凝集体流体抗力のシミュレーション

Simulation for the hydrodynamic drag force on aggregates

飯村 健次^a, 東谷 公^b

Kenji IIMURA, Ko HIGASHITANI

A simulation model to predict the dynamic behavior of large aggregates in flows was developed, in which the effective particle surface exposed to the flow was evaluated and the reduction of fluid velocity due to neighboring particles was taken into account. This model was applied to predict the dynamic shape factors of regular shaped aggregates settling in a quiescent fluid and the simulated results were compared with the experiments reported elsewhere. It is found that the hydrodynamic drag force exerted on aggregates is simulated quantitatively by the present model. This indicates that the proposed simulation model is applicable to predict the complicated behavior of large aggregates in flows, such as their deformation and breakup.

Key Word : Drag Force, Aggregates, Kinetic Shape Factor, Sedimentation Velocity, Simulation

1. 緒 言

湿式プロセス中の微粒子は、多かれ少なかれ凝集している場合が多い。凝集体の挙動を解析することは基本的に重要であるが、凝集体は、形が不規則なうえ、「場」の影響を受けてその形を変えるため、その解析は一般に難しい。近似的な手法として、凝集体を2個の大きな球形粒子に代表させて、分裂、飛散、凝集などを解析する方法がとられることが多い。ここでは、構成している個々の粒子に働く有効流体抗力並びに近隣粒子の存在による流れ場への影響を考慮した離散要素法を構築し、流れ場中の個々の構成粒子ならびに凝集体全体の変形や分裂挙動の推定が可能な3次元モデルを提案する。より単純な2次元モデルについては、凝集体の分裂過程に適用し、実験結果との比較検討の結果、本モデルの基本概念が妥当であることを確認しているが、2次元モデルでは当然その定量性に限界がある¹⁾。ここで提案している3次元モデルでは、

次元上の問題はないにしても、モデル導出に際し用いられる仮定があるため、このモデルを定量的に利用するには、必ずその定量性を検証することが必要である。

実験により凝集体の微視的挙動を定量的に検証した例はほとんどない。これは凝集体の微細な構造を実験的に検証する手法が見つからないことによる。そこで、凝集体の流体抗力を同体積の球形粒子の流体抗力と比較し、その比を動力学の形状係数と定義し、これを球形からのずれのパラメータとして利用し、凝集体を同体積球形粒子として取り扱う比較的巨視的な手法が用いられている。動力学の形状係数 K は、凝集体粒子の沈降実験を利用して、次式のように沈降速度 v_{sag} と体積相当球（半径 a_{ve} ）の沈降速度 v_{sve} の比として求めることが出来る。

$$K = \frac{v_{\text{sve}}}{v_{\text{sag}}} \quad (1)$$

シミュレーションモデルの検証には動力学の形状係数は極めて有用である。それは、この係数が粒子や媒体の物性にはよらないため、必ずしも実験系と物性を合わせることなくシミュレーション結果の検証が可能である。動力学の形状係数についてはいくつかの研究があるが^{2~5)}、鎖状凝集粒子および等方的な塊状凝集粒子については Stöber ら²⁾ が次のように与えている。

2000年3月21日受付

a 姫路工業大学工学部産業機械工学科
(〒671-2201 姫路市書写2167) TEL 0792-67-4960
Department of Chemical Engineering,
Himeji Institute of Technology
(2167 Shosha, Himeji, 671-2201)

b 京都大学大学院工学研究科化学工学専攻
(〒606-8501 京都市左京区吉田本町) TEL 075-753-5562
Department of Chemical Engineering, Kyoto University
(Yoshida-honmachi, Sakyo-ku, Kyoto, 606-8501)

$$\text{鎖状: } K = 0.862N^{1/3} (N \geq 8) \quad (2)$$

$$\text{塊状: } K = 1.232 (N \geq 5) \quad (3)$$

ここで N は凝集体の構成粒子次数を示す。一方、新居田、大塚³⁾は、最近、種々の等軸晶系構造を持つ凝集体の沈降に対する動力学の形状係数を導出した。この場合、粒子は互いに糊付けされているため、変形可能な一般の凝集体では無いものの、構造が明確に分かっておりシミュレーション結果の定量的検証には極めて有用な結果である。そこで本研究では、上述のシミュレーションモデルを用い、凝集体の動力学の形状係数を推算し、新居田、大塚の実験値と比較することにより本モデルの定量性の検討を行う。

2. シミュレーションモデル

Fig. 1 に示されるような、半径 a 、密度 ρ_p の粒子 N 個より構成される凝集体が粘度 μ_f 、密度 ρ_f の流体中にあるとする。この凝集体の構成粒子 i の運動は次式で表される。

$$m \frac{d\mathbf{v}_i}{dt} = \mathbf{F}_i \quad (4)$$

$$I \frac{d\boldsymbol{\omega}_i}{dt} = \mathbf{M}_i \quad (5)$$

ここで $m = (4/3)\pi a^3 \rho_p$ および $I = (8/15)\pi a^5 \rho_p$ はそれぞれ質量、慣性モーメントである。 $\mathbf{v}_i$ 、 $\mathbf{F}_i$ 、 $\boldsymbol{\omega}_i$ 、 $\mathbf{M}_i$ はそれぞれ粒子 i の速度、力の総和、角速度、トルクの総和である。ここでは、粒子は充分大きく、ブラウン運動の影響は無視小であるとしている。個々の粒子には、流体、隣接粒子および外力場から受ける力、ならびに対応したトルクが働く。従って次式が成立する。

$$\mathbf{F}_i = \mathbf{F}_{hi} + \sum_j \mathbf{F}_{pij} + \mathbf{F}_{ext} \quad (6)$$

$$\mathbf{M}_i = \mathbf{M}_{hi} + \frac{1}{2} \sum_j \mathbf{F}_{pij} \times \mathbf{r}_{ij} \quad (7)$$

ここで、 $\mathbf{F}_{hi}$ 、 $\mathbf{M}_{hi}$ はそれぞれ流体から受ける力、トルク、 $\mathbf{F}_{pij}$ 、 $\mathbf{F}_{ext}$ はそれぞれ近隣粒子 j 、外力場から受ける力を表す。 $\mathbf{r}_{ij} = \mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j$ で、 $\mathbf{x}_i$ は i 粒子の中心の位置ベクトルである。

2.1 露出表面積の推定

粒子径基準のレイノルズ数 $Re < 0.1$ の領域で、単一粒子に加わる流体抗力が Stokes 抵抗則で与えられることは良く知られているが、凝集体に関しても、凝集

Fig. 1 Schematic drawing of the model of an aggregate and the coordinate system. The dark section on the particle i indicates the region which is regarded as exposed directly to the flow. In this region, four lines to the corners of a section from the particle center are not intercepted by other particles.

構造の複雑さの故に、第一近似として、この Stokes 抵抗則が用いられることが多い。すなわち、流体はあたかも他の粒子が存在しないかのように粒子間を素抜けずとして、個々の構成粒子に働く流体抗力は Stokes 抵抗則で与えられると仮定する。この仮定は Free draining と呼ばれており、粒子表面の大部分が流れに接している短い鎖状凝集体に対しては比較的に誤差が小さいと予想されるが、流れから遮蔽される中心部に多くの粒子を持つ一般の凝集体に対しては、流体抵抗を過大に見積もる。これを是正する方法として本モデルでは、流れに露出している表面からのみ流体抗力を受けるものとし、この面積の推定を行った。Fig. 1 に示すように、各粒子の表面を緯度、経度方向にそれぞれグリッド間隔が $\pi/36$ の角度を持つ 2592 の微小面積要素 dS に分割する。この面積要素 dS が露出しているかどうかは、各粒子中心から dS の全ての隅点に引いた直線が他粒子の存在により遮られないかどうかで判断した。この検討を全要素に対して行い、粒子 i の流れに露出している表面積 S_i を決定した。

2.2 局所流れ場の補正

近隣粒子が存在せず単一粒子であるかのごとく、上で求めた各粒子の S_i に凝集体とバルク流体との相対速度による抗力が働くすると、流体抗力を過大評価するのは明らかである。すなわち凝集体中の注目している粒子の周りの流体流動は、凝集体から遠く離れ凝集体の存在による影響の無いバルクの流動とは異なり、近隣粒子の影響を著しく受ける。一般に凝集体周

りの流れは複雑で、その流れ場を正確に知ることは難しい。

一方、粉体層中を流れる流体の速度が、粒子の存在により著しく低下することは良く知られている。この場合、粒子と流体との相対速度 $\mathbf{v}_i$ は $\varepsilon f(\varepsilon) \mathbf{v}_i$ に減少する。ここで $f(\varepsilon)$ は空隙率関数であり空隙率 ε ($0 \leq \varepsilon \leq 1$) の単調増加関数で、種々の実験式として報告されている。Steinour は次式⁶⁾を提案している。

$$f(\varepsilon) = 10^{-1.82(1-\varepsilon)} \quad (8)$$

そこで本モデルでは、凝集体中の注目している粒子の周りの流体速度は粉体層の場合と同様に減少すると仮定した。すなわち、粒子 i の近傍の相対速度は $\varepsilon_i f(\varepsilon_i) \mathbf{v}_i$ で与えられるとした。ここで $\mathbf{v}_i$ は粒子と流体の相対速度である。 ε_i の値の定義は難しいが、ここでは粒子 i 周りの局所空隙率として Fig. 2 に示すように、粒子中心から内半径 a 、外半径 R_s の球殻シェル内の空隙率で与えられるとし、各粒子について計算した。

2.3 凝集体の流体抗力の推算

上で求めた S_i と粒子近傍の相対速度を用いて、凝集体に働く流体抗力と沈降速度を計算する。粒子が回転しない場合、静止流体中を $\varepsilon_i f(\varepsilon_i) \mathbf{v}_i$ の速度で移動する粒子 i により生ずる粒子中心から距離 $\mathbf{r}_i$ における流れ場 $\mathbf{u}_i$ 、および静圧 p_i は、次式で表される⁷⁾。

$$\mathbf{u}_i = \varepsilon_i f(\varepsilon_i) \left[\frac{3a}{4r_i} \left(1 + \frac{a^2}{3r_i^2} \right) \mathbf{v}_i + \frac{3a}{4r_i} \left(1 - \frac{a^2}{r_i^2} \right) \frac{\mathbf{r}_i \cdot \mathbf{v}_i \mathbf{r}_i}{r_i^2} \right] \quad (9)$$

$$p_i = \varepsilon_i f(\varepsilon_i) \frac{3\mu_f}{2a^2} \mathbf{v}_i \cdot \mathbf{r}_i \quad (10)$$

ただし、 $r_i = |\mathbf{r}_i|$ である。また、ニュートン流体の場合応力テンソル $\boldsymbol{\tau}_i$ は次式で表される。

$$\boldsymbol{\tau}_i = -p_i \boldsymbol{\delta} + \mu_f [\nabla \mathbf{u}_i + (\nabla \mathbf{u}_i)^T] \quad (11)$$

ただし、 $\boldsymbol{\delta}$ は単位テンソルを表す。 $\boldsymbol{\tau}_i$ を全露出面積 S_i にわたって積分することにより i 粒子に働く流体抗力 $\mathbf{F}_{hi}$ が計算できる。

$$\mathbf{F}_{hi} = \int_{S_i} \boldsymbol{\tau}_i \cdot \mathbf{n} |_{r_i=a} dS \quad (12)$$

ただし $\mathbf{n}$ は、粒子表面に垂直な外向きを正とする単位ベクトルである、式 (9)～(11) を式 (12) に代入すると流体抗力 $\mathbf{F}_{hi}$ を推算することができる。

Fig. 2 Schematic drawing of the method to calculate the local void fraction around a particle; the local void fraction is represented by the void fraction for the spherical shell of inner radius a and outer radius R_s around a particle.

2.4 凝集体の沈降速度

N 個の粒子より構成される凝集体が、液中で重力により終末速度で沈降するとする。

2.4.1 体積相当球の沈降速度

凝集体の体積相当半径 a_{ve} は、 $a_{ve} = a \cdot N^{1/3}$ で与えられるので、この体積相当球の終末沈降速度 v_{sve} は、Stokes 領域にあるとして、次式より算出できる。

$$N \frac{4}{3} \pi a^3 (\rho_p - \rho_f) \mathbf{g} - 6\pi \mu_f a \cdot N^{1/3} \mathbf{v}_{sve} = \mathbf{0} \quad (13)$$

ただし、 $\mathbf{g}$ は重力加速度である。

2.4.2 提案モデルによる沈降速度と動力学的形状係数

提案モデルによる沈降速度 v_{sag} の算出法を述べる。本法はランダムな構造を有する任意の凝集体にも適用可能であるが、ここではシミュレーション結果を新居田、大塚の実験結果³⁾と比較する目的で、凝集体は粒子接点が接着され回転しない等軸晶系構造の剛体とする。この場合、式 (5)、(7) は不要となる。終末沈降であることから、式 (4) より $\mathbf{F}_i = \mathbf{0}$ で、式 (6) の左辺は 0 であり、これを全粒子の総和をとって剛体に対する式にすると、右辺第 2 項は 0 となり、第 3 項の外力は重力と浮力となるので、 N 個の粒子からなる剛体凝集体の沈降に対して次式が成立する。

$$N \frac{4}{3} \pi a^3 (\rho_p - \rho_f) \mathbf{g} - \sum_{i=1}^N \mathbf{F}_{hi} = \mathbf{0} \quad (14)$$

従って、式 (12) を式 (14) の左辺第 2 項に代入し、式 (14) を満たす一定値 $\mathbf{v}_i$ を求めることにより、凝集

Fig. 3 Aggregates employed in the experiment by Niida and Ohtsuka. Experimental values of dynamic shape factor K are cited in the parenthesis.

体の沈降速度 v_{sag} が決定される。この v_{sag} の値と v_{sve} を式 (1) に入れることにより、動力学的形状係数を求めることができる。

3. 結果と考察

3. 1 実験との比較

Fig. 3 は、新居田、大塚のクロム鋼球（密度 $7.79 \times 10^3 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$ 、粒径 $2.00 \sim 4.00 \text{ mm}$ ）を用いて作った凝集体の形状と、それをシリコンオイル中で沈降させ、Stokes 領域における終末速度の測定により決定した動力学的形状係数の実験値 K_{exp} を示す³⁾。シミュレーションをこれと対応させるため、同様の凝集体を作り、その動力学的形状係数 K_{cal} を上述のシミュレーションモデルにより推算した。用いた物性値を **Table 1** に示す。ここでは、 $R_s/a = 2.0$ として計算した。この R_s の値に対する妥当性については 3. 2 節において検討する。

Fig. 4 は、実験値 K_{exp} に対するシミュレーションによる推算値 K_{cal} を示したグラフで、推算値が実線で示した傾き 1 の線上に乗れば、実験値と一致したことを示す。同図には、露出表面の補正、近接粒子による局所流れ場補正のどちらの補正も行わない Free

Table 1 Parameters employed in the present simulation

a	radius of a primary particle	$1.0 \times 10^{-6} \text{ m}$
ρ_p	density of particle	$2.6 \times 10^3 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$
ρ_f	density of fluid	$9.8 \times 10^2 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$
μ_f	viscosity of fluid	$8.9 \times 10^{-4} \text{ Pa} \cdot \text{s}$

Fig. 4 Comparison between the experimental values, K_{exp} and values predicted by the proposed models, K_{cal} for $R_s/a = 2.0$.

■ : neither correction for the exposed surface nor for flow disturbance by neighboring particles is taken into account (Free draining) ;
▲ : only the correction for the exposed surface is taken into account, ○ : both corrections are carried out. The solid line indicates the experimental value.

draining の場合、及び露出表面補正のみを行った場合の推算値も併記する。Free draining の場合には、推算値が実験値より極めて大きくなるのがわかる。これは、粒子に働く流体抗力が過大に計算され、凝集体の沈降速度が極度に小さく計算されたことによる。このことは、 N の値の小さい領域においても見られ、凝集体の流体抗力計算において広く用いられてきた Free draining の仮定は、大きな凝集体だけでなく、粒子の大部分の面が流体と接している小さな凝集体においても流体抗力の推算には用いることが出来ないことを示している。

露出表面の補正のみを行った場合は、Free draining の場合と比較すると大幅な改善が見られるが、実験値との差異は小さいとは言えず、依然として流体抗力を過大評価しているのがわかる。一方、露出表面補正及び近接粒子の存在による流れの補正を共に行う本モデルの場合、実験値と推算値が良好に一致していることがわかる。これは、ここで提案した手法が、凝集体に働く流体抗力を定量的に推定できる手法であることを示している。

Fig. 5 Comparison between of K_{cal} and K_{exp} for various values of R_s .

○ : $R_s/a=1.5$; ● : $R_s/a=2.0$;
◐ : $R_s/a=2.5$; ⊠ : $R_s/a=3.0$

3.2 R_s の値に対する検討

前節の計算では $R_s/a=2.0$ の条件を用いた。本節では、この値が妥当であるかどうかを検討する。Fig. 5は、 $R_s/a=1.5, 2.0, 2.5, 3.0$ として計算した K_{cal} の値を実験値と比較したものである。Table 2には、これに対応した k 個の K_{cal} 値の平均2乗誤差 σ^2 を示している。この σ^2 は次式で定義される。

$$\sigma^2 = \frac{1}{k} \sum (K_{\text{cal}} - K_{\text{exp}})^2 \quad (15)$$

R_s/a の値が仮定された範囲であれば、いずれの場合も、Free draining の場合、露出表面の補正のみを行った場合より、格段に精度が増すのがわかる。しかし $R_s/a < 2.0$ では、 R_s/a が1.0に近づくと共に、当然、空隙率が大きくなるので、 K_{cal} が過大評価され、実験値から外れることが分かる。 R_s/a が3.0より大きくなると、Fig. 3で表される凝集体の場合、注目し

Table 2 Effect of R_s on the accuracy of the present model

R_s/a	(-)	1.5	2.0	2.5	3.0
$\sigma^2 \times 10^2$	(-)	14.7	1.93	3.53	5.74

ている粒子の隣接粒子を越えた反対側の空隙まで計算することとなり、適当ではない。従って、ここでは $2.0 \leq R_s/a \leq 3.0$ であると考えられるが、Fig. 5ならびにTable 2から、 $R_s/a=2.0$ の時が最も精度良いことがわかる。従って、 $R_s/a=2.0$ と仮定するのは妥当であると結論される。

4. 結 言

凝集体に働く流体抗力に対し、露出表面補正及び近隣粒子の存在による局所流れ場補正を行うモデルを構築した。これを用いて凝集体の動力学の形状係数を推算し、実験値と比較した結果、以下の結論を得た。

- 1) 露出表面補正、局所流れ場補正を行うことにより、凝集体の動力学の形状係数の推算値は、Free draining 及び露出表面補正のみの場合と比較して、実験値と良好に一致し、本モデルにより、凝集体に働く流体抗力の定量的推算が可能であることがわかった。
- 2) 局所空隙率として、粒子中心から内半径 a 、外半径 $2a$ の球殻シェル内の空隙率を仮定するのが妥当であることが分かった。
- 3) 本研究において構築されたシミュレーションモデルは、複雑な形状を持ち巨大な任意の凝集体の流れ場中での定量的挙動の推算に対し、適用可能であることが推定された。

Nomenclature

a : radius of a particle	(m)	(-)
a_{ve} : radius of particle of equivalent volume to an aggregate	(m)	m : mass of a particle (kg)
f : void function	(-)	M : torque on a particle ($\text{N} \cdot \text{m}$)
F : force on a particle	(N)	M_h : hydrodynamic torque exerted on a particle ($\text{N} \cdot \text{m}$)
F_{ext} : external force on a particle	(N)	n : unit vector normal to the particle surface (-)
F_h : hydrodynamic drag force exerted on a particle	(N)	p : static pressure ($\text{N} \cdot \text{m}^{-2}$)
F_p : inter-particle force	(N)	S : area of particle surface exposed to flow (m^2)
g : gravity acceleration	($\text{m} \cdot \text{s}^{-2}$)	r : position vector from the particle center (m)
I : moment of inertia of a particle	($\text{N} \cdot \text{m} \cdot \text{s}^2$)	r : $ \mathbf{r} $ (m)
k : number of data	(-)	Re : Reynolds number (-)
K : dynamic shape factor	(-)	R_s : radius of outer surface for the definition of void fraction (m)
N : number of constituent particles of an aggregate		t : time (s)

$\mathbf{u}$: fluid velocity	($\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$)	ρ_f : fluid density	($\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$)
$\mathbf{v}$: particle velocity	($\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$)	σ^2 : error mean square	($-$)
v_{sag} : sedimentation velocity of an aggregate	($\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$)	$\boldsymbol{\tau}$: stress tensor	($\text{N} \cdot \text{m}^{-2}$)
v_{sve} : sedimentation velocity of a sphere of equivalent volume to an aggregate	($\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$)	ω : angular velocity	(s^{-1})
$\mathbf{x}$: vector of arbitrary position	(m)	subscript	
$\boldsymbol{\delta}$: unit tensor	($-$)	cal : calculated value	
ε : void fraction	($-$)	exp : experimental value	
μ_f : fluid viscosity	($\text{Pa} \cdot \text{s}$)	i, j : index of particle	
ρ_p : particle density	($\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$)	ij : index for particle i relative to particle j	

Literature Cited

1) Higashitani K. and K. Iimura : "Two-Dimensional Simulation of the Breakup Process of Aggregates in Shear and Elongational Flows", *J. Colloid and Interface Sci.*, **204**, 320-327 (1998)

2) Stöber W., H. Flachsbart and D. Hochrainer : "Der aerodynamische Durchmesser von Latexaggregaten und Asbestfasern", *Staub*, **30**, 277-285 (1970)

3) Niida T. and S. Ohtsuka : "Dynamic Shape Factors of Regular Shaped Agglomerates and Estimation Based on Agglomerate Symmetry", *KONA (POWDER AND PARTICLE)*, **15**, 202-211 (1997)

4) Happel, J. and H. Brenner : "Low Reynolds Number Hydrodynamics", p269, p272, Prentice-Hall, Englewood, N. J. (1965)

5) Kasper, G., T. Niida and M. Yang : "Measurements of Viscous Drag on Cylinders and Chains of Spheres with Aspect Ratio Between 2 and 50", *J. Aerosol Sci.*, **16**, 535-556 (1985)

6) Steinour H. : "RATE OF SEDIMENTATION-Nonfloc-culated Suspensions of Uniform Spheres-", *I. E. C.*, **36**, 618-624 (1944)

7) Russel, W. B., D. A. Saville and W. R. Showalter : "Colloidal Dispersions", pp. 38-39, Cambridge Univer-sity Press, New York (1989)