固気二相流の数値シミュレーションとモデル*

Numerical Simulation of Gas-Solid Flows and Modeling

辻 裕 **

TSUJI Yutaka

Abstract Mathematical models are necessary more or less in the simulation. In general, particle-fluid interaction and particle-particle interaction are modeled in discrete particle simulation. The more universal the models, the more bearable for various purposes. Some examples of simulations which are regarded as earliest works in this field are shown.

Keywords : Discrete Particle Simulation, Particle-Particle Interaction, Particle-Fluid Interaction, Particle-Turbulence Interaction, Momentum Coupling, Mass Coupling, Energy Coupling

1. はじめに

自分が数値シミュレーションに携わっていると考えている人々は大学にも企業にも多くいると思うが、数値シミュレーションという用語はそれぞれの人が考えている以上に世の中では広い意味で用いられているようだ。そこで本稿で使う混相流の数値シミュレーションを定義しておこう。先ず流動現象を記述する基礎式が与えられていることが前提である。その基礎式を離散化して数値的に解き、知りたい現象を模擬するものとしてここで定義する。この定義は本誌の読者には当たり前かもしれないが、一般的にはやや狭い。何らかのモデルに基づいて数値的に現象を模擬するものは全て数値シミュレーションと呼ばれる。また、混相流のように工業的に広く利用され且つ現象が複雑なために理論的扱いが困難とされる流れにおいては、古くから経験式が数多く提案され、それらを計算機に取り込み、必要に応じて種々の条件に対して適用し、設計その他の目的で現象予測するものも数値シミュレーションと呼ばれている。以下に述べるシミュレーションは、そのようなものではないことを先ず断っておく。

数値シミュレーションを基礎式の数値解法に基づくものと定義した上で、シミュレーションの目的を2つの極端な例に分類すると、以下のようになるのではなかろうか。1つは、実験の代替手段として計算で現象を予測し、最適操作条件を見つけたり設計などの手段として用いるものである。他の1つは未知の現象を発見したり追求する目的で使うものである。数値シミュレーションに基づく方程式系が厳密であればあるほど、オールマイティであるが、そのような厳密性にこだわっておれない状況が工業現場にはある。そこで前者の目的の場合、実験で得た知見に基づいて適当な数値モデルが作成される。このようなシミュレーションでは実験事実の後追いで理由付けがなされるので、本質的には実験を越えることはできない。しかし、現象を支配する因子が多岐に渡るほど、種々雑多の知見をモデル化したシミュレーションによって、時間と労力の節約をはかることが可能となる。混相流の数値シミュレーションはこの目的に使われることが多い。近年、著しく普及している市販のソフトは全てこの目的のために作られていると考えてよい。従ってモデルの適用範囲に付随する

* 2001.5.8 受付

** 大阪大学工学研究科機械物理工学専攻 〒565-0871 吹田市山田丘2番1号
TEL (06)6879-7315 FAX (06)6879-7315 E-mail:tsuji@mech.eng.osaka-u.ac.jp

限界を有することを常に頭に置きながら使用する必要がある。ただしモデルが全て実験事実依存して作成されるかというところとは限らない。実験によらず物理学的に見て合理的なモデルが作成されることもある。その場合には、実験の単なる代替手段ではなく、現象そのものの追求の目的にも使われる。

後者の目的、すなわち未知の現象を発見したり追求する目的が達成されるためには、用いられる数理モデルは絶対的な信頼性を有しなければならない。流体現象の記述モデルとしてきわめて信頼性の高い数理モデルであるナビエ・ストークス式を絶対と見なす立場にたって、ナビエ・ストークス式だけでシミュレーションを行った場合には、たとえナビエ・ストークス式の手の平の上の現象と言えども、発見と言えるような成果が得られる。

最近、そのようなアプローチを目指す試みが徐々に始まっている。文献[1]、[2]。このようなシミュレーションでは、モデルに頼らないことに特色があり、例えば、固体粒子に働く力に関しても抵抗係数のような概念は使われない。固体粒子を移動する境界と見なし、ナビエ・ストークス式の解として得られる粒子表面の応力の積分から個々の粒子に働く力が求められる。もちろん各瞬間の粒子の周りの流れも解かれる。この方法を、多数の粒子が存在する工業現場で遭遇する固気二相流に適用することは非現実的である。また固気二相流の場合には、粒子間の衝突や接触を扱う際、間に介在する流体の影響を無視することができ、衝突や接触に関して適当なモデルが利用できるので、ナビエ・ストークス式と衝突・接触モデルの組み合わせで後者の目的にも耐えられるシミュレーションが可能である。しかし、固液二相流の場合には衝突や接触を考える時一般に粒子間にある流体の影響が無視できない。いわゆる潤滑効果が効くのである。固液二相流を離散粒子法で解く場合にはナビエ・ストークス式だけに依存する方法は計算負荷が膨大になるという欠点はあるが、他の方法が持ち得ない特色を有する。そこで限られた粒子数であってもこのような方法で厳密な計算を行い、工業的な計算で必要なモデルを作成する目的でこの種のシミュレーションがなされるであろう。

上では、極端な場合について述べたが実際には、両者の中間にある場合が多い。つまりナビエ・ストークス式以外の何らかのモデルが登場する。そのモデルの汎用性が高ければ高いほど、結果の信

憑性は高いが、一般にモデルが厳密であるほど計算負荷が高くなる。

2. モデリング

固気二相流のシミュレーションの歴史を振り返れば殆どモデルの歴史そのものである。固体粒子と流体の混合物を1つの流体と見なしたり(1流体モデル)、2つの流体と見なす方法(2流体モデル)は古くから多くの人々によって研究されてきた。これらは連続体モデルと呼ばれている。連続体モデルは現在実用的な計算に広く用いられている。これらのモデリングは固気二相流に限らない。気液二相流や固液二相流あるいは3相流でも同様である。連続体モデルの中で具体的に何がモデル化されるかといえば、各種の応力項なのである。単相乱流の平均流を支配するレイノルズ方程式の中で、変動成分の相関が種々のレイノルズ応力となって式中に登場するが、それと同様にして、混相乱流で変動成分の相関項が登場する。混相乱流では、流体の変動に加えて粒子相の変動(分散密度の変動、速度の変動)が存在する。流体変動成分同士の相関に加えて、粒子変動成分同士の相関、流体変動成分と粒子変動成分の相関が式中に表れ、考えなければならない相関項が劇的に増える結果となる。各々の相関項に対してモデルが提案されてきた。あるモデルは経験的、またあるモデルは粒子運動の微視的な考察に基づいて理論的に誘導される。それらを本稿で紹介するのは筆者の手に余る。

比較的新しい方法として個々の粒子を扱うものがあり、離散粒子法とかラグランジュ法などと呼ばれている。連続体モデルに基づく方法に比べると、モデルの数は少なく、またモデルの物理的な意味は理解しやすい。以下には主にこの離散粒子法に関係するモデリングに限って話を進める。

離散粒子法では何がモデル化されるかを端的に言えば、次の2種類の相互作用に尽きる。

1. 粒子と流体の相互作用
2. 固体間の相互作用

モデルができれば、それらを微分方程式に組み込むことに大きな障害はない。

2.1 粒子と流体の相互作用

粒子と流体の相互作用はさらに次の3種類に分類することができる。Fig. 1。

- (1) 運動量の交換
- (2) 物質の交換
- (3) エネルギーの交換

Fig. 1 Particle - Fluid Interaction

運動量の交換として登場するモデルの代表は流体抵抗力のモデルである。粒子の大きさと粒子・流体間の相対速度に基づくレイノルズ数が十分小さい場合にはストークス抵抗のようなナビエ・ストークス式の理論解が使われる。粘性流体を数理的に研究する人達の多くはナビエ・ストークス式の理論解や近似解を追求してきた。無限に広い一様流に単独に置かれた球の周りの流れを出発点として、様々な複雑要素を考慮する研究へと進んできた。非定常、非球形、流れ場の非一様性、他の粒子や境界との干渉など多岐に渡る。これらの成果は文献[3]に豊富に紹介されている。

レイノルズ数が大きくなると抵抗係数によるモデルが一般に使われる。簡単に扱うために、一様流中に静止している球に対して得られた結果がしばしば適用されるが、抵抗係数が様々な因子の影響を受けることはよく知られている通りである。中間レイノルズ数および高レイノルズ数の場合の流体抵抗の研究も低レイノルズ数の場合と同様、種々の因子の影響を調べるという経過を経た。ただし、計算機の能力の不足のため殆どが実験的研究であり、ナビエ・ストークス式を直接数値的に解いて影響を調べる研究が報告されたのは比較的最近になってからである。広範囲に渡って系統的なデータを実験から得るには限界があるため、実験結果に基づいて多くのモデルが作成されたが、それらのモデルを使用する場合、それらのモデルの元になった実験の条件に注意する必要がある。

物質交換とエネルギー交換は同時に起こることが多い。例えば、蒸発、凝縮、乾燥、燃焼などは物質交換とエネルギー交換を同時に考えなければなら

ない。物質交換やエネルギー交換に関しても多くのモデルが提案されている。これらの現象の基礎は分子レベルで説明されるものであるが、経験モデルとしては、流体抵抗の場合と同様の式が用いられる。流体抵抗が速度の差に依存することと同様に、物質交換の場合には、濃度差や質量差に依存し、伝熱の場合には温度差に依存する。そして流体抵抗に抵抗係数があるように、物質交換にはシャーウッド数、伝熱の場合にはヌッセルト数が導入される。

上で述べた運動量の交換は粒子と流体の直接的な相互作用であるが、他にもっとやっかいな相互作用がある。それは粒子と流体乱れの相互作用である。この相互作用は本質的には運動量の交換によるものである。実験事実としては多くの蓄積があるが、計算による予測は今もまだ困難であり、流体力学者の最も興味を引いている現象の1つとなっている。これについては、3節で再度触れる。

2.2 固体間の相互作用

固体間の相互作用は次の2つに分類することができる。

(1) 粒子と境界壁

(2) 粒子と粒子

粒子は境界壁に接触したり衝突することによって、力学的エネルギーや熱的エネルギーの授受が生じる。個々の粒子が衝突する際の速度変化は、もし反発係数や摩擦係数を既知とすれば、衝撃方程式の解として得られる。

粒子濃度が低い場合、粒子同士の衝突や接触は考慮する必要がない。濃度が高くなると、それらを考慮しなければならない、とは誰でも考えることであるが、では考慮すべきか否かの判断はどうすればいいのか。粒子間の距離がある程度以下になれば考慮するというのも1つの考え方であるが、もしFig. 2 (a)のように空間に分布している粒子が全て同じ速度を持っていたら、たとえ粒子間距離が短くても衝突しない。しかしFig. 2 (b)のように粒子は一般にランダムな速度を持っているので、Fig. 2 (a)のようなことは起こりえない。Fig. 2 (b)で粒子間衝突の必要性の判断は、粒子の流体に対する応答時間と粒子の平均衝突時間の比較によることになる。

きわめて簡単なモデルで、複雑な現象を模擬できた例を紹介しよう。循環流動層のライザー部のような所では粒子は一様に分散するのではなく、クラスターと呼ばれる集団ができ、その結果、濃

Fig. 2 Velocity Vectors of Particle

度むらが生じることは実験家の間では知られていた。筆者の研究グループ[4]は、粒子が非弾性衝突を繰り返すことによって、クラスターが発生することを明らかにした。Fig. 3は、その結果である。一般に濃度むらの原因は非弾性衝突以外にもあるが、Fig. 3は粒子間衝突が流れの大局的な構造を決定することを示した点で興味深いと考えている。

粒子濃度が高くなり、粒子が分散状態を保つことが困難となると、粒子は互いに接触状態を保つ

ようになる。接触状態にある粒子同士に働く力を考える場合に減衰振動のモデルが使われる。このモデルでは、スプリングとダッシュポットが粒子間に並列に置かれた場合と同じ力が粒子間に働くと仮定される。このモデルは1つの粒子が複数の粒子と接触する場合にも全く問題なく適用できる。スプリングの伸縮が粒子の変形に対応するので、柔軟粒子モデルと呼ばれることもある。このモデルの適用によって初めて離散粒子法による高濃度輸送[5](Fig. 4)や流動層[6](Fig. 5)の数値

Fig. 3 Formation of Clusters in Channel [4]

Fig. 4 Dense-Phase Conveying [5]

シミュレーションが可能になった。軟体粒子モデルそのものは土質力学の分野で初めて用いられたモデルであるが、混相流へ適用されたことで、一層大きな広がりを見せた。Fig. 3、Fig. 4、Fig. 5のような比較的古い結果をあえてここで示したのは、この種のシミュレーションがいつ頃から始まったかを示すためでもある。粒子間相互作用を考慮する混相流の離散粒子法論文が初めて公表されて約10年経ったが、この期間における発展には目を見張るものがある。最近では、付着力や伝熱などの複雑な因子を考慮する研究も報告されるようになっていく。

3. 粒子と乱れの相互作用

モデルを使わずナビエ・ストークス式のみによって粒子運動も流体運動も求める立場の計算の場合には、粒子と乱れの相互作用をどのようにモデル化するかの問題は存在しないが、一般には単相流であっても乱れに対してモデルを使う計算が多いのが現状である。粒子濃度が低いいわゆる one-way coupling の計算であれば、流体乱れが粒子に及ぼす影響のみを考えればよい。粒子は流体抵抗を通じて流体乱れの影響を受けるが、流体速度と粒子速度の瞬時の差が適当に与えられれば粒子の不規則な運動が求められる。この場合、瞬時の流体速度を実際の乱流の場合にできるだけ一致するように与えたり、または単相乱流の瞬時の流体速度の計算結果が用いられる。

粒子濃度が高くなると、粒子が流体乱れにどのように影響するかが問題となる。問題としてはこちらの方がやっかいなのである。粒子濃度が高くなると言っても体積濃度で0.1%程度ではっきりと流体乱れは粒子の影響を受ける。従って、流体の乱れが粒子の影響を受け始める固気二相流は感覚的には低濃度である。

乱れモデルは一般に渦粘性の形で与えられる。その渦粘性の研究にも長い研究の歴史がある。現

Fig. 5 Fluidized Bed [6]

在最も多く利用されているのは、いわゆる $k-\varepsilon$ モデルと呼ばれるものである。渦粘性を乱れエネルギー k と粘性減衰量 ε の関数で与え、 k や ε を支配する微分方程式をナビエ・ストークス式から誘導し、それらの微分方程式と運動方程式が連立的に解かれる。 k 方程式にも ε 方程式にもいくつかの経験係数が登場する。それらの係数が粒子の影響を受けることは確かであるが、どのようにその影響をモデル化するかは至難の問題である。また固気二相乱流では流体の乱れだけでなく粒子運動の乱れも加わる。固相を連続体と見なして解く方法では、流体の乱流の場合と同様の方法が取られる。2 節の冒頭で少し触れたように、固相に対しても種々の乱れの相関量を支配する微分方程式が誘導されるが、相関量が新たな相関量を伴い、その都度、経験係数が導入されるため、係数がどんどん増殖する結果となっている。この種のシミュレーションは研究をスマートにまとめたいと考える研究者からは敬遠される領域である。しかし、とにかくも現象を予測し最適な操作条件を見つける必要性に迫られている固気二相流の現場では、このような方法に依存せざるを得ないのが現状である。

$k-\varepsilon$ モデルでは流体運動の瞬間値が計算されるわけではない。乱れの瞬間値を求めるにはメッシュサイズを最小渦のレベル以下まで小さくし非定常のナビエ・ストークス式を直接数値的に解けばよい。この計算は一般に DNS (Direct Numerical Simulation) の略名で知られている。最小渦から最大渦までのサイズの幅が広がるほどメッシュ数が増え、計算負荷が膨大となる。そのサイズの幅はレイノルズ数が大きいほど広がるので、DNS では一般には比較的レイノルズ数が低い乱流に計算は限られる。なるべく計算負荷を少なくして、高レイノルズ数の乱れの瞬時値を得る方法として LES (Large Eddy Simulation) がある。メッシュサイズを最小渦まで小さくせずに細かい渦をその内部に含む適当な大きさのサイズに設定し、細かい渦の効果を渦粘性に置き換えるのである。このモデリングは局所等方性と呼ばれる乱れの一般的な性質を利用している。つまりスケールの大きな乱れが非等方であっても、小さなスケールの乱れ成分は等方的になり、大局的な流れの性質を受けず普遍性を有する。従ってそのようなスケールの小さな乱れに対応する渦粘性にはより普遍性があると期待できるのである。しかし乱れの

効果を渦粘性で置き換える限り、経験係数の導入は避けることができず、スマゴリンスキー係数のような経験係数が必要になる。 $k-\varepsilon$ モデルの場合に比べ、値を仮定しなければならない係数の数は減るという意味では、LES は $k-\varepsilon$ モデルよりも上級である。

粒子と流体の相互作用については従来のモデルを適用し、流体運動は DNS で解く方法も試みられている。単相乱流の LES や DNS の計算グループが大挙して、粒子の影響を考慮する方向に研究を拡張している。最近のジャーナルを見ると、この種の論文が次から次へと発表されている。

本号では、乱流モデルについての湯の解説もあるので、詳しくはその解説にゆずる。

4. 結び

本号は固気二相流のシミュレーションの特集号として発行されている。乱流モデル、渦法、企業における解析事例の解説がその分野の専門家によってなされている。本総説はそれらの解説の露払いのようなものであり、具体的で突っ込んだ内容は各解説に譲る。離散粒子法についての詳細は田中の解説 (7) ~ (9) が参考になる。

参考文献

- [1] H.H. Hu, Int. J. Multiphase Flow, Vol.22, No2, 335-352 (1996)
- [2] 瀧口智志・梶島岳夫・三宅 裕, 日本機械学会論文集 66巻648号 B 編 1998-2005 (2000).
- [3] J. Happel and H. Brenner, Low Reynolds number hydrodynamics, Martin Nijhoff Publishers, The Hague (1983)
- [4] 田中敏嗣ほか, 日本機械学会論文集 59巻566号 B 編 2982-2989 (1993)
- [5] 田中敏嗣, 石田俊哉, 辻 裕, 日本機械学会論文集 57巻534号 B 編 456-463 (1991)
- [6] 川口寿裕, 田中敏嗣, 辻 裕, 日本機械学会論文集 58巻551号 B 編 2119-2125. (1992).
- [7] 田中敏嗣, 混相流学会誌, Vol. 8, No. 1, 41-47 (1994)
- [8] 田中敏嗣, 混相流学会誌, Vol. 8, No. 2, 140-146 (1994).
- [9] 田中敏嗣, 混相流学会誌, Vol. 8, No. 4, 315-323. (1994)

特集「固気二相流の数値シミュレーション」

※一部の結果を、カラー表示しました。

「固気二相流の数値シミュレーションとモデル」

辻 裕

本文 p.124 ~ p.129

離散要素法 (DEM) による 2 次元流動層の流動の数値シミュレーション結果
 容器幅 140mm、粒子径 $400 \mu m$ 、粒子密度 $2500 kg/m^3$ 、粒子数 167,000 個、空塔速度 $0.357 m/s$
 川口寿裕、田中敏嗣、辻 裕 (大阪大学大学院工学研究科)