計算数理工学論文集 Vol. 17 (2017 年 12 月)，論文 No. 01-171215 JASCOME

埋め込み境界–改良 Lattice Kinetic Schemeを用いた三次元T字管内における単一固体粒子の輸送解析

TRANSPORT ANALYSIS OF A SINGLE SOLID PARTICLE IN A THREE-DIMENSIONAL T-SHAPED SQUARE PIPE BY THE IMMERSED BOUNDARY–IMPROVED LATTICE KINETIC SCHEME

白　涵夫 [1)]，吉野　正人 [2)]，鈴木　康祐 [3)]

Hanfu BAI, Masato YOSHINO and Kosuke SUZUKI

1) 信州大学大学院 総合理工学研究科 工学専攻　(〒 380-8553　長野市若里 4-17-1,　E-mail: 16w4039h@shinshu-u.ac.jp)
2) 信州大学学術研究院 工学系　(〒 380-8553　長野市若里 4-17-1,　E-mail: masato@shinshu-u.ac.jp)
3) 信州大学学術研究院 工学系　(〒 380-8553　長野市若里 4-17-1,　E-mail: kosuzuki@shinshu-u.ac.jp)

An immersed boundary–improved lattice kinetic scheme is applied to numerical simulations of fluid flows with a single solid particle in a three-dimensional T-shaped square pipe. In this study, we extend the method to a three-dimensional formulation, while in the previous study by Yoshino et al. [Trans. Jpn. Soc. Comput. Meth. Eng., **16** (2016), pp. 31–36 (in Japanese)] it was formulated for two-dimensional problems. In addition, the method is validated through three-dimensional simulations of the sedimentation of a sphere. Using the present method, we investigate the motion of a single solid particle in a T-shaped square pipe by changing three important parameters, i.e., the initial position of the particle, the pressure difference between two outlets, and the Reynolds number. As a result, we obtain bifurcation diagrams of the particle transport for these parameters. In particular, we can find a characteristic regime where the particle is trapped by the vortex around the junction of the square pipe, which was not observed in two-dimensional simulations.

Key Words: Immersed Boundary–Improved Lattice Kinetic Scheme, Solid Particle, T-Shaped Square Pipe, Particle Separation

1. はじめに

流体と一緒に流れる粒子の分離や分級は，機械工学や化学工学でよく見られる単位操作の一つである．流体と粒子の密度が異なる場合には，重力を利用して簡単に操作することができるが，等密度の場合には重力で操作することができないため，何らかの工夫が必要になる．そこで近年では，T 字管という流路を利用して，粒子を分離や分級させる方法が注目されている.[(1)–(4)] しかしながら，詳細な現象については未知の部分が多いのが現状である．そのため，T 字管内における粒子を含む流れを調べることは，工学的な応用のみならず学術的にも重要であると考えられる．

T 字管内における粒子の輸送問題に関して，その現象の複雑さから，理論･実験的アプローチが困難な場合が多く，数値流体力学を用いたアプローチが期待されている．吉野ら [(5)] は，Inamuro et al. による液液二相系格子ボルツマン法 [(6)] を用いて，粒子を硬い液相と近似し，T 字管内における複数個の粒子の挙動解析を行った．しかしながら，硬い液相は流体の中で，多少ながらも変形することがあるため，固体粒子として扱うには十分ではないと考えられる．近年，移動境界流れの効率の良い数値計算法として，変形しない固体物体を扱うことができる埋め込み境界–格子ボルツマン法（Immersed Boundary–Lattice Boltzmann Method, IB-LBM）が注目され発展を遂げている．この手法は，デカルト格子上において境界近傍の格子点に適切な体積力を加えることにより，固体壁面上におけるすべりなし境界条件を満足する埋め込み境界法 [(7)] を，非圧縮性粘性流れの数値計算法の一種であり，圧力の Poisson 方程式を解くことなく流れ場を計算できる格子

2017 年 9 月 15 日受付，2017 年 10 月 31 日受理

ボルツマン法（LBM）[8] に組み込んだ手法である．吉野ら [9] は，LBM の拡張版である Lattice Kinetic Scheme[10]（以下，LKS と記す）をさらに改良して精度や安定性を改善した改良 LKS[11] と，埋め込み境界法を組み合わせることにより，管内における粒子の輸送問題の効率の良い計算手法を構築した．また，この新しい計算手法を用いて，二次元 T 字管内における固体粒子を含む流れの数値計算 [9] を行った．

そこで本研究では，その手法を三次元に拡張して，三次元 T 字管内における単一固体粒子の輸送シミュレーションを行い，粒子の初期位置，出口間の圧力差，およびレイノルズ数が粒子の挙動に与える影響を調べることにする．

2. 計算手法

2.1. 埋め込み境界–改良 LKS

本研究では，三次元 T 字管内における粒子の輸送解析を行うために，吉野らによって提案された埋め込み境界–改良 LKS[9] を三次元に拡張した．ただし，二次元と三次元の定式化はほとんど変わらず，格子気体モデルを 2 次元 9 速度モデルから 3 次元 15 速度モデルに変更したのみである．この手法の詳細は参考文献 [9] を参照されたい．なお，予備計算の結果，埋め込み境界法の反復回数を 0 回と 5 回にした場合の計算結果は良く一致した．そのため，本計算では計算負荷を減らすために，反復回数を 0 回にした．

2.2. 粒子の運動

本研究では，粒子の並進運動のみならず，回転運動も考える．粒子の回転運動により，並進エネルギーが回転エネルギーに変化するため，粒子の並進速度は遅くなるものと考えられる．粒子の重心の速度と角速度はニュートンの運動方程式によって計算される．この運動方程式の数値積分には 1 次精度のオイラー法を用いた．粒子が受ける力を計算する際には，内部質量の影響の計算法として，Suzuki & Inamuro[12] の方法を参考にして Lagrangian points approximation を用いた．その詳細については文献 [12] を参照されたい．

2.3. 粒子と壁面の反発力

粒子は壁と接触した時，壁から反発力 $\boldsymbol{F}_\mathrm{w}$ を受ける．本研究では，Feng et al.[13] の方法を参考に，反発力を以下のように与えた．

$$\boldsymbol{F}_\mathrm{w} = \begin{cases} B\left(\dfrac{|\boldsymbol{X}_\mathrm{p}-\boldsymbol{X}_\mathrm{w}|-R-\zeta}{\zeta}\right)^2\left(\dfrac{\boldsymbol{X}_\mathrm{p}-\boldsymbol{X}_\mathrm{w}}{|\boldsymbol{X}_\mathrm{p}-\boldsymbol{X}_\mathrm{w}|}\right) & \\ \qquad\qquad |\boldsymbol{X}_\mathrm{p}-\boldsymbol{X}_\mathrm{w}| \le R+\zeta, & \\ 0 \qquad\qquad |\boldsymbol{X}_\mathrm{p}-\boldsymbol{X}_\mathrm{w}| > R+\zeta, & \end{cases} \tag{1}$$

ここで，$\boldsymbol{X}_\mathrm{p}$ は粒子の重心位置，$\boldsymbol{X}_\mathrm{w}$ は壁の座標，B は力の大きさを決めるパラメータ，R は粒子の半径，ζ は安全領域である．本計算では，埋め込み境界法の有効範囲が壁と接触した際に，上記の反発力が作用するようにした．つまり，$\zeta = 2\Delta x$（Δx：格子間隔）とした．

3. 本手法の妥当性検証

本計算手法の妥当性を検証するために，閉じられた箱の中に満たされた静止流体中を球が重力によって沈降する運動の数値計算を行った．この問題は ten Cate et al. による PIV を用いた実験 [14] によって調べられている．以下に実験の条件を有次元量で記す．Fig. 1 のように，箱の大きさは幅 × 奥行き × 高さ = 100 × 100 × 160 mm である．球の直径は D_p = 15 mm で，その密度は ρ_b = 1120 kg/m^3 である．今回の計算では，計算領域を $200\Delta x \times 320\Delta x \times 200\Delta x$ とし，球の直径を $30\Delta x$ とする．壁にはすべりなし境界条件を用いる．系の支配パラメータは，球と流体の密度比 $\gamma = \rho_\mathrm{b}/\rho_\mathrm{f}$ およびレイノルズ数 $Re = \rho_\mathrm{f} u_\infty D_\mathrm{p}/\mu$ である．ここで，u_∞ は無限領域中の球の終端落下速度である．Table 1 に今回計算した 4 つの場合についてのレイノルズ数，流体の密度，および粘性係数を示す.

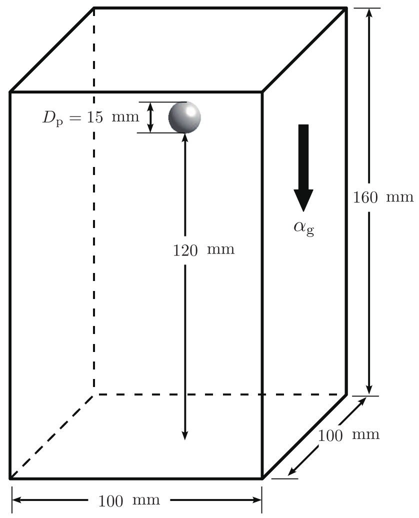

Fig. 1　The domain of computation for a sphere falling in a closed box. The sphere is driven by a constant gravity acceleration α_g.

Table 1　Fluid properties in simulations.

	Re	ρ_f [kg/m^3]	$\mu \times 10^3$ [Ns/m^2]
Case 1	1.5	970	373
Case 2	4.1	965	212
Case 3	11.6	962	113
Case 4	32.2	960	58

Fig. 2 に自由落下する球の軌跡と速度を ten Cate et al. の実験結果とともに示す．この 2 つの図から，本計算結果は ten Cate et al. の実験結果と良く一致しており，本計算手法の妥当性が確認ができた．

4. 三次元 T 字管内の単一固体粒子の輸送解析

4.1. 計算条件

Fig. 3(a) に示すような T 字管内において，流体が定常的に流れている中に直径 $D = 10\Delta x$ の粒子を 1 個配置し，初期位置を変えて運動を開始した場合の粒子の挙動を調べる．計算領域は $L_x = 500\Delta x$，$L_y = 275\Delta x$，$L_z = H = 50\Delta x$ とした．

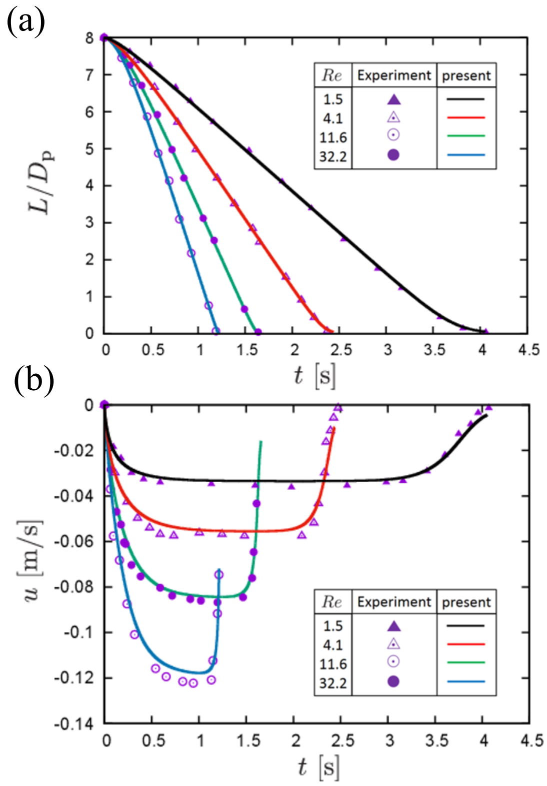

Fig. 2 Comparisons of the present results with experimental results by ten Cate et al.[14]: (a) the time variations of the gap L between the sphere and the bottom of the domain ; (b) the time variations of the velocity of the sphere u.

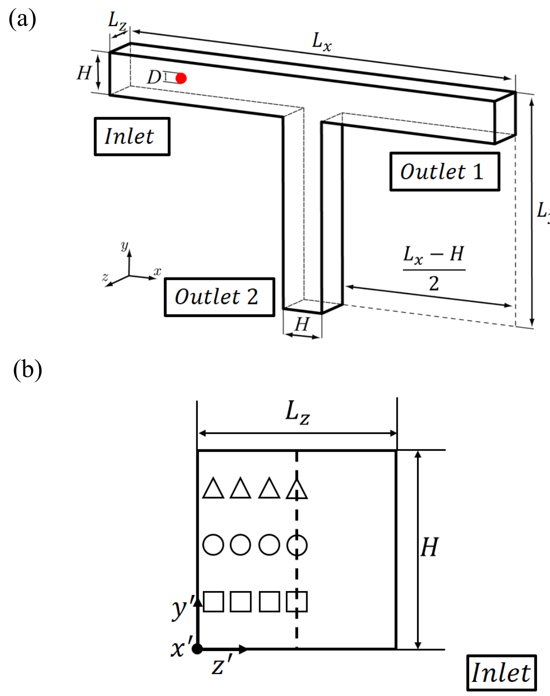

Fig. 3 Computational domain of a three-dimensional T-shaped square pipe: (a) overall view; (b) initial positions of a single particle at the inlet.

流入口（Inlet）には流入条件としてポアズイユの流速分布ならびに圧力勾配一定とし，流出流路の出口（Outlet 1）および分岐流路の出口（Outlet 2）では，いずれも流出条件として速

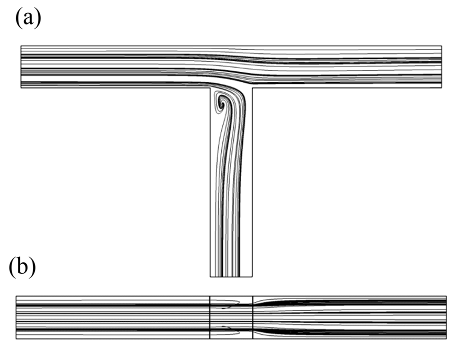

Fig. 4 Initial streamlines for $\Delta P = 0$ at $Re = 100$ viewed from (a) $z = +\infty$; (b) $y = +\infty$.

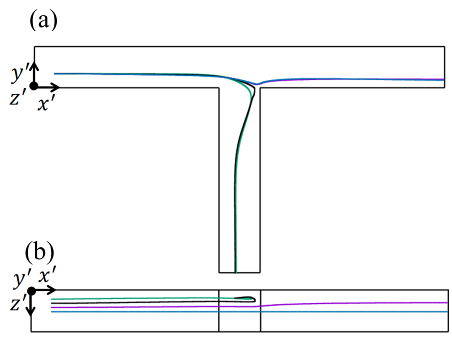

Fig. 5 Trajectories of a single particle from various initial positions in the z'-direction for $\Delta P = 0$ at $Re = 100$ viewed from (a) $z = +\infty$; (b) $y = +\infty$.

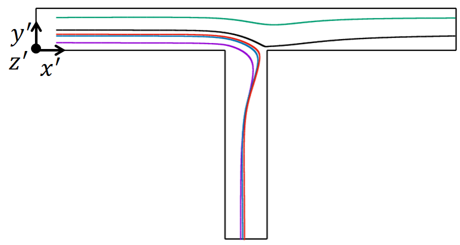

Fig. 6 Trajectories of a single particle from various initial positions in the y'-direction for $\Delta P = 0$ at $Re = 100$ viewed from $z = +\infty$.

度勾配 0 および圧力一定とした．その他の壁面にはすべりなし境界条件を用いた．レイノルズ数 $Re = U_{\rm in}H/\nu$ は，100 から 500 まで変化させた．ここで，$U_{\rm in}$ は流入口における平均流速である．Outlet 1 の圧力を p_1，Outlet 2 の圧力を p_2 として，その両出口間の無次元圧力差を $\Delta P = (p_1 - p_2)/(\rho_{\rm f} U_{\rm in}^2)$ と定義する．流体および粒子の密度は等しく，それぞれ $\rho_{\rm f} = 1$，$\rho_{\rm p} = 1$ とし，流体の動粘性係数を $\nu = 2.9 \times 10^{-3}\Delta x$ とする．このとき，動粘性係数を調整するパラメータ [11] は $A_u = 9.826 \times 10^{-1}$ となる．以下では，Fig. 3(b) のように流入口の断面正方形左下の角を原点として，$x'y'z'$ 軸を定義した座標系を用いる．粒子の初期位置については，Fig. 3(b) のように，入口断面において，y' 軸と z' 軸方向の位置を変化させたいくつかの点を考える．また，粒子の初期速度を $\boldsymbol{U}_{\rm p} = \boldsymbol{0}$ とする．

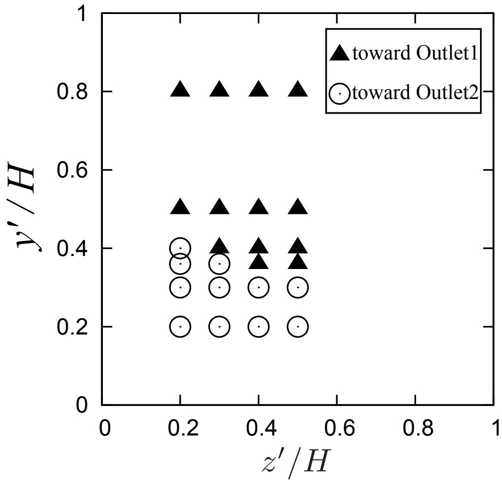

Fig. 7　Calculated results classified by the outlet which the particle reaches for various initial positions with $\Delta P = 0$ in the case of $Re = 100$.

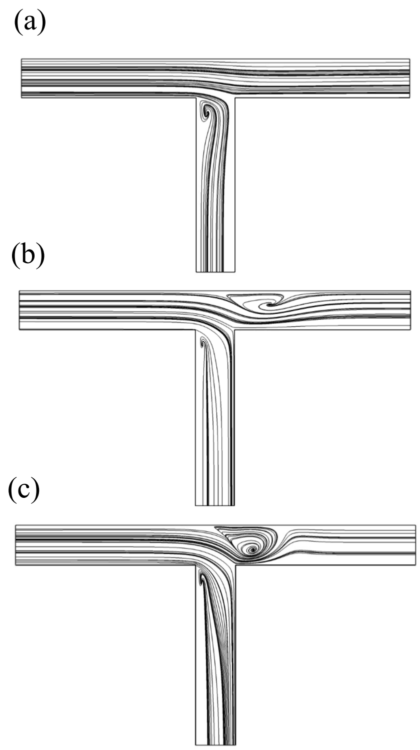

Fig. 8　Initial streamlines for various non-dimensional pressure differences ΔP at $Re = 100$ viewed from $z = +\infty$: (a) $\Delta P = 0$; (b) $\Delta P = 1.982$; (c) $\Delta P = 2.973$.

4.2. 初期位置の影響

初期位置が粒子の挙動に与える影響を調べるため，各初期位置に対して，$Re = 100$ で $\Delta P = 0$ として計算を行った．なお，流れ場の初期条件は，粒子を配置せずにT字管内の流れを計算した場合の，定常に達した流れ場とする．T字管の断面中央における初期の流線を Fig. 4 に示す．Fig. 4(a) より，$\Delta P = 0$ の時，Outlet 2 側に渦が生じることがわかる．また，初期位置の y' 座標を $0.36H$ で固定し，z' 座標のみ変化させた $(x', y', z') = (0.5H, 0.36H, 0.5H)$,$(0.5H, 0.36H, 0.4H)$,$(0.5H, 0.36H, 0.3H)$, $(0.5H, 0.36H, 0.2H)$ の 4 ケースに対する粒子の軌跡を Fig. 5 に示す．初期位置が入口断面の中央に近い粒子は，分岐部を通過した後に Outlet 1 へ移動し，逆に中央から遠い粒子は，分岐部へ到達した時に Outlet 2 へと移動していることがわかる．これは，壁面に近づくほど流速は小さくなるため，壁面近くから出発した粒子は十分に加速されず，分岐部へ到達した時に Outlet 2 側の渦に大きく影響されてしまうためと考えられる．

一方，初期位置の z' 座標を $0.2H$ で固定し，y' 座標のみ変化させた $(x', y', z') = (0.5H, 0.8H, 0.2H)$, $(0.5H, 0.5H, 0.2H)$, $(0.5H, 0.4H, 0.2H)$, $(0.5H, 0.36H, 0.2H)$, $(0.5H, 0.2H, 0.2H)$ の 5 ケースに対する粒子の軌跡を Fig. 6 に示す．初期位置が入口断面の中央より下の粒子は全部 Outlet 2 へと移動していることがわかる．これも，入口断面の中心から離れた位置から出発する粒子は十分に加速されず，Outlet 2 側の渦に影響されるためと考えられる．

種々の初期位置に対する粒子の到達位置の変化を Fig. 7 に示す．この図より，どの z' 座標の位置から出発した粒子も，$y' = 0.4H$ 程度を境に粒子の到達出口が変わっていることがわかる．すなわち，z' 座標の影響は y' 座標に比べて小さいと考えられる．

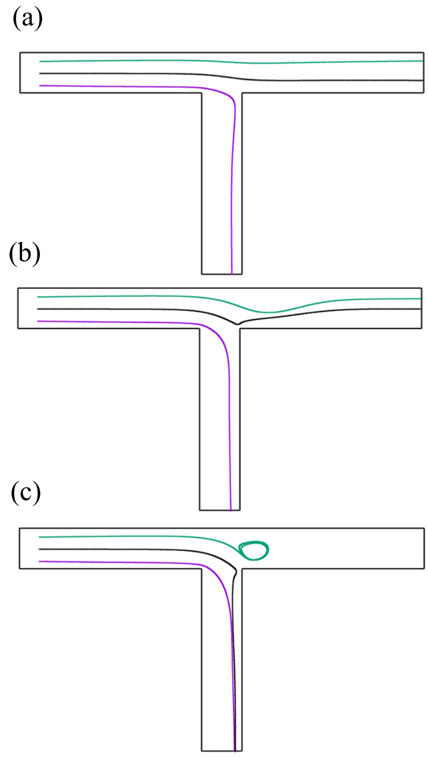

Fig. 9　Trajectories of a single particle from various initial positions in the case of $Re = 100$ viewed from $z = +\infty$: (a) $\Delta P = 0$; (b) $\Delta P = 1.982$; (c) $\Delta P = 2.973$.

4.3. 出口間圧力差の影響

両出口間圧力差の影響を調べるため，$Re = 100$ で ΔP を変化させて計算を行った．なお，予備計算の結果より，粒子の挙動に対する初期位置の z' 座標の影響は，ΔP が増加するにつれて大きくなったが，y' 座標の影響に比べると小さいこと

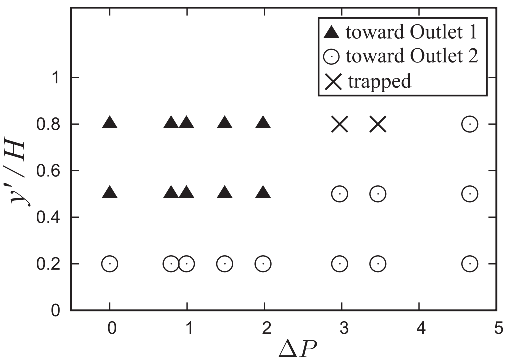

Fig. 10　Calculated results classified by the outlet which the particle reaches for various non-dimensional pressure differences ΔP and initial positions y'/H in the case of $Re = 100$.

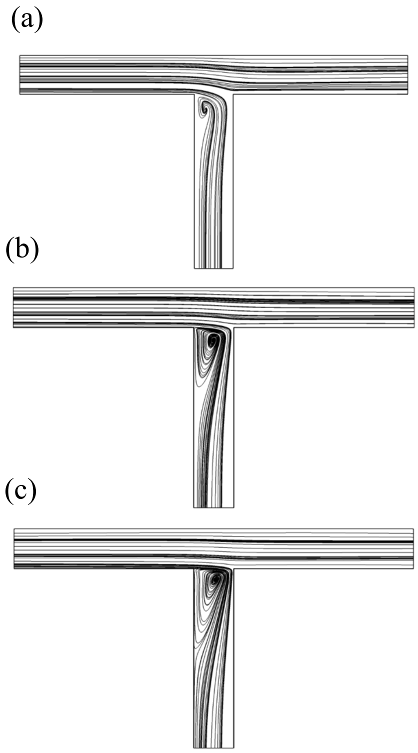

Fig. 11　Initial streamlines for various Reynolds numbers Re at $\Delta P = 0$ viewed from $z = +\infty$: (a) $Re = 100$; (b) $Re = 300$; (c) $Re = 500$.

がわかった．そのため，本節では，初期位置の z' 座標を $0.5H$（中央）に固定し，△：$(x', y', z') = (0.5H, 0.8H, 0.5H)$; ○：$(x', y', z') = (0.5H, 0.5H, 0.5H)$; □:$(x', y', z') = (0.5H, 0.2H, 0.5H)$ の 3 点のみ考える．種々の ΔP に対する初期の流線を Fig. 8 に示す．この図より，ΔP が増加するにつれて Outlet 2 側の渦は徐々に小さくなり，一方，Outlet 1 側には渦が生じ始め，徐々に大きくなることがわかる．このような圧力差の違いに対する流れ場の変化は，液液二相系 LBM(6) を用いて行った三次元 T 字管内流れの計算結果 (5) にも見られ，定性的に妥当な結果であると考えられる．また，各圧力差における粒子の軌跡を Fig. 9 に示す．Fig. 9(a) より，初期位置□から動き始めた粒子は分岐部に到達し，Outlet 2 へと

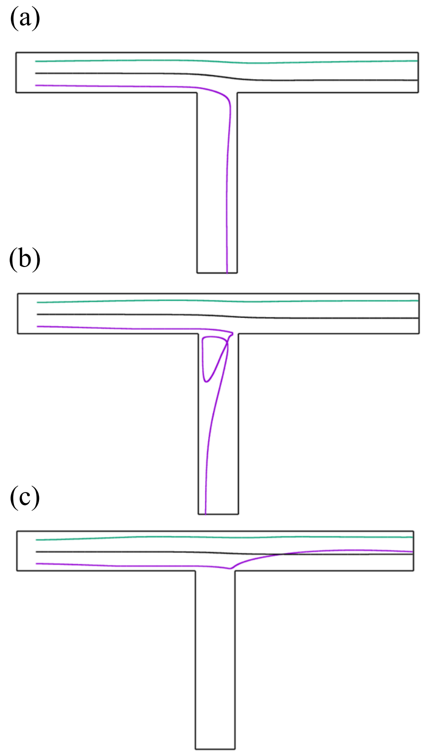

Fig. 12　Trajectories of a single particle from various initial positions in the case of $\Delta P = 0$ viewed from $z = +\infty$: (a) $Re = 100$; (b) $Re = 300$; (c) $Re = 500$.

移動していることがわかる．また，$\Delta P = 1.982$ とした時の粒子の軌跡（Fig. 9(b)）では，初期位置○から動き始めた粒子は分岐部を通過した後に，壁に接触して Outlet 1 へ移動していることがわかる．さらに，$\Delta P = 2.973$ とした時の粒子の軌跡（Fig. 9(c)）では，初期位置○および□から動き始めた粒子は，分岐部到達後に Outlet 2 へと移動していることがわかる．一方，初期位置△から動き始めた粒子は，分岐部を通過した後に Outlet 1 側の渦にトラップされる特徴的な現象が得られた．

種々の初期位置と両出口間の圧力差に対する粒子の到達位置の変化を Fig. 10 に示す．この図より，ΔP を少し大きくすることで，$y' = 0.5H$ に配置した粒子が Outlet 2 に移動するようになることがわかる．さらに ΔP を大きくすると，Outlet 2 に移動する初期位置の範囲が広がり，管の上部に配置した粒子でも Outlet 2 に移動するようになることがわかる．なお，$\Delta P = 2.973$ および $\Delta P = 3.468$ の場合には，管の上部に配置した粒子が分岐部に到達した後，Outlet 1 側の渦にトラップされる結果となった．

4.4. レイノルズ数の影響

T 字管を流れる粒子の挙動に対するレイノルズ数の影響を調べるため，粒子の初期位置を 4.3 節の場合と同一とし，$\Delta P = 0$ で Re を 100 から 500 まで変化させて計算を行った．各 Re に対する初期の流線を Fig. 11 に示す．この図より，Re が増加するにつれて Outlet 2 側の渦は徐々に大きくなることがわかる．また，各 Re における粒子の軌跡を Fig. 12 に示す．$Re = 300$ とした時の粒子の軌跡（Fig. 12(b)）では，初

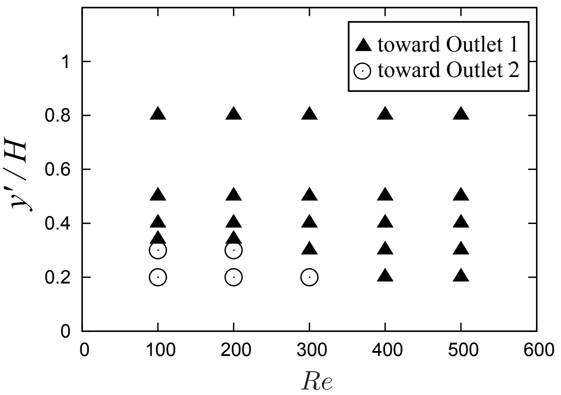

Fig. 13　Calculated results classified by the outlet which the particle reaches for various Reynolds numbers Re and initial positions y'/H in the case of $\Delta P = 0$.

期位置□から動き始めた粒子は分岐部へ到達した時に，壁に接触して Outlet 2 側の渦にトラップされた後に，Outlet 2 へ移動する結果となった．さらに，$Re = 500$ とした時の粒子の軌跡（Fig. 12(c)）では，初期位置によらず，粒子は分岐部を通過して Outlet 1 へと移動していることがわかる．

種々の Re に対する粒子の到達位置の変化を Fig. 13 に示す．この図より，Re を大きくすることで，管の下部に配置した粒子が Outlet 1 に移動するようになることがわかる．しかしながら，4.3 節で述べた ΔP の影響と比較して，粒子の挙動が Re に影響される範囲は小さいことがわかる．

5. おわりに

本論文では，まず，吉野らが提案した埋め込み境界–改良 Lattice Kinetic Scheme[9] を三次元に拡張した．この手法の妥当性を確認するために，三次元球の自由落下の数値計算を行ったところ，本計算結果は ten Cate et al. の実験結果 [14] と良く一致した．

次に，この手法を用いて三次元 T 字管内の単一固体粒子の輸送シミュレーションを行い，粒子の初期位置，出口間の圧力差，およびレイノルズ数 Re が粒子の挙動に与える影響を調べた．得られた結果より，粒子の初期位置の z' 座標が粒子の挙動に与える影響は，y' 座標に比べて小さいことがわかった．また，Re が粒子の挙動に与える影響の範囲は，無次元圧力差 ΔP に比べて小さいこともわかった．なお，$Re = 100$ の時，粒子の初期位置と無次元圧力差のある条件下では，粒子が渦にトラップされた．この挙動は，二次元解析ではどの初期位置，無次元圧力差でも見られなかった特徴的な現象である．実際に，同条件で回転を考慮しない三次元計算を行った場合でも，同様のトラップ現象が見られたことから，二次元解析にはなかった三次的な流れ場による影響が大きいと考えられる．

今後の課題としては，複数個の粒子の輸送解析や，赤血球などの柔軟性のある変形物体の挙動解析を行うことが挙げられる．

謝　辞

本研究の一部は，JSPS 科研費 JP26420105 の助成を受けたものです．ここに記して謝意を表します．

参考文献

(1) S. T. T. Ollila, C. Denniston and T. Ala-Nissila: One- and Two-Particle Dynamics in Microfluidic T-Junctions, Phys. Rev. E, **87** (2013), 050302(R) (5pp).

(2) D. Vigolo, I. M. Griffiths, S. Radl and H. A. Stone: An Experimental and Theoretical Investigation of Particle–Wall Impacts in a T-Junction, J. Fluid Mech., **727** (2013), pp. 236–255.

(3) D. Vigolo, S. Radl and H. A. Stone: Unexpected Trapping of Particles at a T Junction, Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A., **111** (2014), pp. 4770–4775.

(4) M. Trofa, M. M. Villone, G. D’Avino, M. A. Hulsen, P. A. Netti and P. L. Maffettone：Numerical Simulations of the Separation of Elastic Particles in a T-Shaped Bifurcation, J. Non-Newtonian Fluid Mech., **233** (2016), pp.75–84.

(5) 吉野正人，天野慎也，鈴木康祐：二相系格子ボルツマン法による T 字型分岐部を流れる粒子の挙動解析，計算数理工学論文集, **14** (2014), pp. 107–112.

(6) T. Inamuro, R. Tomita and F. Ogino: Lattice Boltzmann Simulations of Drop Deformation and Breakup in Shear Flows, Int. J. Mod. Phys. B, **17** (2003), pp. 21–26.

(7) C. S. Peskin：Flow Patterns around Heart Valves: A Numerical Method, J. Comput. Phys., **10** (1972), pp. 252–271.

(8) T. Inamuro : Lattice Boltzmann Methods for Moving Boundary Flows, Fluid Dyn. Res., **44** (2012), 024001 (21pp).

(9) 吉野正人，白涵夫，鈴木康祐：埋め込み境界–改良 Lattice Kinetic Scheme を用いた T 字管内における固体粒子を含む流れの数値計算，計算数理工学論文集, **16** (2016), pp. 31–36.

(10) T. Inamuro：A Lattice Kinetic Scheme for Incompressible Viscous Flows with Heat Transfer, Philos. Trans. R. Soc. London Ser. A, **360** (2002), pp. 477–484.

(11) K. Suzuki and T. Inamuro : An Improved Lattice Kinetic Scheme for Incompressible Viscous Fluid Flows, Int. J. Mod. Phys. C, **25** (2014), 1340017 (9pp).

(12) K. Suzuki and T. Inamuro：Effect of Internal Mass in the Simulation of a Moving Body by the Immersed Boundary Method, Comput. Fluids, **49** (2011), pp. 173–187.

(13) Z-G. Feng and E. E. Michaelides : *Proteus*: A Direct Forcing Method in the Simulations of Particulate Flows, J. Comput. Phys., **202** (2005), pp. 20–51.

(14) A. ten Cate, C. H. Nieuwstad, J. J. Derksen and H. E. A. Van den Akker: Particle Imaging Velocimetry Experiments and Lattice-Boltzmann Simulations on a Single Sphere Settling under Gravity, Phys. Fluids, **14** (2002), pp. 4012–4025.