



付着性粒子に対する粒子剛性低減 DEM モデリング

Reduced-Stiffness DEM Modeling for Cohesive Particles

田中 敏嗣¹, 鷲野 公彰²
Toshitsugu TANAKA¹, Kimiaki WASHINO²

¹ 大阪大学大学院工学研究科 教授
² 同 講師

¹ Professor, Graduate School of Engineering, Osaka University, JAPAN
² Senior Lecturer, Graduate School of Engineering, Osaka University, JAPAN

抄 録

離散要素法は、一般的な粉粒体挙動の数値シミュレーションを可能とし、計算機環境の発達と商用汎用コードの普及などを背景として、粉粒体挙動の理解や各種粉体プロセスの設計や最適化のために必要不可欠なツールとなっている。本稿では、まず、計算負荷を軽減して効率的な計算を行うために必要となる粒子運動計算の基礎的な知識、および離散要素法におけるばね定数の低減が計算負荷軽減に有効であることを述べる。次に、この知識を活用することにより、粒子が付着力を有する場合に対して計算負荷軽減のためのモデリングが可能となること、さらにそのモデリングの一般化について紹介する。

ABSTRACT

Nowadays, Discrete Element Method (DEM) is widely used to study the phenomena concerning granular materials or powders or to develop and to optimize granular facilities and processes. When DEM is used, the spring constant in the contact force model of DEM is often reduced to reduce the calculation time or calculation cost. However, it has been pointed out that the reduction in the spring constant largely changes the agglomeration behavior of cohesive particles. When one uses the technique of reducing spring constant, it is required to understand the physics of particle-particle interaction. In this article, the way of thinking to use the technique of reducing spring constant is presented based on the authors' previous studies.

1 はじめに

Cundall と Strack (Cundall P.A. and Strack O.D.L., 1979) によって提案された離散要素法 (Discrete Element Method, 以後 DEM) により、一般的な粉粒体挙動の数値シミュレーションが可能となった。その後、計算機環境の発達を背景として、粉粒体の関わる様々な現象の解明や工業プロセスへの応用がな

され、商用汎用コードの普及などもあって、DEM は粉粒体挙動の理解や各種粉体プロセスの設計や最適化のために必要不可欠なツールとなっている。

例えば、空気輸送や流動層などのように、多くの粉粒体プロセスにおいて周囲流体の流れの影響を強く受ける。そのような固気二相流の流動挙動の数値予測に対しても、局所平均化された流体流れ場 (Anderson and Jackson, 1967) と DEM をカップリン

グする計算手法が開発されており、水平管内プラグ流の計算 (田中ら, 1991), (Tsuiji Y. et al., 1992) や、2次元流動層内における気泡の形成と挙動の計算 (川口ら, 1992), (Tsuiji Y. et al., 1993) などが行われている。このDEM-CFDカップリングモデルの詳細と計算例については田中と川口による解説 (田中と川口, 2012) が参考になる。

DEMは、元来、粒子が密集状態での挙動を計算するために開発された計算モデルおよび計算手法であるが、その適用範囲の広さから、希薄から高濃度、粒子堆積層に至る幅広い挙動に対して用いられるようになってきている。このような状況において、DEMは、一見、万能の計算手法のように思えるが、計算負荷を軽減して効率的な計算を行うためには、粒子運動の計算の基礎的な知識が必要となる。

一般に、粉粒体挙動のDEM解析を行う場合、計算負荷軽減のためにばね定数を低減する手法 (川口ら, 1992; Tsuiji Y. et al., 1993) が一般的な手法となっている。しかし、粒子間に付着力が存在する場合、ばね定数の低減は付着の効果が強調されるため、ばね定数の低減手法をそのままでは用いることができず、新たなモデリングが必要となる (Kobayashi T. et al., 2013)。また、同様のモデリングが、液架橋力など含む一般的な付着力に対しても有効であることが示されている (Washino K. et al., 2018)。

以上のような背景の下、本稿ではDEMのモデリングの最近の課題、とくに付着力を伴う場合について計算負荷軽減のためのモデリングの考え方について解説する。

2 離散粒子シミュレーションの基礎

2.1 剛体粒子モデルと柔軟粒子モデル

個々の粒子の運動をラグランジュ的に追跡するシミュレーション手法を離散粒子シミュレーションといい、そこで用いられる粒子モデルを離散粒子モデルと呼ぶ。DEMは離散粒子シミュレーションのひとつである。

離散粒子モデルは、図1に示すように、剛体粒子モデルと柔軟粒子モデルに分類される。剛体粒子モデルでは、粒子・粒子間あるいは粒子・固体壁面間の相互作用は衝突としてモデル化されるのに対して、柔軟粒子モデルでは接触力により表現される。

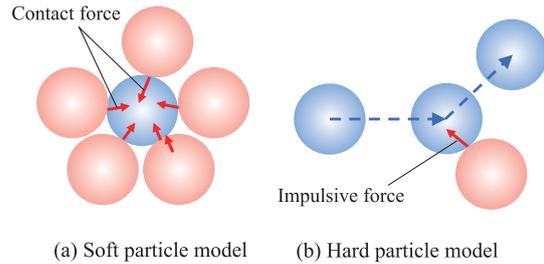


図1 離散粒子モデルの分類

Fig. 1 Classification of discrete particle model.

球形の剛体粒子モデル (剛体球モデル) の場合、次に示す衝撃運動方程式により衝突前の粒子の運動状態 (粒子重心の並進速度 v , 角速度 ω) から衝突後の状態が求められる。

$$v^* = v + \frac{J}{m} \quad (1)$$

$$\omega^* = \omega + \frac{a}{I} n \times J \quad (2)$$

ここで、 m は粒子質量、 I は粒子の重心周りの慣性モーメント、 J は粒子に働く衝撃力、 n は粒子の接点における法線方向単位ベクトル、 $*$ は衝突後の量を表す。このように、剛体粒子モデルでは衝突に要する時間は無視され、衝突が発生した場合には衝撃運動方程式により衝突後の速度に置き換えられる。衝撃力 J は衝突モデルにより与えられ、法線方向成分は反発係数、接線方向成分は摩擦係数および接線方向の反発係数などのパラメータを用いてモデル化される。

これに対して、柔軟粒子モデルを用いた計算では、衝突は、他の粒子あるいは固体壁面と接触状態にある衝突の過程での粒子運動を追跡することにより求められる。つまり、有限の大きさをもつ衝突時間内で接触力を受けながら運動する粒子挙動が、その衝突時間に比べて小さな時間刻みを用いて計算される。DEMは代表的な柔軟粒子モデルにもとづく手法であり、図2に示すように、接触力はばね、ダッシュポットおよび摩擦スライダによる接触力モデルを用いて与えられる。剛体粒子モデルでは、計算の時間刻みは衝突時間に比べて非常に大きくとることができ、柔軟粒子モデルを用いた計算に比べて計算負荷は非常に小さくできる。

剛体粒子モデルは、その特徴により、扱うことが

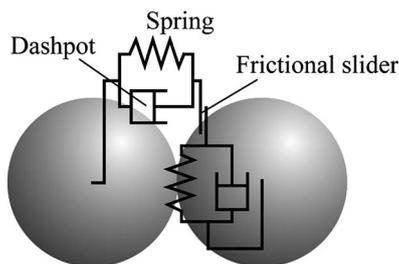


図2 離散要素法の接触力モデル
Fig. 2 Contact force model of discrete element method.

できる粒子挙動は衝突支配流動に限られ、例えば静止堆積層のような持続的な接触を維持する挙動は表すことができない。例えば、砂時計の中の砂の挙動を考えると、剛体粒子モデルは、落下する過程にある流動する粒子の運動は表現できるが、堆積層の中にある粒子の運動は取り扱えない。これに対して、DEMに代表される柔軟粒子モデルは、砂時計の砂の挙動をすべて表現することができる。これが柔軟粒子モデルの有利なところであり、現在までに広く利用されるに至った理由である。しかし、砂時計の中を衝突しながら落下する粒子の挙動だけを表現するのであれば、剛体粒子モデルで十分であり、これにより計算負荷を軽減できる。

2.2 DEMの接触力モデル

DEMで用いられる接触力モデルは大別して、線形のばねおよびダッシュポットを用いる線形モデルと、等方弾性体の接触理論に基づく理論解を用いるHertz-Mindlinモデル (Hertz H., 1881), (Mindlin R.D., 1949) がある。

Hertzの接触理論 (Hertz H., 1881) では、二つの球形粒子の法線方向弾性反発力 f_{cn} は次式で与えられる。

$$f_{cn} = \frac{\sqrt{2aE}}{3(1-\sigma^2)} \delta_n^{\frac{2}{3}} \quad (3)$$

ここでは、半径 a をもち、同じ材質からなる球形粒子間の接触を考えており、 δ_n は法線方向の変形量、 E はヤング率、 σ はポアソン比である。式 (3) で示されるように、球形粒子の弾性反発力 f_{cn} と変形量 δ_n の関係は、通常の力学の教科書に出てくるばねのように線形ではない。

式 (3) で与えられるような弾性反発力を接触力に用いる DEM は、計算に大きな困難をもたらす。

その理由を以下に示す。法線方向に Hertz の弾性反発力だけが働く想定した場合の衝突時間を考えてみよう。このとき、粒子間衝突の衝突時間 τ は法線方向の相対衝突速度 v_0 の関数として次式で与えられる (Johnson K.L., 1985)。

$$\tau = 2.94 \left(\frac{m^2}{\kappa^2 v_0} \right)^{1/5} \quad (4)$$

$$\kappa = \frac{4\sqrt{2aE}}{15(1-\sigma^2)} \quad (5)$$

ここで、 m は粒子質量である。上式の関係より、衝突時間 τ はヤング率 E の増大とともに小さくなるのが分かる。ポリスチレン粒子 ($E=0.3 \times 10^{10}$ Pa, $\sigma=0.34$) とガラス粒子 ($E=7 \times 10^{10}$ Pa, $\sigma=0.25$) を想定して、具体的な衝突時間 τ を求めると、表1のようになる。表に示すように、衝突時間は衝突速度に依存し、衝突速度が大きくなると衝突時間は小さくなる。また、衝突時間は非常に小さく、表に示す衝突速度の範囲で 1×10^{-7} s から 1×10^{-5} s となる。このような条件に対して DEM 計算を安定に行うためには、この衝突時間を細分する計算時間刻みを採用する必要があるため、非常に大きな計算負荷を要することになる。

これに対して、DEMの接触力モデルに線形モデルを用いる場合、粘性減衰を無視して、粒子質量 m 、法線方向ばね定数 k のばね・質量系の衝突時間 τ を求めると次のようになる。

$$\tau = \pi \sqrt{\frac{m}{k}} \quad (6)$$

線形モデルでは衝突時間は衝突速度に依存せず、

表1 衝突時間
Table 1 Collision duration.

material	d [mm]	v_0 [m/s]	τ [μ s]
Polystyrene ($E=0.3 \times 10^{10}$ Pa, $\sigma=0.34$)	1.0	1.0	9.6
	1.0	0.1	15
	0.1	1.0	0.96
	0.1	0.1	1.5
glass ($E=7 \times 10^{10}$ Pa, $\sigma=0.25$)	1.0	1.0	3.9
	1.0	0.1	6.2
	0.1	1.0	0.39
	0.1	0.1	0.62

粒子質量と接触力モデルのパラメータで一定値に決まる。また、ばね定数 k を小さく設定できれば、 τ が大きくなるとともに計算時間刻みも大きく取ることができ、計算負荷を軽減することができる。

3 弾性係数の低減による計算負荷軽減

3.1 線型モデルとばね定数の低減による計算負荷の軽減

2.1 節で述べたように、高濃度であっても粒子間相互作用が衝突支配の挙動であれば、DEM の接触力モデルは線型モデルであっても Hertz-Mindlin モデルであってもどちらでもよく、粒子間衝突が表現できればよい。この観点からは、2.2 節で述べたように衝突時間が制御しやすい線型モデルが有利であり、粒子運動に関する他の特性時間（例えば、粒子間衝突時間間隔）に比べて十分小さくなる範囲でばね定数を低減すれば、計算負荷を軽減することができる。

接触力モデルに線型モデルを用いた場合の流動層内の粒子流動化状態に対するばね定数の影響を図 3 に示す (Kobayashi T. et al., 2013)。図に示すように、粒子流動化状態に対するばね定数の影響は小さく、ばね定数の低減により計算の時間刻み Δt を大きくすることができ、計算負荷を低減できることが分かる。

4 付着力を有する場合

4.1 線型モデルの場合

粒子の粒径が数十 μm 程度より小さくなると、van der Waals 力による付着力の影響が現れる。図 3 で示した流動層の場合にも、流動化挙動に付着力の影響が現れるようになる。Kobayashi ら (Kobayashi T. et al., 2013) は流動層の流動化挙動で付着力の影響が問題となる粒子の条件 (Geldart A 粒子) に対して DEM-CFD シミュレーションを行った。ここでは、検証実験で用いられた粒径 $60 \mu\text{m}$ のガラス粒子の付着力が実測され、その付着力の実測値を用いて計算が行われた。その結果、図 4 に示すように、計算結果はばね定数に大きく依存し、ばね定数が小さくなるほど付着の効果が強調される結果となった。

この Kobayashi らの研究 (Kobayashi T. et al., 2013) で明らかにされたことは、付着力があるときの粒子間衝突時の付着・反発挙動は、図 5 に示すように、法線方向衝突速度 v_0 がある付着限界速度 v_c 以下では付着し、衝突速度がそれを超えると反発すること、付着限界速度 v_c と、粒子質量 m 、法線方向ばね定数 k の間に次式の関係があることである。

$$v_c = \infty \frac{F_{AD}}{\sqrt{mk}} \quad (7)$$

つまり、付着力がある場合にばね定数を変えてしまうと衝突挙動を変えることになる。Kobayashi らはこの結果から、衝突時の v_c を一定とする動的付着力モデルを提案した。つまり、計算時間刻みを拡大するためにはばね定数 k を小さくするとき、式 (9) に基づいて v_c を変えないように付着力 F_{AD} を小さく

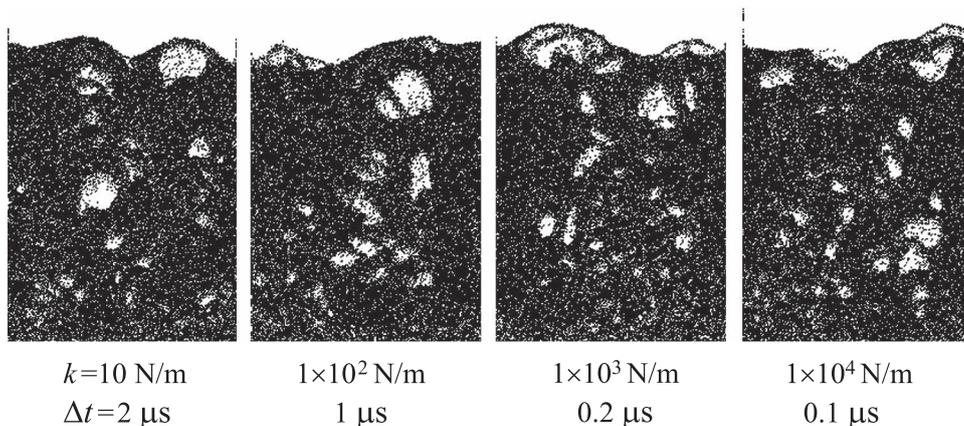


図 3 粒子流動化挙動に対するばね定数の影響 (Kobayashi T. et al., 2013)
Fig. 3 Effect of spring constant on fluidized behavior (Kobayashi T. et al., 2013).

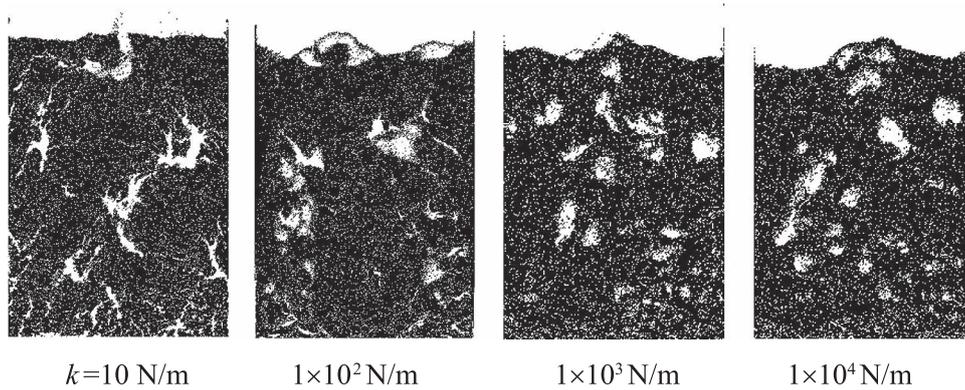


図4 付着力を有する場合の粒子流動化挙動に対するばね定数の影響 (Kobayashi T. et al., 2013)
 Fig. 4 Effect of spring constant on fluidized behavior with cohesion force (Kobayashi T. et al., 2013).

するのがこのモデルの考え方である。この動的付着力モデルを用いると、付着力を有する場合であっても、図5に示すように、ばね定数を低減して付着力の影響を表現することができる。なお、図6において各粒子の色は配位数を表しており、流動層中における凝集体（配位数の大きな粒子群の領域）の形成が良好に表現できていることが分かる。

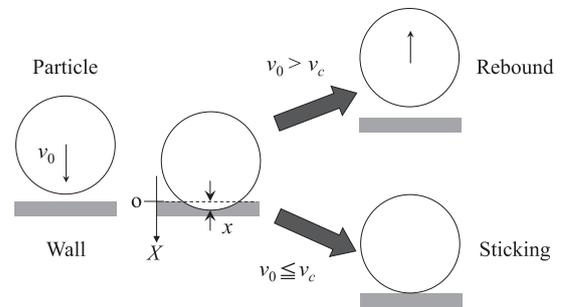


図5 粒子・壁面衝突時の付着 / 反発挙動
 Fig. 5 Stick/rebound behavior after particle-wall collision.

4.2 一般的な付着力と接触力モデルへの拡張

4.1節に示したように、線形モデルと一定の大きさの粒子間付着力を仮定した場合、粒子が2体衝突する際の付着限界速度は理論的に扱うことができる。しかし、一般的には、粒子の運動方程式を理論的に解くことのできる場合は多くなく、むしろ例外的である。粒子間に働く付着力には様々なものがあり、それらは、例えば、接触面積や粒子速度といった粒子接触に関連する変数の複雑な関数となる。また、Hertz-Mindlin モデルのような非線形モデルでは、

たとえ付着力がない場合でも理論的な扱いは困難である。そこで、Washino らは別の観点からのアプローチにより、以下に示すように、動的付着力モデルの一般化を行った (Washino K. et al., 2018)。

線形モデルを用いた場合、2体衝突する粒子の運動方程式は次式のように無次元化される。

$$\hat{v} \frac{d\hat{v}}{d\hat{x}} + \hat{x} + \sqrt{\frac{4}{1 + (\pi / \ln(e))^2}} \hat{v} + \sum \sqrt{\frac{1}{mkv_0^2}} F_{AO} = 0 \quad (8)$$

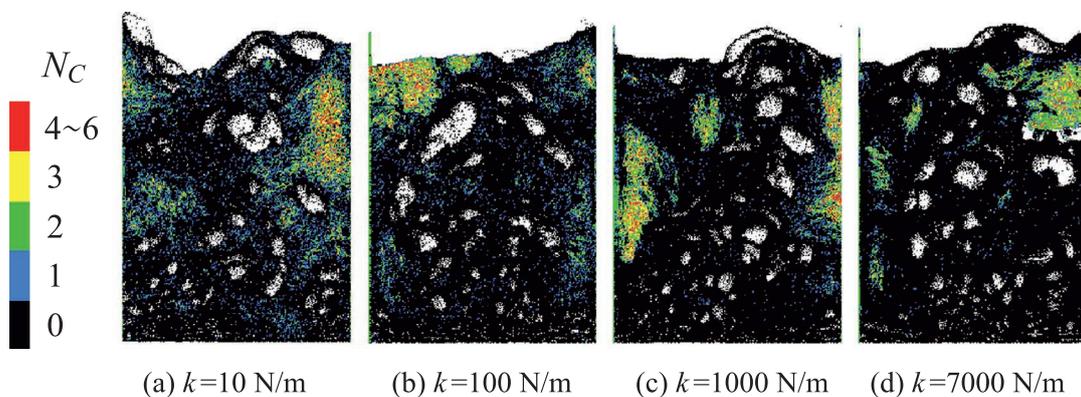


図6 動的付着力モデルを用いた場合の配位数分布 (Kobayashi T. et al., 2013)
 Fig. 6 Coordination number distribution with dynamic cohesion force model (Kobayashi T. et al., 2013).

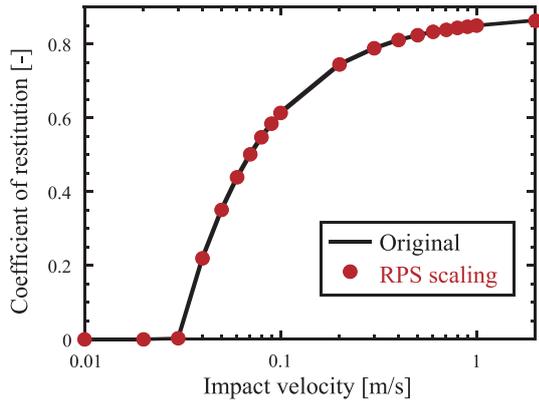


図7 線形接触力モデルと潤滑力を有する場合の衝突速度と反発係数の関係 (Washino K. et al., 2018)
 Fig. 7 Relationship between net coefficient of restitution and impact velocity; the contact force is modelled with the linear spring-dashpot and lubrication force is exerted on the particle (Washino K. et al., 2018).

ここで、無次元化された粒子速度 \hat{v} と変位 \hat{x} は次式で定義される。

$$\hat{v} = \frac{v}{v_0} \tag{9}$$

$$\hat{x} = x \sqrt{\frac{k}{mv_0^2}} \tag{10}$$

式 (8) では、付着力 F_{AO} は粒子接触に関する変数の任意関数であることを仮定しており、また複数の付着力が同時に働いている場合も考慮して総和の形で表されている。式 (8) の左辺第 1~3 項の係数は定数もしくは付着力のない場合の反発係数のみの関数であり、ばね定数に依存しない。したがって、ばね定数を低減させた際に左辺第 4 項の形が変わら

ないように付着力をスケールすれば、衝突前後の粒子速度、すなわち粒子のエネルギー損失量はばね定数低減の影響を受けないことになる。

Washino らはこの方法を Reduced Particle Stiffness (RPS) スケールと呼び、図 7 に示すように、ばね定数を下げた粒子を用いて、ばね定数の大きなオリジナル粒子の付着・反発挙動を再現できることを示している。以上の説明から分かるように RPS スケールは付着力がどのような関数であっても適用することができ、線形モデルと一定値の粒子間付着力に対して、RPS スケールは 4.1 節の動的付着力モデルに一致する。

非線形ばねに対して RPS スケールを用いて、液架橋による付着力が働く場合のミキサー内の粒子挙動を計算した例を図 8 に示す。粒子としては 2 mm のポリマー粒子が想定されており、ヤング率は 10GPa (Original) である。ヤング率を 5MPa まで低減した計算結果 (Scaled) は Original の計算結果をよく表し、図 8 に示すように粒子速度の確率密度関数についても非常に良い一致を示すことがわかる。

5 おわりに

粉粒体挙動の DEM シミュレーションを行う場合に、離散粒子シミュレーションの基礎を理解しておくことが重要であることを述べ、この考え方が付着力を有する場合のモデル化に有効であることを示した。

ここで示した動的付着力モデルおよび RPS スケールの考え方は、剛体粒子モデル的な衝突に基づいて行われているが、図 7 に示したような必ずしも衝

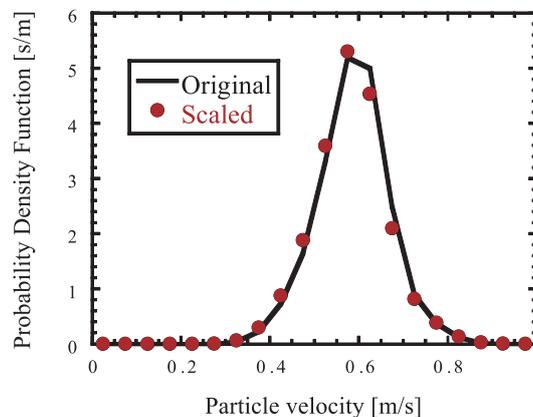
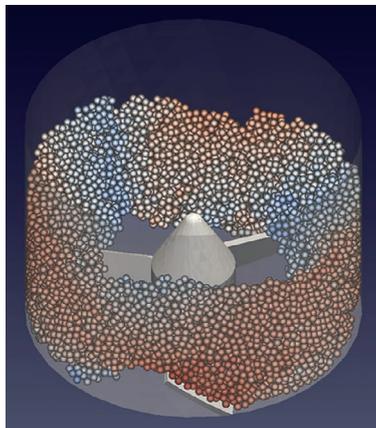


図8 液架橋による付着力を有する場合の混合器内の粒子挙動 (左) と粒子速度の確率密度分布 (右)
 Fig. 8 Snapshot of particles in mixer (left) and probability density function of particle velocity (right).

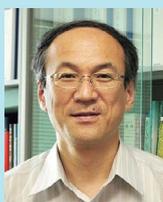
突支配流動とはみなせない場合にも有効であることは興味深い。現時点で、このような衝突支配とはみなせないような挙動に対するこれらのモデルの有効性については、まだ理論的な検証が行われていない。

今後、この分野のモデリングがさらに発展し、多様な物理を含む粉粒体挙動の予測と解明が進むことに期待する。

References

- Anderson T.B., Jackson R., A fluid mechanical description of fluidized beds, Equations of motion, Industrial & Engineering Chemistry Fundamentals, 6 (1967) 527–539. <https://doi.org/10.1021/i160024a007>
- Cundall P.A., Strack O.D.L., A discrete numerical model for granular assemblies, Géotechnique, 29 (1979) 47–65. <https://doi.org/10.1680/geot.1979.29.1.47>
- Hertz H., über die Berührung fester elastischer Körper, Journal für die reine und angewandte Mathematik, 92 (1881) 156–171. <<http://eudml.org/doc/148490>> accessed 28.08.2019.
- Johnson K.L., Contact Mechanics, Cambridge University Press, 1985. <https://doi.org/10.1017/CBO9781139171731>
- 川口 寿裕, 田中 敏嗣, 辻 裕, 離散要素法による流動層の数値シミュレーション (噴流層の場合), 日本機械学会論文集, 58-551B (1992) 2119–2125. <https://doi.org/10.1299/kikaib.58.2119>
- Kobayashi T., Tanaka T., Shimada N., Kawaguchi T., DEM–CFD analysis of fluidization behavior of Geldart Group A particles using a dynamic adhesion force model, Powder Technology, 248 (2013) 143–152. <https://doi.org/10.1016/j.powtec.2013.02.028>
- Mindlin R.D., Compliance of elastic bodies in contact, Journal of Applied Mechanics ASME, 16 (1949) 259–268.
- 田中 敏嗣, 石田 俊哉, 辻 裕, 水平管内粒状体プラグ流の直接数値シミュレーション (付着力がない場合), 日本機械学会論文集, 56-534 B (1991) 3210–3216. <https://doi.org/10.1299/kikaib.57.456>
- 田中 敏嗣, 川口 寿裕, 計算機粉体工学の課題と展望 :7. 粒子流動化挙動の DEM-CFD カップリングシミュレーション, 粉体工学会誌, 49-11 (2012) 837–845.
- Tsuji Y., Tanaka T., Ishida T., Lagrangian numerical simulation of plug flow of cohesionless particles in a horizontal pipe, Powder Technology, 71 (1992) 239–250. [https://doi.org/10.1016/0032-5910\(92\)88030-L](https://doi.org/10.1016/0032-5910(92)88030-L)
- Tsuji Y., Kawaguchi T., Tanaka T., Discrete particle simulation of two-dimensional fluidized bed, Powder Technology, 77 (1993) 79–87. [https://doi.org/10.1016/0032-5910\(93\)85010-7](https://doi.org/10.1016/0032-5910(93)85010-7)
- Washino K., Chan E. L., Tanaka T., DEM with attraction forces using reduced particle stiffness, Powder Technology, 325 (2018) 202–208. <https://doi.org/10.1016/j.powtec.2017.11.024>

〈著者紹介〉



田中 敏嗣 Toshitsugu TANAKA

〔経歴〕 1984年3月 大阪大学大学院工学研究科産業機械工学専攻 博士前期課程修了。同年4月より助手。1996年6月より同准教授, 2003年4月より現職。

〔専門〕 固気二相流動および粉粒体流動に関する研究。

〔連絡先〕 tanaka@mech.eng.osaka-u.ac.jp



鷺野 公彰 Kimiaki WASHINO

〔経歴〕 2007年3月 大阪大学大学院工学研究科機械工学専攻博士前期課程修了。2011年3月 The University of Sheffield, Department of Chemical & Biological Engineering, PhD 課程修了。同年4月より The University of Sheffield / Procter & Gamble, KTP Associate。2013年1月より 大阪大学大学院工学研究科機械工学専攻 助教, 2018年1月より現職。

〔専門〕 固気液三相流のモデリング, とくに造粒に関する研究。

〔連絡先〕 washino.k@mech.eng.osaka-u.ac.jp