

乱流中の粒子層における分級現象の並列計算法

Parallel Computation for Particle Segregation in Movable Beds under Turbulent Flows

牛島 省, 瀬津 家久

京都大学大学院 環境地球工学専攻, 〒 606-8501 京都市左京区吉田本町

S. Ushijima and I. Nezu

Department of Global Environment Engineering, Kyoto University

Kyoto-shi, 606-8501, Japan, E-mail : ushijima@gee.kyoto-u.ac.jp

A parallel computation method has been developed for non-uniform solid particles in turbulent liquid flows on the basis with a two-way modeling. The numerical model is based on an Eulerian-Lagrangian approach, in which the carrier fluid is solved on three-dimensional general curvilinear coordinates with the Eulerian governing equations while the movements of the individual particles are predicted with a distinct element method (DEM). Due to the modeling in DEM, particle-particle and particle-wall contact forces are adequately treated in the computation. The fluid-particle interaction is taken into account through the message passings in the unsteady computations. The computational time can be reduced due to the parallel numerical procedures for both phases on the basis of a domain-decomposition method. The particle segregation is successfully predicted in an oscillating turbulent flow with the present method.

1. 緒言

河川や海岸の底質が、粒径が様でない混合砂で構成される場合、流れによるそれらの輸送機構や分級・混合過程を明らかにすることは、河床や海浜変形などの評価を行う際に重要である。本報では、分散相と液相の相互作用を考慮した two-way model を用いる計算手法を扱う。粒子運動に対しては、個別要素法 (DEM) を用いて粒子間および粒子と境界面との接触力を評価する。液相と固相の非定常計算を並列的に進めるとともに、領域分割法により領域ごとに並列計算を行うことで、計算時間の短縮と複雑形状境界への適用性の向上などを図る。得られた計算手法を振動流中の不均一粒子群に適用し、粒子の輸送過程や分級現象の再現性について検討を加える。

2. 液相の数値解析法

粒子の周囲に存在する液相に対しては、Euler 的に導かれた支配方程式を離散化し、これを有限差分法により解析する。図 1 に、液相の計算のフローチャートを示す。領域分割・並列計算法に基づく解法を利用するため、最初に与えられた計算領域を複数のサブブロックに分割する (図 1 中の Block-M, N 等)。各サブブロックにはスレーブプロセスが一対一対応しており、これがサブブロック内の座標生成と流体計算を行う。図 1 中のマスタープロセスは、スレーブプロセス間のデータ通信を管理する。

領域分割の際には、計算負荷を平準化すること、また全体の領域が複雑な形状の場合には、形状の模擬性を良好にすること、などが考慮される。各サブブロックの境界形状は 3 次元境界適合座標系 (3D BFC) により表現される。サブブロック間の共有境界面近傍では、変数の 3 次スプライン内挿を行って格子点上の値を定めるため、面上で各ブロックの格子点は一致しなくてもよい。境界適合座標系は、Thompson ら¹⁾と同様に、物理空間および写像空間中の座標成分 (それぞれ x_i および ξ_m ; $i, m = 1, 2, 3$) から構成されるポアソン方程式を逆変換した次式により生成される。

$$\left(\frac{\partial^2 x_i}{\partial \xi_p \partial \xi_q} \right)^* \left(\frac{\partial \xi_p}{\partial x_j} \right)^* \left(\frac{\partial \xi_q}{\partial x_j} \right)^* + \frac{\partial^2 x_i}{\partial \xi_r \partial \xi_s} \left(\frac{\partial \xi_r}{\partial x_j} \right)^* \left(\frac{\partial \xi_s}{\partial x_j} \right)^* + P_m \left(\frac{\partial x_i}{\partial \xi_m} \right)^* = 0 \quad (1)$$

座標生成時の計算精度を高めるため、上式中の*記号がついた項を、中央差分ではなく 3 次スプライン関数を用いて

評価することとしている²⁾。(1) 式中の P_m は、物理空間中のメッシュ間隔の粗密を制御するために利用される関数である。このようにして、全体の計算領域は境界適合座標系で表現された複数のサブブロックの集合体として扱われる。なお、粒子運動の計算では同様のサブブロックを利用するため、図 1 の矢印 (A) で示すように、格子点データを送信する。

液相の基礎方程式は、二流体モデルから導かれるアンサンブル平均がなされた連続式と運動方程式、そして乱れエネルギーとその散逸率の輸送方程式から構成される。 C を固相の体積濃度の平均成分、 $\Phi = 1 - C$ とするとき、液相の連続式と運動方程式は次式で与えられる。

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\Phi U_{fi}) = 0 \quad (2)$$

$$\frac{D_f U_{fi}}{Dt} = \frac{1}{\Phi} F_i - \frac{1}{\Phi} \frac{1}{\rho_f} \frac{\partial P}{\partial x_i} - \frac{1}{\Phi} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\Phi u'_{fi} u'_{fj} \right) + \nu_f \frac{\partial^2 U_{fi}}{\partial x_j^2} + R_i \quad (3)$$

D_f/Dt は液相流速に基づく Lagrange 微分、 F_i は重力などの外力、 P は液相の平均圧力、 ν_f は液相の動粘性係数、 ρ_f は液相の密度、 d は粒子の代表粒径、 U_{fi} と U_{pi} は液相と固相の平均流速成分、 R_i は粒子から受ける力である。プライム付の小文字の変数は変動成分を表す。 R_i の値は、粒子運動の計算において、流体の計算セル内に含まれる粒子に働く力の総和を取り、これを図 1 の矢印 (B) で示された通信で受取ることとしている。従って、単位体積中の粒子に作用する力と流体に作用する力は等しい。

液相の乱れエネルギーとその散逸率に対しては、粒子相により生ずる乱流量の評価が困難であるため、ここでは単相流に対して導かれた方程式を用いることとした。こ

れらは、写像空間中において以下のように表される。

$$\begin{aligned} \frac{Dk}{Dt} = & \epsilon_M \left(\frac{\partial u_i}{\partial \xi_n} \frac{\partial \xi_n}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial \xi_n} \frac{\partial \xi_n}{\partial x_i} \right) \frac{\partial u_i}{\partial \xi_m} \frac{\partial \xi_m}{\partial x_j} \\ & + \left(\nu + \frac{C_k}{C_\nu} \epsilon_M \right) \left(\frac{\partial^2 k}{\partial \xi_m \partial \xi_n} \frac{\partial \xi_m}{\partial x_j} \frac{\partial \xi_n}{\partial x_j} + P_m \frac{\partial k}{\partial \xi_m} \right) \\ & + \frac{C_k}{C_\nu} \frac{\partial \epsilon_M}{\partial \xi_m} \frac{\partial \xi_m}{\partial x_j} \frac{\partial k}{\partial \xi_n} \frac{\partial \xi_n}{\partial x_j} - \epsilon \end{aligned} \quad (4)$$

$$\begin{aligned} \frac{D\epsilon}{Dt} = & C_{\epsilon 1} \frac{\epsilon}{k} \epsilon_M \left(\frac{\partial u_i}{\partial \xi_n} \frac{\partial \xi_n}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial \xi_n} \frac{\partial \xi_n}{\partial x_i} \right) \frac{\partial u_i}{\partial \xi_m} \frac{\partial \xi_m}{\partial x_j} \\ & + \left(\nu + \frac{C_\epsilon}{C_\nu} \epsilon_M \right) \left(\frac{\partial^2 \epsilon}{\partial \xi_m \partial \xi_n} \frac{\partial \xi_m}{\partial x_j} \frac{\partial \xi_n}{\partial x_j} + P_m \frac{\partial \epsilon}{\partial \xi_m} \right) \\ & + \frac{C_\epsilon}{C_\nu} \frac{\partial \epsilon_M}{\partial \xi_m} \frac{\partial \xi_m}{\partial x_j} \frac{\partial \epsilon}{\partial \xi_n} \frac{\partial \xi_n}{\partial x_j} - C_{\epsilon 2} \frac{\epsilon^2}{k} \end{aligned} \quad (5)$$

上記の基礎方程式は、写像空間中において Lagrange スキームを利用して離散化される²⁾。移流項は局所的な3次スプライン内挿を利用する手法である LCS1 法²⁾により計算した。

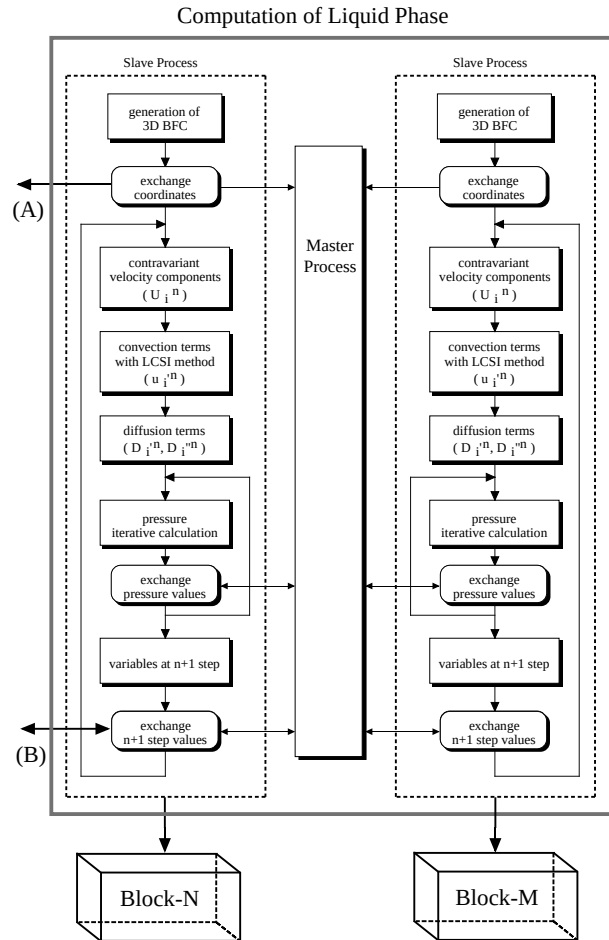


Fig. 1: Flowchart for liquid phase

3. DEM による固体粒子運動の数値解析法

粒子運動の計算のフローチャートを図2に示す。図2のデータ通信を示す矢印(A)と(B)は、図1のそれらと対応している。

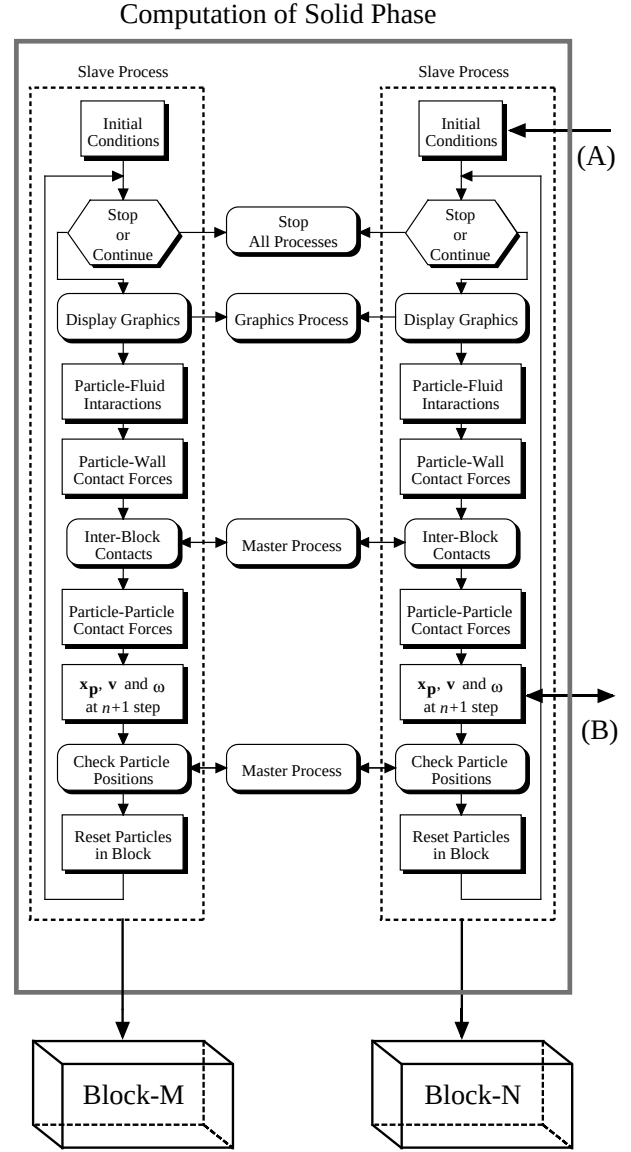


Fig. 2: Flowchart for particle computation

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ものであり、それぞれ次式で与えられる。

$$m \frac{d^2 \mathbf{x}_p}{dt^2} = \mathbf{F}_L + \mathbf{F}_C \quad (6)$$

$$I \frac{d\boldsymbol{\omega}_p}{dt} = \mathbf{T}_L + \mathbf{T}_C \quad (7)$$

ここで、 $\mathbf{x}_p$ は粒子の位置ベクトル、 $\mathbf{F}_L$ と $\mathbf{F}_C$ は、それぞれ粒子に作用する流体力と接触力であり、 $\boldsymbol{\omega}_p$ 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。

粒子に作用する液相の流体力としては、次式のように、Basset 項を除く 5 つの項を考慮している。

$$\begin{aligned} \mathbf{F}_L = & m \frac{\rho_f}{\rho_p} \frac{\partial \mathbf{u}_f}{\partial t} + \frac{m}{2} \frac{\rho_f}{\rho_p} \frac{\partial \mathbf{u}_r}{\partial t} \\ & + \beta \frac{m}{c_p \rho_p} \mathbf{u}_r |\mathbf{u}_r| + m \frac{\rho_p - \rho_f}{\rho_p} g + C_{LR} |\mathbf{u}_r| \frac{\mathbf{u}_r \times \boldsymbol{\omega}_r}{|\boldsymbol{\omega}_r|} \end{aligned} \quad (8)$$

ここで、 ρ_p は固体粒子の密度、また c_p は固相の体積濃度、 u_r は液相と固体粒子の相対速度 ($u_f - u_p$) であり、(8) 式右辺第 3 項の抗力では、Ergun 式に基づき粒子数密度の高低を考慮した抵抗係数 β を利用している³⁾。

ここでは流体計算で生成した境界適合座標系を利用するため、図 2 中の矢印 (A) で示されるように、最初に同一のサブブロックにおける流体計算プロセスから格子点のデータを受信する。次に、非定常計算の計算ステップが、指定した回数 (例えば 100 ステップに 1 回) に相当する場合、粒子分布の表示が可視化プロセス (Graphic process) により行われる。

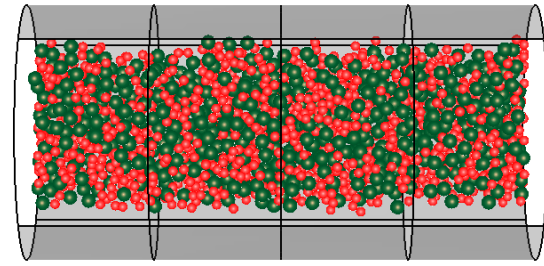
粒子間および粒子と境界面との間で発生する接触力は、DEM で一般に用いられるバネ-ダッシュポットモデルにより評価する⁴⁾。接線方向の接触力に対しては、粒子の滑りを考慮するため、摩擦スライダを設定した。粒子と計算領域の境界面との接触は、実際には境界面上の計算格子点によって形成されるセル平面と粒子との接触として扱われる。すなわち、セル平面と粒子中心位置の距離と粒子半径との大小関係から接触の有無を判定するものとした。一方、粒子間の接触力を求める際には、サブブロックどうしが接続する断面を介して接触する、異なるブロックに属する粒子の間に働く接触力を適切に扱うことが必要となる。これに対しては、前報⁵⁾と同様の手法を利用する。

図 2 の矢印 (B) に示されるように、流体計算と時刻が一致するステップにおいて F_L や粒子の体積濃度、液相の流速成分などの相間相互作用の算出に必要な情報が流体計算のプロセスと送受信される。

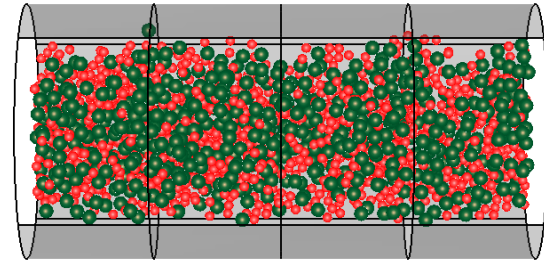
4. 振動流中の粒子混合物への適用例

計算手法の適用性を検討するため、円管内に振動流を発生させて内部の不均一粒径の粒子混合物の挙動を調べる数値実験を行った。この数値実験では、内径 50mm、軸方向長さ 90mm の円管内において両端の圧力条件を変化させることにより、流向が時間によって変化する振動流を内部に発生させる。円管の中心軸は水平に置かれている。円管内には、粒径が 2mm で比重 2.0 の粒子 (S 粒子) と粒径 3mm で同比重の粒子 (L 粒子) をそれぞれ 1,067 個および 533 個ずつ投入した。計算では、最初に液相流速を 0 とし、円筒内に 2 種類の粒子をランダムに配置し、それらが下部に堆積した状態を初期条件とした。計算領域は、軸方向に 4 つの領域に分割されている。これら 4 ブロックの液相および固相の計算を 4 台の PC に割り当て、可視化プロセスを他の 1 台で実行させた。両端における流体流速は周期境界条件に従う。固体粒子の移動に関しても周期境界条件を適用し、一端から排出された粒子は他端より同一流速を持って同一断面内位置から投入される。

計算では、振動流に対応して粒子群が移動を開始し、計算の進行とともに粒子が軸方向に偏在するものとなった。このため、初期にはほぼ平坦であった粒子群の表面は、局部的に高低差を有する分布を示す。また、初期には S 粒子と L 粒子はほぼランダムに混合していたが、時間の進行とともに L 粒子が表層付近に数多く分布する傾向が見られる。図 3 は、円管の鉛直上方から見た初期と十分な時間が経過した後の粒子分布の計算結果である。これより、L 粒子が表面近傍に露出する傾向が把握される。なお、T は振動流の周期 (約 0.18 秒) である。



(a) $t/T = 0.0$



(b) $t/T = 5.6$

Fig. 3: Predicted particle distributions
(Top views)

$t/T = 0.0$ と $t/T = 5.6$ における S 粒子の鉛直方向の分布を図 4 に示す。図中の z_b は円管底部からの鉛直高さであり、横軸は $z_b = 0$ から 1 mm ずつのバンド幅内に中心を持つ粒子数をカウントし、それを S 粒子の総数で正規化して示した値 (%) である。S 粒子は、時間が経過すると $6\text{mm} \leq z_b \leq 12\text{mm}$ に存在する粒子数が減少し、逆に $1\text{mm} < z_b < 6\text{mm}$ の範囲の粒子数が増加している。従って、粒径の小さい S 粒子は底部付近に移動する傾向を示している。

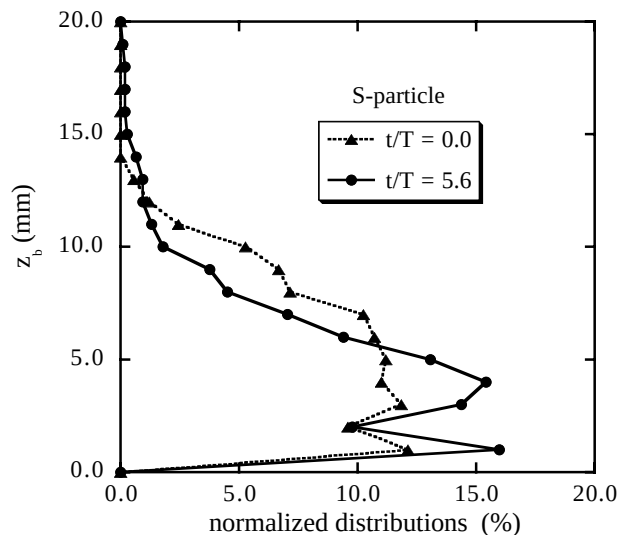


Fig. 4: Vertical distribution of S-particles

同様に L 粒子の鉛直方向分布を示すのが図 5 である。図 4 に示された傾向とは逆に、底部付近で L 粒子の数が減少し、 $9\text{mm} \leq z_b$ の上部で粒子数が増加している。これより、L 粒子は上方へ移動する傾向が把握された。

$t/T=5.6$ における鉛直方向の粒子数から、 $t/T=0.0$ のそれを減じた結果を図6に示す。横軸0に対して右側が初期の粒子分布に対する増加を表し、左側が減少を表す。この結果から、上述のように、S粒子は下方、L粒子は上方への移動が確認されるが、L粒子の移動領域はS粒子のそれより鉛直方向に広く、両粒子の増減領域は必ずしも対応していないことが注目される。初期の粒子分布に対して、時間が経過した状態では粒子の空隙率が変化することや、粒子が軸方向に偏在することなどもこの一因であると考えられる。

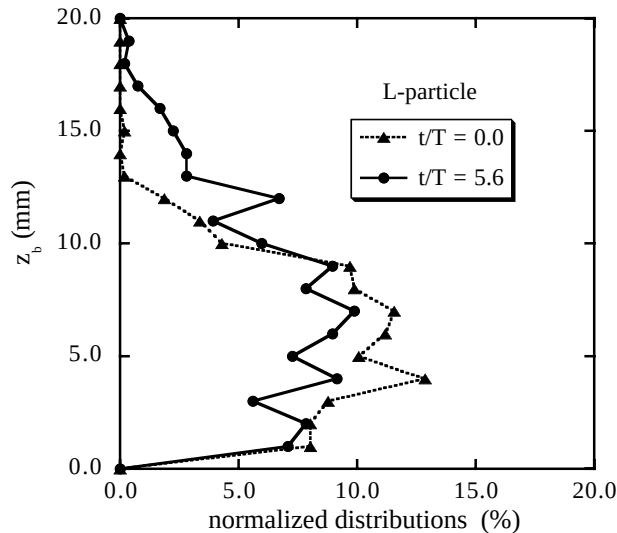


Fig. 5: Vertical distribution of L-particles

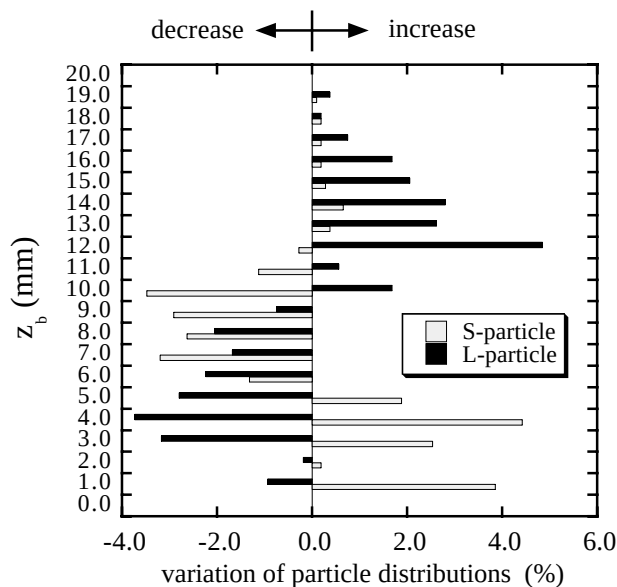


Fig. 6: Vertical distribution for variation of particle numbers (variation between $t/T=5.6$ and $t/T=0.0$)

上記のように、この数値計算ではこれまで実験等で確認されてきた不均一粒子の分級現象が再現され、二成分粒子の鉛直方向の移動特性が定量的に把握できることが示された。なお、本報のモデルでは、鉛直方向の乱流効果を粒子運動の計算に考慮していないため、粒子の巻き上げはあまり見られなかった。この点に関しては今後詳細な検討を行いたいと考える。

5. 結言

本報では、液相に対して二流体モデルから導かれる Euler 的な基礎方程式を解析し、粒子相に対しては DEM により Lagrange 的に粒子運動を解析する、Eulerian-Lagrangian 法に基づく解析手法を提案した。各相の計算は並列的に進行し、同一時刻における両相の相互作用が考慮される。また、液相および粒子運動の計算に領域分割・並列計算手法を利用し、各相の計算が分割された領域ごとに並列的に行われるものとした。この手法を振動流中の二成分粒子混合物に適用し、これまで実験等で確認されたものと同様の分級現象が再現され、特に二成分粒子の鉛直方向の移動特性が定量的に把握できることが示された。

参考文献

1. J. F. Thompson, Z. U. A. Warsi, and C. W. Mastin. *Numerical Grid Generation*. Elsevier Science, New York, 1985.
2. S. Ushijima. Prediction of thermal stratification in a curved duct with 3D boundary-fitted co-ordinates. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, Vol. 19, pp. 647–665, 1994.
3. 川口寿裕・田中敏嗣・辻裕. 離散要素法による2次元流動層の数値シミュレーション (噴流層の場合: 2次元モデルと3次元モデルの比較). 日本機械学会論文集 (B編), Vol. 61, No. 589, pp. 3169–3175, 1995.
4. P. A. Cundall and O. D. L. Strack. A discrete numerical model for granular assemblies. *Geotechnique*, Vol. 29, No. 1, pp. 47–65, 1979.
5. 牛島省, 禰津家久. 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. 水工学論文集, Vol. 45, pp. 715–720, 2001.