

# 粒子法による粉体シミュレーションに関する研究

木村 昭穂<sup>†</sup>

## Simulation of Powder Behavior Using the Particle Method

Akio KIMURA<sup>†</sup>

### ABSTRACT

In this study, we investigated the powder filling process by means of numerical simulation using the particle method. Recently, numerical simulation is coming into wider use in many different fields. Numerical simulations are particularly important in ascertaining and predicting conditions in areas that are inaccessible to people. Accordingly, in the present study we applied this approach to the simulation of powder behavior as an application example using the particle method that is suitable for ascertaining phenomena at the particle level. To ascertain the filling state of the powder, we used the Voigt model, which expresses the particle-particle interaction force, and calculated the increase in the relative displacement of the particles and the force acting on the particles, taking the normal direction component and shear direction component into consideration. The results indicate that it is possible to simulate the situation of filling powder particles.

**Key Words:** *particle method, powder, numerical simulation*

キーワード: 粒子法, 粉体, 数値シミュレーション

### 1. はじめに

最近の目覚ましい技術の発展に伴い、コンピュータが小型で高速・高性能となりグラフィカルユーザインターフェースがより使いやすくなり、数値シミュレーション等に利用されている。特に、人の近付けない場所のデータを基にした

状況把握や予測のための数値シミュレーションは必要不可欠となっている。例えば、プラズマプロセスのように半導体等の製造過程での原子レベルでの現象把握には、粒子法の様な原子レベルでのシミュレーションが必要となっている。そこで、本研究では粒子レベルで現象の把握に適している粒子法<sup>1), 2)</sup>による適用例として、粉体のシミュレーションへの応用を試みた。粉体が充填する様子を、粒子相互作用力を表わすフオークトモデルを用いて粒子の相対変位増分に伴う回転変位、粒子間作用力は法線方向成分と

---

平成 24 年 1 月 6 日受理

<sup>†</sup>感性デザイン学部感性デザイン学科・准教授

せん断方向成分を考慮して行った。その結果、粉体粒子が充填する様子をシミュレーションでできることが分かった。

についての解析を試みた。

### 3. 粒子法の運動方程式

#### 2. 粒子法について

粒子法は、連続体を有限個の粒子によって表し、連続体の挙動を粒子の運動によって計算する方法である。各粒子は差分法や有限要素法<sup>3,4)</sup>が必要とする、ベクトルポテンシャルや温度、速度、圧力といった変数を保持しながら移動する格子やメッシュを使用しないので、格子やメッシュに関するノウハウを必要としない。また、粒子法と同様に格子やメッシュを使わない方法として分子動力学法<sup>5-8)</sup>がある。

差分法や有限要素法では計算対象の空間を格子やメッシュによって分割し、変数は格子やメッシュ点上に配置される。連続体の挙動を記述する微分方程式の離散化は、格子やメッシュを用いて行われ、格子点やメッシュ点の数の連立代数方程式に変換される。

粒子法や分子動力学法の場合は、微分方程式を代数方程式に離散化するという点では、差分法や有限要素法と同様であるが、離散化の過程に格子を用いないことである。粒子法は、連続体の移動とともに観測者も移動し、粒子は移動する計算点である。しかし、多粒子が関与する実際の物理現象をシミュレートする場合、問題点がある。それは、構成粒子の1個1個に対して運動方程式を適用して解くことによって、構成粒子の運動を追跡するので、粒子数が多くなると計算機の負荷が極めて膨大になることである。 $1\text{cm}^3$  当たりの気体では $10^{19}$  個程度の分子からなっているので、実際の解析対象物の計算をすることは膨大な量の粒子を取り扱わなければならないので非常に困難である。したがって、解析対象とする系の粒子数が制約される。しかし、解析対象の粒子をある程度の大きさの粒子として取り扱い解析を行ってもその現象を把握することができるので、その一例として粉体の充填

粒子群がある方向に流動しているものとし、この中の1個の粒子に着目すると、その着目粒子の運動は周りの接触粒子から受ける力によって左右される。この着目粒子が周りの粒子から受ける接触力 $F$ を刻々と知ることができれば、質量 $m$ をもつ着目粒子の運動はニュートンの運動方程式で表される。この場合接触力 $F$ が分かっているので運動方程式を解くことができるので、粒子の加速度が得られる。それを時間で積分すると粒子の速度 $v$ 、さらに積分すると変位 $u$ が得られ、流動する粒子の運動軌跡が計算できる。この方法で流動する全ての粒子の運動軌跡を得ることによって、粒子群の挙動を表すものとする。

通常の流動粒子群は近接粒子と衝突や摩擦を繰り返しながら流動している。その場合の粒子の接触は弾性的または、非弾性的であったりする。この接触力は色々な方向に作用するので、計算の便宜上、接触2粒子の法線方向とそれに垂直なせん断方向成分に分ける。粒子の相対変位増分や粒子に作用する力は法線方向成分とせん断方向成分を考慮すると式(1)、(2)のように表わされる。

$$m \frac{du^2}{dt^2} + \eta \frac{du}{dt} + Ku = 0 \quad (1)$$

$$I \frac{d\varphi^2}{dt^2} + \eta r^2 \frac{d\varphi}{dt} + Kr^2 \varphi = 0 \quad (2)$$

質量 $m$ をもつ2粒子間に働く力 $F$ による接触粒子の変位を $u$ 、回転変位を $\varphi$ 、弾性係数を $K$ 、粘性係数を $\eta$ 、慣性モーメントを $I$ とする。

一般には1個の粒子の周りに多数の粒子が接触しているので、それら個々の接触点に対して

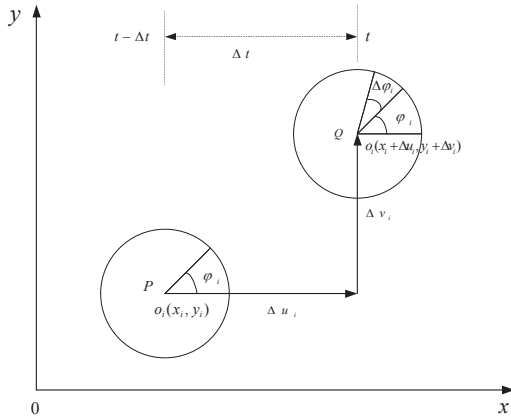


図1 粒子の変位

式(1), (2)が成立する。着目粒子の運動を知るためには接触点数と同じ数の方程式を連立して解かなければならない。この困難を避けるために、実際の計算では式(1), (2)を時間増分  $\Delta t$  で差分近似<sup>2)</sup>して計算する。差分近似の式は、次式のように表わされる。

$$m[u]_t = -\eta[u]_{t-\Delta t} - K[u]_{t-\Delta t} \quad (3)$$

$$I[\varphi]_t = -\eta r^2[\varphi]_{t-\Delta t} - K r^2[\varphi]_{t-\Delta t} \quad (4)$$

新しい時刻  $t$  における加速度  $[u]_t$  は、時刻  $\Delta t$  前の変位と加速度から得られる。新しい時刻  $t$  における加速度  $[u]_t$  を数値積分すると、時刻  $t$  における変位と加速度が得られる。この計算を時間刻み  $\Delta t$  で繰り返すことによって粒子の運動軌跡が計算できる。

#### 4. 粒子間の相対変位増分

粒子  $i$  が時刻  $t - \Delta t$  から時刻  $t$  までの微小時間

$\Delta t$  の間に図1に示す位置  $P(x_i, y_i)$  から  $Q(x_i + \Delta u_i, y_i + \Delta v_i)$  に変位するものとする。このとき変位増分の  $x, y$  成分をそれぞれ  $\Delta u_i, \Delta v_i$  とし、その変位にともなう粒子の回転変位増分を  $\Delta \varphi_i$  で表すことにする。

粒子半径が  $r_i, r_j$  である2つの球形粒子  $i, j$  は、次式で表わされる条件を満たして接触するものとする。粒子は剛体で変形しないので互いに重なりあう事が出来るものとする。

$$r_i + r_j \geq L_{ij} \quad (5)$$

ここで、 $L_{ij}$  は粒子  $i, j$  の中心距離であり、次式のように表わされる。

$$L_{ij} = \sqrt{(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2} \quad (6)$$

粒子  $i, j$  の接触点の位置を識別するために、粒子  $i, j$  を結ぶ共通直線が  $x$  軸となす角度を  $\alpha_{ij}$  とする。角度  $\alpha_{ij}$  と粒子の座標の関係は次式で表わされる。

$$\sin \alpha_{ij} = \frac{(y_j - y_i)}{L_{ij}} \quad (7)$$

$$\cos \alpha_{ij} = \frac{(x_j - x_i)}{L_{ij}} \quad (8)$$

接触する2粒子  $i, j$  の微小時間  $\Delta t$  における相対変位量の法線方向とせん断方向成分は、角度

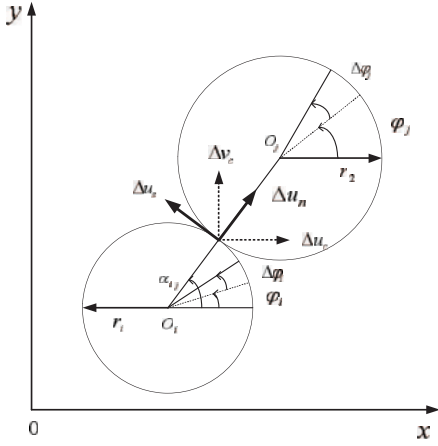


図 2 粒子の接触

$\alpha_{ij}$  を用いると、次式のように表わされる。

$$\begin{aligned} \Delta u_n &= (\Delta u_i - \Delta u_j) \cos \alpha_{ij} \\ &+ (\Delta v_i - \Delta v_j) \sin \alpha_{ij} \end{aligned} \quad (9)$$

$$\begin{aligned} \Delta u_s &= (\Delta u_i - \Delta u_j) \sin \alpha_{ij} \\ &+ (\Delta v_i - \Delta v_j) \cos \alpha_{ij} + (r \Delta \varphi_i + r \Delta \varphi_j) \end{aligned} \quad (10)$$

## 5. 粒子間作用力

粒子間に作用する力を法線方向成分とせん断方向成分に分けて考える。

### (a) 法線方向成分

時刻  $t$  における作用力は、時刻  $t - \Delta t$  の作用力に時間  $\Delta t$  の間の粒子  $i, j$  の相対変位増分、 $\Delta u_n$  による力を加えたものである。相対変位増分  $\Delta u_n$  による力が次式で表わされるものとする。

ただし、添え字  $n$  は法線方向を示す。

$$\Delta e_n = K_n \Delta u_n \quad (11)$$

$$\Delta d_n = K_n \frac{\Delta u_n}{\Delta t} \quad (12)$$

また、時刻  $t$  における 2 粒子間の法線方向弾性力  $[\Delta e_n]_t$  と粘性抵抗力  $[\Delta d_n]_t$  は次式で与えられる。

$$[\Delta e_n]_t = [\Delta e_n]_{t-\Delta t} + \Delta e_n \quad (13)$$

$$[\Delta d_n]_t = \Delta d_n \quad (14)$$

したがって、時刻  $t$  における法線方向成分のせん断方向力  $[f_n]_t$  は次式で表わされる。

$$[f_n]_t = [\Delta e_n]_t + [\Delta d_n]_t \quad (15)$$

### (b) せん断方向成分

せん断方向成分についても同様に相対変位増分  $\Delta u_s$  による力は次式で表される。添え字  $s$  はせん断方向を示す。

$$\Delta e_s = K_s \Delta u_s \quad (16)$$

$$\Delta d_s = \eta_s \frac{\Delta u_s}{\Delta t} \quad (17)$$

時刻  $t$  におけるせん断方向の力は、次式となる。

$$[\Delta e_s]_t = [\Delta e_s]_{t-\Delta t} + \Delta e_s \quad (18)$$

$$[\Delta d_s]_t = \Delta d_s \quad (19)$$

したがって、時刻 $t$ におけるせん断方向の作用力 $[f_s]_t$ は次式で表わされる。

$$[f_s]_t = [\Delta e_s]_t + [\Delta d_s]_t \quad (20)$$

## 6. 加速度, 速度, 変位の計算

着目粒子 $i$ に接触するすべての粒子 $j$ からの接触力 $[f_n]_t, [f_s]_t$ を求める。粒子 $i$ に作用する力の $x$ 方向分力 $X_i$ と $y$ 方向分力 $Y_i$ ならびに粒子 $i$ の中心周りモーメント $M_i$ が次式で表わされるとする。

$$[X_i]_t = \sum_j \{ [f_n] \cos \alpha_{ij} + [f_s]_t \sin \alpha_{ij} + m_i g \} \quad (21)$$

$$[Y_i]_t = \sum_j \{ [f_n] \sin \alpha_{ij} - [f_s]_t \cos \alpha_{ij} \} \quad (22)$$

$$[M_i]_t = -r_i \sum_j [f_s]_t \quad (23)$$

ここで、 $\Sigma$ は粒子 $i$ に接触するすべての粒子 $j$ についての総和であり、 $m_i$ は粒子 $i$ の質量である。粒子 $i$ に関する作用力は式(21),(22),(23)で与えられるので、時刻 $t$ における粒子 $i$ の加速度は次式のように表わされる。

$$[u_{ai}]_t = [X_i]_t / m_i \quad (24)$$

$$[v_{ai}]_t = [Y_i]_t / m_i \quad (25)$$

$$[\varphi_{ai}]_t = [M_i]_t / I_i \quad (26)$$

また、時刻 $t$ における粒子の速度は式(24), (25), (26)を時間増分 $\Delta t$ で積分すると得られる。

$$[u_i]_t = [u_i]_{t-\Delta} + [u_{ai}]_t \Delta t \quad (27)$$

$$[v_i]_t = [v_i]_{t-\Delta} + [v_{ai}]_t \Delta t \quad (28)$$

$$[\varphi_i]_t = [\varphi_i]_{t-\Delta} + [\varphi_{ai}]_t \Delta t \quad (29)$$

さらに、速度を時間増分 $\Delta t$ で積分すると $\Delta t$ の間の変位増分 $\Delta u$ と $\Delta v$ が得られる。

$$[\Delta u_i]_t = [u_i]_t \Delta t \quad (30)$$

$$[\Delta v_i]_t = [v_i]_t \Delta t \quad (31)$$

$$[\Delta \varphi_i]_t = [\varphi_i]_t \Delta t \quad (32)$$

ここで得られた変位を時刻 $t$ から $t + \Delta t$ までの変位増分として式(11)から式(32)の計算を繰り返すことによって $\Delta t$ ごとの粒子の運動が計算できる。

## 7. 粒子法による解析結果

粒子法による粉体の充填計算は、表1に示すような物性値と計算条件<sup>2)</sup>を用いた。充填の初期状態は、乱数を用いて粒子が降下における初期状態とした。粒子の半径が大きい場合を最大粒子とし、粒子の半径が小さい場合を最小粒子とし、2種類の粒子を用いた。図3の(a)は、充填の初期状態 ( $t = 0$  (s)) の様子を示したものである。また計算言語には、MATLABを用いた。

図3の(b)は $t = 1 \times 10^{-3}$  (s) の場合の充填の状態を示したもので、反復回数 1000 回である。箱の可変部分に粒子が少し充填している様子が分かる。

表 1 計算に用いた物性値および計算条件

項目	数値
粒子の弾性係数	$4.9 \times 10^9$ [Pa]
壁の弾性係数	$3.9 \times 10^9$ [Pa]
粒子ボアソン比	0.23
壁ボアソン比	0.25
最大粒子半径	$1.0 \times 10^{-2}$ [m]
最小粒子半径	$0.5 \times 10^{-2}$ [m]
摩擦係数	0.466
摩擦係数 (粒子 - 壁)	0.268
時間刻み	$1.0 \times 10^{-6}$ [s]
粒子数	888

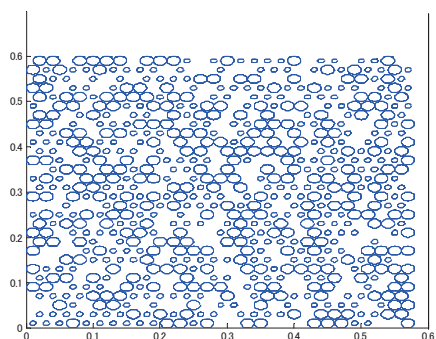
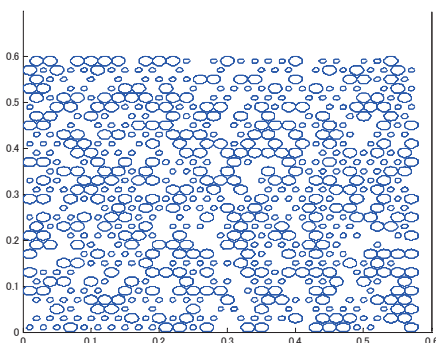
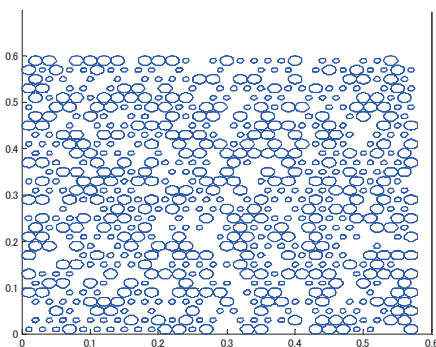
図 3 の (c) は  $t = 1 \times 10^{-2}$  (s) の場合の充填の状態を示したもので、反復回数が 10000 回である。箱の可変部分に粒子が先ほどより幾分充填している様子が分かる。

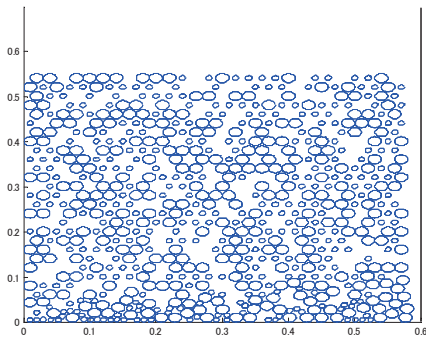
図 3 の (d) は  $t = 1 \times 10^{-1}$  (s) の場合の充填の状態を示したもので、反復回数は 100000 である。箱の可変部分の下から二列目まで粉体が幾分充填している様子が分かる。

図 3 の(e)は  $t = 5 \times 10^{-1}$  (s) の場合の充填の状態を示したもので、反復回数は 500000 回である。箱に粒子がほぼ充填している様子が分かる。

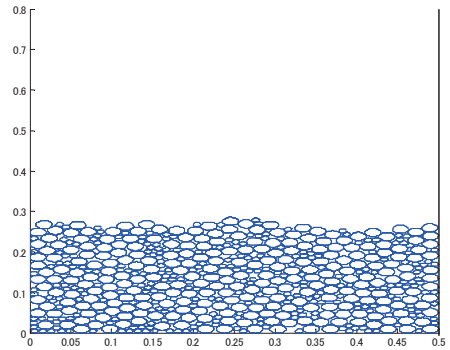
図 3 の(f)は  $t = 1.0$  (s) の場合の充填の状態を示したもので、反復回数は 1000000 回である。箱に粒子がほぼ充填し、 $t = 5 \times 10^{-1}$  (s) の場合より沈降している様子が分かる。

図 3 の(g)は  $t = 2.0$  (s) の場合の充填の状態を示したもので、反復回数は 2000000 回である。箱に粒子がほぼ充填し、自重により沈降していることが分かる。粒子法を用いることにより粉体が箱に充填する様子を、時間を追って示すことが可能になった。

(a) 充填の初期状態 ( $t = 0$  (s))(b) 充填の経過時間 ( $t = 1 \times 10^{-3}$  (s))(c) 充填の経過時間 ( $t = 1 \times 10^{-2}$  (s))

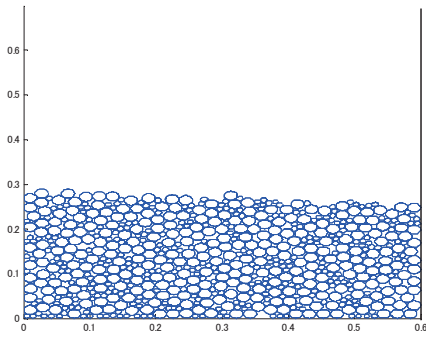


(d) 充填の経過時間 ( $t = 1 \times 10^{-1}$  (s))

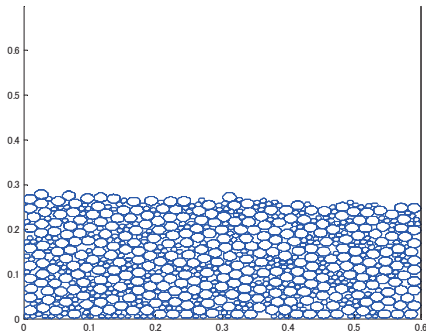


(g) 充填の経過時間 ( $t = 2.0$  (s))

図3 粒子の時間経過による充填



(e) 充填の経過時間 ( $t = 5 \times 10^{-1}$  (s))



(f) 充填の経過時間 ( $t = 1.0$  (s))

## 8. まとめ

本研究では、粒子レベルでの現象把握に適している粒子法の適用例として、粉体のシミュレーションへの応用を試みた。その結果、粉体が充填する様子を時間経過と共に示すことができることが分かった。自由落下をする粒子の相互作用力には粒子の相対変位増分に伴う回転変位、粒子間作用力は法線方向成分とせん断方向成分を考慮することにより充填の様子をより詳細に計算できることが分かった。今後の課題として、プラズマプロセスのような半導体の製造過程等での原子レベルの現象把握に、粒子法による原子レベルの数値シミュレーションを検討中である。

## 参考文献

- (1) 越塚：粒子法，丸善，2004
- (2) 梅影，他：粉体シミュレーション入門，産業図書 1998
- (3) 中田，高橋：電気工学の有限要素法，森北出



版, 1982

ミュレーション, コロナ社, 1996

(4) 加川, 山淵, 他: FEM プログラム選 2, 森北出版, 1997

(8) 佐藤: HOW TO 分子シミュレーション, 共立出版, 2004

(5) 大澤, 他: 分子動力学法とモンテカルロ法, 講談社, 1997

(6) 田中, 他: 分子動力学入門, 共立出版 1998

(7) 北川, 他: 原子・分子モデルを用いる数値シ

## 要 旨

本研究は、粉体の充填過程を粒子法による数値シミュレーションにより示したものである。最近、人の近付けないような場所の状況把握や予測のための数値シミュレーションは必要不可欠となっている。そこで、本研究では粒子レベルでの現象把握に適している粒子法による適用例として、粉体のシミュレーションへの応用を試みた。粉体が充填する様子を、粒子相互作用力を表わすフォークトモデルを用いて粒子の相対変位増分や粒子に作用する力は法線方向成分とせん断方向成分を考慮して計算を行った。その結果、粉体粒子が充填する様子をシミュレーションできることが分かった。

キーワード: 粒子法, 粉体, 数値シミュレーション