

格子ボルツマン法を用いた過飽和溶液中での結晶成長シミュレーション

Numerical simulation of crystal growth in supersaturated solution by using Lattice Boltzmann Method

池田 紘幸 [1]; 三善 孝之 [2]; 尾西 恭亮 [3]; 山田 泰広 [4]; 松岡 俊文 [5]

Hiroyuki Ikeda[1]; Takayuki Miyoshi[2]; Kyosuke Onishi[3]; Yasuhiro Yamada[4]; Toshifumi Matsuoka[5]

[1] 京大・工・地球工; [2] 京大・工・社会基盤; [3] 京大・工・社会基盤; [4] 京大・工・社会基盤; [5] 京大・工・社会基盤
[1] Global engineering, Kyoto Univ; [2] Civ. Earth Res. Eng, Kyoto Univ.; [3] Civil & Earth Res. Eng., Kyoto Univ.; [4] Civ. Earth Res. Eng., Kyoto Univ.; [5] Kyoto Univ

1. 研究の背景と目的

新エネルギーとして注目されるメタンハイドレートは日本近海に多量に存在するが、まだエネルギー資源として利用するには多くの技術的・経済的な課題が多い。その一つとして生産時の貯留層崩壊を抑制した融解制御手法の確立があげられる。本研究では格子ボルツマン法を用いて流体流動下における結晶成長過程を再現しメタンハイドレートの生成過程や採鉱時の分解挙動を解明することを最終的な目的とする。

2. 格子ボルツマン法と結晶成長について

本研究では流体流動と溶質流動に関して格子ボルツマン法を適用した。格子ボルツマン法とは、流体を衝突と移動を繰り返す多数の粒子の集合体とみなし粒子の動きを計算することによって流体の運動を求める数値計算法の一つである。境界条件は固体液体の境界面での一次近似反応モデルを用いた。結晶成長は、タイムステップごとに結晶核の質量を増加させ、それらが初期質量の2倍を越えたときに周りの格子点のどれかに新しい結晶核を発生させることでモデル化した。なお本研究では結晶形状を支配するパラメータとしてダムケラー数(Da)を採用した。

3. シミュレーションの結果

ダムケラー数の増加により結晶が球状からフラクタル状に変化していくことがわかった。

次に解析領域の左側から右側へ流体を流入させたときのシミュレーションを行った。ダムケラー数が2.0の場合は流体流動による形状変化がほとんど見られないが、ダムケラー数が600の場合は流入側へ結晶が成長していくのが見られた。これは、流体流動により流入側の濃度が高まり、ダムケラー数が大きいと結晶成長速度が大きくなるためである。

4. まとめ

本研究において、ダムケラー数を変化させることによって結晶の形状が変化することおよび、流体流動が結晶の形状に影響を与えることがわかった。