研究速報

非球状粒子個別要素法モデルのための高速な接触判定法

津守不二夫

九州大学大学院工学研究院機械工学部門, 〒 819-0395 福岡市西区元岡 744.

Fast Contact Detection Method for Discrete Element Method using Non-Spherical Particles

Fujio Tsumori

Department of Mechanical Engineering, Graduate School of Engineering, Kyushu University,
744 Motoooka, Nishi-ku, Fukuoka 819-0395, Japan.

Received July 27, 2009

SYNOPSIS

Discrete Element Method (DEM) is widely used to simulate behavior of powder material. It is well-known fact that interactions between particles affect this behavior. Especially, shape of the particle is the most important factor which governs these interactions. There have been reported some non-spherical models to simulate non-spherical powder particles. In the present paper, the author shows issues of these models and proposes a new model which can express arbitrary particle shapes. It is of great importance to develop a fast contact detection method for DEM simulation. A new method for the present particle model is developed and demonstrated in this paper.

KEY WORDS

DEM, discrete element method, non-sphere particle, contact detection, simulation

1 緒 言

以前より粉末の挙動を解析的に取り扱うため、個別要素法解析 (Discrete Element Method; DEM)¹⁾ が利用されてきた。粉末成形過程の解析手法には FEM に代表される連続体力学的方法も存在するが²⁾、個々の粉末粒子自体がどのように全体の挙動に影響を与えるかといった点についてはまったく考慮することができない。粒度分布の影響や、粒子間相互作用といった微細な粒子個々の影響を評価するためには DEM が非常に効果的である。近年、計算機がますます高速化し、従来では困難であった規模の解析も行うことができるようになってきた。また、微粒子間の相互作用についても原子間力顕微鏡 (Atomic Force Microscopy; AFM) 等を利用した測定により、より正確な知見が得られるようになってきている³⁻⁵⁾。そのため、DEM への期待も高まりつつある。

同時に、粉末材料を構成する粒子は一般にさまざまな形状を持ち、粉末材料を取り扱うプロセスにおいては、形状がその挙動に大きく影響を与えることがよく知られている。このような粒子形状の特性を直接解析に取り込むためには広く用いられている球状粒子の個別要素法ではなく、非球状粒子を

取り扱えるモデルに拡張する必要がある。これまでの DEM 解析の多くは球状粒子を利用したものであった。これは Cundall¹⁾ が提案したものであり、弾性反発力とダッシュポットを組み合わせたものとなっている。球状粒子を用いる一番の理由は接触判定の計算コストが少ないことである。2 粒子の中心間距離とそれぞれの半径が分かれば容易に接触・非接触を判定することができる。同時に接触箇所および接触箇所での曲率半径も導出される。これらは反発力の計算を行うために必要となる。

この球状モデルから拡張され、非球状粒子モデルが提案されてきた。当初から知られるものに、楕円粒子モデルが挙げられる^{6,7)}。特徴としては、長軸・短軸の比率 (アスペクト比) による粒子形状の表現がある。球状モデルからの純粋な拡張であるが、接触判定等の計算量としては、球状粒子と比較すると急激に増大する。また、得られる形状パラメータはアスペクト比のみであり、バリエーションが少ないことも欠点である。他のモデルとしては多角形モデル⁸⁾ が挙げられる。近年の 3D-CG の発展において多角形による計算機データの取り扱い技術は急激に進化し、ほぼ任意の形状を表現することが

可能である。問題点としては、粒子あたりの形状パラメータ数が莫大となること、DEMで必要となる粒子上の各点の曲率等について別途計算する必要があること、が挙げられる。最後のモデルは複合粒子モデルである。このモデルは複数の球状粒子を重ね合わせたり、円弧を組み合わせてすることによりひとつの粒子を定義する。例えば、アスペクト比の大きい粒子を表すために円筒とその両端に半球を2個設置する方法がとられている。また多数の球状粒子を重ね合わせ任意形状の粒子を表現しようとする解析例^{9,10)}も報告されている。このモデルの一番の特長は基本的には球粒子の接触判定を利用することであり、計算量を抑える点に関してこの恩恵は大きい。しかし、粒子表面形状が微分連続な形式で表すことができないことや、円弧と円弧のいわゆる継ぎ目において他粒子と接触した場合の処理に困難が残ることが問題となる。

2 三角関数を利用したモデル

2.1 形状の定式化

現在、上記の問題点を解消することを考え、Fig.1のように、三角関数を重ね合わせた形で表面形状を定義した新たなモデルを提案する。Fig.1において右向きの矢印は粒子のローカルな座標系における0度方向を示している。角度 θ における半径を $r(\theta)$ とすると、具体的に数式を利用し以下のように表せる。

$$\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = r(\theta) \begin{pmatrix} \cos \theta \\ \sin \theta \end{pmatrix} \quad (1)$$

$$r(\theta) = r_0 + \sum_n \left\{ a_n \cos(n\theta) + b_n \sin(n\theta) \right\} \quad (2)$$

式(1)の基本部分は円の表現と同じである。これに θ 方向に分布する半径を形状関数として式(2)を掛け合わせてある。また表面形状の連続性から $r(0) = r(2\pi)$ であることに注意したい。形状関数はフーリエ展開と同様の考え方により、粒子形状として非常に高い自由度を表現できる。 n を無限にとれば任意形状を表現可能である。メリットとしては、①少ないパラメータで多種多様の粒子を表現できる、②接触判定もある

Fig.1 Schematic of non-spherical particle model

程度簡易に行うことができる、③表面形状は任意階微分可能である、といった点が挙げられる。

本研究では簡単化のため以下のように余弦の項のみを取り扱い、最大で第2項までを取り扱う。

$$r(\theta) = r_0 + r_1 \cos(n_1\theta) + r_2 \cos(n_2\theta) \quad (3)$$

ここで取り扱う2種類の周波数成分を n_1, n_2 とする。また式(2)での余弦の振幅項 a_n については r_1, r_2 が対応している。Fig.2に第1項までを考慮した粒子形状のバリエーションを示す。このように非常に多様な粒子形状を表現することができる。なお、ここではすべての粒子の面積が等しくなるようにパラメータを設定してある。面積を導出する際数式を積分する必要があるが、上式は容易に積分可能であり、任意の粒子サイズを設定するための各パラメータを導出できる。

2.2 接触判定

DEMにおいては接触判定の計算コストが最も重要となる。ここでは新たな粒子モデル用に開発した高速な計算方法について述べる。

2粒子それぞれの座標と回転角度が与えられたとき、それらが接しているかどうかを判定したい。まず、2粒子が接しているときの必要条件を考えると、以下の2条件が得られる。

- ・接点において2粒子は同じ座標を共有している
- ・接点において2粒子は同じ接線を共有している

与えられた粒子位置および回転角度において、このような接点を見つけることは繰り返し計算無しでは非常に困難であり、従来より計算時間を多く割く結果となっていた。しかし、逆方向の計算、すなわち、固定した粒子A上のある点において粒子Bが接しているとき、粒子位置および回転角度を求めることは簡単である。Fig.3に示すように、 θ_A で与えられる粒子A上の点と、 θ_B で与えられる粒子B上の点で2粒子が接するとする。このときの粒子Bの中心座標 O_B およびそれぞれの粒子の回転角度の差 θ_{AB} は上記の2条件を満たすように導出できる。 θ_A および θ_B を0から 2π の範囲に変化させ、それぞれの場合における θ_B, θ_{AB} をデータベース化しておけば、このデータベースを用いることにより接触判定を行うことができる。

具体例をFig.4で示す。これは形状関数を $r(\theta) = 1.0 + 0.3 \cos(2\theta)$ とした場合のデータベースを示している。このデータベースは粒子Bが粒子Aと接する場合の中心位置 O_B の集合を示している。縦軸は θ_{AB} である。複雑な曲面であるため、いくつかの断面をFig.5に抽出して示しておく。断面形状は独特な曲線となっていることが見て取れる。数式から許される接触条件として内部に孤立した曲線部が存在するが、この部分は実際の物理現象としては粒子の大部分が重なっているため考慮する必要のないものである。最終的なデータベースとしては外郭線のみが必要であり、Fig.4, Fig.5はこの外郭線のみを示してある。

具体的な接触判定手順は次のようになる。粒子A, Bが与えられているとき、その位置および回転角度が与えられる。つ

Fig.2 Examples of particle shapes represented by the present method; each shape is determined from the equation: $r(\theta) = r_0 + r_1 \cos(n_1\theta)$.

Fig.3 Two particles contacted with each other.

まり粒子座標と両者の角度の差 θ_{AB} は既知である。 θ_{AB} におけるFig.4の断面をとりあげ、与えられた既知の O_B がこの断面の外郭線より内部にあれば粒子は接触しており、外部にあれば接触していないと判定できる。

このように粒子の接触状態についてあらかじめすべて計算しデータベース化しておくことにより、実際の解析時には非

Fig.4 Curved surface shows the series of the center of particle B, when particles A and B are tangent to each other. The center of particle A is fixed to origin point.

Fig.5 Cross sections of the curved surface shown in Fig. 4.

常に高速な接触判定を行うことが可能となる。もちろん、データベースの作成時にはそれなりの計算時間をかけることになるが、ここに示した例においては現在のデスクトップPCを用い、数時間でデータベースを作成することが可能であった。一度データベースを作成しておけば、球状粒子の接触判定と大差ない計算コストで接触判定を行うことが可能である。

3 充填解析

3.1 解析手法 (モンテカルロ法)

ここでは例として粉末の充填解析を行う。手法として確率的にエネルギーを安定化していくモンテカルロ法を利用する。まず、初期状態として容器内にランダムに粒子を配置した状態からスタートする。以下、次の手順を繰り返す。

1. ランダムで1粒子をピックアップする
2. 微小量回転させる
3. 微小量移動させる
4. 移動後、他粒子と重なっていた場合はもとに戻す

ここで3の微小量移動の際、確率的に下に移動する頻度を高くしておくことにより粒子はより下方、すなわち重力によりエネルギー的に安定な状態へと充填されていく。今回の解析で

Fig.6 Simulated results of packing with gravity. Six kinds of particles are used, frequency component of which is 2.

は、基本的に水平より下方向にランダムな方向へと微小量移動させることとした。ただし、粒子の形状が複雑な場合は、3粒子の配置いかんによっては、絡み合ったまま空中に固定され下方向へと移動出来ずに拘束されることがある。このような場合は、拘束を解くため、ある程度上方向への移動を行う必要がある。具体的にはFig.8の解析においては、水平下方向のみならず、水平より上向き $\pi/6$ までの角度を許容しランダムな方向へ微小量移動させた。粒子は矩形容器内に1000個配置した。

3.2 解析結果

まず $r(\theta) = r_0 + r_1 \cos(2\theta)$ の場合、すなわち外形の周波数成分が2の場合の解析例をFig.6に示す。ここでは r_1 を $0.1 \times r_0$ から $0.6 \times r_0$ まで変化させている。 r_0 は各粒子の体積(面積)が一定となるように設定してある。図は200万M.s.(モンテカルロステップ)後の状態であるが、デスクトップPCで数分程度の計算で結果を得られている。この間、数億回の接触判定が行われているが、十分高速に計算を行えている。結果を見ると、形状ごとに充填状態が変わっていることが確認できる。特に、 r_1 が大きくなるほど、内部に空隙が多くなっていくことが見て取れる。次に、それぞれの位置エネルギーの変化を

Fig.7に示す。縦軸はそれぞれの初期状態のエネルギーで規格化したエネルギーを表している。ちなみにランダムに配置された初期状態においてそれぞれのエネルギーに大きな違いはなかった。結果を見ると、 r_1 が大きいものほど、つまり真円からはずれるほど最終的な位置エネルギーが高いことがわかる。すなわち、充填密度が低いということである。

r_1 が0.3以下のものは同程度であるが、0.4以上ではエネルギーが増加している。0.3と0.4の粒子形状は見た目にはそこまで大きな違いはないが、実質の充填密度に大きく差が出ていることは興味深い。

次に、形状の周波数成分を変化させた場合の解析例をFig.8に示す。 $r(\theta)=r_0+0.4r_0\cos(n\theta)$ とし、 $n=2, 4, 6, 8$ の4種類の解析を行った。非常に凹凸の激しい形状であるが、問題な

Fig.7 Time history of normalized potential energy.

Fig.8 Simulated results of packing with gravity. Frequency component is changed from 2 to 8.

く接触判定が行われていることが分かる。また、周波数成分が増加するにつれ、内部に大きな空孔が増加し、密度が高まっていないことが観察される。粒子の体積はすべて同一であり、形状パラメータが充填状態に大きく影響されることが理解できる。

最後にさらに複雑な形状例として周波数成分を2つ持つ形状関数の場合の結果をFig.9に示す。ここで $r(\theta)=1.0+0.4\cos(2\theta)+0.1\cos(13\theta)$ としている。このような複雑な形状であっても解析時間自体はほとんど変化していない。また、拡大図を見て分かるように、複雑にかみ合う状況においても接触状態が的確に考慮されていることが確認できる。

4 結 言

DEMにおいて非球状粒子モデルの重要性を示し、従来の提案されているいくつかのモデルの欠点を克服するため、形状の自由度が高く、接触判定を高速に行える新たな手法を開発した。実際にいくつかの充填解析例を示し、その有効性を示した。このモデルは、粉末形状のパラメータ化が容易である。また、例えば実際の粒子形状画像からその輪郭をフーリエ変換することにより、特徴的な周波数成分を抽出し、解析に導入することができる。

ただし、現状のモデルでは接触判定は行えるが、粒子相互の重なり、いわゆる食い込み量を取り扱うことができていな

Fig.9 Simulated result using more complicated particles. The particle shape is represented by the equation: $r(\theta)=1.0+0.4\cos(2\theta)+0.1\cos(13\theta)$.

い。弾性反発力等の計算にはこの食い込み量が必要となるため、的確に表現できるモデルの改良が必要とされる。同時に、3次元への拡張についても同様の手法が応用できるが、データベースのサイズの問題が発生する。補間曲線を利用することにより、データベースの精度を落とさずに情報を圧縮する技術の検討が今後必要である。

文 献

- 1) P.A. Cundall and O.D. L. Strack: "A discrete numerical model for granular assemblies", *Geotechnique*, 29(1979)47-65.
- 2) S. Shima, H. Kotera, and Y. Ujie: "A study of constitutive behaviour of powder assembly by particulate modeling", *Material Science Research International*, vol 1.1 (1995)163-168.
- 3) M. Gotzinger and W. Peukert: "Dispersive forces of particle-surface interactions: direct AFM measurements and modeling", *Powder Technology*, 130(2003)102-109.
- 4) R. Jones, H.M. Pollock, D. Geldart, and A. Verlinden: "Inter-particle forces in cohesive powders studied by AFM: effects of relative humidity, particle size and wall adhesion", *Powder Technology*, 132(2003)196-210.
- 5) A.M. Freitas, M.M. Sharma: "Detachment of Particles from Surfaces: An AFM Study", *Journal of Colloid and Interface Science*, 233(2001)73-82.
- 6) L. Rothenburg and R.J. Bathurst: "Numerical simulation of idealized granular assemblies with plane elliptical particles", *Computers and Geotechnics*, 11-4(1991)315-329.
- 7) G.G.W. Mustoe and M. Miyata: "Material flow analyses of noncircular-shaped granular media using discrete element methods", *ASCE Journal of Engineering Mechanics*, 127(2002)1017-1026.
- 8) J.R. Williams and R. O'Connor: "Discrete element simulation and the contact problem", *Archives of Computational Methods in Engineering*, 6-4(1999)279-304.
- 9) X. Jia, et al.: "A packing algorithm for particles of arbitrary shapes", *Powder Technology*, 120-3(2001)175-186.
- 10) T. Matsushima, et al.: "A packing algorithm for particles of arbitrary shapes", 16th ASCE Engineering Mechanics Conf. 2003.