

フェイスマスク内部の粒子流体ダイナミクスの数値解析とデータ駆動予測

Numerical Analysis and Data-driven Prediction of Fluid-particle Dynamics Inside Face Masks

波田 航大*
Kodai Hada

1. はじめに

繊維状フィルタの一種であるフェイスマスクは捕集性能が高く運用コストが低いことから感染症の予防や汚染物質の除去に広く用いられている。大気中のエアロゾル粒子は、マスクの繊維により構成される微細構造の内部を通過する際に捕集されるが、その捕集挙動はよく知られていなかった。数値シミュレーションはマイクロスケールの現象を高解像度に再現可能な手法であるが、不織布マスクのような複雑な微細構造およびその周囲の現象を再現できず、膨大な計算時間を要していた。

そこで本研究は、実際のフェイスマスク内部を透過するサブマイクロサイズの粒子挙動を再現する数値シミュレーションモデルの開発と、粒子-流体挙動を高解像度に予測する機械学習ベースのデータ駆動型フレームワーク構築を目的とした。

2. 主な研究成果

2.1 X線CT画像と連携したCFD-DPM (Discrete phase method) モデルの開発 [1]

シミュレーションモデルは連続の式と Navier-Stokes 式で表される流体運動と、粒子の運動方程式で表される粒子運動を 1-way で連成することで構築した。実際のマスクを X 線 CT により撮影することでシミュレーションに導入した。市販のサージカルマスクから微細構造 S1~S3 を、N95 マスクから微細構造 N1~N3 をそれぞれ取得した。各微細構造に対し、空気と液滴の透過シミュレーションを行い、フィルタ性能（圧力損失・捕集率）を算出した。同じマスクから取得した微細構造でも、繊維配置によってフィルタ性能が異なることが確認できた (Fig. 1)。

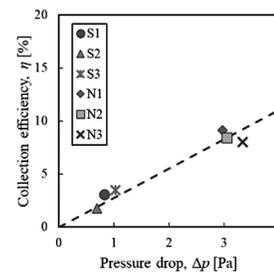


Fig. 1 Relationship between pressure drop and collection efficiency for different facemask domains

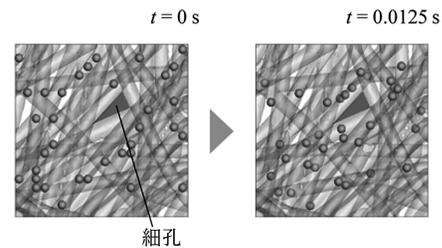


Fig. 2 Snapshots of collection behavior of particles near large pore. Main flow direction is depth direction

2.2 高い捕集性能を有する微細構造の特徴 [1]

開発した CFD-DPM モデルを用いて粒子-流体挙動を観察したところ、フィルタ性能が高い領域では微細構造内部の比較的大きな細孔に粒子が引き寄せられ、細孔付近で捕集される様子が観察された (Fig. 2)。

そこで、細孔径のみが異なる 6 種類のモデルマスクをシミュレーション上で作成した。モデルマスクは微細構造の主流方向に貫通した円柱状の細孔を作成する処理を行うことで作成した。各モデルマスクの圧力損失と捕集率を、式 (1) で定義されるクオリティファクター QF に統合した。定義より、 QF が高いマスクは高い性能を有する。

$$QF = - \frac{\ln(1-\eta)}{\Delta p} \quad (1)$$

細孔サイズを変えると QF が変化し、細孔の大きいモデルマスクは細孔のないモデルマスクより高い QF を示

2025 年 5 月 12 日受付

広島大学大学院 先進理工系科学研究科 化学工学プログラム
(〒739-8527 広島県東広島市鏡山 1-4-1)

Chemical Engineering Program, Graduate School of Advanced Science and Engineering, Hiroshima University
(1-4-1 Kagamiyama, Higashi-Hiroshima, Hiroshima 739-8527, Japan)

* 連絡先 kodaihada96@gmail.com

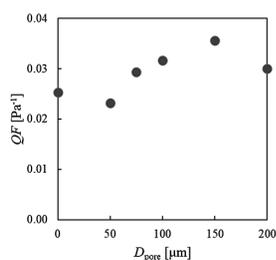


Fig. 3 Relationship between the pore size and quality factor of the model masks

した (Fig. 3)。以上より、細孔の存在は捕集性能に影響し、適切なサイズの細孔はマスクの性能を向上させる可能性があることが示唆された。

2.3 実際のマスク内部の流体流れ場を予測するデータ駆動型フレームワークの開発 [2]

シミュレーションにより得られた流れ場（速度場・圧力場）を学習データとして CNN (Convolutional neural network) モデルの学習を行うフレームワークを構築した。本フレームワークは、X線 CT 画像を入力データとして受け取り、流れ場を出力として提供する。CNN に用いるデータベースのサンプル数を確保するため、3次元のシミュレーションにより得られた流れ場データから2次元の情報を抽出した。流れ場の各ピクセルにおいて CFD による計算値と CNN による予測値をプロットするとおおむね 1:1 の直線関係を示した。また、相対誤差を表す NMSE は 0.01 未満であり、これは計算値と予測値の相対誤差が 10% 未満であったことを表している (Fig. 4)。以上より、本フレームワークで構築したモデルが高いモデル精度を有していることが確認できた。また、本フレームワークを用いることで CFD の計算時間を 99.9% 以上削減することに成功した。

2.4 データ駆動型フレームワークを用いた粒子 - 流体挙動の解析 [3]

機械学習モデルにより予測した流体流れ場を用いて、粒子挙動のシミュレーションを行う CNN-DPM モデルを開発した。CNN-DPM により算出された QF の値は CFD-DPM より得られた QF の値と同程度であり、これは CNN-DPM モデルが良好なモデル精度を示したことを意味している (Table 1)。また、CNN-DPM は粒子 - 流体挙動の計算にかかる時間を 90% 以上短縮していた。以上より、本フレームワークが高精度かつ短時間で粒子 - 流体挙動を再現できることが確認できた。

3. 今後の展望

本研究で開発した数値シミュレーションモデルおよびデータ駆動型フレームワークは、実験的に観察が困難なミクロンサイズの粒子 - 流体挙動や微細構造のフィルタ性能を高精度かつ短時間で予測できるため、高性能なマ

Table 1 Quality factor QF predicted by the CFD-DPM and CNN-DPM for different particle diameters

D_p [μm]	QF [Pa^{-1}]	
	CFD-DPM	CNN-DPM
0.3	0.024	0.033
1.25	0.037	0.049

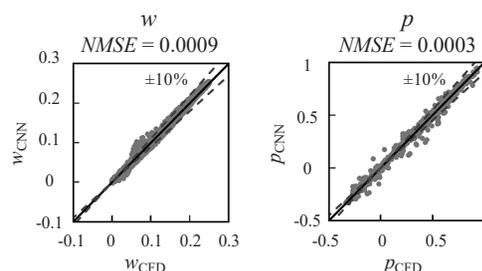


Fig. 4 Scatter plot of fluid velocity and pressure calculated by CFD and CNN at an inlet velocity of 0.1 m/s

スクの製造に寄与すると考えている。マスクの高性能化を実現するために、今後は機械学習の汎化精度向上・マスク構造を良好に記述する設計パラメータの決定・設計パラメータの最適化が必要である。また、これらの手法を異なる繊維状フィルタに適用することで広くフィルタ性能を向上させることが期待される。

4. 謝辞

本研究を行うにあたり、終始暖かくご指導、ご教授を賜りました広島大学大学院先進理工系科学研究科 福井国博教授、石神徹准教授、深澤智典准教授に心より感謝申し上げます。

文献リスト

- [1] K. Hada, M. Shirzadi, T. Fukasawa, K. Fukui, T. Ishigami, Numerical simulation of aerosol permeation through microstructure of face masks coordinating with x-ray computed tomography images, AIP Adv. 12 (2022) 125119.
- [2] K. Hada, M. Shirzadi, T. Fukasawa, K. Fukui, T. Ishigami, Prediction of three-dimensional flow field inside realistic fibrous filter obtained from x-ray computed tomography images using deep convolutional neural networks, Phys. Fluids 36 (2024) 063305.
- [3] K. Hada, M. Shirzadi, T. Fukasawa, K. Fukui, T. Ishigami, Prediction of fluid-particle dynamics and performance in fibrous filters obtained from X-ray CT using convolutional neural network and discrete phase model, Chem. Eng. J. 514 (2025) 163243.

(学位取得は 2025 年 3 月, 広島大学)

< 著者紹介 >



2023 年 9 月 広島大学大学院 先進理工系科学研究科 化学工学プログラム 博士課程前期修了。同年 10 月、同大学大学院 博士課程後期進学。2023 年度広島大学大学院リサーチフェロウシップ採択。
専門：微粒子工学、流体力学、数値解析、機械学習