

希薄固気二相乱流の数値シミュレーション

Numerical Simulation of Dilute Gas-Particle Turbulent Flows

深淵 康二*

*東京大学大学院工学系研究科機械工学専攻

Koji Fukagata

*Department of Mechanical Engineering, The University of Tokyo

E-mail: fukagata@thtlab.t.u-tokyo.ac.jp

1 はじめに

固気二相流は、その名の通り流体中に多数の固体粒子が混ざって流れる流れであり、大気中における浮遊粒子状物質等の環境流れ、微粉炭燃焼や穀物輸送等の工業プロセス、もっと身近なところでは最近流行のサイクロン掃除機等にも見られる。

固気二相流に対する計算モデルとして古くから用いられてきており、また低計算負荷で実用計算に向いているものとして、粒子相も連続相として扱う二流体モデルがある。しかし、特に連続相である気相が乱流である場合、構成方程式や境界条件等、改良すべき点も多いのが現状である。この二流体モデルの改良のための知見の蓄積、あるいはその背後にある乱流準秩序構造と粒子運動の相互作用等の物理現象のより一層の解明のため、直接数値シミュレーション(DNS)やラージ・エディ・シミュレーション(LES)の普及とあいまって、1990年前後より固体粒子を運動方程式に従ってラグランジュ的に追跡する数値シミュレーションが精力的に行われてきた。

自由噴流、スリット噴流[1]など壁面境界の影響が無いあるいは比較的小さい流れ、また壁面境界がある場合でも粒子径及び粒子の時間スケールの小さな粒子が壁面との衝突時にほぼ100%沈着するような場合[2,3]においては、実験を良い精度で再現できている。また、原子力プラント事故時に放射性物質の大気拡散や地表への沈着を予測する SPEEDI[4]等、ラグランジュ追跡的な手法が実用計算に供している例もある。しかし、粒子径及び粒子の時間スケールが大きく、壁面で沈着せず反射するような場合には、チャンネル乱流などの基本的な壁乱流においても未だ実験データと一致しないことが多い。本稿ではそのような固気二相壁乱流に対するラグランジュ追跡数値シミュレーションの手法の実際と予測精度の現状について概観する。

なおこの固気二相流には、粒子濃度が低く粒子-粒子間相互作用よりも流体-粒子間相互作用が重要である場合と、粉体の流動層(fluidized bed)に代表される粒子濃度が高く粒子-粒子間相互作用が支配的になる場合があり、取扱いが若干異なってくる。後者については本特集の別記事[5]に任せることとして、本稿では前者の希薄な場合について述べる。

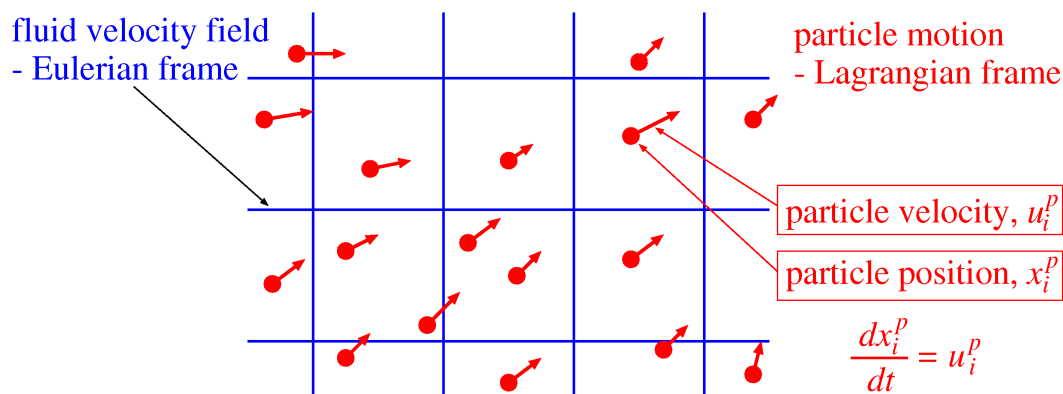


Figure 1: Schematics of the Lagrangian particle tracking (LPT) simulation coupled with DNS/LES.

2 計算手法

2.1 ラグランジュ粒子追跡法

ラグランジュ粒子追跡法(Lagrangian Particle Tracking: LPT)では, ラグランジュ系で記述された粒子の運動方程式を数値積分することにより粒子速度及び粒子位置を求める(図1). 粒子レイノルズ数, 即ち,

$$\text{Re}_p = \frac{|u_i^p - u_i^f| d}{\nu} \quad (1)$$

(ここで u_i^f , u_i^p は気相及び粒子の速度, d は粒子の直径, ν は気体の動粘度) がゼロの極限での非定常場における粒子の運動方程式[6]には付加質量項, 履歴項など様々な項が含まれるが, 固気二相流の場合, 一般に固体粒子と気体の密度比 $S = \rho^p / \rho^f$ が 1000 のオーダーであるため, ストークス抗力のみ考えればよいことがわかる. これに加えて粒子レイノルズ数が有限で $\text{Re}_p < 1$ の場合では, 剪断揚力(Saffman 揚力)[7]や壁の存在によって生じる揚力[8]を考慮する必要がある. また他にも, 粒子の自転が大きい場合には回転揚力(Magnus 揚力)[9]を, 気相分子の平均自由行程に比して粒子が十分大きくない場合(常温常圧の空気中の場合, 凡そ $d < 1 \mu\text{m}$)にはブラウン運動も加味する必要がある[2].

以下で扱う, 密度比が数千で粒子直径が数十ミクロン以上という条件ではしばしば $\text{Re}_p > 1$ となるが, このような場合には抗力係数を経験式によって与えることが多い. また剪断揚力については, 殆ど効かないと考えてよさそうである ($\text{Re}_p > 1$ における修正としては Mei [10]による式が有名であるが, この式は剪断揚力を大幅に過大評価する[11]). したがって, この場合の粒子の運動方程式は,

$$\frac{du_i^p}{dt} = \frac{1}{\tau_p} (u_i^f - u_i^p) + b_i \quad (2)$$

となる(ここで b_i は重力等の体積力, また簡単のため回転揚力は省略). 緩和時間 τ_p は粒子運動の一次遅れの時定数であり,

$$\tau_p = \frac{1}{C_R} \frac{d^2 S}{18\nu} \quad (3)$$

と表される．ここで C_R は粒子レイノルズ数による抗力係数の補正であり，Schiller-Naumann の式[12]を用いると，

$$C_R = 1 + 0.15 \text{Re}_p^{0.687} \quad (4)$$

である．粒子の軌跡は，単純に速度の定義，即ち，

$$\frac{dx_i^p}{dt} = u_i^p \quad (5)$$

を時間積分することにより求められる．

乱流である気相の速度については通常通りオイラー記述のナビエ・ストークス方程式を DNS あるいは LES を用いて解くことが多いが，代数的な擬似乱流場や POD ベースの低自由度モデルを用いた研究[2, 13]も報告されている．上述の粒子運動方程式の右辺を計算するには粒子位置での流体速度 u_i^f を評価する必要がある，これは気相速度の計算点からの補間によって行われる．精度の面からはスペクトル補間やエルミート補間が優れている[14]が，膨大な計算時間が必要である．線形（2次ラグランジュ）補間は計算負荷が小さいものの，精度の面で問題が大きい[14-17]．瞬時場における検証[15]あるいは時間発展シミュレーションにおける検証[16, 17]の結果によると，3次あるいは4次精度のラグランジュ補間が計算負荷と精度のバランスが良いと言える．

ここに記した基本手法および以下に解説する 2 way カップリングの計算手法は，厳密には粒子の直径がコルモゴロフスケールよりも十分小さい場合にのみ適用可能であるが，実際には DNS や LES の最小格子より粒子径が小さい場合に用いている場合が多い．逆に粒子径が計算格子より数倍大きな場合には，粒子-流体間界面で境界条件を考慮する計算手法（例えば[18, 19]）を用いる必要がある．

2.2 2 way カップリング

固体粒子をパッシブな粒子として扱い，気相の速度への影響を無視する 1 way カップリングシミュレーションに対し，2 way カップリングシミュレーションでは粒子の運動による気相速度の変化も考慮する．通常用いられる方法は，粒子に働く力の反作用力を 1 点に働く力として考え，それを流体に加えることによって計算する方法であり，PSI-CELL (Particle Source In Cell) 法[20]と呼ばれる．気相の運動方程式を計算格子で積分した形で書くとする

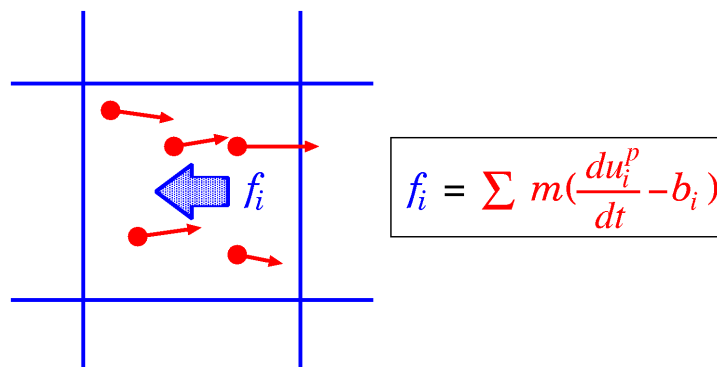


Figure 2: Schematics of PSI-CELL method coupled with the finite volume method.

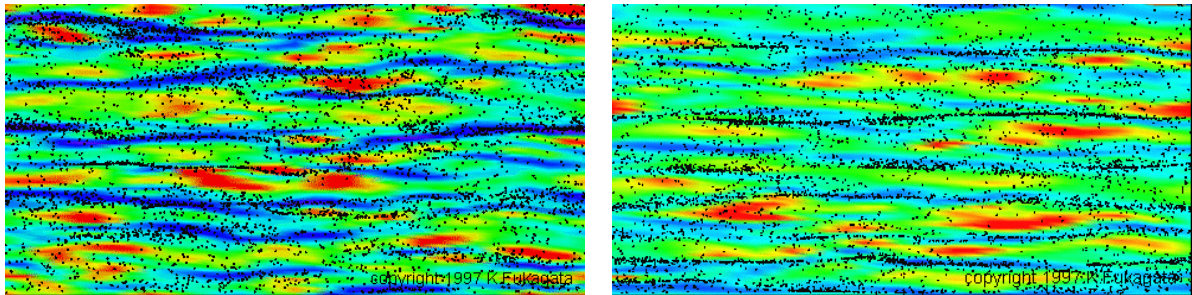
と,

$$\iiint_V \rho \frac{\partial u_i^f}{\partial t} dV = \iint_S \left(-\rho u_j^f u_i^f - p_j n_i + \mu \frac{\partial u_i^f}{\partial x_j} \right) n_j dS - \sum_{\substack{\text{all particles} \\ \text{in the cell}}} m \left(\frac{du_i^p}{dt} - b_i \right) \quad (6)$$

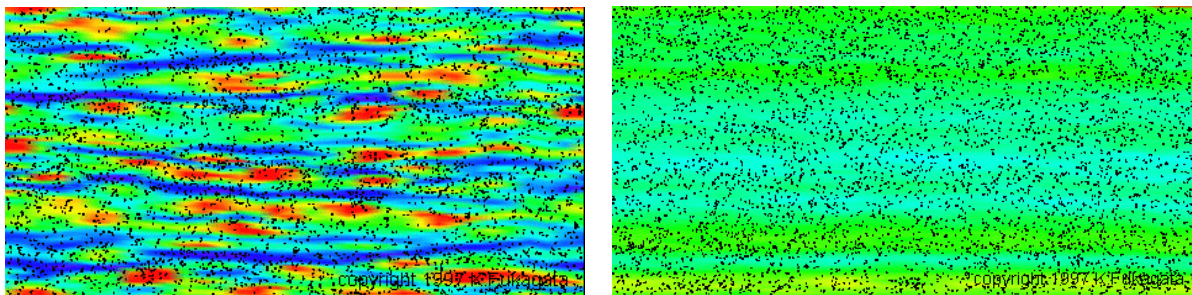
(n_i は単位方向ベクトル) となり, Navier-Stokes 方程式に粒子からの反作用力の総和が加わる形になっている (図 2). 2 way カップリングのモデリングは固気, 固液, 気液全ての分散性二相流の計算手法において最も議論の多い部分であり, 固液, 気液二相流に対しては高次の項を考慮した, PSI-CELL 法よりも精度の良い手法がいくつか提案されている (例えば [21, 22]) が, 実質的に粒子が質点のように働く固気二相流の場合には PSI-CELL 法が十分よい近似となっている [21].

2.3 4 way カップリング

上述の 2 way カップリングに加え, 粒子-粒子間衝突を考慮するシミュレーションを 4 way カップリングシミュレーションと呼ぶ. 粒子-粒子間衝突の計算手法には, 個々の粒子の軌跡より衝突判定し衝突後の速度を計算する決定論的な方法と衝突確率を用いて扱う確率論的な方法 (例えば [23]) があり, どちらを用いるかは解くべき問題に依存する. 希薄固気二相流の場合には衝突が頻繁には起こらないため, 決定論的な方法を用いることが多い [17, 24, 25]. 衝突後の粒子速度は反撥係数と摩擦係数をパラメータとして, 衝突方程式により与えられる. 詳しくは文献 [25] を参照されたい. 粒子-壁面間衝突の計算もこれとほぼ同様である.



(a) 50 micron glass particles (mass flow ratio is 0.4).



(b) 70 micron copper particles (mass flow ratio is 3).

Figure 3: Examples of turbulence modulation around $y^+ = 6$ plane. Left, 1 way coupling; right, 2 way coupling. Color: red, high speed region; blue low speed region; black points, particle positions. (Reprinted from [27].)

3 計算例

ラグランジュ粒子追跡法によるシミュレーションの一例として、チャンネル内の固気二相乱流の 2 way カップリング計算[26]を取り上げる。気相は空気であり、摩擦速度に基づくレイノルズ数は $Re_\tau = 180$ である。固体粒子は比較的緩和時間の長い $d = 50 \mu\text{m}$ のガラス粒子 ($\tau_p^+ = 100$) と $d = 70 \mu\text{m}$ の銅粒子 ($\tau_p^+ = 800$) である。気相の乱流速度場の計算には LES を用い、その速度を 4 次ラグランジュ補間により粒子位置に補間している。2 way カップリングには上述の PSI-CELL 法[20]を用いている。気相、粒子ともに時間積分には 3 次 Adams-Bashforth 法を用いている。ここでの目的は純粋に 2 way カップリングによる乱流構造の変化(乱流変調)を調査することであったため粒子-粒子間衝突は考慮せず、また粒子-壁面間衝突は完全弾性衝突を仮定してある。

図 3 に計算された乱流構造の変化を示す。まず、1 way カップリングの場合の気相速度にはよく知られた低速ストリーク構造が見られる。また、 $d = 50 \mu\text{m}$ ガラス粒子の場合には粒子が低速領域に集まる、いわゆる preferential concentration [27]が見られる。2 way カップリングの場合、粒子質量流量比の低い図 3 (a) では粒子の直進性の影響でストリークが引き伸ばされており、また質量流量比の高い図 3 (b) では乱流構造がほぼ完全に消失している。因みにこの場合の気相の応力収支は通常平均せん断応力、レイノルズ剪断応力に粒子の存在による寄与を加えて直線分布となるが、図 3 (b) の状態になるとレイノルズ剪断応力がほぼゼロである[26]。

4 予測精度の現状

希薄固気二相チャンネル乱流に対しては、Kulick et al. [28]の実験以来、その実験データを再現すべく幾つかのシミュレーションが行われてきた。条件としては、摩擦速度に基づくレイノルズ数は $Re_\tau = 644$ であり、粒子は $d = 50 \mu\text{m}$ ガラス粒子 ($\tau_p^+ = 300$)、 $d = 70 \mu\text{m}$ 銅粒子 ($\tau_p^+ = 2000$) などで、粒子質量流量比は数%から数十%である。

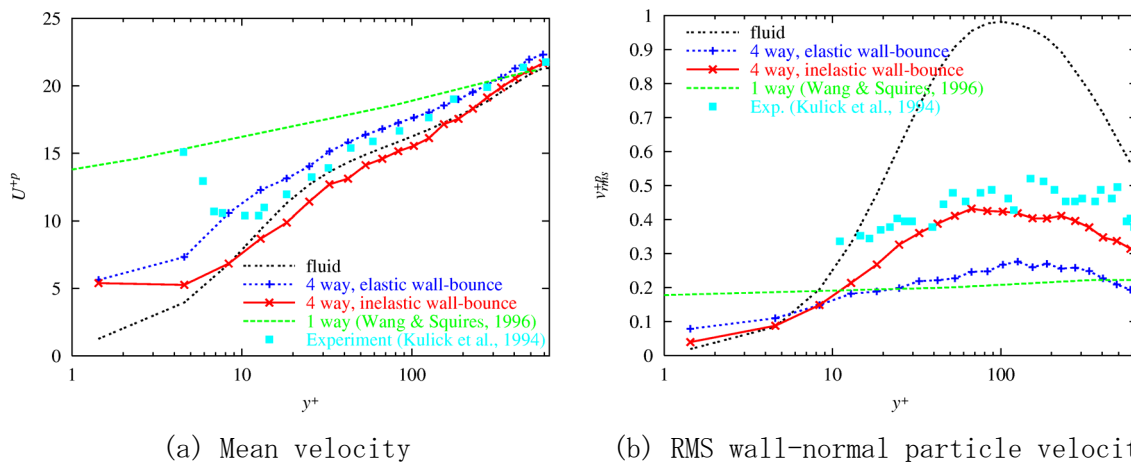


Figure 4: Example results from the simulations of the experiment with 70 micron copper particles in air channel (2 % mass flow rate) by Kulick et al. [28]. (Redrawn from the data presented in [24].)

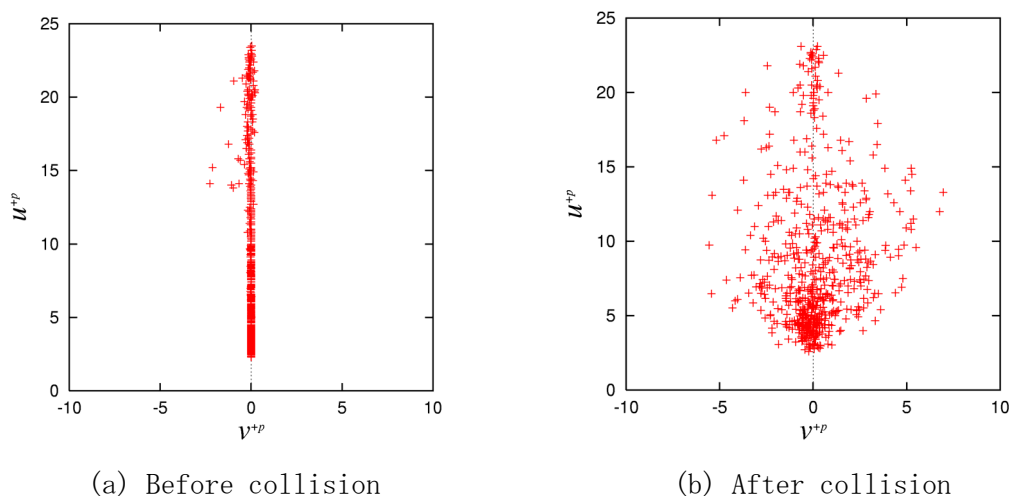


Figure 5: Correlation between the streamwise and wall-normal velocities of the particles that experienced particle-particle collision. (Redrawn from the data presented in [24].)

初期の 1 way カップリングシミュレーション[29]における実験データとの比較において、両者の違いは緩和時間の長い $d = 70 \mu\text{m}$ 銅粒子で特に顕著であった。最大の違いは壁垂直方向粒子速度の RMS 値がシミュレーションでは実験値の半分以下であることであり、また粒子の平均速度分布も定性的に異なるものであった (図 4) (ただし、文献[29]における平均粒子速度分布における全体的な過大評価の主因は粒子相速度の未発達にあると思われる[24])。

最近の 4 way カップリングシミュレーションでは、粒子質量流量比 20% (体積割合で $10^{-4} - 10^{-5}$) と低い場合でも粒子-粒子間衝突が重要であり[25]、さらに Kulick et al. 自身が疑念を抱いていたように[28]、静電気力等によって壁面近傍に粒子が集まるような効果がある場合には、壁近傍の局所粒子密度の増加によって、粒子質量流量比が数%の場合でも粒子-粒子間衝突が重要となる[24]。これらの場合には、粒子の直進性によって気相乱流よりもさらに非等方になっていた速度が粒子-粒子間衝突が起こることにより再等方化される (図 5)。さらに、粒子の緩和時間が長いために衝突・再等方化の影響がチャンネル全体に及び、全体的に壁垂直方向粒子速度の RMS 値も実験値に近づく[17, 24, 25] (図 4 (b))。しかし、それでもなお、定性的、定量的な不一致は多く、実験を再現したと言うには不十分であるのが現状である。

5 まとめ

以上、簡単に固気二相壁乱流に対するラグランジュ追跡数値シミュレーションの手法の実際と予測精度の現状について述べた。固気二相乱流の実験計測が難しいこともあり、壁面近傍において特定できていない粒子の挙動や、そのため計算で考慮されていない効果もまだ存在すると思われる。Kulick et al. [28]の実験における特異な統計量分布について言えば、壁面の表面粗さによる粒子速度の再等方化効果もその一つであると考えられ[30]、ごく最近、

実験的[31]にもその可能性を示唆する結果も報告されている。固気二相流のラグランジュ追跡数値シミュレーションをさらに信頼できるものにするには、これら壁面境界における粒子挙動も含め、計算と実験の間の詳細な相違点を発見し、それらを考慮していく必要があると思われる。

参考文献

- [1] Yuu, S., Ueno, T. and Umekage, T., “Numerical simulation of the high Reynolds number slit nozzle gas-particle jet using subgrid-scale coupling large eddy simulation”, Chem. Eng. Sci., vol. 56., (2001), 4293-4307.
- [2] Li, A. and Ahmadi, G., “Deposition of aerosols on surfaces in a turbulent channel flow”, Int. J. Eng. Sci., vol. 31, (1993), 435-451.
- [3] Wang, Q., Squires, K. D., Chen, M. and McLaughlin, J. B., “On the role of the lift force in turbulence simulations of particle deposition”, Int. J. Multiphase Flow, vol. 23, (1997), 749-763.
- [4] 茅野政道, 安達武雄, “緊急環境線量情報予測システム SPEEDI の現状と今後の展開”, 日本原子力学会誌, vol. 45, No. 5, (2003), 14-19.
- [5] 川口寿裕, “高濃度固気混相流の数値解析”, 日本流体力学会数値流体力学部門 Web 会誌, vol. 11-3, (2003)
- [6] Maxey, M. R. and Riley, J. J., “Equation of motion for a small rigid sphere in a nonuniform flow”, Phys. Fluids, vol. 26, (1983), 883-889.
- [7] Saffman, P. G., “The lift on a small sphere in a slow shear flow”, J. Fluid Mech., vol. 22, (1965), 385-340. (And also: Saffman, P. G., “Corrigendum to ‘The lift on a small sphere in a slow shear flow’”, J. Fluid Mech., vol. 31, (1968), 624.)
- [8] Cherukat, P. and McLaughlin, J. B., “Wall induced lift on a sphere”, Int. J. Multiphase Flow, vol. 16, (1990), 899-907.
- [9] Rubinow, S. I., and Keller, J. B., “The transverse force on spinning sphere moving in a viscous fluid”, J. Fluid Mech., vol. 11, (1961), 447-459.
- [10] Mei, R., “An approximate expression for the shear lift force on a spherical particle at finite Reynolds number”, Int. J. Multiphase Flow, vol. 18, (1992), 145-147.
- [11] Cherukat, P., McLaughlin, J. B. and Dandy, D. S., “A computational study of the inertial lift on a sphere in a linear shear flow field”, Int. J. Multiphase Flow, vol. 25, (1999), 15-33.
- [12] Schiller, L. and Naumann, A., “Über die grundlegende Berechnungen bei der Schwerkraft-aufbereitung”, Zeitschrift des Vereines Deutscher Ingenieure, vol. 77, (1933), 318-320.
- [13] Ushijima, T., “The motion of heavy particles in turbulent flows”, Ph.D. dissertation, The University of Cambridge, (1998).
- [14] Balachandar, S. and Maxey, M. R., “Methods for evaluating fluid velocities in

- spectral simulations of turbulence” , J. Comput. Phys., vol. 83, (1989), 96-125.
- [15] Wang, Q. and Squires, K. D., “Large eddy simulation of particle deposition in a vertical turbulent channel flow” , Int. J. Multiphase Flow, vol. 22, (1996), 667-683.
- [16] Fukagata, K., Zahrai, S. and Bark, F. H., “Force balance in a turbulent particulate channel flow”, Int. J. Multiphase Flow, vol. 24, (1998), 867-887.
- [17] 雷康斌, “ダイナミック・サブグリッド・スケール・モデルに基づく Full Way Coupling 法による固気混相乱流のラージ・エディ・シミュレーション”, 東京大学博士論文 (2001).
- [18] 梶島岳夫, “固体粒子群を含む流れのシミュレーション”, ながれ, vol. 21, (2002), 221-229.
- [19] Takagi, S., Oguz, H. N., Zhang, Z. and Prosperetti, A., “PHYSALIS: a new method for particle simulation. Part II: two-dimensional Navier-Stokes flow around cylinders” , J. Comput. Phys., vol. 187, (2003), 371-390.
- [20] Crowe, C. T., Sharma, M. P. and Stock, D. E., “The particle-source-in-cell (PSI-CELL) method for gas droplet flow” , Trans. ASME J. Fluids Eng., vol. 99, (1977), 325-332.
- [21] Pan, Y. and Banerjee, S., “Numerical simulation of particle interactions with wall turbulence” , Phys. Fluids, vol. 8, (1996), 2733-2755.
- [22] Maxey, M. R. and Patel, B. K., “Localized force representations for particles sedimenting in Stokes flow” , Int. J. Multiphase Flow, vol. 27, (2001), 1603-1626.
- [23] Sommerfeld, M. “Analysis of inter-particle collisions in homogeneous isotropic turbulence using a stochastic Lagrangian modelling approach” , Int. J. Multiphase Flow, vol. 27, (2001), 1829-1858.
- [24] Fukagata, K., Zahrai, S., Kondo, S. and Bark, F. H., “Anomalous velocity fluctuations in particulate turbulent channel flow”, Int. J. Multiphase Flow, vol. 27, (2001), 701-719.
- [25] Yamamoto, Y., Potthoff, M., Tanaka, T., Kajishima, T. and Tsuji, Y., “Large-eddy simulation of turbulent gas-particle flow in a vertical channel: effect of considering inter-particle collisions” , J. Fluid Mech., vol. 442, (2001), 303-334.
- [26] Fukagata, K., Zahrai, S. and Bark, F. H., “Fluid stress balance in a turbulent particulate channel flow”, Proc. 3rd Int. Conf. Multiphase Flow, Lyon (CD-ROM), (1998), Paper 157, 8.
- [27] Fessler, J. R., Kulick, J. D. and Eaton, J. K., “Preferential concentration of heavy particles in a turbulent channel flow” , Phys. Fluids, vol. 6, (1994), 3742-3749.
- [28] Kulick, J. D., Fessler, J. R. and Eaton, J. K., “Particle response and turbulence modification in fully developed channel flow” , J. Fluid Mech., vol. 277, (1994), 109-134.
- [29] Wang, Q. and Squires, K. D., “Large eddy simulation of particle-laden turbulent channel flow” , Phys. Fluids, vol. 8, (1996), 1207-1223.

[30] Fukagata, K., Zahrai, S., Bark, F. H., Kondo, S., "Effects of wall roughness in a gas-particle turbulent vertical channel flow", Proc. 2nd Int. Symp. on Turbulence and Shear Flow Phenomena, Stockholm, (2001), Vol. II, 117-122.

[31] Benson, M. J. and Eaton, J. K., "The effects of wall roughness on particle velocities in a turbulent channel flow", Trans. ASME J. Fluids Eng., (submitted).