接触力予測法の適用による離散要素法の高速度化

Fast Algorithm of Distinct Element Method with Contact Force Prediction Method

所 千晴, 岡屋 克則, 定木 淳

Chiharu Tokoro, Katsunori Okaya, Jun Sadaki

Received 30 September 2002 ; Accepted 20 January 2003

Distinct element method (DEM) requires enormous computation time because it needs small time increments that are sufficient to follow high frequency fluctuations in contact dynamic model. In general, the equations of motion of particles are solved by the second order Adams-Bashforth method, which estimates the contact force for the next time step by linear extrapolation, or by multistep methods such as predictor-corrector method. In order to overcome the deficit of conventional methods, we propose a Contact Force Prediction Method that allows us to use larger time increments. The method incorporates the contact force at every contact point obtained as the exact solutions or numerical solutions of differential equations that describe two particle contacts. It is confirmed that the proposed method gives the simulation results for packing and discharge of particles which are consistent with the experimental data, while accelerating DEM computation by 3 to 8 times.

Keywords : Distinct Element Method, Calculation time, Time step, Numerical integration, Fast algorithm

1. 緒 言

離散要素法 (Distinct Element Method, 以下 DEM)¹⁾ の高速化に対する考察および提案を行う。DEM の高速化へのアプローチ法として, 粒子間接触検索アルゴリズムの効率化, 時間刻みの増大, 計算対象粒子数の限定化等が考えられるが, 本報では時間刻みを増大させる方法について述べる。

DEM では, 粒子どうしの接触を表す振動方程式の周波数が非常に高いため, 差分近似解の安定性を得るためには, 粒径および粒子密度が小さいほど, またバネ定数が大きいほど時間刻みを小さく設定する必要がある。時間刻みを大きくして計算負荷を軽減するために, バネ定数を小さく設定する方法^{2~4)} や, 粒径を大きく設定する方法⁵⁾ などが報告されている。これらの方法は, 厳密には接触力の遅延などが避けられないため, 解析の目的とする現象に対する影響を慎重に吟味

Fig. 1 An example of packing simulation

した上で行う必要があるが, 時間刻みを増大させる有効な方法の一つである。

本研究では, 粒子間の接触力を支配する振動方程式の差分近似解を得るアルゴリズムの改善により, より大きい時間刻みに耐え得る DEM を開発することを目的とする。具体的には, 接触点ごとの接触力の予測値をより安定な解法で求め, その値を用いて粒子の速度

東京大学大学院工学系研究科地球システム工学専攻
(〒113-8656 東京都文京区本郷7-3-1) TEL 03-5841-7079
Department of Geosystem Engineering, Graduate School of Engineering, The University of Tokyo
(7-3-1, Hongo, Bunkyo-ku, Tokyo 113-8656)

Fig. 2 An example of discharge simulation

や位置を求める接触力予測法を用いる。また、多体接触が支配的である現象の例として、球の充填問題 (Fig. 1) および排出問題 (Fig. 2) を取り上げ、新規法が充填率の計算に有効であることを示す。

2. 接触検出の遅れによる誤差と計算の安定性

時間刻みを増大させると、DEMの解析結果により実現象を再現できなくなる可能性があるが、その要因には、(1) 接触検出の遅れ、および (2) 時間の差分化誤差、の二つが考えられる。以下に、従来法におけるこれらの要因に関する考察を行う。

2.1 DEMの構成方程式

以下の考察に必要なDEMの構成方程式をまとめておく。DEMにおける接触力 $\mathbf{f}_{cij}$ は、法線方向 $\mathbf{f}_{nij}$ と

接線方向 $\mathbf{f}_{sij}$ に分けて計算する。

$$\mathbf{f}_{cij}(t) = \mathbf{f}_{nij}(t) + \mathbf{f}_{sij}(t) \quad (1)$$

式中の (t) は、時間 t の関数であることを意味する。接触力の法線方向成分は、次式より計算される。

$$\mathbf{f}_{nij}(t) = -k_{nij}\delta_{nij}^{\alpha_1}(t)\mathbf{n}_{ij}(t) - \eta_{nij}\delta_{nij}^{\alpha_2}(t)\mathbf{v}_{nij}(t) \quad (2)$$

$$\delta_{nij}(t) = (r_i + r_j) - |\mathbf{x}_i(t) - \mathbf{x}_j(t)| \quad (3)$$

$$\mathbf{v}_{ij}(t) = \mathbf{v}_i(t) - \mathbf{v}_j(t) \quad (4)$$

$$\mathbf{v}_{nij}(t) = (\mathbf{v}_{ij}(t) \cdot \mathbf{n}_{ij}(t))\mathbf{n}_{ij}(t) \quad (5)$$

ここで、 k はバネ定数、 η は減衰定数、 r は半径、 δ は歪み、 $\mathbf{n}$ は法線方向を示す単位ベクトル、 $\mathbf{v}$ は速度ベクトル、 $\mathbf{x}$ は位置ベクトルであり、下付き添え字の i は i 粒子、 j は j 粒子、 ij は粒子 i, j 間、 n は法線方向を示す。 α_1 および α_2 はバネの種類によって決定される定数であり、線形バネでは $\alpha_1=1$ および $\alpha_2=0$ 、Hertz バネ⁶⁾ では $\alpha_1=1.5$ および $\alpha_2=0.25$ である。

接触力の接線方向成分は、次式より計算される。

$$\mathbf{f}_{sij}(t) = -k_{sij}\delta_{sij}^{\alpha_3}(t)\delta_{sij}(t)\mathbf{s}_{ij}(t) - \eta_{sij}\delta_{sij}^{\alpha_4}(t)\mathbf{v}_{sij}(t) \quad (6)$$

$$\delta_{sij}(t) = \left| \int \mathbf{v}_{sij}(t) dt \right| \quad (7)$$

$$\mathbf{s}_{ij}(t) = \frac{\mathbf{v}_{sij}(t)}{|\mathbf{v}_{sij}(t)|} \quad (8)$$

$$\mathbf{v}_{sij}(t) = \mathbf{v}_{ij}(t) - \mathbf{v}_{nij}(t) + (r_i\boldsymbol{\omega}_i(t) + r_j\boldsymbol{\omega}_j(t)) \times \mathbf{n}_{ij}(t) \quad (9)$$

ここで、 $\mathbf{s}$ は接線方向を示す単位ベクトル、 $\boldsymbol{\omega}$ は角速度ベクトルを示す。 α_3 および α_4 はバネの種類によって決定される定数であり、線形バネでは $\alpha_3=\alpha_4=0$ 、Mindlin バネ^{7, 8)} では $\alpha_3=0.5$ および $\alpha_4=0.25$ である。また、接線方向の力に対してはクーロン則が適用される。

$$\mathbf{f}_{sij}(t) \leq \mu_{ij} |\mathbf{f}_{nij}(t)| \mathbf{s}_{ij}(t) \quad (10)$$

ここで、 μ は摩擦係数である。

線形バネでは粒子が円盤である場合を除きバネ定数の理論的決定が困難であるが、計算上の取り扱いやすさからよく用いられている⁹⁾。

2.2 接触検出の遅れによる誤差

粒子どうしの接触開始の認識は、最大で時間刻み分の遅れを生じる。この遅れは、時間刻みが十分に小さ

Fig. 3 3-Particle contact problem

い場合には問題とならないが、時間刻みを大きくすることによって2種類の支障が生じる。

その一つは、接触開始後の粒子が時間刻み分の移動距離については全く応力を受けることなく近接を続けるため、実際的ではない大きな歪みを生じ、それに対応する過大な応力が生じることである。これについての対策法としては、接触開始に遡ってその後の粒子運動を再計算する方法も考案されている^{5, 10)}が、本研究では後述する接触点ごとの予測法によってこれを解決する。

二つめは、複数の粒子が同一の粒子に対して接触する、いわゆる多体接触の問題である。時間刻みの都合上、本来はわずかな遅れをもって二つの接触が発生したものを、同時に衝突したものとして処理されることがあり、わずかではあるが衝突エネルギーの消費量が異なるため、衝突後の粒子の挙動が変わってくる。

ここで、多体接触による接触開始時刻とその検出のずれにより生じる実現象との相違についての考察を行う。Fig. 3に示すように、直列した回転を伴わない粒子A, B, Cに関して、中央に静止している粒子Bに両端の粒子A, Cが同じ速度で接触する1次元系を想定する。Fig. 4は、粒子A-B間の接触開始から粒子C-B間の接触開始が $\Delta\tau^*$ 遅れた場合に、それぞれの粒子の接触終了後の速度を算出した結果である。粒子は天然ガスハイドレートペレット^{11, 12)}を想定しており、Table 1はシミュレーションに用いた物性値を示したものであるが、ここでは氷の物性値¹³⁾を代用し

Fig. 4 Normalized velocity of 3-particle problem

ている。粒径は10mmであり、線形モデルを用いた。このときの粒子間の接触時間は 3.7×10^{-5} 秒であり、時間刻みはその1/100に設定したが、これは誤差が十分に小さくなる時間刻みである。図中の $\Delta\tau^*$ は、粒子Aの接触開始時刻と粒子Cの接触開始時刻の差 $\Delta\tau$ を2体接触における接触時間 t_c を用いて正規化した値である。

$$\Delta\tau^* = \frac{\Delta\tau}{t_c} \quad (11)$$

また、速度は接触前の粒子AおよびCの速度で正規化している。Fig. 5は、粒子A-B間の接触と粒子C-B間の接触がほぼ同時刻に起こる系を想定し、片方の接触時間が単位時間刻み分ずれてしまった場合の粒子Aの正規化速度誤差をFig. 4より算出したものである。時間刻みの大きいDEMは、粒子どうしの接触が他の粒子へ及ぼす影響を無視できるほど時間刻みを小さくしたDEMに比べて、Fig. 5に示した誤差を容認した方法であると言える。したがって、時間刻みの大きいDEMに適した数値解法とは、より高精度の解法よりむしろ、計算が速く、より大きい時間刻みに耐え得る安定した解法である。

Table 1 Parameter settings for DEM simulation of ice pellets

Properties	Unit	Value
Density	(kg/m ³)	800
Linear spring constant	(N/m)	2.3×10^6
Young's modulus	(N/m ²)	5.0×10^9
Poisson's ratio	(-)	0.32
γ	(-)	1.0
Friction coefficient	(-)	0.3

Fig. 5 Error of velocity of particle A

2. 3 計算の安定性

一般的な DEM の計算手順を **Fig. 6** に示す。一般的な DEM の計算手順は図の斜線部を除く手順である。DEM では陽解法が用いられており、粒子に作用する力 $\mathbf{f}_i(t)$ 、トルク $\mathbf{T}_i(t)$ を用いて単位時間刻み後の粒子の速度 $\mathbf{v}_i(t+\Delta t)$ 、角速度 $\boldsymbol{\omega}_i(t+\Delta t)$ および位置 $\mathbf{x}_i(t+\Delta t)$ 、回転位置 $\boldsymbol{\theta}_i(t+\Delta t)$ が計算される。以下では回転をしていない粒子が壁に一次的に接触する系を想定し、接触モデルとして線形モデルを用いた場合の従来法における解法の比較を行う。

解法としては種々考えられるが、最も簡単な 1 次精度の解法としては陽的 Euler 法¹⁴⁾ がある。一方、一般的な DEM では、2 次精度の解が期待される 2 次の Adams-Bashforth 式¹⁵⁾ や、蛙飛び法¹⁶⁾、予測子・修正子法¹⁰⁾ が用いられている。2 次の Adams-Bashforth 式は力の予測値を外挿で求めるが、接触開始点や終了点などの不連続点では、適切な処理を施さなければ厳密には 2 次精度が保証されないなどの問題がある。蛙飛び法では速度が時間刻みの中間点でのみ定義されるため、接触力を求める際の速度の値を適切な方法で求め直さなければ 2 次精度は保証されない。また、予測子・修正子法では誤差がある程度以下になる

Fig. 6 Algorithm of calculation of contact force and movement in conventional method and new method

Table 2 Comparison of 4 methods in conventional method ($\kappa=t/\Delta t$, $h=\Delta t$)

Method	Equations	Calculation stability at $\eta=0$	Energy conservation at $\eta=0$	Calculation time
Explicit Euler	$\frac{v_{\kappa+1}-v_{\kappa}}{h} = \frac{f_{\kappa}}{m}$ $\frac{\delta_{\kappa+1}-\delta_{\kappa}}{h} = v_{\kappa}$	Unstable	$h^2 \frac{k}{m} (m v_{\kappa}^2 + k \delta_{\kappa}^2)$ No good	1
2-Order Adams-Bashforth	$\frac{v_{\kappa+1}-v_{\kappa}}{h} = \frac{1}{m} \left(\frac{3}{2} f_{\kappa} - \frac{1}{2} f_{\kappa-1} \right)$ $\frac{\delta_{\kappa+1}-\delta_{\kappa}}{h} = \frac{3}{2} v_{\kappa} - \frac{1}{2} v_{\kappa-1}$	Unstable	$h k (v_{\kappa} x_{\kappa-1} - v_{\kappa-1} x_{\kappa})$ $+ h^2 \frac{k}{m} (m v_{\kappa}^2 + k \delta_{\kappa}^2)$ No good	1.46 ⁺
Leapfrog	$\frac{v_{\kappa+1/2}-v_{\kappa-1/2}}{h} = \frac{f_{\kappa}}{m}$ $\frac{\delta_{\kappa+1}-\delta_{\kappa}}{h} = v_{\kappa+1/2}$	$\Delta t^* \leq \frac{2}{\pi}$	$-\frac{h^2}{4} \frac{k}{m} x_{\kappa+1}^2 + \frac{h^2}{4} \frac{k}{m} x_{\kappa}^2$ Good	1.01 ⁺
Predictor-corrector	$\frac{\hat{v}_{\kappa+1}-v_{\kappa}}{h} = \frac{1}{m} \left(\frac{3}{2} f_{\kappa} - \frac{1}{2} f_{\kappa-1} \right)$ $\frac{\hat{\delta}_{\kappa+1}-\delta_{\kappa}}{h} = \frac{3}{2} v_{\kappa} - \frac{1}{2} v_{\kappa-1}$ $\frac{v_{\kappa+1}-v_{\kappa}}{h} = \frac{1}{2m} (\hat{f}_{\kappa+1} + f_{\kappa})$ $\frac{\delta_{\kappa+1}-\delta_{\kappa}}{h} = \frac{1}{2} (\hat{v}_{\kappa+1} + v_{\kappa})$	$\Delta t^* \leq \frac{2\sqrt{2}-1}{\pi}$	$h^2 \frac{k}{m} (m v_{\kappa} v_{\kappa-1} + k \delta_{\kappa} \delta_{\kappa-1})$ $+ h^2 \frac{k}{m} \left\{ (m v_{\kappa}^2 + k \delta_{\kappa}^2) + h \frac{k}{2} (v_{\kappa} \delta_{\kappa-1} - v_{\kappa-1} \delta_{\kappa}) \right.$ $\left. + 4 h^2 \frac{k}{m} (m v_{\kappa}^2 + k \delta_{\kappa}^2) \right\}$ No good	2.08

まで修正を繰り返すのが通常であるが、DEM では計算時間の関係から、修正を1, 2回にとどめるのが一般的である。予測子・修正子法では、一度接触力を全て計算した後に、速度および位置の予測値を用いて再度接触力の予測値を計算するため、計算上は接触力の予測値を計算するまで全ての接触状態を記憶しておく必要があり、その分計算時間が増大する。

上述の四つの解法の比較を **Table 2** に示す。表中の数式は、1 粒子1 次元系を想定しており、添え字の i, n 等は省略して表記している。また添え字の κ は $\kappa = t/\Delta t$ で定義され、 Δt は時間刻みである。また、 Δt は表記上 h と簡略化している。接触力は線形バネを想定しており、

$$f_{\kappa} = -k \delta_{\kappa} - \eta v_{\kappa} \quad (12)$$

である。Table 2 に示した解析内容を、陽的 Euler 法を例として以下に説明する。陽的 Euler 法を行列表記すると、

$$\begin{bmatrix} v_{\kappa+1} \\ \delta_{\kappa+1} \end{bmatrix} = A \begin{bmatrix} v_{\kappa} \\ \delta_{\kappa} \end{bmatrix} \quad (13)$$

$$A = \begin{bmatrix} 1 - h \frac{\eta}{m} & -h \frac{k}{m} \\ h & 1 \end{bmatrix} \quad (14)$$

となり、その行列は、

$$|A| = 1 - \frac{\eta}{m} h + \frac{k}{m} h^2 \quad (15)$$

となる。ここで、 m は質量である。したがって、任意の m, k および η に対して行列 A の固有値に大きさが1 以上のものが存在する可能性があり、これは計算の安定領域を外れる可能性を示している。表中の計算安定性は、 $\eta = 0$ の場合を例として、上述の陽的 Euler 法の場合と同様に行列式より計算の安定性を解析した結果である。ただし、表中の Δt^* は次式により定義される。

$$\Delta t^* = \frac{\Delta t}{t_c} \quad (16)$$

t_c は $\eta = 0$ のときの接触時間である。

$$t_c = \pi \sqrt{\frac{m}{k}} \quad (17)$$

また、 $\eta = 0$ の場合におけるエネルギー保存の様子を陽的 Euler 法の場合について調べると、

$$m v_{\kappa+1}^2 + k \delta_{\kappa+1}^2 = \left(1 + h^2 \frac{k}{m}\right) (m v_{\kappa}^2 + k \delta_{\kappa}^2) > m v_{\kappa}^2 + k \delta_{\kappa}^2 \quad (18)$$

となり、厳密にはエネルギーは保存されない。厳密にエネルギーが保存されない場合でも、行列 A の行列式が1 の場合には、変換に対してある保存量が存在し、具体的には、計算されるエネルギー量は真のエネルギー値から上下に微小変動するのみで、大きくくずれた値にはならないことを示している。表中のエネルギー保存とは、 $\eta = 0$ の場合に上述の解析を行った結果を示しており、Good とは厳密にはエネルギーは保存されないが行列式が1 である場合を示している。また、エネルギー保存の項に示した数式は、

$$\Delta e = (m v_{\kappa+1}^2 + k \delta_{\kappa+1}^2) - (m v_{\kappa}^2 + k \delta_{\kappa}^2) \quad (19)$$

で定義されるエネルギー誤差であり、表中の $v_{\kappa, \kappa-1}$ 、および $\delta_{\kappa, \kappa-1}$ は、

$$\begin{aligned} v_{\kappa, \kappa-1} &= \frac{3}{2} v_{\kappa} - \frac{1}{2} v_{\kappa-1} \\ \delta_{\kappa, \kappa-1} &= \frac{3}{2} \delta_{\kappa} - \frac{1}{2} \delta_{\kappa-1} \end{aligned} \quad (20)$$

で定義される。

表中の計算時間は、1 粒子1 次元系の粒子の接触を計算するのに要する時間を、陽的 Euler 法の場合を1 として比較したものである。2 次の Adams-Bashforth 式における上付き添え字の+は、厳密に2 次精度を保証するために接触開始点や終了点などの不連続点で適切な処理を施した場合、計算時間がより増大することを示している。また、蛙飛び法では、今回の解析では、2 次精度を保証するための以下の始点および終点用公式

$$\frac{v_{\kappa+1/2} - v_{\kappa}}{h/2} = \frac{f_{\kappa}}{m} \quad (21)$$

$$\frac{v_{\kappa} - v_{\kappa-1/2}}{h/2} = \frac{f_{\kappa}}{m} \quad (22)$$

を用いているが、Eq. (22) は $\eta \neq 0$ の場合には陽的に用いることができないため、2 次精度を保証するためには多段階法等の更に適切な処理が必要となり、上付き添え字の+はそのことによって計算時間が増大することを示している。ただし、DEM の計算時間は、粒子がより密集している状態では、接触力の計算よりむしろ接触判定に要する計算時間の方が支配的であるこ

とが知られていることに注意する必要がある。

蛙飛び法は上述のような問題点を有しているものの、Table 2 より、2 次精度の 3 方法の中では、計算の安定性、エネルギー保存の観点では、最も優れた方法となっている。

以上は 1 粒子が壁に接触した場合における考察であり、一般に、接触数が多くなるに従って個々の粒子の振動数は大きくなる傾向にあるため、多体接触が支配的な計算では、計算の安定性を得るためにより時間刻みを小さく設定する必要がある。次項では、多体接触が支配的な場合においても、より大きい時間刻みで安定な解が得られる方法を提案する。

3. 接触力予測法

3. 1 接触力予測法 の概念

本研究では、2 体接触の段階で予測値を求める方法を提案する。

$$\hat{f}_i(t+\Delta t) = \sum_j \hat{f}_{cij}(t+\Delta t) + \hat{f}_{oi}(t+\Delta t) \quad (23)$$

式中の $\hat{}$ は予測値を示す。このように予測値を接触点ごとに求める方法を、新たに接触力予測法と呼ぶことにする。接触力予測法の計算手順を Fig. 6 に示す。従来法の計算手順と比較すると、斜線部である接触力を接触点ごとに予測する手順が加わっているため、予測のための計算量が極力小さくなるよう配慮する必要がある。

ここで、多体接触の計算に対し、2 体接触の計算で得られる予測値を用いることの意味を数値解析的な側面から考察する。多体接触の例として、直列した回転を伴わない多数の粒子が接触する系を考える。系の中の粒子 i, j に注目すると、その運動方程式は、

$$m_i \frac{dv_i(t)}{dt} = f_{ij}(t) + \Sigma f_i(t) \quad (24)$$

$$m_j \frac{dv_j(t)}{dt} = -f_{ij}(t) + \Sigma f_j(t) \quad (25)$$

となる。それぞれの式の右辺第 2 項は、粒子 i, j 間の接触力以外の各粒子に作用する力である。例えば、粒子 i の速度に関して 2 次精度を達成するためには、

$$v_i(t+\Delta t) = v_i(t) + \Delta t \frac{dv_i(t)}{dt} + \frac{(\Delta t)^2}{2} \frac{d^2v_i(t)}{dt^2} \quad (26)$$

が成り立つ必要がある。ただし、 Δt の 3 次以上の項を省略している。Eq. (24) を代入して Eq. (26) を変

形すると、

$$v_i(t+\Delta t) = v_i(t) + \frac{\Delta t}{2m_i} \left(f_{ij}(t) + \hat{f}_{ij}(t+\Delta t) + \Sigma f_i(t) + \Sigma \hat{f}_i(t+\Delta t) \right) \quad (27)$$

$$\text{ただし、} \hat{f}_{ij}(t+\Delta t) = f_{ij}(t) + \Delta t \frac{df_{ij}(t)}{dt} \quad (28)$$

$$\hat{f}_i(t+\Delta t) = f_i(t) + \Delta t \frac{df_i(t)}{dt} \quad (29)$$

Eq. (28) に関して、

$$\begin{aligned} \frac{df_{ij}(t)}{dt} &= k_{ij}(v_j(t) - v_i(t)) \\ &+ \eta_{ij} \left(\frac{dv_j(t)}{dt} - \frac{dv_i(t)}{dt} \right) \\ &= k_{ij}(v_j(t) - v_i(t)) \\ &+ \eta_{ij} \left(\frac{-f_{ij}(t) + \Sigma f_j(t)}{m_j} - \frac{f_{ij}(t) + \Sigma f_i(t)}{m_i} \right) \end{aligned} \quad (30)$$

であることを考慮すると、 $\eta_{ij} \neq 0$ の多体接触の場合には、Eq. (28) で計算される予測値に他の接触力 $\Sigma f_i(t)$ 、 $\Sigma f_j(t)$ による効果を考慮しなければ、2 次精度は達成されないことが分る。ただし、第 2 節に述べたように、より大きい時間刻みを用いた DEM とは、個々の接触力の計算に関してはある程度の誤差を許容した方法であると言えるから、必ずしも厳密に 2 次精度を達成する必要はないと考えられる。Eq. (27) は、 $\hat{f}_{ij}(t+\Delta t)$ に対する他の接触力 $\Sigma f_i(t)$ 、 $\Sigma f_j(t)$ による効果を見捨てた場合においても、1 次精度は達成されていることを示している。以下では、接触力の予測値に、他の作用力の効果を考慮しない方法に関して考察する。

接触力の予測値を求める解法に関しては種々の方法が考えられるが、中でもより大きい時間刻みで安定な解が得られるものを選択し、Table 3 にそれぞれの特徴を示した。考察の方法は Table 2 と同様であり、計算の安定性およびエネルギー保存は $\eta=0$ の場合について考察したものである。エネルギー保存における Exactly Good とは、Eq. (18) と同様の解析によって厳密にエネルギーが保存されると確認されたものを示す。表中の 2 次の修正 Runge-Kutta 法とは、

$$\frac{v_{\kappa+1/2} - v_{\kappa}}{h/2} = \frac{f_{\kappa}}{m} \quad (31)$$

Table 3 Comparison of 4 Methods for calculating the estimated value of force ($\kappa=t/\Delta t$, $h=\Delta t$)

Method	Calculation stability at $\eta=0$	Energy conservation at $\eta=0$	Application to Hertz and Mindlin model	Calculation time
Implicit trapezoidal	Stable	0 Exactly good	NO	1.22
Modified 2-Order Runge-Kutta	$\Delta t^* \leq \frac{2}{\pi}$	$-\frac{h^2}{4} \frac{k}{m} v_{\kappa+1}^2 + \frac{h^2}{4} \frac{k}{m} v_{\kappa}^2$	OK	1.77
4-Order Runge-Kutta	$\Delta t^* \leq \frac{2\sqrt{2}}{\pi}$	$\frac{k}{m} \left(h + \frac{h^2}{2} + \frac{h^3}{6} + \frac{h^4}{24} \right)^2 (m v_{\kappa}^2 + k \delta_{\kappa}^2)$ No good	OK	2.61
Exact solution	Stable	0 Exactly good	NO	1.22

$$\frac{\delta_{\kappa+1/2} - \delta_{\kappa}}{h/2} = v_{\kappa} \quad (32)$$

$$\frac{v_{\kappa+1} - v_{\kappa}}{h} = \frac{f_{\kappa+1/2}}{m} \quad (33)$$

$$\frac{\delta_{\kappa+1} - \delta_{\kappa}}{h} = \frac{1}{2} (v_{\kappa+1} + v_{\kappa}) \quad (34)$$

とする解法で、Eq. (34) が台形法になっている点が通常の2次のRunge-Kutta法と異なる点である。2次のRunge-Kutta法は $\eta=0$ の場合には計算が不安定であるが、このように少しの修正を加えることで安定性が得られることは興味深い。また、表中の厳密解とは、線形バネモデルを支配する常微分方程式の厳密解を予測値とする方法である。

表中の計算安定性に関するStableとは、接触力に関する数値計算上は時間刻みを大きくしても安定な数値解が得られることを示しているが、DEMでは2.2節で述べたように、時間刻みに別の制約が存在する。基本的には、時間刻みは粒子間の接触時間 t_c 内、すなわち、 $\Delta t^* \leq 1$ の範囲で計算を行うべきである。

Table 3より、時間刻みを大きくできるという点では、陰的台形法や厳密解を用いる方法の二つが優れており、エネルギーを厳密に保存するという点では陰的台形法と厳密解を用いる方法が優れているが、これらの方法は非線形モデルへの適用が困難である。非線形モデルに適用可能な解法で最も時間刻みを大きく設定できるのは、4次のRunge-Kutta法である。接触力に関する計算時間の点からは、陰的台形法および厳密解を用いた方法が最も計算時間が小さいが、前述のよ

うに、粒子がより密集している状態では、DEMでは接触力の計算よりも接触検出に要する計算時間の方が大きいので、高速化に対する接触力の計算時間が小さい効果よりも、時間刻みが大きく設定できる効果の方が大きい。

接触力の予測値は、接触と同様に法線方向と接線方向に分けて求める。2体接触の法線方向および接線方向の速度および位置の予測値を、上述の方法のいずれかにより求めた結果を $\hat{\delta}_{nij}(t+\Delta t)$ 、 $\hat{v}_{nij}(t+\Delta t)$ および $\hat{\delta}_{sij}(t+\Delta t)$ 、 $\hat{v}_{sij}(t+\Delta t)$ とすると、接触力の法線方向成分の予測値 $\hat{f}_{nij}(t+\Delta t)$ は次式で求められる。

$$\hat{f}_{nij}^* = k_{nij} \hat{\delta}_{nij}^{\alpha_1}(t+\Delta t) + \eta_{nij} \hat{\delta}_{nij}^{\alpha_2} \hat{v}_{nij}(t+\Delta t) \quad (35)$$

ただし、 α_1 および α_2 はEq. (2)で用いたものと同じである。一般的なDEMにおける接触モデルでは、ノータンションジョイントで表現される法線方向の引力を許さないという条件があるため、予測値が負にならない条件を加える必要がある。

$$\begin{aligned} \hat{f}_{nij}^* > 0 \text{ のとき} & \quad \hat{f}_{nij}(t+\Delta t) = \hat{f}_{nij}^* \\ \hat{f}_{nij}^* \leq 0 \text{ のとき} & \quad \hat{f}_{nij}(t+\Delta t) = 0 \end{aligned} \quad (36)$$

接触力の接線方向成分の予測値 $\hat{f}_{sij}(t+\Delta t)$ は次式で求められる。

$$\begin{aligned} \Delta t \leq \hat{t}_{cij} \text{ のとき} \\ \hat{f}_{sij}(t+\Delta t) = k_{sij} \hat{\delta}_{sij}^{\alpha_3}(t+\Delta t) \hat{\delta}_{sij}(t+\Delta t) \\ + \eta_{sij} \hat{\delta}_{sij}^{\alpha_4}(t+\Delta t) \hat{v}_{sij}(t+\Delta t) \end{aligned} \quad (37)$$

$$\begin{aligned} \Delta t > \hat{t}_{cij} \text{ のとき} \\ \hat{f}_{sij}(t+\Delta t) = k_{sij} \hat{\delta}_{sij}^{\alpha_3}(t+\Delta \hat{t}_{cij}) \hat{\delta}_{sij}(t+\Delta \hat{t}_{cij}) \end{aligned}$$

$$+ \eta_{sij} \hat{\delta}_{nij}^{a_1} (t + \Delta \hat{t}_{cij}) \hat{v}_{sij} (t + \Delta \hat{t}_{cij}) \quad (38)$$

ただし、 α_3 および α_4 は Eq. (6) で用いたものと同じである。また、 $\Delta \hat{t}_{cij}$ は接触が解除された時間、すなわち、 $\hat{f}_{nij}^* = 0$ の時刻であり、例えば次の直線近似式より得る。

$$\Delta \hat{t}_{cij} = \frac{f_{nij}(t)}{f_{nij}(t) - f_{nij}^*} \Delta t \quad (39)$$

更に、接線方向の予測値にはクーロン則が適用される。

$$|\hat{f}_{sij}(t + \Delta t)| \leq \mu_{ij} |\hat{f}_{nij}(t + \Delta t)| \quad (40)$$

3. 2 接触力予測法の適用例

新規法を用いて DEM 計算を行った例を紹介する。本研究では、接触力が支配的な現象として、充填および排出を取り上げる。

対象とした粒子の物性値は Table 1 に示した通りである。粒子は粒径 50mm、個数は 200 個であり、計算空間は底面が 0.3m × 0.3m の開口型四角柱である。このときの粒子間接触時間は 2.0×10^{-4} 秒である。壁面効果を和らげるために、側壁に周期境界条件を用いた。接触力モデルは線形モデルを採用し、バネ定数は、Hertz バネより得られる粒子間の接触時間を参考にして設定した。

計算全体にわたって、接触力予測法では接触力を求める解法として厳密解を用いる方法を使用している。

3. 2. 1 充填シミュレーション

始めに、自由落下による充填に関する計算を行った。粒子は底面から 1m の地点から自由落下させた。

Fig. 7 は、接触力予測法と従来法をそれぞれ用いて計算した場合の、全粒子の運動エネルギー和の時間変化を示したものである。図中の n_t は接触時間内の分割数であり、次式

$$n_t = \frac{t_c}{\Delta t} \quad (41)$$

で定義され、ここで t_c は粒子 1 個が壁に衝突する際の衝突時間である。従来法では $n_t < 3$ で計算が発散したが、接触力予測法ではそれ以下の刻み数でも発散することなく充填率を計算することができた。また、Fig. 8 は、接触力予測法と従来法のそれぞれについて充填率を算出した結果を比較したものである。時間刻みが大きくなるにつれて充填率の計算値は増加する傾

Fig. 7 Kinetic energy of total particles in packing simulation

向があるが、これは時間刻みの大きさに伴って接触検出時の歪みが蓄積されたまま平衡状態に達している可能性があり、そのために密な充填結果が得られたものと考えられる。接触力予測法における時間刻みをどのように設定するかに関しては、時間刻みの増大による誤差をどの程度許容するかによるが、例えば、Fig. 8 より充填率が時間刻みに影響されなくなる範囲は、従来法では $n_t > 300$ であるのに対して接触力予測法では $n_t > 30$ であることを考慮すると、接触力予測法では時間刻みを従来法の 10 倍程度に設定しても同様の結果が得られることが分る。1 ステップの計算時間に関しては、接触力予測法では従来法の約 1.2 倍であった。従って、時間刻みを 10 倍に設定した場合、8 倍程度の高速化が実現されることになる。

なお、単分散のランダム充填に関しては古くから種々の考察が行われており^{17, 18)}、理論的には最密充填構造における充填率 0.74 から単純立方構造における充填率 0.52 の間の充填率が得られるはずであるし、Westman や White らによる単一球形粒子を用いた実験では、0.553~0.63 の充填率が得られている。したがって、本研究で得られた充填率 0.57 は妥当な数値

Fig. 8 Result of packing simulation

Fig. 9 Kinetic energy of total particles in discharge simulation

Fig. 10 Result of discharge simulation

であると言えるが、充填率に関する詳細な考察は別報にて述べたい。

3. 2. 2 排出シミュレーション

次に、より運動を伴う問題として、充填後の床面に円孔をあけ、1 m 下の床まで粒子を自然落下させた場合の粒子の排出挙動に関する計算を行った。孔径は0.2 m である。

Fig. 9 は、前項と同様に全粒子の運動エネルギー和の時間変化を示したものである。従来法では $n_t=3$ で計算が発散している様子が確認できるが、接触力予測法ではそれ以下の刻み数でも発散することなく充填率を計算することができた。また、Fig. 10 は、排出された粒子個数の時間変化を、接触力予測法と従来法のそれぞれについて算出した結果を比較したものである。排出挙動に関しては、接触力予測法と従来法の両者共、比較的大きい時間刻みでも大きな差異は見られない。これは、粒子全体に運動が加えられたことによって、誤差が互いに打ち消しあったためであると考えられる。Fig. 9 より、従来法では $n_t=6$ 程度で、接触力予測法では $n_t=1.5$ 程度で運動エネルギーにおける発散が見られなかったことから、この場合時間刻みは4倍、計算時間に直すと3倍の高速化が実現したことになる。

4. 結 言

粒子間の接触力を計算するアルゴリズムの改善により、大きい時間刻みに耐え得る DEM を開発した。一般的な DEM で用いられている数値解法である2次の Adams-Bashforth 式は、単位時間刻み後の接触力の

予測値を直線外挿によって求める方法であることや、予測子・修正子法は接触を支配する常微分方程式を利用して接触力の予測値を求める方法であることに注目し、それらの方法をさらに拡張して、2体接触の段階における接触点ごとの接触力の予測値を使用する新規な方法（接触力予測法）を提案した。接触力予測法における接触力の予測値を求める解法に関し、時間刻みを大きく設定できる四つの方法を考察してそれぞれの特徴を示した。また、多体接触が支配的である現象の例として充填および排出問題を取り上げ、接触力予測法では3倍～8倍の高速化が実現できることを示した。

本論文では、一例として単分散系の計算を示したが、現在2成分系を対象として数万個の粒子で構成される系に関する考察を行っている。ここでは、本論文で紹介した接触力予測法他に、接触検索アルゴリズムを効率化する幾つかの方法も考察しており、これらの方法を組み合わせた結果、2成分系を対象とした充填および排出問題について10倍～400倍の高速化を達成している。現在のところ、接触力予測法など考え得る高速化手法を適用した場合でも、一般のパソコンレベルでは数10万個程度の粒子数が限度になると予想される。汎用的な実問題規模へのDEMの適用には、例えば並列処理や連続体モデル等との組み合わせなど、計算対象粒子数を減らす更なる高速化が必要になると考えられるが、本論文で考察した接触力予測法は、離散要素法における高速化の一助となる方法であることが確認された。

Nomenclature

$\mathbf{f}$: force vector of particle

(N) $\hat{\mathbf{f}}$: estimated value of $\mathbf{f}$ (N)

$\mathbf{f}_c$: contact force vector of particle	(N)	$\mathbf{x}$: position vector of particle	(m)
$\hat{\mathbf{f}}_c$: estimated value of $\mathbf{f}_c$	(N)	γ : constant related to restitution coefficient	(-)
$\mathbf{f}_o$: force vector of particle except for contact force	(N)	δ : displacement	(m)
$\hat{\mathbf{f}}_o$: estimated value of $\mathbf{f}_o$	(N)	$\hat{\delta}$: estimated value of δ	(m)
$\mathbf{g}$: acceleration of gravity vector	(m/s ²)	Δt : time step	(s)
h : time step in Table 2 and 3	(s)	Δt^* : normalized time step	(-)
i : particle index	(-)	Δt_c : estimated value of contact time	(s)
I : moment of inertia of particle	(kg · m ²)	$\Delta \tau$: time difference of contact start points	(s)
j : particle index	(-)	$\Delta \tau^*$: normalized time difference of contact start points	(-)
k : spring coefficient	(N/m or N/m ^{1.5})	η : viscosity coefficient	(kg/s or (kg/s)/m ^{0.25})
m : mass of particles	(kg)	θ : angular position vector of particle	(rad)
$\mathbf{n}$: unit vector from the center of particle to contact point	(-)	κ : time index	(-)
n_t : number of steps in contact time	(-)	μ : friction coefficient	(-)
r : radius of particle	(m)	ω : angular velocity vector of particle	(rad/s)
$\mathbf{s}$: tangential unit vector	(-)	Subscripts	
t : time	(s)	i : particle i	
t_c : contact time	(s)	ij : between particle i and j	
$\mathbf{T}$: torque vector of particle	(N · m)	j : particle j	
$\mathbf{v}$: velocity vector of particle	(m/s)	n : normal direction	
v : velocity of particle	(m/s)	s : tangential direction	
$\hat{v}$: estimated value of v	(m/s)		

References

- 1) Cundall, P. A. : "Rational Design of Tunnel Supports - A Computer Model for Rock Mass Behavior Using Interactive Graphics for the Input and Output of Geometrical Data", Technical Report MRD-2-74 Missouri River Division, US Army Corps of Engineers
- 2) Kawagucki, T., T. Tanaka and Y. Tsuji : "Numerical Simulation of Fluidized Bed using the Distinct Element Method (the Case of Spouting Bed)", *Trans. Japan Soc. Mech. Eng.* (Series B), **58-551**, 2119-2125 (1992)
- 3) Asakura, K., S. Harada, T. Funayama and I. Nakajima : "Simulation of Descending Particles in Water by DEM", *Sigen to Sozai*, **112**, 219-224 (1996)
- 4) Watanabe, H. : "Critical Rotation Speed for Ball-Milling", *Powder Technol.*, **104**, 95-99 (1999)
- 5) Natsuyama, S. and M. Horio : "Study of Dynamical Analysis for Scale Up of Fluidized-bed of Solid Dosage Forms by DEM Simulation", *Kagaku Souchi*, **9** (2001)
- 6) Timoshenko, S. P. and J. N. Goodier : "Theory of Elasticity, 3rd Ed.", p.380, McGraw-Hill Book Company (1970)
- 7) Mindlin, R. D. : "Compliance of Elastic Bodies in Contact", *J. Appl. Mechanics*, **16**, 259-268 (1949)
- 8) Mindlin, R. D. : "Elastic Spheres in Contact Under Varying Oblique Forces", *J. Appl. Mechanics*, **20**, 327-344 (1953)
- 9) Taguchi, Y. : "Dynamics of Granular Matter from the Physical Point of View (I)", *J. Soc. Powder Technol., Japan*, **32**, 240-246 (1995)
- 10) 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)
- 11) Okui, T. : "Expectation of Gas Hydrate Transport Technology", *J. Japanese Assoc. Petroleum Technol.*, **66**, 168-174 (2001)
- 12) Nakajima, Y., Y. Kawagoe and T. Takaoki : "Transporting System of Natural Gas Hydrate in Pellet Form", Proceedings of JSME Transportation and Logistics 2001, Kawasaki. pp. 315-316 (2001)
- 13) Maeno, N. and M. Fukuda : "Seppyou no Kouzou to Bussei", p. 122, Kokon Shoin (1986)
- 14) Hitotsumatsu, S. : "Suuchi Kaiseki", p. 103, Asakura Shoten (1982)
- 15) The Society of Powder Technology, Japan : "Funtai Simulation Nyumon", p. 29, Sangyo Tosho
- 16) Moakher, M., T. Shinbrot and J. Muzzio : "Experimentally Validated Computations of Flow, Mixing and Segregation of Non-Cohesive Grains in 3D Tumbling Benders", *Powder Technol.*, **109**, 58-71 (2000)
- 17) Cumberland, D. J. and R. J. Crawford : "The Packing of Particles", pp. 14-39, Elsevier
- 18) Mogami, T. (ed.) : "Doshitu Kogaku", pp. 893-933, Gihodo Shuppan