

オープンソース CFD-DEM を用いた 球形および非球形粒子挙動シミュレーション ～CFDEM[®] coupling を用いた流動層，固気液三相流， 安息角測定試験のシミュレーション～

Spherical and Non-spherical Particle Flow Simulations
using an Open Source CFD-DEM Code
～Simulation of fluidized bed, gas-liquid-solid three-phase flow and angle
of repose measurement tests using CFDEM[®] coupling～

首藤 史 Chikashi SHUTO

日鉄プラント設計株式会社
CAE ソリューション部
流体解析チーム チーフ 博士(水産科学)

抄 録

近年，計算機性能の向上，並びに商用ソフトやオープンソースの汎用性の向上を背景に，離散要素法 (DEM) を用いた粉体シミュレーションが盛んに行われるようになってい
る。さらに，DEM と流体解析 (CFD) を組み合わせることで，粉体シミュレーションがよ
り幅広い産業分野へ適用されるようになってい。本稿では，DEM と流体解析の連成解
析が可能なオープンソース CFDEM[®] coupling を用いた解析例を紹介する。二成分粒子の
流動層の解析では実験結果との比較から CFDEM[®] coupling で粒子の混合や偏析を精度良
く予測できることを確認した。また，非球形粒子を用いた安息角測定試験の解析では粉体
の安息角を粒子形状により任意の値に調整できることを確認した。

Abstract

In recent years, granular simulations using the Discrete Element Method (DEM) have
become increasingly popular due to improvements in computer performance and the
versatility of commercial and open source software. In addition, the combination of
DEM and Computational Fluid Dynamics (CFD) has enabled the application of granular
simulations to a wider range of industries. In this paper, several applications using the
open source CFD-DEM code CFDEM[®] coupling are presented. In the simulation of the
fluidized bed of two-component particles, CFDEM[®] coupling was able to predict the mixing
and segregation of particles with good accuracy in comparison with the experimental
results. In the simulation of the angle of repose measurement tests using non-spherical
particles, it was confirmed that the angle of repose of the particles can be adjusted to
an arbitrary value depending on the particle shape.

1 緒言

コンピュータ性能の格段の向上により、プラント設備、海洋・土木分野などにおいて離散要素法 (Discrete Element Method, DEM) を用いたシミュレーションが活発になってきている。DEM は粒子間の衝突を考慮した粒子挙動をシミュレーションする手法であり、連続体シミュレーション (Euler-Euler 法) では表現が困難な粒状体の粒度偏析や応力ネットワーク構造を算出できるという特徴をもつ。また、DEM と流体解析 (Computational Fluid Dynamics, CFD) や構造解析を組み合わせることで、製造プロセスから防災に関わる海底地盤の挙動検討に至る幅広い分野での DEM の適用が可能になってきている¹⁾。

しかしながら、実現象においては、扱う粒子数が億から兆のオーダーとなる事が多々ある。現在の計算機でその粒子数の DEM 解析を現実的な時間で実行するのは困難であるため、粒径を実際のものより大きくするなどして粒子数を減らすことで対応している。それでも DEM の計算には大規模高速計算機が必要となることから、ソルバーの並列化は不可欠と言える。この並列化への対応としては、商用ソフトの並列化ソルバー導入が最も手早いと考えられるものの、ソフト導入費用が高騰する問題があることから、これを解決するためにオープンソースを用いてソルバーを開発する流れが盛んになりつつある。

また、DEM では球形粒子を用いることが多いが、実際の粒子形状は非球形であるものが大半であるため、これら粒子挙動を高精度に把握するには、非球形粒子での検討が必要になる。

本稿では、まず流体-粒子連成解析に用いたオープンソース CFDEM[®]coupling²⁾ について概説した後、解析例として二成分粒子の気系流動層における粒子混合と偏析の解析および、伝熱や反応を伴う流動層の解析を紹介する。続いて、非球形粒子を球の集合体と超二次関数で表現した場合の解析例を紹介する。

2 オープンソース CFDEM[®]coupling の概要

CFDEM[®]coupling²⁾ は CFD-DEM 連成解析を可能としたオープンソースであり、OpenFOAM[®]³⁾ をベースとした CFD ソルバーと DEM ソフトウェア LIGGGHTS[®]⁴⁾ で構成されている。CFDEM[®]coupling では CFD-DEM 連成解析手法として二種類のソルバーが提供されている。一つは流体計算セルより粒子サイズが小さい場合に適用できるメゾスコピック法のもの、もう一つは流体計算セルより粒子サイズが大きい場合に適用できる埋め込み境界法のものである。ここではメゾスコピック法のソルバーについて説明する。埋め込み境界法については文献⁴⁾を参照されたい。

2.1 CFD の支配方程式

非圧縮性流れの支配方程式は局所体積平均を施した Navier-Stokes 方程式である。

$$\frac{\partial a_f}{\partial t} + \nabla \cdot (a_f \mathbf{u}_f) = 0 \quad (1)$$

$$\begin{aligned} & \frac{\partial (a_f \mathbf{u}_f)}{\partial t} + \nabla \cdot (a_f \mathbf{u}_f \mathbf{u}_f) \\ &= -a_f \nabla \frac{p}{\rho_f} + \nabla \cdot (a_f \nu_f \nabla \mathbf{u}_f) - \frac{\mathbf{R}_{pf}}{\rho_f} \end{aligned} \quad (2)$$

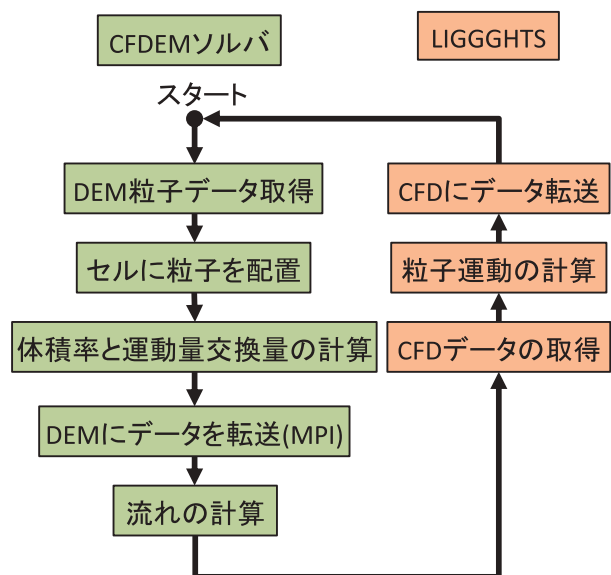


図1 CFDEM[®]coupling におけるメゾスコピック法の計算手順

Fig. 1 Calculation procedure for the mesoscopic method in CFDEM[®]coupling

ここで、 ρ_f は流体の密度、 a_f は流体の体積率、 \mathbf{u}_f は流速ベクトル、 p は圧力、 ν_f は動粘性係数、 \mathbf{R}_{pf} は粒子相との相互作用力である。 \mathbf{R}_{pf} は各流体計算セルで次式により計算される。

$$\mathbf{R}_{pf} = \frac{\sum_i \mathbf{F}_{i,f}}{V_{cell}} \quad (3)$$

ここで、 $\mathbf{F}_{i,f}$ は粒子に働く流体力で計算セル内にある全ての粒子の合計をとる。 V_{cell} は流体計算セルの体積である。

2.2 DEMの支配方程式

個々の粒子の運動は、並進と回転の運動方程式を解くことにより求められる。

$$m_i \frac{d\mathbf{u}_{p,i}}{dt} = \mathbf{F}_{i,n} + \mathbf{F}_{i,t} + \mathbf{F}_{i,f} + \mathbf{F}_{i,b} \quad (4)$$

$$I_i \frac{d\boldsymbol{\omega}_{p,i}}{dt} = \mathbf{r}_{i,c} \times \mathbf{F}_{i,t} + \mathbf{T}_{i,r} + \mathbf{T}_{i,f} \quad (5)$$

ここで、 m_i 、 $\mathbf{u}_{p,i}$ 、 $\boldsymbol{\omega}_{p,i}$ はそれぞれ粒子*i*の質量、粒子速度、角加速度である。 $\mathbf{F}_{i,n}$ 、 $\mathbf{F}_{i,t}$ は周囲の粒子や壁との接触により働く法線、接線方向接触力である。 $\mathbf{F}_{i,f}$ は粒子に働く流体力、 $\mathbf{F}_{i,b}$ は重力である。また、 I_i は慣性モーメント、 $\mathbf{r}_{i,c}$ は粒子の中心から接触点までの位置ベクトル、 $\mathbf{T}_{i,r}$ は転がり摩擦トルク、 $\mathbf{T}_{i,f}$ は流体トルクである。

法線方向、接線方向接触力はそれぞれ次式で表される。

$$\mathbf{F}_n = -k_n \boldsymbol{\delta}_n + c_n \Delta \mathbf{u}_n \quad (6)$$

$$\mathbf{F}_t = \min \left\{ \left| k_t \int_{t_c}^t \Delta \mathbf{u}_t dt + c_t \Delta \mathbf{u}_t \right|, \mu \mathbf{F}_n \right\} \quad (7)$$

ここで、 k_n 、 k_t は法線、接線方向のバネ係数、 c_n 、 c_t は法線、接線方向の減衰係数、 $\Delta \mathbf{u}_n$ 、 $\Delta \mathbf{u}_t$ は接触粒子間の法線、接線方向の相対速度、 $\boldsymbol{\delta}_n$ は接触粒子間の法線方向のオーバーラップ、 μ は摩擦係数である。

また、流体力(抗力、浮力、仮想質量力、揚力)のモデルは複数用意されており、既に組み込まれているモデルを参考にすれば、新たなモデルを組み込むことも容易である。

2.3 計算手順

図1にCFDEM[®]couplingにおけるメゾスコピッ

ク法の計算手順を示す。まずCFD側ではDEM粒子データ(粒子の中心座標値と速度)の受信後、流体計算セルに粒子を配置する。次に各流体計算セルにおける流体体積率 $a_f (= 1 - \text{粒子体積率})$ と粒子-流体間の運動量交換量(流体力)が計算され、流体力はDEM側に転送され、流体体積率と流体力は流体解析に用いられる。DEM側では、流体力の受信後、粒子運動を計算し、粒子の中心座標値と速度をCFD側へ転送する。ここで、CFDとDEM間のデータ送受信にはMPIが用いられている。

3 CFDEM[®]couplingを用いた CFD-DEM 連成解析事例

3.1 二成分粒子流動層の粒子混合と偏析の解析

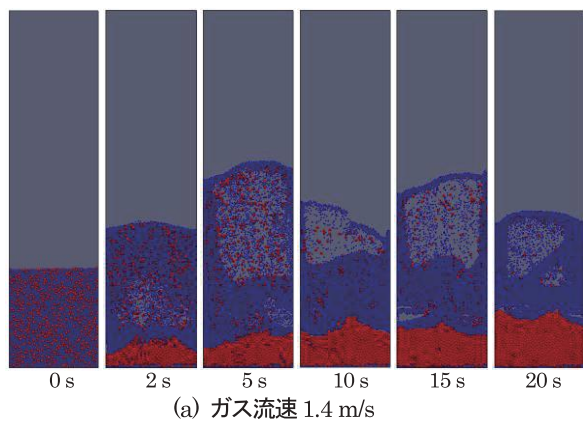
ここでは文献⁵⁾を参考にして実施した、矩形流動層における二種混合粒子の流動化シミュレーションについて紹介する。槽のサイズは幅が0.065m、高さが0.26m、奥行が0.0081mである。総粒子数は25000で、粒径1mm(小粒子)、粒径2mm(大粒子)がそれぞれ重量比50%ずつの割合で混ざった状態で存在している。ガスは底面から一様に送入される系である。シミュレーションに用いたパラメータおよび流体力モデルは文献⁵⁾と同じである。このシミュレーションはCFDEM[®]couplingが提供しているソルバーをそのまま使用すれば実施できる。

図2に流入ガス流速1.4と1.6m/sの時の粒子流動状態の時刻歴を示す。まず、ガス流速1.4m/sでは小粒子が層上部に、大粒子が層下部に偏在していることが確認できる。一方、ガス流速1.6m/sになると層全体が流動化し、層底部を除くと大小粒子が良く混合していることがわかる。

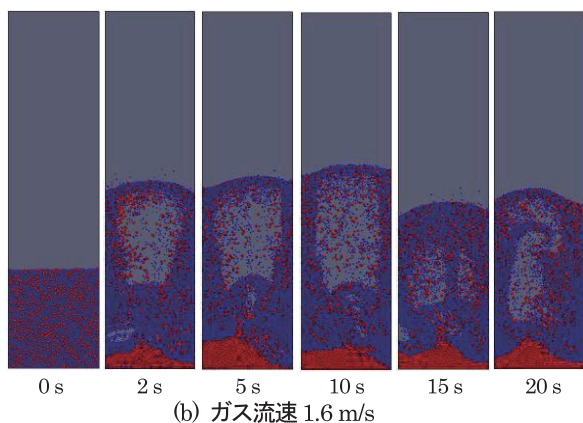
図3に実験と解析における粒子流動状態の比較を示す。実験の方は暗い色が小粒子、明るい色が大粒子である。この図から流入ガス流速による大粒子の層高さの違いが実験と解析で良く一致していることが確認できる。

3.2 伝熱を伴う流動層の解析

伝熱を伴う流動層を扱う場合、粒子間および粒子-壁間の接触および輻射伝熱や粒子-流体間の対流伝熱の考慮が必要となる。この内、輻射伝熱以外



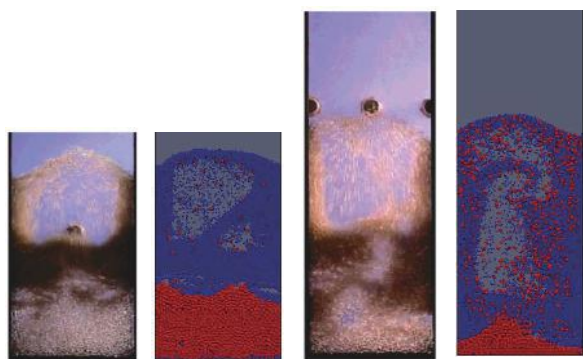
(a) ガス流速 1.4 m/s



(b) ガス流速 1.6 m/s

図2 流入ガス流速(a) 1.4m/s と(b) 1.6m/sの時の粒子流動状態の時刻歴

Fig. 2 Particle flow patterns at different times when the superficial gas velocity is (a) 1.4 and (b) 1.6m/s

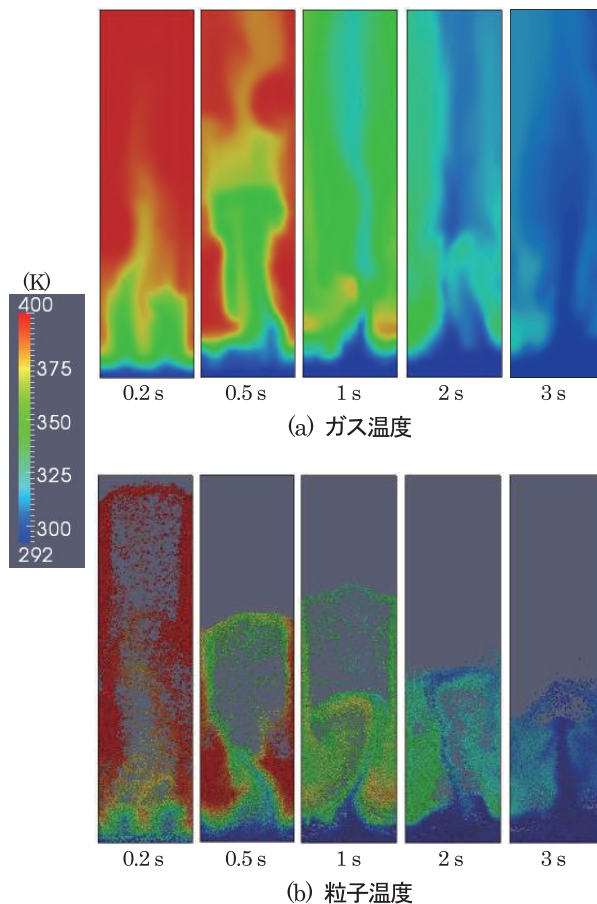


実験⁵⁾ 解析 (a) ガス流速 1.4 m/s (b) ガス流速 1.6 m/s

図3 流入ガス流速(a) 1.4m/s と(b) 1.6m/sの時の実験⁵⁾ (左)と解析(右)の粒子流動状態の比較

Fig. 3 Comparison of experimental⁵⁾ (left, Reprinted (adapted) with permission from ref. 5). Copyright 2004 American Chemical Society.) and simulation (right) particle flow patterns when the superficial gas velocity is (a) 1.4 and (b) 1.6m/s

はCFDEM[®]coupling に実装されているため取り扱うことができる。また、CFDEM[®]coupling は非圧縮性流体ソルバーのみ提供しているため、圧縮性流



(a) ガス温度

(b) 粒子温度

図4 伝熱を伴う流動層の(a)ガス温度と(b)粒子温度の時刻歴

Fig. 4 Snapshots of (a)gas temperature and (b)particle temperature in a fluidized bed with heat transfer

体およびエネルギー方程式のソルバーは新たに作成する必要があるが、これらはOpenFOAM[®]を用いて比較的容易に作成できる。解析例を図4に示す。

初期状態は粒子温度400K、ガス温度292Kであり、底部からの流入ガス温度は292Kである。この図から時間と共にガスに熱を奪われ粒子温度が低下して行く様子がわかる。

3.3 反応による粒径変化を伴う流動層の解析

反応を伴う流動層を扱う場合、反応による粒子-流体間の物質移動やそれに伴う粒子密度や粒径の変化を考慮する必要がある。これらを考慮するにはLIGGGHTS[®]のカスタマイズが必要になる。また、化学種輸送方程式のソルバーも新たに作成する必要がある。

図5に反応による粒径変化を伴う流動層の解析例を示す。これは粒子がガスと反応し、時間と共に粒径が縮小して行く様子を解析したものである。

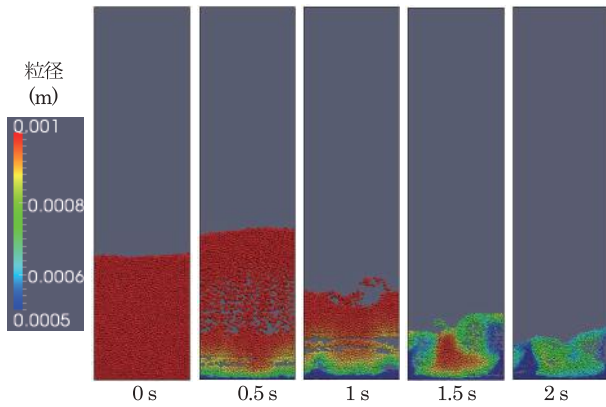


図5 反応による粒径変化を伴う流動層の流動状態の時刻歴
Fig. 5 Snapshots of particle flow patterns with particle size change due to the reaction

4 非球形粒子のDEM

4.1 非球形粒子のDEMの概要

非球形粒子のDEM解析では、個々の粒子の姿勢、換言すれば、どの位置がどの方向を向いているかを時々刻々追う必要がある。このため、粒子の回転運動には物体固定座標系と空間固定座標系間の座標変換が都度必要になり、その結果、球形の場合と比して計算量が多くなる。そのため、球形粒子を用いた解析では数百万粒子でも実用的な時間で解析できるようになってきたが、非球形粒子では未だ困難である。

非球形粒子のモデル化方法としては、粒子を超二次関数⁶⁾や超二次曲面⁷⁾で表現する方法、多面体で表現する方法⁸⁾、球の集合体として表現する方法⁹⁾がある。LIGGGHTS[®]には非球形粒子を球の集合体や超二次関数で表現する方法が実装されているため、それらの解析例を以下に紹介する。

4.2 集合体要素を用いた安息角測定試験の解析

ここでは文献¹⁰⁾を参考にして実施した、安息角測定試験の解析を紹介する。要素モデルは図6に示す6個の等球形要素を対称配列したものである。球要素の重複程度によって凹凸度合いを表現するパラメータとして、次式で表す凸度 β を用いる¹¹⁾。

$$D_n = \beta D \quad (8)$$

ここで、 D_n は非重複領域の長さ、 β は凸度を表すパラメータ、 D は球形要素の直径である。安息角

測定装置は文献¹⁰⁾と同様のものとしたが、要素の径は30mm(文献¹⁰⁾では5~10mm)としたため、それに合わせて装置も拡大した。

図7に凸度 $\beta=0.2$ と0.5の場合の粒子挙動の時刻歴を比較して示す。また、図8に安息角と凸度の関係を示す。これらの図から凸度 β が大きいほど安息角が大きくなることがわかる。したがって、粒子の凸度 β の調整で安息角を任意の値に調整できるといえる。

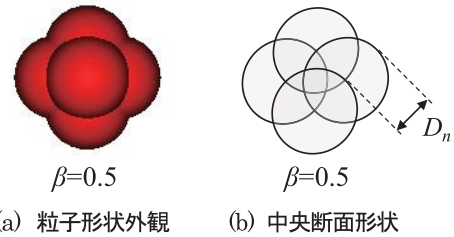


図6 集合体要素¹¹⁾
Fig. 6 Assembled element model¹¹⁾

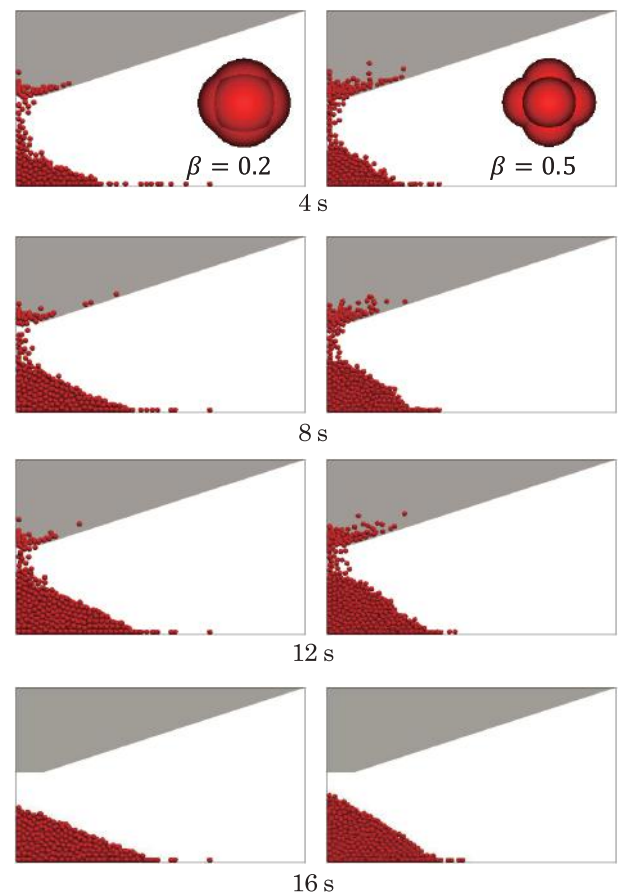


図7 粒子挙動の時刻歴比較：集合体要素の凸度 $\beta=0.2$ (左)と0.5(右)
Fig. 7 Snapshots of particle behavior when the protruding coefficient of assembled elements β is 0.2(left) and 0.5(right)

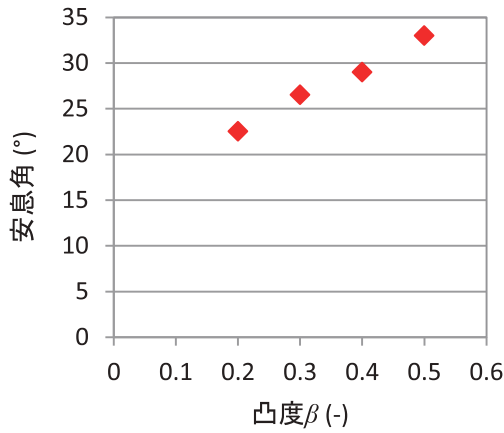


図8 安息角と凸度 β の関係
Fig. 8 Relationship between angle of repose and protruding coefficient β

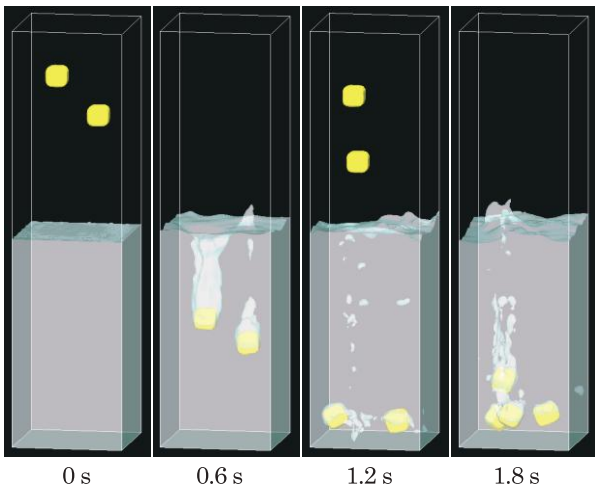


図9 埋め込み境界法を用いてシミュレーションした水中に落下する物体の挙動
Fig. 9 Snapshots of falling objects in water simulated by the immersed boundary method

4.3 埋め込み境界法を用いた集合体要素の CFD-DEM 連成解析

流体と粒子の連成解析手法に埋め込み境界法を用い、水中に連続的に落下する物体の様子をシミュレーションした結果を図9に示す。物体は27個の球で立方体を近似したものである。気液界面追跡法には界面捕獲法 (Volume of Fluid 法) を用いている。埋め込み境界法では、メッシュを粒子サイズより小さくするため、物体が水中に落下した時に巻き込む気泡まで捉えられていることがわかる。

4.4 超二次関数粒子を用いた安息角測定試験の解析

ここでは超二次関数粒子を用いた安息角測定試験

の解析例を紹介する。超二次関数は次式で与えられる。

$$\left(\left| \frac{x}{a} \right|^{n_2} + \left| \frac{y}{b} \right|^{n_2} \right)^{\frac{n_1}{n_2}} + \left| \frac{z}{c} \right|^{n_1} = 1 \quad (9)$$

ここで、 a, b, c はスケールパラメータ、 n_1, n_2 は形状パラメータである。超二次関数は少ないパラメータで様々な形状を表現でき、 $n_1 = n_2 = 2$ のとき楕円体、 $n_1 = 2, n_2 \gg 2$ のとき円柱、 $n_1 \gg 2, n_2 \gg 2$ のとき箱型形状となる。超二次関数で表現した粒子形状の例を図10に示す。なお、超二次関数粒子の接触判定や接触力計算の方法については文献¹²⁾を参照されたい。

安息角測定試験の解析に用いた粒子は図10に示す4つの粒子形状と球形粒子である。これらの粒子の体積や密度、摩擦係数などの物性値はすべて同じ値とした。

安息角測定試験のシミュレーションの様子を図11に示す。円盤に乗せた円筒内にランダムに粒子を発生させ(向きもランダム)、落下させて充填していく。ここで充填させる粒子数は全ケース同一である。充填後、円筒を引き上げ、最後まで円盤上に残った粒子が形成する堆積形状を測定する。

安息角測定試験での各粒子の堆積形状を図12に示す。この図から粒子形状によって堆積形状が大きく異なることが確認できる。図12の堆積形状の斜面の角度を測定するのは難しいため、各粒子の堆積高さ(粒子の中心位置の最大高さ)を比較して図13に示す。同じ物性値でも形状によって堆積高さが大きく

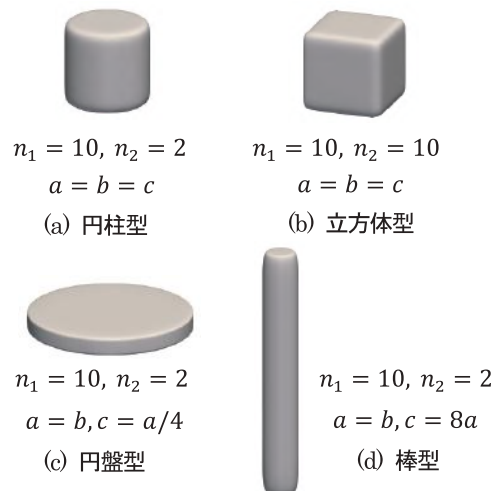


図10 超二次関数により表現した粒子形状
Fig. 10 Superquadric particles

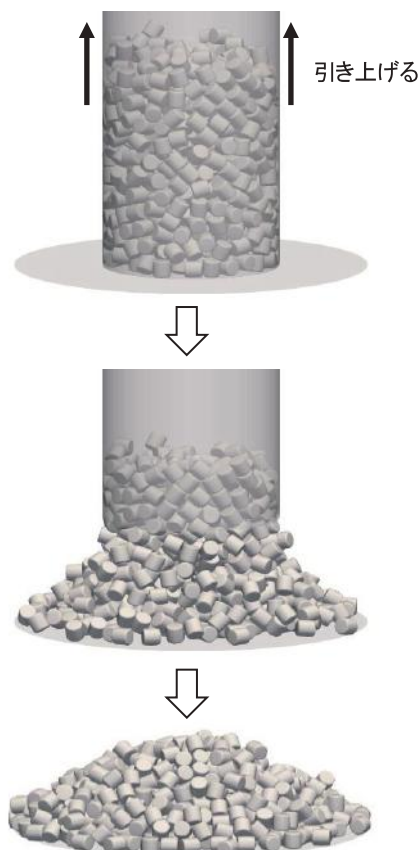


図11 安息角測定試験のシミュレーションの様子
Fig. 11 Simulation of the angle of repose measurement test

異なることから、安息角に対する形状の影響は大きいと言える。

5 結言

本稿では、オープンソース CFDEM[®]coupling の概要を説明し、球形粒子と非球形粒子を用いた解析例を紹介した。二成分粒子の流動層の解析については実験と解析の粒子流動状態を比較した結果、CFDEM[®]coupling で粒子の混合や偏析を精度良く予測できることを確認した。したがって、CFDEM[®]coupling は流体-粒子連成解析の業務に利用できるレベルにあると考えている。また、非球形粒子を用い、安息角測定試験を模擬した解析では、凸度を変えることで粉体の安息角を任意の値に調整できることを確認した。

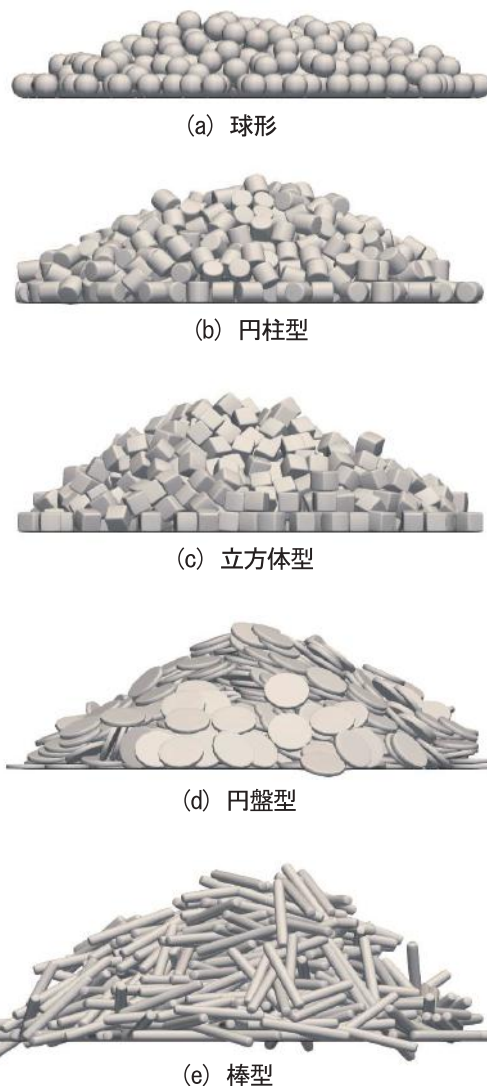


図12 安息角測定試験での各粒子の堆積形状
Fig. 12 Simulation snapshots at the final time step in the angle of repose tests

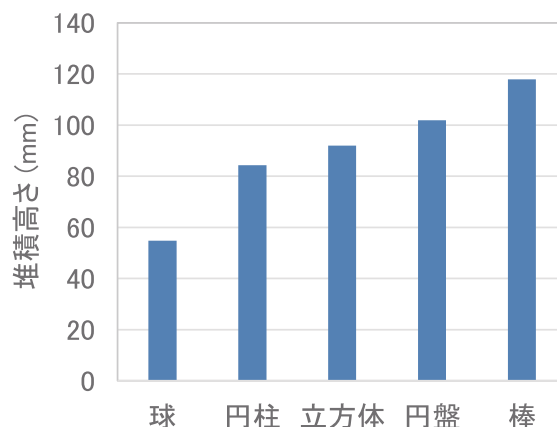


図13 安息角測定試験後の堆積高さの比較
Fig. 13 Comparison of heap heights in the angle of repose tests

参考文献

- 1) Zhu, H.P., Zhou, Z.Y., Yang, R.Y., Yu, A.B., Discrete particle simulation of particulate systems: A review of major applications and findings, *Chemical Engineering Science*, 63, (2008), 5728.
- 2) Goniva, C., Kloss, C., Deen, N.G., Kuipers, J.A.M., Pirker, S., Influence of rolling friction modelling on single spout fluidized bed simulations”, *Particuology*, 10, 5, (2012).
- 3) Weller, H. G., Tabor, G., Jasak, H., Fureby, C., A tensorial approach to computational continuum mechanics using object-oriented techniques, *Computers in Physics*, 12(6), (1998), 620.
- 4) Kloss, C., Goniva, C., Hager, A., Amberger, S., Stefan Pirker, S., Models, algorithms and validation for open-source DEM and CFD-DEM, *Progress in Computational Fluid Dynamics*, An Int. J. 12, (2012), 140.
- 5) Feng, Y. Q., Yu, A. B., Assessment of model formulations in the discrete particle Simulation of gas-solid flow, *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 43, (2004), 8378.
- 6) Cleary, P.W., Industrial particle flow modeling using discrete element method, *Eng. Comput.*, 26, 6 (2009), 698.
- 7) Lillie, C., Wriggers, P., Three-dimensional modeling of discrete particles by superellipsoids, *Proc. Appl. Math. Mech.*, 6 (2006), 101.
- 8) Zhao, D., Nezami, E. G., Hashash, Y. M. A., Three-dimensional discrete element simulation for granular materials., *Eng. Comput. Int. J. Comput. Aided Eng. Softw.*, 23, 7 (2006), 749.
- 9) Bierwisch, C., Kübler, R., Kleer, G., Moseler, M., Modeling of contact regimes in wire sawing with dissipative particle dynamics, *Phil. Trans. R. Soc. A*, 369(2011), 2422.
- 10) 堀口俊行, 澁谷一, 香月智: 個別要素法による礫材の安息角解析, 構造物の衝撃問題に関するシンポジウム論文集, 10(2011), 43.
- 11) 堀口俊行, 香月智, 田附正文: 集合体要素を用いた個別要素法による柔性鋼製杵堰堤の抵抗力推定法, 構造工学論文, 59A(2013), 208.
- 12) Podlozhnyuk, A., Pirker, S., Kloss, C., Efficient implementation of superquadric particles in Discrete Element Method within an open-source framework, *Comp. Part. Mech.* 4 (2017), 101.