

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 25 年 6 月 3 日現在

機関番号：32621

研究種目：若手研究(B)

研究期間：2010～2012

課題番号：22760129

研究課題名（和文） サブミクロン粒子の凝集体形成過程の数値解析手法に関する研究

研究課題名（英文） Numerical simulation of aggregation of submicron particles

研究代表者

渡邊 摩理子 (WATANABE MARIKO)

上智大学・理工学部・准教授

研究者番号：80452473

研究成果の概要（和文）：

サブミクロンからミクロンオーダーの粒子を統一して扱えるシミュレーション手法として、界面よりすべり距離分だけ内側に固体の仮想界面を考え、仮想界面を用いて計算格子内の固体体積率を計算することで、体積力型埋め込み境界法にすべり効果を導入する方法を提案した。また、ブラウン力によるランダム運動と凝集を解析するアルゴリズムの開発を行い、本アルゴリズムを用いたブラウン動力学シミュレーションにより、温度や境界条件といった物理的条件が凝集体の形状や成長過程に与える影響を明らかにした。

研究成果の概要（英文）：

This study aimed to develop a direct numerical simulation method to systematically treat submicron- to micron-sized particles. This method was based on a body-force-type immersed boundary method. The inward slip distance assumed between the virtual and actual interfaces resulted in the slip flow effect and a solid volume fraction was calculated using the virtual interface. In addition, I developed an algorithm that calculates random motion and aggregation by Brownian force and clarified the influence of physical conditions such as temperature and boundary conditions on the aggregation shape and formation process by using the Brownian dynamics simulation code.

交付決定額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2010 年度	800,000	240,000	1,040,000
2011 年度	1,000,000	300,000	1,300,000
2012 年度	1,100,000	330,000	1,430,000
総計	2,900,000	870,000	3,770,000

研究分野：工学

科研費の分科・細目：機械工学・流体工学

キーワード：混相流、サブミクロン粒子、凝集、シミュレーション

1. 研究開始当初の背景

燃焼器から排出されるすすが大気環境や人体へ悪影響を及ぼすことが懸念されてお

り、その発生や流動の予測、さらに抑制や捕集・除去の技術開発が望まれる。しかしながら、すすを捕集して分析することは出来ても、

すすの流動特性、凝集過程、集団挙動を直接計測することは難しく、数値シミュレーションが現象解明における現実的かつ有効な手段と言える。

しかしながらすすは、サブミクロンサイズの一次粒子が凝集し、ミクロンサイズの二次粒子を形成したものである。標準大気での平均自由行程は $O[10^2]$ nm であるから、二次粒子のスケールでは周囲の流体を連続体として扱うことができるが、一次粒子のスケールでは、分散媒質のすべり効果やブラウン運動による拡散といった希薄気体の特性が現れる。したがって、このようなスケールにあるすすの生成過程や燃焼ガスあるいは大気中での挙動を解析するためには、スリップ境界条件を連続流体解法に統合し、さらにブラウン運動など微小スケールで顕著に現れる現象を反映した解析手法の確立が求められる。

2. 研究の目的

流体中を運動する多数のサブミクロン粒子が凝集体を形成する過程を再現し、凝集体の構造を決定付ける因子の解明が可能な、高クヌッセン数を考慮した直接数値解析手法を確立することを目的とする。具体的には、体積力型埋め込み境界法にスリップ境界条件を統合すること及びすすの鎖状構造を表現できる外力モデルを確立することを目標とする。

3. 研究の方法

(1) スリップ境界条件の定式化と検証

高効率に流体一粒子間相互作用を解く混相流解析手法である体積力型埋め込み境界法（以下、体積力型 IBM と略記）では、計算セル内に占める固体の体積率によって線形補間された体積力を介して、流体一固体間の運動量交換を行う。本研究ではすべり効果を導入するため、界面よりすべり距離だけ内側に固体の仮想界面を考え、その仮想界面において固体体積率の計算を行うことで界面にすべりを発生させる方法を提案した（図 1）。またその妥当性を、以下の方法により検証した。

① 境界適合格子を用いた解析との比較

境界適合格子を用い、界面における速度の境界条件としてすべり速度を直接与えた場合（以下、BFG と略記）と、本研究で提案した手法を用いてすべり効果を考慮した場合との比較を行い、本手法の妥当性について考察を行った。計算対象は平行平板間流れであり、流入境界に一樣流入速度を与え、流出境界に速度勾配無し（ノイマン境界条件）を与えた。計算条件は表 1 の通りとした。なお、上付き添え字*は無次元数を表す。

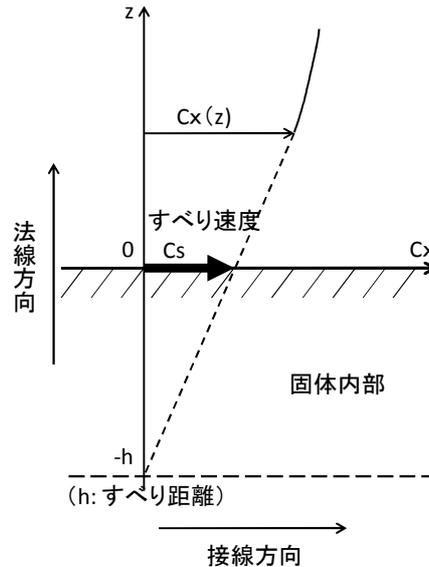


図 1 希薄気体流れの固体表面近傍における接線方向速度分布

表 1 平行平板流れ解析条件

	BFG	体積力型 IBM
格子数 $n_x \times n_y$	200 × 20	200 × 40
計算領域 $L_x^* \times L_y^*$	10.0 × 1.0	
空間解像度 L^*/Δ^*	20	
レイノルズ数 Re	1.0	
クヌッセン数 Kn	0.010	
時間刻み Δt^*	1.0×10^{-3}	

② 二次元円柱周りの流れ

一樣な低速流れ（レイノルズ数 $Re = 0.5$ ）中に固定された二次元円柱周りの流れの解析を行った。計算領域のサイズは主流方向とそれに直交する方向に対して 20×10 とし、これを 200×100 の等間隔格子に分割した。円柱の直径は 1 とした。クヌッセン数（流体分子の平均自由行程と代表長さとの比）は $Kn = 10^{-4}$ 、 10^{-3} 、 10^{-2} 、 5×10^{-2} 、 10^{-1} とし、流れが定常になるまで計算を行った。本手法によりクヌッセン数によるすべり速度の変化が捉えられているか検証した。

(2) ブラウン力によるランダム運動と凝集解析アルゴリズムの開発

上述の直接数値解析手法に導入するブラウン力の解析アルゴリズムを検討するため、ブラウン動力学シミュレーションを行った。結果として得られた凝集体の形状やフラクタル次元から、すすのような鎖状構造を解析できるか確認した。また、本ブラウン動力学解析コードを用いて物理的要因が凝集体形状に及ぼす影響についても調べた。

4. 研究成果

(1) スリップ境界条件の導入

①BFG との比較

BFG を用い界面における速度の境界条件としてすべりなし境界条件（速度がゼロのディリクレ境界条件）を直接与えた場合と体積力型 IBM を用いた場合の速度場の比較を図2に、BFG を用い界面における速度の境界条件としてすべり速度を直接与えた場合と本研究で提案したモデルを用いた場合の速度場の比較を図3に示す。また、すべりなし流れ及びすべり流れにおける二つの手法の誤差を表2に示す。

図3より、界面 ($y^*=0.0$ 及び 1.0) において速度に差が見られる。しかしながら図2においても、体積力型 IBM の結果では界面で速度はゼロにならない。これは体積力型 IBM では界面の速度は計算されず、界面を含むセルの体積平均速度を計算しているためである。したがって、図3の界面における速度のずれは、本モデルが体積力型 IBM を拡張して作られたことに起因すると考えられる。

次に表2から、すべり流れにおいて界面における速度を直接与えた場合と本手法との誤差は、すべりなし流れにおける誤差と同じオーダーであることが分かる。体積力型 IBM を用いた解析では、これまでに二次元円柱まわりの流れ場の再現性がよいことが確認されているため、界面での速度を直接与えた解析との誤差が同程度である本手法においても、十分に流れ場が捉えられているものと考えられる。

②二次元円柱周りの流れ

図4に円柱表面の $\theta = \pi/2$ の位置における主流方向速度 u と Kn の関係を示す。なお、円柱中心から上流側のよどみ点の方向を角度 $\theta = 0$ とし、反時計回りを正とする。 u は一様流入速度によって無次元化されている。 Kn が大きくなるにつれてすべり効果が大きくなる様子が確認できる。これは実験やボルツマン方程式の解析によりすべり速度を調べた他研究の結果と同様の傾向を示している。しかし、 θ によっては界面近傍の速度の誤差が大きくなるため、界面付近での流れをより高精度に予測できるような改良が必要とされる。

(2) ブラウン力によるランダム運動と凝集解析アルゴリズムの開発

本研究で開発したブラウン動力学解析コードを用いた解析例を図5に示す。計算領域のサイズは $80D$ (D は粒子直径) であり、全ての境界を周期境界とした。また解析条件は、粒子数 500、 $Kn = 1.36$ 、温度は 573K とした。本解析コードには、粒子の凝集位置を正しく求めるアルゴリズムを開発して導入した。また、ランダム運動するサブミクロン粒子だけでなく並進・回転運動する凝集体同士

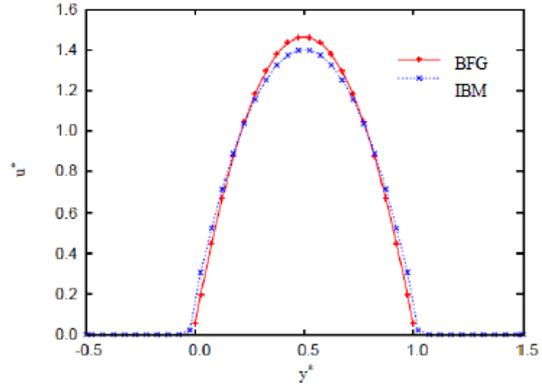


図2 主流方向速度の y 方向（主流に対し垂直方向）分布（すべりなし流れ）

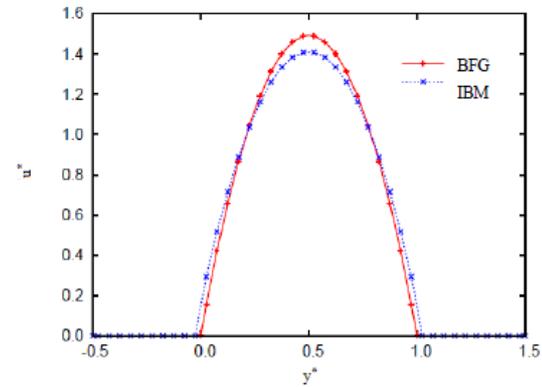


図3 主流方向速度の y 方向分布（すべり流れ）

表2 BFG と比較した場合の速度の最大誤差と平均誤差

	すべりなし境界条件	すべり境界条件
最大誤差	0.1543	0.2187
平均誤差	0.01420	0.01846

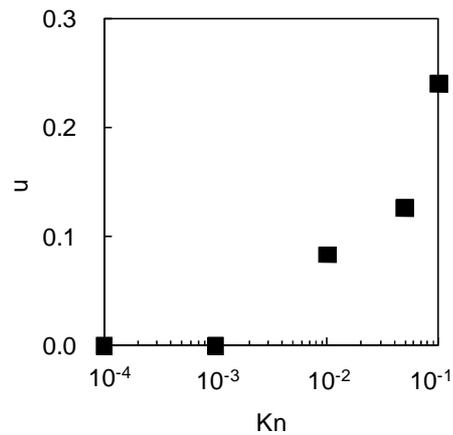


図4 円柱表面の主流方向速度 u と Kn の関係 ($\theta = \pi/2$)

の凝集も考慮した。結果として図5のように、すずのような鎖状構造を得られることが確認できた。また、温度や境界条件、領域のサイズを変更して解析した結果、温度に起因するブラウン運動の速度変化や、境界に衝突した際の凝集体の回転の変化が、最終的な凝集体形状に影響することが明らかになった。

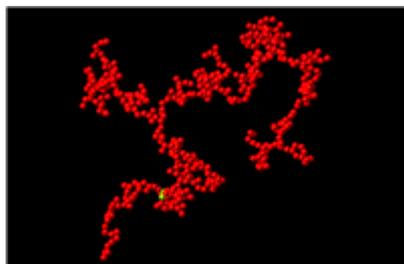


図5 ブラウン動力学解析によって得られた微粒子凝集体

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 Mariko Watanabe, Daisuke Tanaka, Brownian Dynamics Simulation of the Aggregation of Submicron Particles in Static Gas, Computers & Chemical Engineering, Reviewed paper, Vol. 54, 2013, pp. 151-158
DOI:
10.1016/j.compchemeng.2013.03.028

[学会発表] (計2件)

- ① Mariko Watanabe, Investigation of the factors affecting aggregation of submicron particles by Brownian dynamics simulation, The 23rd International Symposium on Transport Phenomena (ISTP-23), New Zealand, 2012, 177
- ② 田中大資、中村摩理子、サブミクロン粒子の凝集に関するブラウン動力学シミュレーション、日本機械学会2010年度年次大会講演論文集 Vol. 1、2010, pp.3-4

6. 研究組織

(1) 研究代表者

渡邊 摩理子 (WATANABE MARIKO)

上智大学・理工学部・准教授

研究者番号：80452473