

引力を考慮した DEM 法による多孔体構造作成シミュレーション

株式会社豊田中央研究所 反応制御研究室 林 秀光¹

1 はじめに

ディーゼル車から排出される粒子状物質 (PM) を除去するためのフィルタとして、DPF (Diesel Particulate Filter) が考案され、現在急速に普及しつつある。DPF の構造は複数提案されているが、現在の主流は Wall-through 型である。この型の DPF では、エンジン側から流入した排気ガスは、多孔体で形成される流路壁を通過して初めて大気側へ流出できる仕組みになっている。排気ガス中に浮遊している PM は、排気ガスが流路壁を通過する過程で多孔体内部に捕集される。このような Wall-through 型 DPF の動作原理から考えて、捕集効率や圧力損失など DPF の主要特性は、多孔体の構造に強く依存すると予想される。

本研究では、SiC 粉末を焼結して作成される SiC-DPF を対象とし、粉体のパッキングにより流路壁の多孔体を作成した。粉のパッキング問題の解法としては、従来は、粉の幾何学的形状のみを考慮してランダムにパッキングする事が行われていたが [1]、最近では、DEM 法 (Distinct Element Method) [2] により粉の運動を動力的に追跡する事で現実に近いパッキングが可能になってきた。ところで、粉の粒径が 100 μ m 以下になると、パッキングの結果として作成される多孔体の Porosity が粒径の減少につれて増大する事が知られている。この現象は、粉の幾何学的形状のみを考慮した方法では再現できないが、粉と粉の間に van der Waals 力を考慮した DEM 法を用いると再現できる事が示されており [3]、動力的な多孔体作成方法の優位性を示している。そこで本研究では、van der Waals 力を考慮した DEM 法を用いた粉体のパッキングにより多孔体を作成した。

2 引力を考慮した DEM 法

DEM 法は、弾性変形とエネルギー散逸を考慮して剛体の運動を追跡する計算手法である。その基本方程式は、剛体に対する Newton の運動方程式であり、並進運動と回転運動に関してそれぞれ次の通りに書ける [2]。

$$m_i \frac{d\mathbf{v}_i}{dt} = \mathbf{F}_i; \quad I_i \frac{d\boldsymbol{\omega}_i}{dt} = \mathbf{T}_i \quad (1)$$

ここで、 m_i と I_i は粒子 i の質量と慣性モーメント、 $\mathbf{v}_i$ と $\boldsymbol{\omega}_i$ は粒子 i の重心の並進速度と重心周りの角速度、 $\mathbf{F}_i$ と $\mathbf{T}_i$ は粒子 i に働く力と重心周りのトルクである (図 1 参照)。

粒子間で衝突を繰り返しながら重力により落下する粒子を考察する場合、粒子 i に働く力 $\mathbf{F}_i$ とトルク $\mathbf{T}_i$ は、次のように書ける。

$$\mathbf{F}_i = \sum_j (\mathbf{F}_{ij}^n + \mathbf{F}_{ij}^s + \mathbf{F}_{ij}^v) + m_i \mathbf{g} \quad (2)$$

¹E-mail: e0905@mosk.tytlabs.co.jp, URL: <http://www.tytlabs.co.jp/>

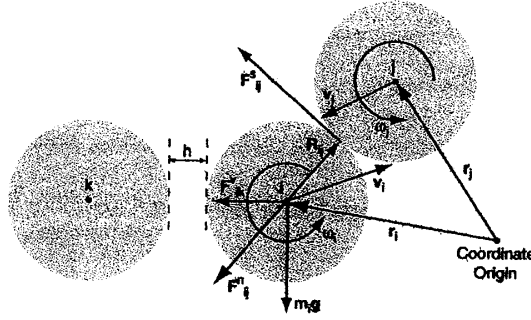


図 1: DEM 法の方程式に含まれる各種ベクトル

$$\mathbf{T}_i = \sum_j (\mathbf{T}_{ij}^s + \mathbf{T}_{ij}^r) \quad (3)$$

ここで, $\mathbf{F}_{ij}^n$, $\mathbf{F}_{ij}^s$, $\mathbf{F}_{ij}^v$, $m_i \mathbf{g}$ は, それぞれ, 粒子 i が粒子 j から受ける接触力の法線成分, 接触力の接線成分, van der Waals 力, 粒子 i に働く重力である. また, $\mathbf{T}_{ij}^s$ と $\mathbf{T}_{ij}^r$ は, それぞれ, 粒子 i が粒子 j から受けるトルクと転がり摩擦である.

DEM 法では, 粒子 i が粒子 j から受ける接触力の法線成分 $\mathbf{F}_{ij}^n$ を次式で表す.

$$\mathbf{F}_{ij}^n = \left[\frac{2}{3} E \sqrt{\bar{R}} \xi_n^{2/3} - \gamma_n E \sqrt{\bar{R}} \sqrt{\xi_n} (\mathbf{v}_{ij} \cdot \mathbf{n}_{ij}) \right] \mathbf{n}_{ij} \quad (4)$$

ここで, E は Young 率 Y と Poisson 比 σ を使って $E = Y/(1 - \sigma^2)$ と定義される量であり, $\bar{R}$ は, 粒子 i と粒子 j の半径 R_i と半径 R_j の調和平均であり $\bar{R} = R_i R_j / (R_i + R_j)$ と書ける. また, ξ_n は, 粒子 i と粒子 j の重なり長さを表し $\xi_n = \max(R_i + R_j - |\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i|, 0)$ と定義されている. γ_n は, 法線方向のダンピング係数である. $\mathbf{v}_{ij}$ は粒子 i と粒子 j の重心の相対速度であり $\mathbf{v}_{ij} = \mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j$ と書ける. $\mathbf{n}_{ij}$ は, 粒子 j の重心から粒子 i の重心へ向かう単位ベクトルであり, $\mathbf{n}_{ij} = (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) / (|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|)$ と定義される.

粒子 i が粒子 j から受ける接触力の接線成分 $\mathbf{F}_{ij}^s$ は次式で与えられる.

$$\mathbf{F}_{ij}^s = -\mu \left| \mathbf{F}_{ij}^n \right| \frac{\min(\xi_s, \xi_{s,\max})}{\xi_{s,\max}} \frac{\mathbf{V}_{ij}^t}{|\mathbf{V}_{ij}^t|} \quad (5)$$

ここで, μ は摩擦係数, ξ_s は粒子 i と粒子 j が接触してから現時刻までの接触点の積算移動長さ, 最大積算移動長さ $\xi_{s,\max}$ は, $\xi_{s,\max} = \mu[(2 - \sigma)/2/(1 - \sigma)]\xi_n$ と定義される. $\mathbf{V}_{ij}^t$ は, 粒子 i と粒子 j の接触点の相対速度の接線成分であり,

$$\mathbf{V}_{ij}^t = \mathbf{v}_{ij} - (\mathbf{v}_{ij} \cdot \mathbf{n}_{ij}) \mathbf{n}_{ij} + (\omega_i + \omega_j) \times \mathbf{R}_{ij} \quad (6)$$

で与えられる. ここで, $\mathbf{R}_{ij}$ は, 粒子 i の重心から粒子 j との接触点へ向かうベクトルであり, $\mathbf{R}_{ij} = R_i(\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i) / (R_i + R_j)$ と書ける. 接触点の積算移動長さ ξ_s の算出方法は, 文献に詳しく書かれていないが本研究では, 運動方程式 (1) を積分する際の時間刻みを dt として, $\mathbf{V}_{ij}^t dt$ の絶対値を粒子 i と粒子 j が接触を開始した時刻から積算して求めた.

van der Waals 力 $\mathbf{F}_{ij}^v$ は、次式で与えられる (文献 [3] およびその参考文献を参照)。

$$\mathbf{F}_{ij}^v = -\frac{H_a}{6} \frac{64R_i^3 R_j^3 (h + R_i + R_j)}{(h^2 + 2R_i h + 2R_j h)^2 (h^2 + 2R_i h + 2R_j h + 4R_i R_j)^2} \mathbf{n}_{ij} \quad (7)$$

ここで、 H_a は、Hamaker 定数である。h は、粒子 i と粒子 j の表面間の距離であり、カットオフ距離 $h_{\min}$ を考慮して、次式で算出される。

$$h = \max(|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i| - (R_i + R_j), h_{\min}) \quad (8)$$

粒子 i が粒子 j から受けるトルク $\mathbf{T}_{ij}^n$ は、

$$\mathbf{T}_{ij}^s = \mathbf{R}_{ij} \times \mathbf{F}_{ij}^s \quad (9)$$

と書ける。また、転がり摩擦 $\mathbf{T}_{ij}^r$ は、次式で導入した。

$$\mathbf{T}_{ij}^r = -\mu_r R_i \left| \mathbf{F}_{ij}^n \right| \frac{\boldsymbol{\omega}_i}{|\boldsymbol{\omega}_i|} \quad (10)$$

運動方程式 (1) は、力が速度に依存するため、数値的に積分するには工夫が必要である。本研究では、運動方程式の積分に PCVV 法 (Predictor Corrector Velocity Verlet Method) を用いた。PCVV 法のアルゴリズムは以下の通りである。時刻 t での粒子 i の位置、速度、角速度を $\mathbf{r}_i^{(0)}$, $\mathbf{v}_i^{(0)}$, $\boldsymbol{\omega}_i^{(0)}$ とし、これらを用いて計算した粒子 i に働く力とトルクを $\mathbf{F}_i^{(0)}$ と $\mathbf{T}_i^{(0)}$ とする。まず、次式により位置、速度、角速度の中間的な値 $\mathbf{r}_i^{(1)}$, $\mathbf{v}_i^{(1)}$, $\boldsymbol{\omega}_i^{(1)}$ を求める。

$$\mathbf{r}_i^{(1)} = \mathbf{r}_i^{(0)} + dt \mathbf{v}_i^{(0)} + \frac{dt^2}{2m} \mathbf{F}_i^{(0)} \quad (11)$$

$$\mathbf{v}_i^{(1)} = \mathbf{v}_i^{(0)} + \frac{dt}{m} \mathbf{F}_i^{(0)} \quad (12)$$

$$\boldsymbol{\omega}_i^{(1)} = \boldsymbol{\omega}_i^{(0)} + \frac{dt}{I} \mathbf{T}_i^{(0)} \quad (13)$$

次に、これらの中間的な値を使って求めた各粒子に働く力とトルクを $\mathbf{F}_i^{(1)}$ と $\mathbf{T}_i^{(1)}$ とする。さらに、次式により $\mathbf{v}_i^{(2)}$, $\boldsymbol{\omega}_i^{(2)}$ を求める。

$$\mathbf{v}_i^{(2)} = \mathbf{v}_i^{(1)} + \frac{dt}{2m} (\mathbf{F}_i^{(0)} + \mathbf{F}_i^{(1)}) \quad (14)$$

$$\boldsymbol{\omega}_i^{(2)} = \boldsymbol{\omega}_i^{(1)} + \frac{dt}{2I} (\mathbf{T}_i^{(0)} + \mathbf{T}_i^{(1)}) \quad (15)$$

最終的に、時刻 t+dt での粒子 i の位置、速度、角速度を $\mathbf{r}_i^{(1)}$, $\mathbf{v}_i^{(2)}$, $\boldsymbol{\omega}_i^{(2)}$ とする。

3 球のパッキングシミュレーション

本研究では、粉の形状は球とし、球の大きさはすべて同一として数値計算を実施した。数値計算に用いた各種パラメータの値は、文献 [3] と同じ値を使用した。重力と垂直な方向の境界条件は周期境界条件とし、その周期は粒子の直径 d の 10 倍とした。重力に平行な方向の境界条件は、底面

は剛体壁 (物性値は球と同一) とし, 上面は自由境界条件とした. 数値計算の初期条件は, Porosity が 0.94 となるように粒子をランダムに配置し, 各粒子の速度と角速度はゼロとした.

球の集団を自由落下させ, 運動エネルギーを失った後の球の集団は多孔体となる. 多孔体の Porosity は, 球の集団が含まれる領域の体積と球の外部となる空間の体積の比として容易に計算される. 本研究のシミュレーション結果を用いて算出した Porosity の値を他の計算や実験と比較した結果を図 2(a) に示す. 粉の粒径が大凡 $100\mu\text{m}$ 以下になるとパッキングの結果として得られた多孔体の Porosity 値が細密充填の場合の値 (0.36) より増加する事が知られている. これは, van der Waals 力の大きさが重力と比べて無視できなくなるためと考えられている. 図 2(a) から, 本研究で開発された DEM 法の計算機プログラムが, 粉の粒径の減少にともなう Porosity の増大を正しく再現する事が分かる.

次に, パッキングシミュレーションの結果として得られた多孔体の細孔径分布を求める. ここでは, Gelb らの文献 [4] に述べられている方法を用いた. この方法の要点は, 次の通りである. (1) 細孔中のある点 (a 点とする) での細孔径を求めるとする. (2) 細孔中の任意の点を中心とし a 点を含み細孔壁と交わらない半径が最大の球を描く. (3) これらの球の半径の最大値を a 点での細孔径とする. このようして求められた細孔径分布の計算結果を図 2(b) に示す.

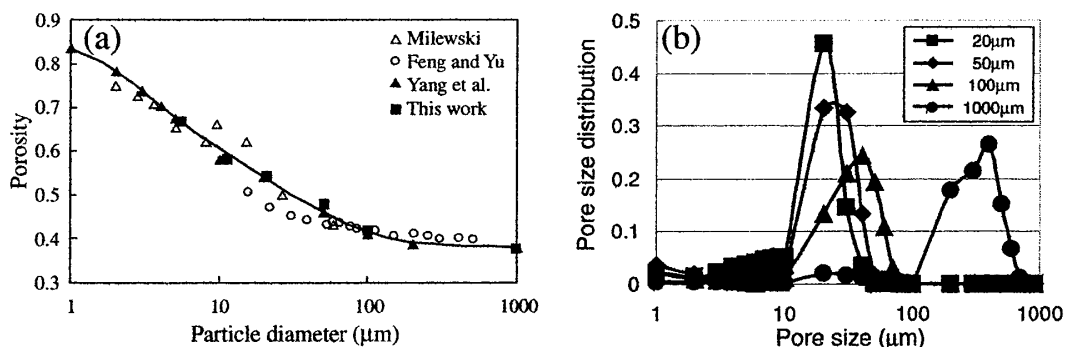


図 2: 球のパッキングシミュレーションの結果

(a) Porosity の球の直径依存性に関し, 本研究の結果が, Yang らの計算結果 [3] 及び Milewski や Feng らの実験結果と比較されている. (b) 粉の粒径が $20\mu\text{m}$, $50\mu\text{m}$, $100\mu\text{m}$, $1000\mu\text{m}$ の場合に細孔径分布の計算結果が示されている.

参考文献

- [1] 例えば, C. Pan, M. Hilpert, and C.T. Miller, Phys. Rev. E **64** (2001), 066702.
- [2] P.A. Cundall and O.D.L. Strack, Geotechnique **29** (1979), 47.
- [3] R.Y. Yang, R.P. Zou, and A.B. Yu, Phys. Rev. E **62** (2000), 3900.
- [4] L.D. Gelb and K.E. Gubbins, Langmuir **15** (1999), 305.