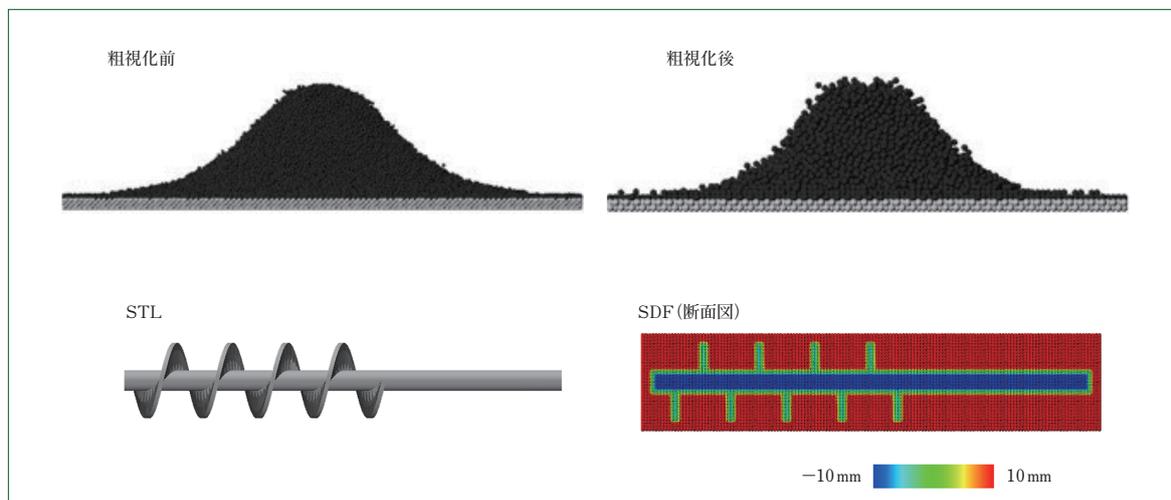


粉粒体シミュレーション技術の開発

Development of Powder and Granular Material Simulation Technology

● 廣瀬 良太*
Ryouta HIROSE



粗視化前後での安息角シミュレーション結果とスクリーウの SDF モデル
Simulation results of angle of repose before and after coarse graining and SDF model of screw

粒子動力学法をもととした粉粒体のシミュレーション手法には分子動力学法に似た相互作用が用いられており、さらにエネルギー散逸項を付加した定式化となっている。そこで、我々が開発したくりこみ群分子動力学法のくりこみ変換則を参考に、今回粉粒体のシミュレーション手法の粗視化変換則を新たに開発した。この変換則を用いることで、少ない粒子数で相似な結果が得られることを確認した。さらに、符号付距離関数を用い剛体形状を表現することで、複雑な剛体モデルを含む粉粒体シミュレーションを高い形状精度と低い計算コストで実現した。本報では、この技術をスクリーウフィーダのシミュレーションに適用し、搬送量が理論式と比較してよく一致することを示す。

Simulation methods for powder and granular materials based on particle dynamics method use interactions similar to those used in molecular dynamics method, and are formulated to include an energy dissipation term. Therefore, based on the renormalization transformation rule of the renormalization group molecular dynamics method that we had developed, we developed a new coarse-grained transformation rule for the simulation method of granular materials. We confirmed that using this transformation rule, similar results can be obtained with a small number of particles. Furthermore, by expressing rigid body shapes using a signed distance function, we were able to achieve powder and granular material simulations including complex rigid body models with high shape accuracy and low computational cost. We applied this technology to the simulation of a screw feeder and showed that the conveying amount closely matched the theoretical formula.

1 まえがき

当社製品には粉状やペレット状の材料などを取り扱う製品が多くある。これら製品の設計・開発を行うに当たり、シミュレーションで粉粒体の挙動・流動を予測することは非常に重要な課題である。

粉粒体シミュレーション手法として、粒子動力学法をもとにした手法が提案されている。これを一般的に用いられる粉粒体シミュレーション手法である個別要素法 (DEM: Distinct Element Method) と比較すると、パラメータが少なくさまざまな現象を再現できるわけではないが、計算量が少なく高速に計算することが可能な手法であるといえる。しかし、当社

製品は規模が大きなものがあり、粒子動力学法を用いたとしても計算量・計算時間の観点からシミュレーションでは難しい問題が多くある。

これまで我々はくりこみ群分子動力学 (RMD: Renormalization Molecular Dynamics) 法⁽¹⁾の開発を行ってきた。RMD法は、分子動力学 (MD: Molecular Dynamics) 法にくりこみ変換を適用することで、MD法の利点を継承しつつ少ない粒子数で相似な計算結果が得られる手法であり、これまで弾性解析⁽²⁾・流体解析⁽³⁾・塑性変形⁽⁴⁾や高分子⁽⁵⁾などのシミュレーションに応用されてきた。

そこで、RMD法のくりこみ変換則の考え方をもとに粒子動力学法の粗視化変換則を提案する。さらに剛体形状モデル

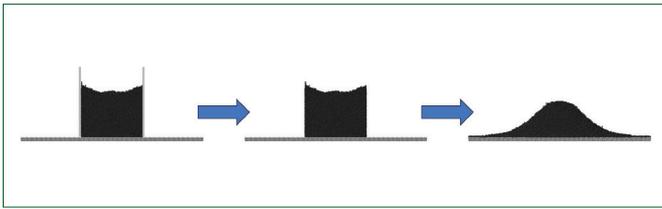


図1 安息角シミュレーション
Angle of repose simulation

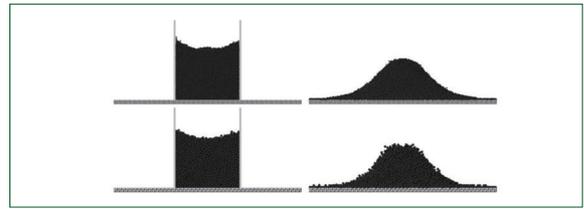


図2 粗視化前後の安息角シミュレーション結果
Simulation results of angle of repose before and after coarse graining

においても、符号付き距離関数 (SDF : Signed Distance Function)⁽⁶⁾を用いたモデルを適用することで形状精度を保ちつつ低い計算コストでの計算を可能とした。

2 シミュレーション手法

2.1 粒子動力学法をもとにした粉粒体シミュレーション手法⁽⁷⁾

粉粒体のシミュレーション手法として、粒子動力学法をもとに排除体積効果のための斥力と運動エネルギーの散逸で記述された手法がある。この手法において粒子間相互作用は

$$f_i = \sum_{i \neq j}^{\text{contact}} \left(\frac{\partial \phi_{ij}}{\partial r_{ij}} + \sum_{\beta=n,t} r_{\beta} v_{ij,\beta} \right) \dots \dots \dots (1)$$

の式で表される。第1項がポテンシャルによる斥力項であり、第2項が運動エネルギーの散逸による減衰項である。ここで、 f_i は粒子*i*にかかる力、 ϕ_{ij} と r_{ij} 、 v_{ij} はそれぞれ、粒子*ij*間の相互作用ポテンシャルと距離と相対速度である。また、 γ は減衰係数であり、 γ と v_{ij} の添え字となっている $\beta=n,t$ は粒子*ij*の法線成分と接線成分を表している。相互作用ポテンシャルは

$$\phi_{ij} = \begin{cases} 4\epsilon \left\{ \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 + \frac{1}{4} \right\}, & |r_{ij}| \leq 2\frac{1}{6}\sigma \\ 0, & |r_{ij}| > 2\frac{1}{6}\sigma \end{cases} \dots \dots \dots (2)$$

である。ここで、 ϵ と σ はそれぞれ斥力の大きさと粒子径を決定するパラメータであり、MD法のLennard-Jonesポテンシャルの斥力部分と同様のかたちとなる。この手法を用いて実機スケールの粉粒体シミュレーションを実施しようとした場合、粒子数が多くなり計算時間を要することがある。

2.2 分子動力学法のくりこみ変換則⁽¹⁾

現実の系が体積 $V=L^3$ 、原子数 N を持つとする。この系にくりこみ群を適用し、相似な系(L', N')を作る。

$$\begin{aligned} L &\rightarrow L' = L \\ N &\rightarrow N' = \lambda^{-3} N \dots \dots \dots (3) \\ \lambda &= 2^n \end{aligned}$$

n はくりこみ回数である。

くりこみに際し、物理量は次のようになりこまれる。

$$\begin{aligned} m &\rightarrow m' = \lambda^3 m \dots \dots \dots (4) \\ \phi(r) &\rightarrow \phi' = \lambda^3 \phi \left(\frac{r}{\lambda} \right) \end{aligned}$$

ここで、 m は質量、 ϕ は原子間ポテンシャルである。また、変数は次のようにスケールされる。

$$\begin{aligned} q &\rightarrow q' = q \dots \dots \dots (5) \\ \dot{q} &\rightarrow \dot{q}' = \dot{q} \end{aligned}$$

ここで、 q は座標である。

くりこみ変換によって時間はスケールされない。しかし、時刻間 dt はくりこまれる前の λ 倍に取ることが可能である。

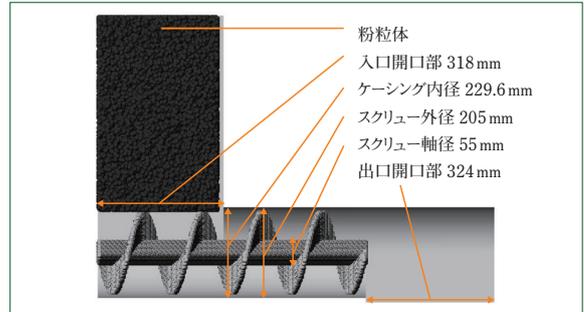


図3 スクリューフィーダ解析モデル
Screw feeder analysis model

2.3 粗視化変換則⁽⁸⁾

くりこみ群分子動力学法のくりこみ変換則を参考に、粒子動力学法での粉粒体シミュレーション手法の粗視化変換則を開発した。質量やポテンシャルなどの粗視化変換則はくりこみ変換則と同様に変換する。さらに、MD法と粒子動力学法による粉粒体シミュレーションとの違いは運動エネルギーの散逸項である。変換前後のポテンシャルによる粒子間相互作用力関係と散逸力の関係が同様になるように

$$\gamma \rightarrow \gamma' = \lambda^2 \gamma \dots \dots \dots (6)$$

とした。この粗視化変換則を用い粗視化前後で相似な結果が得られることを確認する。

3 安息角のシミュレーションによる粗視化変換則の確認

まず、粒子動力学法による粉粒体シミュレーションの粗視化変換則の確認として安息角のシミュレーションを実施した。安息角のシミュレーションは、図1に示すように、底面と側面を壁で囲まれた領域に粉粒体を入れ、緩和計算により安定した状態を初期状態とする。その後、側面の壁を外すと粉粒体が崩れる。崩れた際の粉粒体の分布を粗視化変換の有無と比較する。

粉粒体材料のパラメータは粒径1.350 mm、ヤング率3.096 GPa、真密度1370.0 kg/m³のコークスを想定して、 $\epsilon=9.434 \times 10^{-2}$ J、 $\sigma=1.203 \times 10^{-3}$ mとした。また、減衰係数は法線成分、接線成分ともに $\gamma=1.257 \times 10^{-1}$ kg/sとした。減衰係数を変更することによって安息角を変えることができる。

図2に、粗視化前後でのシミュレーションの可視化結果を示す。粉粒体の分布は、粗視化の前後で相似な結果が得られていることが確認できた。

4 スクリューフィーダへの粗視化の適用

4.1 シミュレーションモデルと条件

本手法を用いてスクリューフィーダへの適用を実施した。

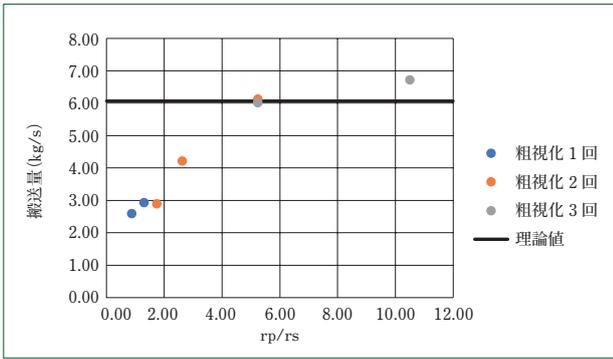


図4 スクリュー粒子と粉粒体粒子の粒径比に対する搬送量
Conveying amount relative to particle size ratio of screw particles to powder and granular material particles

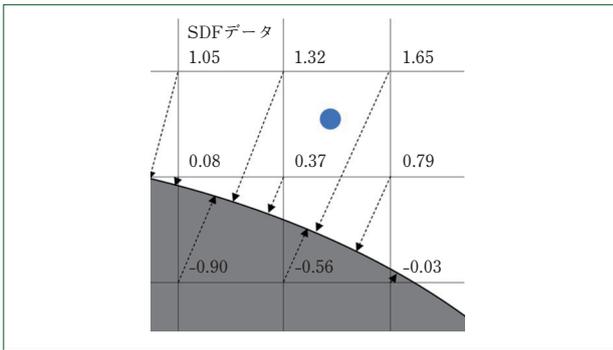


図5 符号付き距離関数
Signed distance function

図3に、シミュレーションモデルの形状を示す。粉粒体粒子は、安息角シミュレーションと同様のコークスを想定した材料とした。スクリーは外径205mm、軸径55mm、ピッチ150mmで4.5ピッチ分の長さとなっている。また、ケーシングは入口開口部318mm、出口開口部324mmとなっており、その間がスクリーと同軸の229.6mmの円筒形状となっている。fcc構造で形状に合うように粒子を配置し剛体モデルとして計算した。ケーシングは複数の面を関数で認識し、粒子と面との間に斥力を与えた。

粗視化の回数は1回、2回、3回と変更し、それに伴いスクリー粒子の粒子径も変更してシミュレーションを実施した。

4.2 シミュレーション結果

図4に、100r/minでスクリーを回転させた際の粗視化後のスクリー粒子径 r_s と粉粒体粒子径 r_p の粒径比に対するスクリーフィーダの搬送量のグラフを示す。プロットが計算結果で黒の実線が搬送量の理論値を示している。搬送量の理論値 Q は

$$Q = a \frac{\pi}{4} (D_s^2 - d_s^2) p_s n_s \rho_p \dots \dots \dots (7)$$

より求められる⁽⁹⁾。このとき a は充填率、 D_s 、 d_s 、 p_s はそれぞれスクリー外径、シャフト外径、ピッチであり、 n_s はスクリーの回転数、 ρ_p は粉粒体の嵩密度である。形状精度と計算量を調整し粉粒体粒子に対してスクリーの分解能を十分に保つことでシミュレーション結果が搬送量の理論値に近い値となることが確認できた。

しかし、シミュレーション対象となるモデル変更に伴い調整が必要となることや、スクリー側の分解能によって粉粒

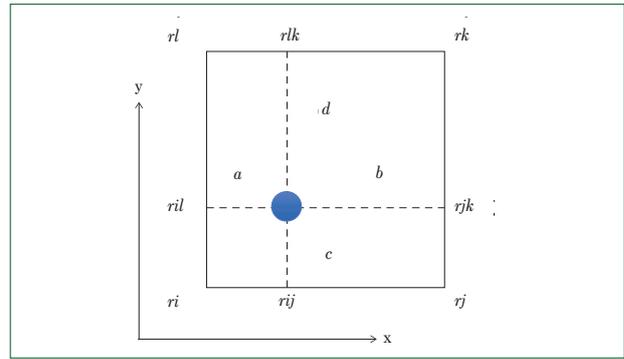


図6 SDFを用いた距離と法線ベクトルの計算
Calculating distance and normal vectors using SDF

体側の分解能を上げられないという問題が生じる。

5 符号付き距離関数SDFを用いた剛体の表現

5.1 符号付き距離関数SDF

粒子を配置した剛体モデルの問題点を解決する方法としてSDFによる剛体表現を用いた。SDFデータは対象の物体を内包する領域をセル分割し、さらに図5に示すように、セル分割したノード点と物体との最短距離に対して外側为正、内側が負の符号を付加したデータである。SDFを用いて任意の点と物体との距離を計算する場合、その点を内包するセルの周りの(2次元であれば4点、3次元であれば8点の)SDF値から線形内挿の計算をすることで求めることが可能である。形状精度はセルサイズによって決定される。形状精度を上げることを目的にセルサイズを小さくした場合、ノード点が増加するのでSDFデータ量も多くなり、計算時に使用するメモリ量は増大する。しかし、任意の点と物体の距離計算は、点が所属するセルのノード点上のSDFデータから内挿計算をするだけであるため、分解能による計算量は変わらない。このSDFを用いることで低計算コストかつ高精度な剛体に計算を行うことができる。

5.2 SDFを用いた粒子剛体間の距離と法線の計算方法

例として2次元の場合の粒子と、SDFを用いた剛体モデル(SDFモデル)との距離と法線ベクトルを計算する方法を示す。

図6に、粒子の所属セル情報を示す。ここで r_i 、 r_j 、 r_l 、 r_k はSDFの値であり a 、 b 、 c 、 d は各辺と粒子の距離を示している。まず、 r_i と r_j の内挿から r_{ij} (r_{ij} で示す点での表面からの距離)を計算すると、

$$r_{ij} = \frac{b \cdot r_i + a \cdot r_j}{a + b} \dots \dots \dots (8)$$

となる。また r_{lk} 、 r_{il} 、 r_{jk} についても同様に計算することができる。粒子とSDFモデルとの距離 R は r_{ij} と r_{lk} もしくは r_{il} と r_{jk} の内挿から求めることができ、式は

$$R = \frac{bd \cdot r_i + ad \cdot r_j + ac \cdot r_k + bc \cdot r_l}{(a + b)(c + d)} \dots \dots \dots (9)$$

となる。

法線ベクトルは r_{ij} と r_{lk} 、 r_{il} と r_{jk} の傾きから求めることができ、式は

$$(n_x, n_y) = \left(\frac{r_{jk} - r_{il}}{a + b}, \frac{r_{lk} - r_{ij}}{c + d} \right) \dots \dots \dots (10)$$

となる。

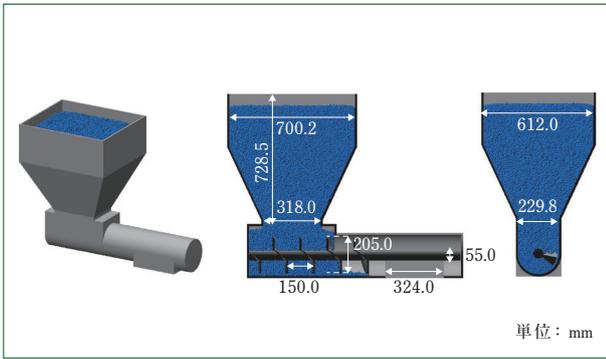


図7 スクリューフィーダ解析モデル
Screw feeder analysis model

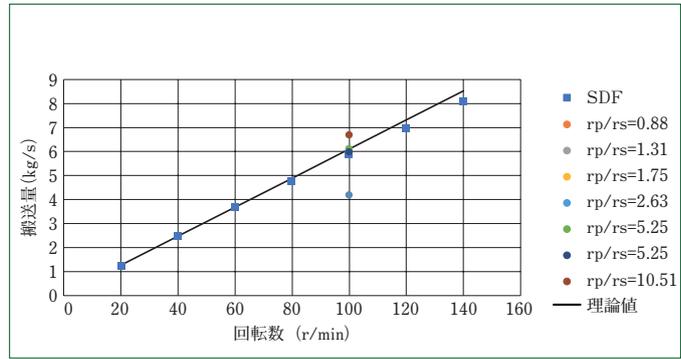


図8 搬送量の結果
Conveyer capacity results

5.3 粉粒体粒子 - SDF剛体間の相互作用モデル

粒子を配置した剛体モデルでは、粉粒体粒子 - 剛体モデル内粒子のポテンシャルを設定し相互作用を計算していた。しかしSDFモデルから得られるのは粉粒体粒子 - SDF剛体間の距離と法線ベクトルのみである。このことから、同様にポテンシャルを設定し相互作用の計算を実施すると剛体表面の法線成分の力しか発生しない。結果として粉粒体は剛体表面上で何の抵抗もなく滑ってしまうことが考えられる。そこで粉粒体粒子 - SDF剛体間の相互作用モデルが必要である。

相互作用モデルとして、SDF剛体表面と粒子との相互作用の法線成分 $f_{rp\perp}$ は

$$f_{rp\perp} = -\frac{\partial\phi}{\partial r} - \gamma v_{r\perp} \dots\dots\dots (11)$$

となる。

粉粒体粒子 - SDF剛体間の相互作用は、粉粒体粒子間相互作用と同様にLennard-Jonesポテンシャルの斥力部分と減衰項とする。また、減衰係数 γ は反発係数 e から設定する¹⁰⁾。次に、水平成分は

$$f_{rp\parallel} = -\frac{\mu N}{|v_{r\parallel}|} v_{r\parallel} \dots\dots\dots (12)$$

となり、クーロン摩擦相当の減衰力を与える。ここで、 μ は摩擦係数、 N は垂直抗力である。これにより動摩擦を再現する。

6 スクリューフィーダへのSDFモデルの適用

6.1 スクリューフィーダへのSDFモデルの適用

図7に、スクリューフィーダの計算機実験モデルを示す。スクリューやホップ・ケーシングについてはSTL(3次元形状データ)からSDFデータを作成した。3回くりこむことで変換後の粉粒体の粒子数を20万粒子とした。粉粒体は初期配置をSTLで指定し、その内部にランダムに粒子を生成し、緩和計算を実施することで初期状態を作成した。これまでのシミュレーションと同様に粉粒体粒子はコークスを想定した材料とした。粉粒体粒子 - SDFモデル間のポテンシャルは粒子同士のポテンシャルと同様のものを使用した。また、反発係数 e は0.5、摩擦係数 μ は0.413とした。出口開口部から出て落下した粒子は消去する。

6.2 SDFモデルでのシミュレーション結果

搬送量を予測すべくスクリューの回転数を20~140r/minとし、シミュレーションを実施した。図8に、回転数と搬送量

の関係を示す。丸のプロットが粒子を配置したスクリュー、四角のプロットがSDFモデルでのシミュレーション結果であり、黒の実線は理論値を示している。搬送量の理論値とSDFモデルでの解析結果を比較すると、非常によく一致していることが確認できる。

7 むすび

- (1) 粒子動力学法をもとにした粉粒体シミュレーション手法に対し、RMD法のくりこみ変換則を応用することで粗視化変換則を確立した。
- (2) 安息角のシミュレーションを実施し、粗視化の前後で相似な結果が得られることを確認した。
- (3) 複雑な形状を有するモデルに対し、高い形状精度と低い計算コストでの計算を実現することを目的としてSDFを適用した。
- (4) これらの技術を適用しスクリューフィーダの解析を実施した結果、粗視化した粒子数の少ない系で粒子を配置した剛体モデルのように、粉粒体粒子径と剛体の粒子径の関係を調整することなく理論値とよく一致した搬送量を得られることを確認した。

(参考文献)

- (1) 市嶋大路, シミュレーション方法 シミュレーションプログラム及びシミュレーション装置, 特開2016-218767.
- (2) 市嶋大路, 大西良孝, 廣瀬良太, くりこみ群分子動力学法の開発, 住友重機械技報, no.168, 2008.
- (3) 市嶋大路, 廣瀬良太, 大西良孝, くりこみ群分子動力学法による流れの計算機実験, 住友重機械技報, no.173, 2010.
- (4) 大西良孝, 檜垣孝二, 市嶋大路, 廣瀬良太, 小林義崇, くりこみ群分子動力学法による回転塑性加工シミュレーション第3報 塑性加工シミュレータの現場実証, 住友重機械技報, no.186, 2015.
- (5) 小林義崇, 市嶋大路, くりこみ群分子動力学法を用いた高分子シミュレーション, 住友重機械技報, no.194, 2018.
- (6) 茂渡悠介 (2014). 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, 東京大学工学系研究科博士論文.
- (7) 青木圭子, 粉粒体の流動化, 日本物理学会誌, Vol.55(2000)no.1, p.3
- (8) 廣瀬良太, 市嶋大路, 粉粒体のシミュレーション方法及びシミュレーション装置, 特開2017-27217.
- (9) 粉粒体共有装置委員会, 粉粒体の貯槽と供給装置, 日刊工業新聞社, 1963, p.247.
- (10) 和田浩二, 千秋博紀, 松井孝典, 遊・星・人: 日本惑星科学会誌 13(4), 233-240, 2004-12-25.