

科学研究費助成事業 研究成果報告書

令和 5 年 5 月 29 日現在

機関番号：14401

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2020～2022

課題番号：20K11850

研究課題名(和文) 固体・流体状態の粉粒体に対する粗視化離散要素モデルの開発

研究課題名(英文) Development of DEM scaled-up particle model for solid-state and fluid-state particulate flows

研究代表者

鷲野 公彰 (Washino, Kimiaki)

大阪大学・大学院工学研究科・講師

研究者番号：10726384

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,400,000円

研究成果の概要(和文)：本研究では、実工業プロセスにおける粉粒体の離散要素シミュレーションを高速に行うため、径の大きな粒子を用いて実粒子の挙動を模擬する粗視化モデルの開発を行った。開発された粗視化モデルは粉粒体を連続体として近似することにより導出され、固体状態・流体状態の粉粒体挙動を良好に再現できることが示された。また、より現実に近い系のシミュレーションを可能にするため、粒子に働くトルクのスケーリング則や、非球形・多分散系の粗視化モデルの開発を行い、その妥当性について議論を行った。

研究成果の学術的意義や社会的意義

今日の産業で使用されている工業原料の3/4以上は粉粒体であり、工業製品の50%以上は粉粒体、もしくは製造過程で粉粒体を經由している。粉粒体挙動を数値シミュレーションにより理解することは工業的に利用価値が高いだけでなく、物理的にも非常に興味深いものである。本研究で開発された粗視化モデルにより、実工業プロセスで利用されている粉粒体の挙動を、現実的な計算時間で精度良くシミュレーションすることが可能となった。これらのシミュレーションを行うことで、多くの工業プロセスの最適化や品質向上、問題点の改善などが期待され、社会的意義は非常に大きいと言える。

研究成果の概要(英文)：In this work, a scaled-up particle model for Discrete Element Method (DEM), which is sometimes referred to as the coarse grain model, is developed to simulate a particulate flow in an industrial scale process. The model is based on the continuum assumption of an arbitrary flow and can be used to simulate particles in both solid-like and fluid-like states. A scaling law for particle torques is also derived from the same concept. In addition, it is proven that the same theory can be directly reapplied to non-spherical and poly-dispersed particles. Many simulations are performed to discuss the validity of the scaled-up particle model developed.

研究分野：粉体工学

キーワード：粗視化モデル 離散要素法 (DEM) 計算高速化 非球形粒子 多分散系

1. 研究開始当初の背景

今日の産業で使用されている工業原料の3/4以上は粉粒体であり、工業製品の50%以上は粉粒体、もしくは製造過程で粉粒体を經由している。また、粉粒体はそれを構成する一つ一つの固体粒子を分子と置き換えて考えることにより、固体または流体に相当する状態が存在することが知られている。粉粒体挙動を理解することは工業的に利用価値が高いだけでなく、物理的にも非常に興味深いものであるが、混合度・滞留時間・応力鎖分布といった詳細な情報を実験により計測・評価することは一般的に困難である。

近年の計算機の発達により、粉粒体のシミュレーションが広く行われるようになってきた。その中でも、粒子個々の運動を詳細に追跡する離散要素法 (DEM) は、実験では観測することの難しい微視的な情報を得ることができるため、特に広く用いられている。しかし、DEMは非常に計算負荷の大きな手法であり、現在の高性能コンピュータを用いても、現実的に計算できる粒子数は十億個 ($\sim 10^9$) 程度のオーダーであると言われている。一方、工業プロセス内で扱う粒子数は千兆個 ($\sim 10^{15}$) を優に超えることも珍しくなく、実質的にシミュレーションをすることが不可能である。

この問題を解決するために近年注目を浴びているのが、径の大きな粒子を用いて実粒子の挙動を模擬する粗視化モデルである (Fig. 1)。しかし、径の小さな粒子と大きな粒子は、個々の質量や接触面積などの微視的パラメータが異なるため、実粒子の挙動を模擬するためには粗視化粒子に働く種々の力を適切にスケールリングする必要がある。これまで、多くの研究者によって様々な力のスケールリング則が提案されてきたが、その物理的意味や適用範囲については十分な検証がなされていなかった。

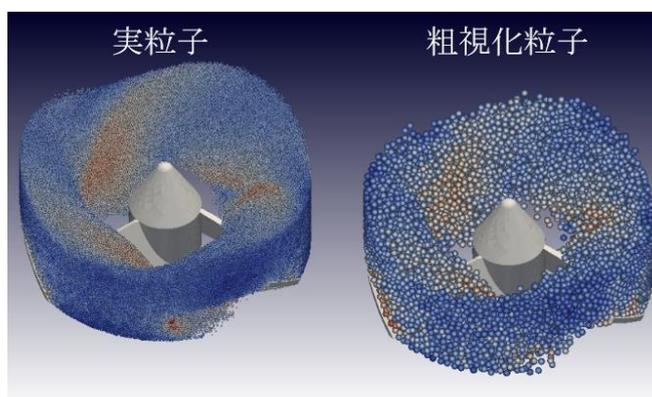


Fig. 1. Example of scaled-up DEM simulation.

2. 研究の目的

一般的な系の DEM シミュレーションを行うためには、粉粒体が固体状態、流体状態、もしくはそれらが混在する系に対しても適用できる粗視化モデルを用いる必要がある。また、実工業プロセスで使用される粉粒体は、付着性や非球形性など複雑な特性を有することが多く、これらを考慮したモデル開発が必要不可欠である。本研究では、粉粒体を連続体とみなし、気体分子運動論とのアナロジーより導かれる粗視化モデルの開発を行い、その妥当性や適用範囲について詳細に調査することを目的とする。

3. 研究の方法

本研究は、(1) 実粒子変数評価方法の検討、(2) 粒子トルクのスケールリング則開発、(3) 非球形粒子・多分散系の粗視化シミュレーションに大別される。それぞれの項目について詳細を以下に示す。

(1) 実粒子変数評価方法の検討

粗視化モデルでは、まず実粒子に働く力を推定し、それをスケールリングしたものを粗視化粒子に作用させることで実際の粉粒体挙動を模擬する。一般的に、粒子に働く接触力や付着力は粒子速度や粒子オーバーラップ量といった変数の関数として与えられる。しかし、粗視化シミュレーションでは実粒子を陽的には取り扱わないため、粗視化粒子変数から実粒子変数の値を評価する必要がある。ここでは、実粒子変数と粗視化粒子変数の関係について、連続体近似による理論的導出を行った。

(2) 粒子トルクのスケールリング則開発

DEM では、粒子同士の接触判定を高速に処理できるという利点から、球形の粒子を用いてシミュレーションが行われることが多い。球形粒子では粒子間に働く法線方向 (接触表面に垂直な

方向)の力は、粒子回転運動に寄与しない。一方、非球形粒子では、法線方向力によるトルクが発生するため、球形粒子とは異なる回転運動が見られることが多い。この粒子非球形性に起因するトルクを簡易的に考慮するために、接触による転がり摩擦モデルがしばしば用いられる。ここでは、粒子に働くトルクに関するスケーリング則を理論的に導出し、転がり摩擦を考慮した粗視化シミュレーションを行った。

(3) 非球形粒子・多分散系の粗視化シミュレーション

工業プロセスで実際に使用されている粉粒体は非球形粒子から成り、異なる組成を持つ粒子混合物である場合が多い。より現実に近い系のシミュレーションを可能にするために、これまでに得られた粗視化モデルの理論を非球形粒子かつ多分散系に拡張することを試みた。非球形粒子の表現には Superquadric モデル (粒子表面位置を関数により陰的に表現するモデル) および Multisphere モデル (1つの非球形粒子を複数の球集合体として表現するモデル) の2種類を用い、様々な形状を持つ粒子の粗視化シミュレーションを行った。

4. 研究成果

(1) 実粒子変数評価方法の検討

Fig. 2 に示すように、同体積の実粒子と粗視化粒子を検査体積 (CV) の中に入れることを考える。このときの粗視化率 (粗視化粒子径を実粒子径で除したものを l とすると、粗視化粒子数は実粒子数の $1/l^3$ 倍となる。粉粒体が連続体として近似された場合、CV 内の粒子は偏りなく一様に分布していると考えべきである。この仮定が成り立つためには、粒子間オーバーラップ量や粒子間距離に対して、実粒子と粗視化粒子の間に幾何学的相似関係が必要となることが明らかとなった。

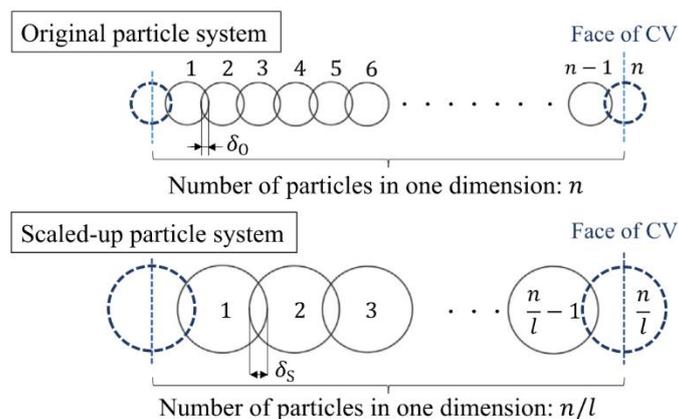


Fig. 2. Geometric similarity in control volume (1-dimension). δ is the particle overlap, and the subscripts O and S denote the original and scaled-up systems, respectively.

この幾何学的相似の考え方により実粒子変数評価を行い、粉粒体の一軸圧縮 (Fig. 3) およびミキサー内付着性粉体 (Fig. 4) の粗視化シミュレーションを行った。Fig. 3 は準静的で接触力支配の系、Fig. 4 は動的で粒子が流動化している系であるが、どちらの場合でも開発した粗視化モデルが実粒子の結果を良好に再現できていることが見て取れる。このことから、本研究で開発された粗視化モデルが、固体状態および流体状態両方で適用可能であることが示された。また、これらの結果をまとめて論文発表を行った (Y. Hu et al., Powder Technol., 404, 117483 (2022), <https://doi.org/10.1016/j.powtec.2022.117483>)。

(2) 粒子トルクのスケーリング則開発

前節同様に粉粒体を連続体として近似し、隣接する CV 同士での角運動量交換量が実粒子と粗視化粒子で同一になるように、粗視化粒子に働くトルクをスケーリングすることを考える。これにより、粒子トルクに対する l^2 スケーリング則を理論的に導出することができた。開発されたモデルを用い、転がり摩擦を考慮したミキサー内付着性粉体の粗視化シミュレーションを行った (Fig. 5)。ここで使用した計算条件は Fig. 4 のものと同じであるが、大きな転がり摩擦係数 ($\mu_r = 0.4$) を与えているために粒子の回転が抑制されている。その結果、速度分布に大きな変化があることが見て取れ、粗視化粒子が実粒子流動を良好に模擬していることがわかる。これらの結果より、開発された粒子トルクスケーリング則の妥当性を確認することができた。

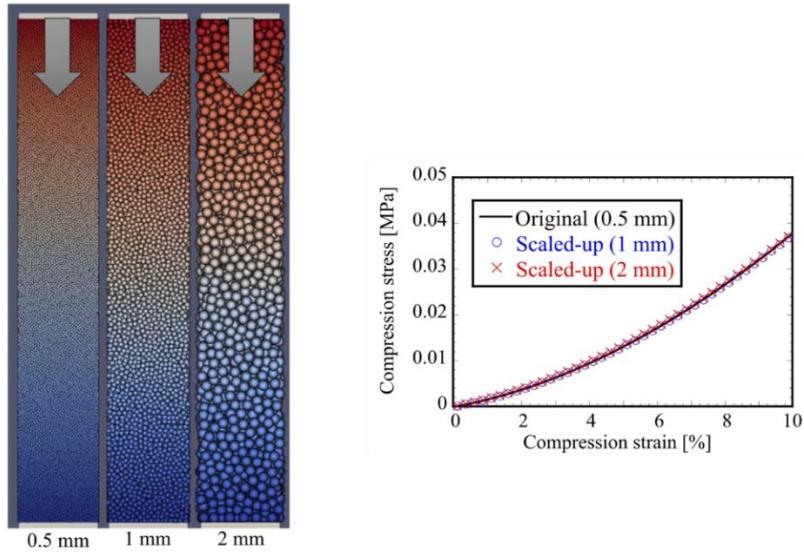


Fig. 3. Simulation of uniaxial compression.

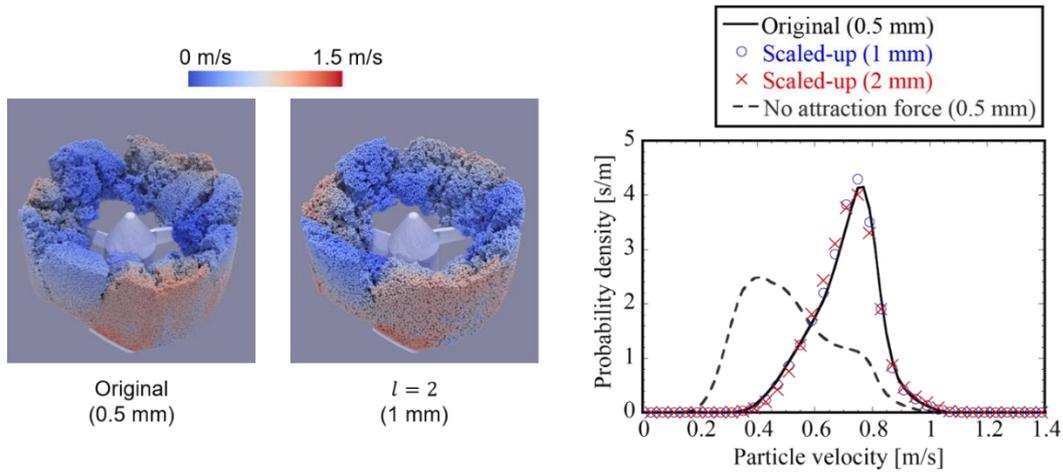


Fig. 4. Simulation of cohesive particles in a vertical mixer.

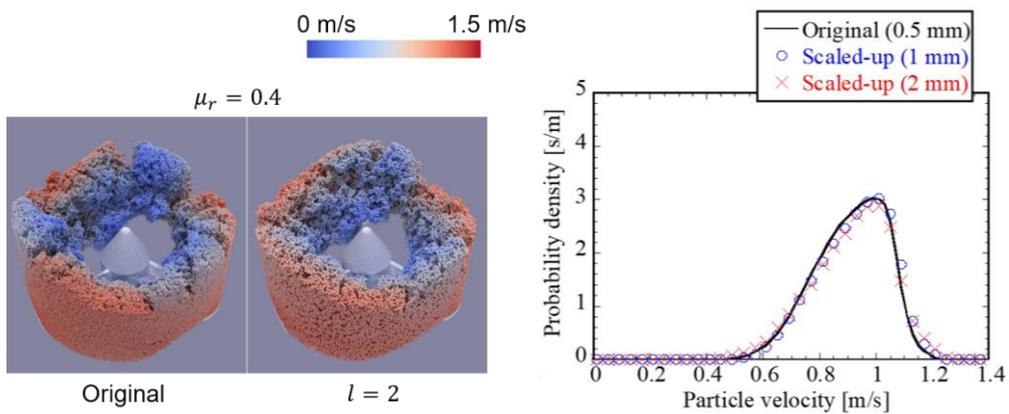


Fig. 5. Simulation of cohesive particles in a vertical mixer with rolling resistance.

(3) 非球形粒子・多分散系の粗視化シミュレーション

前節までで開発された粗視化モデルは、単分散の球形粒子を対象としたものであったが、同様の考え方により非球形粒子かつ多分散系の粗視化モデルを導出することができる。このモデルは、理論的にはどのような粒子形状モデルに対しても適用が可能である。Fig. 6は、ミキサー内附着性粉体のシミュレーションであり、ロッド粒子と球粒子をそれぞれ異なる比率で一樣混合している。粒子形状の表現には Superquadric モデルを用いている。これらの結果より、ロッド粒子が球粒子よりも大きな速度で運動することがわかり、混合比率を変えたときの実粒子速度の

変化を粗視化粒子で良好に再現できることが示された。

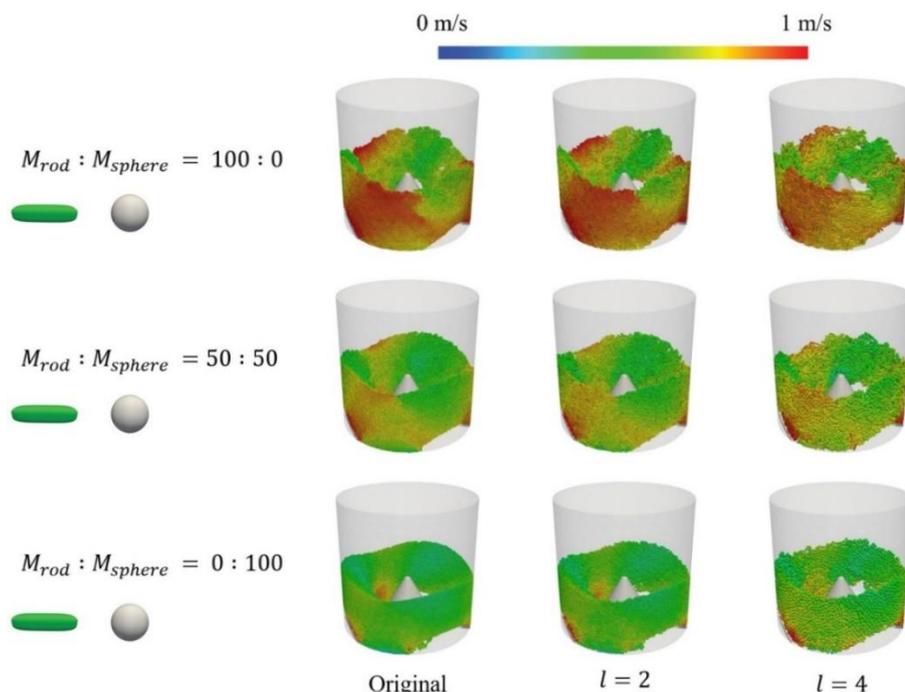


Fig. 6. Simulation of cohesive particles in a vertical mixer with different values of mass ratio of rod and spherical particles.

Fig. 7 は、V型ミキサー内附着性粉体のシミュレーションである。棒状とチップ状の2種類の粒子を Multisphere モデルによって表現している。これらの粒子は計算開始時点では形状ごとに2層に分かれており、ミキサーの回転により時間とともに混合される。実粒子と粗視化粒子で、混合の様子や各形状の粒子平均位置がほぼ一致していることが見て取れる。Fig. 6 および Fig. 7 より、開発された粗視化モデルが、どのような粒子形状モデルに対しても適用可能であることが示唆された。また、これらの結果をまとめて論文発表を行った (K. Washino et al., Powder Technol., In Press, <https://doi.org/10.1016/j.powtec.2023.118676>) .

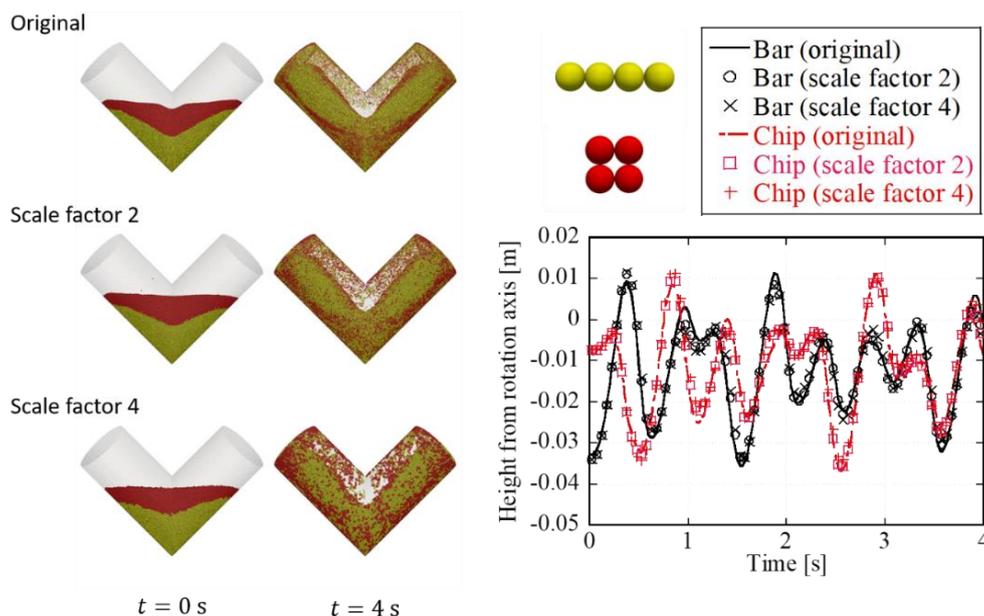


Fig. 7. Simulation of cohesive particles in a V-mixer with bar and chip particles.

本研究で開発された粗視化モデルにより、国内外の実工業プロセスで利用されている粉粒体の挙動を、現実的な計算時間で精度良くシミュレーションすることが可能となった。これらのシミュレーションを行うことで、多くの工業プロセスの最適化や品質向上、問題点の改善などが期待され、その社会的意義やインパクトは非常に大きいと言える。今後の展望としては、実験とシミュレーションの比較や、流体との連成などがある。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計2件（うち査読付論文 2件／うち国際共著 0件／うちオープンアクセス 0件）

1. 著者名 Hu Yuze, Chan Ei L., Tsuji Takuya, Tanaka Toshitsugu, Washino Kimiaki	4. 巻 404
2. 論文標題 Geometric similarity on interparticle force evaluation for scaled-up DEM particles	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Powder Technology	6. 最初と最後の頁 117483 ~ 117483
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1016/j.powtec.2022.117483	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Washino Kimiaki, Chan Ei L., Nishida Yukiko, Tsuji Takuya	4. 巻 In Press
2. 論文標題 Coarse grained DEM simulation of non-spherical and poly-dispersed particles using Scaled-Up Particle (SUP) model	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Powder Technology	6. 最初と最後の頁 118676 ~ 118676
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1016/j.powtec.2023.118676	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

〔学会発表〕 計9件（うち招待講演 2件／うち国際学会 5件）

1. 発表者名 Kimiaki Washino, Ei L. Chan, Yuze Hu, Takuya Tsuji, Toshitsugu Tanaka
2. 発表標題 A universal scaled-up particle model for DEM simulation
3. 学会等名 Advances in Powder Technology（招待講演）（国際学会）
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Kimiaki Washino, Yuze Hu, Ei L. Chan, Takuya Tsuji, Toshitsugu Tanaka
2. 発表標題 DEM simulation of cohesive particles using scaled-up particle model
3. 学会等名 World Congress on Particle Technology（国際学会）
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Kimiaki Washino, Giang T. Nguyen, Taichi Tsujimoto, Naoto Fujii, Ei L. Chan, Takuya Tsuji, Toshitsugu Tanaka
2. 発表標題 Resolved CFD-DEM Simulations of Three-Phase Flows Using Controlled Interface Models
3. 学会等名 7th International Conference on the Characterization and Control of Interfaces for High Quality Advanced Materials (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Kimiaki Washino, Yuze Hu, Ei L. Chan, Takuya Tsuji, Toshitsugu Tanaka
2. 発表標題 Geometric similarity on force evaluation for scaled-up particle model in DEM
3. 学会等名 AIChE Annual Meeting 2021 (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Kimiaki Washino, Giang T. Nguyen, Ei L. Chan, Takuya Tsuji, Toshitsugu Tanaka
2. 発表標題 Resolved CFD-DEM coupling model for gas-liquid-solid three-phase flows with controlled interfaces
3. 学会等名 The 8th Asian Particle Technology Symposium (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 鷲野 公彰, 辻 拓也
2. 発表標題 粗視化モデルを用いた付着性粒子の数値シミュレーション
3. 学会等名 2021年度第2回日本画像学会技術研究会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 鷲野 公彰, フー ユーゼ, チャン イーリーン
2. 発表標題 離散要素法における粗大粒子モデルの改良
3. 学会等名 第26回流動化・粒子プロセッシングシンポジウム
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 新原 史彬, 鷲野 公彰, 辻 拓也, 田中 敏嗣
2. 発表標題 付着性粒子群の固体相転移に関するスケーリング則
3. 学会等名 粉体工学会秋期研究発表会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 田中 晴也, 鷲野 公彰, 辻 拓也, 田中 敏嗣
2. 発表標題 粒子せん断流 DEM シミュレーションによる動的付着力モデルの検証
3. 学会等名 粉体工学会秋期研究発表会
4. 発表年 2020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

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8 . 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関
---------	---------