatani, Y. Abe, Numerical Simulation of Flux Melting Process during Submerged Arc Welding using DEM-ISPH Hybrid Method, 70th IIW Annual Assembly and International Conference, 2017
- Masaya Shigeta, Modeling and Simulation of Nanopowder Growth Processes around Thermal Plasma Flows, Symposium Gas-phase Synthesis of Functional Nanomaterials: Fundamental Understanding, Modeling and Simulation, Scale-up, 2017 (招待講演)
- H. Komen, T. Methong, M. Shigeta, M. Tanaka and A. B. Murphy, Visualization of Plasma Temperature and Weld Pool Convection during Gas Metal Arc Welding, 31st International Congress on High-Speed Imaging and Photonics, 2016
- Takahiro FUJIMOTO, Hisaya KOMEN, Masaya SHIGETA, Manabu TANAKA, Naoki MUKAI and Reiichi SUZUKI, Simulation of Droplet Transfer in FCAW by Incompressible SPH Method and Finite Volume Method, The International Symposium on Visualization in Joining & Welding Science through Advanced Measurements and Simulation, 2016
- Hisaya KOMEN, Masaya SHIGETA, Manabu TANAKA, Mitsuyoshi NAKATANI and Yohei ABE, Simulation of Flux Melting Process during a SAW by DEM-ISPH Hybrid Method, The International Symposium on Visualization in Joining & Welding Science through Advanced Measurements and Simulation, 2016
- Kyohei Konishi, Masaya Shigeta, Akihisa Murata, Tadasuke Murata, Anthony B. Murphy and Manabu Tanaka, Two-temperature modeling for understanding of arc phenomena during TIG welding with a constricted nozzle, 6th East Asia Symposium on Technology of Welding and Joining, 2016
- K. Konishi, S. Miki, M. Shigeta, A. Murata, T. Murata, M. Tanaka, A. B. Murphy, Numerical analysis of arc phenomena during TIG welding with a constricted nozzle by using a two-temperature model, Annual Assembly 2016 of International Institute of Welding (IIW), Study Group 212 "Physics of Welding", 2016
- H. Komen, M. Shigeta, M. Tanaka, Incompressible SPH simulation of molten metal droplet transfer and weld pool convection during GMA Welding, Annual Assembly 2016 of International Institute of Welding (IIW), Study Group 212 "Physics of Welding", 2016
- M. Shigeta, Modelling for fluid-dynamic transport of nanopowder growing around a thermal plasma jet, 14th High-Tech Plasma Processes Conference (HPPT14), 2016 (招待講演)

〔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