

エアロゾル粒子の捕集と電子計算機

工学部・化工 金 岡 千嘉男

はじめに

現在、我々の研究室ではエアロゾルの挙動解明の一環としてエアロゾル粒子の捕集と壁への沈着現象に関する研究を行なっているが、この過程で電子計算機を利用して、流れ粒子軌跡の計算を行なっているのでこれらの方法を若干述べたい。

昔から、とても実現できないものの例として「雲をも把む」という言葉があるが、雲はエアロゾルの一種であり、我々の行なっている研究はさしづめ、この雲をいかにして把むかということになるであろう。

エアロゾルを気体から分離する装置としてフィルタ、スクラバなどがよく知られている。これらはエアロゾルの流れの中に繊維や液滴などの障害物（捕集体）を挿入すると気体は障害物に沿って流れの方向を変えることができるが粒子は気体に比べると非常に大きな質量を持っているため十分に方向を変えることができず、ついには障害物に衝突することを利用してゐる。粒子が捕集される機構としてはこれ以外にも拡散、重力、静電気力など種々であるが、いずれにしても粒子と気体の間になんらかの方法により相対速度を作り出すことが粒子捕集の原理であるといえる。したがって、エアロゾル粒子がどれだけ捕集されるか(捕集効率)を知るという問題は結局、分散媒である気体の運動とその内での粒子の運動を明らかにすることに帰着する。

エアロゾルの運動とその解析

エアロゾルのような粒子—気体 2 成分系の流れは両者が相互に干渉し合いその挙動は一般には非常に複雑である。しかし、粒子濃度が低いときには気体と粒子の運動を以下のように分けて考えることができる。

気体

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = -\frac{1}{\rho} \text{grad } P + \nu \nabla^2 \mathbf{u} \quad (1)$$

$$\text{div } \mathbf{u} = 0 \quad (2)$$

粒子

$$m \frac{d\mathbf{v}}{dt} = \frac{\pi}{8} D^2 \rho C_D (\mathbf{u} - \mathbf{v}) |\mathbf{u} - \mathbf{v}| + \mathbf{F} \quad (3)$$

ここで、 \mathbf{u} : 気体速度、 \mathbf{v} : 粒子速度、 D : 粒子径、 C_D : 抗力係数、 m : 粒子質量、 P : 圧力
 ρ : 気体密度、 ν : 気体動粘度

Eq.(3)において、右辺第 1 項は流体抵抗を第 2 項はその他の外力であり、重力、静電気力、拡散力などおもに粒子がおかれている場に関連した力である。

Eqs.(1)~(3)を比較すれば明らかなように気体の運動はそれ独自のものとして Eqs.(1),(2)を解くことにより求めることができるが、粒子の場合には気体の流れが明らかとならなければ Eq.(3)を解くことはできない。

したがって、理論的に粒子の捕集効率を明らかにするには、まず最初に Eqs.(1),(2)より捕集体を過ぎる気体の流れを求め、その後、その流れ場での粒子の運動を各機構別に Eq.(3)を用いて求めなければならない。

まず、Eqs.(1),(2)を解く問題であるが、Eq.(1)は良く知られているように Navier-Stokes の式であり、これが解析的に求まるのはごく限られた場合だけである。このため、計算は全て数値計算に頼らざるを得なくなる。

いま、非圧縮性の気体がFig-1で示す領域を定常状態で流れる場合について考えると、Eqs. (1), (2)には未知数を3つ含むことになり、このままでは3元方程式となり解きにくいので次のように変形する。

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} = \zeta r + \frac{1}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r} \quad (4)$$

$$\frac{\partial^2 \zeta}{\partial r^2} + \frac{\partial^2 \zeta}{\partial z^2} = \frac{1}{r} \left(\frac{\zeta}{r} - \frac{\partial \zeta}{\partial r} \right) + \frac{Re}{2} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial \psi}{\partial z} \cdot \frac{\partial \zeta}{\partial r} - \frac{1}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r} \cdot \frac{\partial \zeta}{\partial z} - \frac{\zeta}{r^2} \cdot \frac{\partial \psi}{\partial z} \right) \quad (5)$$

ここで、 ψ : 無次元流れ関数、 ζ : 無次元渦度、 Re : Reynolds数

Eqs.(4), (5)は未知数を2つしか含まないので両式を適当な境界条件下に連立して解けば ψ , ζ の値を知ることができる。

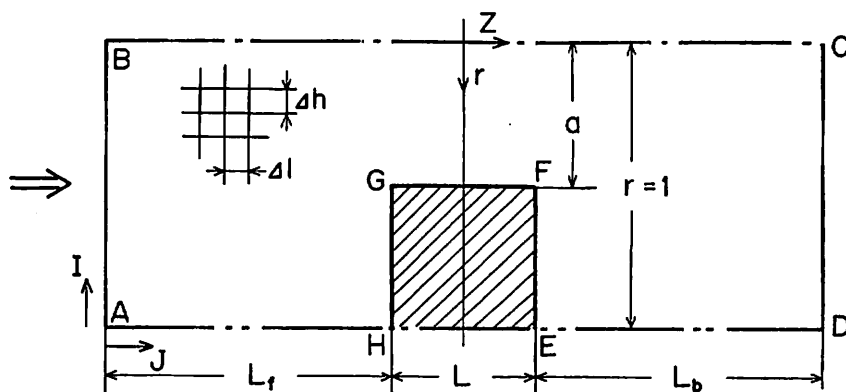


Fig. 1. Cylindrical Co-ordinates System and location of mesh points

そこで、我々は、Eqs.(4), (5)を点綴和法で求めることとし、次の差分式を用いた。

$$\psi_{i,j} = \frac{1}{2(\Delta h^2 + \Delta l^2)} \left\{ \Delta l^2 (\psi_{i-1,j} + \psi_{i+1,j}) + \Delta h^2 (\psi_{i,j-1} + \psi_{i,j+1}) - \Delta h^2 \Delta l^2 r_i \zeta_{i,j} - \frac{\Delta h \Delta l^2}{2r_i} (\psi_{i-1,j} - \psi_{i+1,j}) \right\} \quad (6)$$

$$\zeta_{i,j} = \left\{ \frac{\zeta_{i-1,j} + \zeta_{i+1,j}}{\Delta h^2} + \frac{\zeta_{i,j+1} + \zeta_{i,j-1}}{\Delta l^2} + \frac{\zeta_{i-1,j} - \zeta_{i+1,j}}{2r_i \Delta h} - \frac{Re}{8r_i \Delta h \Delta l} \left\{ (\psi_{i,j-1} - \psi_{i,j-1}) \times (\zeta_{i-1,j} - \zeta_{i+1,j}) - (\psi_{i-1,j} - \psi_{i+1,j}) (\zeta_{i,j+1} - \zeta_{i,j-1}) \right\} \right\} \left\{ \frac{2}{\Delta h^2} + \frac{2}{\Delta l^2} + \frac{1}{r_i^2} - \frac{Re}{4r_i^2 \Delta l} (\psi_{i,j+1} - \psi_{i,j-1}) \right\}^{-1} \quad (7)$$

ここで、 i, j はそれぞれ r, z 方向メッシュ番号を、また、 $\Delta h, \Delta l$ は分割巾を意味する。

次に境界条件であるが、これは捕集体表面以外は比較的簡単に与えられるが、捕集体表面は気体速度が零であることを除くと他には情報が無いので、内点を用いて次のように仮定した。

(i) 水平壁 (GF)

$$\zeta_{i,j} = (\psi_{i,j} - \psi_{i+1,j} + \frac{\Delta h^2}{6} r_i \zeta_{i+1,j} + \frac{\Delta h^3}{12} \zeta_{i+2,j} - \frac{\Delta h^3}{3} \zeta_{i+1,j}) \left(\frac{\Delta h^3}{12} + \frac{\Delta h^4}{24r_i} + \frac{\Delta h^2}{3} r_i \right)^{-1} \quad (8)$$

(ii) 垂直壁 (HG, FE)

$$\zeta_{ij} = \frac{3}{r_i \Delta l^2} (\psi_{i,j+1} - \psi_{ij}) - \frac{1}{2} \zeta_{i,j+1} \quad (9)$$

ここで-はHG, +はFEに対応する。

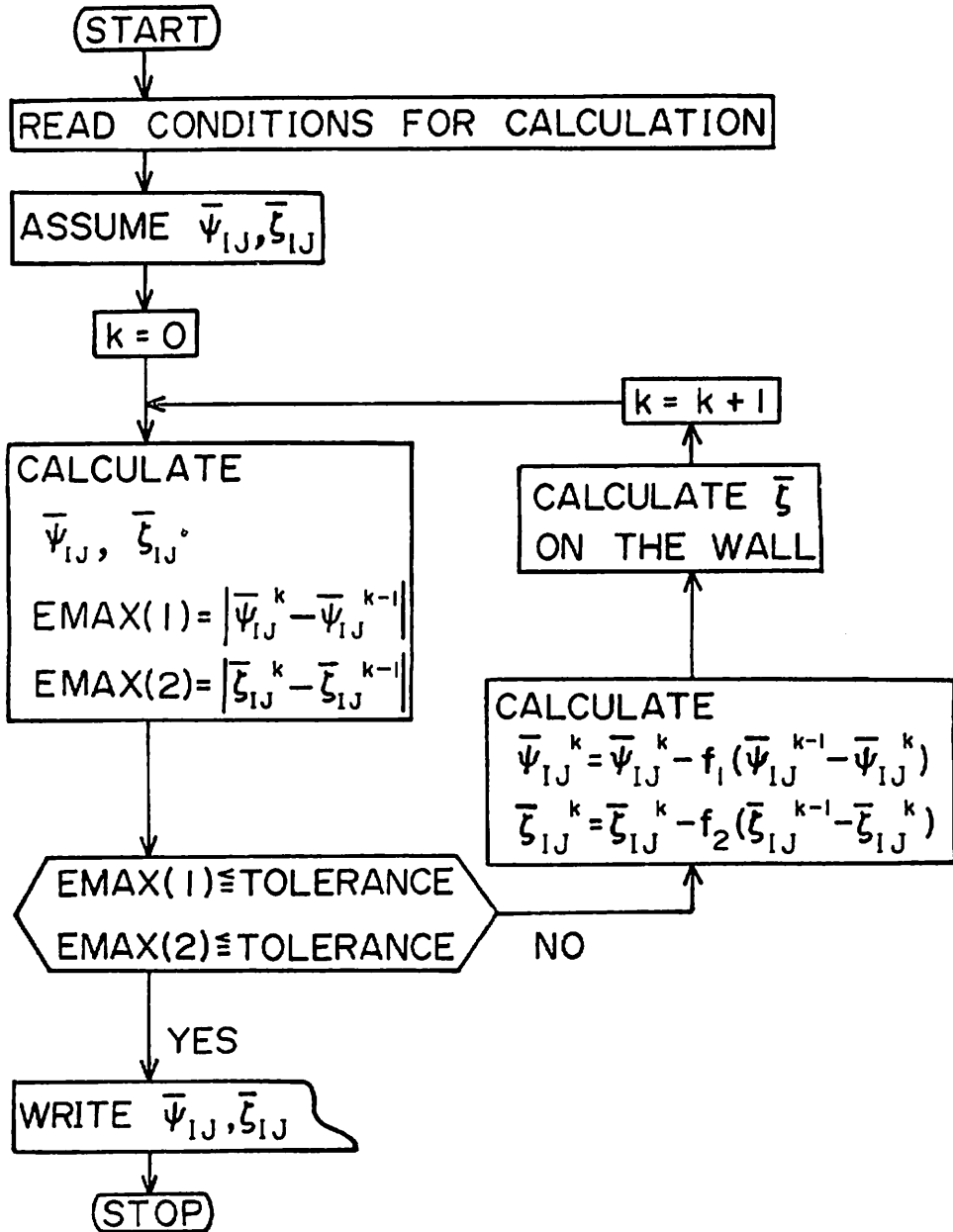


Fig. 2. Flow sheet for the calculation of flow pattern

したがって、Eqs.(6),(7)をEqs.(8),(9)などの境界条件下に計算を行なえばよいのだが、計算はFig. 2に示すフローチャートに従って行なった。すなわち、全ての格子点での ψ, ζ の初期値を仮定する。その後、内点についてはEqs.(6),(7)、境界上の点ではEqs.(8),(9)などの関係を用いて計算し、初めに仮定した値との差が許容誤差内に収まっているかどうかを調べる。そして、この条件が満足されないときには次のように初期値を設定しなおし、演算誤差が許容値内に入るまで計算を繰り返す。

$$\psi_{ij}^k = \psi_{ij}^{k-1} + f_1(\psi_{ij}^{*k} - \psi_{ij}^{k-1}) \quad (10)$$

$$\zeta_{ij}^k = \zeta_{ij}^{k-1} + f_2(\zeta_{ij}^{*k} - \zeta_{ij}^{k-1}) \quad (11)$$

ここで、 $k, k-1$ はそれぞれ k 回目、 $k-1$ 回目の計算を、また、 $*$ は補正以前の計算値を意味する。さらに、 f_1, f_2 は加速演算子である。

以上が気体の流れの計算の概要であるが、この方法により得られる結果が正確であるためには、計算の領域は出来るだけ広く、そして分割巾は出来るだけ小さく(特に捕集体表面近傍では)とることが望まれる。ところが、両者を同時に満足させるには膨大な数の格子点と計算時間を要し、実際上不可能なので適当な所で妥協せざるを得ない。 ψ, ζ の物理的性質を考えると、これらは物体表面の近くでは急激に変化するが離れた所ではそれほどでもないので、分割巾を物体表面近くでは小さく、遠くでは大きくなるように座標変換するが、領域に応じて分割巾を変えるような操作をすれば上述の欠点はかなり改善される。それで、現在、我々は必要に応じて以上のような方法により、格子数や分割巾を選択して計算を行っている。(格子数は大体 $41 \times 100 \sim 300$ 程度)格子数などを決定するとき、さらに考慮しなければならないのは計算時間の制約である。数値解である以上、何回計算を繰り返しても真の値には到達しないので適当な許容誤差を設定し、そこへ如何に早く到達させ、計算を終らせるかが問題となる。本題で取り上げた流れの計算では、Eqs.(10),(11)で示した加速演算子 f_1, f_2 を変化させると計算時間が変わると云われている。我々もはじめ f_1, f_2 を種々に変えて演算誤差がどのように変化するかを調べ、その中で最も計算が早くなると思われる f_1, f_2 を採用して計算になった。Re数によって種々であるが f_1 は1, f_2 は0.~0.8程度で400~1,000回程度の繰り返し計算を必要とした。これでも、計算時間にして100分~200分という膨大なものになる。)

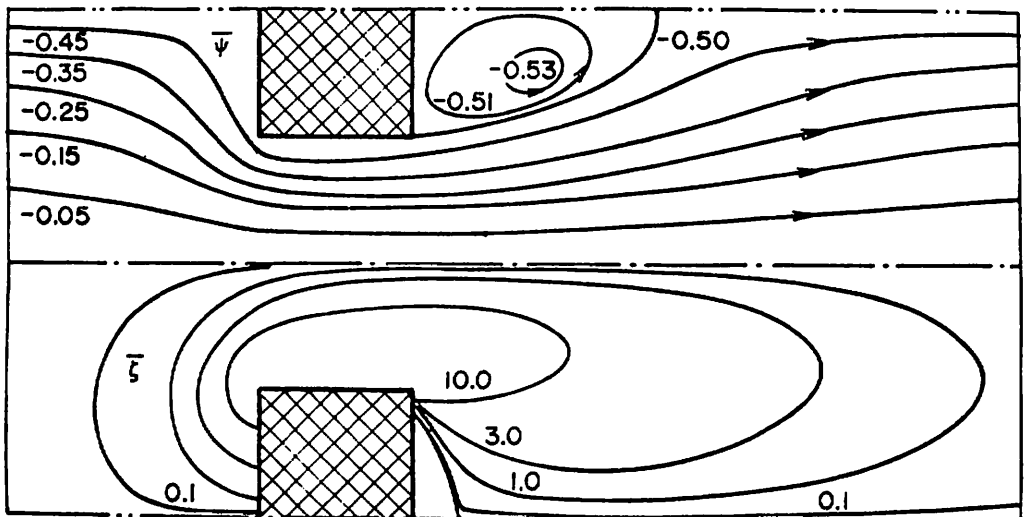


Fig. 3. Streamlines and vorticities near a circular hole at $Re=10.0$ and $\epsilon=0.25$

このようにしてFig. 3のように流れが求まると、次にこの流れの中での粒子の運動をEq.(3)を用いて求めることになる。Eq.(3)は2元2次の微分方程式に書き替えられるので前項で求めた流れの値を代入して、RKM法により積分して粒子軌跡を求める方法をとっている。

以上のようにして粒子の軌跡がわかると、捕集体の無限前方のどの領域に入った粒子が捕集体により捕集されるかを知ることができるので、これを種々の力の場、条件によりどのように変化するかを調べると理論的な捕集の機構を明らかに出来ることになる。

RKM: Runge Kutta Merson

測定値から未知パラメーターを決定する方法(II)

—変数探索法—

理学部・化学 須原正彦・村田重男

前回は、非線形最適化の方法の内、我々が用いている方法の概要を説明したが、今回は、個々の場合の具体的な例として「①直接探索法」の内、最も簡単な最小化問題、すなわち一変数探索のプログラムを紹介することにする。多変数関数の最小化問題に用いられている手法は、独立変数が構成する空間のそれぞれの方向に沿って順次探索するので、それぞれの線形探索は一変数探索と等しいため、一変数探索は最小化問題の基本となる。

一変数探索の方法は二つに分類される。

(1)最小点が存在する区間を求める方法 (2)最小点に近接した点を求める方法

(1)の方法を適用する場合、最小点の存在がわかっている区間が示され、関数はこの区間内で唯一の積値をもっていることを仮定する。最小点の位置が要求される精度で求まるまで、最初に示された区間を種々な方法で短縮していく。(2)の方法を用いるには、最小点に近接した初期点をまず決める。多数の点に当てはまる低次の多項式を定め、つぎに当てはめた関数の最小点を求めると云う手順を、要求されている精度で最小点が求まるまで繰り返す。

我々は(1)に対しては黄金分割による探索法、(2)に対しては二次補間法による探索法を選んだ。

(1) 黄金分割による探索法

探索の各ステップごとに、最小点を含む区間の幅を一定の比率で減らしていく。

求めようとする最小点は、区間 (x_1, x_2) 内に存在し、 $x_1 < x_3 < x_4 < x_2$ を満たすように2点 x_3, x_4 をこの区間内から選ぶ。 i 回目の反復において

$$x_3^{(i)} = \frac{\tau - 1}{\tau} (x_2^{(i)} - x_1^{(i)}) + x_1^{(i)}, \quad x_4^{(i)} = \frac{1}{\tau} (x_2^{(i)} - x_1^{(i)}) + x_1^{(i)}$$

一方、探索においては $x_4^{(i)} - x_1^{(i)} = x_2^{(i)} - x_3^{(i)} = (x_2^{(i)} - x_1^{(i)}) / \tau$ を満たさねばならぬ。 i 回目の反復の結果、最小点を含む区間は $(x_1^{(i)}, x_4^{(i)})$ であったと仮定すると、

$$x_1^{(i+1)} = x_1^{(i)}, \quad x_2^{(i+1)} = x_4^{(i)}, \quad x_4^{(i+1)} = x_3^{(i)}, \quad \text{となる。}$$

$(i+1)$ 回目ののち最小点を含む区間が $(x_1^{(i+1)}, x_4^{(i+1)})$ 、 $(x_3^{(i+1)}, x_2^{(i+1)})$ にかかわらず

$$(x_4^{(i+1)} - x_1^{(i+1)}) + \frac{1}{\tau} (x_2^{(i)} - x_1^{(i)}) = (x_2^{(i)} - x_1^{(i)}) \text{となり} (i-1) \text{回目の反復で求めた}$$

区間の長さは i 回目と $(i+1)$ 回目での長さの和に等しくなる。従って、 $(i-1)$ 回目の反復後の区間は“黄金分割”にしたがって分けられていることになる。