

粒子状物質の有害性評価のための気中粒子操作分析技術の応用

慶應義塾大学理工学部応用化学科

教授 奥田 知明

特任助教 ビンモハマドノル ムハンマドアイマン

1. はじめに

大気中を浮遊する微小な粒子（エアロゾル）は健康影響、視程障害、気候変動などの環境影響がある。呼吸により体内に取り込まれたエアロゾルは、粒径の小さいものほど体の奥深くまで入り込みやすく、特に PM_{2.5}（空気動学的 50% 分粒径が 2.5 μm 以下の大気粒子）に代表される微小粒子状物質は、気管支や肺胞までたどり着き、喘息や肺がんなどになるリスクを高めている。粒子状物質の有害性を評価するためには、粒子状物質そのものを用いた細胞・動物曝露実験を行うことが重要である。実環境中の粒子状物質を分析するために、一般的にはフィルターを用いてサンプリングが行われるが、その方法では曝露実験に必要な量の粒子状物質をフィルターから取り出すことが困難であった。そのため、フィルターに捕集された粒子状物質から水または有機溶媒により抽出された成分を曝露している例も多く見られるが、粒子中の成分のみを曝露することは、これらの成分を含んだ粒子そのものが曝露されているという現実の系を再現できていない、という本質的な問題がある。そこで当研究室では、曝露実験に供することができる比較的大量（数十 mg～数百 mg のオーダー）の粒子状物質をフィルターを用いずに採取することができる、インパクターとサイクロンを組み合わせた大流量粒子サンプラーを開発した。

2022 年度は、当研究室で開発された小型可搬型開閉型サイクロンを天野工業技術研究所でも作製し、さらに必要に応じて改良を加えることを可能にした。さらに、得られた大気粒子の化学・生物学的分析手法を概ね確立した。2023 年度は、共同製作した小型可搬型開閉型サイクロン装置により得られた粉体の化学分析のほか、装置のスケールアップを実施した。さらに、小型開閉型サイクロン内部の CFD 解析を実施した。これをふまえて 2024 年度では、以下の項目につき研究を進めた。

1. 中型 (540 L/min) 開閉型サイクロン装置の共同製作および得られた粉体の化学分析
2. 中型および小型開閉型サイクロン内部の流体シミュレーション
3. ボルテックスファインダー長さを変化させた中型開閉型サイクロン内部の流体シミュレーション
4. 中型開閉型サイクロン内部の流体シミュレーションにおける計算モデルの違いによる結果の比較

2. 研究成果

2.1. 中型 (540 L/min) 開閉型サイクロン装置の共同製作および得られた粉体の化学分析

慶應大奥田研にて開発実用化済の小型可搬型開閉型サイクロン装置 (90 L/min) の製作図面一式を天野工技研に提供し、その図面に基づき天野工技研にてスケールアップを実施し、540 L/min を想定して中型開閉型サイクロン装置の製作を行った (Figs. 1, 2)。複数回の試運転を実施し、得られた粉体を回収して化学成分分析を行った。2024/11/19～2025/3/11 の期間に 3 週間ずつ 4 回のサンプリングを実施し、約 10～50 mg の粉体を得た。

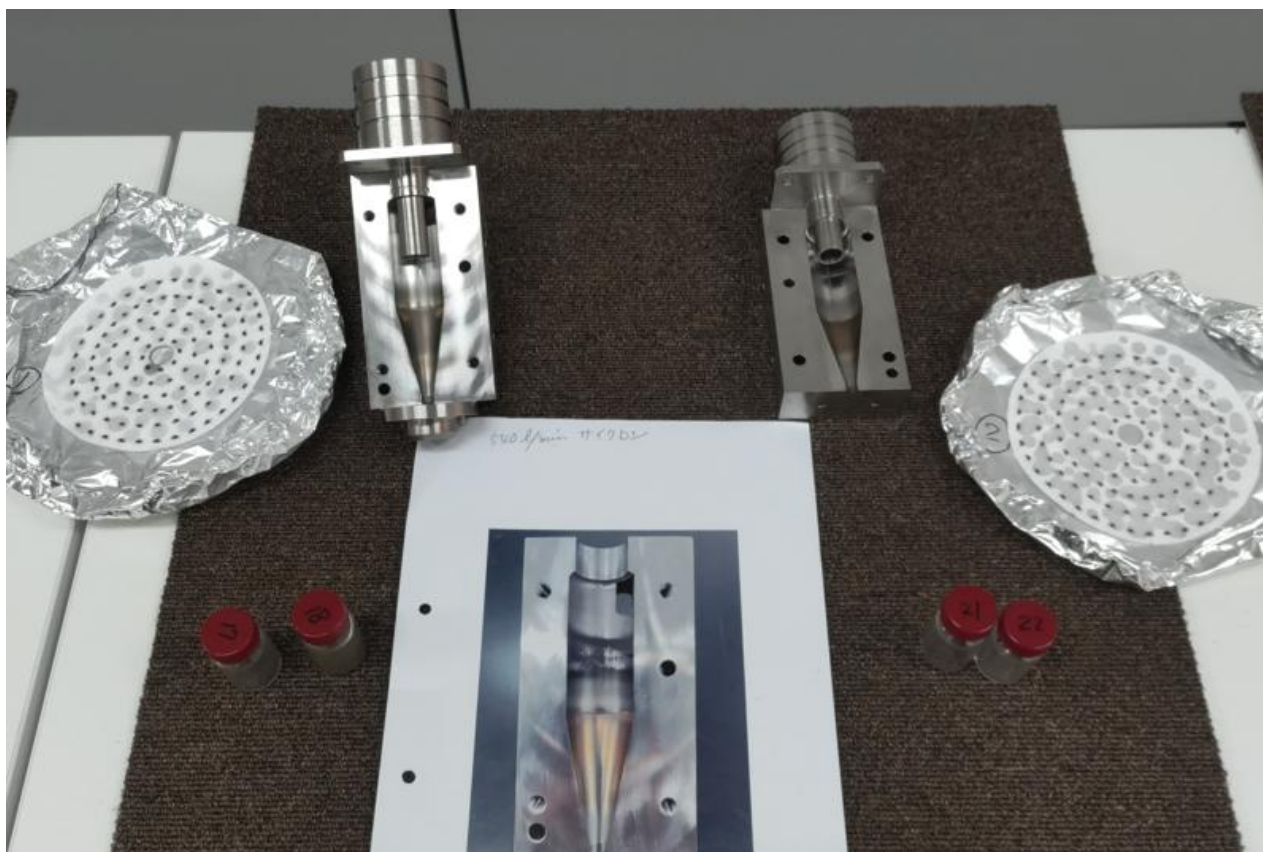


Fig. 1 製作された中型開閉型サイクロン (540 L/min での稼働を想定)
 (左) ボルテックスファインダー 30 mm (中) 同 30 mm の粒子捕集後の写真 (右) 同 20 mm



Fig. 2 製作された中型開閉型サイクロン装置の全体概観
 (この写真ではサイクロン自体は接続されていない)

次いで、採取した粒子状物質を約 2 mg 量り取り、超純水（比抵抗 18.2 MΩ・cm）により水溶性成分の抽出を行い、イオンクロマトグラフ（Dionex ICS-2100/1100, Thermo Fisher Scientific）システムにより水溶性無機イオン成分を測定した。その結果、硝酸イオンと硫酸イオンが約 7 割以上を占め、特に硫酸イオンが多かった。大気中の硫酸イオンはサブミクロン領域にそのほとんどが存在することから、本共同研究により開発された中型開閉型サイクロン装置により、サブミクロン領域の微小粒子を採取できることが示された。

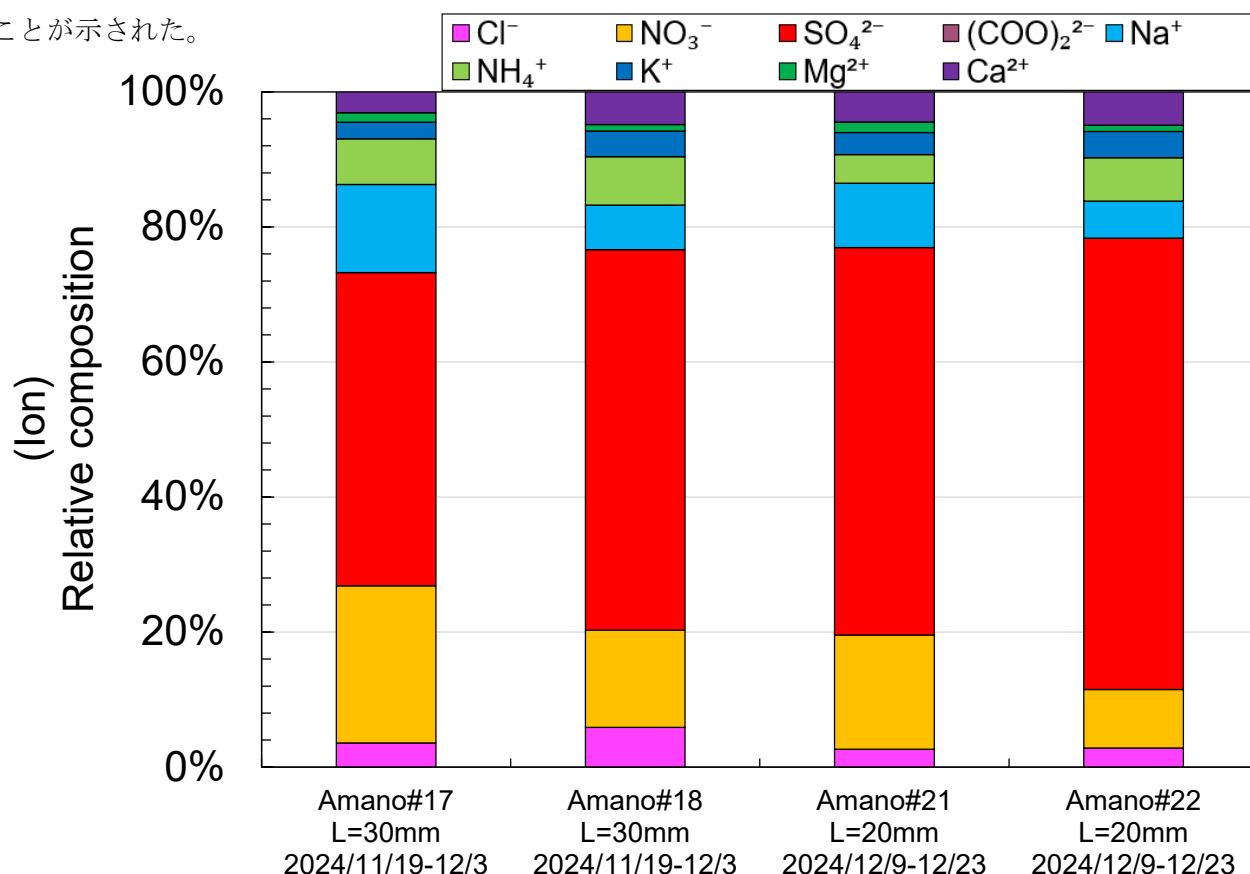


Fig. 3 中型サイクロン装置により採取された粒子中水溶性イオン成分の測定結果

2.2. 中型および小型開閉型サイクロン内部の流体シミュレーション

非定常・等温・非圧縮性流体シミュレーションにおいて、乱流モデルとしてレイノルズ応力モデル (RSM) を使用した。Fig. 4 にシミュレーションで使ったジオメトリと境界条件を示した。また、Tables 1～5 には、540 L/min 中型サイクロン分離器の CFD シミュレーションで使った全ての設定を示した。シミュレーションの安定性は、計算領域内のすべてのセルでクーラン・フリードリヒス・リュウイ (CFL) 数が 1 未満となるよう、メッシュ数と時間ステップを選定することで確保した。結果は Fig. 5 に示す円筒座標系で表現する。

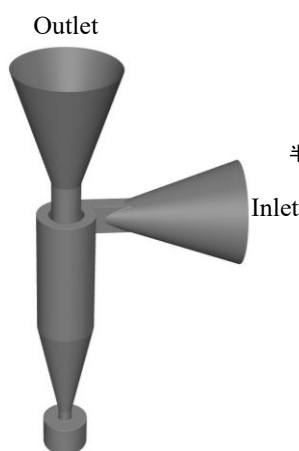


Fig. 4 CFD 用のジオメトリと境界

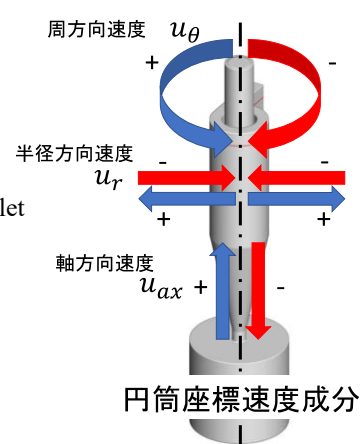


Fig. 5 円筒座標速度成分の方向性

Table 1 数値シミュレーション設定とモデル

Items	Details
Software	ANSYS Fluent 2024 R1
Solver	Type: Pressure-based, Velocity formulation: Absolute, Time: Transient, Gravity: On, Energy: off
Turbulent model	Reynolds Stress Model
Reynolds-Stress model	Quadratic Pressure Strain
Reynolds-Stress option	Wall BC from k Equation
Near-wall treatment	Scalable wall function

Table 2 流体物性値と計算値

Properties	Parameter
Density	1.204 kg/m ³
Dynamic viscosity	1.831×10 ⁻⁵ Pa·s
Operating pressure	101,325 Pa
Operating temperature	293.15 K (20 °C)

Table 3 境界条件の設定

Boundary names	Boundary types	Parameters
Inlet	Velocity inlet	$Q_{in} = 540$ L/min
Outlet	Pressure outlet	101,325 Pa
Wall	Non-slip wall	$v_w = 0$ m/s

Table 4 手法の設定

Terms		Schemes
Pressure-velocity coupling		SIMPLE
Spatial discretization	Gradient	Least squares cell based
	Pressure	Second order
	Momentum	Second order upwind
	Turbulent kinetic energy	Second order upwind
	Turbulent dissipation energy	Second order upwind
	Reynolds stresses	First order upwind
Transient formulation		Second order implicit

Table 5 空間・時間的な情報

Items	Details
Number of cells	4,469,795
Wall Y-plus value	>11.225
Time step	1×10 ⁻⁷ s
Courant–Friedrichs–Lewy (CFL) no.	<1

Figs. 6～9 には、540 L/min で動作する中型サイクロンの時間平均速度の大きさおよび各速度成分の結果と 90 L/min で動作する小型サイクロンの結果を示した。シミュレーションの結果、両者の流速分布は似ていたが、中型サイクロンの方が小型サイクロンよりも速度値が顕著に大きいことが確認された。

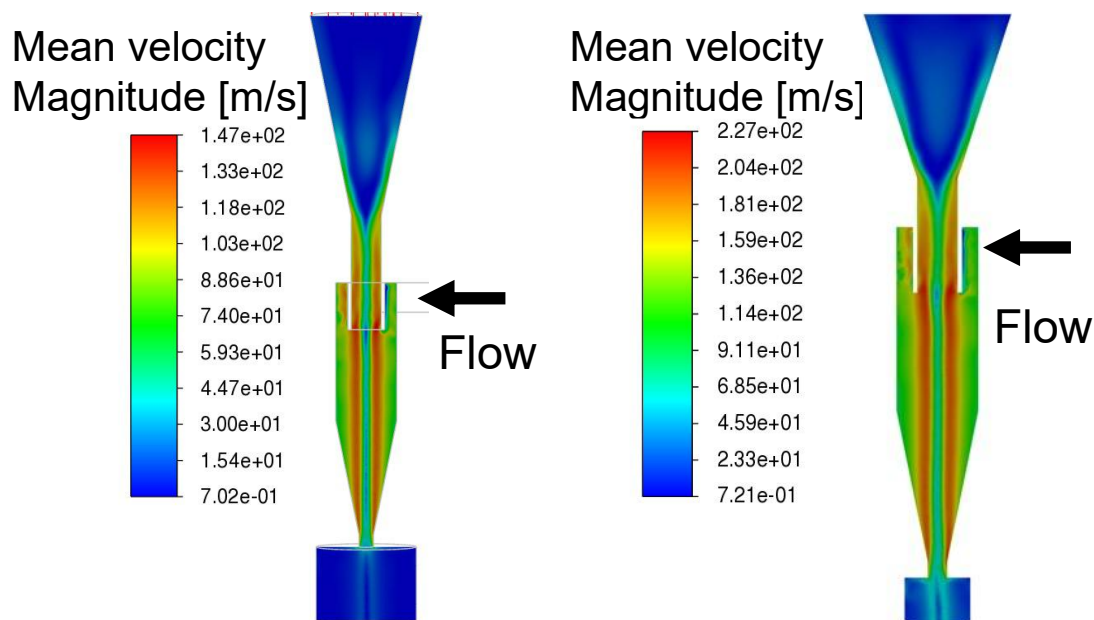


Fig. 6 (左) 90 L/min 小型サイクロンと (右) 540 L/min 中型サイクロンの時間平均速度大きさの比較

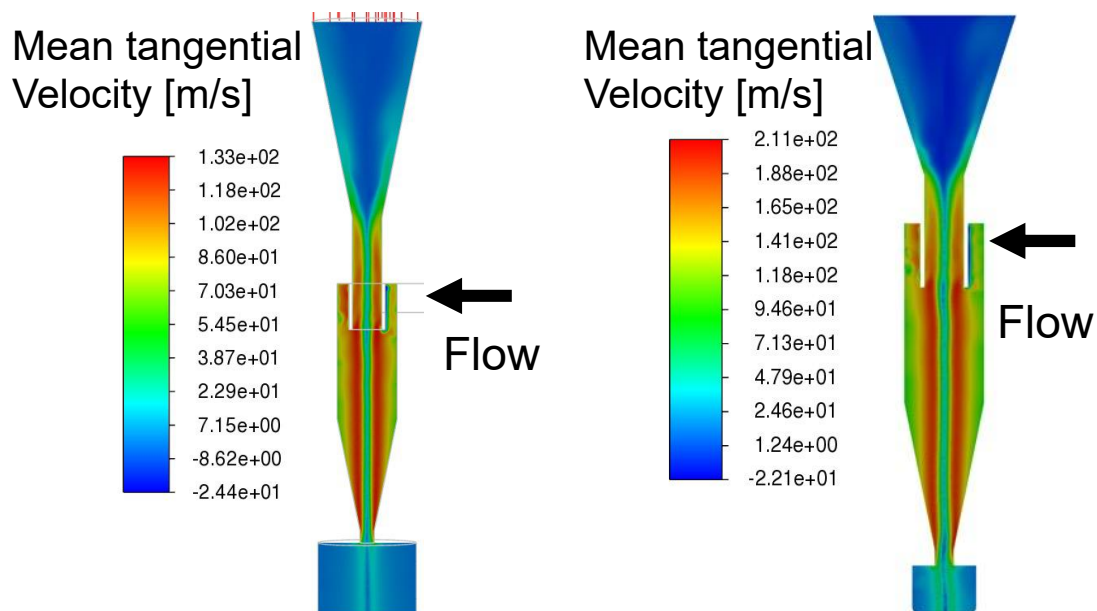


Fig. 7 (左) 90 L/min 小型サイクロンと (右) 540 L/min 中型サイクロンの時間平均周方向速度の比較

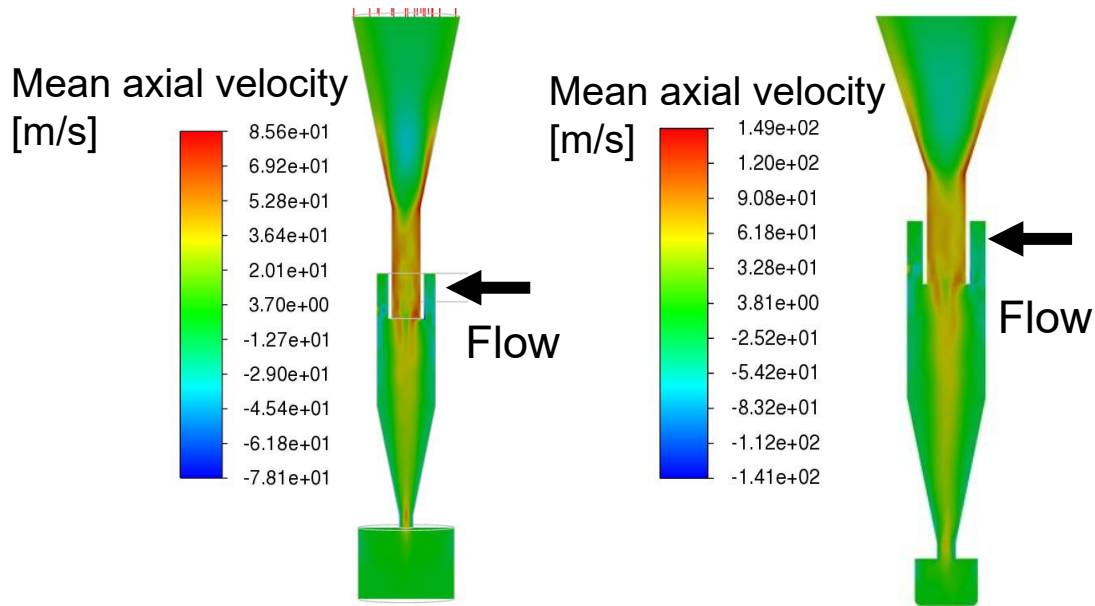


Fig. 8 (左) 90L/min 小型サイクロンと (右) 540 L/min 中型サイクロンの時間平均軸方向速度の比較

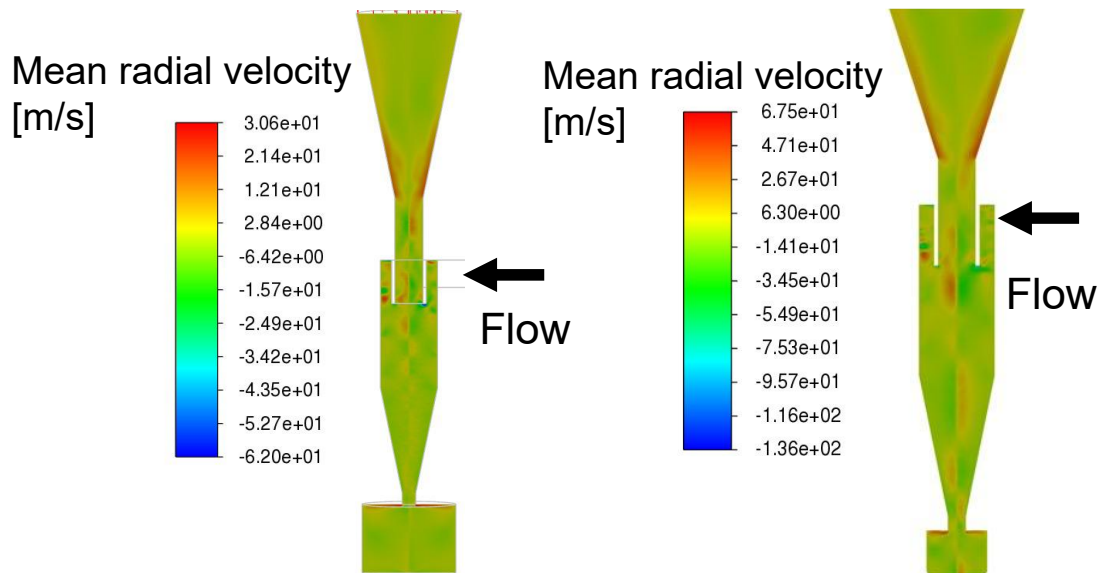


Fig. 9 (左) 90L/min 小型サイクロンと (右) 540 L/min 中型サイクロンの時間平均半径方向速度の比較

ここでサイクロン分離器の特性比較には、ボルテックスファインダーのレイノルズ数 Re_{vf} がよく用いられる。このレイノルズ数は、ボルテックスファインダー径を代表長さ d_{vf} 、ボルテックスファインダー速度 V_{vf} を基準速度として 式(1) のように定義される。

$$Re_{vf} = \frac{\rho V_{vf} d_{vf}}{\mu} = \frac{V_{vf} d_{vf}}{\nu} \quad (1)$$

ここで、 ρ, μ および ν はそれぞれ流体の密度、粘度、動粘度を示す。流量既知の場合 ($Q_{vf} = A_{vf} V_{vf}$ and $A_{vf} = 0.25\pi d_{vf}^2$)、以下の 式(2) を用いてレイノルズ数を導出できる。

$$Re_{vf} = \frac{Q_{vf}}{0.25\pi d_{vf} \nu} \quad (2)$$

540 L/min 中型サイクロンと 90 L/min 小型サイクロンの Re_{vf} はそれぞれ 50,471 と 16,824 であり、前者の方が大きい値を示した。これは中型サイクロンの方が流速が大きいことを意味する。ここで前年度までの研究により、小型サイクロンの場合は局所的に速度がマッハ数 0.3 を超える場合があることが確認されているため、流体の圧縮性がサイクロン内の流場に影響を与える可能性がある（2023 年度年次報告書参照）。このため、中型サイクロン（540 L/min）の場合は圧縮性の影響がさらに顕著になることが予想される。圧縮性流れのシミュレーションを実施する場合、流速や流量に基づく境界条件ではなく、圧力差に基づく境界条件を設定することで、より安定かつ精度の高いシミュレーションが可能となると考えられる。小型サイクロン（90 L/min）の実験結果では、圧力差 $\Delta P = 17,000$ Pa の条件で圧縮性流れのシミュレーションが実際の流量（ $0.00150 \text{ m}^3/\text{s}$ ）に最も近い値を示した。サイクロン出口流量の時系列平均のシミュレーション結果は、非圧縮性の場合で $0.00131 \text{ m}^3/\text{s}$ であったのに対し、圧縮性を考慮した場合で $0.00147 \text{ m}^3/\text{s}$ であった。

2.3. ボルテックスファインダー長さを変化させた中型開閉型サイクロン内部の流体シミュレーション

サイクロン実機を製作するにあたり、ボルテックスファインダー長さは比較的变化が容易なパラメータである。上記 2.2.項において実際にボルテックスファインダー長さを変化させたサイクロンを用いて 3 週間の実大気サンプリングを実施したところ、粉体の回収量には違いが見られた。そこで、540 L/min 中型サイクロンのジオメトリーは固定したまま、ボルテックスファインダー長さのみを変化させた場合に、サイクロン内部の流体挙動にどのような変化が生じるかをシミュレーションにより解析した。

その結果、ボルテックスファインダー長さ 30 mm の場合では 20 mm の場合に比べてボルテックスファインダー周辺の速度の値が相対的に小さくなっていた（Fig. 10）。一方、これ以外の領域では両ケース間に顕著な違いは見られなかった。長さ 20 mm の場合でボルテックスファインダー周辺の速度が大きくなっている理由は、流れの抵抗が相対的に小さくなっているためと考えられる。これが正しいとすると、ボルテックスファインダーが短いほど流体が直接ボルテックスファインダーに流出しやすくなり、いわゆる *short-circuit flow*、つまりインレットより導入された流体がサイクロン分離部（円筒・円錐部）に到達せず流体が直接排出されてしまう現象が発生しやすくなると考えられる。

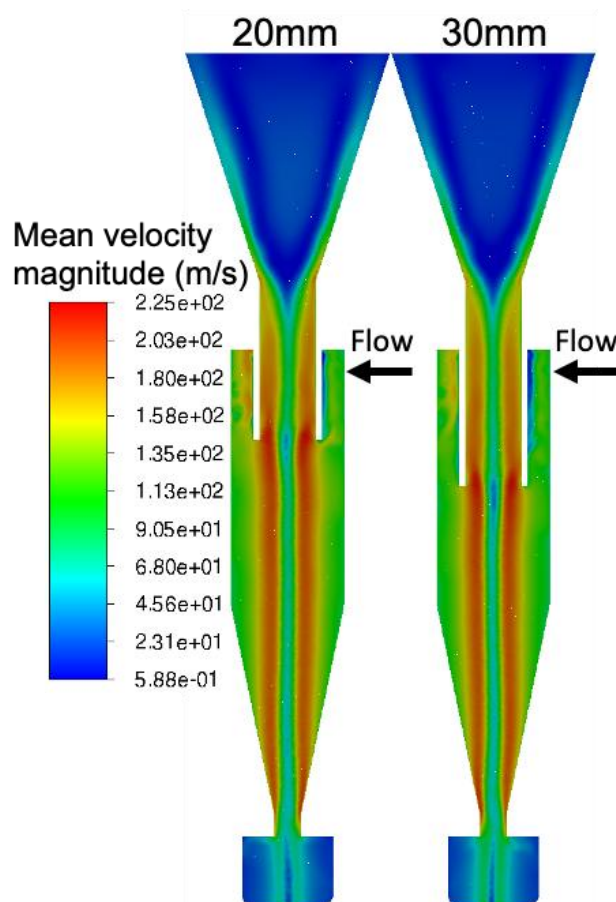


Fig. 10 20mm と 30mm ボルテックスファインダーの時間平均速度大きさの比較

2.4. 中型開閉型サイクロン内部の流体シミュレーションにおける計算モデルの違いによる結果の比較

ボルテックスファインダーの長さを 30 mm とした中型サイクロンにおいて、流量 540 L/min の条件で数値シミュレーションを実施するにあたり、これまでは乱流モデルとしてレイノルズ応力モデル (Reynolds Stress Model: RSM) を用いてきたが、本項では大規模渦シミュレーション (Large Eddy Simulation: LES) を用いた結果との比較を行った。その結果、時間平均流れ場の構造に関しては、RSM と LES の間に顕著な違いは見られなかった (Fig. 11)。一方で局所的には、ボルテックスコア領域、サイクロン本体、およびボルテックスファインダー内部において、LES の場合により大きな速度値が得られた。また、円筒形状の上部 (ボルテックスファインダー外面の周辺) においても、LES の方がやや大きな速度値を示した。さらに速度の 2 乗平均値の平方根 (rms : 速度変動を表す) 速度分布 (速度の大きさ、円周方向速度、軸方向速度、および軸方向速度成分) を比較した結果、LES は RSM に比べて速度変動幅が大きいことが確認された (Fig. 12)。特にボルテックスファインダー入口およびサイクロン本体 (円筒・円錐部) において、LES では大きな速度変動が発生していた。これらの速度変動は異なるスケールの渦が相互に干渉することによって生じるものと考えられ、特に微小粒子の運動に大きな影響を与えるため、最終的に粒子捕集効率の結果に影響を及ぼす可能性がある。今後は粒子運動の計算を行い、各計算モデルによる違いや実際に観察される現象との比較を実施する予定である。

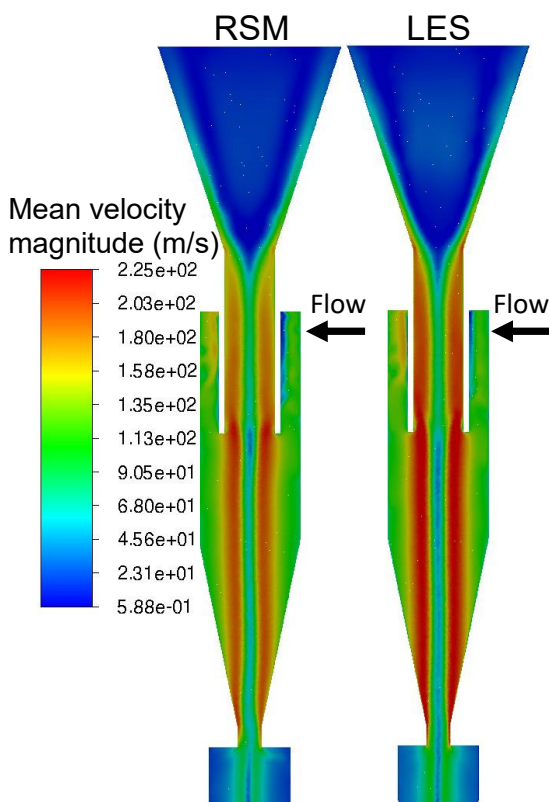


Fig. 11 RSM および LES の時間平均速度大きさの分布の比較

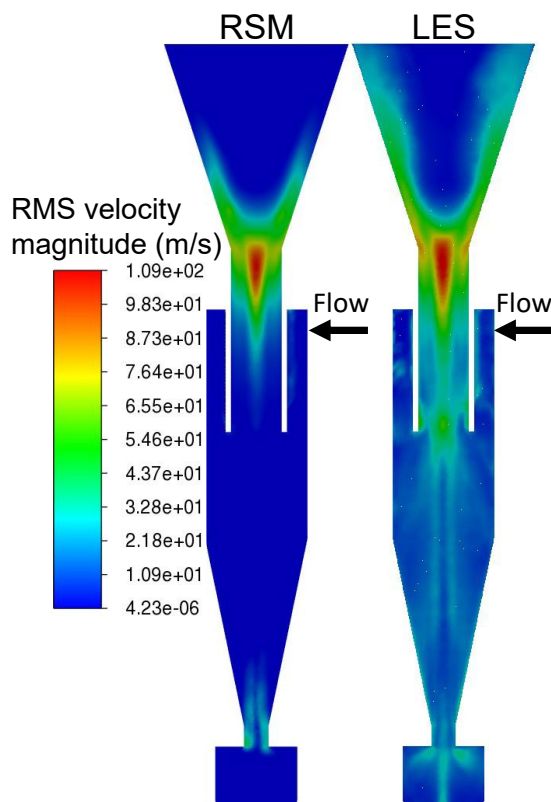


Fig. 12 RSM および LES の rms 速度大きさの分布の比較