

格子ボルツマン法を用いた多孔質体中のガス拡散と密度流に関する研究

Lattice Boltzmann Simulation of Gas Diffusion and Density Driven Flow in Porous Media

谷史郎* 濱本昌一郎** 常田岳志** 関勝寿** 溝口勝** 宮崎毅**

TANI Shiro HAMAMOTO Shoichiro TOKIDA Takeshi SEKI Katsutoshi MIZOGUCHI Masaru MIYAZAKI Tsuyoshi

1. はじめに

近年、土壌内の流体移動現象を数値シミュレートする手法として格子ボルツマン法(Lattice Boltzmann Method:LBM)が注目されている。LBMは、流れ場を格子状に区切り、各格子点上に流体と仮定した密度分布を持った粒子を配置し、格子上を移動する粒子同士が衝突を繰り返しつつ密度分布を再配分することで流体の移動をシミュレートする方法である。一方、揮発性有機化合物(Volatile Organic Compound:VOC)による土壌汚染が近年顕在化しており、土壌中におけるVOCガスの挙動を把握することが求められている。一般にVOCは空気よりも比重が大きく常温常圧で気体として存在し、土壌中では重力の影響で密度流が発生することが知られている。濱本¹⁾は、立川ロームと豊浦砂を用いたカラム実験により、密度流の影響が両試料において異なることを実験的に明らかにした(Fig.1)。本研究では、LBMが多孔質体中のガスの拡散と密度流へ適用できるかどうか検証し、土壌の間隙構造が拡散および密度流に与える影響について考察した。

2. 方法

(1) 拡散係数の測定

$y=0, 32$ が障害物の壁となっている空洞空間内(サイズ $(x,y,z)=(12,32,12)$)の $(0 < y < 16)$ に空気、 $(16 < y < 32)$ にVOCガスを、気圧101325 [Pa]、温度293.15 [K]で配置し、LBM上で拡散現象を起こした(Fig.2)。数値実験中に、中心の濃度勾配とVOCのフラックスを測定し、Fickの法則から大気中のAir-VOC拡散係数

を求めた。ここで格子間隔を $L=1.2 \times 10^{-7}$ [m]、タイムステップを $\Delta t=3.75 \times 10^{-10}$ [s]とした。

(2) 拡散および密度流の再現(Fig.3)

濱本¹⁾の実験を再現するため、障害物で満たされた空間内(サイズ $(x,y,z)=(12,32,12)$)に、気相率が60%になるようにランダムに間隙を配置した。試料は、間隙形が2格子間隔と3格子間隔の立方体の二種類を用意し、おのおの重力の有無の計4条件で数値実験を行った。初期には間隙に空気粒子を配置し、数値実験開始後、 $y=1$ にVOC粒子(仮想VOCガスとみなす)を、 $y=31$ に空気粒子を、毎タイムステップ配置した。これはそれぞれ、飽和VOCガスを満たしたチャンバとの接続条件と大気への開放条件である。また200タイムステップごとに、 y 方向(32格子点)において仮想VOCガス相対密度を記録した。

(3) 間隙サイズと密度流フラックス

間隙サイズが密度流に与える影響を検討するため、一辺が1格子(サイズ1)または2格子(サイズ2)間隔の、二種類の立方体の間隙を、Table1のように混合した試料を用意した(Fig.4)。それぞれの試料に対して(2)と同じ実験を重力ありの状態で行い、定常状態で流出端($y=31$)におけるVOCフラックスを記録した。

3. 結果と考察

(1) 拡散係数の測定

LBMによるAir-VOC相互拡散係数は、 7.6×10^{-6} [$\text{m}^2 \text{s}^{-1}$]と推定された。この値は、Fuller et al.,²⁾の推定値 7.7×10^{-6} [$\text{m}^2 \text{s}^{-1}$]と良く一致した。これは、LBMが大気中のガス拡散を再現することに有効であることを示している。

* 東京大学農学部 Faculty of Agriculture, The University of Tokyo

** 東京大学大学院農学生命科学研究科 Graduate School of Agricultural and Life Science, The Univ. of Tokyo

キーワード：格子ボルツマン法、拡散、密度流、多孔質体、VOC

(2) 拡散および密度流の再現(Fig.5)

重力をかけない条件(左図)では時間によって仮想 VOC ガス相対密度が上昇し、定常状態ではほぼ直線状となった。間隙の大きさによる明瞭な差は見られなかった。重力をかけた条件(右図)でも同様に時間によって相対密度は上昇したが、重力の影響による密度流のために、重力のない場合に比べ相対密度が上昇した。さらに間隙サイズの大きい試料(図中点線)ではより大きな相対密度の上昇が見られた。これは間隙構造の相違は拡散には影響を与えないが、密度流には影響を与えることを示す。この結果は濱本¹⁾と定性的に一致し、LBM がガスの拡散と密度流の再現に有効であることを示唆する。

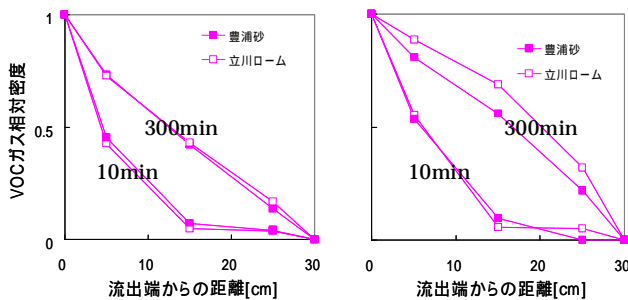


Fig.1 相対密度分布(濱本¹⁾)左:水平 右:鉛直下向き

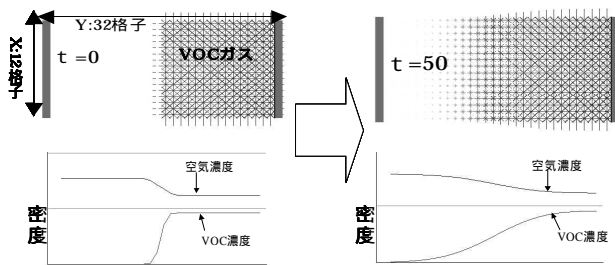


Fig.2 拡散係数測定の様子(z=0断面)

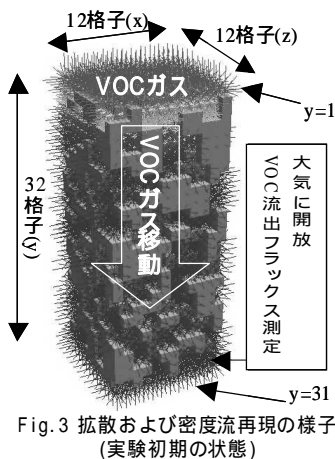


Fig.3 拡散および密度流再現の様子(実験初期の状態)

(3) 間隙サイズと密度流フラックス(Fig.6)

間隙が大きくなるにつれて二次関数的に、流出端のVOCフラックスが大きくなった。これは、間隙径が大きいほどより大きな密度流が起こり易いことを意味する。

4. おわりに

LBM を多孔質体のガス移動に適用したところ、以下の点が明らかになった。(1) Air-VOC 相互拡散係数が数値実験で容易に算出できる。(2) 拡散と密度流を定性的に再現できる。(3) 多孔質体の大きな間隙の占める割合が大きいほど大きな密度流が生じる。

参考文献 1) 濱本(2005)第47回土壌物理学講演要旨集,p20-21
2) Fuller et al., (1996): Ind. Eng. Chem 58, p.19-27

試料	間隙サイズ	
	1	2
A	100	0
B	75	25
C	50	50
D	25	75
E	0	100

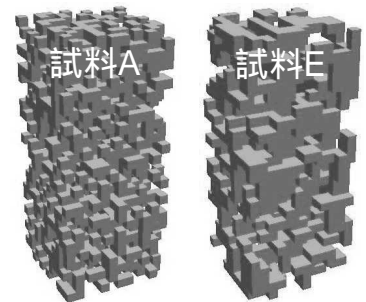


Fig.4 異なる間隙径の試料の図

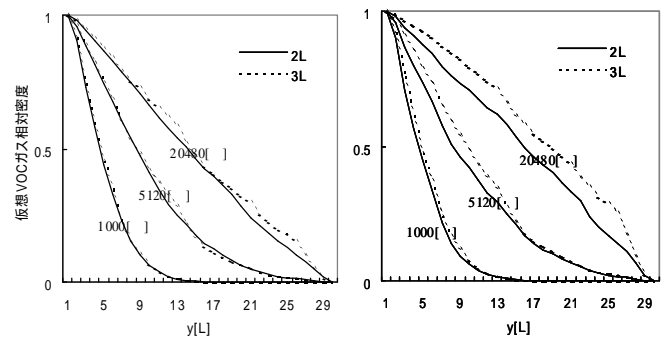


Fig.5 LBM による拡散および密度流の数値実験の相対密度分布
左:重力なし 右:重力あり / 2L,3L: 立方体間隙の一片の長さ

L: 一格子間隔 Δ: タイムステップ

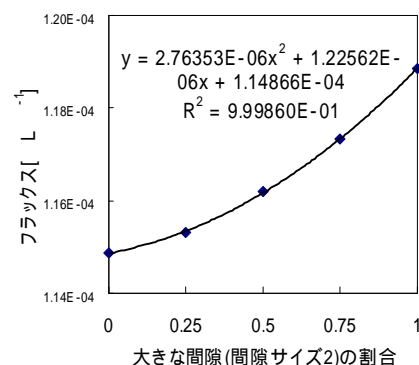


Fig.6 間隙サイズとフラックスの関係