

粒子流の直接数値シミュレーション



研究ノート

辻 裕*

1. はじめに

まず「粒子流」を定義しよう。粒子流とは、「互いに衝突したり接触するほど近い距離にある多くの固体粒子が外力的作用によって集団で運動する場合の流れ」である。したがって、衝突が無視できるような希薄な粒子群の流れは、一見多くの粒子が流れている場合でも、粒子流とは見なされない。通常環境では粒子間には気体または液体が存在するので、粒子流は混相流の一種と見ることができ、一般に粒子流では粒子間に存在する流体の影響よりも粒子同士の摩擦や衝突の影響が現象の支配因子となる点で、通常の流体力学とも一線を画している。

粒子流の身近な例として、砂時計における砂の流れがある。これは容器から排出される粉粒体の流れであるが、粉粒体を扱う工業分野でおなじみである。粉粒体を気体の力によって管内を輸送するいわゆる空気輸送においても、粒子濃度が高くなり、流れがプラグ流やスラグ流と呼ばれる流動パターンになる場合、粒子流として現象を扱う必要がある。化学装置として広く用いられている流動層も粒子流の一種である。さらに土石流、雪崩などの自然界の現象も粒子流に属する。このように粒子流の実例は幅広い分野において見ることができる。

2. 粉粒体マイクロダイナミクス

上の例はいずれも古くからよく知られたもので、それぞれが工学として一分野を築いている。これらの分野における現象の予測は、実験デー

タとそれから得られる相関式を利用する経験的方法によるか、または粒子群を連続体と見なし、その構成方程式をなんらかの方法で求め流体の場合と同様の解析をするかである。いずれの方法も、長年に渡る研究の歴史があり、その割には今だに現象を満足に予測できない状況にある。従来の方法の限界をさとるべきかも知れない。

確かに粒子流を巨視的に見ると、その挙動には予測しがたいことが多くある。ところが一番基本となる要素、つまり1個の粒子に注目すると単に周りの粒子と接触して力を及ぼしあっているだけであり、接触そのものの力学的方程式は単純である。複雑なのは一つの粒子が周りの多くと接触し、それが時々刻々と変化することなのである。そこで記憶容量と計算時間に問題がなければ、単純な方程式系を用い、1つ1つの粒子の運動の積み重ねから粒子の集合、つまりバルクとしての粉粒体の挙動を知ることができるのではないかという期待がでてくる。

まさにこの方法が計算機の能力の増大によって可能になっているのである。これは、個々の分子の運動から連続体としての流体の性質を導くことと同じである。分子の場合と異なり粒子間の摩擦や非弾性衝突を考慮しなければならないが、考え方そのものは単純明解である。このような方法はマイクロダイナミクス手法として最近種々の分野で注目されているが、筆者は粒子流を対象とする意味で粉粒体マイクロダイナミクスなる言葉を使っている。

3. モデリング

個々の粒子が互いに押し合いへし合いしながら、全体として流動する粒子流の現象は、満員電車の中の人の流れを連想させる。そこで満員電車の中の人の中に働く相互作用力のモデリン

*辻 裕 (Yutaka TSUJI), 大阪大学工学部, 産業機械工学科, 教授, 工学博士, 設備装置工学

グを考えよう。ぎゅっと押されれば、その変位に比例する復元力が生じる。これは人と人の間に弾性スプリングをかませることで表現できる。しかし押されるばかりでなく、押される速度に比例する抵抗（粘性減衰力）も働くので、スプリングの他にダッシュポットも設ける必要がある。さらに固体摩擦に相当する摩擦力も考慮の対象となる。

粒子流の数値シミュレーションでは、これと同じモデリングがなされる。つまり互いに接触して流動する粒子の間に作用する力が、スプリング、ダッシュポット、スライダのような機械力学の概念を用いて図1のように表される¹⁾

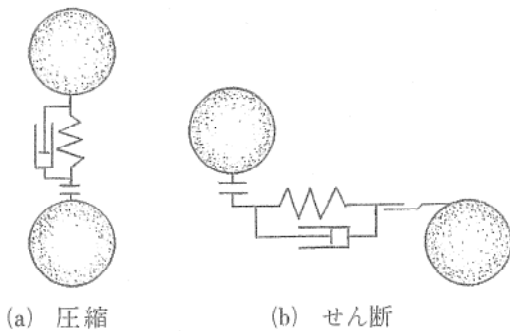


図1 粒子間相互作用のモデル

図1は粘弾性物体のモデルとして知られているフォークト物体（ケルビン物体とも呼ばれる）である。

外力を以上のようにモデル化した後、個々の粒子の運動方程式がたてられるが、一般に1つの粒子は複数の周囲の粒子と接触しているので、それらの粒子からの寄与を全て考慮しなければならない。厳密には互いの接触を通じて離れた粒子とも力を及ぼし合うが、1つの粒子に着目した場合、その粒子が直接接触している粒子との相互作用のみが考慮される。この単純化は計算効率の面からきわめて効果的である。とくに実際問題に有用な結果を得ようとすれば多くの粒子に対し計算を実行する必要があるので、この単純化がなければ計算は事実上不可能に近い。

運動方程式は適当な時間刻みごとに数値的に積分される。粒子が受ける外力がわかれば運動方程式によって変位が求まり、その変位に基づいて新たに外力が与えられる。この繰り返しによって計算が時間的に進行される。ここで時間

刻み幅が問題となる。計算を効率よく行うためには時間刻み幅を大きく取る必要があるが、あまり大きく取ると計算が不安定となる。

4. 周期境界

粒子間衝突や接触を考慮した計算を多数の粒子について実施する場合、研究者を悩ますことは、膨大な記憶容量を要することである。記憶容量の問題を解決する巧妙な方法として、周期境界の概念を用いる方法があり、十分発達した定常状態での流れの計算に対し有効である²⁾。すなわち流れ方向の座標が周期的に繰り返す境界で区切ることができると仮定され、計算の実際においては1組の境界で囲まれた領域のみが計算の対象となる。図2において下流側の境界を越えた粒子は、同じ速度および断面内の位置をもって上流側の境界から再び投入される。これにより周期境界内の一定数の粒子のみに注目すればよい。以上の周期境界の方法は、乱流のLESシミュレーションでも用いられており、定常状態だけを問題にするなら非常に効果的である。

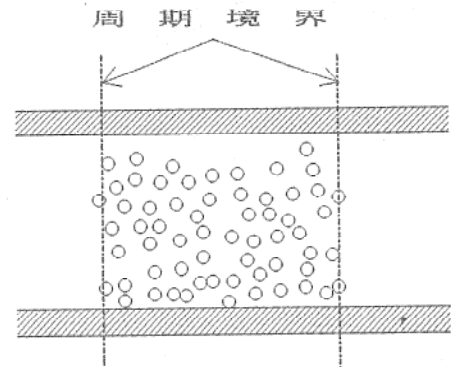


図2 周期境界

5. 結果

ここで述べた数値シミュレーションの応用例としては容器内の粉体の応力、容器からの排出時における粒子流動^{3,4)}、粉体層のせん断崩壊過程⁵⁾などがある。さらに最近、実際の地形データを入力して雪崩現象がシミュレーションされ、この方法がそのような用途にも有効であることが示された。我々は、重力だけでなく流体力をも考慮に入れ、高濃度空気輸送においてみ

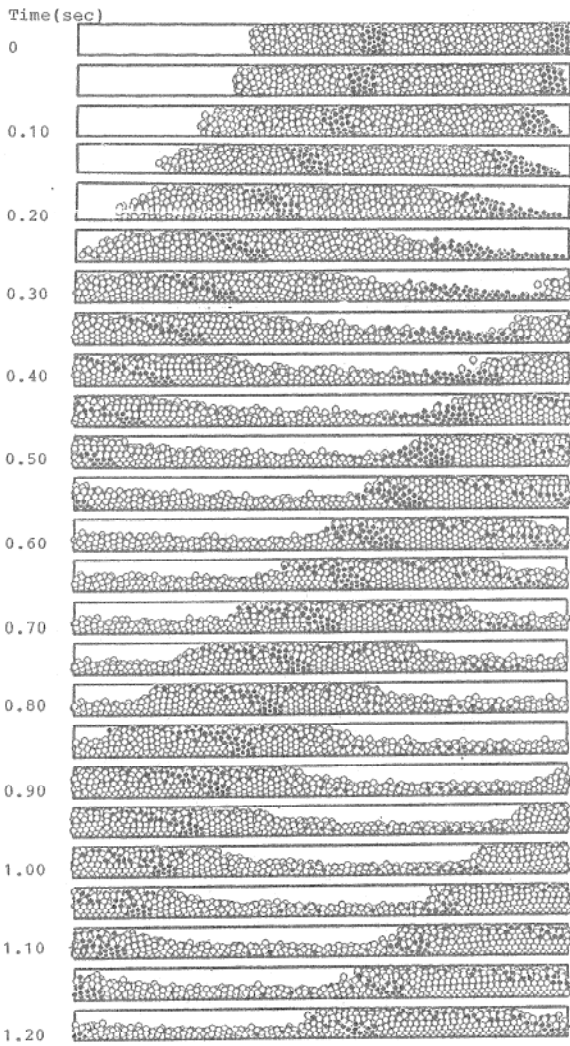


図3 プラグ流
 (粒子数=1000, 粒子径=10mm, 粒子密度=1000kg/m³,
 管径=50mm, 周期境界の長さ=800mm, 空気速度=
 2.4m/s)

られるプラグ流をシミュレーションすることを試みた。図3にその結果を示す。これは初期状態で管の右に寄せられた粒子群に右から左へ

定速度の気流が流れ始めた場合の現象を模擬したものである。図中の黒塗の粒子は個々の粒子の動きを見やすくするために色付けされたものである。管底に堆積粒子群を残しながら一部の粒子群が管断面を塞ぎ進行する様子は、実際の観察結果とほとんど同じである。我々の研究室ではCRTの画像からアニメーションフィルムも製作しており、それを見ると結果が一層リアルであることがわかる。

6. あとがき

現状では、本稿の直接数値シミュレーションをより実際的な問題に適用しようとするれば、かなり長い計算時間と大きな記憶容量を要するという問題があり、計算機ハードウェアの一層の進歩が待たれる。

参考文献

- 1) Cundall, P.A. & Strack, O.D.L. (1979), *Geotechnique*, 29, p. 47.
- 2) Campbell, C.S. & Brennen, C.E. (1985) a, *J. Applied Mechanics(ASME)*, 52, p. 17.
- 3) 木山・藤村 (1983), 土木学会論文報告集, 333, p. 137.
- 4) 日高・今井・三輪 (1988), 粉体工学会昭和62年度春期研究発表会講演要旨集, p. 30.
- 5) 日高・金星・三輪 (1989), 粉体工学会誌, 26, p. 77.
- 6) Nakanishi, H. & Toyoshima, S. (1989), *KOBELCO TECHNOLOGY REVIEW* 5, pp. 27-29.
- 7) 田中・石田・辻, 投稿中