DEM 粗視化モデルによる気泡流動層の数値解析

Numerical Simulation of a Bubbling Fluidized Bed by the Coarse Grain Modeling of DEM

酒井 幹夫, 柴田 和也, Vanessa M. Kawasaki, 越塚 誠一

Mikio Sakai, Kazuya Shibata, Vanessa M. Kawasaki, Seiichi Koshizuka

Received 25 September 2009; Accepted 19 November 2009

Discrete Element Method (DEM) is widely used in many powder systems. The DEM makes possible to figure out the complicated phenomena related to particle flowability. On the other side, the DEM has a fatal problem, that is, the number of calculated particles is restricted due to the excessive calculation cost. Thereat, we have developed a large scale model of the DEM which is called coarse grain model. The coarse grain represents a group of the original particles so that a large-scale DEM simulation can be performed by using extremely small number of the calculated particles. In our previous studies, the coarse grain model was used in not only gas-solid flow simulations like a pneumatic conveying system but also a fundamental study of solid liquid flows. The coarse grain model is expected to be used in various powder systems. Therefore, in the current study, the coarse grain model was applied to a two-dimensional bubbling fluidized bed. The results by the coarse grain model were in good agreement with that of the original system. The coarse grain model was shown to be available in the bubbling fluidized bed. Moreover, it is exhibited that the calculation speed with the coarse grain model is much faster than that of the original one.

Keywords: Coarse grain model, Discrete element method, Bubbling fluidized bed, DEM-CFD method

1. 序 論

近年の著しい計算機性能の向上により、粉体シミュレーションが学術・研究の現象解明ばかりでなく、産業界における設計や運転検討においても広く用いられるようになってきた。その事例は枚挙にいとまがないほど多く、流動層^{1,2)}、ボールミル^{3,4)}、ホッパー⁵⁾、電子写真システム⁶⁾など多岐に及ぶ。粉体シミュレーションには、Discrete Element Method (以下、DEM⁷⁾と記す) が広く使われる。DEM は、粉体層を形成する個々の粒子を計算する手法である。DEM は、このように多くの体系に使用されているが、いくつかの欠点を抱えている。最も大きな欠点として、現実的な時間でシミュレーションを実行する場合に、計算上使用

できる粒子数が限られていることがあげられる。産業界では、多くの場合、10億個超の粒子が取り扱われる。他方、現在、DEM で扱われている計算粒子数は、主として、数十万個であり、超並列計算を実施したとしても、近年において、500万個の計算粒子数が使用されたことが報告されている⁸⁾。数十万個の粒子数が砂糖スプーン一杯分程度と言われていることを考えると、10億個超の計算粒子を用いたシミュレーションが現実的な時間で実行されるには、更に高性能な計算機が開発されるまで長い年月を待たねばならない。

このような問題に対して、これまでに、粉体シミュレーションの大規模モデルがいくつか提案された。これは、連続体を計算するための粒子法である Smoothed Particle Hydrodynamics (以下、SPH と記す) 法⁹⁾の粉体シミュレーションへの応用¹⁰⁾、DEM を用いた相似則モデル¹¹⁾ および仮想球モデル¹²⁾ である。これらの大規模モデルでは、オリジナルの粒子よりも大きなモデル粒子を用いて計算を実行する。これらの粉体シミュレーションの大規模モデルには問題があった。

東京大学大学院 工学系研究科 システム創成学専攻
(〒113-8656 東京都文京区本郷7-3-1) TEL 03-5841-6977
(Department of Systems Innovation, School of Engineering,
The University of Tokyo
(7-3-1, Hongo, Bunkyo-ku, Tokyo 113-8656, Japan)

SPH 法のような連続体モデルを使用すると、粉体のような不連続体らしい振る舞いを再現することが困難であった。相似則モデルや仮想球モデルは、粒子-流体間相互作用力に着目してモデル化されたため、粒子相の体積分率が高く、粒子間の作用する接触力の影響が無視できない体系では、計算精度が悪くなった。実際に、流動層のような比較的粒子相の体積分率の高い体系において、接触力に用いるパラメータを変化させると粉体の流動挙動が変化することが報告されている¹³⁾。

そこで、著者らは、DEM 粗視化モデル^{14~16)}を開発した。DEM 粗視化モデルも前述の大規模モデルと同様に、オリジナル粒子群を大きなモデル粒子で代表させて計算する。他方、DEM 粗視化モデルでは、従来の大規模モデルとは異なり、流体力および外力の他に、接触力がモデル化される。接触力については、モデル粒子とそれに含まれるオリジナル粒子群の運動エネルギーが一致するようにモデル化し、流体力や外力については、モデル粒子とそれに含まれるオリジナル粒子群がバランスするようにモデル化する。DEM 粗視化モデルは、これまでに、固気混相流の代表的な体系である気流搬送¹⁴⁾ および流動層（単一気泡の生成）¹⁵⁾、さらに固液混相流¹⁶⁾ に適用された。DEM 粗視化モデルが粉体シミュレーションの大規模モデルとして有効であることを示すためには、他の体系にも適用して、その信頼性を高めることが望まれる。

DEM 粗視化モデルの実用化をさらに進めるため、本研究は、気泡流動層のような産業界で広く用いられる体系への DEM 粗視化モデルの適用性を検討することを目的とする。気泡流動層は、燃焼、乾燥、混合、コーティング、造粒をはじめ、多くの粉体プロセスで使用されるばかりでなく、粉体シミュレーションにおいても広く適用対象となっている。さらに、本研究では、DEM 粗視化モデルによるシミュレーションの高速化についても検討する。本研究により、気泡流動層の体系において、DEM 粗視化モデルがオリジナル粒子の挙動を精度よく模擬できることを示すとともに、それによるシミュレーションの高速化も示す。

2. DEM 粗視化モデルを用いた DEM-CFD 連成解析

DEM 粗視化モデルと流体解析（Computational Fluid Dynamics：以下、CFD と記す）との連成については、著者らにより既に報告^{14,15)} されているので、ここでは、その概要を述べる。DEM 粗視化モデルの詳細については、前述の文献を参照されたい。

Fig. 1 Discrete Element Method

2.1 粒子相

粒子相の挙動は、DEM 粗視化モデルを用いて計算する。DEM 粗視化モデルは、DEM を拡張したモデルである。DEM では、粒子の並進運動および回転運動を解析するにあたり、Fig. 1 に示すようなバネ、ダッシュポットおよびフリクションスライダから構成されるモデルを用いる。並進運動については、粒子-粒子間相互作用力、粒子-流体間相互作用力および体積力を考慮する。回転運動は、粒子に作用する接触力の接線方向成分による回転モーメントから求められる。DEM の詳細については、引用文献⁷⁾ を参照されたい。

DEM 粗視化モデルにおいて、オリジナル粒子よりも l 倍大きな粒子（以下、粗視化粒子と記す）を用いる場合、粗視化粒子には l^3 個のオリジナル粒子が含まれる（Fig. 2）。粗視化モデルでは、粗視化粒子内部のオリジナル粒子が全て 2 体衝突し、粗視化粒子とオリジナル粒子群（平均）の運動エネルギーが、

Fig. 2 Coarse grain model ($l=2.0$)

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2}m_{\text{CGM}}\dot{\mathbf{x}}_{\text{CGM}}^2 + \frac{1}{2}I_{\text{CGM}}\dot{\boldsymbol{\theta}}_{\text{CGM}}^2 \\ &= l^3 \left(\frac{1}{2}m_o\dot{\mathbf{x}}_o^2 + \frac{1}{2}I_o\dot{\boldsymbol{\theta}}_o^2 \right) \end{aligned} \quad (1)$$

のように一致するとして、接触力をモデル化する。ここで、 m , I , l , $\mathbf{x}$ および $\boldsymbol{\theta}$ は、それぞれ、粒子質量、慣性モーメント、粗視化率、粒子の位置ベクトルおよび粒子の回転角であり、添字の CGM および O は、粗視化粒子およびオリジナル粒子を意味する。なお、 l は実数として扱うことができる。DEM 粗視化モデルでは、Fig. 2 に示すように、並進運動について、粗視化粒子とオリジナル粒子（平均）が一致すると仮定し、回転運動について、粗視化粒子とオリジナル粒子群を一致させるにあたり、オリジナル粒子が各々の重心で回転することを仮定する。Eq. (1) より、粗視化粒子に作用する接触力が求められる。粒子-流体間相互作用力や重力について、粗視化粒子に作用するこれらの力が粗視化粒子領域に存在するオリジナル粒子群のものとバランスするようにモデル化する。その結果、粗視化粒子に作用する力は、

$$\begin{aligned} m_{\text{CGM}}\ddot{\mathbf{x}}_{\text{CGM}} &= \mathbf{F}_{\text{fCGM}} - V_{\text{CGM}}\nabla p + \sum \mathbf{F}_{\text{CGM}} + \mathbf{F}_{\text{gCGM}} \\ &= l^3 \bar{\mathbf{F}}_{\text{fo}} - l^3 V_o \nabla p + l^3 \sum \bar{\mathbf{F}}_{\text{Co}} + l^3 \mathbf{F}_{\text{go}} \end{aligned} \quad (2)$$

のように表される。ここで、 $\mathbf{F}_{\text{f}}$, $\mathbf{F}_{\text{c}}$, $\mathbf{F}_{\text{g}}$, p および V は、それぞれ、流体力、接触力、重力、圧力および粒子の体積である。

回転モーメントと慣性モーメントの関係について、オリジナル粒子と粗視化粒子の間には、

$$\ddot{\boldsymbol{\theta}}_{\text{CGM}} = \frac{T_{\text{CGM}}}{I_{\text{CGM}}} = \frac{1}{l} \ddot{\boldsymbol{\theta}}_o \quad (3)$$

の関係が成り立つ。ここで、 $\mathbf{T}$ はトルクである。Eq. (3) は、Eq. (1) の回転運動のエネルギーにおいて、オリジナル粒子群のものと粗視化粒子のものが一致することを満たす。

DEM 粗視化モデルでは、並進運動においてオリジナル粒子群と粗視化粒子が一致することを仮定し、さらに Eq. (3) とオリジナル粒子径と粗視化粒子径の関係 ($r_{\text{CGM}} = l r_o$) があるため、オリジナル粒子群と粗視化粒子の相対速度 $\mathbf{v}$ および変位 $\boldsymbol{\delta}$ は等しくなる。その結果、粗視化粒子に作用する接触力は、それに含まれるオリジナル粒子の個数 (l^3 個) とオリジナル粒子に作用する接触力の積となり、

$$\begin{aligned} \mathbf{F}_{\text{nCGM}} &= l^3 (-k_n \boldsymbol{\delta}_{\text{nCGM}} - \eta_n \mathbf{v}_{\text{nCGM}}) \\ &= l^3 (-k_n \bar{\boldsymbol{\delta}}_{\text{no}} - \eta_n \bar{\mathbf{v}}_{\text{no}}) \end{aligned} \quad (4)$$

$$\mathbf{F}_{\text{tCGM}} = \begin{cases} l^3 (-k_t \boldsymbol{\delta}_{\text{tCGM}} - \eta_t \mathbf{v}_{\text{tCGM}}) \\ = l^3 (-k_t \bar{\boldsymbol{\delta}}_{\text{to}} - \eta_t \bar{\mathbf{v}}_{\text{to}}) (|\mathbf{F}_{\text{tCGM}}| < \mu |\mathbf{F}_{\text{nCGM}}|) \\ - |\mathbf{F}_{\text{nCGM}}| \mathbf{v}_{\text{tCGM}} / |\mathbf{v}_{\text{tCGM}}| \\ = l^3 \mu |\mathbf{F}_{\text{no}}| \bar{\mathbf{v}}_{\text{to}} / |\bar{\mathbf{v}}_{\text{to}}| (|\mathbf{F}_{\text{tCGM}}| \geq \mu |\mathbf{F}_{\text{nCGM}}|) \end{cases} \quad (5)$$

のように表される。ここで、 k , $\boldsymbol{\delta}$, η および μ は、それぞれ、バネ定数、変位、粘性減衰係数および摩擦係数であり、添字の n および t は、垂直方向成分および接線方向成分である。 η は反発係数と関係づけられ、

$$\eta = -2 \ln(e) \left(\sqrt{\frac{km}{l^2 n(e) + \pi^2}} \right) \quad (6)$$

のように与えられる。ここで、 e および m は反発係数および粒子質量である。

流体力については、

$$\mathbf{F}_{\text{fCGM}} = \frac{\beta}{1-\varepsilon} (\mathbf{u}_{\text{g}} - \dot{\mathbf{x}}_{\text{p}}) V_{\text{CGM}} = l^3 \frac{\beta}{1-\varepsilon} (\mathbf{u}_{\text{g}} - \dot{\mathbf{x}}_{\text{p}}) V_o \quad (7)$$

のように表される。ここで、 ε , $\mathbf{u}_{\text{g}}$ および β は、それぞれ、空隙率、流体の速度および流体抵抗係数である。

DEM 粗視化モデルでは、オリジナル粒子の物性値をそのまま使用する。また、DEM 粗視化モデルの計算粒子径（すなわち、粗視化率 l ）の設定にあたり、対象とする解析の現象を予め把握する必要がある。

2.2 連続相

連続相である流体の支配方程式については、空間において局所平均した連続の式および運動方程式を用いる。連続の式および運動方程式は、

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon \mathbf{u}_{\text{g}}) = 0 \quad (8)$$

$$\begin{aligned} & \frac{\partial (\varepsilon \rho_{\text{g}} \mathbf{u}_{\text{g}})}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon \rho_{\text{g}} \mathbf{u}_{\text{g}} \mathbf{u}_{\text{g}}) \\ &= -\varepsilon \nabla p + \beta_o (\bar{\mathbf{x}}_{\text{p}} - \mathbf{u}_{\text{g}}) + \nabla \cdot (\varepsilon \boldsymbol{\tau}_{\text{g}}) + \varepsilon \rho_{\text{g}} \mathbf{g} \end{aligned} \quad (9)$$

のように表される。ここで、 ρ_{g} , $\bar{\mathbf{x}}_{\text{p}}$, $\boldsymbol{\tau}_{\text{g}}$ および $\mathbf{g}$ は、それぞれ、流体の密度、粒子の局所平均速度、流体の粘性応力テンソルおよび重力加速度である。 β については、Ergun の式¹⁷⁾ と Wen and Yu¹⁸⁾ の式を結合した

モデルが広く用いられているので、本研究ではこれを用いる。Ergun の式と Wen and Yu の式を結合したモデルは、

$$\beta = \begin{cases} 150 \frac{(1-\varepsilon)^2}{\varepsilon} \frac{\mu_g}{d_p^2} + 1.75(1-\varepsilon) \frac{\rho_g}{d_p} |\mathbf{u}_g - \bar{\mathbf{x}}_p| & (\varepsilon \leq 0.8) \\ \frac{3}{4} C_d \frac{\varepsilon(1-\varepsilon)}{d_p} \rho_g |\mathbf{u}_g - \bar{\mathbf{x}}_p| \varepsilon^{-2.65} & (\varepsilon > 0.8) \end{cases} \quad (10)$$

のように与えられ、高粒子濃度に対しては粉体充填層の圧力損失を与える Ergun の式を用い、低粒子濃度に対しては単一球の流体抵抗則に空隙補正した Wen and Yu の式を用いる。ここで、 μ_g 、 d_p および C_d は、それぞれ、流体の粘性率、粒子径および単一球に対する抵抗係数である。 C_d は、

$$C_d = \begin{cases} \frac{24}{Re_p} (1 + 0.15 Re_p^{0.687}) & (Re_p \leq 1000) \\ 0.44 & (Re_p > 1000) \end{cases} \quad (11)$$

のように与えられ、レイノルズ数

$$Re_p = \frac{|\mathbf{u}_g - \bar{\mathbf{x}}_p| \varepsilon \rho_g d_p}{\mu_g} \quad (12)$$

に依存する。

3. アルゴリズム

本研究における数値解析のアルゴリズムは、著者らの既報のものとはほとんど同じである。

流体解析には有限体積法を適用し、計算空間にはスタガード格子を使用した。空間の差分スキームについて、移流項にはハイブリッド法¹⁹⁾を適用し、拡散項には2次精度中心差分を適用した。速度場と圧力場のカップリングにはフラクショナル・ステップ法を使用した。圧力のポアソン方程式を計算するにあたり、共役勾配法を使用した。

粒子の運動を解析するにあたり、前述の粒子-流体間相互作用力、粒子-粒子間接触力および外力に基づいて加速度を求め、粒子の速度、変位、角速度および角度変位を Euler 陽解法および Euler 陰解法を適用して計算した。

4. 数値解析

DEM 粗視化モデルを用いた DEM-CFD 連成解析の気泡流動層への適用性および DEM 粗視化モデルによ

Fig. 3 Schematic diagram of a bubbling fluidized bed

るシミュレーションの高速化の検討を行うために、2次元体系における数値実験を実行した。

4. 1 解析条件・体系

Fig. 3 に解析体系を示す。寸法 80 mm × 800 mm の容器に粉体をランダムに充填した。流体解析について、本研究では、格子の大きさを粒子径よりも十分に大きく設定し、20 × 200 で空間分割した。計算領域底部から空塔速度 $U_0 = 0.37$ m/s でガスを注入した。

Table 1 に、本研究で使用した物性値を示す。バネ定数は 800 N/m とし、実際の粉体よりも柔らかい値を使用した。バネ定数の設定については、これまでにいくつか検討²⁰⁻²²⁾がなされているため、これらの知見に基づいて設定した。反発係数および摩擦係数は、それぞれ、0.9 および 0.3 とした。粒子密度は 2500 kg/m³

Table 1 Physical properties

Particle (original)		
Particle density	(kg/m ³)	2500
Stiffness	(N/m)	800
Restitution coefficient	(-)	0.9
Friction coefficient	(-)	0.3
Gas		
Density	(kg/m ³)	1.0
Viscosity	(Pa·s)	1.8×10^{-5}

Table 2 Calculation conditions

		Case 1	Case 2	Case 3	Case 4
Solid phase					
Coarse grain ratio	(—)	1.0	2.0	3.0	1.0
Original particle size	(μm)	300	300	300	900
Calculated particle size	(μm)	300	600	900	9000
Number of particles	(—)	126000	31500	14000	14000
Time step	(s)	2.50×10^{-6}			
Gas phase					
Number of grids	(—)	4000 (20×200)			
Superficial velocity	(m/s)	0.37			
Time step	(s)	1.25×10^{-5}

Fig. 4 Simulation results of a bubbling fluidized bed

である。これらの物性値について、全てのケースで同じものを使用した。

本研究では、4 ケースの解析を実行した。Case 1 ではオリジナル粒子の体系を対象とし、126000個の粒子径 $300\mu\text{m}$ の計算粒子を用いてシミュレーションを実行した。Case 2 および Case 3 では、DEM 粗視化モデルを適用してシミュレーションを実行した。Case 2 および Case 3 では、粗視化率2.0（計算粒子径： $600\mu\text{m}$ ，計算粒子数：31500）および3.0（計算粒子径： $900\mu\text{m}$ ，計算粒子数：14000）のシミュレーションを実行した。Case 4 については、Case 3 との比較により DEM 粗視化モデルの有効性を検証するために、粗

視化モデルを用いなくて、計算粒子径 $900\mu\text{m}$ ，計算粒子数14000のシミュレーションを実行した。全てのケースにおいて、充填した粉体の体積が等しくなるように設定し、実時間で2.0秒のシミュレーションを実行した。Table 2 に解析条件を示す。

本研究では、Case 1 から Case 3 を比較して、DEM 粗視化モデルによりオリジナル粒子体系の流動状態を模擬できることを示す。また、Case 3 と Case 4 を比較することにより、DEM 粗視化モデルの有効性を検証する。さらに、Case 1 から Case 3 の計算時間を比較し、DEM 粗視化モデルによるシミュレーションの高速化を検討する。

(a) height = 130 mm

(b) height = 50 mm

Fig. 5 Comparison of the bubble size between the original particle and the coarse grain model

本解析で使用した計算機の仕様およびプログラム開発環境は、CPU: Intel Core i7 965 (3.2 GHz), Memory: 12 GB, OS: Windows XP Professional x64 および Compiler: Intel Compiler C/C++ Version 11.0 である。

4. 2 解析結果・考察

Fig. 4 に、Case 1 から Case 4 におけるシミュレーション結果において、解析開始から約 1.0 s 後および約 1.5 s 後のスナップショットを示す。Case 1 から Case 3 においては、計算領域下部で生成された気泡が、上部に移動するにつれて成長していた。他方、Case 4 では、初期状態からほとんど変化しなかった。まず、DEM 粗視化モデルの妥当性について検証する。**Fig. 4** より、計算領域下部および上部において、オリジナル粒子および DEM 粗視化モデル体系より観察された気泡径は、それぞれ、両者でおおよそ同じ大きさであった。なお、流動層内での気泡の軌跡や形状は、粒子群の複雑な流れに関係することが知られており、ランダムな現象となるため、同一時刻に同一の現象が出現することはほとんどない。これより、DEM 粗視化モデルは、気泡流動層におけるオリジナル粒子挙動を定性的に模擬できることが示された。

定量的な評価を行うために、計算開始後 1.0 s から

Fig. 6 Definition of the bubble size

Table 3 Comparison of the bed height

	Case 1	Case 2	Case 3
Bed height (mm)	192.0	195.2	198.4

2.0 s の流動層計算領域底部（高さ：50 mm 程度）および上部（高さ：130 mm 程度）における気泡径 D_{bubble} を評価した (**Fig. 5**)。なお、 D_{bubble} の算定にあたり、**Fig. 6** に示す D_w および D_h を用いて、 $D_{\text{bubble}} = \sqrt{D_w D_h}$ とした。計算領域底部 (**Fig. 5 (a)**) では、DEM 粗視化モデルを用いた体系 (Case 2 および Case 3) の平均気泡径は、オリジナル粒子の平均気泡径 (Case 1) に対して、8 % 以内の誤差で一致した。計算領域上部 (**Fig. 5 (b)**) についても同様に、Case 1 から Case 3 において、DEM 粗視化モデルを用いた体系の平均気泡径は、オリジナル粒子の平均気泡径に対して、7 % 以内の誤差で一致した。平均気泡径の誤差は、DEM 粗視化モデルを開発した際の仮定に起因するものと考えられる。

また、DEM 粗視化モデル体系およびオリジナル粒子体系の粉体層の高さについても比較した。1.0 s から 2.0 s における粉体層の平均高さを **Table 3** に示す。DEM 粗視化モデル体系およびオリジナル粒子体系の粉体層の高さは、3 % 程度の違いがあったが、両者でよく一致した。層高の誤差は、気泡径のものと同様に、DEM 粗視化モデルを開発した際の仮定に起因するものと考えられる。

次に DEM 粗視化モデルの有効性について検証する。Case 3 および Case 4 を比較したところ、両者の計算粒子径が等しいにもかかわらず、DEM 粗視化モデルを適用しないと気泡が生成されなかった。これは、ただ単に大きな計算粒子径を使用しても、小さな粒子径の体系の粒子挙動を模擬できないことを意味する。

このように、DEM 粗視化モデルを用いて、すなわち、実際よりも大きなモデル粒子を用いて、オリジナル粒子群の挙動を模擬できた理由として、DEM 粗視

Fig. 7 Speed-up by the coarse grain model

化モデルが流体力と接触力の両方をモデル化したことがあげられる。流動層では、粒子の流動は流体力が大きな要因になるので、従来の DEM の大規模モデルのように、そのモデル化が重要になる。また、流動層のような粒子濃度の比較的高い体系では、粒子の衝突が頻繁に起こるため、体系全体における粒子のエネルギー消散を精度よくモデル化する必要がある。このように、流動層のような比較的粒子濃度の高い体系では、接触力のモデル化により、解析結果の精度が高くなると考えられる。粗視化率 l の値について、本研究では 3.0 まで示したが、限界値がある。本研究のような DEM-CFD 解析の場合、粗視化率は流体の格子サイズに制限される。これは、流体の格子サイズは計算粒子径よりも十分に大きく設定する必要があるためである。

以上のように、DEM 粗視化モデルにより、気泡流動層体系におけるオリジナル粒子の挙動が、定性的かつ定量的によく一致することが示された。これにより、気泡流動層体系において DEM 粗視化モデルが適用できることが示された。

4. 3 DEM 粗視化モデルによるシミュレーションの高速化

DEM 粗視化モデルは、オリジナル粒子群を大きなモデル粒子で代表するため、実際よりも少ない粒子数で計算できる。そこで、DEM 粗視化モデルによるシミュレーションの高速化を検討した。Case 1 から Case 3 について、粗視化率に対する計算時間の関係を Fig. 7 に示す。本計算時間は、全計算ステップの平均に基づいて見積もられた。粗視化率が 2.0 および 3.0 のときに、それぞれ、約 3.0 倍および約 4.3 倍の高速化がなされた。このように、粗視化率が高くなるにつれて、シミュレーションが高速化されることが示され

た。これは、計算粒子数が減少したことが主な要因であると考えられる。本研究で用いた手法のように、格子の大きさを粒子のものよりも十分に大きく設定する場合には、このような傾向になる。本結果は、格子の大きさを粒子のものよりも十分に大きく設定する手法の場合には、オリジナル粒子の挙動を模擬できるまで、できるだけ大きな粗視化倍率を適用した方が、シミュレーションの高速化を図ることができることを示唆する。なお、DEM 粗視化モデルを用いた高速化の結果について、計算時間はコンパイラによるプログラムの最適化や CPU の仕様に依存すると考えられる。

5. 結 論

DEM 粗視化モデルを用いた DEM-CFD 連成解析の気泡流動層への適用性の検討および DEM 粗視化モデルによる計算効率の評価を行うために、2 次元体系における数値実験を実行した。本研究を通して以下の知見を得ることができた。

- 1) オリジナル粒子体系と DEM 粗視化モデル体系を比較したところ、両者の体系において流動層底部から上部にかけて気泡の成長が見られた。平均気泡径は、オリジナル粒子体系と DEM 粗視化モデル体系とで定量的によく一致した。また、DEM 粗視化モデル体系とオリジナル粒子体系の粉体層の高さについても両者でよく一致した。これらの結果より、気泡流動層の体系において、DEM 粗視化モデルにより、オリジナル粒子体系の挙動を模擬することができることが示された。
- 2) DEM 粗視化モデルは、オリジナル粒子群を大きなモデル粒子で代表するため、実際よりも少ない粒子数で計算できる。そこで、DEM 粗視化モデルによるシミュレーションの高速化を検討した。粗視化率が高くなるにつれて、シミュレーションが高速化された。これは、計算粒子数が減少したことが主な原因である。これより、オリジナル粒子の挙動を模擬できるまで、できるだけ大きな粗視化倍率を適用した方が、シミュレーションの高速化を図ることができることを示唆する。ただし、粗視化率について、流体の格子サイズが計算粒子径よりも十分に大きくする必要があるため、設定限界値がある。

このように、本研究において、2 次元気泡流動層の体系において、DEM 粗視化モデルがオリジナル粒子の挙動を精度よく模擬できることを示すとともに、そのシミュレーション速度の高速化を示すことができ

た。今後も、多くの体系に適用し、その適用範囲の広さを示していきたい。

[謝辞] 本研究は文部科学省グローバル COE プロ

グラム（世界を先導する原子力研究イニシアチブ）の支援を受けた。

Nomenclature

C_d	: drag coefficient	(—)	$\mathbf{x}$	: position vector	(m)
d_p	: particle diameter	(m)	β	: inter-phase momentum transfer coefficient	(kg/(m ² s))
e	: restitution coefficient	(—)	δ	: particle displacement	(m)
$\mathbf{F}_c$	: contact force	(N)	ε	: void fraction	(—)
$\mathbf{F}_f$	: drag force	(N)	η	: damping coefficient	(Ns/m)
$\mathbf{F}_g$	: gravity	(N)	θ	: angular displacement	(rad)
$\mathbf{g}$	: gravitational acceleration	(m/s ²)	μ	: friction coefficient	(—)
I	: inertial moment of particle	(kg m ²)	μ_g	: gas viscosity	(Pa·s)
k	: stiffness	(N/m)	ρ_g	: gas density	(kg/m ³)
l	: coarse grain ratio	(—)	τ_g	: viscous stress tensor	(N/m ²)
m	: particle mass	(kg)	Subscripts		
p	: pressure	(N/m ²)	CGM	: coarse grain model	(—)
Re_p	: particle Reynolds number	(—)	n	: normal component	(—)
$\mathbf{T}$	: torque	(N m)	O	: original particle	(—)
$\mathbf{U}_0$	: superficial velocity	(m/s)	t	: tangential component	(—)
$\mathbf{u}_g$	: gas velocity	(m/s)			
V	: particle volume	(m ³)			

References

- 1) Tsuji, Y., T. Kawaguchi and T. Tanaka: “Discrete Particle Simulation of Two-Dimensional Fluidized Bed”, *Powder Technol.*, **77**, 79-87 (1993)
- 2) Yuu, S., T. Umekage and Y. Johno: “Numerical Simulation of Air and Particle Motions in Bubbling Fluidized Bed of Small Particles”, *Powder Technol.*, **110**, 158-168 (2000)
- 3) Sakai, M., K. Shibata and S. Koshizuka: “Effect of Nuclear Fuel Particle Movement on Nuclear Criticality in a Rotating Cylindrical Vessel”, *J. Nucl. Sci. Technol.*, **42** [3], 267-274 (2005)
- 4) Kano, J., H. Mio and F. Saito: “Correlation of Size Reduction Rate of Inorganic Materials with Impact Energy of Balls in Planetary Ball Milling”, *J. Chem. Eng. Japan*, **32**, 445-448 (1999)
- 5) Hidaka, J., J. Kano and A. Shimosaka: “Flow Mechanism of Granular Materials Discharging from Bin-Hopper System”, *Kagaku Kogaku Ronbunshu*, **20**, 397-404 (1994)
- 6) Nakayama, N. and H. Kawamoto: “Numerical Simulation of Magnetic Bead Chains in a Magnetic Field Using 3-D Distinct Element Method”, *Trans. Japan Soc. Mech. Eng. Ser. C*, **70**, 804-811 (2004)
- 7) Cundall, P. A. and O. D. L. Strack: “A Discrete Numerical Model for Granular Assemblies”, *Geotechnique*, **29**, 47-65 (1979)
- 8) Tsuji, T., K. Yabumoto and T. Tanaka: “Spontaneous Structures in Three-Dimensional Bubbling Gas-Fluidized Bed by Parallel DEM-CFD Coupling Simulation”, *Powder Technol.*, **184**, 132-140 (2008)
- 9) Monaghan, J. J.: “SPH Simulation of Multi-phase Flow”, *Comput. Phys. Commun.*, **87**, 225-235 (1995)
- 10) Johno, Y. and S. Yuu: “Numerical Simulation of Bubbling Fluidized Bed Using Smoothed Particle Method and Experimental Verification”, *Trans. Japan. Soc. Mech. Eng. Ser. B*, **68**, 2703-2711 (2002)
- 11) Washino, K., C. H. Hsu, K. Kawaguchi and Y. Tsuji: “Similarity Model for DEM Simulation of Fluidized Bed”, *J. Soc. Powder Technol., Japan*, **44**, 198-205 (2007)
- 12) Sakano, M., T. Yaso and H. Nakanishi: “Numerical Simulation of Two-dimensional Fluidized Bed Using Discrete Element Method with Imaginary Sphere Model”, *Japanese J. Multiphase Flow*, **14**, 66-73 (2000)
- 13) Xu, B. H. and A. B. Yu: “Numerical Simulation of the Gas-Solid Flow in a Fluidized Bed by Combining Discrete Particle Method with Computational Fluid Dynamics”, *Chem. Eng. Sci.*, **52** [16], 2785-2809 (1997)
- 14) Sakai, M. and S. Koshizuka: “Large-Scale Discrete Element Modeling in Pneumatic Conveying”, *Chem. Eng. Sci.*, **64**, 533-539 (2009)
- 15) Sakai, M. and S. Koshizuka: “Development of a Coarse Grain Simulation Methodology for Discrete Element Method in Gas-Solid Flows”, *J. Soc. Powder Technol., Japan*, **45**, 12-22 (2008)
- 16) Sakai, M., S. Koshizuka and I. Toyoshima: “Numerical

- Simulation of Solid-Liquid Flows Involving Free Surface by DEM-MPS Method”, *J. Soc. Powder Technol., Japan*, **45**, 466-477 (2008)
- 17) Ergun, S.: “Fluid Flow Through Packed Columns”, *Chem. Eng. Prog.*, **48**, 89-94 (1952)
 - 18) Wen, C. Y. and Y. H. Yu : “Mechanics of Fluidization”, *Chem. Eng. Prog. Symp. Ser.*, **62**, 100-111 (1966)
 - 19) Patankar, S. V.: “Numerical Heat Transfer and Fluid Flow”, Hemisphere (1980)
 - 20) Pandit, J. K., X. S. Wang and M. J. Rhodes : “On Geldart Group A Behaviour in Fluidized Beds with and without Cohesive Interparticle Forces : A DEM Study”, *Powder Technol.*, **164**, 130-138 (2006)
 - 21) Kaneko, Y., T. Shiojima and M. Horio : “DEM Simulation of Fluidized Beds for Gas-phase Olefin Polymerization”, *Chem. Eng. Sci.*, **54**, 5809-5821 (1999)
 - 22) Rhodes, M. J., X. S. Wang, M. Nguyen, P. Stewart and K. Liffman : “Use of Discrete Element Method Simulation in Studying Fluidization Characteristics : Influence of Interparticle Force”, *Chem. Eng. Sci.*, **56**, 69-76 (2001)