

博士論文(要約)

論文題目 符号付距離関数を用いた離散要素法の壁境界モデルの
開発と粉体混合機への応用

氏 名 茂渡 悠介

粉体は、砂、食品、化粧品といった形で、我々の身近な存在であるばかりでなく、化学工学、機械工学、土木工学、農学、薬学など多くの産業分野においても極めて広く使われている。こうした産業に深く関わる現象として、粉体の流動現象がある。粉体の流動には、流体とは異なる特有の現象が報告されている。粉体流は、粉体単相で構成されるばかりでなく、気体や液体との混相流として存在することも多い。このような粉体流の研究、粉体流を扱う機器の設計や運転条件の検討には、これまで実験が広く用いられてきた。しかしながら、粉体流の多くは流体関連現象と異なり、体系内部の光学的な観察が非常に困難であるという問題がある。体系内部の観察に対しては、観測手段の改良および数値シミュレーションの二つのアプローチが適用されてきた。しかしながら、観測手段の改良だけでは、対象となる体系は比較的小規模なものに限られ、また体系形状や粉体の材質にも制約があった。これに対して、計算機を用いて粉体流を再現する数値シミュレーションにおいては、原理上、断面図の作成などが極めて容易であり、体系内部の観察が可能である。また、粉体流れにはスケール依存性があるため、小規模な実験装置では実機の再現ができないといった問題もあったが、シミュレーションでは仮想空間上で計算を行うため、スケール依存性を持たないという利点がある。このため、シミュレーションは実験が持つ問題を解決することが期待される。さらに、近年の計算機性能の著しい向上により、計算機によるシミュレーションのコストは年々低下している。このため、産業界においては、現象把握ばかりでなく、コスト削減の目的からもシミュレーションの応用が期待されている。

粉体のシミュレーションにおいては、離散要素法(Discrete Element Method; DEM)は信頼性の高い手法とされ、不連続体モデルとして最も広く使用されているものの一つである。DEMでは粉体を構成する個々の粒子を追跡し、粒子解像度での解析を行う。この手法では粒子間接触を考慮して計算を行うため、高濃度の粉体流れであっても精度良く粉体挙動を解析できる。また、DEMにおいてはSpring, Dash-potおよびFriction sliderによって接触力がモデル化されるため、接触力計算において一粒子あたりの計算コストが低い。また、計算に必要な物性も実験などから容易に求めることができる。さらに、個々の固体粒子の挙動を計算することから、遠距離力や流体との相互作用力といった物理モデルの導入が容易であるという特徴がある。このように、粉体シミュレーションの手法の中で、DEMは精度が高く、比較的計算コストが低い。さらにはモデル拡張も容易であるため、産業界での応用に適していると考えられる。このため本研究では、粉体シミュレーション手法としてDEMを使用する。

DEMは多くの優れた特徴を持っている。しかしながら、DEMも他の手法同様、いくつかの問題があることが知られている。粉体単相流解析における大きな問題を二つ述べる。一つ目は、DEMでは個々の固体粒子を計算するため、計算負荷が粒子数に比例して増加することである。このため、実際の産業現場で使用されるような、数十トン単位で粉体を扱う大規模な粉体機器の解析には莫大な計算負荷が発生する。これまでに、一つの計算粒子で多数の粒子群を代表させることで粉体の統計的な挙動を再現させるDEM粗視化モデルが提案

されてきた。しかしながら、粗視化モデルでは計算負荷の低下と引き替えに計算解像度が低下するため、適用には制限があった。さらに、産業界で使用される粉体の粒子数は10の12乗オーダー以上になるため、粗視化モデルを用いてもなお、大規模体系の解析においては高い計算負荷が求められた。こうした問題に対して、著者らはこれまでにスレッド並列計算手法を提案し、計算機一台で効率の良いDEM計算が可能であることを示してきた。二つ目の問題は、DEMにはこれまで任意形状壁面を効率よく扱うモデルが存在しないということである。壁面形状は粉体挙動に非常に大きな影響を与える要素であるため、DEMによる粉体シミュレーションにおいては、粉体流における壁面形状の影響を取り扱うことが期待されている。しかしながら、これまでに提案されている壁面モデルでは、アルゴリズムが複雑であり、任意形状壁面を効率よく取り扱うことができなかった。このため、産業界で使用されるような、複雑形状を有する機器内の粉体流れは、実用体系解析が困難であった。既往の粉体シミュレーションの多くは、その適用先は比較的単純な形状の体系に限られていた。そこで、本研究では、壁面モデルの問題を解決するため、符号付距離関数(Signed Distance Functions; SDF)を用い、DEMのための任意形状壁面モデルを開発した。このモデルにおいては、壁面モデル形状はSDFにより、(任意の点における最近接壁面までの距離)と(壁面の内外を示す符号)の積からなる連続した符号付距離の分布として表現される。粒子-壁面間の接触判定はSDFに対する単純な代数演算により完了する。また、接触面の法線も同様に単純な代数演算により得られるため、従来手法による壁面モデルと比べてアルゴリズムが極めて単純になる。本研究では、開発したモデルを用いて産業界で使用されるような機器を模擬した体系の解析を行い、提案手法により実用的な解析が可能になることを示した。また、従来手法を用いた結果とシミュレーション間で比較を行い、新手法は従来手法と同程度の計算精度を持つことを示した。併せて、新手法は従来手法よりもはるかに計算効率に優れることを示した。さらに、シミュレーション全体に占める計算時間との比較を行うことにより、DEMにおけるボトルネックの一つが提案手法により解決されることを示した。

次に、固体-流体連成問題における問題を指摘する。産業界においては、粉体の単相流だけでなく、気体や液体と粉体が混在した状態である固気・固液二相流が広く使われている。こうした混相流の流れの理解のためにも、シミュレーションの適用が求められているが、DEMは粉体層のみを扱うモデルであるため、流体と粉体からなる混相流を解析する際には、流体解析のためのモデルおよび流体-粉体間の相互作用を扱うモデルがそれぞれ必要になる。流体解析手法(Computational Fluid Dynamics; CFD)における非圧縮性流体の解析手法としては、これまでに有限差分法、有限体積法や有限要素法のような多くの手法が提案されている。混相流解析手法としては、これらを組み合わせたDEM-CFD法が提案されている。しかし、産業界で使用されるような、複雑形状を有する機器内での流れ解析に適用することを考えると、粉体単相流と同様、固体-流体混相流においても、壁面形状の扱いが問題となる。格子法による流体解析は計算速度や精度において優れている。しかしな

がら、有限差分法は任意形状体系の解析が困難であった。また、有限体積法や有限要素法による解析では、高品質な格子分割が必要となるため、任意形状体系における混相流シミュレーションへ適用した場合には安定性や計算速度が悪化する問題があった。さらに、移動壁を有する体系の解析は頻繁な格子再分割が発生するため、実用的な計算が極めて困難であった。そこで、本研究においてはDEM-CFDに対して、本研究で提案する壁面モデルと埋め込み境界法(Immersed Boundary Method; IBM)を導入することにより、任意形状体系における混相流シミュレーションを容易に実行可能となるような手法(DEM-CFD-IBM-SDF)を開発した。この手法においては、流体解析を安定かつ低コストで行うため、有限差分法に基づく格子法を用いた。任意形状体系の解析を行うため、DEMには本研究で提案するSDFによる任意形状壁面モデルを適用した。さらに、流体に対しては流体格子内における占有割合で壁面を表現するIBMを適用することにより、任意形状体系内での解析を可能にした。IBMでは従来は流体格子内での占有割合の計算は解析的に計算可能な体系に限られていたが、本研究ではSDF壁面モデルを適用することで、任意形状体系壁面を一貫した手順で取り扱うことが可能になることを示した。解析においては、提案手法を用いたシミュレーションと、実験との結果を比較した。これにより、提案手法が平易でありながら混相流現象を再現可能であることを示した。加えて、粉体大規模モデルであるDEM粗視化モデルと提案手法を組み合わせることで、従来は多大な計算負荷のために解析が困難であったような体系が解析できることも示した。

このように、本研究ではまず、符号付距離関数を用いた離散要素法の壁境界モデルを構築した。提案手法は従来手法よりも計算アルゴリズムが単純であることが示された。また、本手法により、従来手法よりも低い計算コストで任意形状体系における粉体流の解析が可能となることを示した。つぎに、任意形状体系内での固気・固液混相流解析を安定かつ高速に行うことが出来るようなモデルを構築した。提案した手法はDEM-CFDにより粉体-流体間の相互作用力を計算する。先に提案した任意形状壁境界モデルを粉体のみならず、流体解析にも適用することで、任意形状体系内における流体解析が可能となることを示した。さらに、提案手法を用いることにより、従来手法では高い計算コストが必要であった、移動壁面を有する体系内での流体解析も容易になることを示した。これらの手法を用いて、粉体混合機への応用を行い、実用体系における粉体関連現象の解析が容易になることを示した。また、DEM粗視化モデルを適用することにより、これまでは解析が不可能であったような多数の粒子を含む体系の解析も可能になることが示された。