

不均一粒子流の混合・分級現象に関する 3次元並列数値解析法の提案

THREE-DIMENSIONAL PARALLEL COMPUTATION METHOD FOR NON-UNIFORM PARTICULATE FLOWS

牛島 省¹・瀬津 家久²

Satoru USHIJIMA and Iehisa NEZU

¹ 正会員 工博 京都大学大学院助教授 環境地球工学専攻 (〒 606-8501 京都市左京区吉田本町)

² フェロー 工博 京都大学大学院教授 環境地球工学専攻

A parallel computation technique has been proposed for mixing and segregation of granular mixture with a multi-block grid system. The particle motions in multiple sub-blocks are calculated simultaneously on the basis of the distinct element method (DEM). The possible particle contacts through the common boundary shared by two sub-blocks are detected by exchanging the particle information included in the near-boundary volumes. The developed computational method was applied to the particulate flows in a cylinder rotating around its horizontal axis. From the comparison of the necessary CPU time, the computational efficiency in the parallel method has been confirmed. In addition, it was shown that the predicted distributions of the granular binary mixture are in good agreement with the experimental results.

KeyWords : parallel computation, multiblock grid, DEM, granular mixture, segregation

1 緒言

粒径や比重などの物性値が均一でない粒子混合物の一樣分散あるいは分級・偏析現象は、多くの研究分野で興味を持たれてきた課題である。近年、個別要素法 (DEM)¹⁾ に基づく粒子群の数値解析法が提案され、実験では計測が困難であった粒子流の挙動の把握や現象予測が行われるようになった。特に、水工学においては、河川や海岸における混合粒径の土砂粒子の分級現象が一つの重要な研究対象であり、最近では DEM を用いて流動場の底部に堆積した粒子混合物の輸送量の評価が検討された例²⁾ も見られる。

DEM による数値解析は、このように流体中の多成分粒子混合物の挙動を把握するために有効であるが、現状では 2 次元計算手法が適用されることが多く、また粒子数を十分大きく確保することが困難であるなど、改良が望まれる点も少なくない。DEM を用いた均一粒子の計算において、2 次元および 3 次元の結果が異なるという報告があり³⁾、多成分粒子混合物の場合も十分な数の粒子を用いた 3 次元計算が必要である。さらに、実用的な観点からは、土砂バイパスや分岐・合流管などのように、境界形状が複雑な場における粒子輸送に対しても適用可能な計算手法の開発が望まれる。

数値解析手法をこのように発展させるためには、著

者らは領域分割・並列計算手法を DEM の計算に利用することが有効であると考えた。過去に領域分割法を利用した例としては、拡張個別要素法 (EDEM) を並列的に計算する研究⁴⁾ があり、同手法は構造解析に適用されている。本研究では、せん断流等を含めた広範な流体中に含まれる数密度の高い粒子群を対象とするため、領域分割により得られる各ブロックの形状を流体解析で用いる境界適合座標系 (BFC) で表現することとした。BFC を利用することにより、流体計算と粒子運動の計算の整合性が向上すると期待される。また、分割された領域内に含まれる粒子の計算を並列的に行うことで、計算速度の向上あるいは扱う粒子数を増加させることができる。さらに、前報⁵⁾ で示されたように、複雑な境界形状に対する適用性も向上する。

上記のような背景のもとで、本研究では流動場に対する粒子の影響が無視し得る場合の多成分粒子混合物に対する領域分割・並列計算手法の開発に重点を置き、写像空間中での流体力の扱いやサブブロック境界面近傍における粒子間接触力の評価方法などについて検討を加えた。解析手法の適用性を確認するため、両端が閉じた回転円筒容器内の粒子流の挙動を解析し、並列計算により計算効率が向上すること、また二成分粒子混合物の一樣分散および分級現象がほぼ適切に解析できることを示す。

2 領域分割・並列計算手法の概要

(1) 領域分割と並列計算のプロセス構成

粒子を含んだ3次元の計算対象領域は、任意に設定された断面により複数のサブブロックに分割される。このため、計算領域全体が複雑な形状を有していても、これを比較的単純な形状のサブブロックの集合体として表現することができる。この各サブブロックの形状は、前報⁵⁾と同様に、3次スプライン関数を利用して生成された3次元境界適合座標系により表現される。

各サブブロック内の粒子運動の数値解析は並列的に進められる。図1に、この並列計算の主な手順を示す。並列計算においては、マスタープロセス、スレーブ

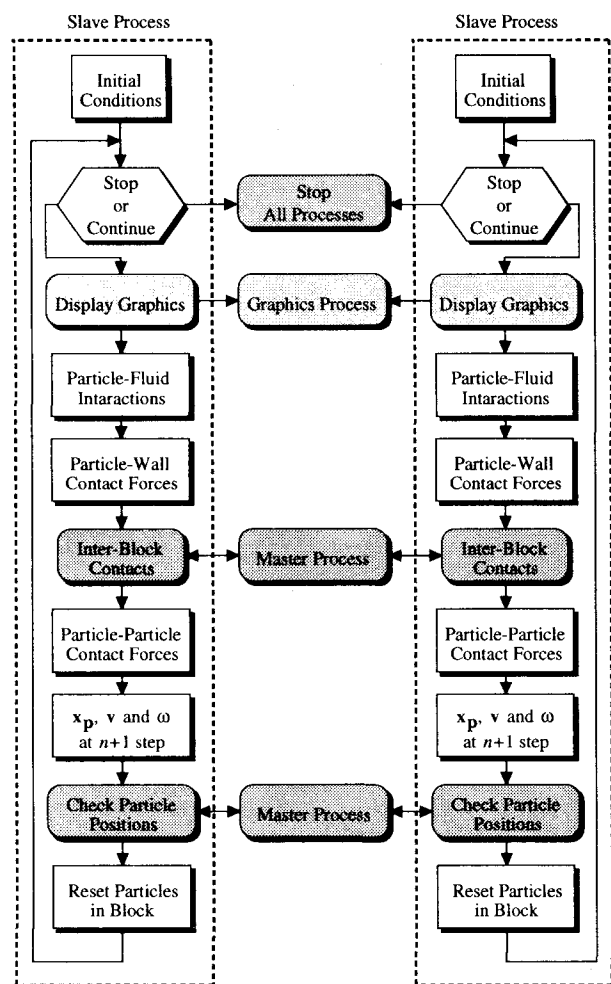


図-1 並列計算手法のフローチャート

プロセス、可視化プロセスの3種類のプロセスが生成される。このうち、スレーブプロセスはサブブロック数と同数起動され、サブブロック内に含まれる粒子運動の計算を行う。一方、マスタープロセスは単一のプロセスであり、スレーブプロセス間のデータ通信を管理する。また、可視化プロセスは、非定常計算の過程を

可視化するもので、全スレーブプロセスから粒子の情報を受信した後、粒子計算と並列的に描画処理を進め、その結果をディスプレイ上に表示する。これらの並列計算は一般的なPCがネットワーク接続された、いわゆるPCクラスタ上で実行されるものとした。

(2) 基底変換を利用した流体力の評価

粒子運動の支配方程式は、3次元場の並進運動と回転運動に関する方程式であり、それぞれ次式で与えられる。

$$m \frac{d^2 \mathbf{x}_p}{dt^2} = \mathbf{F}_L + \mathbf{F}_B + \mathbf{F}_C \quad (1)$$

$$I \frac{d\boldsymbol{\omega}_p}{dt} = \mathbf{T}_L + \mathbf{T}_C \quad (2)$$

ここで、 $\mathbf{x}_p$ は粒子の位置ベクトル、 $\mathbf{F}_L$ 、 $\mathbf{F}_B$ 、 $\mathbf{F}_C$ は、それぞれ粒子に作用する流体力、浮力、接触力である。ここで、 $\mathbf{F}_L$ としては、粒子と流体の相対速度に起因する抗力 f_D と揚力(マグナス力) f_{LR} を考慮する。また、 $\boldsymbol{\omega}_p$ は粒子の角速度ベクトル、 $\mathbf{T}_L$ と $\mathbf{T}_C$ は、それぞれ流体の粘性に起因する減衰モーメントと接触力により発生するモーメントである。 f_D 、 f_{LR} および $\mathbf{T}_L$ を算出するための関係式は前報⁶⁾と同様である。

粒子に作用する流体力などを精度良く算出するために、写像空間中における粒子位置を求め、流体流速の反変成分を空間内挿する方法をとる。このため、物理空間中の粒子位置 $\mathbf{x}_p$ と粒子に最も近接する格子点位置、すなわち境界適合座標系により定められた計算格子点の位置 $\mathbf{x}_g$ を求め、それらの差 $\mathbf{x}_p - \mathbf{x}_g$ として定義されるベクトルに基底変換行列 C を作用させることで、写像空間中の粒子位置 $\mathbf{X}_p$ を定める。

$$\mathbf{X}_p = C (\mathbf{x}_p - \mathbf{x}_g) + \mathbf{X}_g \quad (3)$$

ここに、基底変換行列の成分 C_{ij} は

$$C_{ij} = \frac{\partial \xi_i}{\partial x_j} \quad (4)$$

で与えられ、 $\mathbf{X}_g$ は格子点 $\mathbf{x}_g$ の写像空間中の位置ベクトルである。ここで、 x_j および ξ_i ($i, j = 1, 2, 3$) は、それぞれ物理空間および写像空間中の座標成分である。

次に、格子点上で求められている周囲流体の流速の反変ベクトル $\mathbf{U} (= C \mathbf{u}_f$; ここに $\mathbf{u}_f$ は物理空間中の流体の流速ベクトル) を写像空間中の粒子位置 $\mathbf{X}_p$ において空間内挿し、その値を物理空間中に再度変換する。この変換を行うために、粒子が存在する位置における基底変換行列の逆行列 C_p^{-1} が必要となるが、 C_p も格子点上で得られている基底変換行列 C を空間内挿することで求めている。

また、 $\mathbf{X}_p$ における流体の渦度ベクトル $\boldsymbol{\Gamma}_p$ も、格子点位置で定められた写像空間中の渦度ベクトル $\boldsymbol{\Gamma}$ を

空間内挿することにより計算される。なお、物理空間中の粒子と流体の相対角速度ベクトルは、 Γ_p に C_p^{-1} を作用させて物理空間中の x_p における渦度ベクトルを求め、これと粒子自身の角速度 ω_p の差をとることで求める。この相対角速度ベクトルは揚力 f_{LR} と粒子の回転運動に対する減衰モーメント T_L の計算に用いられる。

(2) サブブロック間の粒子接触力の評価

粒子が他の粒子や境界面に接触する場合に生ずる接触力のモデルとしては、Cundall¹⁾ が提案したバネ・ダッシュポットモデルを利用する。このモデルは、法線方向および接線方向接触力としてバネとダッシュポット、また接線方向に摩擦スライダを追加した力学モデルである。これらの接触力の求め方は、前報⁶⁾と同様である。

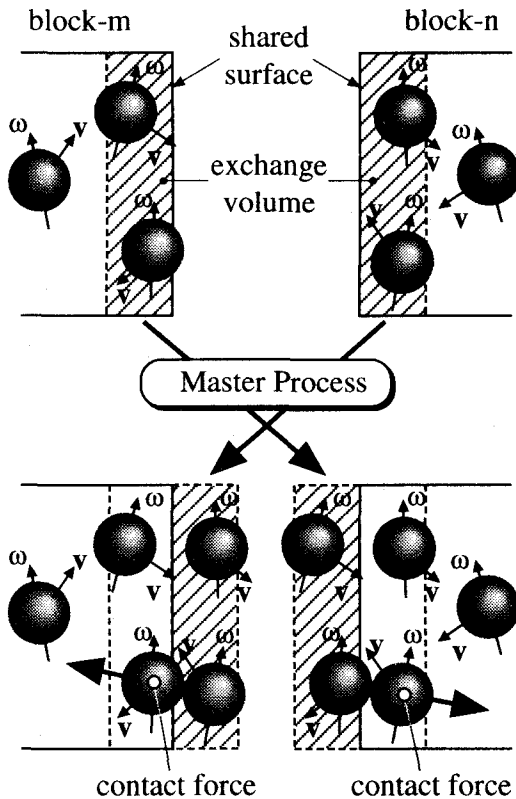


図-2 サブブロック間の粒子の接触

本研究では領域分割法を利用しているので、2つのサブブロックの境界面である、共有境界面付近において、異なるサブブロックに含まれる粒子どうしが接触する可能性がある。これを正しく検出しないと、異常反発などの原因となり、計算領域全体として連続的な接触力の評価ができない。このため、図2に示すように、共有境界面の内側に交換領域を設定し、この中に含まれる粒子位置や粒径などの情報を2つのサブブロッ

ク間で交換する。そして、各サブブロックでは、図2に示すように、この交換領域を共有境界面の外側に接続した状態で接触力を求めることとした。

以上のようにして、サブブロック内部およびサブブロック間で発生する接触力が求められ、それらは同方向に作用する流体力と加算されて(1)式および(2)式中の外力およびモーメントとして粒子解析に用いられる。陽的に離散化された両式を解析することにより、 $n+1$ ステップにおける粒子の速度ベクトルと粒子位置、粒子の角速度ベクトルが求められる。新たに求められた粒子位置が、これまで属していたサブブロックの外部に移動するときは、関連するサブブロック間で粒子の追加と削除が行われる。

3 解析手法の有効性

(1) 並列処理による計算効率

本研究の並列計算法の計算効率を評価するため、水平な回転円筒容器内において、静止状態にある粒子群に回転運動を加えた場合の数値計算を行った。図3に円筒容器と座標系を示す。円筒容器は直径 D が 50mm、

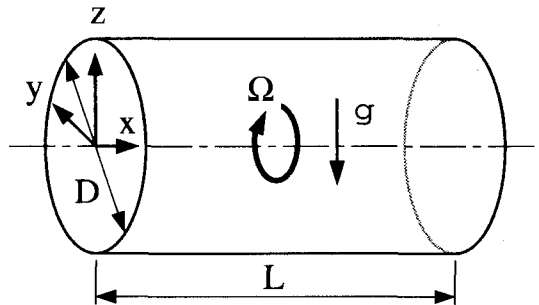


図-3 円筒容器と座標系

軸方向長さ L が 90mm で、毎秒 0.93 回転の速度で水平な円筒軸を中心に回転する。座標系は、軸方向に x 軸、鉛直上方に z 軸をとる。

並列化による計算効率の変化を把握するため、均一粒径 ($d = 1mm$) の粒子を利用して、円筒容器全体を単一のブロックとした場合（シングルブロック計算）、また2個および4個のサブブロックに分割した場合（マルチブロック計算）のそれぞれの条件における計算時間を比較した。計算では、粒子数 N を 500 から 100,000 まで変化させ、1,000 ステップの計算に要する計算時間を計測した。

粒子の接触判定を効率良く行うために、田中ら⁷⁾と同様に、粒径と同じ大きさを持つ3次元の立方体セルを設定し、全ての粒子がどのセルに属するかをあらかじめ算出し、粒子の接触判定は隣接するセル間でのみ

行うという方法を利用した。このセル分割を利用した結果、図4に示すように、いずれの計算においても粒子数と計算時間は線形に近い関係があることを確認した。これは従来より確認されている傾向と一致するものである。

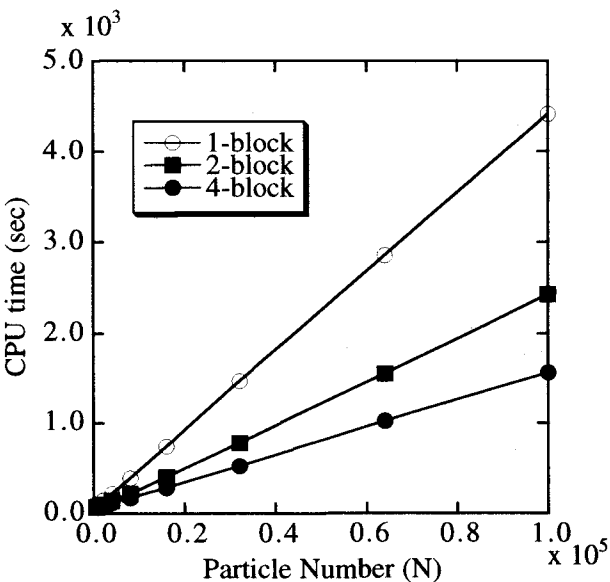


図-4 粒子数と計算時間の関係

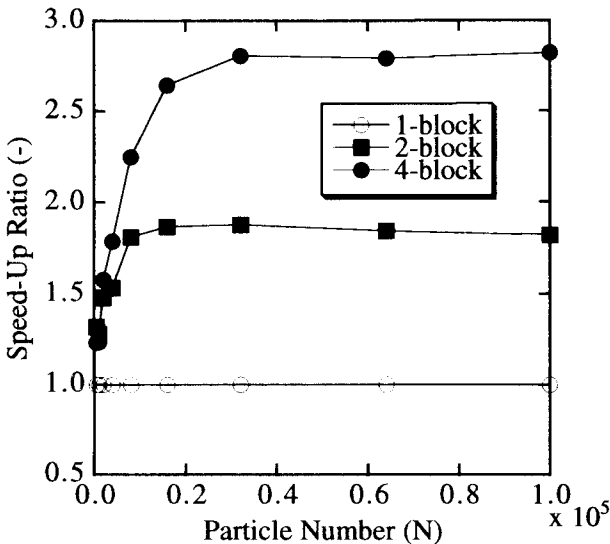


図-5 粒子数と速度向上比の関係

次に、マルチブロック計算における計算速度向上比を求めた。この速度向上比は、同一粒子数のシングルブロック計算で必要となる計算時間をマルチブロック計算の計算時間で除した値として定義される。図5に示すように、粒子数が約30,000以上になると速度向上比はほぼ一定となり、その値は2ブロック計算で約1.8、4ブロック計算で約2.8となる。この結果から、並列化により計算効率が向上することが確認された。

なお、計算対象となる粒子群が、粒径が均一でない混合物である場合には、接触判定のための立方体セルの大きさを最大粒径に合わせ、さらにセル内部の小粒径粒子の接触判定などを行うなどの処理が必要となる。この場合には、粒子数が増えることによる計算時間の増加は、図4で示される線形関係よりさらに大きくなるため、並列計算による速度向上比はさらに増加すると考えられる。

(2) 回転円筒容器内の不均一粒子流への適用

上記と同様の回転円筒において、表1に示すように、ナイロンを材質とするN3およびN6粒子と、アルミナ材のA3粒子の合計3種類の粒子を用いた粒子混合実験を行った。表1に記述された反発係数は、円筒容器と同じ材質であるアクリル平面上に粒子を自由落下させた状態をビデオで撮影し、画像から反発高さを算出することにより求めている。

表1 実験で利用した粒子

粒子名	材質	粒径 (mm)	比重	反発係数
N3 粒子	ナイロン	3.3	1.14	0.77
N6 粒子	ナイロン	6.4	1.14	0.78
A3 粒子	アルミナ	3.3	3.60	0.82

これらの3種類の粒子のうち、2種類の粒子を組み合わせて表2に示す2ケースの実験を行った。

表2 実験条件 (使用した粒子と個数)

計算ケース	N3 粒子	N6 粒子	A3 粒子
case-1	150	0	150
case-2	0	50	250

実験では、所定の粒子を容器に投入した後、二成分の粒子群がほぼ均等に混ざりあった状態とし、回転ミル上に円筒容器を静かに設置した。この状態を初期条件として、回転ミルを始動させ、粒子群を回転混合させた。実験中は、円筒容器の直上に設置したビデオカメラから粒子の混合・分離過程を撮影し、粒子の分布を取得した画像から把握した。

実験の結果、粒子混合物の粒径が同一で比重のみが異なるcase-1では、図6に示すように、ビデオ画像で観察される範囲では、2種類の粒子群はほぼ良好に混合し、空間的に両者が分離する状況は観察されなかった。case-1では、粒子群の流動は、円筒容器側面に沿って上昇し、最上部付近から動的安息角を持って落下する2次元的な循環運動となった。

一方、粒径と比重が異なる二成分粒子混合物を用いたcase-2では、分級が明瞭に発生した。円筒容器の回転直後から粒子はほぼ完全に分離し、その状態が継続するものとなった。図7は、case-2における典型的な粒子分布を示す実験結果である。図7に示されるように、容器中心部付近では、A3粒子は円筒側面に沿って

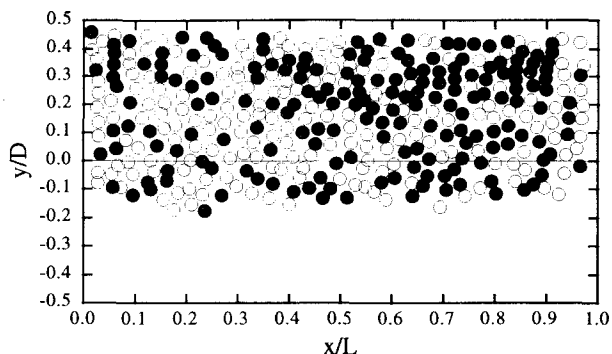


図-6 実験により得られた粒子群の分布 (case-1, ● = A3 粒子; ○ = N3 粒子)

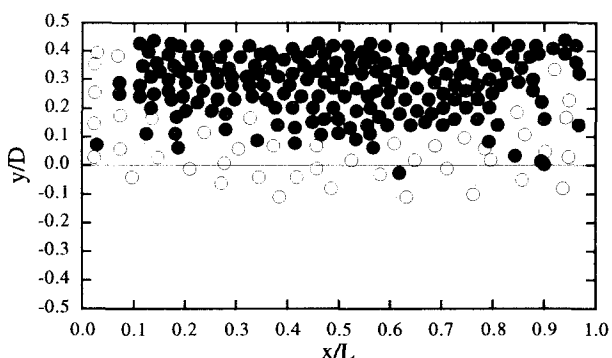


図-7 実験により得られた粒子群の分布 (case-2, ● = A3 粒子; ○ = N6 粒子)

上昇するかたちではほぼ1層に集合し、N6粒子はその背後と円筒容器両端付近に集積する状態で分離した。

上記の実験を対象にした数値計算を行った。円筒容器を軸方向に同じ長さを持つ4つのブロックに分割し、5台のPCに1つのマスタープロセスと4つのスレーブプロセス、他の1台のPCに可視化プロセスをそれぞれ割り当てて計算を行った。計算時間を短縮化するため、バネ定数は $5.0 \times 10^4 N/m$ とした。これは、ナイロンおよびアルミナよりも低いヤング率を有する、弾性ゴムが有する物性値 (ヤング率 $1.5 \times 10^6 [Pa]$, ポアソン比 0.46) に相当する。また、粒子間および粒子-壁面間における摩擦係数は 0.4 とし、粘性減衰係数は佐伯ら⁸⁾ の関係式で定められるものとした。

1 ステップの非定常計算の時間間隔 Δt は、 $1.0 \times 10^{-5} sec$ であり、可視化プロセスとの通信、すなわち数値可視化処理は粒子計算 100 ステップに対し 1 回実行するものとした。この描画頻度により、連続的な粒子分布の遷移を把握できるが、計算負荷を調べた結果、1 回の描画処理は次の通信開始までに十分な余裕を持って終了しているため、粒子計算に負荷を与えていないことが確認された。

case-1 を対象とした数値計算では、実験で観察された混合状態、すなわち N3 粒子と A3 粒子がほぼ均一

に混合する過程が再現されるかどうかを確認するため、円筒容器中に静止した粒子を人為的に明確に二成分に分離した。この状態を初期条件として、円筒容器の回転運動を開始し、粒子群の非定常運動を数値解析した。計算開始後、二成分の粒子は徐々に混合し、20 秒程度経過すると両者はほぼ均一に混合する状態となった。粒子の分布が安定した後、約 20 秒間にわたる粒子位置を 1,000 ステップごとに $x-y$ 平面上に投影し、 $2.5mm \times 2.5mm$ の大きさのセル分割を行って、セル内に含まれる粒子数を N3 および A3 粒子ごとに正規化した結果を示すのが図 8 と図 9 である。両図に示

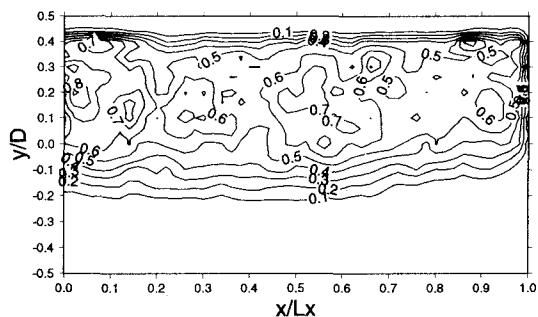


図-8 N3 粒子の平均的な分布 (case-1, 数値解析結果)

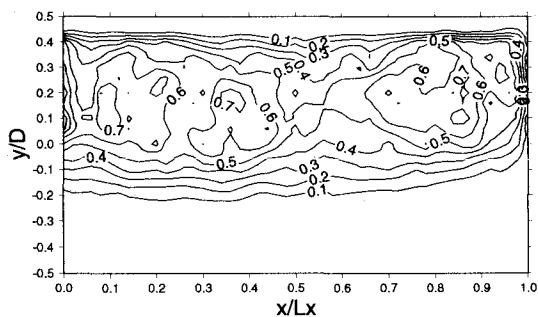


図-9 A3 粒子の平均的な分布 (case-1, 数値解析結果)

されるように、時間平均的な粒子の分布は N3 および A6 粒子に顕著な相違は見られず、円筒軸方向にほぼ一様に分散したものとなっている。

一方、case-2 を対象とした数値計算では、実験で観察された分級現象の再現性を確認するため、ランダムに配置された粒子群が静止した状態を初期条件とした。この初期状態から円筒容器の回転を開始した結果、実験とほぼ同様に、円筒容器の回転開始直後から粒子の分離が始まった。そして十分な時間が経過すると図 10 に示すように、A3 粒子は円筒側面に沿って上昇するかたちで集合し、その背後と両端部に N6 粒子が偏析した。

case-1 と同様にして求められた粒子の平均的な分布を図 11 と図 12 に示す。図 11 に示された結果から、粒径が比較的大きい N6 粒子は主として円筒容器両端部

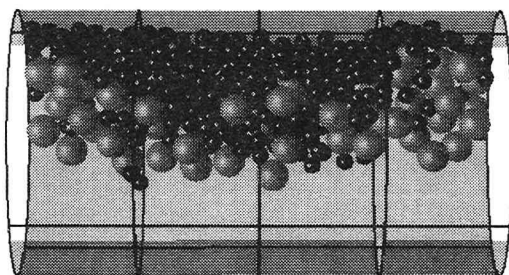


図-10 粒子群が混合した状態の計算結果 (case-2, 大粒子=N6 粒子; 小粒子=A3 粒子)

付近に集中しており, 軸方向中心付近 ($x/L = 0.5$) に向かうにつれ, 分布位置が $-y$ 方向に向かう傾向を示している. 上記の結果は, 図7に示される粒子実験

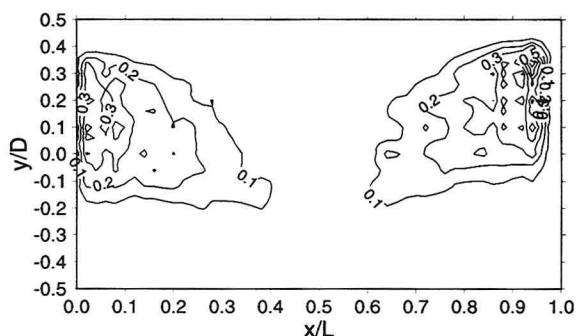


図-11 N6 粒子の平均的な分布 (case-2, 数値解析結果)

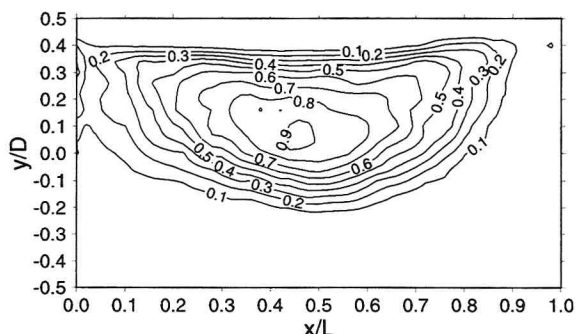


図-12 A3 粒子の平均的な分布 (case-2, 数値解析結果)

の結果を良好に再現するものとなっている. なお, 上記のように大粒径の粒子が円筒容器の両端付近に集中する特性は, Wightman ら⁹⁾の実験でも認められており, 本報の計算でもこのような一般的な二成分粒子混合物の偏析現象を再現し得ることが示されたと考えられる.

4 結言

本報では, DEM に基づく粒子計算法に対して領域分割・並列計算法を適用することにより, 複雑な境界形状への適用性を確保するとともに, ブロック内の粒子計算を並列的に実行して計算効率の向上を図る手法を提案した.

均一粒子を対象にして計算効率を比較した結果, 粒子数が約 30,000 以上になると速度向上比はほぼ一定となり, その値は2ブロック計算で約 1.8, 4ブロック計算で約 2.8 となった. この計算効率は計算条件により変化し得るが, 一般に不均一粒子混合物の場合には効率はさらに向上すると考えられる.

さらに, 水平回転円筒容器内において二成分粒子混合物の挙動を解析した. その結果, 比重が異なる同粒径の粒子混合物の均一分散および粒径と比重が異なる混合物の分級現象が, いずれも実験結果とほぼ同様に再現され得ることが確認された.

参考文献

- 1) P. A. Cundall and O. D. L. Strack. A discrete numerical model for granular assemblies. *Geotechnique*, Vol. 29, No. 1, pp. 47-65, 1979.
- 2) 後藤 仁志・原田 英治・酒井哲郎. 数値移動床による混合粒径流砂の流送過程のシミュレーション. 水工学論文集, 第 44 巻, pp. 665-670, 2000 年.
- 3) 井上義之, 横山豊和, 山根賢治, 田中敏嗣, 辻裕. 離散要素法による転動ボールミル内の媒体運動の解析. 日本機械学会論文集 (B 編), Vol. 63, No. 606, pp. 356-363, 1997.
- 4) 恒川裕史. ワークステーションクラスタによる EDEM の並列化. 竹中技術研究所報告, No. 52, pp. 9-15, 1996.
- 5) 牛島 省・田中 伸和・米山望. 一般座標系を用いた領域分割流体解析手法の提案とその基本特性に関する考察. 水工学論文集, 第 44 巻, pp. 563-568, 2000 年.
- 6) 牛島 省・田中 伸和・米山望. 3 次元複雑形状領域内における固気混相流中の固体粒子のラグランジュ的解析法. 水工学論文集, 第 43 巻, pp. 515-520, 1999 年.
- 7) 田中敏嗣・門野啓一郎・辻裕. 鉛直管内固気二相流の数値シミュレーション (粒子間衝突の影響について). 日本機械学会論文集 (B 編), Vol. 56, No. 531, pp. 3210-3216, 1990.
- 8) 佐伯暢人, 皆川利宣, 高野英資. 粒状体の振動輸送に関する研究. 日本機械学会論文集 (C 編), Vol. 63, No. 615, pp. 3817-3823, 1997.
- 9) C. Wightman and F. J. Muzzio. Mixing of granular material in a drum mixer undergoing rotational and rocking motions. ii. segregating particles. *Powder Technology*, Vol. 98, pp. 125-134, 1998.

(2000. 10. 2 受付)