

DEMで求めた粉体層の構成および状態関係とそれを用いた粉体層の 動力学的崩壊の計算と実験による検証

大岳 R. & D. コンサルタント事務所 湯 晋一
九州工業大学 梅景 俊彦, 満生 泰規, 古賀 文章

Shinichi Yuu, Toshihiko Umekage, Fumiaki Koga and Yasunori Mitsui
Department of Mechanical Engineering, Kyushu Institute of Technology,
1-1, Sensuicho, Tobataku, Kitakyushu 804-8550, Japan.

Corresponding author: Shinichi Yuu

Ootake R. and D. Consultant Office,
1-17-27-508, Ootake, Higashiku, Fukuoka 811-0322 Japan.

1. 緒言

粒状体は多くの生産プロセスに現出し、また自然界にも多数存在し、それらの操作や現象に大きくかかわっている。したがって粒状体のより進んだ理解は種々の生産技術の進歩や粒状体が起因する自然災害の防止に大きく寄与すると考えられる。

粒状体、ここでは大部分の粒状体が堆積して静止または運動する濃厚な粒状体をさすが、の力学に関する研究は二つに分けられるだろう。その一つは連続体モデルで、他の一つは粒子のまま計算する離散モデルである。

通常、粒状体は無数といってもいいほどの多数の粒子からなっているので、粒状体の力学現象を一般的に説明するには連続体モデルが適していると思われる。連続体化するためには主に構成関係が必要となり、それを求める多くの研究がなされている。例えば、古典的な塑性理論を用いた Savage and Hutter [1]の研究、visco-plastic model による Jop et al.[2]の研究、homogenization techniques を用いた micromechanical model による Hicher and Chang, [3]の研究、hypoelastic or hypoplastic model を用いた McCue et al.[14]の研究、micro-polar model を用いた Teichman and Bauer [15]の研究がある。このように多くの構成関係が求められているにもかかわらず、粒状体の静および動力学現象に対する理解は満足いくほど深まっていない。その理由として構成関係にセットしなければならないパラメータの数が多すぎることに、そして現実の粒状体にあてはめて実際の力学場を計算することが難しいことがあげられる。したがって得られた構成関係の実験による検証があまりなされていない。

もう一方の離散モデルは個々の粒子を直接計算するので構成関係はいらないが、どうしても計算可能な粒子数に制限があるため現実的な力学場の計算には向いていない。そこで筆者らはDEMを用いて構成関係を求めることをおこなった。構成関係を求める際、現実的

な境界条件に基づく必要がないので、さほど多くの粒子数を必要としない。また粒状体の現象には3次元性が重要であるが、この方法だと比較的容易に3次元構成関係を求めることができる。えられた構成関係を運動方程式に代入し、それを用いて、静止粒状体層の側壁を取り払い崩壊させ、それが再び静止して heap を形成する様子を計算した。その結果を同一条件下の実験結果と比較検討することによって、構成関係およびこれらの計算手法の妥当性を検証した。その結果、粒状体の力学現象に関するいくつかの知見が得られたので以下に報告する。

2. 計算方法

2. 1 DEMで求めた応力と歪を用いて求めた粒状体の構成関係

まず、粒状体に微小回転はないとすると、応力は6成分となり、それらは係数 A1~A6 と歪で表わされるものとする。また A1~A6 は歪のスカラ値とかさ密度の関数で表わされると考えられる。結果として応力は歪とかさ密度の非線形関数となり、塑性域も含めて表わされるだろう。その式を以下に示す。

$$\sigma_x = A1\varepsilon_{xx} + A2(\varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}) + A3(\gamma_{xy} + \gamma_{xz}) \quad (1)$$

$$\sigma_y = A1\varepsilon_{yy} + A2(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{zz}) + A3(\gamma_{yx} + \gamma_{yz}) \quad (2)$$

$$\sigma_z = A1\varepsilon_{zz} + A2(\varepsilon_{yy} + \varepsilon_{xx}) + A3(\gamma_{zx} + \gamma_{zy}) \quad (3)$$

$$\tau_{xy} = (A4\gamma_{xy} + A5\gamma_{xz} + A6\gamma_{zy})P \quad (4)$$

$$\tau_{yz} = (A4\gamma_{yz} + A5\gamma_{yx} + A6\gamma_{zx})P \quad (5)$$

$$\tau_{zx} = (A4\gamma_{zx} + A5\gamma_{zy} + A6\gamma_{yx})P \quad (6)$$

ただし、 $P = \sqrt{\sigma_x^2 + \sigma_y^2 + \sigma_z^2}$ である。

また、 $\gamma_{xy} = \gamma_{yx}$ 、 $\gamma_{yz} = \gamma_{zy}$ 、 $\gamma_{zx} = \gamma_{xz}$ である。

DEMを用いて、着目点の全ての応力成分、歪成分を求め、その値を式(1)~(6)に代入して、A1~A6の値を求めた。DEMの計算方法は文献[6~7]に詳しいのでここでは省略している。応力場は以前著者等が計算したせん断場[8]とほぼ同一である。

DEMで求めた粒子間作用力とそれらの位置から連続体化した粒状体の応力は次式で求まる[9]。

$$\sigma_{ij} = \frac{1}{2\Delta x \Delta y \Delta z} \sum_m \sum_n (x_i^m - x_i^n) F_j^{mn} \quad (7)$$

また、垂直歪およびせん断歪は次式で求まる。

$$\varepsilon_{xx} = \sum_n \frac{u_{xx1} - u_{xx2}}{\Delta x} \Delta t \quad (8)$$

$$\gamma_{xz} = \sum_n \frac{u_{zx1} - u_{zx2}}{\Delta z} \Delta t \quad (9)$$

応力や歪等のより詳しい計算方法は引用文献[8]を参照されたい。また、計算条件は引用文献[8]とほぼ同一なのでここでは省略している。

粒子の初期位置は3種類設定した。一様にランダム配置した後、重力沈降させて収まった状態、その状態から5%の個数の粒子を一様ランダムに抜き取った状態、7%を同様に抜き取った状態を各初期状態とした。初期充填率はそれぞれ0.594, 0.556, 0.546である。計算領域を上部セルと下部セルに分け、上部セルを微小な一定速度 ($V_s = 1.0 \text{ mm/s}$) で移動させ、粒子群の変形を引き起こした。十分な大変形が起こった後、速度を逆向きに変え、除荷の状態を作り出した。変形が進行する各状態における着目点の全ての応力成分と全ての歪成分を求める。それらを式(1)~式(6)に代入し、解くことにより、各状態における全てのA1~A6が求まる。

2. 2 粒状体の崩壊の計算

支配方程式は粉体層の運動方程式と連続の式で、次式となる。

$$\begin{aligned} & \left(\frac{\partial u_p}{\partial t} + u_p \frac{\partial u_p}{\partial x} + v_p \frac{\partial u_p}{\partial y} + w_p \frac{\partial u_p}{\partial z} \right) = \frac{du_p}{dt} \\ & = -\frac{(1-\varepsilon)}{\rho_b} \left(\frac{\partial \sigma_{pxs}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{pxys}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{pxzs}}{\partial z} + \frac{\partial \sigma_{pxd}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{pxyd}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{pxzd}}{\partial z} \right) - \frac{D}{U_s^2} g \end{aligned} \quad (10)$$

$$\begin{aligned} & \left(\frac{\partial v_p}{\partial t} + u_p \frac{\partial v_p}{\partial x} + v_p \frac{\partial v_p}{\partial y} + w_p \frac{\partial v_p}{\partial z} \right) = \frac{dv_p}{dt} \\ & = -\frac{(1-\varepsilon)}{\rho_b} \left(\frac{\partial \tau_{pxys}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{pys}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{pyzs}}{\partial z} + \frac{\partial \tau_{pxyd}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{pyd}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{pyzd}}{\partial z} \right) \end{aligned} \quad (11)$$

$$\begin{aligned} & \left(\frac{\partial w_p}{\partial t} + u_p \frac{\partial w_p}{\partial x} + v_p \frac{\partial w_p}{\partial y} + w_p \frac{\partial w_p}{\partial z} \right) = \frac{dw_p}{dt} \\ & = -\frac{(1-\varepsilon)}{\rho_b} \left(\frac{\partial \tau_{pxzs}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{pyzs}}{\partial y} + \frac{\partial \sigma_{pzs}}{\partial z} + \frac{\partial \tau_{pxzd}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{pyzd}}{\partial y} + \frac{\partial \sigma_{pzd}}{\partial z} \right) \end{aligned} \quad (12)$$

$$\frac{\delta \rho_b}{\delta t} = -\nabla \cdot (\rho_b \mathbf{u}_p) + \mathbf{u}_p \cdot \nabla \rho_b \quad (13)$$

前節で得られたA1～A6を数式化して準静的応力の計算に構成式として用いる。粒子間の衝突によって生ずる応力は、その偏差応力は準静的応力と比較してはるかに小さいが、kinetic theory、すなわち分子粘性の analogy から求めた[10]。それらを上式に代入して SPH 法によって数値計算した。SPH 法による計算方法は著者等[11]の報告に記述されているのでここでは省略する。計算条件を Table1 に示す。

Table1 計算条件

	Dimensional	Nondimensional
Dimensions of the fluidized bed		
(Height)	350.0 mm	140.0
(Width)	80.0 mm	32.0
(Depth)	5.0 mm	2.0
Number of cells (Nx × Ny × Nz)	200 × 240 × 4=192000	
Cell sizes		
Δx	1.75 mm	0.7
Δy	1.25 mm	0.5
Δz	1.25 mm	0.5
Superficial air velocity U_s	0.12 m/s	1.0
Reynolds number Re		640
Time step Δt	5.0×10^{-6} s	2.4×10^{-4}
Number of imaginary particle N_{ip}	$65 \times 48 \times 3=9360$	
Imaginary particle s		
Particle diameter D_p	200 μm	0.08
Particle density ρ_p	2.5×10^3 kg/m ³	
Constants in the constitution equations		
A1	1.14×10^{-2} kg/(m s)	
A2	1.94×10^{-4} kg/(m s)	
Initial void fraction ϵ_0		0.4
Initial imaginary particle diameter	1.67mm	0.67

3. 計算結果と考察

以下に代表的な初期充填率が 0.594 の結果を、Fig.1 に求めた構成方程式 (Eq.(1)~(6)) の係数の一部と Fig.2 に DEM で求めた応力と Eq.(1)~(6)で求めた応力の一部をそれぞれ示す。

A1 は垂直歪のスカラー値とかさ密度の関数として表わされることが分かる。せん断応力を表わす係数の A4 は同様にせん断歪のスカラー値とかさ密度の関数として表わされるのがわかる。ここでは A1 と A4 のみを示したが、他の係数も全て同様に表わされている。Fig.2 から分かるように、当然のことながら DEM の結果を用いて係数を定めた構成式は DEM で求めた応力の変化をよく表わしている。歪が小さい弾性域はもちろんのこと、非線形の崩壊、塑性域およびある程度の流動域もふくめて、得られた構成方程式は DEM でえられた応力をよく表現している。

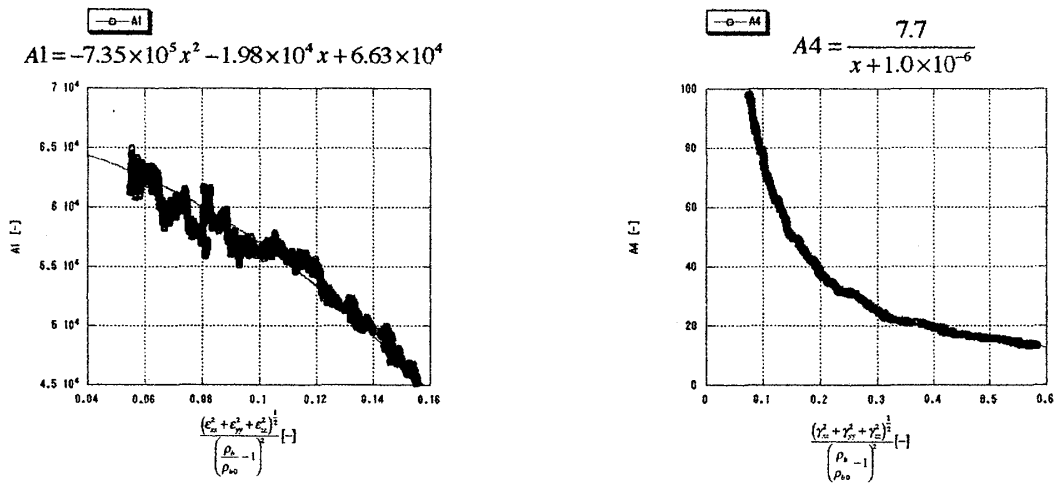


Fig.1 構成式の係数A 1, A 2の計算結果と表現式

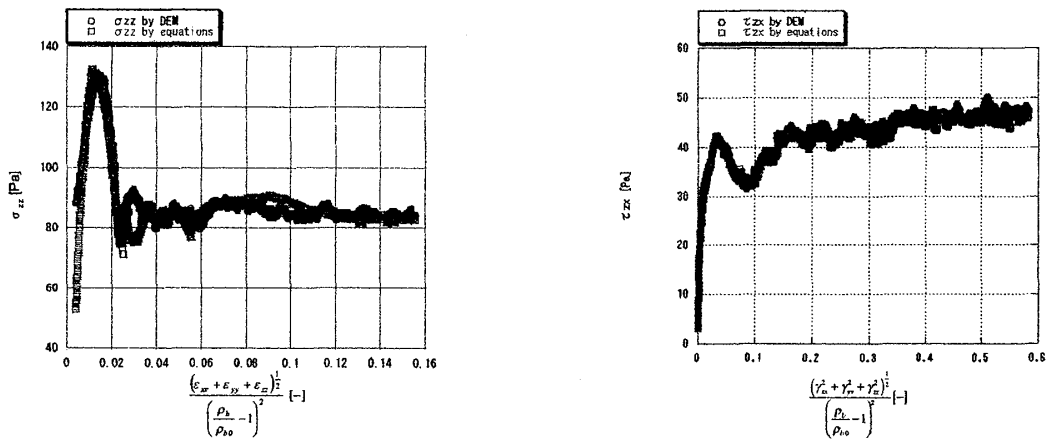


Fig.2 得られた構成式から求めた応力とDEMで求めた応力の比較

求まったこれらの構成式の特徴は Yield 条件や Flow ルールは必要なく、構成関係の中に自動的に組み込まれていること、かさ密度による応力変化が考慮されていること、変形過程で摩擦力、すなわち摩擦係数が増加することが入っていること等である。

沈降によって粉体層の初期状態が形成された(充填率は0.52~0.62程度に分布)後、左右の壁を取り払うと、急激に充填率(無次元かさ密度)の変化が現れる。その時間変化を Fig.3 に計算結果の充填率のモノクロコンタで示す。

取り払って0.01s後(Fig.3(a))には取り払った左右壁の近傍に低充填率が形成され、内部にも充填率分布が始まる。Fig.3(b)の0.05s後になると、図に示されているように中心軸に向かう斜め線状に低充填率の領域が形成され、その線状の領域が何本にも増加していき(Fig.3(c))、それが合体することによって外側に低充填率領域が形成される(Fig.3(d))。また粉体層の中心領域では斜め線状の低充填率領域が消滅して広い領域で充填率が0.52~0.53程度の通常の粉体層が形成される(Fig.3(d))。

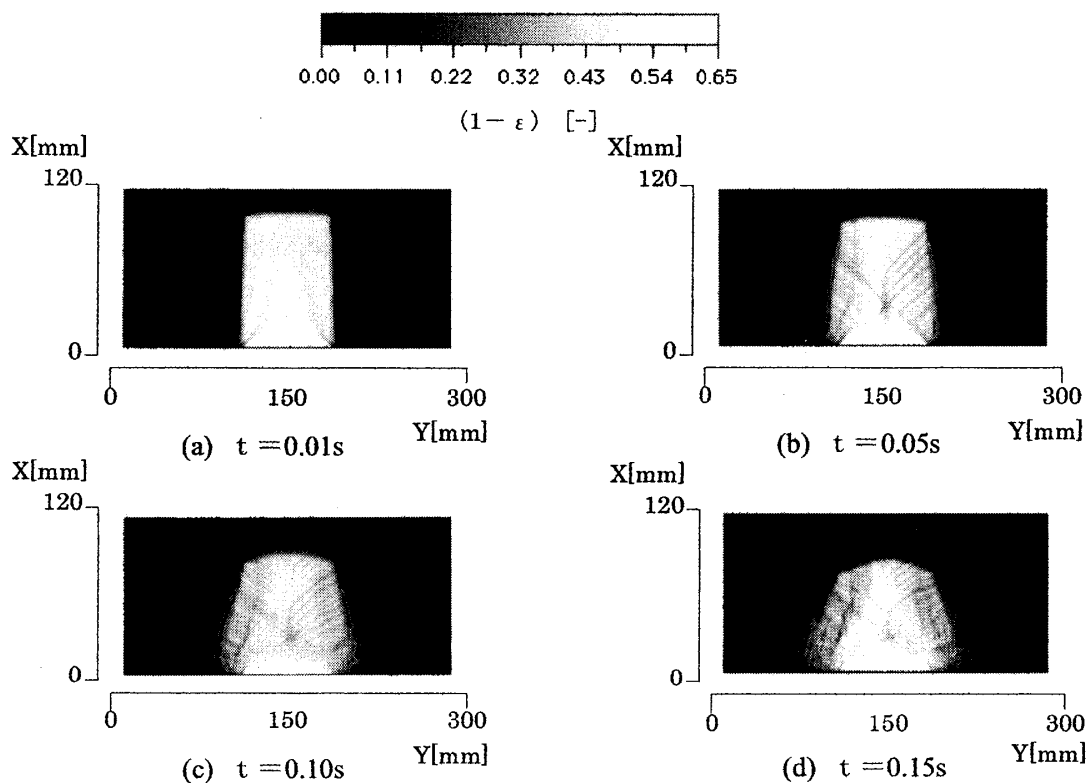
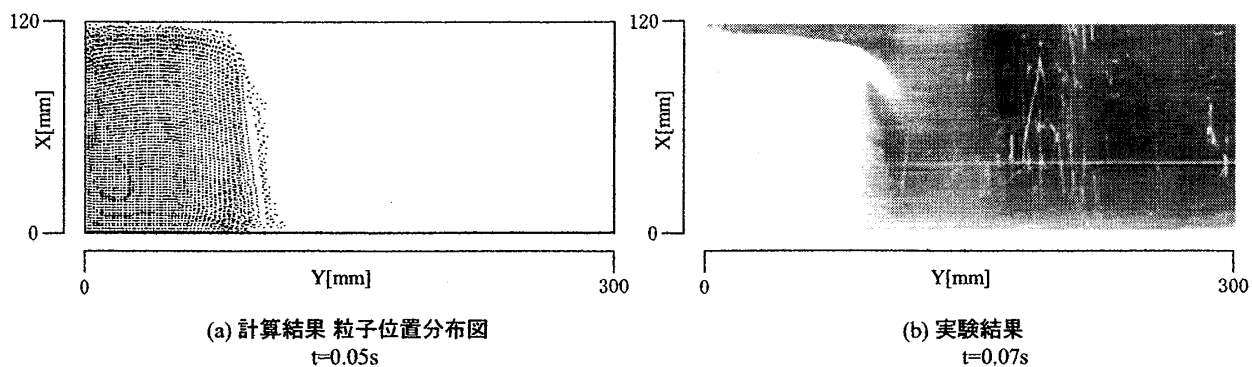


Fig.3 粉体層の崩壊時の充填率変化

同一粉体(ガラスビーズ $D_p=200\mu m$),同一寸法、同一形状の粉体層が片側に崩壊して静止するようすの計算結果と実験結果を Fig.4に示している。

各時間の形状は一致している。ただし、粉体層が最終的にほぼ静止した状態の計算結果は壁よりの部分が測定値のそれより平坦である。この原因はまだ定かでない。安息角はいずれの場合も 25 度で一致している。



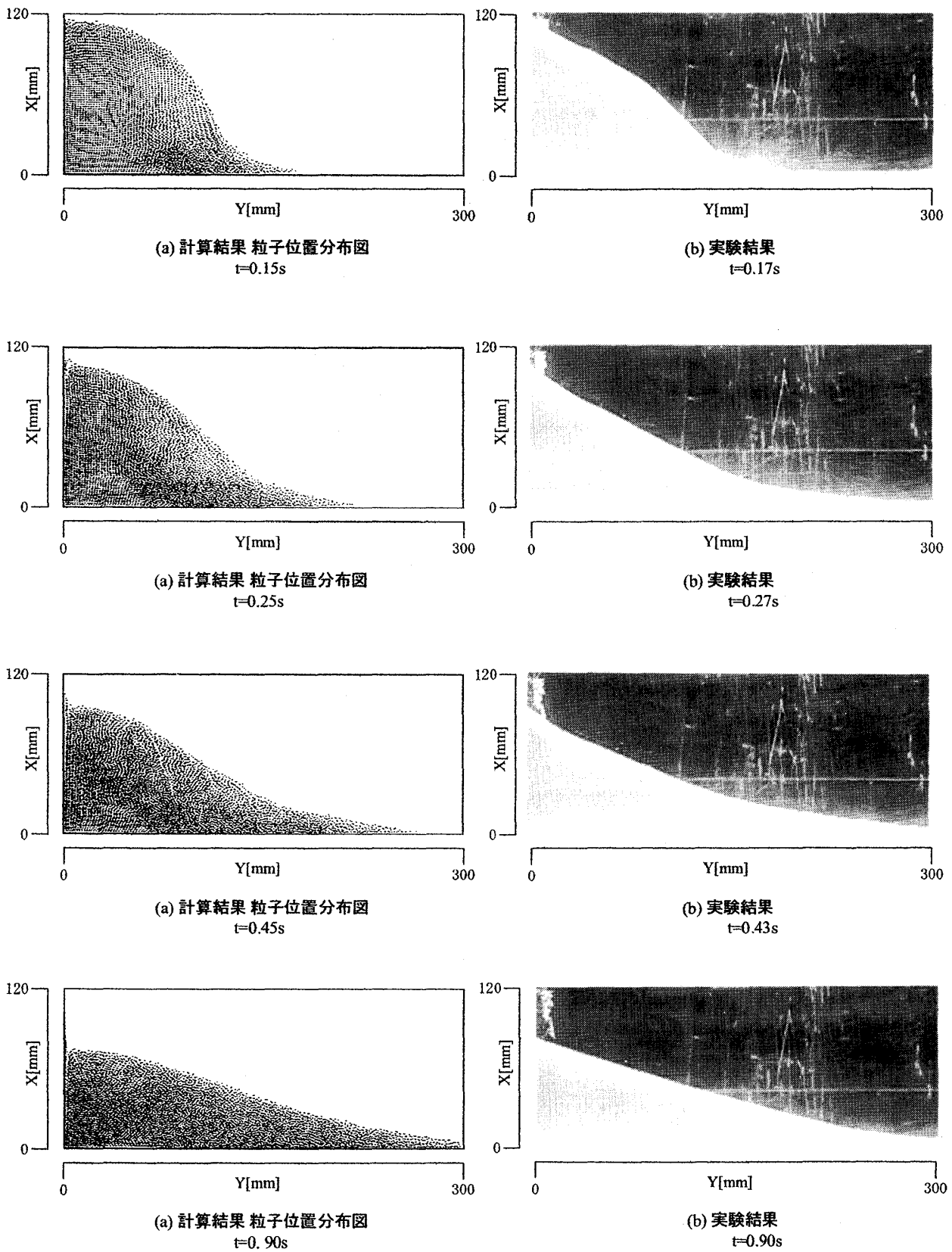


Fig.4 粉体層の片側崩壊時の形状変化の計算結果と実験結果

4. 結言

粒状体が崩壊し、再び堆積するといった濃厚粒状体の特徴的な現象を支配するのは準静的応力であるが、準静的応力は粒子が接触してつながっていないと働かない。この境界をあらわす一つの目安として立方正方配列の充填率=0.523 を本研究では考えたが、それは単なる目安であって、現実には充填率が0.523より小さくなくても状況によって準静的応力はおおいに働く。通常の物質の analogy として考えると、充填率が0.5近辺で固体から液体または気体に相変化が起こっていると考えられる。ただし粒状体の複雑なところはこの相変化がはっきりせず、もちろん充填率が0.5よりある程度大きくなれば固相のみとみなせるが、多相が混在する点にある。連続体としてこれを表現するのは難しい。粒子間衝突が支配的な希薄な粒状体では偏差応力に対して kinetic theory の analogy が適用できるが、その中間領域の厳密な表現は容易でない。ラフで便宜的ではあるが本計算では充填率が0.523より小さい点の応力をその点で計算した準静的応力に(その点の充填率/0.523)**6を掛けることによって表現した。これがどの程度正しいかはわからない。ただしこれによって計算結果は実験結果にかなり近づく。

引用文献

1. S. B. Savage and K. Hutter, The motion of a finite mass of granular materials down a rough incline, *J. Fluid Mech.* **199**, 177-215 (1989).
2. P. Jop, Y. Foflet and O. Pouliquen, A constitutive law for dense granular flows, *Nature*, **441**, 727-729 (2006).
3. P. Y. Hicher and C. S. Chang, Evaluation of two Homogenization techniques for modeling the elastic behavior of granular materials, *J. Eng. Mech.-ASCE* **131**, 1184-1194 (2005).
4. S. W. McCue, I. K. Johnpillai and J. M. Hill, Symmetry analysis for uniaxial compression of a hypoplastic granular materials, *Z. angew. Math. Phys.* **56**, 1061-1083 (2005).
5. J. Tejchman and E. Bauer, Modeling of a cyclic plane strain compression-extension test in granular bodies within a polar hypoplasticity, *Granular Matter*, **7**, 227-242 (2005).
6. P. A. Cundall and O. D. L. Strack, A discrete numerical model for granular assemblies, *Geotechnique*, **29**, 47-65 (1979).
7. S. Yuu, T. Umekage and Y. Johno, Numerical simulation of air and particle motions in bubbling fluidized bed of small particles, *Powder Technology*, **110**, 158-168 (2000).
8. S. Yuu and T. Umekage, Numerical simulation of constitutive relationship between stress and strain of particulate matters, *J. Soc. Powder Technology*, **42**, 116-124 (2005).
9. S. Kotake, Bunshi Netsuryuutai, pp. 68-70, Maruzen, Tokyo (1990).
10. S. Yuu, H. Hayashi, M. Waki and T. Umekage, The stress-strain rate relationships for flowing coarse particle powder beds obtained by the 3-dimensional distinct element method and experiments, *J. Soc. Powder Tech.*, **34**, 212-220 (1997).
11. S. Yuu, T. Umekage and K. Matsumoto, Numerical simulation of flow fields in two-dimensional fluidized bed using SPH based on stress strain relations obtained by DEM and finite difference methods, and experimental verification, *Kagaku-kougaku-ronbunshuu*, **31**, 92-101 (2005).