流動層の DEM 計算における相似則モデル

Similarity Model for DEM Simulation of Fluidized Bed

鷲野 公彰, 許 志宏, 川口 寿裕, 辻 裕

Kimiaki Washino, Chih-Hung Hsu, Toshihiro Kawaguchi, Yutaka Tsuji

Received 1 December 2006 ; Accepted 9 January 2007

Discrete Element Method (DEM) is widely applied to the numerical simulations of fluidized beds. However, the computational expense increases explosively as the number of particles increases. This issue hinders DEM from being applied to real-scale simulations. A model particle is sometimes employed in order to overcome this problem, in which real particles are replaced by larger model particles. When the model particle is used, some conditions (e.g., superficial velocity, gas density, gas viscosity, particle density) must be adjusted accordingly. Those are referred to as the 'similarity conditions.' In this research the similarity conditions are derived from the equations of change through a dimensionless analysis. Bubble motions are compared between the model particle cases and the real particle case to validate the proposed similarity conditions.

Keywords : Fluidized bed, DEM, Calculation time, Similarity model

1. 緒 言

流動層とは、容器内に充填された粒子層の底部から気流を吹き込むことによって粒子を流動化させる装置であり、燃焼、乾燥、混合、触媒反応、コーティング、造粒などさまざまな工業プロセスで利用されている。近年の計算機の発達とともに、流動層内の流動挙動の数値シミュレーションも盛んに行われるようになってきた。流動層の数値シミュレーションは Euler-Euler 型と Euler-Lagrange 型に大別される。二流体モデルに代表される E-E 型の手法では、流体相、粒子相ともに連続体的に扱われる¹⁾。現在この手法は、粒子相に対する構成方程式を kinetic theory²⁾に基づいて導出する方法が主流となっている^{3~5)}。しかし、この粒子相の構成方程式には多くのパラメータを含むため、どのような場合にも適用できる普遍的なモデルは現在でも開発されていない。一方、E-L 型では流体相は Euler 的に記述され、粒子相は離散要素法（以下 DEM）などにより個々の粒子運動が

Lagrange 的に追跡される。この方法では、特別なパラメータフィッティングをすることなしに実現現象を再現できることが広く認められている^{6~9)}。しかしその反面、粒子数が増えると計算時間が増大するという問題がある。計算機能力の向上により扱える粒子数の範囲は広がってきているが、実際に工業プロセスに使用されている装置で取り扱う粒子数に比べると、現状では極めて小規模なスケールにとどまっている。

この問題を克服するために、いくつかの試みがなされている^{10~12)}。その中の一つに、実際より大きな粒径のモデル粒子を用いて計算を行う手法がある。これは、計算機で扱える範囲の粒子数を用いて実際の流動層の流動状態を模擬したいという考え方である。モデル粒子を用いて実現現象を模擬するためには、いくつかのパラメータを調整する必要があるため、このモデルを相似則モデルと呼ぶ。これまでに様々な相似則モデルが提案されている^{11, 12)}が、まだ確立されたものは存在しない。また、これらのモデルは固気系混相流で粒子間接触力の影響が小さい系を対象としたものである。粒子間接触力の影響が大きな系に対しては、酒井ら¹³⁾が改良型代表粒子モデルを提案している。

本研究では、流動層を対象とした新しい相似則モデ

大阪大学工学研究科 機械工学専攻
(〒565-0871 大阪府吹田市山田丘 2-1) TEL 06-6879-4878
Department of Mechanical Engineering, Osaka University
(2-1, Yamada-oka, Suita, Osaka 565-0871, Japan)

ルとして、流動層内の流体、粒子の運動を支配する基礎方程式を無次元化することにより相似則条件を導出する方法を提案する。さらに、この相似則モデルを用いて気泡流動層および噴流層の数値シミュレーションを行い、気泡の挙動に関して実粒子を用いたシミュレーション結果と比較することによりモデルの妥当性を検証する。

2. 相似則条件の導出

2.1 流体運動の無次元化

はじめに流体運動の支配方程式を無次元化する。粒子径 d_p 、流体密度 ρ_g 、空塔速度 U_0 を代表量として取り、流体相の連続の式、運動方程式を無次元化すると、次の Eqs. (1), (2) となる。

$$\frac{\partial}{\partial t^n} \varepsilon + \frac{\partial}{\partial x_i^n} (\varepsilon U_i^n) = 0 \quad (1)$$

$$\begin{aligned} & \frac{\partial (\varepsilon U_i^n)}{\partial t^n} + \frac{\partial (\varepsilon U_i^n U_j^n)}{\partial x_j^n} \\ &= -\varepsilon \frac{\partial P^n}{\partial x_i^n} + \frac{1}{Re} \frac{1-\varepsilon}{\varepsilon} (\bar{V}_i^n - U_i^n) S_f \end{aligned} \quad (2)$$

ただし、流動層のように固体粒子が高濃度に依存する流れにおいては、流体の粘性応力項の影響は小さいものと考えて無視している。無次元変数 t^n , U_i^n , $\bar{V}_i^n$, P^n , x_i^n はそれぞれ以下のように定義される。

$$\begin{aligned} t^n &= \frac{t}{d_p / U_0}, \quad U_i^n = \frac{U_i}{U_0}, \quad \bar{V}_i^n = \frac{\bar{V}_i}{U_0}, \\ P^n &= \frac{P}{\rho_g U_0^2}, \quad x_i^n = \frac{x_i}{d_p} \end{aligned}$$

ここで、 U_i は流体速度であり、 ε は空隙率、 $\bar{V}_i$ は平均粒子速度、 P は圧力である。また、 Re は次のように定義される。

$$Re \equiv \frac{\rho_g d_p U_0}{\mu} \quad (3)$$

μ は流体の粘性係数である。運動方程式の右辺第2項は粒子-流体間の相互作用を表す項であり、 S_f は以下の関数式で与えた。

$$S_f = \begin{cases} 150(1-\varepsilon) + 1.75Re_p, & \varepsilon \leq 0.8 \\ 18\varepsilon^{-1.7} + 2.7Re_p^{0.687} \varepsilon^{-1.7}, & \varepsilon > 0.8 \text{ for } Re_p < 1000 \\ 0.33Re_p \varepsilon^{-1.7}, & \varepsilon > 0.8 \text{ for } Re_p > 1000 \end{cases} \quad (4)$$

Eq. (4) において、空隙率の小さな領域に対するものは充填層に対する Ergun の式¹⁴⁾ を、空隙率の大きな領域に対するものは Wen と Yu¹⁵⁾ の式をそれぞれ用いた。また、 Re_p は粒子レイノルズ数であり次式で定義される。

$$Re_p \equiv \frac{\rho_g d_p |U_i - \bar{V}_i|}{\mu} \quad (5)$$

なお、流体計算は有限体積法に基づいており、SIMPLE 法を用いて計算を行っている。

2.2 粒子運動の無次元化

次に、流動層内の粒子の運動を無次元化する。固気流動層内の1つの粒子に作用する主な力として、粒子間相互作用力、粒子-流体間相互作用力および重力が挙げられる。流動層内の粒子は流体力によって浮遊状態になっており、互いの接触力からは解放されている。このため、付着力が無視できる比較的大きな粒子からなる流動層においては、粒子間相互作用力は無視でき、粒子-流体間相互作用力と重力のみでその流動様式が決定されたと考えてよい。以上をふまえると、代表量、 d_p , ρ_g , U_0 を用いて粒子の運動方程式は以下のように無次元化される。

$$\frac{dV_i^n}{dt^n} = \frac{1}{\varepsilon \rho_p^n Re} S_f (U_i^n - V_i^n) + \frac{1}{\rho_p^n} \frac{\partial P^n}{\partial x_i^n} + g_i^n \quad (6)$$

ρ_p^n , V_i^n , g_i^n は、それぞれ無次元化された粒子密度、粒子速度、重力であり、それぞれ次のように定義される。

$$\rho_p^n = \frac{\rho_p}{\rho_g}, \quad V_i^n = \frac{V_i}{U_0}, \quad g_i^n = \frac{g_i}{U_0^2 / d_p}$$

2.3 相似則条件

Eqs. (1), (2), (6) より、実際の粒子およびモデル粒子を用いた場合で次の三つの無次元定数が一定になるとき、支配方程式が同じになり流れ場および粒子挙動を相似にすることができる。

$$g_i^n = \frac{g_i}{U_0^2 / d_p} = \text{const.} \quad (7)$$

$$Re = \frac{\rho_g d_p U_0}{\mu} = \text{const.} \quad (8)$$

$$\rho_p^n = \frac{\rho_p}{\rho_g} = \text{const.} \quad (9)$$

モデル粒子径が実際の粒子径の k 倍になる場合、すなわち

Table 1 Similarity conditions

Particle diameter (m)	$d_{p2}=k d_{p1}$
Acceleration of gravity (m/s^2)	$g_{i2}=g_{i1}$
Superficial gas velocity (m/s)	$U_{02}=\sqrt{k} U_{01}$
Gas viscosity ($\text{Pa} \cdot \text{s}$)	$\mu_2=\mu_1$
Gas density (kg/m^3)	$\rho_{g2}=\frac{1}{k\sqrt{k}}\rho_{g1}$
Particle density (kg/m^3)	$\rho_{p2}=\frac{1}{k\sqrt{k}}\rho_{p1}$

$$d_{p2}=k d_{p1} \quad (10)$$

となる場合を考える。ここで添え字 1 は実際の粒子の場合を、添え字 2 はモデル粒子の場合を表す。このときに Eqs. (7), (8), (9) を満たすような条件を考える。決定すべきパラメータが五つあるのに対し、式が三つであるため、この条件は一意に決まるものではない。本研究では以下のことに留意して条件の設定を行っている。まず、Eq. (7) に注目する。今後実験による検証を行うことを考えて、 g_i が一定となるように $g_{i2}=g_{i1}$ を設定する。これより $U_{02}=\sqrt{k} U_{01}$ が決定される。次に Eq. (8) に注目する。本研究では流体の粘性摩擦による力を無視して計算を行っているため、 μ の値が変化しないような条件 $\mu_2=\mu_1$ を考え、 $\rho_{g2}=\frac{1}{k\sqrt{k}}\rho_{g1}$ とする。最後に Eq. (9) より、 $\rho_{p2}=\frac{1}{k\sqrt{k}}\rho_{p1}$ が決定される。以上の関係を **Table 1** にまとめ、この条件を相似則条件と呼ぶ。

3. 流動層の数値シミュレーション

3. 1 計算条件

まず初めに、**Fig. 1** に示す形状の 2 次元流動層を計算対象として用いた。主な計算条件は **Table 2** にまとめている。流入気体は空気であり、粒子は直径 0.3 mm の球形ガラス粒子を想定している。以下ではこの粒子を実粒子と呼ぶことにする。

次に、同様の流動層容器において、粒径 1, 2, 3 および 4mm のモデル粒子を用いたときの数値シミュレーションをそれぞれ行った。Table 1 より、各モデル粒子を使用した場合の計算条件は **Table 3** のようになる。なお、モデル粒子のばね定数、反発係数、摩擦係数は実粒子と同じ値を用いている。また、現象に対する空間分解能を維持するために、実粒子の場合と同じ大きさの流体計算セルを用いている。

Table 2 Calculation conditions (Real particle case)

Particle	
Diameter (mm)	0.3
Density (kg/m^3)	2470
Normal spring constant (N/m)	800
Tangential spring constant (N/m)	200
Coefficient of restitution (—)	0.9
Coefficient of friction (—)	0.3
Number (—)	461076
Acceleration of gravity (m/s^2)	9.8
Gas	
Density (kg/m^3)	1.205
Viscosity ($\times 10^{-5} \text{Pa} \cdot \text{s}$)	1.8
Superficial gas velocity (m/s)	0.2
Calculation	
Time step ($\times 10^{-6} \cdot \text{s}$)	4.0
Cell size (mm)	10×20

Fig. 1 Geometry of calculation region (Fluidized bed)

3. 2 計算結果および考察

相似則モデルの妥当性を検証するために、各シミュレーション結果において気泡の挙動に注目して解析を行った。特徴的な気泡の様子を **Fig. 2** に示す。ここで **Fig. 2** では、粒子層の変形を見るために色をつけたトレーサー粒子を層状に配置している。

実粒子を用いたシミュレーションでは、気泡は上昇するとともに面積を増大させながら成長している。本研究で用いた実粒子は Gerdart の分類によると B 粒

Table 3 Calculation conditions (Model particle case)

Particle				
Diameter (mm)	1	2	3	4
Density (kg/m^3)	405.9	143.5	78.11	50.73
Number (-)	41273	10212	4508	2553
Gas				
Density (kg/m^3)	0.200	0.0697	0.0379	0.0211
Viscosity ($\times 10^{-5} \text{Pa} \cdot \text{s}$)	1.80			
Superficial gas velocity (m/s)	0.37	0.52	0.63	0.73
Calculation				
Time step ($\times 10^{-5} \cdot \text{s}$)	1.0	1.6	2.0	2.5
Cell size (mm)	10×20

Fig. 2 Behavior of particles in fluidized bed

子に属しており、この気泡面積の増加パターンはB粒子の特徴的なものであるといえる。また、気泡のウェーク部の粒子が気泡に伴って上昇し、粒子相の変

形、混合が観察される。モデル粒子を用いた場合、1mm、2mmモデルの気泡の成長の様子は実粒子の場合と似た結果となっている。また、粒子相の変形、

Table 4 Period of bubble generation (Fluidized bed)

	Real	1mm	2mm	3mm	4mm
d_{p2}/d_{p1}	1	3.3	6.7	10	13.3
Period (s)	0.26	0.26	0.25	0.33	0.31

Fig. 3 Mean bubble area (Fluidized bed)

混合についても実粒子の場合と同様の傾向が観測される。しかし、3mm、4mm モデルを用いた場合はスラッシングに近い現象が起きている。また、トレーサー粒子層の変形から、気泡に伴っての粒子上昇は見られず、流動パターンが定性的に異なっていることが分る。

流動層底部より 100~200mm の位置を通過する気泡の平均面積について調べたものを **Fig. 3** に示す。図中のエラーバーは存在する気泡面積の範囲を表している。また、ここでいう気泡とは空隙率 0.7 以上であり、かつ面積が 0.001m^2 以上の領域のことを指す。Fig. 3 を見ると、1mm、2mm モデルの結果は気泡の平均面積や最大の気泡面積について実粒子の場合と近い結果となっている。しかし、3mm や 4mm モデルを用いた場合はかなり大きな気泡が発生している。

次に、各条件における気泡の発生周期について検討する。流動層底部より 200mm の高さを通過する気泡の周期を計算したものを **Table 4** に示す。ここで、気泡の周期は一定の時間内に発生する気泡の数をカウントし、時間を気泡数で割ることにより算出した。これを見ると、1mm、2mm モデルを用いた場合は気泡

Fig. 4 Geometry of calculation region (Spouted bed)

の発生周期が実粒子の場合とほぼ同じ値となっている。しかし、3mm、4mm モデルを用いた場合は気泡の発生周期が長くなっている。

以上の結果より、今回の計算条件では 2mm モデル以下の粒子を用いれば実粒子の流動層の気泡挙動を模擬できたといえる。しかし、粒径 3mm、4mm の粒子を用いた場合は、気泡の面積、発生周期ともに大きく変化した。この原因の一つとして壁面の影響が挙げられる。一般に容器壁面付近では他の領域に比べて空隙が大きくなる。今回はいずれの場合も一定サイズの流体セルを用いているため、粒径が大きくなると壁面に隣接するセルの空隙率が大きくなる。その結果、下部から流入された空気は壁面近傍を優先的に流れる。この効果により、流動様式が変化してしまったものと考えられる。

4. 噴流層の数値シミュレーション

4.1 計算条件

前節の流動層のシミュレーションでは、容器壁面の効果が強く影響していることが示唆された。そこで、この壁面の影響が小さくなる条件での数値シミュレーションを行い、先ほどの流動層の結果との比較を行った。Fig. 1 に比べて横幅が 3 倍の容器を用い、底部中心 30mm から空気を流入する噴流層を計算対象とした (**Fig. 4**)。使用粒子は流動層の場合と同じものを使用した。それぞれの計算条件における粒子数および空塔速度を **Table 5** に示す。流体計算セル等の計算条件は流動層の場合と同様である。

Table 5 Superficial velocity (Spouted bed)

	Real	1mm	2mm	3mm	4mm
Number (—)	1385076	124373	30912	13708	7616
Superficial velocity (m/s)	0.12	0.22	0.31	0.38	0.44

(a) Real particle

(b) 1mm model particle

(c) 2mm model particle

(d) 3mm model particle

(e) 4mm model particle

Fig. 5 Behavior of particles in spouted bed

4. 2 計算結果

各計算条件で特徴的な流動様式を表す粒子運動のスナップショットを Fig. 5 に示す。1mm, 2mm および 3mm 粒子を用いた場合は、実粒子の場合と近い大きさの気泡が発生している。しかし、4mm 粒子を用いた場合はチャネリングを起こしている様子が見て取れる。

次に、実粒子、1mm, 2mm, 3mm 粒子の結果について、層底部から 100mm～200mm の領域を通過

Fig. 6 Mean bubble area (Spouted bed)

Table 6 Period of bubble generation (Spouted bed)

	Real	1mm	2mm	3mm
d_{p2}/d_{p1}	1	3.3	6.7	10
Period (s)	0.20	0.22	0.20	0.19

する気泡の平均面積について調べた。結果を Fig. 6 に示す。いずれの場合も、平均気泡面積はほぼ同じになっていることが分る。気泡面積の分布も、モデル粒子を用いた場合は若干大きくなっているが、ほぼ近い値となっている。

次に、実粒子、1mm, 2mm, 3mm 粒子を用いた場合に、流動層底部から 80mm の位置を通過する気泡の周期を算出したものを Table 6 に示す。気泡の発生周期に関しても、これらのモデルはほぼ一致していることが分る。

以上から、壁面の影響の小さな体系に対しては、3mm の粒子を用いても実粒子の場合の現象を模擬することができた。しかし、4mm の粒子では流動様式に違いが生じた。これは、流体計算セルに対して粒径が大きすぎるために起こったものと考えられる。一般に、DEM を用いた流動層のシミュレーションでは、用いられる流体計算セルの中には十分な数の粒子が含まれていなければならない。本研究では現象に対する空間分解能を維持するために、実粒子の場合とモデル粒子の場合で同じ大きさの流体計算セルを使用している。したがって、粒径が大きくなるとセル内に含まれる粒子数が減少する。4mm 粒子を用いた場合はセル内に含まれる粒子が不十分となり、流動様式が変化したものと考えられる。

5. 計算時間

1 秒間の噴流層のシミュレーションを行うのに必要

Fig. 7 Calculation time

な時間を Fig. 7 に示す。なお、Fig. 7 ではそれぞれの計算時間は実粒子の場合の計算時間を用いて無次元化されている。本研究における実粒子のシミュレーションでは、粒径に比べて比較的大きな流体セルを使用している。そのため、粒子計算にかかる時間は流体計算にかかる時間に比べてはるかに大きく、全体の約 98 % が粒子計算である。このことから、相似則モデルにより粒子数を減らすことが計算コストの削減に効果的であることが分る。噴流層のシミュレーションで実粒子の挙動を比較的模擬できていたと考えられる

3mm モデルを用いた場合は、計算時間は実粒子の場合の約 1/367 と大幅に短縮できている。

6. 結 言

気泡流動層の DEM シミュレーションにおける大規模計算のために、無次元方程式より導かれた相似則モデルを提案した。2次元の気泡流動層、および噴流層の数値シミュレーションを行い、気泡の挙動について実粒子を用いた場合とモデル粒子を用いた場合の結果を比較してモデルの妥当性を検証した。その結果以下の知見が得られた。

- 1) 提案した相似則モデルを適用することで、少数の大粒子からなる流動層および噴流層内で実際の気泡挙動を十分に模擬できることを確認した。
- 2) 本相似則モデルを用いても、モデル粒子径がある程度大きくなると、実現象をうまく表現できないことが分った。その原因としては、(1) 容器壁面の影響と、(2) 流体計算格子と粒子径の大きさの割合が考えられる。しかし、これらは本相似則モデルの本質的な限界ではなく、計算上の工夫で改善できるものと考えられる。
- 3) 本相似則モデルを適用することで、計算時間を大幅に短縮できることを確認した。

Nomenclature

d_p : particle diameter	(m)	V_i : particle velocity	(m/s)
g_i : acceleration of gravity	(m/s ²)	$\bar{V}_i$: averaged particle velocity in cell	(m/s)
P : pressure	(N/m ²)	ε : void fraction	(-)
Re : Reynolds number	(-)	μ : coefficient of friction	(-)
Re_p : particle Reynolds number	(-)	ρ_g : gas density	(kg/m ³)
U_i : gas velocity	(m/s)	ρ_p : particle density	(kg/m ³)
U_0 : superficial velocity	(m/s)		

References

- 1) Gidaspow, D.: "Multiphase Flow and Fluidization", Continuum and Kinetic Theory Description, Academic Press (1994)
- 2) Jenkins, J. T. and S. B. Savage: "A Theory for the Rapid Flow of Identical, Smooth, Nearly Elastic Spherical Particles", *J. Fluid Mech.*, **130**, 187-202 (1983)
- 3) Ding, J. and D. Gidaspow: "A Bubbling Fluidization Model Using Kinetic Theory of Granular Flow", *AIChE J.*, **36**, 523-538 (1990)
- 4) Hong, R. Y., Q. J. Guo, G. H. Luo, J. -Y. Zhang and J. Ding: "On the Jet Penetration Height in Fluidized Beds with Two Vertical Jets", *Powder Technol.*, **133**, 216-227 (2003)
- 5) van der Hoef, M. A., M. van Sint Annaland and J. A. M. Kuipers: "Computational Fluid Dynamics for Dense Gas-Solid Fluidized Beds": A Multi-Scale Modeling Strategy, *Chem. Eng. Sci.*, **59**, 5157-5165 (2004)
- 6) Tsuji, Y., T. Kawaguchi and T. Tanaka: "Discrete particle simulation of two-dimensional fluidized bed", *Powder Technol.*, **77**, 79-87 (1993)
- 7) 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**, 2785-2809 (1997)
- 8) Mikami, T., H. Kamiya and M. Horio: "Numerical Simulation of Cohesive Powder Behavior in a Fluidized Bed", *Chem. Eng. Sci.*, **53**, 1927-1940 (1998)
- 9) 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)
- 10) Sugino, T. and S. Yuu : "Numerical Analysis of Fine Powder Flow Using Smoothed Particle Method and Experimental Verification", *Chem. Eng. Sci.*, **57**, 227-237 (2002)
 - 11) Kawaguchi, T., S. Kajiyama, T. Tanaka and Y. Tsuji : "DEM Simulation of 2-D Fluidized Bed Using Similarity Model", Proceedings of the 3rd International Conference, Discrete Element Methods, pp. 167-171 (2002)
 - 12) Kazari, M., K. Roko, T. Kawaguchi, T. Tanaka and Y. Tsuji : "A Study on Conditions for Similarity of Particle Motion in Numerical Simulation of Dense Gas-Solid Two Phase Flow", Proceedings of the 2nd International Conference on Multiphase Flow '95, pp. FB2-9-FB2-15, Kyoto (1995)
 - 13) Sakai, M., S. Koshizuka and H. Takeda : "Development of Advanced Representative Particle Model-Application of DEM Simulation to Large-scale Powder Systems-", *J. Soc. Powder Technol., Japan*, **43**, 4-12 (2006)
 - 14) Ergun, S. : "Fluid flow through packed columns", *Chem. Eng. Progress*, **48**, 89-94 (1952)
 - 15) Wen, C. Y. and Y. H. Yu : "Mechanics of fluidization", *Chem. Eng. Progress Symposium Series*, **62**, 100-111 (1966)