

離散要素法による水素吸蔵合金の充填状態計算

松下政裕^{*1}, 門出政則^{*1}, 光武雄一^{*2}

Analysis of Metal Hydride Packed-Bed by Discrete Element Method

Masahiro MATSUSHITA^{*1}, Masanori MONDE and Yuichi MITSUTAKE

^{*1} Institute of Ocean Energy, Saga University
Honjo 1, Saga, 840-8502 Japan

We analyzed the metal hydride packed-bed by discrete element method (DEM). Some analyses carried out by uniform diameter particles, or by Rosin-Rammler distribution particles. Simulation results were not the void fraction beyond 60% obtained by experiment, because particles are treated as a sphere and about 200 times size. In order to simulate experimental results, we are trying to develop van der Waals force model and contact diameter change model.

Key Words : Atomization, Discrete element method, Energy storage, Hydrogen energy, Metal hydride, Packed bed,

1. 緒 言

環境問題や資源問題への対応のため、水素がエネルギー循環の中心的役割を果たすことが確実視されている。しかし、水素はその貯蔵方法が大きな課題となっており、まだ、万能な貯蔵方法は見つかっていない。そのため、早期に水素エネルギー社会を実現するには、用途によって貯蔵方法を使い分けることが必要であり、中でも、安全性を重視する用途では、水素吸蔵合金が有望視されている。

水素吸蔵合金による水素貯蔵の実用普及には、設計計算などのためにも、粉体層の充填状態を正しく評価することが必要である。著者らはこの粉体層を直接可視化することによって、実験的に、その充填状態を詳細に調べた^{(1),(2),(3)}。結果として、水素吸蔵合金は水素吸蔵放出を繰り返すことで、粒子が崩壊し、高密度には充填できない粒子層になることが分かった。そこで、この充填層を、膨張、収縮、崩壊を含めて、解析によって算出することを考えている。

粉体の解析方法は、大きく分けて二種類あり、連続体として扱う方法と離散的に扱う方法がある。しかし、どちらも水素吸蔵合金のような実際粒子レベルの解析を行う手法は確立されていない。連続体として扱う方法では、構成関係式、破壊条件式、状態方程式のいずれかを粉体層に適した形で与えなければならず、この構築が困難となっている。離散的に扱う方法は、個々の粒子の運動方程式を解くため、精度よく評価できるが、コンピュータが発達した現在においても粒子数に制限があり、微粉体の実際の粒子層に対する解析を行うにはモデル化を行って計算負荷を減らすことが必要となっている。従って、実際粒子レベルの解析では、いくつかの解析手法を組み合わせるような解析を行うことが必要であると考えられ、まずは、様々な方法で水素吸蔵合金の解析を行い、その問題点などを明らかにする必要がある。

そこで、本研究では、まずは、離散的に取り扱う方法の離散要素法^{(4),(5)} (Discrete element method, DEM) を使用し、水素吸蔵合金の充填状態の解析を行った。解析では、実験から得られた粒子径分布も使用し、実験との比較を行った。また、その解析結果から、可視化実験で得られたような60%を超えるような大きな空隙率の充填状態を解析で求められるようにするモデル化方法の検討も行ったので、その内容について報告を行う。

^{*1} 佐賀大学 海洋エネルギー研究センター (〒840-8502 佐賀市本庄1)

^{*2} 佐賀大学 理工学部機械システム工学科

E-mail: matusita@ioes.saga-u.ac.jp

2. 離散要素法シミュレーション

2.1 基礎式および座標系

離散要素法 (DEM) では, 個々の粒子間の接触力を図 1 に示すようなフックモデルで表現する. 離散要素法における基礎式を以下に示す.

$$F = m \frac{d^2 u}{dt^2} = -\eta \frac{du}{dt} - Ku + F_g \quad (1)$$

$$M = I \frac{d^2 \psi}{dt^2} = -\eta r^2 \frac{d\psi}{dt} - Kr^2 \psi \quad (2)$$

m は粒子の質量, u は並進変位, η はダッシュポット粘性係数, K はバネ弾性定数, F_g は重力, I は慣性モーメント, ψ は回転変位, r は粒子半径である.

粒子の質量と慣性モーメントはそれぞれ以下の式で表される. ここで, ρ は密度である.

$$m = \frac{4}{3} \pi r^3 \rho \quad (3)$$

$$I = \frac{8}{15} \pi r^5 \rho \quad (4)$$

計算には図 2 のように二種類の座標系を用いる. 二粒子間での計算には接点への法線ベクトルを基準にした局所座標系を使用し, 共通座標系から座標変換して計算を行う.

$[X, Y, Z]$: 粒子の接点における法線方向, せん断方向の局所座標 (X 方向が法線方向)

$[x, y, z]$: 全粒子共通の座標

座標変換は以下の式のようになる.

$$\begin{bmatrix} X \\ Y \\ Z \end{bmatrix} = [T_e] \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} \quad (5)$$

$$[T_e] = \begin{bmatrix} \frac{x_j - x_i}{L_{ij}} & \frac{y_j - y_i}{L_{ij}} & \frac{z_j - z_i}{L_{ij}} \\ -\frac{\alpha(y_j - y_i)}{l_{ij}} & \frac{\alpha(x_j - x_i)}{l_{ij}} & 0 \\ -\frac{\alpha(x_j - x_i)(z_j - z_i)}{L_{ij}l_{ij}} & -\frac{\alpha(y_j - y_i)(z_j - z_i)}{L_{ij}l_{ij}} & \frac{\alpha l_{ij}}{L_{ij}} \end{bmatrix} \quad (6)$$

$$L_{ij} = \sqrt{(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2 + (z_i - z_j)^2} \quad (7)$$

$$l_{ij} = \sqrt{(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2} \quad (8)$$

$$\alpha = \begin{cases} \text{SIGN}(y_j - y_i) & \text{for } y_i \neq y_j \\ \text{SIGN}(x_j - x_i) & \text{for } y_i = y_j \text{ and } x_i \neq x_j \end{cases} \quad (9)$$

ただし, $\text{SIGN}(a)$ は符号を返す関数で, $a < 0$ のとき -1 , $a > 0$ のとき 1 である. 添え字 i が計算を行う粒子, 添え字 j が接触している粒子を示している. ここで, 式 (6) は, $x_i = x_j$, $y_i = y_j$ の場合は計算できないので, $z_j - z_i$ の値によって, 以下のどちらかの変換行列を使用する.

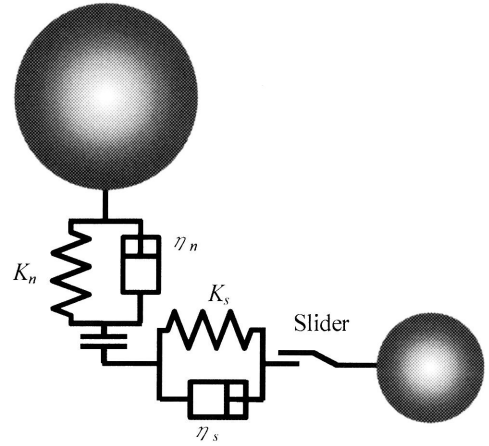


Fig.1 Voigt model

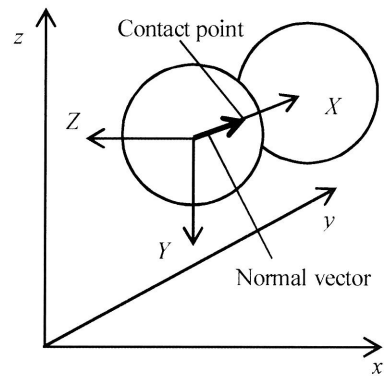


Fig.2 Coordinate system

$$z_j - z_i \text{ が負の場合} \quad [T_e] = \begin{bmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (10)$$

$$z_j - z_i \text{ が正の場合} \quad [T_e] = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (11)$$

2・2 作用する力

一つの粒子に作用する力 (添え字 i) は, 接触しているすべての粒子 (添え字 j) との力の総和になる. 従って, 各粒子との接触点での力を座標変換し加算する.

$$\begin{bmatrix} F_x \\ F_y \\ F_z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum F_{xj} \\ \sum F_{yj} \\ -F_g + \sum F_{zj} \end{bmatrix}, \quad \begin{bmatrix} F_{xj} \\ F_{yj} \\ F_{zj} \end{bmatrix} = [T_e]^{-1} \begin{bmatrix} F_{Xj} \\ F_{Yj} \\ F_{Zj} \end{bmatrix} \quad (12)$$

時刻 t における各粒子との接触点における各方向の力は弾性力と粘性抵抗力の和であり, 以下のようになる.

$$\begin{bmatrix} F_{Xj} \\ F_{Yj} \\ F_{Zj} \end{bmatrix}_t = \begin{bmatrix} e_n \\ e_{sY} \\ e_{sZ} \end{bmatrix}_t + \begin{bmatrix} d_n \\ d_{sY} \\ d_{sZ} \end{bmatrix}_t \quad (13)$$

$$\begin{bmatrix} e_n \\ e_{sY} \\ e_{sZ} \end{bmatrix}_t = \begin{bmatrix} \Delta e_n \\ \Delta e_{sY} \\ \Delta e_{sZ} \end{bmatrix}_{t-dt} + \begin{bmatrix} \Delta e_n \\ \Delta e_{sY} \\ \Delta e_{sZ} \end{bmatrix}_t = \begin{bmatrix} K_n \Delta U \\ K_s \Delta V \\ K_s \Delta W \end{bmatrix}_{t-dt} + \begin{bmatrix} K_n \Delta U \\ K_s \Delta V \\ K_s \Delta W \end{bmatrix}_t, \quad \begin{bmatrix} d_n \\ d_{sY} \\ d_{sZ} \end{bmatrix}_t = \begin{bmatrix} d_n \\ d_{sY} \\ d_{sZ} \end{bmatrix}_t = \frac{1}{\Delta t} \begin{bmatrix} \eta_n \Delta U \\ \eta_s \Delta V \\ \eta_s \Delta W \end{bmatrix} \quad (14)$$

$$\begin{bmatrix} \Delta U \\ \Delta V \\ \Delta W \end{bmatrix} = [T_e] \begin{bmatrix} \Delta u_i - \Delta u_j \\ \Delta v_i - \Delta v_j \\ \Delta w_i - \Delta w_j \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ \Delta \Psi_{zi} & \Delta \Psi_{zj} \\ -\Delta \Psi_{yi} & -\Delta \Psi_{yj} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} r_i \\ r_j \end{bmatrix}, \quad \begin{bmatrix} \Delta u_i \\ \Delta v_i \\ \Delta w_i \end{bmatrix}_t = \Delta t \begin{bmatrix} u_i \\ v_i \\ w_i \end{bmatrix}_t = \Delta t \frac{1}{\Delta t} \left\{ \begin{bmatrix} x_i \\ y_i \\ z_i \end{bmatrix}_t - \begin{bmatrix} x_i \\ y_i \\ z_i \end{bmatrix}_{t-\Delta t} \right\} \quad (15)$$

ここで, 添え字の n が法線方向, s がせん断方向を意味する. ただし, せん断方向 (Y, Z) の力は, 法線方向 (X) の力に対し, 以下の式によって最大値が制限されている.

$$\mu F_x > F_s = \sqrt{F_y^2 + F_z^2} \quad (16)$$

ここで, μ は粒子間摩擦係数である. また, $e_n < 0$ のとき, $e_s = d_s = 0$ とする.

バネ弾性定数, ダッシュポット粘性係数の算出は, 法線方向 (添え字 n) とせん断方向 (添え字 s) では異なり, それぞれ以下の式によって算出される.

バネ弾性定数

$$\text{法線方向} \quad K_n = \frac{4b}{3} \left(\frac{1}{\frac{1-v_i^2}{E_i} + \frac{1-v_j^2}{E_j}} \right), \quad (17)$$

$$\text{せん断方向} \quad K_s = \frac{8b}{\left(\frac{2-v_i+2-v_j}{G_i} + \frac{2-v_i+2-v_j}{G_j} \right)}, \quad G_* = \frac{E_*}{2(1+\nu_*)} \quad (18)$$

ここで, b は粒子間接触面半径, δ は接近量を意味し, 以下の式で表される. ここで, 壁と粒子間の場合, 添え字 w は壁を意味する.

$$\text{粒子間} \quad b = \sqrt[3]{\frac{3}{4} \frac{r_i r_j}{r_i + r_j} \left(\frac{1-v_i^2}{E_i} + \frac{1-v_j^2}{E_j} \right) P}, \quad \delta = \sqrt[3]{\frac{9}{8} \left(\frac{1}{r_i} + \frac{1}{r_j} \right) \left(\frac{1-v_i^2}{E_i} + \frac{1-v_j^2}{E_j} \right)^2} \quad (19)$$

$$\text{壁と粒子間} \quad b = \sqrt[3]{\frac{3}{4} r_i \left(\frac{1-v_i^2}{E_i} + \frac{1-v_w^2}{E_w} \right) P}, \quad \delta = \sqrt[3]{\frac{9}{8} \left(\frac{1}{r_i} \right) \left(\frac{1-v_i^2}{E_i} + \frac{1-v_w^2}{E_w} \right)^2} \quad (20)$$

ダッシュボット粘性係数

$$\eta_n = h \times 2\sqrt{mK_n} \quad (21)$$

ここで, h は減衰定数, e は反発係数で以下の関係がある.

$$e = \exp\left(-\frac{h}{\sqrt{1-h^2}}\pi\right), \quad h = \frac{\ln(e)}{\sqrt{\pi+(\ln(e))^2}} \quad (22)$$

ここでは, 臨界減衰条件 ($h=1$) を使用し, 次式を使用した.

$$\text{法線方向} \quad \eta_n = 2\sqrt{mK_n}, \quad (23)$$

$$\text{せん断方向} \quad \eta_s = \eta_n \sqrt{\frac{K_s}{K_n}} \quad (24)$$

2・3 ねじりモーメント及び力のモーメント

モーメントに関しても, 以下のように接触しているすべての粒子 (添え字 j) との総和をとる.

$$\begin{bmatrix} M_x \\ M_y \\ M_z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum M_{xj} \\ \sum M_{yj} \\ \sum M_{zj} \end{bmatrix}, \quad \begin{bmatrix} M_{xj} \\ M_{yj} \\ M_{zj} \end{bmatrix} = [T_e]^{-1} \begin{bmatrix} -M_R \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} + r_i [T_e]^{-1} \begin{bmatrix} 0 \\ F_{Zj} \\ -F_{Yj} \end{bmatrix} \quad (25)$$

$$[M_R]_t = [e_R]_t + [d_R]_t \quad (26)$$

$$[e_R]_t = [e_R]_{t-dt} + K_R r^2 [\Delta\Psi] \quad (27)$$

$$[d_R]_t = \eta_R r^2 \frac{[\Delta\Psi]}{dt} \quad (28)$$

$$\Delta\Psi = \Delta\Psi_{xi} - \Delta\Psi_{xj} \quad (29)$$

$$\begin{bmatrix} \Delta\Psi_{xi} & \Delta\Psi_{xj} \\ \Delta\Psi_{yi} & \Delta\Psi_{yj} \\ \Delta\Psi_{zi} & \Delta\Psi_{zj} \end{bmatrix} = [T_e] \begin{bmatrix} \Delta\Psi_{xi} & \Delta\Psi_{xj} \\ \Delta\Psi_{yi} & \Delta\Psi_{yj} \\ \Delta\Psi_{zi} & \Delta\Psi_{zj} \end{bmatrix} \quad (30)$$

ただし, $e_n < 0$ のとき, $e_R = d_R = 0$ とした. また, 今回の解析では, ねじりモーメントは考慮していないので, $K_R = 0$, $\eta_R = 0$ としている.

2・4 計算条件

計算は水素吸蔵合金 (LaNi₅) の可視化実験結果⁽³⁾に合わせた条件で行った. 容器形状は内径 $\phi 27\text{mm}$ の円筒型のガラス瓶であり, 水素吸蔵合金の充填量は 50g とした. そのままの粒子での解析では数十億個の粒子解析となり困難であるので, 今回は 200 倍程度の大きな粒子として解析を行った. 表 1 に解析を行った粒子の設定値を示す. 均一粒子として, 粒子直径の異なる解析を 2 種類 (Uni-1,2), 粒子径分布を与えた解析を 3 種類 (RR-1~3) 実施した. 粒子径分布を与える場合では, 実験から得られた結果をもとに, 水素吸蔵放出を $5, 10, 50$ 回繰り返

Table 1 Calculation particles

Name	Run number	Distribution	De	n	Time	Number	Mean number diameter	Minimum diameter	Maximum diameter
Uni-1	—	Uniform	—	—	—	11,544	1 mm	—	—
Uni-2	—	Uniform	—	—	—	1,344	2 mm	—	—
RR-1	5	Rosin-Rammler	12.99	1.25	200	310	2.323 mm	0.050 mm	7.350 mm
RR-2	10	Rosin-Rammler	9.93	1.25	200	571	1.858 mm	0.050 mm	6.750 mm
RR-3	50	Rosin-Rammler	8.03	1.25	200	1,002	1.525 mm	0.050 mm	6.150 mm

した時の粒子径分布に対し、Rosin-Rammler 分布として近似した分布を与えている。なお、実験結果では粒子径分布は 15 回の繰り返し以降はほとんど変化していない。Rosin-Rammler 分布は以下の式で表される。

$$Q = 1 - \exp\left\{-\left(\frac{D}{D_e}\right)^n\right\} \quad (31)$$

また、ヤング率、ポアソン比、摩擦係数が入力値として必要であるが、水素吸蔵合金 LaNi_5 の物性値は入手できなかったため、今回の解析は、ニッケルの値及び摩擦に関してはニッケルとガラスの値を使用した。表 2 に使用した値を示す。

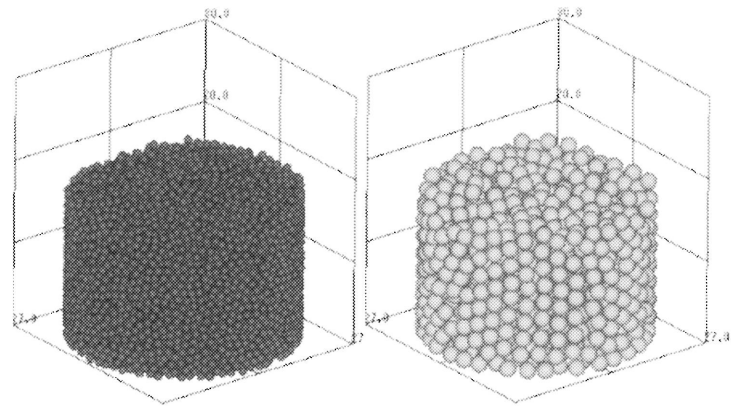
Table 2 Setting value

	Nickel	Glass
Young's modulus	$2.0 \times 10^{11} \text{Pa}$	$6.0 \times 10^{10} \text{Pa}$
Poisson's ratio	0.3	0.23
Friction coefficient		
Nickel	0.7	0.7

3. 計算結果

3・1 均一径での解析結果

まず、均一粒子として解析を行った結果について示す。図 3 は粒子の充填状態を表している。それぞれの充填層の深さの平均値は Uni-1 (粒子直径 1mm) で 18.3mm, Uni-2 (粒子直径 2mm) で 18.1mm であった。ここで、深さの平均値とは、それぞれの粒子において、その上に他の粒子が存在するかどうかを判別し、上に他の粒子が存在しない粒子の頂点の座標を平均したものである。この深さの平均値から算出した空隙率は、それぞれ Uni-1 (粒子直径 1mm) で 42.3%, Uni-2 (粒子直径 2mm) で 41.6% であった。球を最密充填した場合、六方最密では空隙率 26%, 体心立方では空隙率 32% となるが、壁の影響があり、解析結果はそれらの値よりは大きな空隙率となっている。

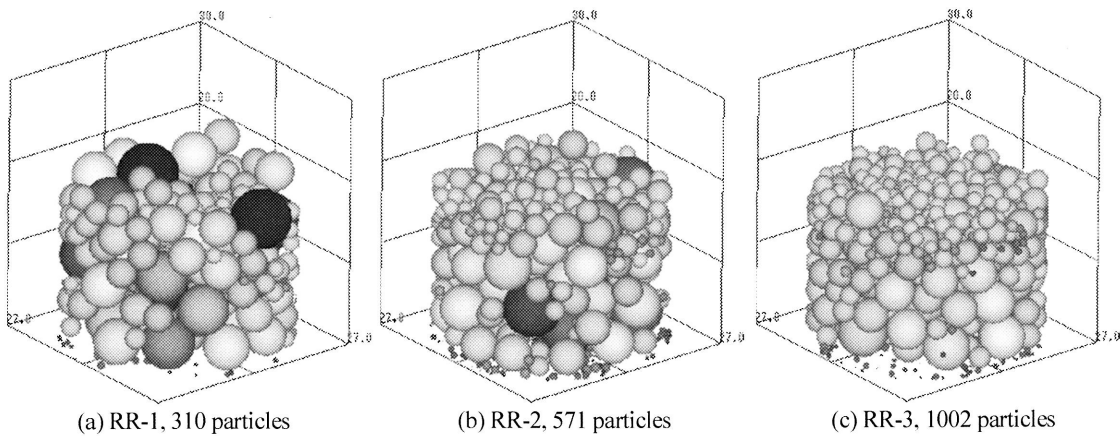


(a) Uni-1, $D_p=1\text{mm}$ (b) Uni-2, $D_p=2\text{mm}$

Fig.3 Calculation results of uniform particles

3・2 粒子径分布を与えての解析結果

次に、実験から得られた粒子径分布を Rosin-Rammler 分布として与えた場合の解析結果について示す。図 4 は



(a) RR-1, 310 particles

(b) RR-2, 571 particles

(c) RR-3, 1002 particles

Fig.4 Calculation results of Rosin-Rammler distribution particles. ($\times 200$)

粒子の充填状態を表しており、明確に粒子径分布の異なる場合の解析であることがわかるように、粒子径の違いで粒子を色分けしている。図5は解析結果の深さの平均値から算出した空隙率を示しており、実験結果として、水素最大吸蔵時の粒子層体積最大時 (Maximum volume)、水素放出後 (After)、水素流入直後の粒子層体積最小時 (Minimum volume) の空隙率と、タップ充填による最密充填の空隙率も示してある。解析結果は3種類であるが、実験では15回の水素吸蔵放出の繰り返し以降、粒子径分布にほとんど変化はみられなかった。従って、RR-3の解析結果は15回以降の共通の結果とみなし、15回以降に線で示している。結果は、解析では、粒子径分布の変化の影響だけがあらわれており、崩壊が進行した場合には、空隙率は減少し、より高密度に充填できるという結果になった。実験では、崩壊によって形状変化がおき、その影響で高密度に充填できない粒子層になり、タップ充填を行っても約62%の空隙率にしかできなかった。しかし、解析では粒子は球形として扱っており、粒子の大きさも200倍であるため、その実験結果を表現できていない。実験結果に近い結果を得るためには、粒子崩壊による付着力の増大や形状変化を考慮する必要があると考えられる。そこで、付着力と粒子形状を考慮できるような計算モデルについて構築を行っている。

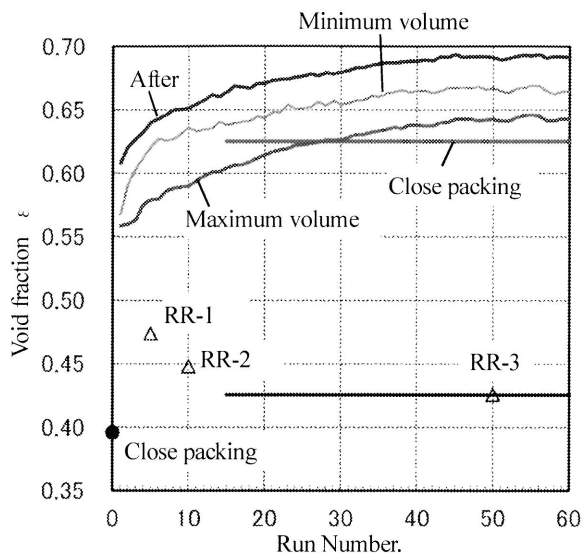


Fig.5 Transition of void fraction.

4. 計算モデル

4・1 付着力モデル

まず、粒子間付着力としてファンデルワールス力を考慮するモデルについて示す。粒子間のファンデルワールス力は以下の式で表される。

$$F_{vw} = -\frac{AR}{6(H+B)^2}, \quad R = \frac{D_i D_j}{(D_i + D_j)} \quad (32)$$

A : ハマーカー一定数, H : 表面間距離, B : 粗さパラメータ, D : 粒子直径

付着力は1mm以下の粒子径では重力より大きな力となるが、離散要素法 (DEM) では計算負荷の軽減のため実際の粒子径より大きな粒子径で計算しているため、導入しても付着力は小さくなってしまいほとんど影響しない。そこで、大きな粒子径に対しても付着力の影響が出るように重力との比として係数を与えるモデルを使用する。

$$F_{vw} = C_{vw} F_g \quad (33)$$

C_{vw} : 重力比係数, F_g : 重力

しかしながら、式 (33) では、 C_{vw} に一定値を与えると、粒径が異なるとき2粒子間で異なる付着力が作用してしまうので、 C_{vw} (重力付着力比) の粒径に関する項を残し、以下のようなモデルを与える。

Table 3 Van der Waals force (RR-1)

Coefficient	Maximum - Maximum	Maximum - Minimum		Minimum - Minimum
1.0×10^{-5}	$0.92663301 \times F_g$	$0.0390506 \times F_g$	$3915.715 \times F_g$	$2000 \times F_g$
1.0×10^{-6}	$0.09266330 \times F_g$	$0.0039051 \times F_g$	$391.5715 \times F_g$	$200 \times F_g$
1.0×10^{-7}	$0.00926633 \times F_g$	$0.0003905 \times F_g$	$39.15715 \times F_g$	$20 \times F_g$
1.0×10^{-8}	$0.00092663 \times F_g$	$0.0000391 \times F_g$	$3.915715 \times F_g$	$2 \times F_g$
0	$0 \times F_g$	$0 \times F_g$	$0 \times F_g$	$0 \times F_g$

$$F_{vw} = L \times C \frac{D_j}{D_i^2(D_i+D_j)} F_g, \quad L = \frac{1}{H_a^2} \left(\frac{1+H_a^2}{1+H^2} - 1 \right) \quad (34)$$

C : 係数, L : 影響範囲係数 (表面間距離 H が $0 \sim H_a$ の範囲で作用, 接触時は $H=0$ で $L=1$)

先ほどの解析条件 RR-1 に対してファンデルワールス力を導入し, 係数を変えた場合の最大粒子間, 最大粒子と最小粒子間, 最小粒子間に働く力を表3に示す. 小さな粒子に対しては重力より大きな付着力が作用し, 異なる径の粒子間でも同じ力が作用するように重力に対する倍数が異なるようになっている. なお, 今回の解析では, 壁と粒子間の付着力は考慮していない.

図6はRR-1の条件において, 付着力の係数を変えて解析を行った結果である. 図6aが付着力の影響が最も大きい場合であるが, 他の場合と比較しても充填層全体での大きな違いはみられない. ただ, 小さな粒子が下まで落ちていないという点で付着力の影響がみられている. 図7は, 解析結果の深さの平均値から算出した空隙率の係数に対する違いである. 付着力の係数が大きいほうが, 付着力の影響が大きい, 層全体の空隙率に対する影響はほとんど見られない. 最も大きな付着力を与えた $C=10^{-5}$ の場合だけ, 空隙率の増加がみられる. この場合だけ, ローラーの式⁵⁾で表される付着力の支配する領域になったと考えられ, 他の場合は, 付着力に関係なくほぼ同じ空隙率の粒子層状態になっていると考えられる. 現段階では, 今回の200倍の粒子に対する計算において, 係数 C をいくつにすることがふさわしいかは明確ではないが, 付着力モデルの導入だけで実験結果のような大きな空隙率を再現する解析は困難とみられる.

4・2 接触距離変化モデル

実験結果のような大きな空隙率になるように計算をするためには, 粒子形状による影響を考慮したモデル計算が必要であると考えられる. しかし, 複雑な形状の粒子の計算を行うことは, 計算時間が膨大になり現実的ではない. そこで, 基本的には粒子を球形として扱い, 主な計算は面積相当径 D_A を使用し, 粒子間の接触位置に関する計算では, 図8のような外接円直径 D_C と面積相当直径 D_A の間の距離 D_B を設定し, 計算を行うモデルを使用した. 外接円直径は, 実験から得られたワーデルの球形度 ψ_w を利用し設定することを考えている. ワーデルの球形度は以下の式で表される.

$$\psi_w = \frac{D_A}{D_C} \quad (35)$$

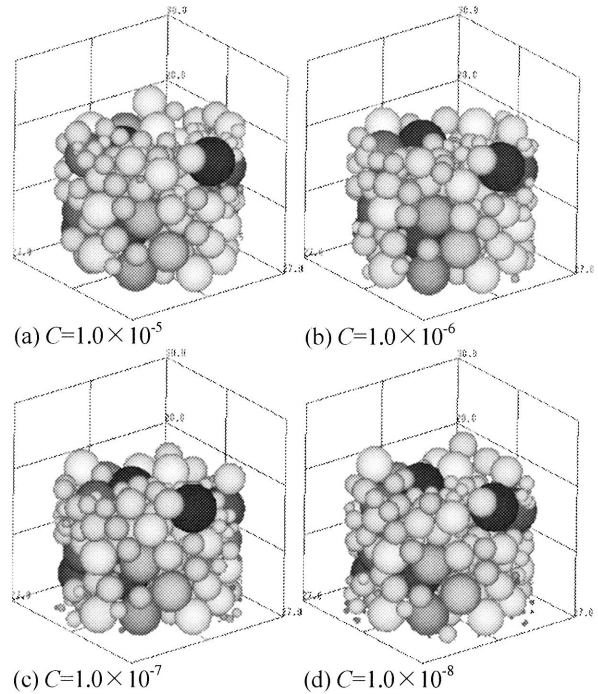


Fig.6 Calculation results of van der Waals force model. (RR-1)

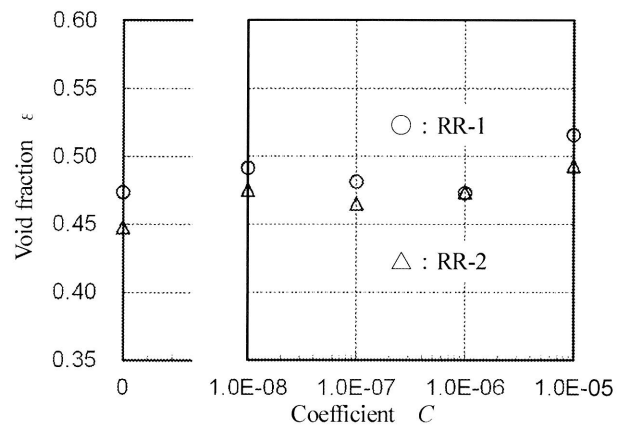


Fig.7 Void fraction of van der Waals force model

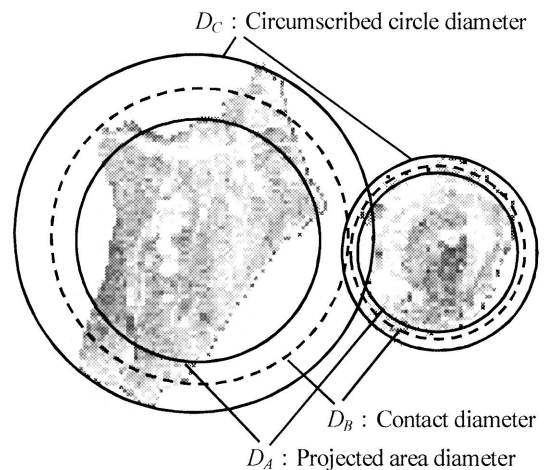
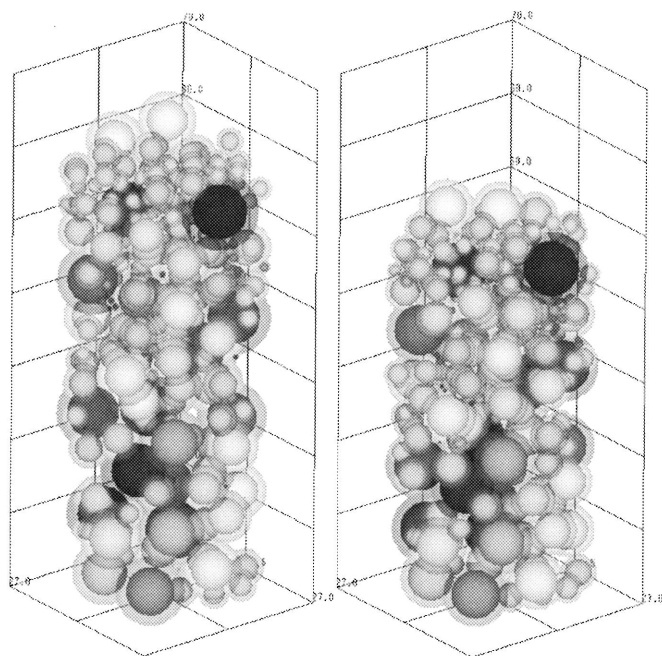


Fig.8 Contact diameter change model

実験で水素吸蔵放出を繰り返した粒子では、ワーデル球形度は平均値 0.73 となっていた。

図 9 はワーデル球形度 0.7 (図 9a) と、0.75 (図 9b) として、すべての粒子が最小外接円直径で接触するとした場合の計算結果である。すべてが外接円で接触しているため、当然、大きな空隙率になり、層全体の体積が大きくなっている。空隙率は、ワーデル球形度 0.7 (図 9a) では 82.5%、0.75 (図 9b) では 78.9% になっている。この結果は、接触距離が常に最大となる場合の結果とみなせるが、実際にはモデルの中で、接触距離を個々の粒子間で設定する必要があり、どのように個別に設定していくかは、まだ検討中である。案としては、実験から粒子形状のパラメータとして、ワーデル球形度と表面の凹凸を表すフラクタル次元⁽³⁾のデータが得られているので、これを活用し、制限付きの乱数によって与えることを考えている。



(a) Wardell's sphericity = 0.70 (b) Wardell's sphericity = 0.75

Fig.9 Calculation results of contact diameter change model
(RR-1, $C=1.0 \times 10^{-5}$)

5. ま と め

本報告は、離散要素法 (Distinct element method, DEM) を使用し、水素吸蔵合金の充填状態の解析を行った。得られた結果を以下にまとめる。

- (1) 実験に基づく粒子径分布だけを与えて充填状態を計算すると、粒子は球形として扱われた場合、実験とは異なり、粒子崩壊が進むと空隙率が減少する結果となった。
- (2) 粒子間のファンデルワールス力を重力との比として与えるモデルによって、実際より大きな粒子の解析でも付着力の影響を考慮する解析を行うことができたが、付着力のみの影響では実験で得られたような大きな空隙率の解析結果を得ることはできなかった。
- (3) 粒子間の接触距離を外接円直径と円相当直径を使用して個別に与えるモデルを使用し、初期的な解析によって大きな空隙率の解析を得ることができることを確認した。

今後、ファンデルワールスカモデルと粒子間接触距離変化モデルを改良し、実験結果に近い充填状態を計算できるような解析方法の研究を進めていく。

文 献

- (1) 松下政裕, 門出政則, 光武雄一, 水素吸蔵合金の膨張・収縮の可視化試験装置, 佐賀大学海洋エネルギー研究センター報告 OTEC, 第 15 号 (2010), pp.37-40.
- (2) 松下政裕, 門出政則, 光武雄一, 水素吸蔵放出による水素吸蔵合金の体積変化の可視化計測, 佐賀大学海洋エネルギー研究センター報告 OTEC, 第 16 号 (2011), pp.77-84.
- (3) 松下政裕, 門出政則, 光武雄一, 水素吸蔵合金の粒子崩壊による充填状態の変化に関する研究, 日本機械学会論文集 B 編, (投稿中)
- (4) 粉体工学会編, 粉体工学叢書 第 7 巻 粉体層の操作とシミュレーション, (2009), 日刊工業新聞社.
- (5) 粉体工学会編, 粉体シミュレーション入門, (1998), 産業図書株式会社.

