

2次元破碎性粉体のシミュレーション

石川遥登¹, 高田智史^{1,2}

¹ 東京農工大学 大学院工学府 機械システム工学専攻

² 東京農工大学 工学研究院 先端機械システム部門

概要

離散要素法により2次元破碎性粉体の衝突シミュレーションを行い、破碎様式の変化について数値的に調べる。2体衝突を考える場合には破碎が生じるある閾値が存在し、それが運動と結合エネルギーを考慮した簡単な議論で説明できることを報告する。さらにマクロな跳ね返り係数を求めることで、破碎の様子を特徴づける。また、多粒子系に剪断をかけた系の平均破片サイズと剪断応力の関係についても調べ、剪断応力が平均破片サイズにほとんど依存しないことを報告する。

Simulation of two-dimensional crushable granular materials

Haruto Ishikawa¹, Satoshi Takada^{1,2}

¹ Department of Mechanical Systems Engineering, Graduate School of Engineering,
Tokyo University of Agriculture and Technology

² Division of Advanced Mechanical Systems Engineering, Institute of Engineering,
Tokyo University of Agriculture and Technology

Abstract

Two-dimensional simulation of crushable granular materials is performed in terms of the discrete element method. First, we investigate two-body collisions. There exists a threshold of the breakage, which is explained by a simple model between the kinetic and bond energies. We also measure the relative speed dependence of the bond number and the restitution coefficient to clarify the breakage. We also study many-body simulations under a shear condition. We find that the shear stress is almost independent of the mean cluster size of the macroscopic particles.

1 はじめに

我々の身の回りには存在する粉体の挙動(レオロジー)を理解することは、土木工学や化学工学など工学の幅広い分野で重要な課題となっている[1]。特にその中でも破碎現象を理解することは、安定的な粒度分布の実現や破碎の効率化などの知見への貢献が期待される。実際、この問題に関するシミュレーションは数多く行われており、ブラジリアンテストなど様々な問題設定が調べられている[2, 3]。破碎現象を考えるにあたり、先行研究においては主に2

つの手法が用いられていることが多い[1]。一つ目はマクロな粉体粒子を考えそこに基準以上の応力が作用した際により小さな粒子群に置き換える手法であり、二つ目は小さな粒子を多数集めそれらをボンドで結合することによりマクロな粉体粒子を構成する手法である。しかしながら、これらのモデルにおいては前者では粒子の置き換え方を外から与える必要性、後者においては確率的にボンドの破碎を与える必要があり、さらにその確率の与え方はマクロな粒子系の実験結果を流用しているという問題がある[1]。そこで本研究においては後者のモデルを採用し

つつ破碎条件として前者を採用することにより決定論的なシミュレーションを行うことで、粉体粒子の破碎がどのように進展していくかについての知見をミクロな視点から得ることを目的とする。

2 モデルとセットアップ

本章ではシミュレーションに使用するモデルと、セットアップについてそれぞれ述べていく。

2.1 モデル

シミュレーションは離散要素法 (以下 DEM) を用いる [4]。系は 2 次元系とし、結晶化を避けるため粒子は個数比 1:1 で直径 d 、 $1.4d$ 、質量 m 、 1.4^2m の二分散系を考える。相互作用している粒子間には法線方向 (F_{ij}^n)、接線方向 (F_{ij}^t) とともに線形ばね (k_n および k_t) とダッシュポット (η_n および η_t) で連結されていると仮定して計算する [4, 5]。また、接線方向に関してはクーロン摩擦を表現するために摩擦スライダー (摩擦係数 μ) も導入している [4, 5]。

それに加えて、初期に粒子間距離が 2 粒子の半径の和の $(1+u)$ 倍以内の距離にある場合、粒子同士を結合ボンドで繋ぐことにする。ここで、結合ボンドは粒子間相互作用が

$$\frac{-F_{ij}^n}{F_0^n} + \frac{|F_{ij}^t|}{F_0^t} \geq 1, \quad (1)$$

を満たすときに破壊され、一度これが満たされた場合、以後はこの結合を取り除くものとする [6]。

本研究においては、各パラメータの値として $k_t = k_n$ 、 $\eta_n = \eta_t = 1.0\sqrt{mk_n}$ 、 $F_0^n = F_0^t = 5.0 \times 10^{-3} k_n d$ 、 $\mu = 0.3$ 、 $u = 5.0 \times 10^{-3}$ を用いることにする。これに対応する粒子間のはねかえり係数は法線方向、接線方向ともに

$$e_n = e_t = \exp\left(-\frac{\pi\eta_n}{\sqrt{2mk_n - \eta_n^2}}\right) \simeq 4.3 \times 10^{-2}, \quad (2)$$

となる。また、粒子数 N については 3.1 章においては $N = 10^4$ 、3.2 章においては $N = 5 \times 10^2$ と 10^3 を用いることにする。

2.2 セットアップ

シミュレーションのセットアップについて述べる。初期条件を作成するために直径 $D = (1/2)(1 + 1.4^2)(N/\varphi)d$ の円を考え、その中に各粒子を配置する。ここで φ は破碎性粉体の充填率であり、今回は

$\varphi = 0.80$ と設定した。その後、各粒子を膨らませ、各粒子間のオーバーラップの最大が $10^{-6}d$ 以下になるまで緩和を行った。緩和を行った後は粒子間の距離の測定を行い、粒子間の距離が $r_{ij} \leq (1+u)d_{ij}$ にある粒子には結合ボンドが生じているとみなし、式 (1) で破壊される結合ボンドを用意した。また、初期配置による依存性を排除するため、各パラメータの組み合わせに対して 10 通りの初期配置を用意した。

3 結果

本章では、2 体衝突、および多体系に剪断を加えた場合のシミュレーション結果についてそれぞれ述べていく。

3.1 2 体衝突

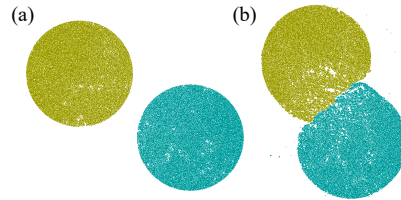


図 1: 時刻 (a) $t = 0$ および (b) $150 d/V$ における 2 体の破碎性粉体の振る舞い。衝突パラメータと相対速度はそれぞれ $b = 0.6D$ 、 $V = 3.2 \times 10^{-2} d\sqrt{k_n/m}$ である。

この章では 2 つの破碎性粉体を衝突させるシミュレーションによって得られた結果について述べる。相対速度 V および衝突パラメータ (接触が始まる前における相対速度と垂直方向の 2 粒子間の重心距離) b を変化させた際の 2 体衝突による破壊の様子の変化を調べた。2 粒子の衝突前および衝突中の典型的な様子をそれぞれ図 1(a) および (b) に示す。図 1(b) のように、衝突により破碎性粉体の一部分が変形し、その後に粒子内の破碎が進行する。

図 2 にこの際の粒子内の結合ボンドの時間発展を示している。衝突前においては、ボンド数は $N_{\text{bond}}/N \simeq 1.7$ 程度存在するのに対し、衝突により破碎が進行していくと減少していく。このとき、相対速度 V が大きいほど衝突後のボンド数 N_{bond} は小さくなり、また衝突パラメータ b が小さいほど同様に N_{bond} は小さくなる。ここで、 N_{bond} の減少が始まる時刻が異なるが、これは b によって接触が始まる時刻が異なるためである。

さらに、衝突パラメータ b を変化させた場合の、

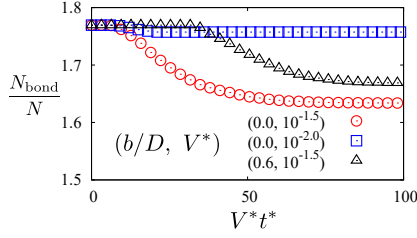


図 2: 各初期速度に対するボンド数の時間変化。ここで $V^* \equiv V/(d\sqrt{k_n/m})$ 、 $t^* \equiv t/\sqrt{m/k_n}$ である。ここで、結果は 10 サンプルの平均を示している。

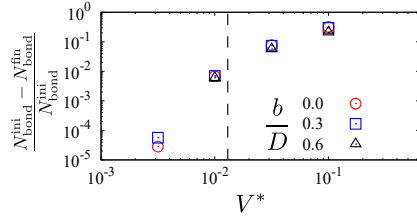


図 3: 相対速度に対する破碎する結合の個数の変化。破線はエネルギーのバランスから見積もった閾値 $V_c \sim 1.3 \times 10^{-2} d\sqrt{k/m}$ である。ここで、結果は 10 サンプルの平均を示している。

衝突の前後における結合ボンド数の差の衝突速度依存性を図 3 に示す。ここで、衝突前 (後) の結合ボンド数を $N_{\text{bond}}^{\text{ini}}$ ($N_{\text{bond}}^{\text{fin}}$) と置いた。図 3 より、破碎される結合ボンド数の割合は速度の増加関数であること、および同じ衝突速度の場合においては衝突パラメータの減少関数であることがわかる。また、破碎割合は $V_c \simeq 1.0 \times 10^{-2} d\sqrt{k/m}$ の閾値を境に大きく変化している。この V_c については以下の簡単な議論から説明できる。まず、破碎性粉体の運動エネルギー K は、1 個の破碎性粉体が N 個の粒子から構成されるため質量は $M = Nm_i \sim Nm$ となること、および破碎性粉体の換算質量が $M_r = M/2$ であることから、 $K \sim (1/2)M_r V^2$ と見積もることができる。一方、結合を破壊するためのエネルギーは、ボンド数が N_{bond} で与えられることから $U \sim 2 \times (1/2)ku^2 d^2 N_{\text{bond}}$ となる。これら二つのエネルギーが等しいとすると、ボンドを破壊するために必要な相対速度は $V_c \sim u\sqrt{(4N_{\text{bond}}/N)d\sqrt{k/m}}$ と見積もられる。ここに我々が使用したパラメータの値および $N_{\text{bond}}/N \simeq 1.7$ を代入すると、 $V_c \sim 1.3 \times 10^{-2} d\sqrt{k/m}$ が得られ、図 3 の閾値と定量的に一致していることがわかる。

また、衝突の際の (マクロな) はねかえり係数 e の

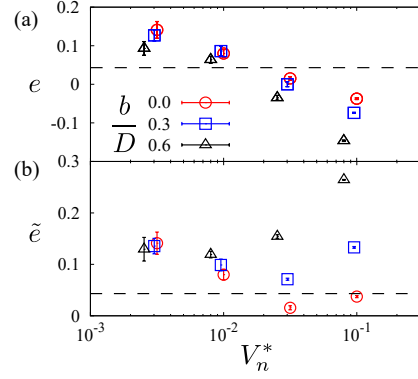


図 4: 衝突パラメータ b を変化させたときの法線方向の相対速度 $V_n = \mathbf{V}(0) \cdot \mathbf{n}(0)$ に対する (a)(マクロな) はねかえり係数 e および (b) 修正はねかえり係数 \tilde{e} の変化。ここで $V_n^* \equiv V_n/(d\sqrt{k_n/m})$ であり、図中の破線は構成粒子のはねかえり係数 $e_n = 4.3 \times 10^{-2}$ を示す。ここで、結果は 10 サンプルの平均を示している。

衝突速度および衝突パラメータ依存性についても調べた (図 4(a) 参照)。衝突による破碎性粉体内部の破壊による影響で、構成粒子のはねかえり係数 e_n とは異なる変化を示す。低速領域においてはマクロなはねかえり係数は構成粒子のはねかえり係数より大きくなる。これは前者が式 (2) において質量 m を Nm に置き換えることによって得られ、 N が大きくなると後者よりも大きな値を取ることが理解できる。

一方、高速領域においてははねかえり係数は負の値となる。これは有限の接触時間となることで、粒子間の方向ベクトルが時間とともに変化していることに起因している [7]。ここで、時間とともに変化する方向ベクトル $\mathbf{n}(t)$ を導入し、さらに衝突開始および終了時刻を $t = 0$ および t_c と置くことで、修正はねかえり係数 \tilde{e} を

$$\tilde{e} \equiv -\frac{\mathbf{V}(t_c) \cdot \mathbf{n}(t_c)}{\mathbf{V}(0) \cdot \mathbf{n}(0)} \quad (3)$$

で定義する [7]。ここで $\mathbf{V}(t)$ は時刻 t における相対速度ベクトルである。図 4(b) にこの修正はねかえり係数の衝突速度依存性を示す。この定義を用いることで、修正されたはねかえり係数は 0 から 1 までの範囲に収まる。ただし、衝突速度が閾値を超え破碎が起こる場合、この定義を用いることではねかえり係数が増大していることに注意する必要がある。

3.2 一様剪断下での多粒子系の破碎

次に、破碎性粉体粒子を多数用意し、そこに一様剪断をかけた際の挙動について調べていく。2.1 章

で述べた通り、破碎性粉体の構成粒子数は 500 個および 1000 個とし、それらを 20 個ずつ用意する。その系に対し Lees-Edwards 境界条件 [8] を適用することで剪断を作用させることにする。

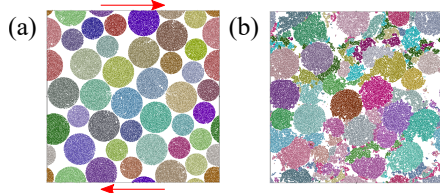


図 5: 剪断率 $\dot{\gamma} = 1.0 \times 10^{-4} \sqrt{k_n/m}$ における (a) 初期および (b) 歪み $\gamma = 10.0$ での破碎性粉体の振る舞い。(a) における矢印は剪断の方向を示す。

剪断率により、破碎性が大きく変わる。図 5 に剪断率が小さい場合における系の典型的な発展の様子を示している。これからわかる通り、剪断率が小さい場合には破碎が生じる (マクロな) 粒子と生じない粒子が混在する。一方、剪断率が大きくなると破碎は均等に起こる。

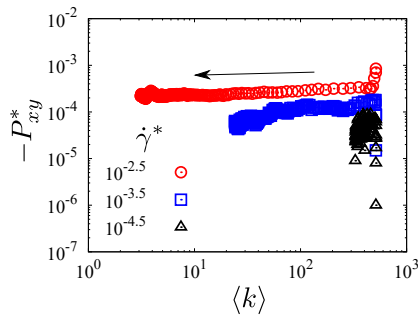


図 6: 無次元化剪断率 $\dot{\gamma}^* = 10^{-2.5}$ 、 $10^{-3.5}$ 、 $10^{-4.5}$ に対する平均破片サイズ $\langle k \rangle$ と剪断応力 P_{xy}^* の関係。矢印は時間発展の方向を示す。ここで、 $\dot{\gamma}^* \equiv \dot{\gamma} \sqrt{m/k_n}$ 、 $P_{xy}^* \equiv P_{xy}/k_n$ である。

図 6 に剪断をかけた際の剪断応力と平均破片サイズの関係を示す。時間経過によって破碎が進み、平均破片サイズ $\langle k \rangle$ が小さくなる。さらに剪断率 $\dot{\gamma}$ が大きいほど $\langle k \rangle$ がより小さくなるまで破碎が進むことが見て取れる。一方、剪断応力 P_{xy} の値については、初期を除いてほぼ一定であり、 $\langle k \rangle$ にはほとんど依存しないことがわかる。これは、剪断応力がある瞬間に局所的に大きくなるとそこで破碎が発生し、その結果全体の剪断応力が減少するためであると考えられる。ここで、 $\dot{\gamma}$ が小さい場合にはほとんど破碎が起こらないため、 $\langle k \rangle$ がほとんど変化しないことに注意が必要である。

4 まとめ

本研究では破碎のある粉体のモデル化を行い、それを用いてシミュレーションを実行した。その結果、2体衝突系においては衝突速度に閾値が存在し、その前後で結合ボンド数やばねかえり係数の衝突速度・衝突パラメータ依存性が大きく変わることを明らかにした。また、簡単な解析によりこの閾値を定量的に再現できることを示した。一方、剪断下での多体系においては剪断率を変化させると平均破片サイズは大きく変化するものの、剪断応力はほとんど変化しないことを明らかにした。

しかしながら多体系において剪断率によって破碎が局所的に起こる条件などについてはまだ明らかにできていない。これを解決するにあたり、今後は破碎進行中の各粒子内部の応力状態の解析などが必要であると思われる。また破碎進行が起こる直前に現れる何らかの前兆現象などについても調べていきたい。

謝辞

本研究は JSPS 科研費 JP20K14428 の助成を受けたものです。

参考文献

- [1] C. O'Sullivan, "Particulate Discrete Element Modelling", Routledge, (2017).
- [2] S. Antonyuk, M. Khanal, J. Tomas, S. Heinrich, and L. Mörl, Chem. Eng. Process. **45**, 838 (2006).
- [3] D. Li, L. Ngai, and Y. Wong, Rock Mech. Rock Eng. **46**, 269 (2013).
- [4] S. Luding, Granul. Matter **20**, 235 (2008).
- [5] Y. Wang, F. Alonso-Marroquin, S. Xue, and J. Xie, Particuology **18**, 35 (2015), **23**, 49 (2015).
- [6] Y. Wang, S. Abe, S. Latham, and P. Mora, Pure Appl. Geophys. **163**, 1769 (2006).
- [7] K. Saitoh, A. Bodrova, H. Hayakawa, and N. V. Brilliantov, Phys. Rev. Lett. **105**, 238001 (2010).
- [8] A. W. Lees and S. F. Edwards, J. Phys. C: Solid State Phys. **5**, 1921 (1972).