

令和 2 年 6 月 5 日現在

機関番号：14401

研究種目：若手研究

研究期間：2018～2019

課題番号：18K13690

研究課題名（和文）高粘度の液と粉体の相互作用を考慮したDEMシミュレーション

研究課題名（英文）DEM simulation considering the interactions between particles and highly viscous liquid

研究代表者

鷲野 公彰（Washino, Kimiaki）

大阪大学・工学研究科・講師

研究者番号：10726384

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 3,200,000円

研究成果の概要（和文）：本研究では、高粘度の液で濡れた粒子の離散要素法（DEM）による数値シミュレーションを可能とするためのモデル開発を行った。産業で用いられる高粘度の液体はべき乗則流体であることがしばしばあるため、べき乗則流体の液架橋により粒子に働く粘性力の開発を行いその妥当性を確認した。また、DEMは非常に計算負荷の大きなシミュレーション手法であり、現実的な系に適用するためには計算負荷の低減が必要不可欠である。この問題を解決するため、粘性力に対する半理論解を用いた積分スキームと、粒子剛性を低減する手法をそれぞれ開発した。これらにより、計算精度を落とすことなく、効率的にシミュレーションを行うことが可能となった。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本研究で得られたモデルを用いることにより、これまで不可能であった高粘度の液で濡れた粒子のDEMシミュレーションを、現実的な時間スケールで行うことが可能となった。これにより、例えば液で濡れた粉体の分散メカニズム解明のような様々な知見を得ることができ、学術的に非常に意義があると言える。また、粉体ハンドリングプロセス中に起こる様々な問題についてシミュレーションを行うことで、問題解決の方法を提案やプロセスの最適化に役立つと考えられる。このことは、国民の手にわたる粉体関連製品の品質向上や低価格化につながり、社会的にも意義のあるものである。

研究成果の概要（英文）：In this research, several simulation models are developed to enable computer simulation of wet particles with highly viscous liquid using Discrete Element Method (DEM). Since highly viscous liquids used in industry are often power-law fluid, the viscous force models for liquid bridge of power-law fluid between particles are developed. DEM is a computer intensive method and it is crucial to reduce the computational cost to simulate industrial scale systems. In order to overcome this problem, the semi-theoretical integration scheme for viscous force as well as the reduced particle stiffness method are proposed. It is proven that these models make it possible to perform DEM simulation efficiently without sacrificing the accuracy.

研究分野：粒子系混相流の数値シミュレーション

キーワード：離散要素法 液架橋力 高粘度 計算負荷低減

様式 C - 19、F - 19 - 1、Z - 19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

粉体に高粘度の液を少量付加すると個々の粒子間に液架橋が形成され、液架橋力により攪拌機内の粉体の流動様式が大きく変化する。それに伴い粒子凝集体の非一様なサイズ分布や壁面付近での粒子の堆積が起き、最終的に得られる製品の品質低下や製造効率の低下を引き起こすことが深刻な問題となっている。このように、高粘度の液を付加することによる粉体挙動の変化、さらにそれが粉体内への液分散に与える影響について理解することは産業的に重要であるのみならず、物理的にも大変興味深いものであるが、粒子 - 液体間の相互作用は非常に複雑であることに加え、実験により粉体内部を直接観測することは容易ではなく、そのメカニズムは十分に理解されていない。

近年の計算機の発達により、攪拌機内の粉体のシミュレーションも行われるようになっており、その中でも粒子個々の運動を追跡する離散要素法 (DEM) は特に広く用いられている。DEM を用いることで実験では観測することの難しい粒子レベルの情報を得ることができるため、液と粒子の相互作用や粉体の流動メカニズムの解明といった学術的に意義のある知見の獲得が期待されている。しかし、これまでに DEM を用いて高粘度の液で濡れた粉体の流れを解析した例はほとんど報告されていない。

2. 研究の目的

高粘度の液で濡れた粒子の DEM シミュレーションを行うためには、(i) 精度の良い液架橋力モデルと、(ii) 計算負荷の低減手法が重要である。液架橋力は表面張力に起因するキャピラリ力と、液粘度および粒子間相対運動に起因する粘性力に大別される。粘性力は潤滑力とも呼ばれ、高粘度の液で濡れた粒子を扱う系ではこの力が支配的となるため、精度の良い粘性力モデルの開発が望まれている。また、DEM は非常に計算負荷の大きなシミュレーション手法であり、現実的な系に適用するためには計算負荷の低減が必要不可欠である。本研究では、これらの問題を解決し、高粘度の液で濡れた粒子の DEM シミュレーションを可能とするためのモデルを開発することを主な目的とした。

3. 研究の方法

本研究では、(i) 精度の良い粘性力モデル開発と、(ii) 計算負荷の低減手法の開発をそれぞれ行った。それぞれの方法について、概要を以下に述べる。

(i) 精度の良い粘性力モデル開発

粒子間に液架橋が形成されているとき、粒子が相対運動をすると液架橋内に圧力分布が生じる。これまで筆者により、粒子の相対運動の種類に応じてレイノルズの潤滑理論から液架橋内部圧力分布を表現する微分方程式を導出し、それを近似的に解くことにより粒子に働く粘性力を求める方法が提案されている。また、産業で用いられる高粘度の液体は、そのレオロジー特性がべき乗則で近似できる、いわゆるべき乗則流体であることがしばしばある。そのため、上記の方法をべき乗則流体の液架橋に拡張し、粒子が法線方向に並進する場合、接線方向に並進する場合、回転する場合の 3 つの条件について粘性力モデルの開発を行った。また、直接数値計算 (DNS) により粒子に働く粘性力を直接評価し、モデルによる予測値と比較することでその妥当性を検証した。

(ii) 計算負荷の低減手法の開発

DEM の計算負荷を低減するために、半理論解による積分スキームの開発および粒子剛性低減手法の開発を行った。一般的に、DEM では陽解法の積分スキーム (例えば、Velocity Verlet 法) が用いられることが多い。しかし、計算を安定に行うためには、粘性力や接触力による現象の代表時間 (例えば、速度減衰の緩和時間や弾性波の伝播時間) に対して十分に小さな時間刻みを選択する必要がある。液粘度が大きく緩和時間が短い場合や、粒子剛性が高く弾性波の伝播が速い場合には時間刻みが非常に小さくなり、計算に膨大な時間が必要となる。そこで、粘性力に対しては、2 体問題をベースにした半理論解を用いた積分スキームを、接触力に関しては粒子剛性低減法をそれぞれ開発することで、大きな時間刻みで計算を安定に行う手法を提案した。

4. 研究成果

4.1. 液架橋力モデルの開発

粒子が法線方向に並進、接線方向に並進および回転運動をしている際に、べき乗則流体の液架橋により粒子に働く粘性力モデルの開発を行った。開発されたモデルおよび直接数値計算 (DNS) により得られた、無次元化された粘性力と粒子間距離の関係を Figure 1 に示す。これより、開発モデルが粘性力を比較的良好に表現できていることがわかる。Figure 1 はべき乗則指数が 1 より小さい shear-thinning 流体の結果であるが、このモデルはべき乗則指数が 1 より大きな shear-

thickening 流体に対しても適用可能である．しかし，法線方向力モデルについては粒子間距離が大きい場合に，接線方向並進および回転モデルについては粒子間距離が小さい場合に，DNS の結果と少し差があることがわかる．これらの差が生じる原因についてより詳細に検討を行うことでモデル精度の向上が期待できるが，これについては今後の検討課題である．

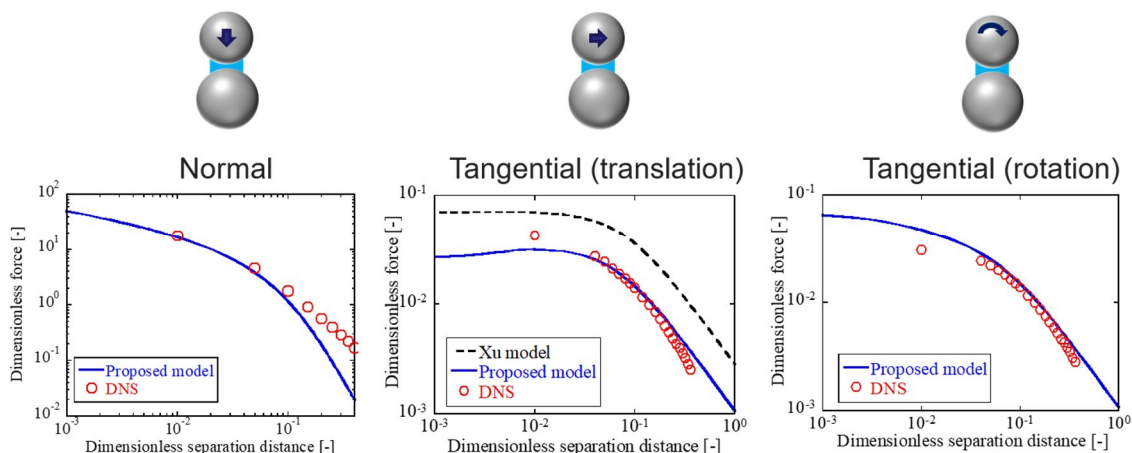


Figure 1. Relationship between dimensionless viscous force and separation distance when particles are in (left) normal, (middle) tangential and (right) rotational motions.

4.2. 粘性力に対する半理論解積分スキーム

粒子間に粘性力のみが働く場合の速度減衰の緩和時間は液粘度に反比例する．したがって，高粘度の液を使用した場合，安定な計算を行うために必要な時間刻みが小さくなり，計算に膨大な時間がかかることになる．高粘度の液を用いた場合に大きな時間刻みを用いてシミュレーションを行うために，半理論解を用いた積分スキームの開発を行った．この手法では，粒子の運動方程式を Fractional step 法を用いて解く．まず，粒子に働く粘性力以外の力（例えば，接触力，流体力，キャピラリ力，重力等）については，従来の陽解法積分スキームを適用する．その後，粘性力のみを考慮した 2 粒子間の運動方程式を理論的に解き，粒子速度を逐次更新する．すなわち，この方法は多体問題を連続する 2 体問題と近似して解くことと等価である．開発された手法の妥当性を検証するため，Figure 2 に示すミキサー内の乾燥および液で濡れた粒子挙動の DEM シミュレーションを行った．使用した粒子径は 1.29 mm，密度は 1058 kg/m³，液粘度は 5 Pa.s である．この系を安定に計算するために，従来手法を用いた場合の時間刻みは，粒子間接触力により求まる時間刻み Δt_{dry} よりも約 100 倍小さくする必要がある．しかし，提案手法を用いることで，時間刻みが $0.1\Delta t_{dry}$ もしくは Δt_{dry} の場合でも，安定に計算を行うことが可能であることがわかる．また，得られた粒子速度の分布は，従来手法で小さな時間刻みを用いた場合とよい一致を示している．これにより，開発された積分スキームにより，精度を落とすことなく効率的にシミュレーションを行えることが確認できた．

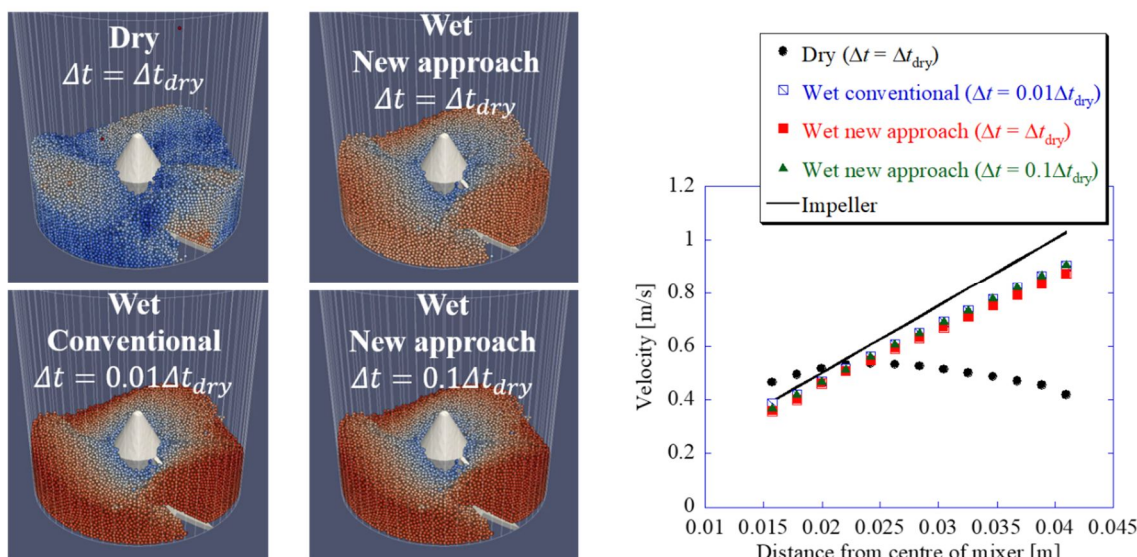


Figure 2. Simulation of dry and wet particles with viscous liquid using conventional and fast integration schemes.

4.3 粒子剛性低減法

一般にDEMでは、粒子間接触力により求まる時間刻みはRayleigh時間を基準にして求めることが多い。Rayleigh時間は粒子剛性の平方根に反比例するため、粒子剛性が大きいと安定なシミュレーションを行うために必要な時間刻みが小さくなる。この問題を解決するため、粒子剛性低減法の開発を行った。この方法では、粒子剛性を実際の物性値より小さな値を用い、粒子間の接触時間を疑似的に大きくすることで時間刻みを大きくする手法である。しかし、粒子間に粘性力が働く場合、単純な粒子剛性の低減は付着の効果を強調するということが、本研究により明らかになった。この問題を解決するため、粒子剛性の低減に合わせて粘性力のスケールリングを行う方法を提案した。このとき、実粒子と剛性低減された粒子の間で無次元化された粒子並進運動の方程式が一致するように粘性力のスケールリングを行う。言い換えると、粒子の衝突・反発時のエネルギーの減衰量が同じになるように粘性力はスケールリングされ、この手法をReduced Particle Stiffness (RPS) スケールリングと呼ぶこととする。RPSスケールリングの妥当性を検証するために、Figure 3に示すミキサー内粒子挙動のシミュレーションを行った。粒径は2 mm、密度は100 kg/m³、粒子間には粘性力が働いており、液粘度は0.6 Pa·sである。実粒子のヤング率は10 GPaであり、粒子剛性の低減率は2000とした。Figure 3を見ると、粒子剛性を単純に低減した場合は付着の効果が強調されるために、速度の確率密度関数の分布が右にシフトしているが、実粒子およびRPSスケールリングを適用した場合は分布がほぼ一致している。これより、提案するRPSスケールリングの妥当性が確認された。

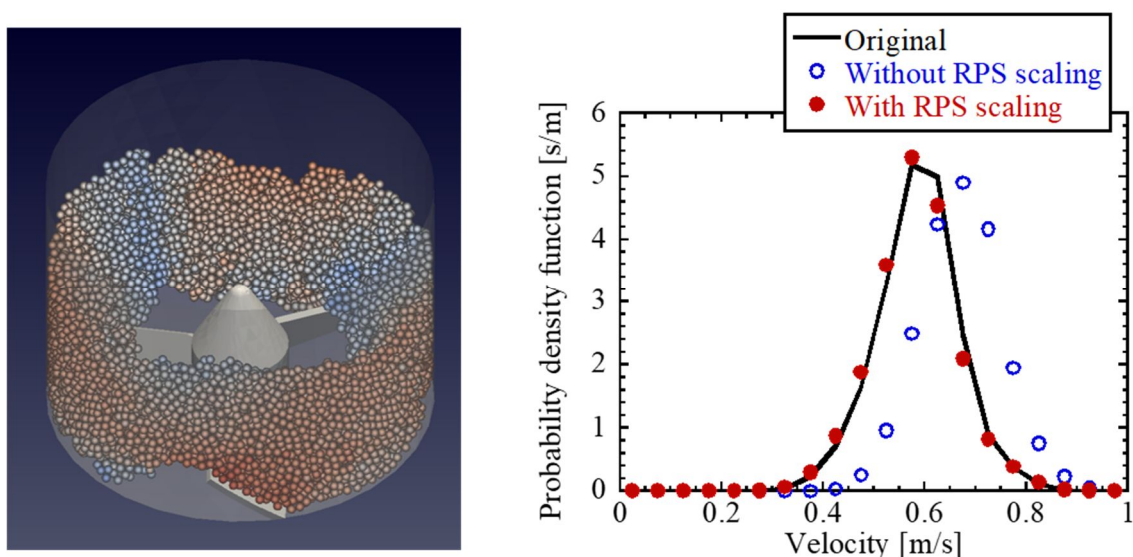


Figure 3. Simulation of wet particles in a mixer using RPS scaling.

また、本研究では、粒子回転方向の運動方程式を無次元化することにより、並進運動の場合と同様のスケールリングを導出することに成功した。これにより、提案するRPSスケールリングが並進および回転する粒子を扱う一般的な系に対しても有効であることを証明することができた。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計0件

〔学会発表〕 計8件（うち招待講演 0件 / うち国際学会 5件）

1. 発表者名 鷲野 公彰, Chan Ei Leen, 田中 敏嗣
2. 発表標題 液中濡れた粒子のDEMシミュレーション
3. 学会等名 粉体工学会 第54回技術討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Kimiaki Washino, Ei L. Chan, Junpei Uno, Takuya Tsuji, Toshitsugu Tanaka
2. 発表標題 DEM-CFD model for gas-liquid-solid flows with complex wall boundaries
3. 学会等名 8th International Conference on Discrete Element Method (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Ryosuke Yamagami, Kimiaki Washino, Ei L. Chan, Takuya Tsuji and Toshitsugu Tanaka
2. 発表標題 Reduction of particle stiffness in DEM simulation considering attraction force
3. 学会等名 Asian Pacific Confederation of Chemical Engineering 2019 (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Giang Nguyen, Kimiaki Washino, Takuya Tsuji and Toshitsugu Tanaka
2. 発表標題 Volume penalization method for gas-liquid-solid flows with immersed free surface
3. 学会等名 Asian Pacific Confederation of Chemical Engineering 2019 (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 南山 拓海, 鷲野 公彰, 田中 敏嗣, 辻 拓也
2. 発表標題 界面相互作用を考慮したDNS-DEM気液固三相モデル開発
3. 学会等名 第25回流動化・粒子プロセッシングシンポジウム
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Washino, K.
2. 発表標題 DEM Simulation with Scale-up Particles
3. 学会等名 AIChE annual meeting 2018 (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Washino, K.
2. 発表標題 DEM Simulation with Reduced Particle Stiffness
3. 学会等名 8th World Congress on Particle Technology (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 鷲野 公彰
2. 発表標題 弾性率を下げた粒子を用いたDEMシミュレーション - 粒子間付着力を考慮した場合について -
3. 学会等名 粉体工学会春期研究発表会
4. 発表年 2018年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
--	---------------------------	-----------------------	----