

解析支援ネットOKAYAMA

流体熱力学解析勉強会, 2007.06.30

粉粒体数値シミュレーション用 構成方程式確立のための 実験的アプローチ

岡山理科大学

工学部機械システム工学科

桑木 賢也

離散要素法

DEM (Discrete Element Method)

～解析手法とその適用例～

1. 研究背景

固体（粉粒体）と気体が混ざった流れ（固気二相流）

- ・ 粒子希薄系…石炭微粉炭燃焼、循環流動層ボイラー、
粒子表面改質装置（トナーなど）
- ・ 粒子濃厚系…流動層（流動層燃焼ボイラー、
ゴミ焼却炉、石油精製、製薬など） 移動層（高炉）、固定層



岡山県下での流動層

石油化学工業

(例：重合反応によるポリプロピレン製造)

バイオマス

(例：木質系バイオマスの高温ガス化)



これらがシミュレーションできる
コード開発の必要性

混相流の数値解析方法

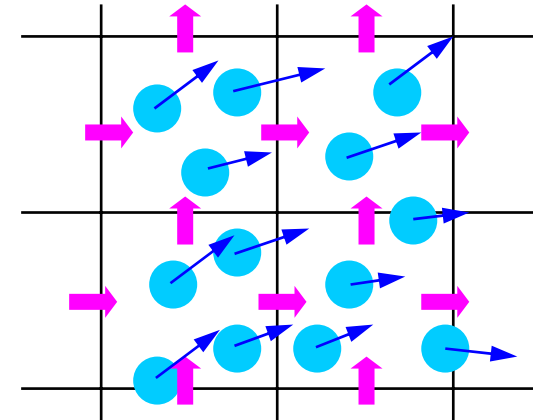
(1) 分散相を Euler 的に扱う方法

(a) 混合物モデル

均質流モデル、スリップ流モデル、
ドリフトフラックスモデル

(b) 二流体モデル

一圧力モデル、二圧力モデル、分散流モデル



(2) 分散相を Lagrange 的に扱う方法

DEM(Discrete Element Method)・・・粉体

Particle Tracking Method・・・気液二相流

(3) 界面追跡法 (Interface Tracking Method)

有限要素法(FEM), 境界適合座標(BFC)

MAC(Marker and Cell)法, VOF(Volume of Fraction)法

工業的数値シミュレーション

トラブル要因を組み込んだコードの開発

→工業プロセスでの開発リスクの低減

粉体工業におけるトラブル

- ・粒子の付着性に起因する

付着凝集トラブル

液架橋力

固架橋力

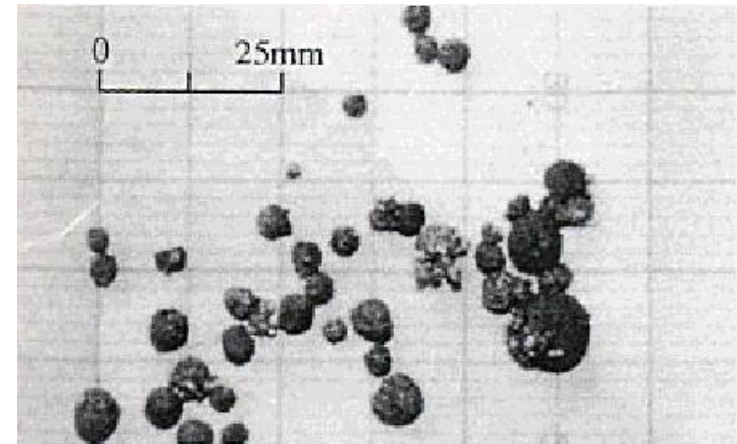
van der Waals力

静電気力

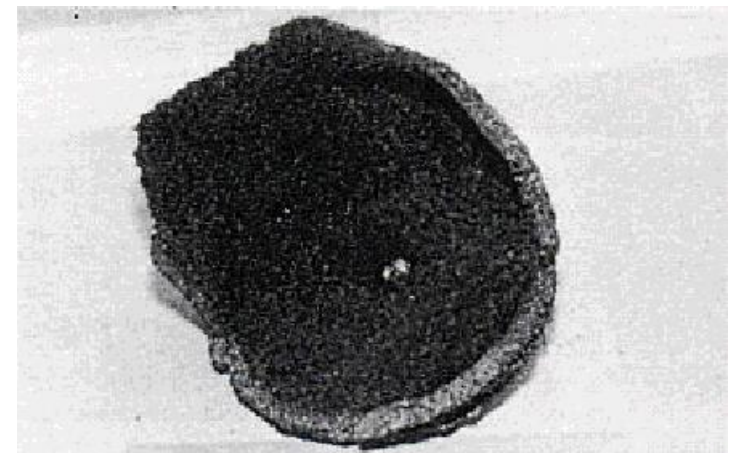
- ・伝熱管などの磨耗、腐食



離散要素法…粒子間付着力を
用意に考慮できる



アグロメレーション (凝集体)



クリンカー

1. 研究背景

固気二相流の数値解析

離散要素法(DEM)

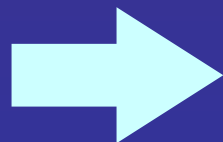
- ・ 付着性を容易に組み込むことができる
- ・ 温度場、反応場にも適用が容易



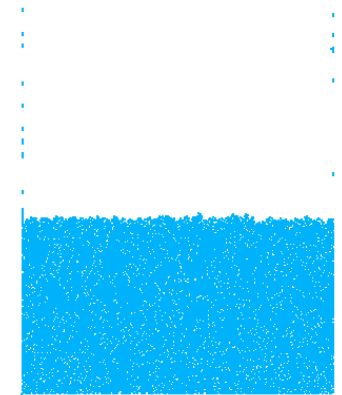
DEMを用いた研究成果は飛躍的に増えている

商用ソフトにはほとんど組み込まれていない

- ・ 粒子数に起因するコンピュータ負荷の問題
→代表粒子モデル(SPA:Similar Particle Assembly)モデルの開発
(Kuwagi et al., 2004)
- ・ 粒子間付着力、伝熱、反応に対する構成方程式で
確立されているものは非常に少ない



温度場解析で最も必要となる
粒子間伝熱の構成方程式の確立



For fluid

Continuity equation

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon \mathbf{u}) = 0$$

Momentum equation

$$\rho_f \frac{\partial (\varepsilon \mathbf{u})}{\partial t} + \rho_f (\mathbf{u} \cdot \text{grad})(\varepsilon \mathbf{u}) = -\varepsilon \text{grad } p - \mathbf{f}_i + \varepsilon \rho_f \mathbf{g}$$

$$\mathbf{f}_i = 150 \frac{(1-\varepsilon)^2}{\varepsilon} \frac{\mu_f (\mathbf{u} - \bar{\mathbf{v}})}{d_p^2} + 1.75 \frac{\rho_f (1-\varepsilon) (\mathbf{u} - \bar{\mathbf{v}}) |\mathbf{u} - \bar{\mathbf{v}}|}{d_p} \quad (\varepsilon < 0.8)$$

$$\mathbf{f}_i = \sum_1^n \mathbf{F}_p \quad (\varepsilon \geq 0.8)$$

For a particle

Momentum equation

$$m \frac{d\mathbf{v}}{dt} = -m\mathbf{g} + \mathbf{F}_{pi} + \mathbf{F}_n + \mathbf{F}_t + \mathbf{F}_c$$

$$I \frac{d\omega}{dt} = \mathbf{F}_t r_p$$

$$\mathbf{F}_{pi} = \frac{\mathbf{F}}{\varepsilon n} + \frac{\rho_f (1-\varepsilon) \mathbf{g}}{n} \quad (\varepsilon < 0.8)$$

$$\mathbf{F}_{pi} = \frac{\pi}{8} C_D' \rho_f \varepsilon^2 (\mathbf{u} - \bar{\mathbf{v}}) |\mathbf{u} - \bar{\mathbf{v}}| d_p^2 \quad (\varepsilon > 0.8)$$

$$C_D' = \varepsilon^{-4.65} C_D \quad C_D = \frac{24}{\text{Re}} (1 + 0.15 \text{Re}^{0.687}) \quad (\text{Re} < 1000)$$

$$C_D = 0.44 \quad (\text{Re} \geq 1000)$$

Basic Equations for Simulation

Normal and tangential component of $F_{\text{collision}}$ and F_{wall}

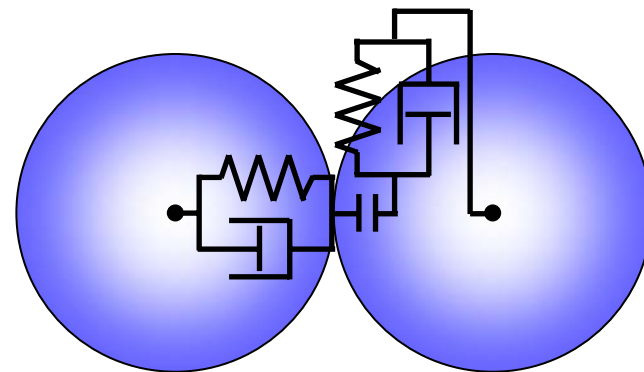
$$\mathbf{F}_n = k_n \Delta \mathbf{x}_n - \eta_n \frac{d\mathbf{x}_n}{dt}$$

$$\mathbf{F}_t = \mu |\mathbf{F}_n| \frac{\mathbf{x}_t}{|\mathbf{x}_t|} \quad |\mathbf{F}_t| > \mu |\mathbf{F}_n|$$

$$\mathbf{F}_t = k_t \Delta \mathbf{x}_t - \eta_t \frac{d\mathbf{x}_t}{dt} \quad |\mathbf{F}_t| \leq \mu |\mathbf{F}_n|$$

$$\eta = 2\gamma \sqrt{km} \quad \gamma = \frac{(\ln e)^2}{(\ln e)^2 + \pi^2}$$

$$\mathbf{F}_f = \mu_f \frac{A \mathbf{v}_t}{h}$$



バネ-ダッシュポットで衝突力をモデル化

Soft Sphere Model

Energy balance

Gas phase :

$$\frac{\partial(\varepsilon T_g)}{\partial t} + \frac{\partial(\varepsilon u_i T_g)}{\partial x_i} = \frac{1}{\rho_g c_{p,g}} Q_g$$

Particle :

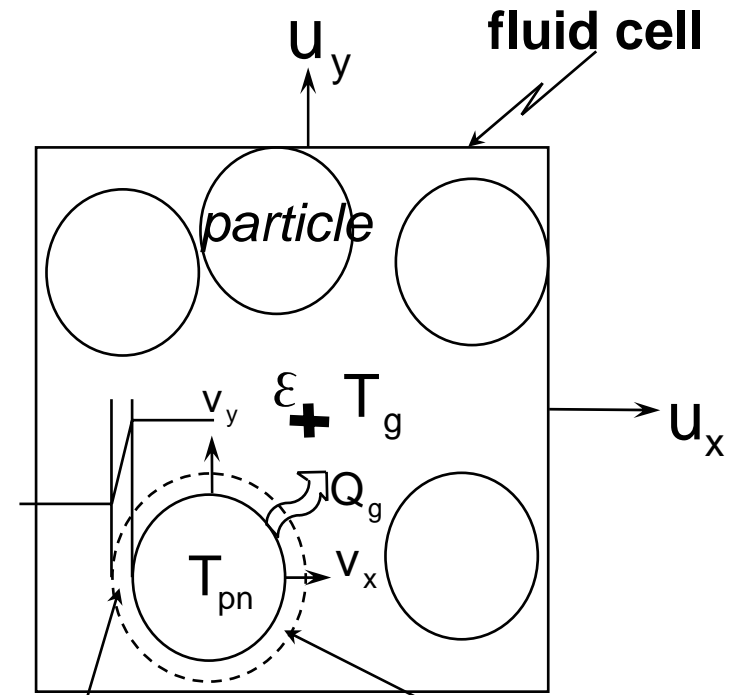
$$V_p c_{p,p} \rho_p \frac{dT_p}{dt} = R_p (-\Delta H_r) - h_p (T_p - T_g) S$$

$$Q_g = \frac{6(1-\varepsilon)}{d_p} \langle h_p (T_p - T_g) \rangle$$

$$R_p = k \exp\left(\frac{E}{RT_p}\right) w_c P_r$$

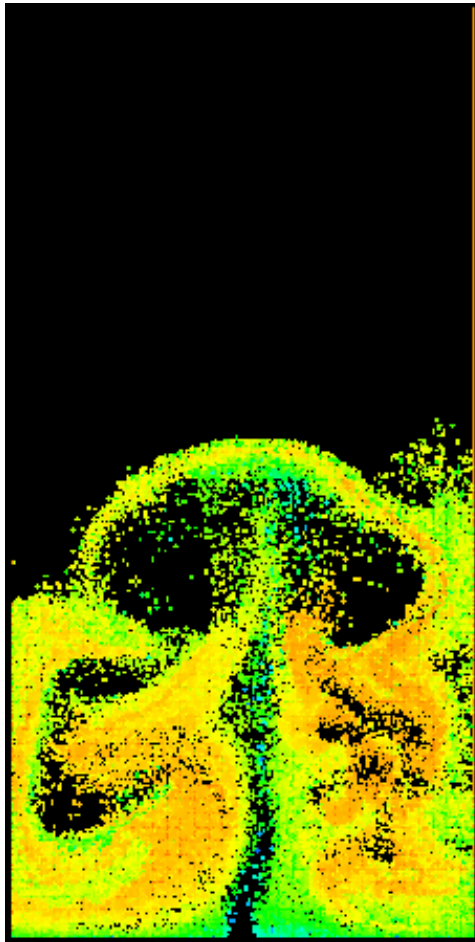
$$Nu = 2.0 + 0.6 Pr^{\frac{1}{3}} Re_p^{\frac{1}{2}} \quad \text{(Ranz-Marshall equation)}$$

$$Nu = h_p d_p / k_g \quad Pr = c_{p,g} \mu_g / k_g \quad Re_p = |u-v| \rho_g d_p / \mu_g$$

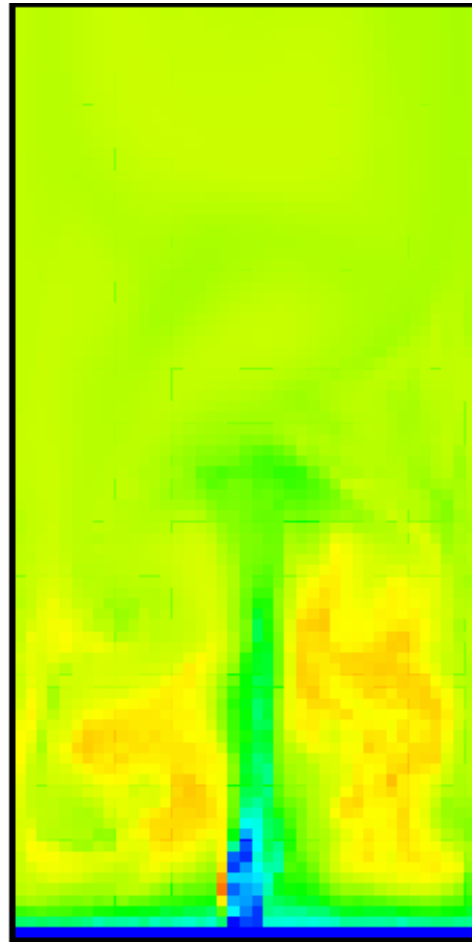


heat transfer coefficient h_{pn} external gas film (is different for each particle)

Gas phase olefin polymerization (Kaneko et al, 1999)



Particle temp.



Gas temp.

Ethylene polymerization

$$d_p = 1.0 \text{ mm}$$

$$\rho_p = 717 \text{ kg/m}^3$$

$$\rho_g = 20.44 \text{ kg/m}^3$$

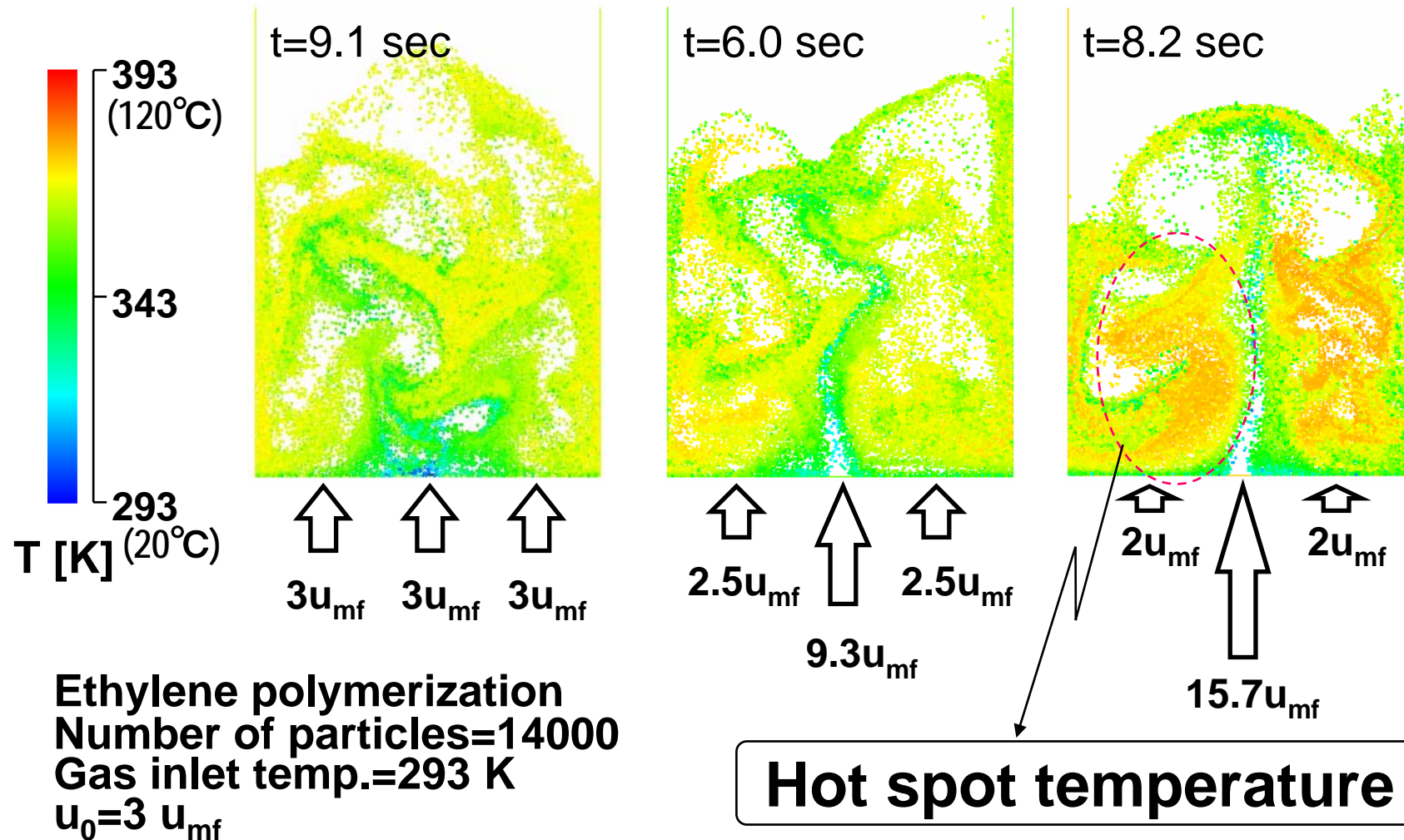
$$u_0 = 0.303 \text{ m/s}$$

$$\text{Number of particles} \\ = 14,000$$

Gas phase olefin polymerization (Kaneko et al, 1999)

Particle circulation

(artificially generated by feeding gas nonuniformly from distributor nozzles)

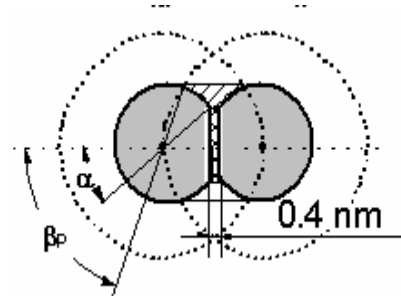


Gas phase olefin polymerization (Kaneko et al, 1999)

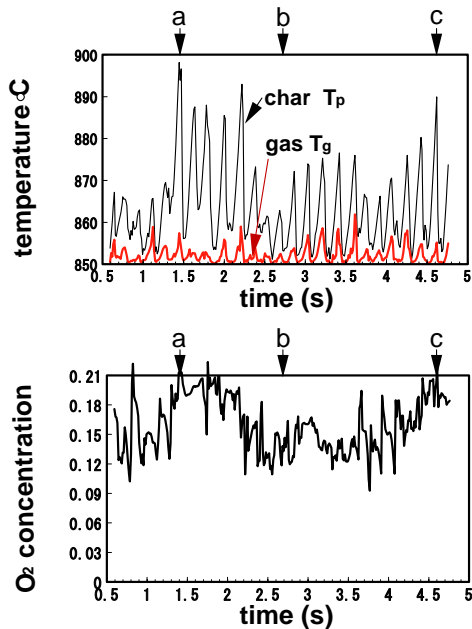
DEMシミュレーション結果(Rong&Horio,1999)

仮定

- ・ 粒子周りの境界膜
- ・ 粒子-粒子接触時の粒子間における接触膜(0.4nm)



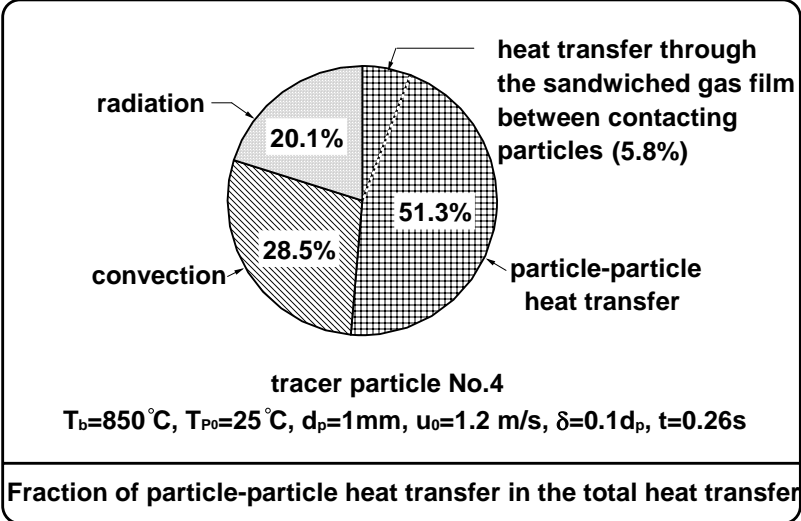
結果



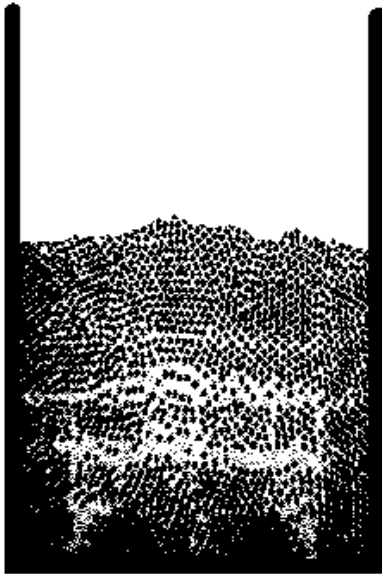
$C_{O_2} = 0.21$
 $T_{b0} = 850\text{ }^\circ\text{C}$
 $T_{p0} = 850\text{ }^\circ\text{C}$
 $T_{g0} = 850\text{ }^\circ\text{C}$
 $d_p = 1\text{ mm}$
 $u_0 = 1.2\text{ m/s}$
char No.3

Relationship between char temperature and gas temperature / oxygen concentration

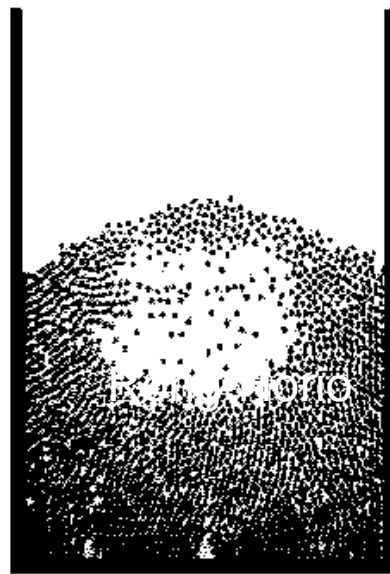
ガスの詳細な温度分布 粒子の温度変化



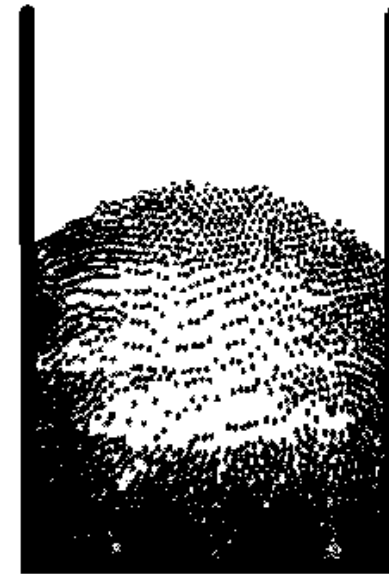
Combustion /Combustion of Small Char



(a) $t=1.432$ s



(b) $t=2.722$ s



(c) $t=4.618$ s

Snapshots of fluidization (simulation results)

DEM Simulation Result (Morikawa et al.,2003.)

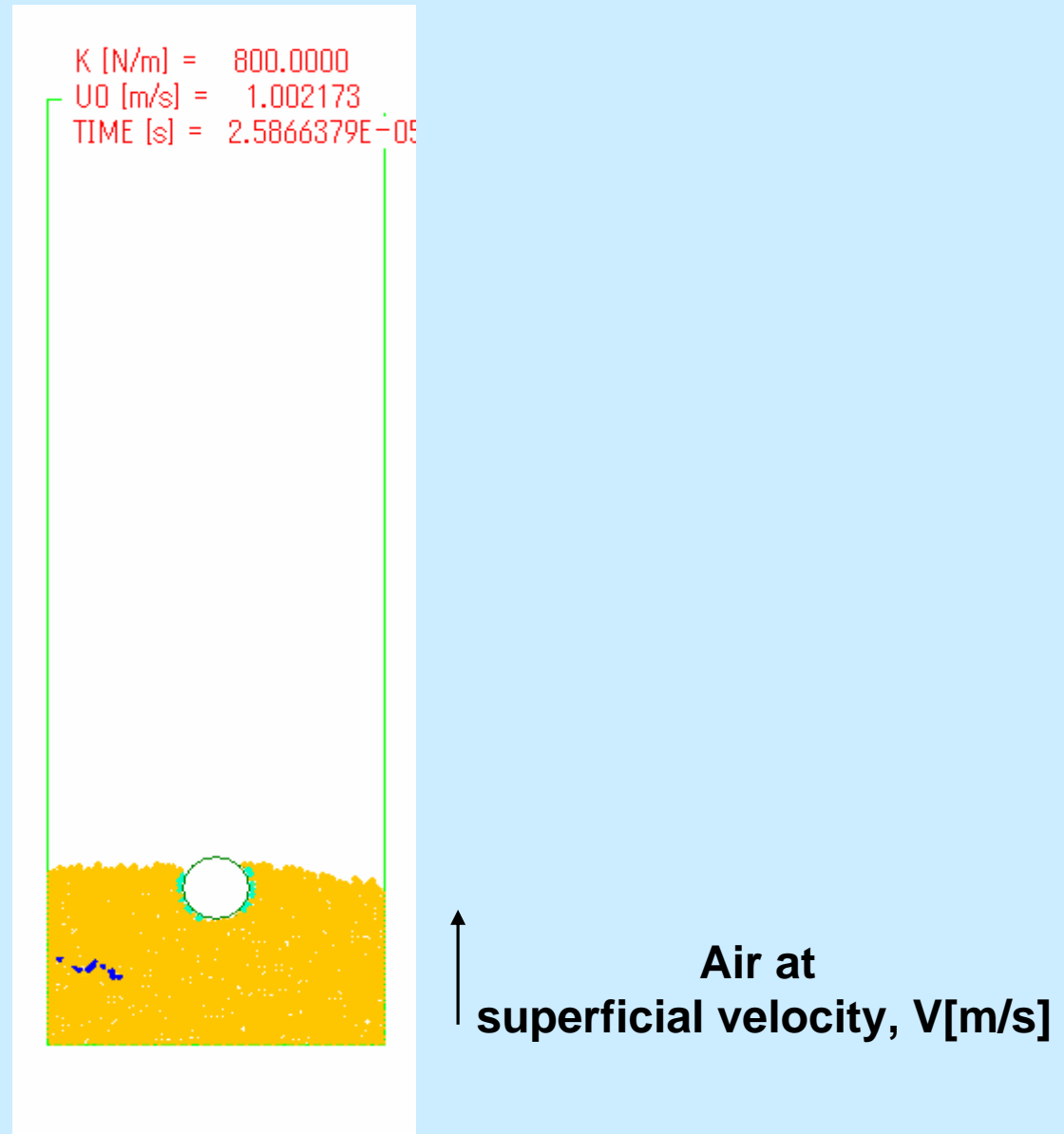
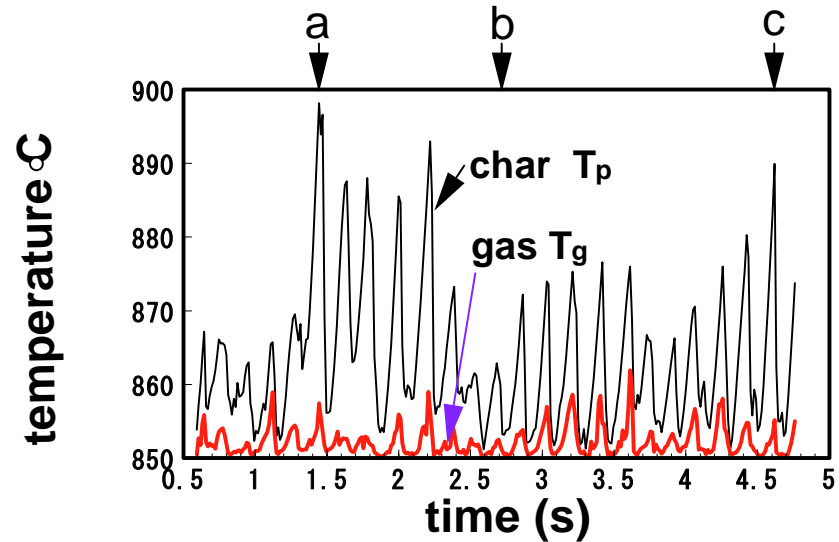


Fig. 1 Fluidized bed with immersed heat exchanger tube

Combustion /Combustion of Small Char



$C_{O_{20}}=0.21$

$T_{b0}=850\text{ }^{\circ}\text{C}$

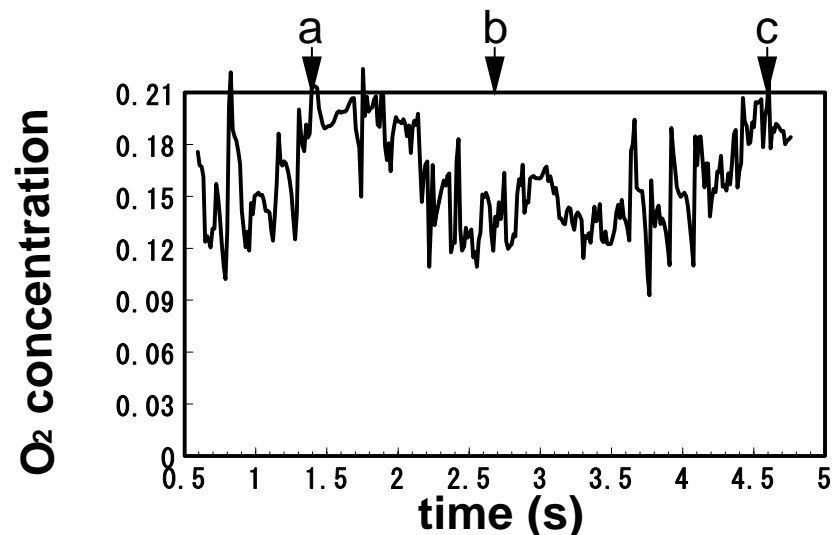
$T_{p0}=850\text{ }^{\circ}\text{C}$

$T_{g0}=850\text{ }^{\circ}\text{C}$

$d_p=1\text{ mm}$

$u_0=1.2\text{ m/s}$

char No.3



**Relationship between char temperature
and gas temperature / oxygen concentration**

1. 研究背景

研究の必要性

粉粒体プラントの開発・設計…数値シミュレーションが大きく寄与

現在の汎用解析ソフト

粉粒体をオイラー的に取り扱う二相流モデルがほとんど
粒子付着力、伝熱、反応を組み込むことは非常に難しい
事前のトラブル回避など開発リスクの低減は図れない

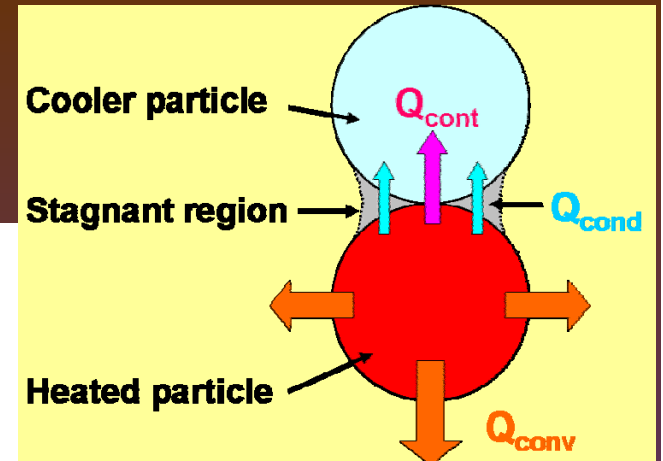
汎用解析ソフト用のDEM

温度場や反応場の解析の際、必要となる**粒子間伝熱の構成方程式**の確立は必要
不可欠



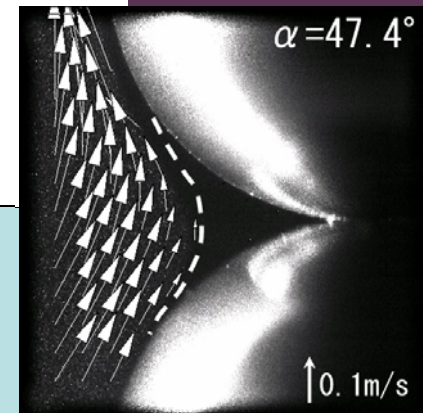
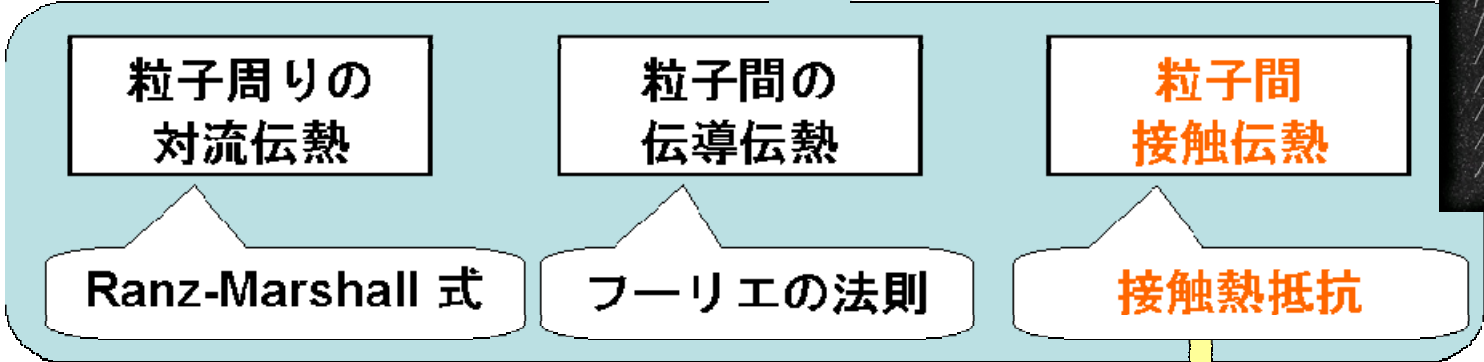
新規粉粒体プロセス開発に大きく寄与

2. 研究の概要



離散要素法(DEM)

構成方程式
粒子間付着力、**伝熱**、反応



レーザー顕微鏡で直接測定

接触面積?

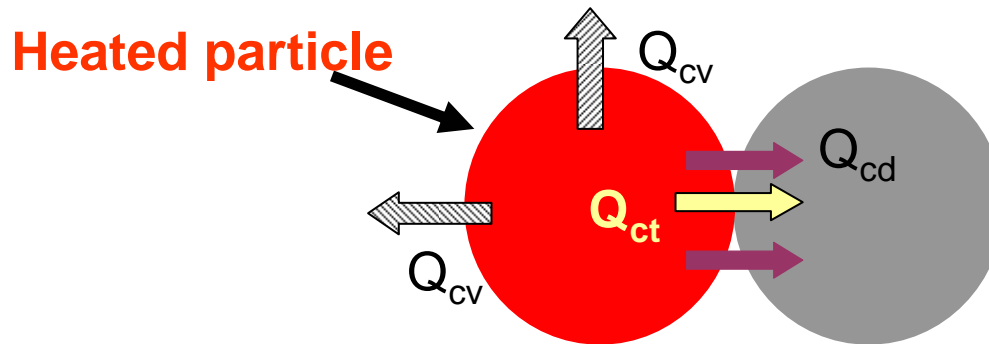
無次元化

構成方程式の
確立

これまでの研究

(1) 粒子周りの伝熱

- ・ 対流伝熱 ← Ranz&Marshall式
- ・ 伝導伝熱 ← フーリエの法則
- ・ **接触伝熱** ← 接触熱抵抗モデル？



(2) 微小時間の伝熱測定 ← 熱抵抗と電気抵抗のアナロジ

熱流束	↔	電流
温度差	↔	電圧
熱抵抗	↔	電気抵抗

微小時間の電流測定



伝熱量の推算

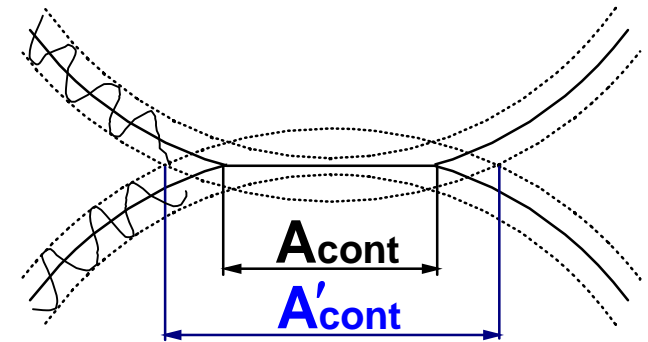
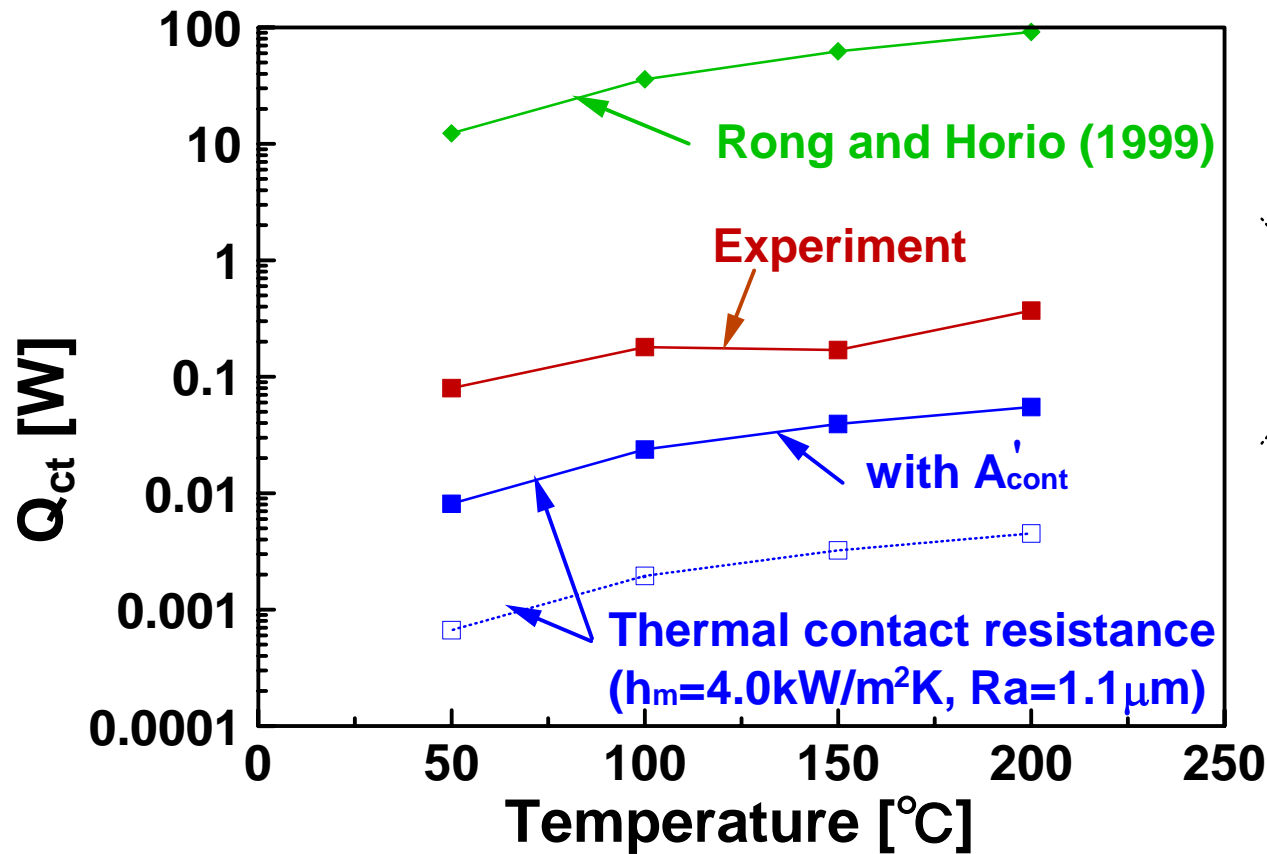
(1) 接触熱抵抗モデル

$$Q_{\text{ct}} = A_{\text{cont}} h_m (T_{\text{high}} - T_{\text{low}})$$

接触応力と接触熱抵抗値($1/h_m$)の関係
(Tomimura et al., 2000), (Zhang et al., 2002)

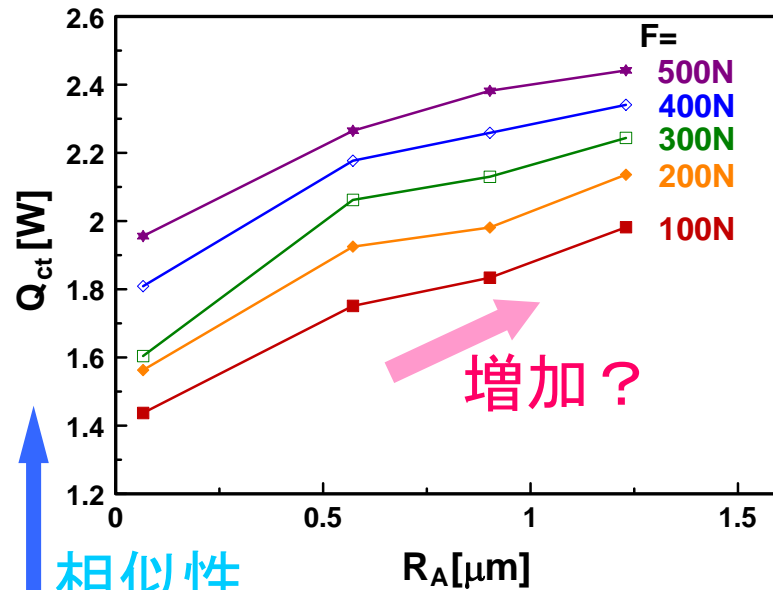
$$\begin{aligned} h_m &= 12\rho_m^{0.4} & (R_A=1.1\mu\text{m}) \\ &= 8\rho_m^{0.3} & (R_A=2.2\mu\text{m}) \end{aligned}$$

(1) 接触熱抵抗を考慮した接触伝熱

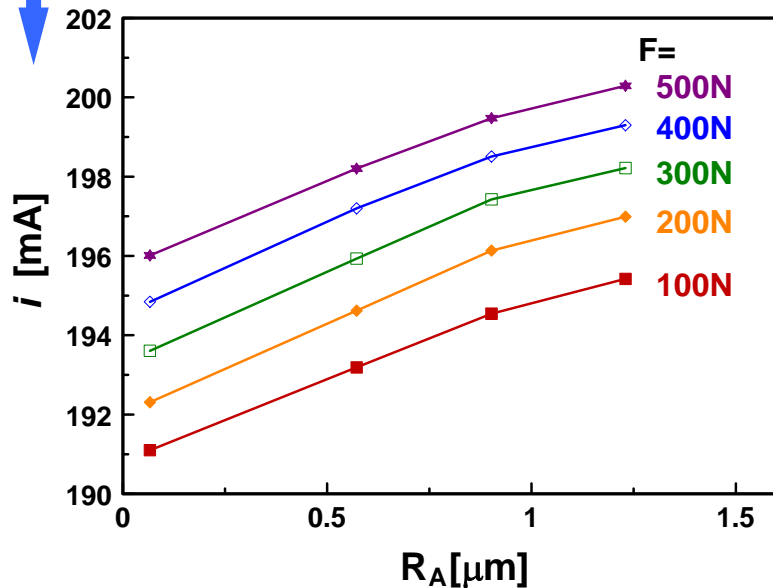


マイクロレベルでの表面状態を考慮することにより、正確に推算できる可能性

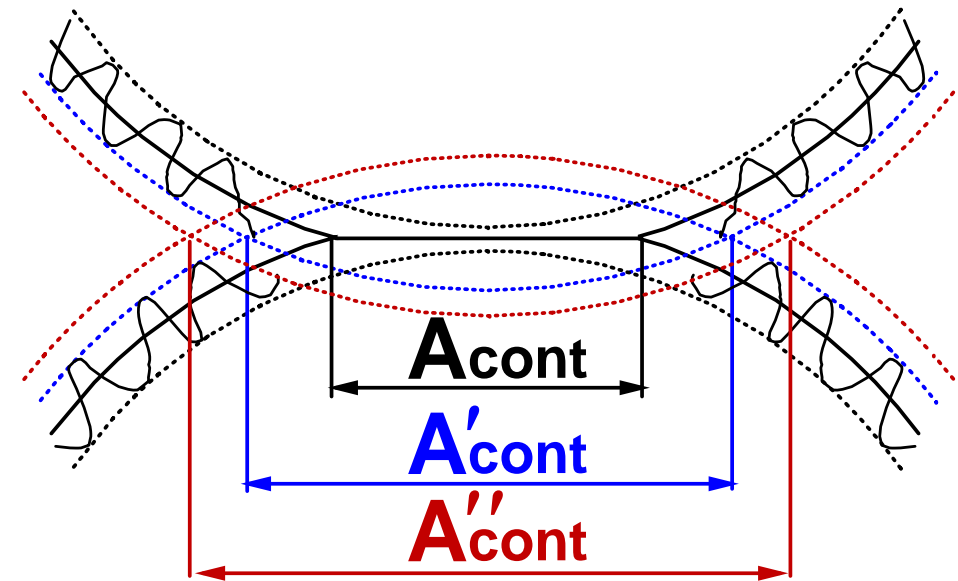
(2) 接触伝熱量に及ぼす表面粗さの影響



相似性



粗さが大きいほど伝熱量大
→ 一般的な傾向と逆



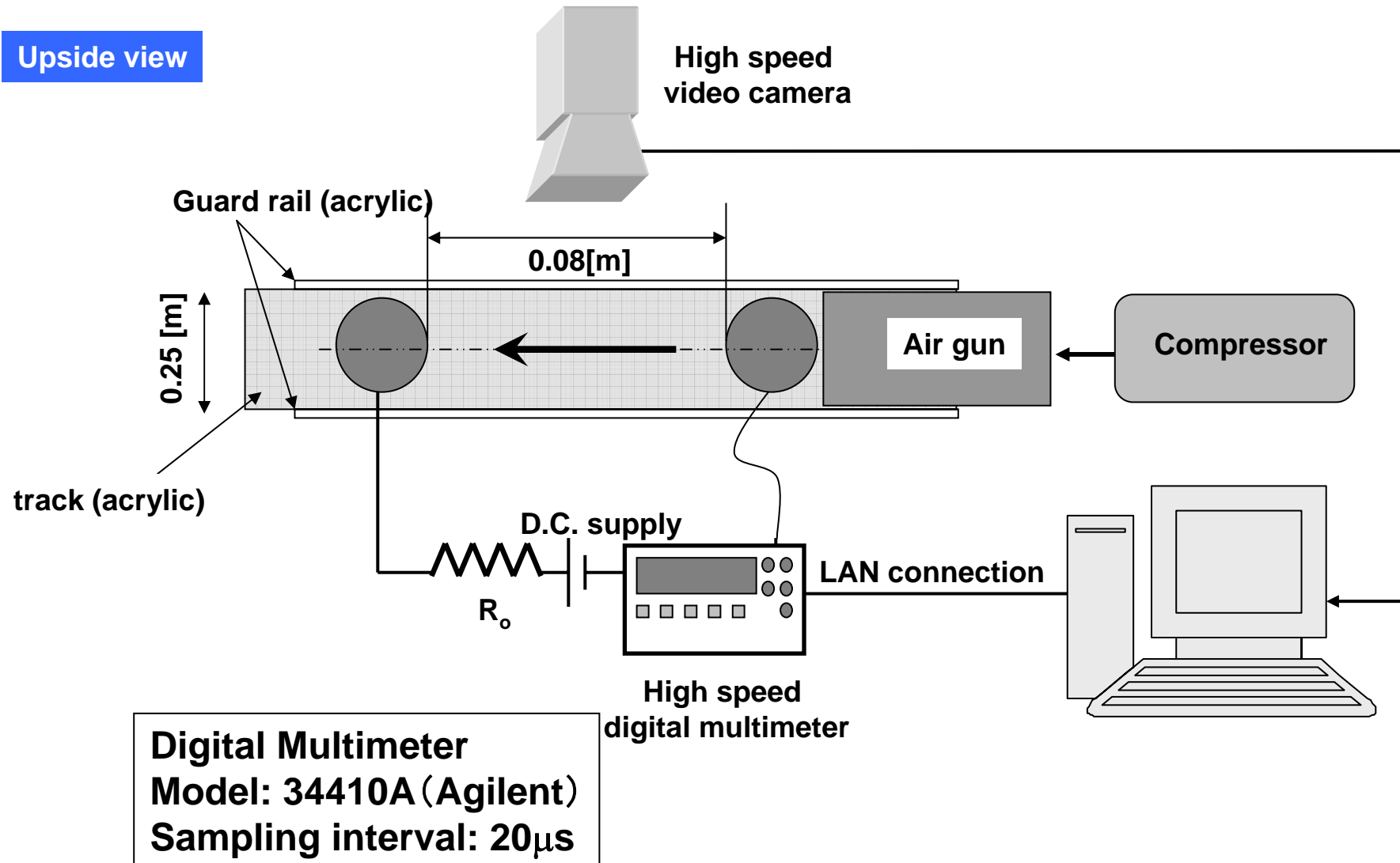
接触面積増大の効果が
熱抵抗増大の効果を上回った

実験

- (1) 衝突時の粒子間接触伝熱量(電流)の測定 (表面粗さの影響を検討)
- (2) 接触状態の粒子の表面状態の観察 (接触面積に及ぼす表面粗さの効果のモデルの検証)

実験(1) 粒子衝突時の電流測定

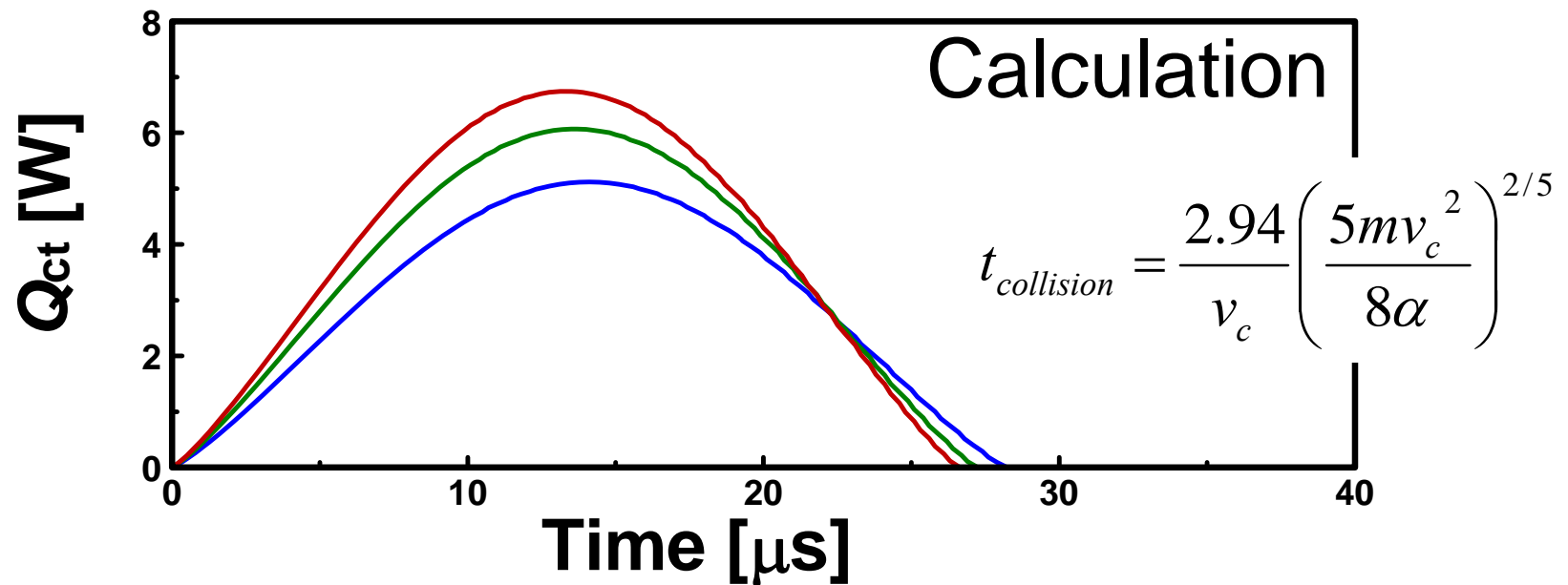
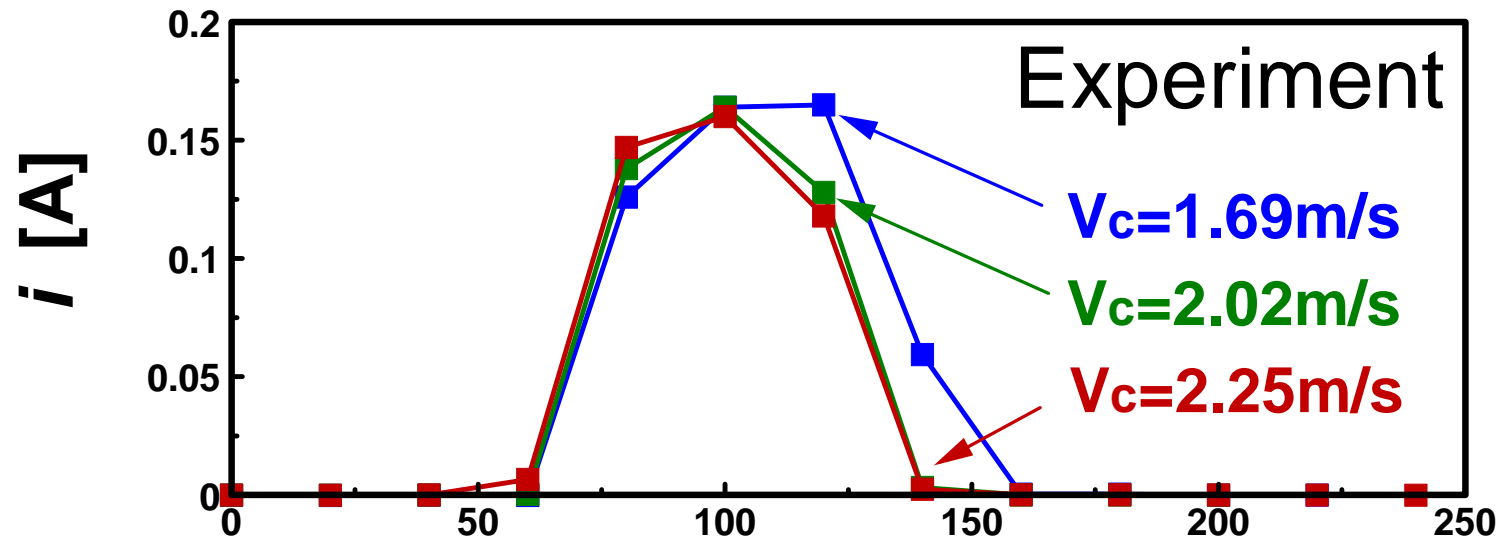
Upside view



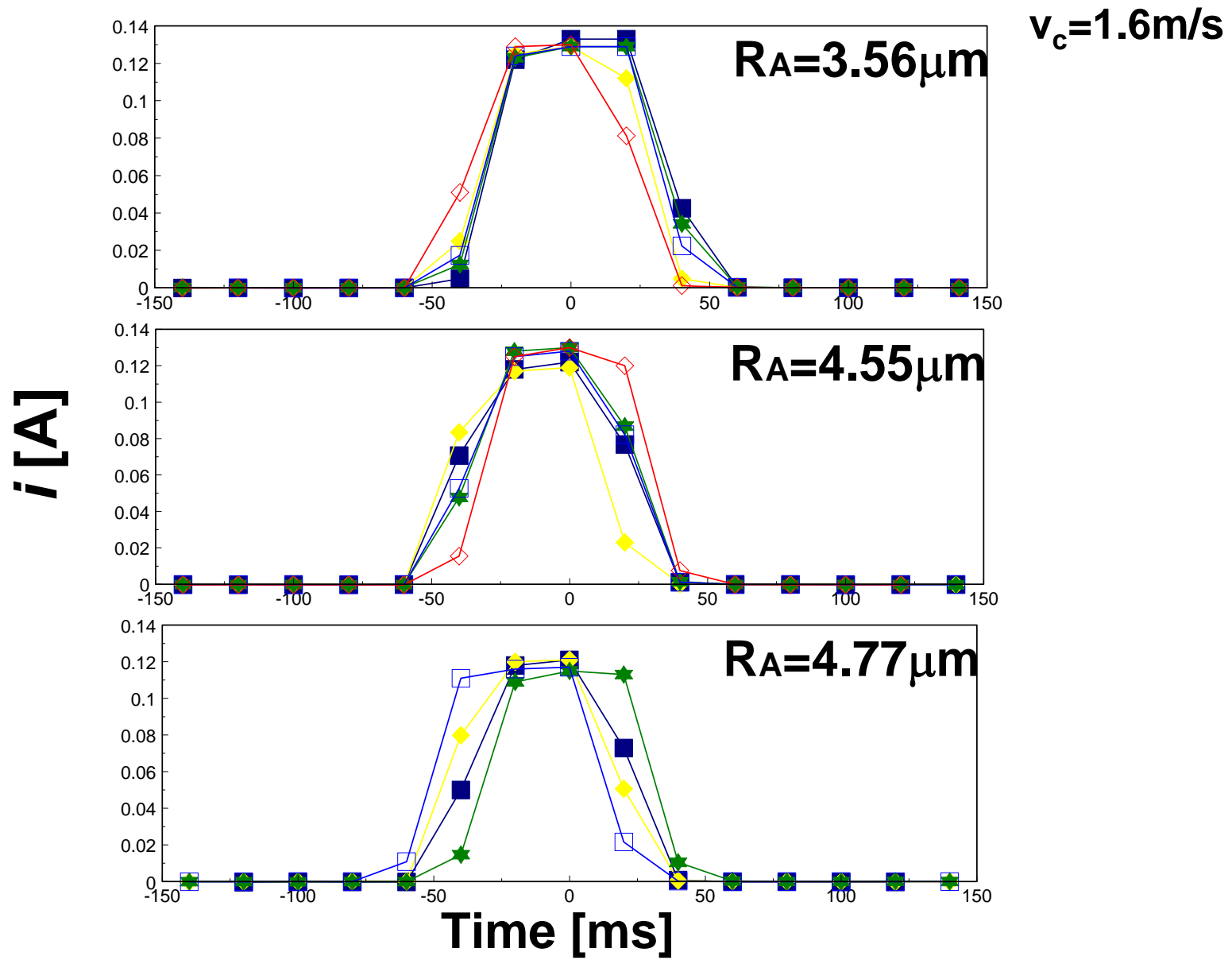
実験条件

球の直径 (SUS304) : d_p [m]	0.0191
質量 : m [kg]	2.82×10^{-2}
比熱 : c [J/kg.K]	0.5×10^3
ポアソン比 : ν	0.305
ヤング率 : E [GPa]	184.365 at 150°C
加熱粒子温度 : T [°C]	150
印加電圧 : V [V]	6.0
衝突速度 : v_c [m/s]	1.69, 2.02, 2.25
表面粗さ : R_A [μm]	3.56, 4.55, 4.77

実験(1) 粒子衝突時の電流と接触伝熱



実験(1) 表面粗さが接触時間に及ぼす影響

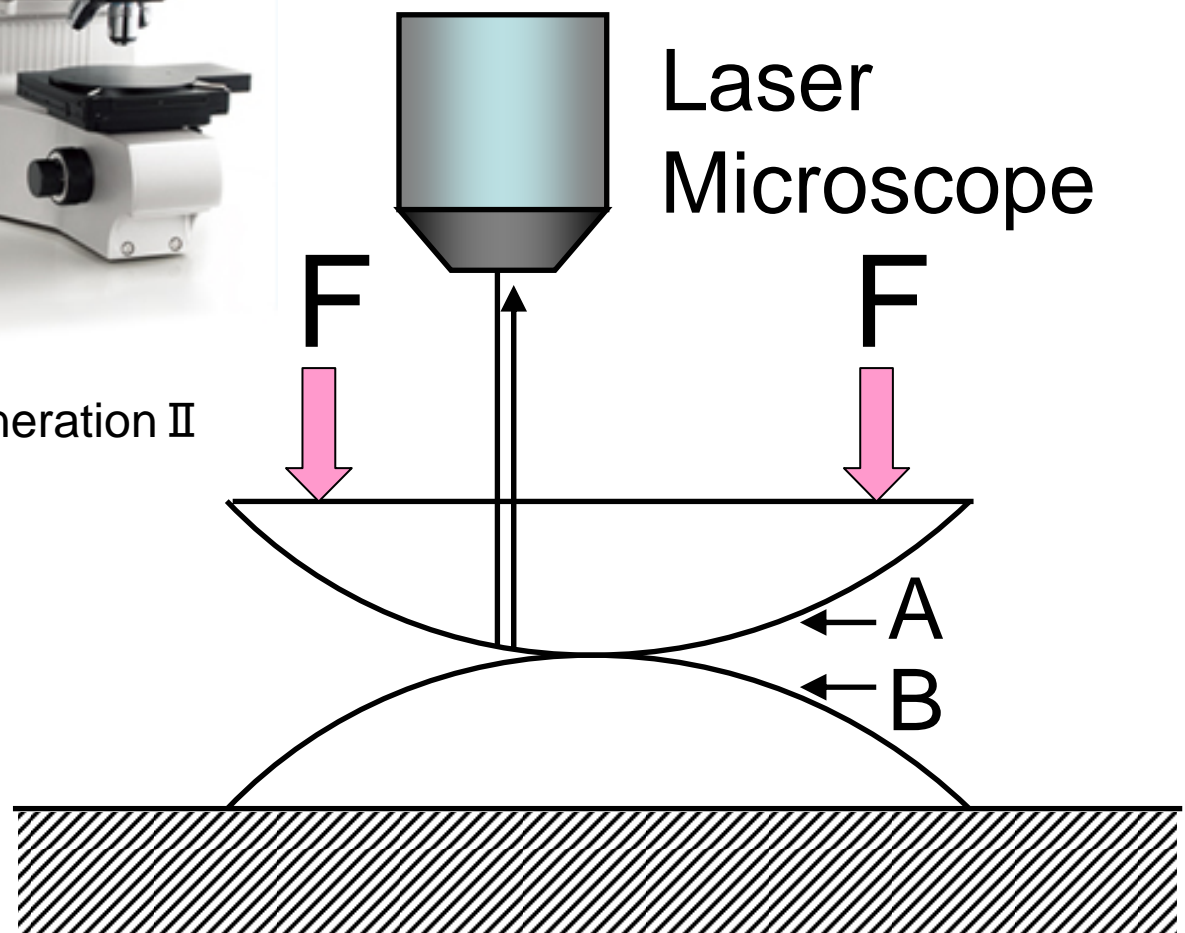


実験(2) 平均表面粗さ R_A 測定と表面形状測定

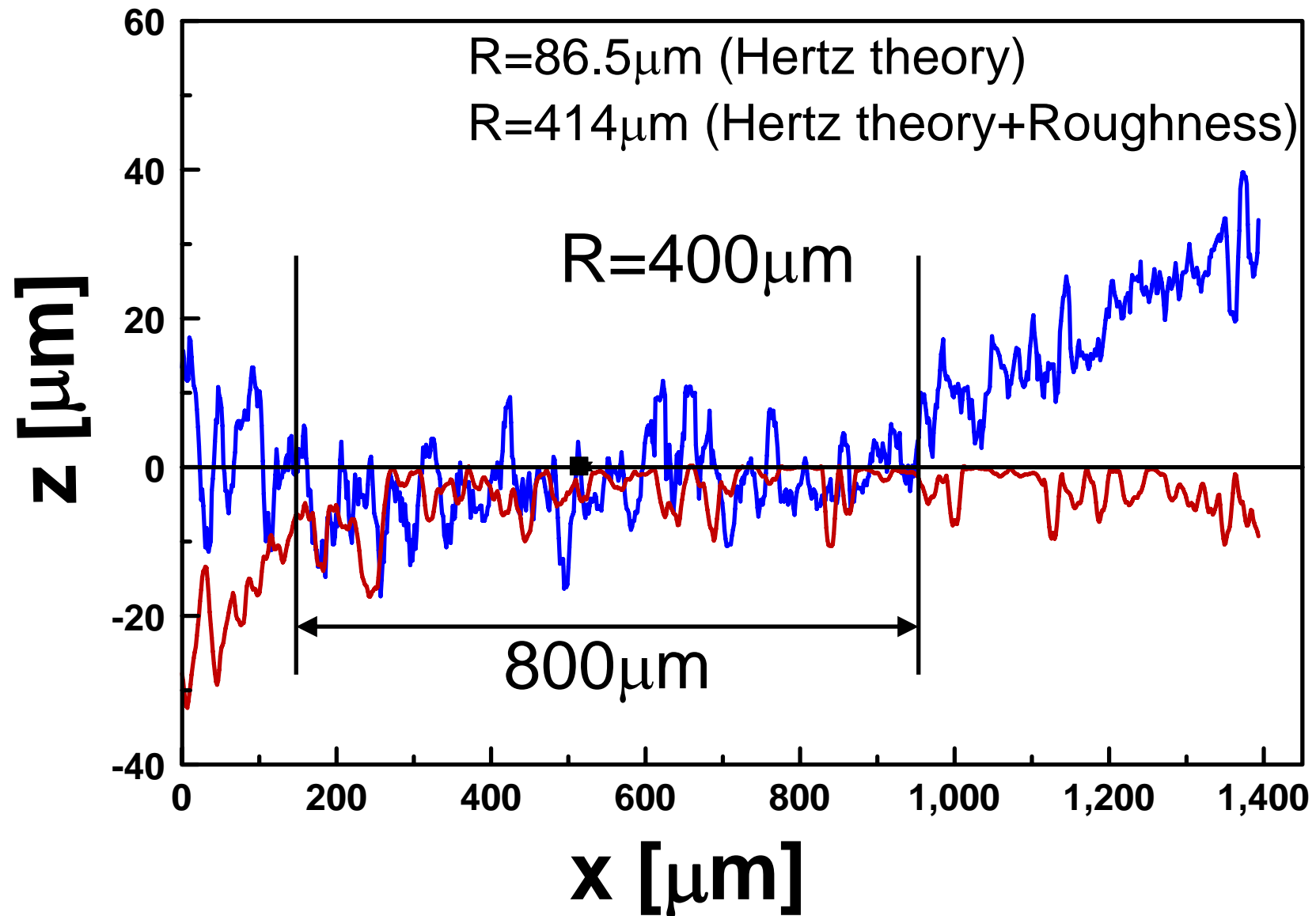


(株)キーエンス・VK-9500 Generation II

接触時の表面形状測定



実験(2) レーザ顕微鏡による接触部分の観察



結言

- 粒子衝突時の電流測定により、衝突時間はHertzの接触理論から計算される値の3倍となり、大きな差が生じた。
- 本解析条件下では、衝突時間に表面粗さが及ぼす影響は見られなかった。
- レーザ顕微鏡を用いた接触面積の測定から表面粗さが接触面積に与える効果のモデルの妥当性が確認できた。



既往の研究による伝熱量の推算式

$Q_{conv.}$ by Ranz & Marshall(1952)

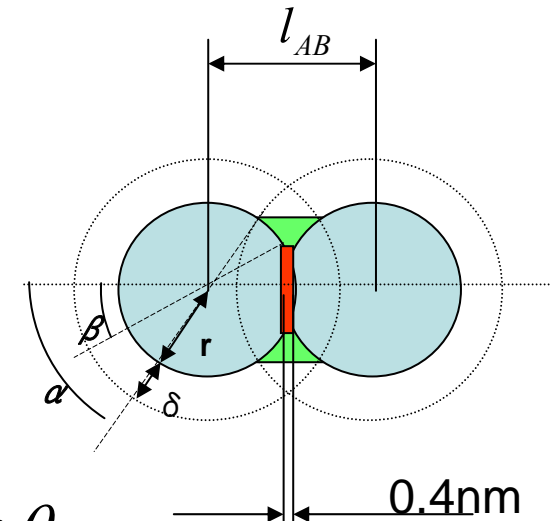
$$\begin{cases} Q_{conv} = h_p A_p (T_p - T_g) & Nu_p = 2.0 + 0.6 Re_p^{1/2} Pr^{1/3} \\ h_p = \frac{Nu_p \lambda_g}{d_p} \end{cases}$$

$Q_{conv.}$ by 高松ら(1987)

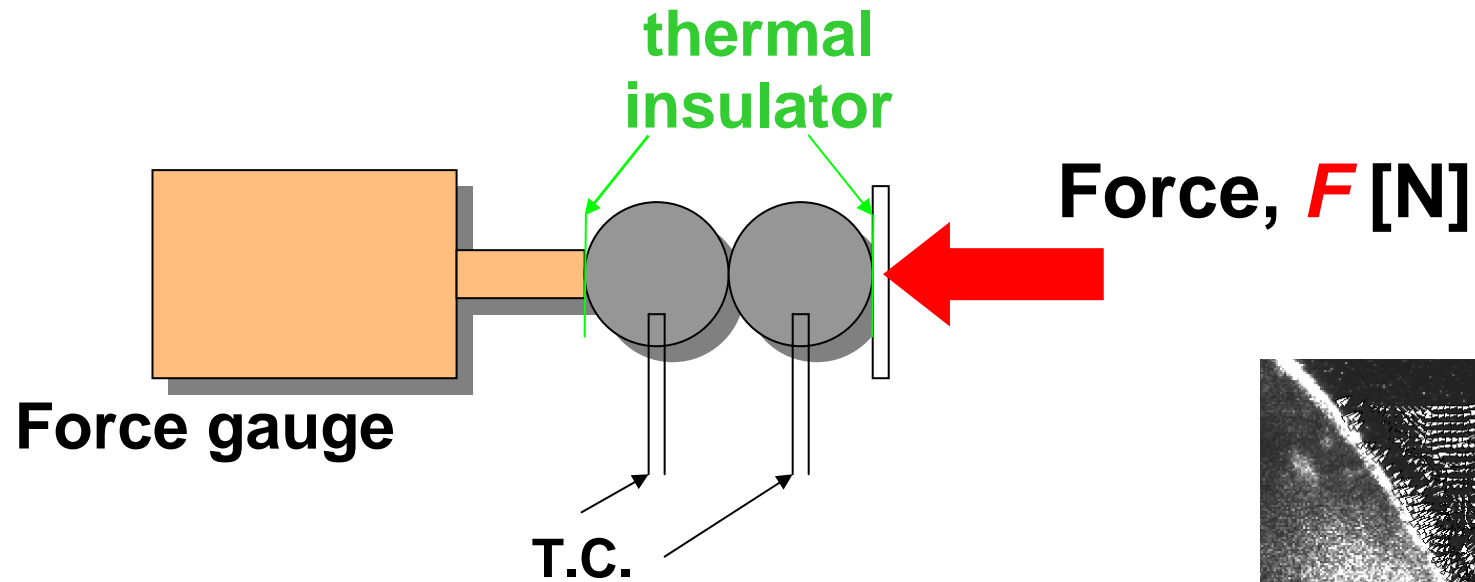
$$\begin{cases} Q = qA & Nu = qd / \lambda(\theta_1 - \theta_2) \\ Nu = 2 + 0.66 C(Pr)^{m_1} Ra^{m_2} & m_1 = 0.25 + \frac{0.25}{1 + 0.33 Ra^{0.2}} \quad m_2 = 0.25 + \frac{0.75}{1 + 4 Ra^{0.14}} \\ C(Pr) = \frac{Pr}{2.4 + 4.9 Pr^{0.5} + 5 Pr} \\ Ra = \{ g \beta (\theta_1 - \theta_2) d^3 \rho^2 / \mu^2 \} Pr \end{cases}$$

$Q_{cont.}$ and $Q_{cond.}$ by Rong & Horio(1999)

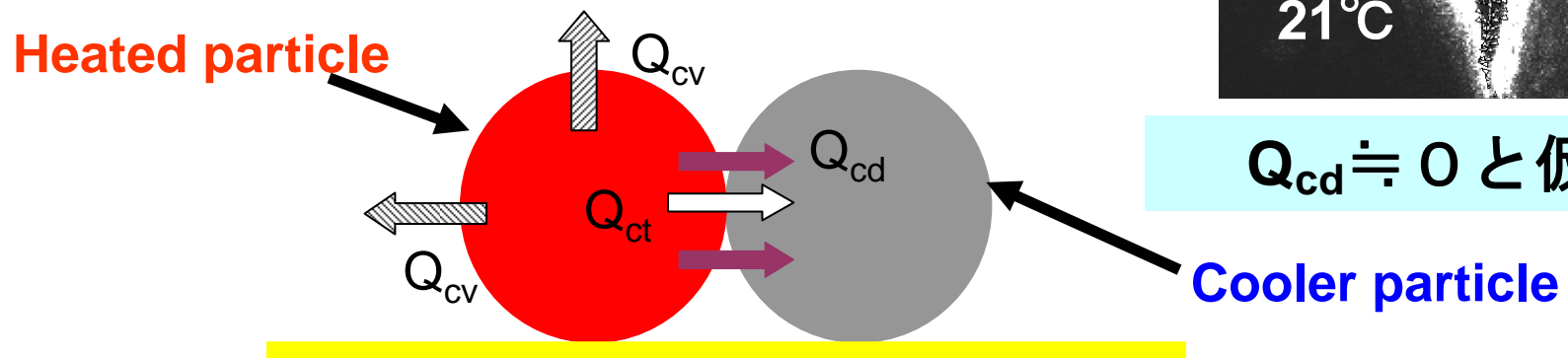
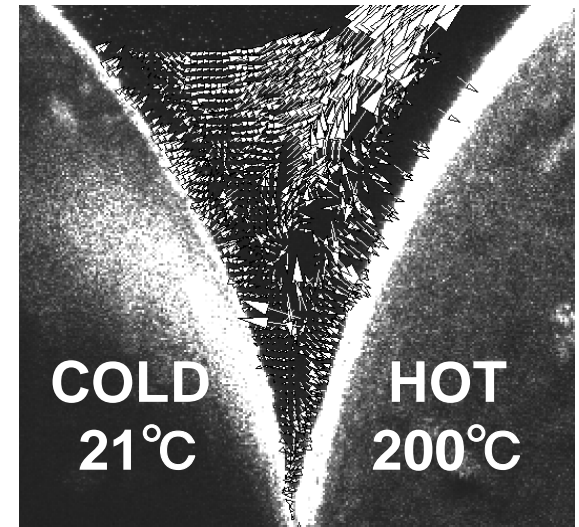
$$(l_{AB} \leq d_p) \begin{cases} Q_{cd} = -\lambda_g \frac{T_p(A) - T_p(B)}{4.0 \times 10^{-10}} \pi (r \sin \beta)^2 \\ -\lambda_g (T_p(A) - T_p(B)) \int_{\beta}^{\alpha} \frac{2\pi r \sin \theta}{l_{AB} - 2r \cos \theta} d(r \sin \theta) \end{cases}$$



実験1: 伝熱測定



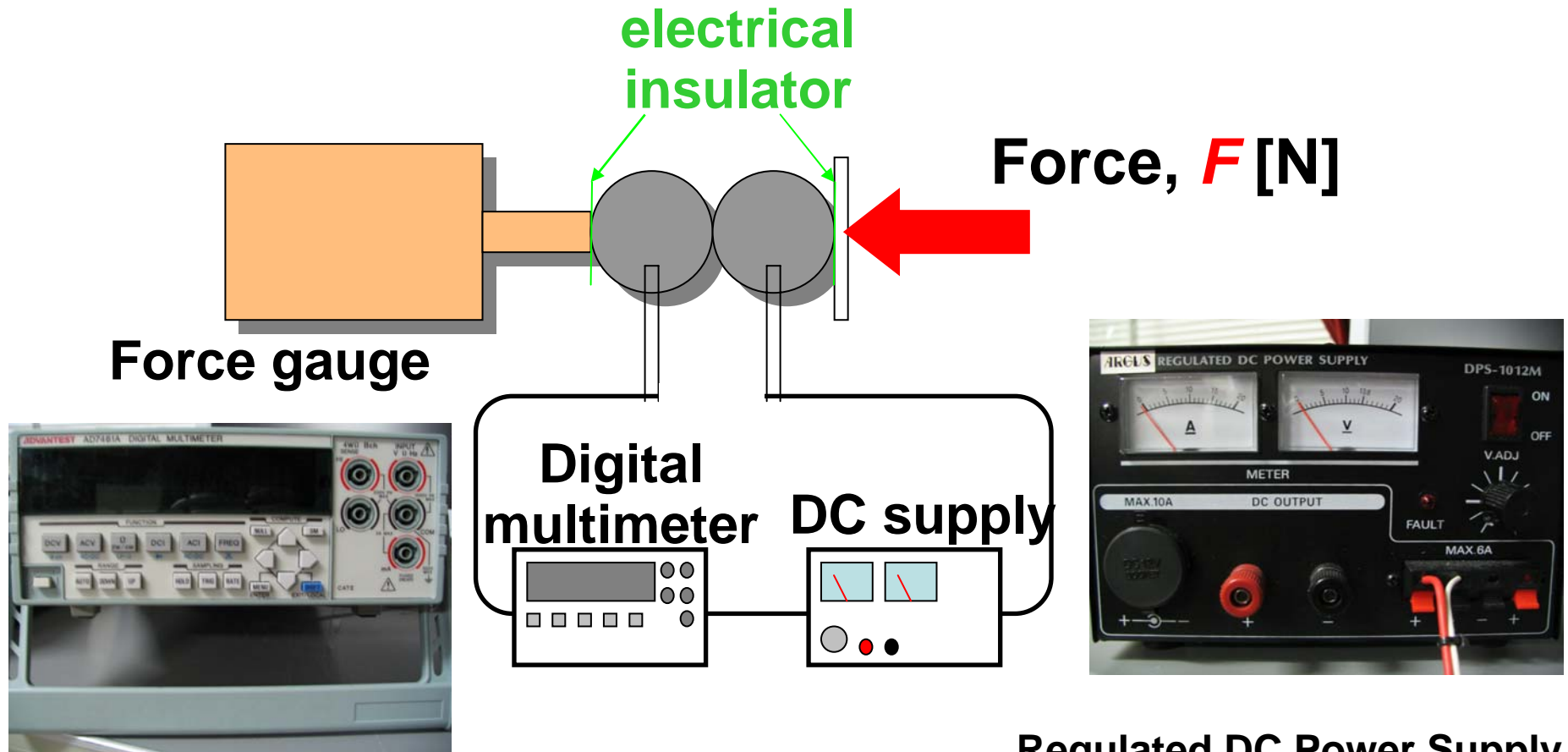
図：接触伝熱測定実験



$Q_{cd} \doteq 0$ と仮定

図：伝熱モデル

実験2: 電流測定



デジタルマルチメータ
型式: AD7461A (ADVANTEST)
サンプリング速度: $50\mu\text{s}$
サンプリング数: 1000回

Regulated DC Power Supply
型式: DPS-1012M (ARGUS)
設定電圧値: 6V

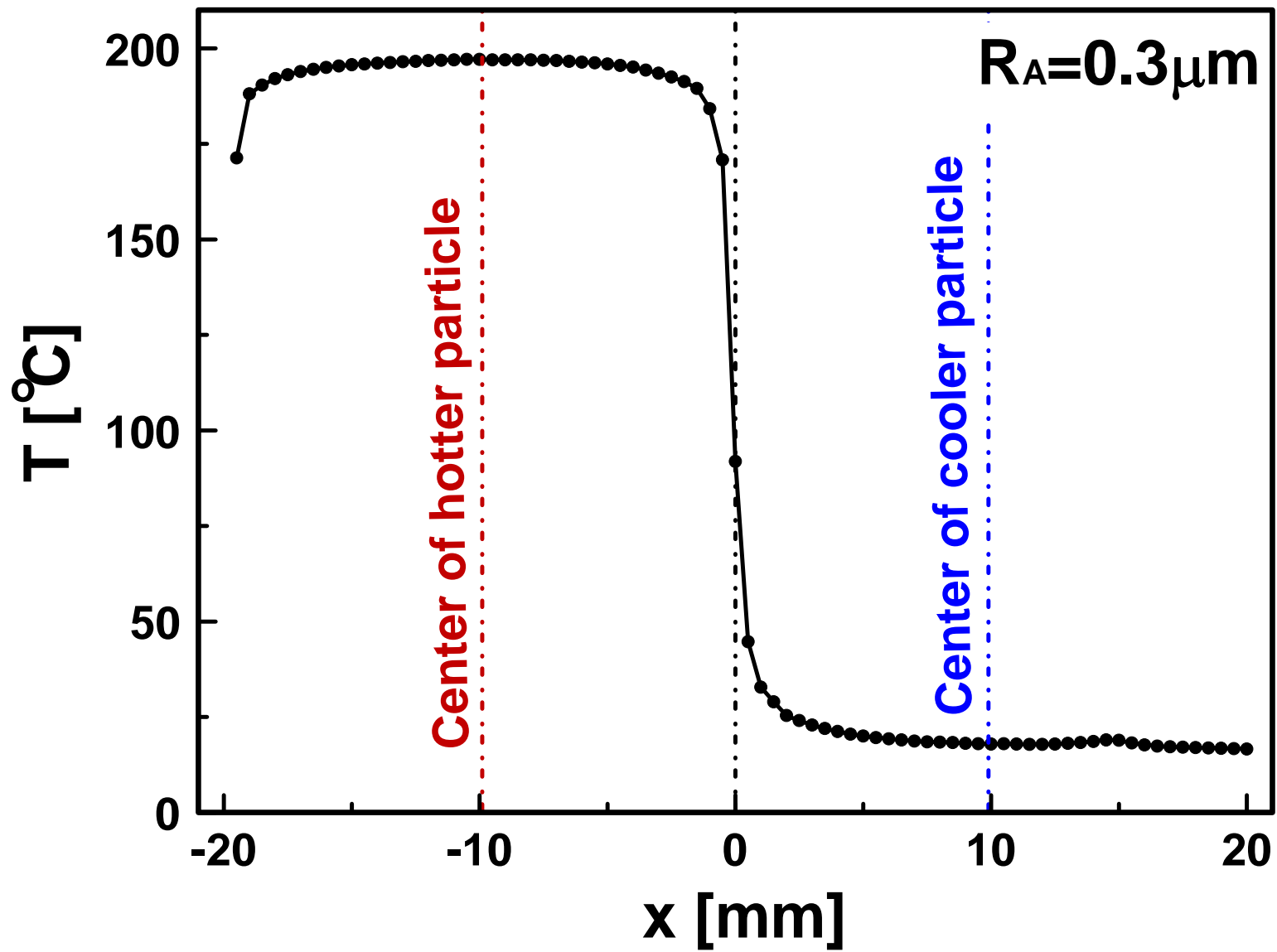


Fig. 7 Temperature distribution at $T_h = 197.1^\circ\text{C}$