固気二相流の離散粒子シミュレーションの進展*

Development of Discrete Particle Simulation of Gas-Solid Two-Phase Flow

田 中 敏 嗣**
TANAKA Toshitsugu

Abstract The development of numerical simulation models and methods in gas-solid two-phase flows by the author's group in the last three decades is briefly reviewed. Eulerian-Lagrangian coupling simulations have been largely developed, especially DEM-CFD coupling simulation has become popular, and widely used in many operations of powder technology field. The establishment of the Japan society for multiphase flow played a very important role in the development of DEM-CFD coupling model.

Keywords: Gas-solid flow, DEM-CFD coupling model, Pipe flow, Fluidized bed

1. 緒 言

気流中に固体粒子の浮遊した固気二相流は、流動層、空気輸送装置、集塵や分級などの粉体プロセス、微粉炭燃焼炉、石炭ガス化装置などの工業装置やプロセスの他、火山爆発、火砕流、雪崩、雲の形成など自然現象にも見られる混相流の一分野である。また、低濃度の固気二相流は、乱流変調の問題に関係して、液滴の分散した気液二相流のモデルと見なされることもある。

1987年の日本混相流学会の設立からの30年の間に、Lagrange型の粒子追跡法とEuler型の数値流体力学（CFD）をカップリングするEuler-Lagrange法による数値解析モデルと手法が大きく進展した。ここでは、とくに特徴的な粒子の扱いに着目し、粒子相単独の扱いを含めて離散粒子シミュレーションと呼ぶことにする。日本混相流学会の設立当時は離散粒子シミュレーションの黎明期であり、今から考えると、そこには開拓すべき原野が広がっていた。

日本混相流学会の設立は、その後の筆者らのグループによる高濃度固気二相流のモデリングの進展に大きな役割を果たした。離散粒子シミュレーション全般の発展については、日本混相流学会の設立25周年の際の著者による解説[1]があるの

で、ここでは筆者らによる高濃度固気二相流のモデリングの進展への取組に焦点を当てて述べることにする。

2. 混相流学会設立時の状況

まず、混相流学会設立（1987年）前後の希薄系および高度系における固気二相流数値解析技術に関する状況について振り返ってみる。

2.1 希薄系

希薄系固気二相流のTwo-wayカップリングによるEuler-LagrangeシミュレーションはCroweら[2]によるParticle-Source-In Cell (PSI Cell) モデルから始まる（1977年）。PSI Cellモデルは、粒子・流体間の運動量の交換を、その粒子の含まれる流体計算セルと対応付けるモデルであり、これにより両相間の相互作用を考慮したTwo-wayの計算が可能となる。国内においては、流路内固気二相流を対象として、辻らにより粒子追跡型シミュレーションが行われていた[3,4]。辻ら[4]は、水平チャネル内の流れに対して、粒子の浮遊を維持するための不規則反発モデルを提案していた（1987）。

2.2 高濃度系

混相流学会設立当時、以後の濃厚系固気二相流の離散粒子シミュレーションの発展を駆動する

* 2017.9.15 受付

** 大阪大学大学院工学研究科 〒565-0871 吹田市山田丘 2-1

TEL: (06)6879-7316 FAX: (06)6879-7316 E-mail: tanaka@mech.eng.osaka-u.ac.jp

二つの分野における発展があった。そのひとつは、1979 年に地盤工学の分野において Cundall と Strack により提案された離散要素法 (Discrete Element Method、以後、DEM) [5]であり、もうひとつは、流動層の分野における二流体モデルの発展である。

Cundall と Strack は、地盤を構成する岩石間の接触による相互作用力を、ばね、ダッシュポット、摩擦スライダを用いて表される接触力モデルにより与え、197 個の岩石群の力学的挙動を数値解析により求めた。これにより、粒状体群の堆積層の静力学から、雪崩のような濃厚な粒状体群の動力学を扱うことが可能となった。当初、本手法は地盤工学の分野で発表されたため、地盤、土木分野での応用が先に進み[6]、筆者がその情報を知ることになるのは 1980 年台半ば、粉体工学の分野においてである。

典型的な濃厚系固気二相流を取り扱う流動層の分野において、二流体モデルのモデリングが進んでいた。まず、Anderson と Jackson[7]により、粒子および流体に対する質量保存則および運動方程式に局所体積平均を施すことにより固相および流体相に対する二流体モデルの基礎式が導かれており (1967 年)、既に、このモデルに基づく数値シミュレーションにより、二次元流動層における気泡形成まで表すことができることが示されていた[8,9]。二流体モデルで高濃度固気二相流を扱う場合に問題となるのは、固相に対する応力・ひずみ関係を与える構成式のモデル化である。当時、Gidaspow らのグループでは、粉粒体の Kinetic theory に基づくモデルによる展開が行われていた[9]。

3. DEM-CFD モデリングの発展

混相流学会設立当時 (1987 年)、筆者の所属した研究室では空気輸送の研究が行われており、輸送方式として主流になりつつあった低速高濃度輸送 (プラグ輸送) の実験を、辻裕先生が進められていた。プラグ輸送では、粒子群は輸送管を栓 (プラグ) 状に塞いだ状態で輸送されるため、それまでの流体中での粒子運動と管壁での衝突からなる希薄系の離散粒子シミュレーション手法の適用は不可能であった。そのような状況の中、粉体工学分野を通じて辻裕先生により DEM の情報が持ち込まれ、これを用いて水平管プラグ輸送

の計算を行うこととなり、修士研究のテーマに設定して私が指導を担当することになった。

筆者はそれまで管内固気二相流の計測を行っており、数値シミュレーションの研究に関わるのは初めてであったが、DEM で問題となる計算の安定性などの課題はすべて解決できた。粒子・流体間のカップリングモデルは次のように与えた。水平管プラグ流では、Fig. 1 に示すように、管の下部に形成される粒子堆積層と、その上部の空筒流路部に分かれる。そこで、Fig. 1 に示すように管を小区間に分割し、小区間での流体の流れる流路を粒子堆積層と上部空塔部の並列流路と考えるモデルにより各流路の空気流量を求めた。粒子堆積層に存在する粒子に働く流体力は Ergun の式[10]を用いて与えた。この研究では、周期境界をもつ水平管内で 1000 個の粒子の運動を求め、Fig. 2 に示すように、実験で観測されるものと同様の流動パターンを得ることに成功した[11,12]。

Fig. 1 Gas flow model of horizontal plug flow.

Fig. 2 Predicted flow pattern of horizontal plug flow.

混相流学会が設立されたのは、上で述べた水平管プラグ流の DEM シミュレーションの研究を始めた直後であった。この研究を流動層に展開する上で混相流学会の設立は大きく役立った。筆者は設立当初の混相流学会で企画運営委員となり、混相流レクチャーシリーズの企画運営を担当した。この混相流レクチャーシリーズの第 2 回が 1988 年 12 月に開催され、そのテーマは「固気二

相流の数値シミュレーション」であった。ここで、東京農工大学の堀尾正鞠先生による「流動層のシミュレーション」の講義があり、2.2 節で述べたこの分野の状況を知ることができた。このことは、筆者らの研究を流動層分野に広げる上で非常に大きな役割を果たした。

このような経緯の下、翌年（1989 年）4 月からの修士研究テーマとして、鉛直管内プラグ流ではなく流動層のシミュレーションが設定された。局所体積平均化された流体流れに関する基礎式と固相との間のカップリングモデルについては二流体モデルの情報を利用することができた。流体計算は、有限体積法に基づき SIMPLE 法を用いる手法[13]により行い、粒子・流体間のカップリングは PSI Cell の考え方を踏襲した。また、水平管プラグ流では接触力モデルに非線形な Hertz-Mindlin モデル[14,15]に粒子のヤング率を適用するモデルを用いたが、流動の接触力モデル依存性が小さいことから、計算負荷を軽減するために接触力モデル中のばね定数を大幅に小さくした線形モデルを用いた。その結果、2400 個の粒子を用いて流動層中の気泡流動化挙動を再現することに成功し、実験とほぼ一致する流動化挙動が得られた[16,17]。

その後の DEM-CFD シミュレーションの大きな発展は、計算機能力の向上や並列計算などの大規模計算環境の発展によりもたらされた。DEM により流動層中に形成される気泡を解像しようとする、気泡径が粒径数十個のスケールであるとして、2 次元の場合で 10^4 (100^2) 個、3 次元の場合で 10^6 (100^3) 個程度の粒子数が必要になる。上で述べたように、2400 個の粒子数で始められた流動層の DEM-CFD シミュレーションは、3 次

Fig. 3 Large scale structure formed in 3D fluidized bed.

元の計算に要する 100 万個のスケールを既に超え、1 千万個オーダー、1 億個オーダーの大規模計算も可能となっている。3 次元の余裕を持った計算が可能になると、3 次元の流動層中での相関をもつ気泡を捉えることも可能となる[18] (Fig. 3)。

以上のような発展の中で、取り残されていた基本的な問題がある。それは付着力のモデリングである。Fig. 4 に流動層における Geldart の粒子分類を示す[19]。Geldart の粒子分類では、流動層における流動化挙動の特徴により、粒子が A 粒子から D 粒子の 4 種類に分類されている。この中で、比較的小粒子の A 粒子と C 粒子では van der Waals 力による付着力の影響が現れ、特に C 粒子では付着力により難流動性を示す。

Fig. 4 Geldart map.

A 粒子、C 粒子の流動化挙動の特長を説明するために DEM-CFD シミュレーションによる取り組みは行われていたが、実際に働いている付着力に基づく定量的な検証は行われていなかった。筆者らのグループにおいて、付着力の実測値に基づく計算を行ったところ、実験に比べて非常に大きな付着力の影響が現れた。この原因を検討したところ、計算負荷軽減のために接触モデル中のばね定数を小さく設定していることが原因であることが分かった。そこで、この問題を解決するため、単一粒子の衝突時の付着反発挙動に基づく動的付着力モデルを提案し、計算負荷を軽減するためにばね定数を低減しながら付着力の影響を表現することに成功した[20] (Fig. 5)。

Fig. 5 Effect of spring constant on coordination number (N_c) distribution.

その他に、当初の DEM-CFD モデルでは流体計算のセルサイズに比べて小さな粒径の粒子しか扱うことができなかった。この問題を解決するために、粗大物体を微小粒子の凝集体として表すモデルを提案し、流体計算セルサイズに比べて大きな粗大物体を含む流れの計算を可能にした[21]。

6. 結 言

以上で述べたように、日本混相流学会の設立は、筆者らによる DEM-CFD モデルの開発と発展に大きく寄与した。現在のように、インターネットから瞬時に広範な情報を得ることができなかった時代に、異なる分野の研究者を結びつけた意義は大きい。今後も、日本混相流学会を基盤として新たな発展が生み出されていくことに期待する。

参考文献

- [1] Tanaka, T., Development of Numerical Analysis of Multiphase Flow in Powder Technology, Japanese J. of Multiphase Flow, Vol. 26(1), 392-398 (2012).
- [2] Crowe, C. T., Sharma, M. P., and Stock, D. E., The Particle-Source-In Cell Model for Gas-Droplet Flows, J. of Fluids Eng., Vol. 99(2), 325-332 (1977).
- [3] Morikawa, Y. and Tsuji, Y., Computer Simulation of the Pneumatic Transport of Solids in Pipes with Bends (in Japanese), Transaction of JSME, Vol. 43(375), 4158-4167 (1977).
- [4] Tsuji, Y., Morikawa, Y., Tanaka, T., Nakatsukasa, N., and Nakatani, M., Numerical Simulation of Gas-Solid Two-Phase Flow in a Two-Dimensional Horizontal Channel, Int. J. Multiphase Flow, Vol. 13(5), 671-684 (1987).
- [5] Cundall, P.A. and Strack O.D.L., Discrete Numerical Model for Granular Assemblies, Geotechnique, Vol. 29, 47-65 (1979).
- [6] Kiyama, H. and Fujimura, H., Application of Cundall's Discrete Block Method to Gravity Flow Analysis of Rock-Like Granular Materials, Proc. Japan Soc. Civil Engineers, Vol. 1983(333), 137-146 (1983).
- [7] Anderson, T.B. and Jackson R., A Fluid Mechanical Description of Fluidized Bed, I&EC Fundamentals, Vol. 6(4), 527-539 (1967).
- [8] Pritchett, J.W., Blake, T.R., and Garg, S.K., Numerical Model of Gas Fluidized Bed, AIChE Symp. Ser., Vol. 74(176), 134-148 (1978).
- [9] Bouillard, J.X., Lyczkowski, R.W., and Gidaspow, D., Porosity Distributions in a Fluidized Bed with an Immersed Obstacle, AIChE J., Vol. 35(6), 134-148 (1989).
- [10] Ergun, S., Fluid Flow through Packed Columns, Chemical Engineering Progress, Vol. 48(2), 89-94 (1952).
- [11] Tanaka T., Ishida, T. and Tsuji, T., Direct Numerical Simulation of Granular Plug Flow in a Horizontal Pipe (The Case of Cohesionless Particles) (in Japanese), Transaction of JSME, Vol. 57(534B), 456-463 (1991).
- [12] Tsuji, T., Ishida, T. and Tanaka T., Lagrangian Numerical Simulation of Plug Flow of Cohesionless Particles in a Horizontal Pipe, Powder Technology, Vol. 71, 239-250 (1992).
- [13] Patankar, S.V., Numerical Heat Transfer and Fluid Flow, Hemisphere, (1980).
- [14] Hertz, H., On the Contact of Elastic Contact, J. Reine Angew. Math., Vol. 92, 156-171 (1881).
- [15] Mindlin, R.D., and Deresiewicz, H., Elastic Spheres in Contact under Varying Oblique Forces, J. Applied Mechanics, Vol. 20, 327-344 (1953).
- [16] Kawaguchi, T., Tanaka, T. and Tsuji, Y., Numerical Simulation of Fluidized Bed using the Discrete Element Method (The Case of Spouting Bed) (in Japanese), Transaction of JSME Ser. B, Vol. 58(551), 2119-2125 (1992).
- [17] Tsuji, Y., Kawaguchi, T. and Tanaka, T. Discrete Particle Simulation of Two-Dimensional Fluidized Bed, Powder Technology, Vol. 77, 79-87 (1993).
- [18] Tsuji, T., Yabumoto K. and Tanaka T., Spontaneous Structures in Three-Dimensional Bubbling Gas-Fluidized Bed by Parallel DEM-CFD Coupling Simulation, Powder Technol., Vol. 184(2), 132-140 (2008).
- [19] Geldart, D., Types of Gas Fluidization, Powder Technology, Vol. 7, 285-292 (1973).

- [20] Kobayashi, T., Tanaka, T., Shimada, N. and Kawaguchi, T., DEM-CFD Analysis of Fluidization Behavior of Geldart Group A Particles Using a Dynamic Adhesion Force Model, Powder Technology, Vol. 248, 143-152 (2013).
- [21] Tsuji, T., Higashida, K., Okuyama, Y. and Tanaka T., Fictitious Particle Method: A Numerical Model for Flows Including Dense Solids with Large Size Difference, AIChE J., Vol. 60(5), 1606-1620 (2014).
-