計算工学講演会論文集 Vol.29 (2024年6月) 日本計算工学会

粉体プロセスの粒子スケールシミュレーションのための流体・粒子連成離散有限要素法

Fluid-Particle-Coupled Discrete Finite Element Method for Process Simulation of Particles and Powders

澤田 有弘[1)]，松本 純一[2)]
Tomohiro Sawada and Junichi Matsumoto

1) 博(科) 産業技術総合研究所 研究チーム長（〒305-8568 つくば市梅園1-1-1, E-mail: tomohiro-sawada@aist.go.jp）
2) 博(工) 産業技術総合研究所 研究チーム長（〒305-8568 つくば市梅園1-1-1, E-mail: matsumoto-junichi@aist.go.jp）

This paper introduces our approach to particle-scale simulation of slurry composed of ceramic powder, solvents, additives, etc. As the power process simulation method, we propose a fluid-particle coupled discrete finite element method (FSI-DFEM) incorporating a phase-field method. We introduce some two-dimensional simulation examples for demonstrating the FSI-DFEM.

Key Words : *Powder process, Fluid-structure interaction, Fluid-particle interaction, Discrete finite element method, Phase-field method, Process simulation*

1. 緒 言

流体・構造連成（FSI, Fluid-Structure Interaction）を考慮することが必要とされる粉体プロセスのシミュレーションにおいては，粉体を構成する粒子一つ一つを主には剛体球として取り扱う離散要素法（DEM, Discrete Element Method）に何らかの数値流体力学手法（CFD, Computational Fluid Dynamics）を組み合わせて動的挙動の数値シミュレーションを行うことが多い.

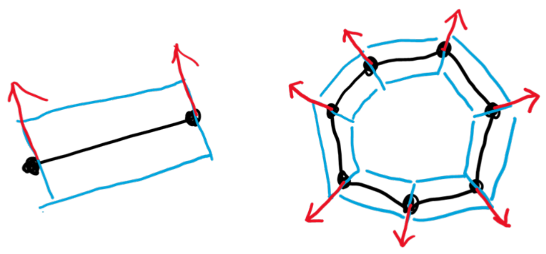
本稿では，筆者らが開発を進めている離散要素法の「要素」を有限要素法の「有限要素」更には「有限要素メッシュ」とした離散有限要素法（DFEM, Discrete Finite Element Method）と，これを流体との連成計算にも対応させた流体・粒子連成型の離散有限要素法（FSI-DFEM）[1-5]，及び当該手法による幾つかの二次元計算例を示す.

2. 流体・粒子連成型の離散有限要素法

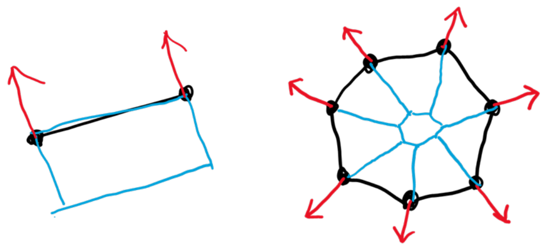
(1) 本離散有限要素法による粒子の取り扱い

粒子一つ一つを有限要素法で取り扱う場合，粒子一つ一つもメッシュ分割する必要が生じる．これをソリッド要素で行うと場合により手間となるため，本手法[1-7]ではシェル要素などの厚みを有する構造要素で粒子の表面のみをメッシュ分割する.

カプセル型の中空粒子の場合には，**図1 (a)** のように，粒子表面をメッシュ分割する．**図1 (a)** の黒線は粒子表面，黒丸は粒子表面上に置いた有限要素の節点，水色の線はメッシュ分割に用いた構造要素の厚み部分，赤の矢印は構造要素の種類にも依るが表面上に立てたディレクターベクトルや法線ベクトルなどを示す．一方で中身が詰まっている中実な粒子に対しては，当然のことソリッド要素分割を適用しても良いが，前述の理由により中空粒子と同様に表面のみの構造要素メッシュ分割を適用する．その際，構造要素の中立面は定式化上，厚み方向にスライドさせることが可能であるため，**図1 (b)** の左図に示されるように構造要素の中立面を粒子の表面にスライドした定式化を施すことで粒子の中身を構造要素の厚み領域とする．すると，**図1 (b)** の右図のように粒子の中心部に若干の



(a) カプセル型の任意形状中空粒子の場合



(b) 近似としての任意形状中実粒子の場合

図-1 表面のみの構造要素分割による任意形状中空粒子と中実粒子それぞれの有限要素モデル化

ボイド領域を残すが多くの部分を構造要素の厚み領域でカバーすることができる．本手法ではその上で，粒子の質量が一致するように構造要素の質量密度を修正する．本処理により，有限要素法を適用しつつもメッシュ生成が容易となる手法としている．

また，粒子一つ一つは有限要素法で標準的な第1Piola-Kirchhoff応用で記述されるtotal Lagrange型のCauchyの運動法則でその運動や変形を記述する．粒子が剛体か柔軟体かは，粒子一つ一つに与えるヤング率などで記述する．すなわち，小さなヤング率を与えれば，本手法では自動的に変形が計算される[1-4]．一方で，ほぼ剛体と見なせる粒子の場合には計算上十分に大きなヤング率を与えることで再現する．ほぼ剛体と見なせる多角形粒子群への適用は文献[4,5]に示した．現在のコードや計算例では単なる弾性構成式を適用しているが，弾塑性構成式を適用すれば将来的には粒子の塑性変形や脆性変形も考慮することが可能な枠組みとなる．

(2)　粒子同士の接触や粒子間力の取り扱い

粒子同士の接触の計算には，その他の粒子間力への拡張性の観点からペナルティ法を適用する．このとき線形ペナルティ法の場合には接触反力が不足する場合があるため，接触反力に非線形構成式を導入する非線形ペナルティ法を適用する．力学的な解釈としては，**図2**に示されるように粒子を離散化する有限要素一つ一つに接触に関するバネ（**図2**で赤で示されるものがバネ）やダンパーを導入することと同じである．またこのバネの式が線形であれば線形ペナルティ法となり，例えば粒子距離に反比例して大きくなるような力・関数であれば非線形ペナルティ法となる．定式化は文献[2,3]を参照頂きたい．

本手法ではこのバネの関数を適切に制御することで，コロイドの分野におけるDLVO（Derjaguin-Landau-Verwey-Overbeek）理論と同様に様々な粒子間力状態を組み込む手段として用いる．例えば，湿式プロセスにおける溶媒には粒子の良分散状態を得るための分散剤や，粒子を糊付けしたり泥漿全体としての粘度を調整したりすることを目的としたバインダーなどの各種の添加剤が付与される．これらの寄与に関しては未知の部分が多いが，接触計算手法を応用することで粒子の粘着に関する粒子間相互作用力等を付与することが可能となる．

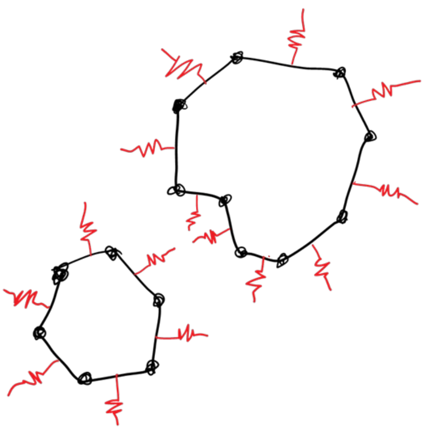


図-2　任意形状粒子の接触に代表される粒子間力の非線形ペナルティ法（非線形バネ）による組み込み

(3)　流体と粒子の連成現象の取り扱い

本手法における流体部すなわち溶媒部の計算は，粒子群のバックグラウンドに空間固定で生成された流体メッシュによって行う．このとき，粒子と溶媒（流体）の境界面に拡張有限要素法を適用することでカットセルと同様の高解像度化手法としてXFEM（eXtended Finite Element Method）を適用するInterface-Reproducing Capturing（IRC）法に基づく流体・構造連成計算手法を適用する[6,7]．

流体部（溶媒部）の支配方程式には非圧縮性Navier-Stokes方程式を適用する．更に，流体部は非ニュートン流体であることが多いため，構成式には主には実験で測定された非ニュートン粘性曲線とフィッティングしやすい指数関数型の非ニュートン構成式を適用する．これら流体の支配方程式の空間離散化には，主にQ1Q1要素を用いた安定化有限要素法を適用する．安定化手法としてはSUPG/PSPG法を主に適用している．

流体と粒子との連成現象は近年開発した安定化Lagrange未定乗数法を適用する．未定乗数法は適切に適用すれば信頼性の高い連成計算が可能な利点を有するが，流体メッシュと粒子を離散化する粒子メッシュとの大小比により，過拘束（ロッキングとも呼ばれる）が生じる場合がある．この過拘束を緩和するための項として残差に基づくラプラシアン項を安定化項として付与した未定乗数法である．定式化の詳細とその有効性確認は文献[8,9]にて行っている．場合により最小二乗，言い換えればAugmented項 に相当するペナルティ項も同時に適用するが，ペナルティ項は過拘束の緩和には有効でないこと明らかとなっている[8,9]．

(4)　流体の界面の取り扱い

計算対象によっては溶媒の界面の移動も計算で追跡する必要が生じる．その場合には，流体計算の観点からは界面補足法の一つであるフェーズフィールド法に基づく混相流計算手法を適用する．フェーズフィールド方程式としては保存型の修正Allen-Cahn方程式もしくはCahn-Hilliard方程式を用いる．原則的には界面計算の安定性，精度，信頼性の全てに優れるCahn-Hilliard方程式を採用する．Cahn-Hilliard方程式の解法としては，一種の混合法と位置付けられる界面維持項を変数分離した上での連立型解法を適用する．

(5)　支配方程式の解法

上記(1)～(4)で空間離散化された流体・粒子連成系の支配方程式は，最終的に非線形・非定常の以下の5つの式

の連立方程式となる．

1)　粒子の移動と変形を記述するCauchyの運動方程式
2)　粒子接触などの粒子間力を記述する非線形ペナルティ式
3)　流体（溶媒）の流動を記述する非圧縮性Navier-Stokes方程式
4)　流体（溶媒）の界面の移動を記述するCahn-Hilliard方程式
5)　粒子と溶媒の連成力を記述する安定化未定乗数式

本稿の手法ではこれらの連立支配方程式を時間・空間分離せず，そのまま一体型の連立方程式として解を求める．強連成解法とも呼ばれる．非線形項にはNewton-Raphson法に基づく反復型解法を適用する．時間積分にはNewmark法に基づく陰解法を適用する．各非線形反復において線形化された連立係数行列の解法には，行列のブロックごとに適宜フィルインレベルを変更するブロックILU分解前処理付きのGMRes法（Generalized Minimal Residual method）をする．特に粒子の行列ブロックのフィルインレベルを流体ブロックのそれより上げるとGMRESの収束性が高まる．

3.　幾つかの計算例（二次元）

本手法によって、長方形の計算領域内に粒子系の異なる多角形の粒子群をランダム生成し、計算領域の上下面にせん断流れを与えた際の粒子群の動的な挙動の計算を行った際の計算結果を**図-3**と**図-4**に示す．詳細な物性や流速条件，境界条件などは謝辞に記載したプロジェクトの取り決め上，記載することは叶わないことを付記する．

図-3と**図-4**の計算例では計算領域の長さと粒子の形状が異なるが（**図-3**は八角形粒子群，**図-4**は六角形粒子群である），最も大きく異なる点は非線形ペナルティ法の応用で導入した粒子間力の異なりである．**図-3**の計算例では粒子間力は小さいため「分散」状態の計算となるが，**図-4**の計算例では大きめの粒子間引力を与えたため「凝集」状態の計算のイメージが強い．結果，粒子群の凝集構造や空隙などが再現されている（実際には溶媒で満たされているため空隙ではない）．粒子もそれぞれ八角形，六角形でモデル化されているため，凝集や凝集に伴う粒子同士のかみ合いやこすれ合いなども粒子の形状を直接反映して計算が行われているが分かる．**図-3**で小さく可視化されている細いベクトルは溶媒や粒子の流速ベクトルを示し，**図-3**と**図-4**で粒子表面上に可視化されている太いベクトルはその時に計算されている粒子間力を示す．また参考として計算条件等は異なるが，本計算手法で得られた粒子群のパッキング配置から，マルチフェーズフィール法に基づく焼結計算までを行った例を文献[5]に示した．

今後，このような粒子スケールの分散や凝集の計算か

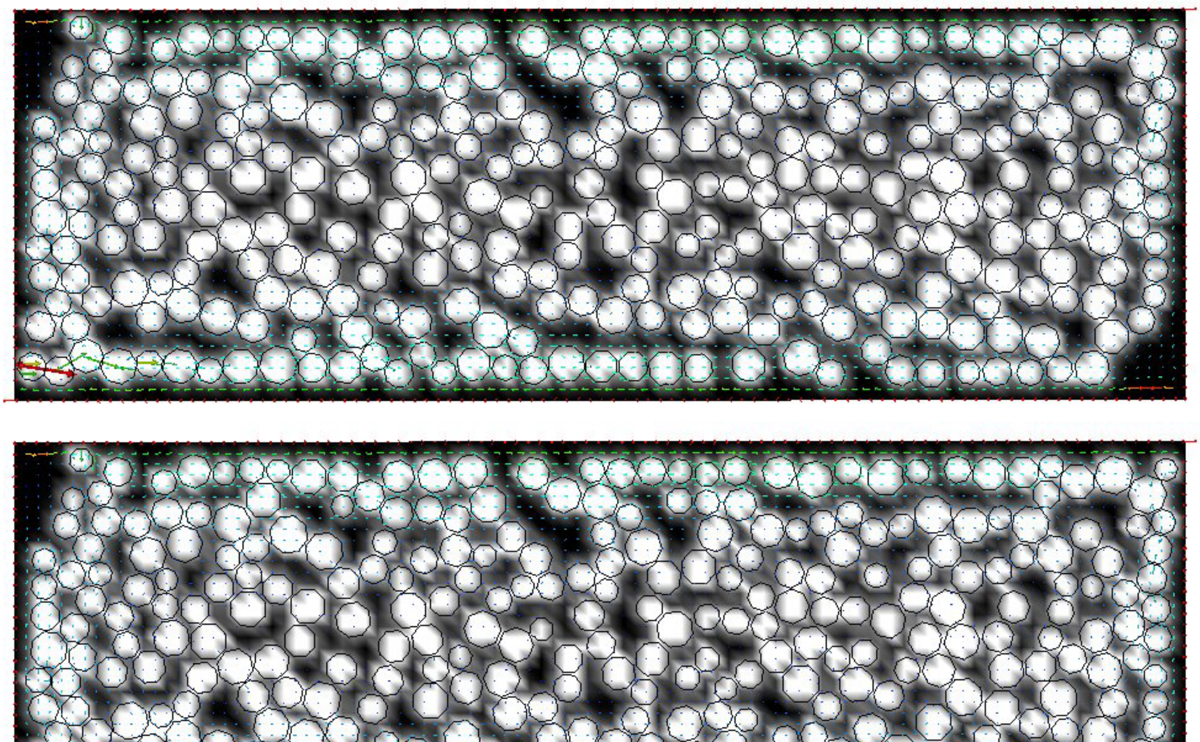


図-3 せん断流れ中における粒子系の異なる八角形粒子群の動的挙動（分散挙動）の二次元計算

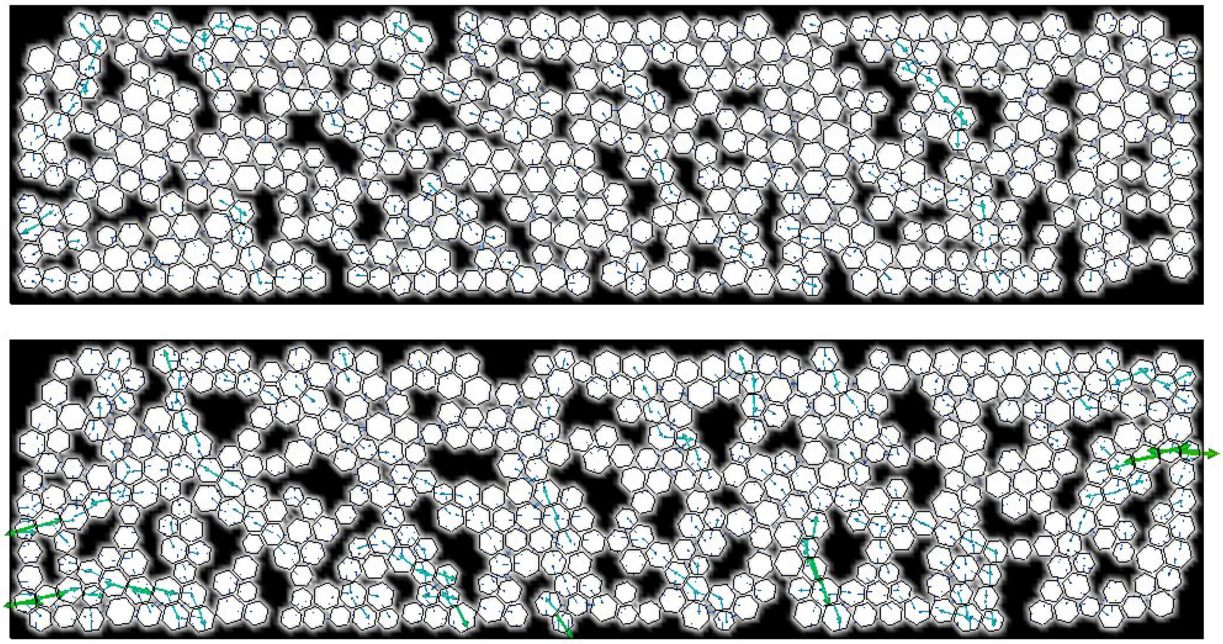


図-4 せん断流れ中における粒子間引力の大きい六角形粒子群の動的挙動（凝集挙動）の二次元計算

ら算定される見かけ粘度などのマクロ的な物性値の評価を行う予定である．更には本手法で球近似粒子群との異なりに関する研究も可能となるものと考えられる．

4. 結　言

本稿では，離散要素法の「要素」を有限要素法の「有限要素」更には「有限要素メッシュ」とした離散有限要素法（DFEM, Discrete Finite Element Method）と，これを流体との連成計算にも対応させた流体・粒子連成型の離散有限要素法（FSI-DFEM）[1-5]を紹介した．また，当該手法によって粒子間力を変えた八角形粒子群と六角形粒子群のせん断流れ中における分散構造の異なりに関する二次元計算例を示した．今後，更に広範な粉体プロセスシミュレーションを可能とする数値計算手法の開発を当該手法を基に進めていく予定である．

謝 辞：この成果の一部は国立研究開発法人新エネルギー・産業技術総合開発機構（NEDO）の委託業務（JPNP22005, 次世代ファインセラミックス製造プロセスの基盤構築・応用開発）の結果得られたものです。

参考文献

[1] 澤田有弘 (2020), 流体・構造連成問題に対する直接数値シミュレーション技術，トライボロジスト，Vol.65 (11), pp.672-677.

[2] 澤田有弘，松本純一 (2021.5), 弾性粒子群の液中挙動に対する流体構造連成・接触計算，日本計算工学会 第26回計算工学講演会論文集, No.A-11-04.

[3] 澤田有弘，松本純一 (2021.9), 粒子群の沈降や撹拌に対する流体・構造・接触の連成計算手法，日本機械学会 第34回計算力学講演会講演論文集, No.158.

[4] 澤田有弘，松本純一 (2022.6), 離散有限要素法による流体・固体・接触の連成計算，第66回理論応用力学講演会講演論文集, No.OS1-4-05.

[5] 澤田有弘，松本純一 (2023.5), 液中における粒子パッキングから焼結までの連成・連携解析，日本計算工学会 第28回計算工学講演会論文集, No.G-01-02.

[6] Sawada T (2018), Interface-Reproducing Capturing (IRC) Technique for Fluid-Structure Interaction: Methods and Applications, In: Tezduyar T (eds), Frontiers in Computational Fluid-Structure Interaction and Flow Simulation, Modeling and Simulation in Science, Engineering and Technology, Birkhauser, Cham.

[7] 澤田有弘，近藤雅裕，松本純一 (2020), XFEM を適用する流体・構造連成計算手法における流体の慣性項の計算，日本計算工学会論文集, Paper No.20200004.

[8] 澤田有弘，松本純一 (2022.6), 流体・構造連成問題の安定化Lagrange未定乗数定式化，日本計算工学会 第27回計算工学講演会論文集, No.A-12-04.

[9] 澤田有弘，松本純一 (2022.11), 流体・構造連成問題に対するLaplacian-perturbed Lagrange未定乗数定式化，日本機械学会 第35回計算力学講演会講演論文集, No.12-06-.