



拡張DEMを用いた粒子流動特性の解析 —実用的な混相流モデル実現のための手法構築と 並列ソフトウェアの開発—

研究・開発機関 : 株式会社PD.Lab.、株式会社CPFD.Lab.
 利用施設 : 自社設備
 計算規模 : PC 28core
 利用ソフトウェア : P.D. (PARTICLE DYNAMICS)

Before

- DEM粒子流動解析は固気液混相流の流動現象を対象に、化学プラント装置の解析に利用され、その実用性の高さが注目されてきました。
- 粒子動特性は複雑な変動を示し、実機プラントの粒子特性の解明には多数の粒子を要しますが、シリアル計算では取り扱える粒子数が100万個程度という限界があり、十分な解析には至っていませんでした。

After

- 拡張DEMを用いた並列解析ソフトの開発により、従来は約6.5日の計算が5時間に短縮され、また、取り扱う粒子数も1,000万を超える計算が可能となりました。
- 適用分野も化学プラント装置から広がり、炉容器内の粒子流動、充填、攪拌、ホッパー、粒子輸送等に有効であることが実証されました。

背景と目的

化学プラントタンク内の粉体現象をシミュレーションする際、離散要素法 (DEM:Discrete Element Method) と呼ばれる数値計算法が用いられます。これは粒子-粒子間、粒子-壁間の接触相互作用をモデル化できるため、より現実的な粒子の挙動解析が可能となるからです。DEM粒子流動解析は固気液混相流の流動現象を扱い、化学プラント装置 (流動層、ライザー、サイクロン、反応炉等) に適用され成果を挙げてきましたが、粒子数を増やすと計算時間がかかり、粒径分布まで考慮すると更に計算量が増大する等の課題がありました。

これに対し、大阪大学の田中研究室で開発されたDEM並列計算モデルを拡張した新しい解析手法であるCADの形状を直接計算モデル化する構造連成法を取り入れることにより、粒子流動 (振る舞い) の詳細解明が可能となり、タンク内粒子流動、ホッパー、攪拌、充填、粒子輸送に有効であることが実証されました。

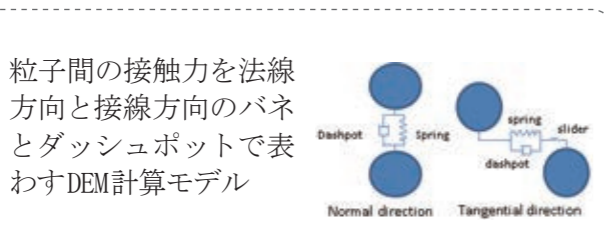


図1 DEM (離散要素法モデル)

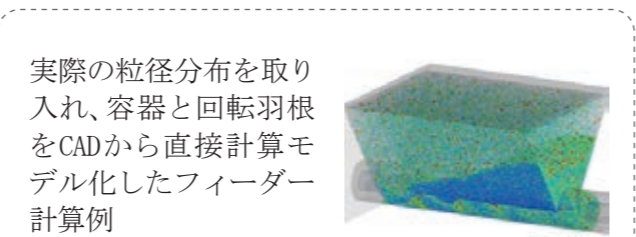


図2 粒径分布とCAD形状の直接計算モデル化

利用成果

当社で開発した拡張DEMを用いた粒子流動解析ソフトウェアP.D. (PARTICLE DYNAMICS) は、DEM粒子と流体の連成現象に対応し、流体は気体-液体の2流体を扱い、粒子-流体-運動物体連成、結合要素モデル、MPS (Moving Particle Semi-implicit) 粒子法、DEM-MPS粒子連成モデル、DEM-DNSモデル、化学反応モデル、輻射モデルなどが利用可能な混相流解析コードです。

並列計算モデルを取り入れた結果、流動層の並列計算テストでは、解析時間は6.5日から5時間に短縮されました。また、並列化により取り扱う粒子数も1,000万を超えることが可能になりました。以下に解析事例を示します。

図3は流動接触分解 (FCC) 炉の粒子流動計算で、シリアル計算では炉容器ごとに個別に計算を行っていましたが、並列化で全体系の計算が可能になりました。

この装置は流動接触分解 (FCC:Fluid Catalytic Cracking) 法により触媒を使用して分解反応を選択的に行わせ、高オクタン価のFCCガソリンを高収率で得る系で、供給原料油はライザーを上昇し、反応塔に入り、流動床触媒と分解反応後、サイクロンで精留塔へ送られます。反応に用いられたFCC触媒はストリッパーを経て再生塔へ送られ、再生後、再びライザー管に戻ります。触媒は反応塔と再生塔の間を循環しています。

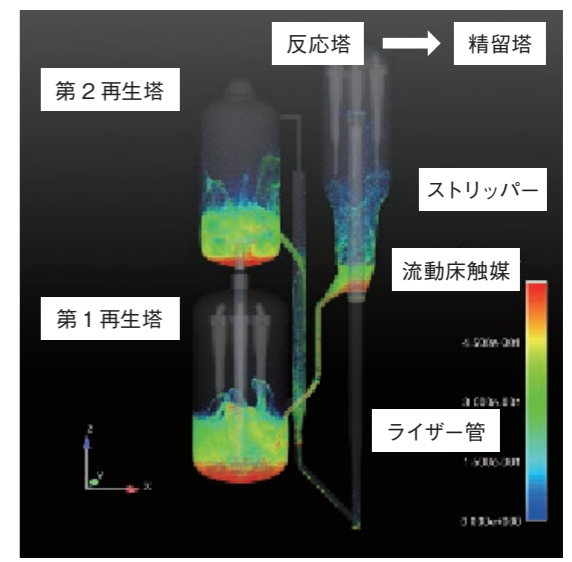


図3 MPI並列化で可能となったFCC全体系の計算

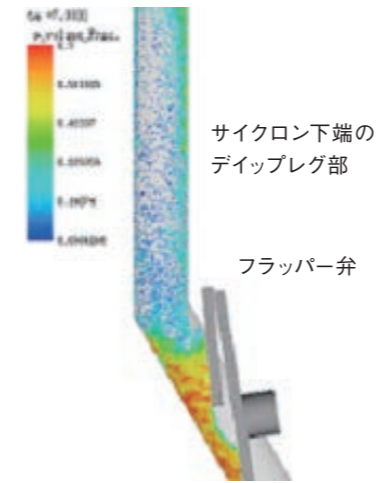


図5 DEMによるサイクロンフラッパー弁運動計算

図4は焼却炉の一種であるストーカー炉下部を対象とした計算結果です。周期的に動く可動火格子と固定火格子がモデル化され、粒子は球形と2種類の円柱形状として取り扱っています。

図5はDEMによるサイクロンフラッパー弁の運動解析結果です。FCC装置のサイクロンにはそのデ IPPレグ部にフラッパー弁が設置されたものがあり、これはサイクロン下部にある流動層からのガスがサイクロン内部に侵入し、触媒がエントレすることやデ IPPレグ自体のエロージョンを防止する役目がありますので、その適切な設計支援解析が行われました。

今後も様々な要因を考慮して計算するには時間が掛かります。さまざまな工夫を駆使して並列化等を行い高速化を図る予定です。

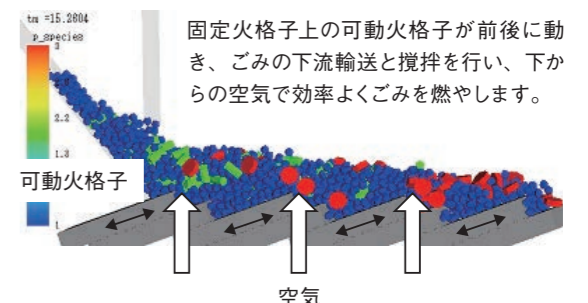


図4 ストーカー炉下部のモデル計算

出典: DEMによるサイクロンフラッパーバルブの運動解析、第25回流動化・粒子プロセッシングシンポジウム、008,P24-25、2019、11/28-29