

境界要素法による単一液滴の物質移動解析

Computations of Mass Transfer from a Single Drop
by Boundary Element Method

秋元梢, 本間俊司, 古閑二郎, 松本史朗

Kozue AKIMOTO, Shunji HOMMA, Jiro KOGA and Shiro MATSUMOTO

Unsteady mass transfer from a two-dimensional drop is solved numerically with boundary element method. The domain is decomposed into two sub-domains for cylindrical drop and surrounding fluid, and boundary elements are arranged between the sub-domains. The system equation for boundary elements is derived by a direct method and by a finite difference approximation for time derivative. The solutions are independent of the number of elements on the interface of the drop and the external boundary of the domain. The number of meshes inside the domain, on the other hand, affects the numerical solutions. It is necessary for good approximation to select appropriate resolution of the computational domain and the time step.

Keywords: boundary element method, drop, mass transfer

1.はじめに

単一液滴の物質移動は、液液抽出などの分離操作において基礎となる重要な現象である。これまで、球状で変形しない液滴を仮定した解析は多いが¹⁾、変形を伴う非定常運動のもとで物質移動を解析した研究例は少ない。

変形を伴う液滴の非定常運動の解析においては、界面運動の式を数値的に解く直接シミュレーションが行われるようになってきた²⁾。物質移動に関する支配方程式を流れの式と同時に解けば、原理的には非定常の濃度分布も同時に得られる。しかしながら、物質移動における特性長さのスケールと流れのそれとは一般に大きく異なり、液滴の非定常運動と物質移動を同時に精度良く解析することは難しい。物質移動速度を精度よ

く求めるためには、非常に高い解像度を必要とする。例えば、二酸化炭素が水に吸収される場合、濃度の計算に必要な解像度は、流れの計算に必要な解像度の少なくとも千倍高くする必要があるとされている³⁾。

我々は、界面運動および物質移動を、同時に精度良く扱うことのできる数値解析手法を開発するため、液滴の変形を伴う流れの解析に、有限差分/ Front-Tracking法⁴⁾を、物質移動の解析に境界要素法をそれぞれ用いたハイブリット型の計算コードの開発を目指している。

本研究では、開発の初期段階として二次元非定常拡散方程式を境界要素法で離散化し、その近似解と液滴周りの要素の分割数、外部境界の要素の分割数、および領域内部の解像度との関係を調査する。

2.定式化

2.1 境界要素法による離散化

Figure 1に示すように、境界 Γ で囲まれた閉領域 Ω 内の任意の点 $p(x, y)$ において濃度分布 $u(p, t)$ が二次元拡散

埼玉大学 工学部 応用化学科

Department of Applied Chemistry, Faculty of
Engineering, Saitama University, 255 Shimo-Okubo,
Sakura-ku, Saitama, 338-8570, Japan

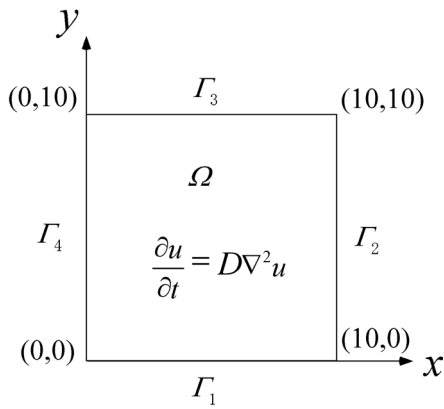


Fig. 1 Computational domain.

方程式

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D \nabla^2 u(p, t) \quad p \in \Omega, \quad (1)$$

$$u(p, t) = \bar{u} \quad p \in \Gamma_1, \Gamma_3, \quad (2)$$

$$q(p, t) = \bar{q} \quad p \in \Gamma_2, \Gamma_4 \quad (3)$$

によって記述される系を考える。ここに D は拡散係数、 q は拡散流束で $q = \partial u / \partial \mathbf{n}$ で定義される。 \mathbf{n} は Γ の外向き法線ベクトルである。 \bar{u} は Γ_1, Γ_3 上で、 \bar{q} は Γ_2, Γ_4 上でそれぞれ規定される既知関数である。式(1)の時間微分が、十分に小さい時間ステップ Δt について、次式のように差分近似できると仮定すると、

$$\nabla^2 u(p, t + \Delta t) - \frac{1}{D \Delta t} u(p, t + \Delta t) + \frac{1}{D \Delta t} u(p, t) = 0. \quad (4)$$

式(4)に重み関数 $U^*(\xi, p, t)$ をかけて領域 Ω で積分すると

$$\int_{\Omega} A U^*(\xi, p, \Delta t) d\Omega(p) = 0. \quad (5)$$

ここに ξ は観測点の位置を表す。また、 A は式(4)の左辺である。部分積分を利用し、さらに、 U^* が式(4)に対する基本解、

$$D \nabla^2 U^*(\xi, p, \Delta t) - \frac{1}{\Delta t} U^*(\xi, p, \Delta t) = -\delta(\xi, p) \quad (6)$$

を満足する事を考慮すれば、式(5)は

$$\begin{aligned} c(\xi) u(\xi, t + \Delta t) &= D \int_{\Gamma} u(p, t + \Delta t) Q^*(\xi, p, \Delta t) d\Gamma(p) \\ &\quad - D \int_{\Gamma} q(p, t + \Delta t) U^*(\xi, p, \Delta t) d\Gamma(p) \\ &\quad + \frac{1}{\Delta t} \int_{\Omega} u(p, t) U^*(\xi, p, \Delta t) d\Omega(p). \quad (7) \end{aligned}$$

ここに、 U^* は式(6)より

$$U^*(\xi, p, \Delta t) = \frac{1}{2\pi D} K_0 \left[\left(\frac{1}{D \Delta t} \right)^{1/2} r \right] \quad (8)$$

と導かれる。 K_0 は0次の第2種変形Bessel関数で、 r は ξ と p との距離を表している。また、 $Q^* = \delta U^* / \delta \mathbf{n}$ である。係数 $c(\xi)$ は ξ の位置によって

$$c(\xi) = \begin{cases} 1/2 & \xi \in \Gamma \\ 1 & \xi \in \Omega \\ 0 & \xi \notin \Gamma \end{cases}$$

が用いられる^{5,6)}。

式(7)を Γ 上で N 個に分割した要素ごとに離散化すると、時刻 $t + \Delta t$ における Γ 上の値を未知数とする方程式が以下のように求められる。

$$\frac{1}{2} u_i = D \sum_{j=1}^N H_{ij} u_j - D \sum_{j=1}^N G_{ij} q_j + F_i \quad (9)$$

ここに i は観測点 x の要素番号、 j は積分点の要素番号である。また

$$G_{ij} = \int_{\Gamma_j} U^*(\xi_i, p, \Delta t) d\Gamma_j, \quad (10)$$

$$H_{ij} = \int_{\Gamma_j} Q^*(\xi_i, p, \Delta t) d\Gamma_j \quad (11)$$

である。式(9)の F_i は時刻 t における Ω の濃度の影響を表し、 $u(p, t)$ と重み関数 U^* の積の領域積分で表される。

$$\begin{aligned} F_i &= \frac{1}{\Delta t} \int_{\Omega} u(p, t) U^*(\xi_i, p, \Delta t) d\Omega(p) \\ &= \frac{1}{\Delta t} \sum_{k=1}^M u(p_k, t) U^*(\xi_i, p_k, \Delta t) A_k \quad (12) \end{aligned}$$

ここに M は Ω の分割数であり、 A_k は領域 k の面積を表す。

2.2 領域分割

液滴内部と外部流体では物性値が異なる。ゆえに、液滴と外部流体の界面において計算領域の分割が必要である。本研究では、外部流体を境界 Γ_{A1}, Γ_{A2} で囲まれた領域 Ω_A 、液滴内部を境界 Γ_B に囲まれた領域 Ω_B として全計算領域を分割した (Fig. 2)。2つの領域は境界 Γ_{A2} および Γ_B で接し、これらを内部境界と呼ぶ。

部分領域 Ω_A および Ω_B においてそれぞれ境界要素方程式が成り立つ。これをマトリックス形式で表すと Ω_A に関しては、

$$\begin{bmatrix} \mathbf{H}^{A1} & \mathbf{H}^{A2} \\ \mathbf{0} & \mathbf{H}^B \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{U}^{A1} \\ \mathbf{U}^{A2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{G}^{A1} & \mathbf{G}^{A2} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{Q}^{A1} \\ \mathbf{Q}^{A2} \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \mathbf{F}^{A1} \\ \mathbf{F}^{A2} \end{bmatrix}. \quad (13)$$

一方、 Ω_B に関しては、

$$\mathbf{H}^B \mathbf{U}^B = \mathbf{G}^B \mathbf{Q}^B - \mathbf{F}^B. \quad (14)$$

マトリックスの要素は式(9)–(12)より求めた。 Ω_A および Ω_B の内部境界面では u が連続（適合条件）、 q が平衡（平衡条件）である。内部境界面の適合条件は次のように表される。

$$\mathbf{U}^{A2} = \mathbf{U}^B = \mathbf{U}^I. \quad (15)$$

ここに \mathbf{U}^I は内部境界面における濃度を表す。また、平衡条件は Ω_A および Ω_B における拡散係数をそれぞれ D_A および D_B とおくと以下の式で表される⁷⁾。

$$\mathbf{Q}^{A2} = -\frac{D_A}{D_B} \mathbf{Q}^B = \mathbf{Q}^I. \quad (16)$$

ここに \mathbf{Q}^I は内部境界面における拡散流束を表す。

式(15)、(16)を式(13)、(14)に結合条件として代入して整理すると、

$$\begin{bmatrix} \mathbf{H}^{A1} & \mathbf{H}^{A2} & -\mathbf{G}^{A2} \\ \mathbf{0} & \mathbf{H}^B & \frac{D_B}{D_A} \mathbf{G}^B \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{U}^{A1} \\ \mathbf{U}^I \\ \mathbf{Q}^I \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{G}^{A1} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{0} \\ \mathbf{Q}^{A1} \\ \mathbf{0} \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \mathbf{F}^{A1} \\ \mathbf{F}^{A2} \\ \mathbf{F}^B \end{bmatrix} \quad (17)$$

となる。

3. 結果と考察

境界条件を Γ_{A1} 上で $u=0$ 、初期条件を $u(p, 0)=0$ ($p \in \Omega_A$)、 $u(p, 0)=100$ ($p \in \Omega_B$)として解析を行った。時間刻み Δt は0.1とした。また、拡散係数は $D_A=D_B=10$ とした。

Figure 3に $p(5, y)$ における y 方向の濃度分布の時間変化を示す。図中の矢印の方向は時間が増加する方向である。時間とともに、濃度が0に収束している。外部境界の u を0に固定しているのでこの収束値は物理的に正しい。

Figure 4に $t=2.0$ における濃度分布を示す。液滴中心から外部流体へと物質が拡散している様子がわかる。

Figure 5に液滴中心、すなわち Ω_B 内の点(5, 5)における濃度の時間変化を Γ_{A2} および Γ_B （液滴周り）の要素分割数 ND 毎に示す。図より液滴周りの要素分割数は濃度

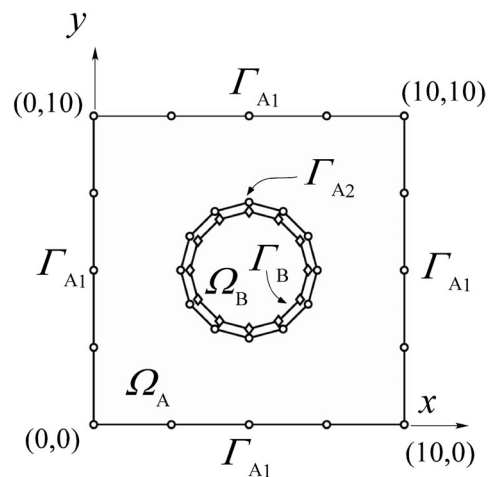


Fig. 2 Domain decomposition and boundary elements.

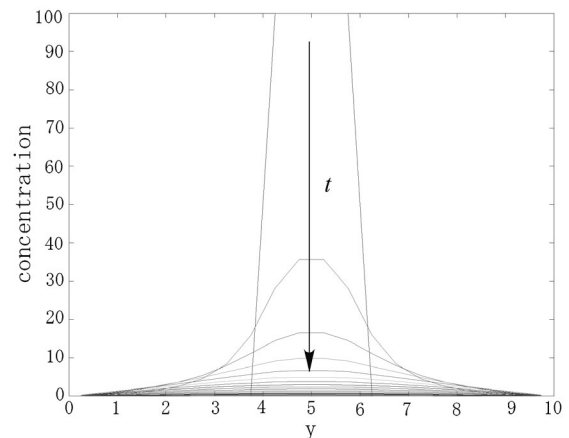


Fig.3 Concentration profiles at $p(5, y)$.

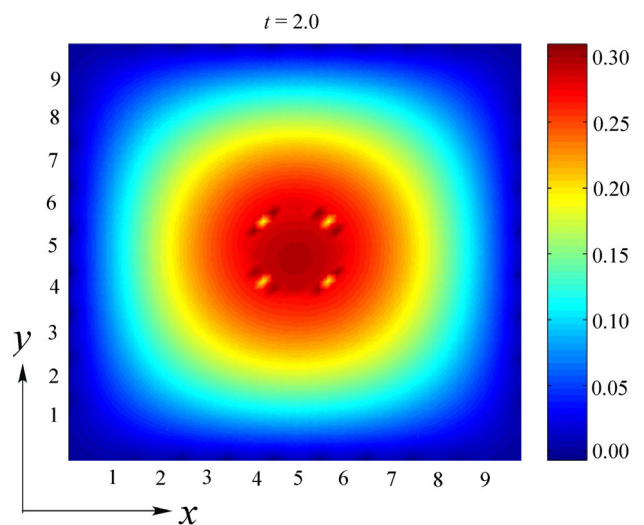


Fig.4 Concentration distribution at $t=2.0$.

の時間変化に影響を与えないことがわかる。

Figure 6に点(5, 5)における濃度の時間変化を Γ_{A1} (外部境界) の要素分割数 N 毎に示す。図より N を変化させても結果に影響しないことがわかる。以上より、要素の分割数は数値解に影響を与えないことがわかった。

Figure 7に領域の分割数 M を変化させた時の点(5, 5)における濃度変化を示す。図より、濃度の時間変化は計算領域の解像度によって変化することがわかる。 $M=10 \times 10$ の時、時刻 $t=0.1$ で濃度が0へ収束しているのは、内点の解像度が不足しているためと考えられる。これは $M=20 \times 20$ へと解像度を上げることで解決した。一方、解像度が高い場合($M=30 \times 30$, $M=40 \times 40$, $M=50 \times 50$)、濃度のアンダーシュートがみられる。これは、解像度を上げることによって、拡散流束の見積もりが大きくなったためと考えられる。

式(8)のBessel関数は、引数が0に近づくと無限大に発散する。領域の分割数を上げることによって、式(8)の r が小さくなり、 U^* は非常に大きくなる。そのため、式(17)の右辺第二項が大きくなり拡散流束も大きくなる。これを解決するためには Δt を小さくし、式(8)のBessel関数の引数を大きくすればよいが、同時に式(12)の F_i が大きくなるため調整が必要である。

精度良い解を得るためには、式(8)のBessel関数の引数 $r/(D\Delta t)^{1/2}$ を4以上または0に非常に近くする必要がありとの報告がある⁷⁾。解像度 $M = 20 \times 20$ においては、最小の $r/(D\Delta t)^{1/2}$ が0.5で、解像度が低いため、 $r/(D\Delta t)^{1/2}$ が4以上になる点も多い。一方、 $M = 50 \times 50$ では引数の最小値が0.2よりも小さく、かつ解像度が高いため、引数が4に満たない点が多いと考えられる。

以上より境界要素法で非定常拡散問題を解く場合、Bessel 関数の引数に注意し、適切な解像度と時間刻みを選定する必要があることが示唆された。

4. 結論

単一液滴の界面運動および物質移動の同時高精度解析を目指した研究の一環として、二次元非定常拡散問題の境界要素法による解析を試みた。境界要素法による離散化においては、非定常項に差分近似を適用する

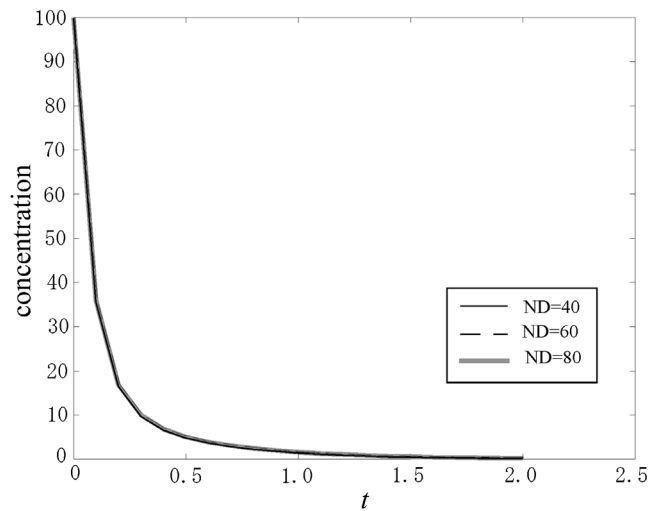


Fig.5 Time dependent concentrations at $p(5, 5)$ with the number of elements in Γ_{A2} and Γ_B .

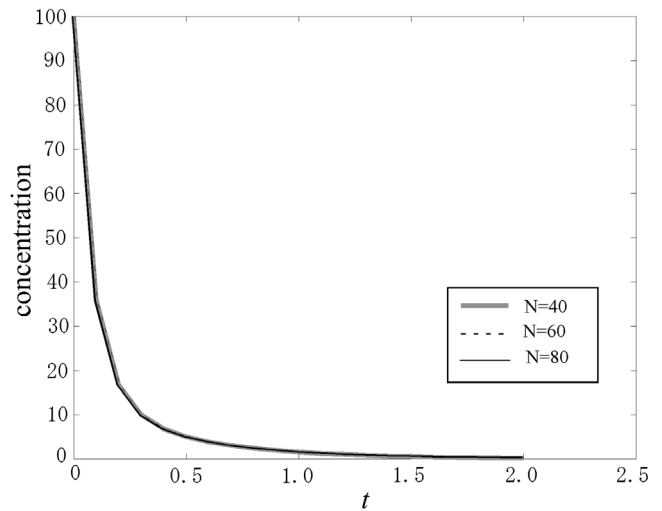


Fig.6 Time dependent concentrations at $p(5,5)$ with the number of elements in Γ_{A1} .

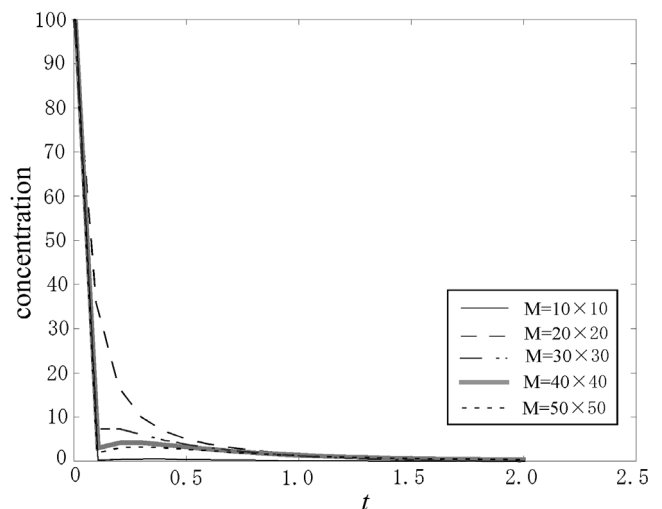


Fig.7 Time dependent concentrations at $p(5,5)$ with the number of meshes in Ω_A .

方法で定式化した。試計算の結果、液滴周りの要素の分割数および外部境界の要素の分割数は、数値解に影響を与えなかった。一方、領域内部の解像度が数値解に影響を与えることがわかり、基本解の形式が原因であることを明らかにした。境界要素法を用いて非定常物質移動現象を解析するためには、拡散係数に適した解像度および時間刻みを選定する必要があり、さらなる検討が必要であることがわかった。

謝辞

本研究は、平成 15 年度埼玉大学教育研究推進費（学長裁量経費）およびカシオ科学振興財団（平成 16 年度研究助成）から支援を得て行われた。

参考文献

- 1) S. S. Sadhal, P. S. Ayyaswamy, J.N. Chung, *Transport Phenomena with Drops and Bubbles*, Springer-Verlag New York, 1997.
- 2) J. Han, G. Tryggvason, Secondary breakup of axisymmetric liquid drops. I. Acceleration by constant body force, *Physics of fluids*, Vol. 11, No. 12, pp. 3656-3667, 1995.
- 3) R. Jung, T. Sato, A numerical solver for high Schmidt number problems about droplet by using moving unstructured meshes, *Proceedings of ASME Fluid Engineering Division Summer Meeting (FEDSM2001)*, 18194, 2001.
- 4) S. O. Unverdi, G. Tryggvason, A Front Tracking Method for Viscous, Incompressible, Multi-Fluid Flows, *J. Comput. Physics*, Vol. 100, pp. 25-37, 1992.
- 5) C. A. Brebbia, J. C. F. Telles, L. C. Wrobel (田中正隆 訳), 境界要素解析—理論と応用—, 丸善株式会社, 1984.
- 6) J. T. Katsikadelis (田中正隆、荒井雄理 訳), 境界要素法—基本と応用—, 朝倉書店, 2004.
- 7) 榎園正人, 境界要素解析, 培風館, 1986.