

博士論文（要約）

メッシュフリー粒子法を用いた

混相流シミュレーション手法の開発と産業応用

Development and industrial application of
a meshfree particle method for a multi-phase flow

高畑 和弥

目次

第 I 章	緒言	1
1	研究の背景	2
1.1	粉体関連現象	2
1.2	粉体流れおよび混相流の数値解析手法	5
2	本研究の課題および目的	8
2.1	液架橋を有する湿潤粉体流れ	8
2.2	任意形状壁面を有する固気混相流の計算手法	9
2.3	薄板を有する固気混相流の計算手法	10
3	本稿の構成	11
第 II 章	計算手法	15
1	DEM	16
1.1	支配方程式	16
1.2	液架橋力モデル	17
2	CFD 法	27
3	任意形状壁面モデル	28
3.1	SDF	28
3.2	IB 法	29
3.3	SDF/IB 法	32
4	薄板を有する固気混相流の計算手法	33
4.1	空隙率の評価手法	33

4.2	Dual grid model における任意形状壁面モデル	37
5	アルゴリズム	39
5.1	射影法/Fractional Step 法	39
5.2	密度スケーリング手法	41
第 III 章	トロイダル近似モデルを用いた液架橋力のシミュレーション	54
1	序論	55
2	解析モデル	56
3	解析条件	57
4	数値解析	58
4.1	粒子初期配置による付着挙動への影響	58
4.2	ロール回転速度による付着挙動への影響	59
5	結論	61
第 IV 章	密度スケーリング手法を用いた固気混相流シミュレーション	83
第 V 章	薄板を有する固気混相流シミュレーション	120
1	序論	121
2	数値解析手法	122
2.1	固相	122
2.2	気相	123
2.3	任意形状壁面モデル	123
2.4	Dual grid model と SDF/IB 法	124
3	薄い壁面を有する固定層流れ	126

3.1	解析条件.....	126
3.2	結果・考察	128
4	薄いスリットを有する流動層シミュレーション.....	130
4.1	実験条件.....	130
4.2	解析条件.....	130
4.3	結果・考察	131
5	結論	132
第 VI 章	結言	153
1	トロイダル近似を用いた液架橋力のシミュレーション	154
2	密度スケーリング手法を用いた固気混相流シミュレーション	155
3	薄板を有する固気混相流シミュレーション.....	156
4	今後の展望	157
	参考文献.....	158
	謝辞	170

图目录

Fig. I-1 Schematic image of processes used for pharmaceutical tableting.....	12
Fig. I-2 Schematic image of removal of fuel debris in atmospheric condition.....	13
Fig. I-3 Typical computational grid used in CFD method	14
Fig. II-1 Schematic diagram of Voigt model.....	42
Fig. II-2 Taxonomy for the concave liquid bridge	43
Fig. II-3 Conceptual graph of cohesion force in function of water content.....	44
Fig. II-4 Geometrical configuration of a liquid bridge between a particle and a plate.....	44
Fig. II-5 Geometrical configuration of a liquid bridge between two particles	45
Fig. II-6 Geometrical configuration of a liquid bridge between two unequal-sized particles	45
Fig. II-7 Geometrical configuration of a liquid bridge between a particle and a plane in toroidal approximation.....	46
Fig. II-8 Geometrical configuration of a funicular liquid bridge	46
Fig. II-9 Geometrical configuration of rupture distance.....	47
Fig. II-10 Geometrical configuration of liquid bridge between two spheres in the surface energy minimization method.....	47
Fig. II-11 Geometrical configuration of gas-solid-liquid interaction point in DEM- DNS-VOF method.....	48
Fig. II-12 Schematic diagram of divided volume method	48
Fig. II-13 2D example of signed distance function	49

Fig. II-14 Schematic description of the classification of grids.....	49
Fig. II-15 Schematic description of the classification of IB and fluid points	50
Fig. II-16 SDF points in a CFD grid for calculation of wall volume fraction in SDF/IB.....	50
Fig. II-17 Distribution of volume fraction of particle in a simple case.....	51
Fig. II-18 Schematic diagram of two different length scales for the dual grid model	51
Fig. II-19 DEM-CFD domain partitioning in dual grid model.....	52
Fig. II-20 Diagram of the calculation algorithm in the FELM	53
Fig. III-1 Geometry of three-roll mill	65
Fig. III-2 Geometrical diagram of simulation system	66
Fig. III-3 Cross-section of SDF.....	66
Fig. III-4 Particle distribution in Case 1-1(a) (Liquid content 10%, Left roll 0.25 m/s, Right roll 0.25 m/s, Initial location Type 1).....	67
Fig. III-5 Particle distribution in Case 1-2(a) (Liquid content 10%, Left roll 0.25 m/s, Right roll 0.25 m/s, Initial location Type 2).....	68
Fig. III-6 Volume fraction of solid particles (Liquid content 10%, Left roll 0.25 m/s, Right roll 0.25 m/s).....	69
Fig. III-7 Balance of liquid bridge force in Case 1 (Liquid content 10%, Left roll 0.25 m/s, Right roll 0.25 m/s).....	70
Fig. III-8 Particle distribution in Case 1-1(b) (Liquid content 10%, Left roll 0.25 m/s, Right roll 0.50 m/s, Initial location Type 1).....	71

Fig. III-9 Particle distribution in Case 1-2(b) (Liquid content 10%, Left roll 0.25 m/s, Right roll 0.50 m/s, Initial location Type 2).....	72
Fig. III-10 Volume fraction of solid particles (Liquid content 10%, Left roll 0.25 m/s, Right roll 0.50 m/s)	73
Fig. III-11 Balance of liquid bridge force in Case 1 (Liquid content 10%, Left roll 0.25 m/s, Right roll 0.50 m/s).....	74
Fig. III-12 Particle distribution in Case 1-1(c) (Liquid content 10%, Left roll 0.25 m/s, Right roll 0.75 m/s, Initial location Type 1).....	75
Fig. III-13 Particle distribution in Case 1-2(c) (Liquid content 10%, Left roll 0.25 m/s, Right roll 0.75 m/s, Initial location Type 2).....	76
Fig. III-14 Volume fraction of solid particles (Liquid content 10%, Left roll 0.25 m/s, Right roll 0.75 m/s)	77
Fig. III-15 Balance of liquid bridge force in Case 1 (Liquid content 10%, Left roll 0.25 m/s, Right roll 0.75 m/s).....	78
Fig. III-16 Balance of liquid bridge force in Case 2-1 (Liquid content 15%, Left roll 0.25 m/s, Initial location Type 1).....	79
Fig. III-17 Balance of liquid bridge force in Case 2-2 (Liquid content 15%, Left roll, 0.25 m/s, Initial location Type 2)	80
Fig. III-18 Balance of liquid bridge force in Case 3-1 (Liquid content 20%, Left roll 0.25 m/s, Initial location Type 1)	81
Fig. III-19 Balance of liquid bridge force in Case 3-2 (Liquid content 20%, Left roll 0.25 m/s, Initial location Type 1)	82
Fig. IV-1 Geometrical configuration of the spouted bed with a midair container ..エ ラー! ブックマークが定義されていません。	

Fig. IV-2 Cross-section of SDF and volume fraction of wall boundary in Case A ..エラー! ブックマークが定義されていません。

Fig. IV-3 Geometrical configuration of the spouted bed with guide tubesエラー! ブックマークが定義されていません。

Fig. IV-4 Cross-section of SDF and volume fraction of wall boundary in Case B ..エラー! ブックマークが定義されていません。

Fig. IV-5 Front views of calculation results in Case A1 (Superficial velocity 10 m/s)エラー! ブックマークが定義されていません。

Fig. IV-6 Top views of calculation results in Case A1 (Superficial velocity: 10 m/s)エラー! ブックマークが定義されていません。

Fig. IV-7 Gas velocity distribution inside the container in Case A1 (Superficial velocity 10 m/s)エラー! ブックマークが定義されていません。

Fig. IV-8 Front views of calculation results in Case A2 (Superficial velocity 20 m/s)エラー! ブックマークが定義されていません。

Fig. IV-9 Top views of calculation results in Case A2 (Superficial velocity 20 m/s)エラー! ブックマークが定義されていません。

Fig. IV-10 Gas velocity distribution inside the container in Case A2 (Superficial velocity 20 m/s)エラー! ブックマークが定義されていません。

Fig. IV-11 Particle spatial location in Case B1 (Superficial velocity 25 m/s) .エラー! ブックマークが定義されていません。

Fig. IV-12 Gas velocity distribution in Case B1 (Superficial velocity 25 m/s)エラー! ブックマークが定義されていません。

Fig. IV-13 Average velocity of solid particles in each measurement point in Case B1 (Superficial velocity 25 m/s)..エラー! ブックマークが定義されていません。

Fig. IV-14 Average velocity of gas in each measurement point in Case B1 (Superficial velocity 25 m/s)	エラー! ブックマークが定義されていません。
Fig. IV-15 Number of solid particles between the guide tubes in Case B1 (Superficial velocity 25 m/s)	エラー! ブックマークが定義されていません。
Fig. IV-16 Transient change of the pressure drop in Case B1 (Superficial velocity 25 m/s)	エラー! ブックマークが定義されていません。
Fig. IV-17 Particle spatial location in Case B2 (Superficial velocity 30 m/s) ..	エラー! ブックマークが定義されていません。
Fig. IV-18 Gas velocity distribution in Case B2 (Superficial velocity 30 m/s) ..	エラー! ブックマークが定義されていません。
Fig. IV-19 Average velocity of solid particles in each measurement point in Case B2 (Superficial velocity 30 m/s) ..	エラー! ブックマークが定義されていません。
Fig. IV-20 Average velocity of solid particles in each measurement point in Case B2 (Superficial velocity 30 m/s) ..	エラー! ブックマークが定義されていません。
Fig. IV-21 Number of solid particles between the guide tubes in Case B2 (Superficial velocity 30 m/s)	エラー! ブックマークが定義されていません。
Fig. IV-22 Transient change of pressure drop in Case B2 (Superficial velocity 30 m/s)	エラー! ブックマークが定義されていません。
Fig. V-1 Geometrical diagram of the single tube and the double tube.....	136
Fig. V-2 Cross-section of SDF and volume fraction of wall boundary in Case A2137	
Fig. V-3 Cross-section of SDF and volume fraction of wall boundary in Case A3138	
Fig. V-4 Gas pressure and velocity distribution inside inner tube	139
Fig. V-5 Gas pressure inside the fixed bed in Cases A1 and A2	140

Fig. V-6 Gas velocity distribution at the horizontal cross-section A (Cases A1 and A2)	140
Fig. V-7 Gas velocity distribution at the horizontal cross-section B (Case A2)...	141
Fig. V-8 Pressure and gas velocity distribution inside the porous media (Cases A1 and A3)	142
Fig. V-9 Gas pressure inside the fixed bed in Cases A1 and A3	143
Fig. V-10 Gas velocity distribution at the horizontal cross-section A (Cases A1 and A3)	143
Fig. V-11 Gas velocity distribution at the horizontal cross-section B (Case A3) .	144
Fig. V-12 Geometrical diagram of the fluidized bed with thin slits.....	145
Fig. V-13 Volume fraction of wall boundary in the fluidized bed with thin slits	146
Fig. V-14 Snapshots of the particle distribution in Case B1 (Superficial velocity 0.6 m/s)	147
Fig. V-15 Transient change of the pressure drop in Case B1 (Superficial velocity 0.6 m/s)	148
Fig. V-16 Gas velocity and particle distribution in Case B1 (Superficial velocity 0.6 m/s).....	149
Fig. V-17 Snapshots of the particle distribution in Case B2 (Superficial velocity 0.8 m/s)	150
Fig. V-18 Transient change of the pressure drop in Case B2 (Superficial velocity 0.8 m/s)	151
Fig. V-19 Gas velocity and particle distribution in Case B2 (Superficial velocity 0.8 m/s).....	152

表目次

Table. III-1 Physical properties.....	63
Table. III-2 Calculation conditions.....	64
Table. IV-1 Physical properties of the spouted bed simulation with a midair container.....	エラー! ブックマークが定義されていません。
Table. IV-2 Calculation conditions of the spouted bed simulation with a midair container.....	エラー! ブックマークが定義されていません。
Table. IV-3 Physical properties of the spouted bed simulation with guide tubes ..	エラー! ブックマークが定義されていません。
Table. IV-4 Calculation conditions of the spouted bed simulation with guide tubes	エラー! ブックマークが定義されていません。
Table V-1 Calculation conditions of the channel flow simulation with a thin wall	134
Table V-2 Calculation conditions of the fluidized bed simulation with thin slits	135
Table V-3 Physical properties of the fluidized bed simulation with thin slits	135

第 I 章 緒言

1 研究の背景

1.1 粉体関連現象

粉体が係わる製品は数え上げれば枚挙に暇がなく、生活に身近な医薬品、食品から、リチウムイオン電池、原子燃料の工業製品まで多種多様である。また、粉体は化学工学、原子力工学など産業分野においても広く扱われている。粉体の産業分野における応用例として、医薬品の生産プロセスおよび原子力の燃料デブリの取り出しについて述べる。

医薬品の生産プロセスには、**Fig. I-1** に示すような、混合、造粒、乾燥、粉碎、充填、被膜といった工程がある。混合プロセスにおける目的は、異なる物性(粒度分布や比重、粒子形状など)の粉体を容器内部で均一に混ぜ合わせることである。産業界で使われる混合機にはその目的に応じて様々な形状の装置がある。例えば、リボンミキサーは、U字型のケースと二重のリボンのついたシャフトで構成されるミキサーである。固体粒子の混合度はリボンの形状[1, 2]やシャフトとリボンをつなぐスポークの有無による影響[3]、粒子の充填量[4]などに左右されるため、品質管理のためには装置設計や運転条件の最適化が重要である。造粒プロセスでは、一次粉末粒子を攪拌しながら、バインダーとして液体を添加し凝集させる。造粒プロセスにおいて、液滴の添加量[5-8]や攪拌翼の形状[9]や回転速度[5-7, 9]、粉体の充填量[5]によって、得られる造粒体の粒度分布が変わることが知られている。粉体層に液滴を添加すると粉体間に液架橋が形成されて引力が生じる。そのため、造粒体では乾燥粉体の挙動と異なり、液架橋による付着力やそれに伴う凝集体の挙動の把握が重要である。乾燥プロセスにおける目的は、湿潤粉体の入った容器に熱風を流入させることで、原料の含水率を低下させることである。乾燥プロセスでは、噴流層が広く採用されている。噴流層では、底部中央から高速の熱風が供給され、粉体層中心では粉体が上昇するスパウト、その周囲には粉体層が下降するアニュラス、アニュラス上方では噴水のようなファウンテンが形成される。ドラフトチューブ付き噴流層は改良型噴流層の1つで、薄いドラフトチューブを装置中央に設置することで、流路を通して噴流化が起こるため、粉体層高が高くなっても安定して噴流化させることができる。乾燥効率を向上させるためには、層内の粒子の滞留時間が均一にすることが重要であり、先行研究において熱風の流入速度[10-12]やドラフトチューブ径[13]、ドラフトチューブ長さ[14]の評価がされている。粉碎

プロセスの目的は、粒子径を小さくすることで比表面積を大きくし、溶解速度を高めることである。粉砕プロセスに用いられる代表的な装置にロールミルが挙げられる。ロールミルでは、ロール間の狭い隙間で粒子が圧密されることで粉砕され、粉末の粒径を小さくできる。均一な粒径分布を得ることを目的に、先行研究ではロール間を通過する際の粒子の密度や温度分布[15]、圧密された際に作用する潤滑力の影響[16, 17]、ロール回転速度の影響[18]が調べられている。また、粉砕と同時にペースト状に混練する 3 本ロールミルでは、含水率をパラメーターとした研究[19, 20]が行われている。充填プロセスの目的は、均一な形状および質量の製品の成型である。粉末金型充填による充填プロセスでは、連続的に生産するために、金型の上部で粉末の入った粉箱が動く体系や固定した粉箱の下部で金型を動かす体系が一般的である。均質な充填のためには、壁面の移動を有する体系における粉体の流動特性の評価が重要である。先行研究では、粒径差による分散[21, 22]や付着力による凝集[23, 24]、空気の有無による流動性[25]、装置形状や運転条件の最適化[26]による粉体の流動特性が調べられている。被膜プロセスの目的は、苦みのマスキングや薬物放出を制御することである。特に後者では、被膜厚みの管理が機能性向上のために重要な要素となる。被膜に用いられる装置として、代表的なものに噴流層があげられる。噴流層内部で循環している粒子に対して、スプレーで被膜材を粒子表面に塗布する。乾燥プロセスと同様に、噴流層内部における粒子の滞留時間を一定に保つことが、被膜効率の向上および均一な被膜において重要な要素である。先行研究では、液滴の添加量[27–29]や粒子の充填量[30]、ドラフトチューブの長さ[31]による被膜効率が評価されている。

原子力工学の応用例として、燃料デブリの取り出しについて説明する。燃料デブリは圧力容器内の燃料が構造物と一緒に溶けて流れ出し、格納容器下部で冷えて固まったものである。**Fig. I-2(a)**は福島第一原子力発電所における燃料デブリ取り出しの模式図である。福島第一原子力発電所における燃料デブリの取り出しには、デブリが気中に露出した状態で、格納容器側面に穴をあけて、遠隔操作でデブリをドリルやレーザーで削り取る完全気中工法の検討もなされている。完全気中工法において、燃料デブリ取り出し時を安全に実施するために、周辺環境への影響や作業者の被ばく評価が検討されている。完全気中工法では、燃料デブリの切削によって多量の α 核種を含む切粉が発生する可能性がある(**Fig. I-2(b)**)。

切粉が発生した場合には、放射性微粒子の閉じ込めを着実にを行うために、微粒子の気相中における挙動の把握が望まれている。こうした炉内における微粒子の挙動の把握では、過酷事故後の複雑構造内における固気混相流の評価をする必要があるが、高温かつ高放射線量という過酷な環境のため、実験による現象の再現は実質的に不可能である。また、切粉の飛散以外にも、完全気中工法では燃料デブリを気中に露出して切削を行うという特性上、燃料デブリの崩壊熱による炉内温度の上昇[32–34]が懸念されている。また、切粉の気相中への放出量の低減および冷却のために、水スプレー等を活用してデブリ表面に水をかけ流し、飛散を抑制する方法が検討されている。液滴を噴霧することで、**Fig. I-2(c)**のように、液滴内に微粒子がトラップされる。そのため、切粉の飛散抑制のためには、粒子間に形成される液架橋力の評価が望まれている。こうした燃料デブリは、溶融した燃料ペレットが被膜管のジルコニウム以外にも、原子炉の構造材であるステンレス鋼やコンクリート、制御棒の材料や、事故直後の冷却材として投入された海水などと反応し、反応時の環境に応じて様々な化学形態を持つことが予想されている。そのため、水をかけ流した際に、状態変化に起因して再臨界が起こる可能性[37]が示唆されている。安全に取り出しを実施するためには、炉内の試料を持ち出す前に、外部から解析を行うことが望まれている。

上述したように、医薬品の製造プロセスでは、液架橋力を伴う湿潤粉体流れ、任意形状壁面や薄板を有する混相流といった現象の把握が望まれている。湿潤粉体流れにおいて、個々の粒子に作用する液架橋力を直接観測することは実験では実質的に不可能である。粉体を伴う混相流において、バルクの観察が実験だけでは困難という問題がある。その他、原子力工学における燃料デブリの取り出しにおいても、複雑形状内における微粒子の飛散や燃料デブリに水をかけ流した際の現象の把握が望まれている。事故後の炉内は、高温かつ高放射線量という過酷な環境であり、実験による再現はほとんど不可能である。そのため、これらの現象の把握には、粉体の挙動や粉体層内部まで観察できる数値シミュレーション技術の導入が期待されている。以下に、粉体流れおよび混相流の数値シミュレーション手法について述べる。

1.2 粉体流れおよび混相流の数値解析手法

粉体流れの挙動の解析には、先にも述べたように個々の粒子の挙動や個々の粒子に作用する力を直接評価できる手法が期待されている。個々の粒子を直接追跡できる計算手法として、代表的なものに Discrete Element Method (以下、DEM[38]と記す)が挙げられる。

DEM では個々の粒子の挙動を追跡し、粒子径の解像度で粉体流れを解析できる。粒子間の接触には、バネ・ダッシュポット・フリクションスライダーによってモデル化された Voigt モデルを用いる。このモデルでは、粒子同士のオーバーラップによって接触力が陽的に求まるため、一粒子あたりの計算コストが低く抑えられる。DEM において、粒子と壁面の接触力は粒子間の接触力と同じモデル式で計算する。粒子と壁面のオーバーラップを評価するためには、壁面形状のモデル化が必要となる。

DEM において広く用いられている壁面モデルには、方程式によって形状を与える手法[39–41]や、粒子を並べることで壁面形状を模擬する手法[42]、メッシュを用いる壁面モデル[43–45]などがあげられる。方程式を用いる手法では、計算コストは非常に少なく済むが、軸対象や基本的な図形の組み合わせしか表現できないという課題がある。粒子を並べる場合には、粒子壁面の接触力の評価が粒子間接触力と同じ方法で行えるためプログラムが容易であるが、滑らかな壁面が表現できないうえ、計算粒子数が増えるため計算コストが高くなるという課題がある。メッシュを用いた手法では、任意形状の壁面形状を精度よく模擬できるが、接触力において、面・辺・頂点によって場合分けをする必要があるため、アルゴリズムが複雑になってしまうという課題がある。これらの手法に対し、先行研究において、シンプルなアルゴリズムで任意形状壁面との接触力を評価できる符号付距離関数 (Signed Distance Function: 以下、SDF と記す)を用いた壁面モデル[46]が開発された。SDF では、計算領域内にサンプリングポイントをいくつかとり、それらの点で予め最近傍壁面までの距離と壁面の内外を示す符号を乗算した符号付距離を計算しておく。粒子と壁面のオーバーラップの計算では、粒子の近傍で予め計算しておいた SDF の値から線形補間によって内挿することで壁面までの距離が計算できる。そのため、任意形状の壁面を有する体系において、接触力計算の高速化が可能となる。さらに SDF では、座標変換操作によって並進や回転を模擬することができるため、移動境界を有する体系への適用も容易で

ある。先行研究において、SDFを導入したDEMはSAGミル[46]、二軸混練機[47]、リボンミキサー[4]、バッチミキサー[48]といった任意形状壁面を有する体系へ応用されている。

このように、任意形状壁面モデルを導入したDEMによって、複雑体系における粉体流れの解析が可能となっている。ここまで述べたDEMは乾燥粉体の流れの解析手法である。湿潤粉体流れでは、液架橋力による付着および凝集体といった、乾燥粉体とは異なる挙動を示すため、湿潤粉体流れの解析にはDEMに液架橋力のモデル式を導入する必要がある。DEMにおいて、広く採用されている液架橋力モデルの1つに、幾何学的に導出した理論モデル[49, 50]がある。このモデルでは、液量と粒子の表面間距離から液架橋力を陽的に算出できる。DEMでは個々の粒子の座標を追跡しており、表面間距離は中心間距離と半径から容易に求められる。そのため、理論モデルはDEMと親和性が高く、先行研究において、混合[51, 52]、造粒[8]、湿潤粉体層の崩壊[53, 54]など、様々な体系に適用されている。

次に、固体-流体連成問題の計算手法について述べる。粉体が気体や液体と混在した混相流は、例えば先に述べた流動層や噴流層、粉末金型充填など、粉体を扱うプロセスにおいて広く扱われる現象である。実験ではバルクの観察が困難なため、粉体を伴う混相流においても数値解析手法の導入が期待されている。DEMは粉体のみを扱う手法であるため、混相流の計算には流体の解析手法(Computational Fluid Dynamics: 以下、CFDと記す)に加えて、固体-流体の連成項のモデルが必要となる。DEMを用いた固気または固液二相流の計算において、代表的な手法では局所体積平均法[55]を用いて計算するDEM-CFD法[56]が挙げられる。DEM-CFD法では流体の計算は格子で行い、空隙率に基づいてNavier-Stokes方程式を計算する。DEM-CFD法において、流体と粉体の相互作用力として流体抗力が計算されている。

粉体流れと同様に、固体-流体連成問題においても、DEM-CFD法を実用的な体系へ応用するためには任意形状壁面モデルが必要となる。任意形状の壁面を有する体系を計算するためには、格子生成手法の選択が重要となる。CFD法における典型的な計算格子をFig. I-3に示す。最もシンプルな計算格子はFig. I-3(a)に示した直交格子である。直交格子では、特に境界面を有する格子で境界層流れを精度よく計算することが難しいという問題があった。直交格子以外では、壁面の形状に沿って格子生成する手法が用いられている。Fig.

I-3(b)は境界適合格子[57]の模式図である。境界適合格子では、境界面の形状に沿って格子生成する。格子は **Fig. I-3(b)**に示すように、2次元であれば4辺のものを使用するため、隣接する格子数については直交格子と同じである。そのため、直交格子で用いられていた離散化手法をそのまま適用できるため、要素数あたりの計算コストを抑えながら、壁面近傍における境界層流れの解析精度を向上させられるというメリットがある。**Fig. I-3(c)**は非構造格子[58]の模式図である。非構造格子では、2次元体系では3角形の格子を用いて格子分割を行う。境界適合格子よりも格子配置の自由度が高いため、壁面の解像度が優れているという利点がある。しかしながら、要素の配置は不規則であるため、計算コストが高いという問題がある。また、境界適合格子と非構造格子の共通の問題点として、格子分割のコストが高いことがあげられる。特に移動境界を有する体系では、壁面の移動に伴ってその都度格子を再生成する必要があるため、計算コストが極めて高くなるという問題がある。そのため、計算コストが低く、シンプルなアルゴリズムで格子生成が可能な、直交格子による格子分割が再び注目されてきている。直交格子において、境界層流れの計算精度を向上させるため、Cut-cell 法[59]や Immersed boundary (以下、IB と記す)法[60, 61]が導入されている。Cut-cell 法は、直交格子を壁面に沿って分割し、流体の支配方程式を分割された流体格子上で直接積分して計算する手法である。Cut-cell 法では壁面形状を精度よく模擬できるため、境界層流れの計算精度が向上することが報告されているが、格子分割の場合分けに複雑なアルゴリズムを要するため、特に3次元体系への拡張が困難という問題がある。一方、IB 法は、流体の支配方程式に仮想外力項を加えることで、物体の境界面を再現する方法である。特に、壁面の体積分率によって重みづけ平均した流速を境界面に与える Kajishima ら[60]のモデルでは、Cut-cell 法と比較して、直交格子のシンプルなアルゴリズムを保ったまま、境界層流れの計算が可能な手法であるため、計算コストの面で優れた手法である。壁面の体積分率を精度よく計算するため、IB 法に SDF を導入した SDF/IB 法[62]が提案された。SDF/IB 法では、流体格子内部の SDF のピクセルを数えることで壁面の体積分率を評価する。先にも述べたように、SDF では座標変換によって壁面の並進や回転運動を扱えるため、SDF/IB 法は任意形状の移動境界に対しても適用可能な手法として期待されている。

近年、任意形状壁面を有する混相流体系の計算手法として、DEM-CFD 法に SDF/IB 法を導入した Advance DEM-CFD 法[25]が開発された。Advanced DEM-CFD 法では、固体粒子の任意形状壁面を SDF で、流体の任意形状壁面を SDF/IB 法で模擬する。先行研究において、Advanced DEM-CFD 法はパイプ付き流動層[63]や粉末金型充填[25]といった体系に応用されており、実験との比較を通してその妥当性が示されている。

上述したように、液架橋力モデルを導入した DEM や Advanced DEM-CFD 法によって、湿潤粉体流れや任意形状壁面を有する混相流といった現象が模擬できるようになっている。しかしながら、既存の手法には、解決すべき課題がいくつかあることが知られている。本研究では、数値解析手法の産業応用を目的に、液架橋力の評価、任意形状壁面を有する固気混相流の計算および薄板を有する固気混相流の計算が可能なシミュレーション手法を提案する。以下に、それぞれの問題点を整理し、本研究の目的を述べる。

2 本研究の課題および目的

2.1 液架橋を有する湿潤粉体流れ

先に述べたように、湿潤粉体流れの計算には液架橋力モデルを導入した DEM が広く採用されており、例えば、混合[51, 52]、造粒[8]、湿潤粉体層の崩壊[53, 54]などに応用されている。これらの計算には幾何学的に液架橋力を導出する理論モデル[49, 50]が広く導入されている。理論モデルでは、液量および粒子表面間距離によって液架橋力を陽的に算出できる。DEM では個々の粒子の座標を直接計算しているため、表面間距離は中心間距離と半径から容易に求められる。そのため、理論モデルによる液架橋力モデルは DEM と親和性が高いことが特徴として挙げられる。一方、理論モデルでは、異なる粒径の粒子間の液架橋力の評価に Derjaguin 近似を導入している。先行研究[68]において、液量が粒子体積に対して 4%よりも多くなると精度が低下することが報告されている。造粒プロセスなどでは、粒子体積に対して 10%以上の液滴が添加されており[9]、理論モデルでは精度よく計算できないという問題があった。

これに対し、液架橋の形状が円形にフィッティングできると仮定して、液架橋力を幾何学的に導出するトロイダル近似による液架橋力モデルが提案された。Huppmann と Rieger[69]は、同じ粒径、同じ接触角の粒子間の液架橋力のモデルを提案した。その後、

Chen ら[70]によって、異なる粒径や粒子壁面間の液架橋力のモデルが提案され、適用可能な範囲が広がった。さらに近年、Sun と Sakai[71]によって、粒径だけでなく異なる接触角に対しても適用可能な液架橋力のモデルが開発された。トロイダル近似による液架橋力モデルは液量の増加による計算精度の低下という理論モデルの欠点を克服できる手法として期待されているが、先行研究において、本モデルは液量が 10%以上の体系に対して適用されていなかった。

そこで本研究では、トロイダル近似による液架橋力モデルを導入した DEM を用いて、理論モデルの適用範囲外である液量が 10%以上の体系の計算を行う。計算の体系には、湿潤粉体をペースト状に混練する際に用いられる 3 本ロールミルを採用する。3 本ロールミルは、隣り合うロールが異なる向き、異なる速度で回転している。ロール間の隙間を通過した後、湿潤粉体は高速のロール側に付着して運ばれ、最も速いロールで回収される。長く使われてきた装置にも関わらず、湿潤粉体が必ず高速のロール側に付着するメカニズムは不明であり、歩留まりの向上が困難という問題があった。シミュレーションでは、ロールの回転速度比および液量をパラメーターとして検証計算を行う。検証計算では体系をサンプルにするため、2 本のロール間を通過する湿潤粉体の挙動解析を行う。3 本ロールミルにおける湿潤粉体の付着メカニズムを明らかにするため、湿潤粉体が付着したロールと反対側のロールとで、粒子壁面間にはたらいた液架橋力を評価する。

2.2 任意形状壁面を有する固気混相流の計算手法

(5 年以内に刊行予定)

2.3 薄板を有する固気混相流の計算手法

IB 法を導入した DEM-CFD 法シミュレーションは攪拌反応槽[76, 77]、バケットエレベーター[78]、流動層[79]など、様々な産業体系に応用されている。任意形状壁面を有する固気混相流の計算手法として、SDF/IB 法[62]を導入した Advanced DEM-CFD 法[25]が開発された。Advanced DEM-CFD 法では、壁面が占める体積分率の計算に SDF を用いる。壁面と流体の境界が存在する格子では、格子内部において SDF 計算点のピクセルを数える。これにより、SDF/IB 法では、シンプルなアルゴリズムで従来の Direct forcing IB 法と比べて精度よく壁面形状をとらえることが可能となったが、未だに解決していない問題がある。これは、DEM-CFD 法において、空隙率の計算に基づいて流体の支配方程式を計算する局所体積平均法[55]を導入していることに起因する。局所体積平均法を用いた場合、粒子によって流体格子が完全に閉塞すると空隙率が 0 になり、計算の不安定性が生じる。計算の安定性のため、局所体積平均法による DEM-CFD 法では、流体の格子幅は粒子径よりも十分に大きくとる必要がある。一方で、SDF/IB 法による壁面の体積分率は流体の格子で計算しており、薄板を有するような体系では流体の格子幅を小さくしなければならない。この矛盾を解決するためには、粒子で閉塞してしまうような小さな格子において空隙率を評価する手法が必要となる。

粒子よりも小さな格子で空隙率を評価する手法の 1 つに、Smoothed void fraction method (以下、SVFM[80, 81]と記す)があげられる。SVFM では、ガウス分布に代表される分布関数を用いて粒子の体積分率を近傍の格子に分配する手法である。分布関数を用いることで、粒子によって完全に閉塞している格子であっても空隙率は完全に 0 にはならず、流体の計算が可能となる。SVFM で用いられる分布関数には、無限遠までの単調減少のものが用いられている。一方、数値シミュレーションにおいて計算領域は有限であるため、SVFM を用いた場合には粒子の体積が保存しないという問題がある。SVFM 以外の手法として、流体の計算と空隙率や流体抗力といった固体・流体の連成項の評価に異なるサイズの格子を用いる Dual grid model[82]が提案されている。Dual grid model では、空隙率や流体抗力の評価には従来の DEM-CFD 法と同じように粒子よりも十分に大きい Coarse grid を、流体の計算には Coarse grid を細かく分割した Fine grid を用いる。Coarse grid

で求めた空隙率を内部の **Fine grid** に均質にマッピングすることで、細かな **Fine grid** においても空隙率は 0 にならず、安定して計算できる。**Dual grid model** では流体の格子は細かくなっているため、圧力場や流速場については高精度に計算できるという利点がある。先行研究において、**Dual grid model** は、粒子の沈降[82]やダムブレイク[83]といった現象の模擬や、高炉[84]、3D プリンター[85]、水噴流加工[86]といった実用体系の解析に応用されており、界面の追跡精度が向上することや、既存の **DEM-CFD** 法では扱えなかった狭い流路における固気混相流が計算可能となることが示されている。しかしながら、既存の **Dual grid model** において、薄板の模擬が可能な壁面モデルは存在しておらず、薄板を有する固気混相流を計算するためには新たなモデルを開発する必要があった。

そこで本研究では、流体の計算格子を細かくしても空隙率を評価できる **Dual grid model** に任意形状壁面モデルとしての **SDF/IB** 法を導入した新たな離散化手法である **Flexible Eulerian-Lagrangian Method** (以下、**FELM** と記す)を開発する。**FELM** では、空隙率や流体抗力の計算には、従来の **DEM-CFD** 法のように粒子よりも大きい **Local volume average** (以下、**LVA** と記す)格子を、流体の計算には **LVA** 格子を細かく分割した **Refined** (以下、**RF** と記す)格子を用いる。**SDF/IB**法による壁面の体積分率は、従来の **DEM-CFD** 法の流体格子よりも細かい **RF** 格子で行えるため、薄板を有する体系が計算可能となる。開発手法の妥当性を検証するために、薄板を有する固定層および流動層において、既存の **DEM-CFD** 法や実験の結果との比較を行う。

3 本稿の構成

本稿は第 I 章から第 VI 章まで 6 つの章で構成されている。第 I 章は緒言であり、研究の背景、課題および目的について述べた。第 II 章では計算手法について述べる。第 III 章はトロイダル近似による液架橋力モデルを用いて 3 本ロールミルの数値解析を行い、湿潤粉体の付着メカニズムを明らかにする。第 IV 章は密度スケーリング手法を固気混相流へ適用し、固体粒子挙動に影響するような流体の壁面を貫通する流れが抑制できることを示す。第 V 章は **FELM** を用いて薄板を有する固気混相流のシミュレーションを行い、妥当性検証の結果について述べる。第 VI 章は結言で、本研究の総括について述べる。

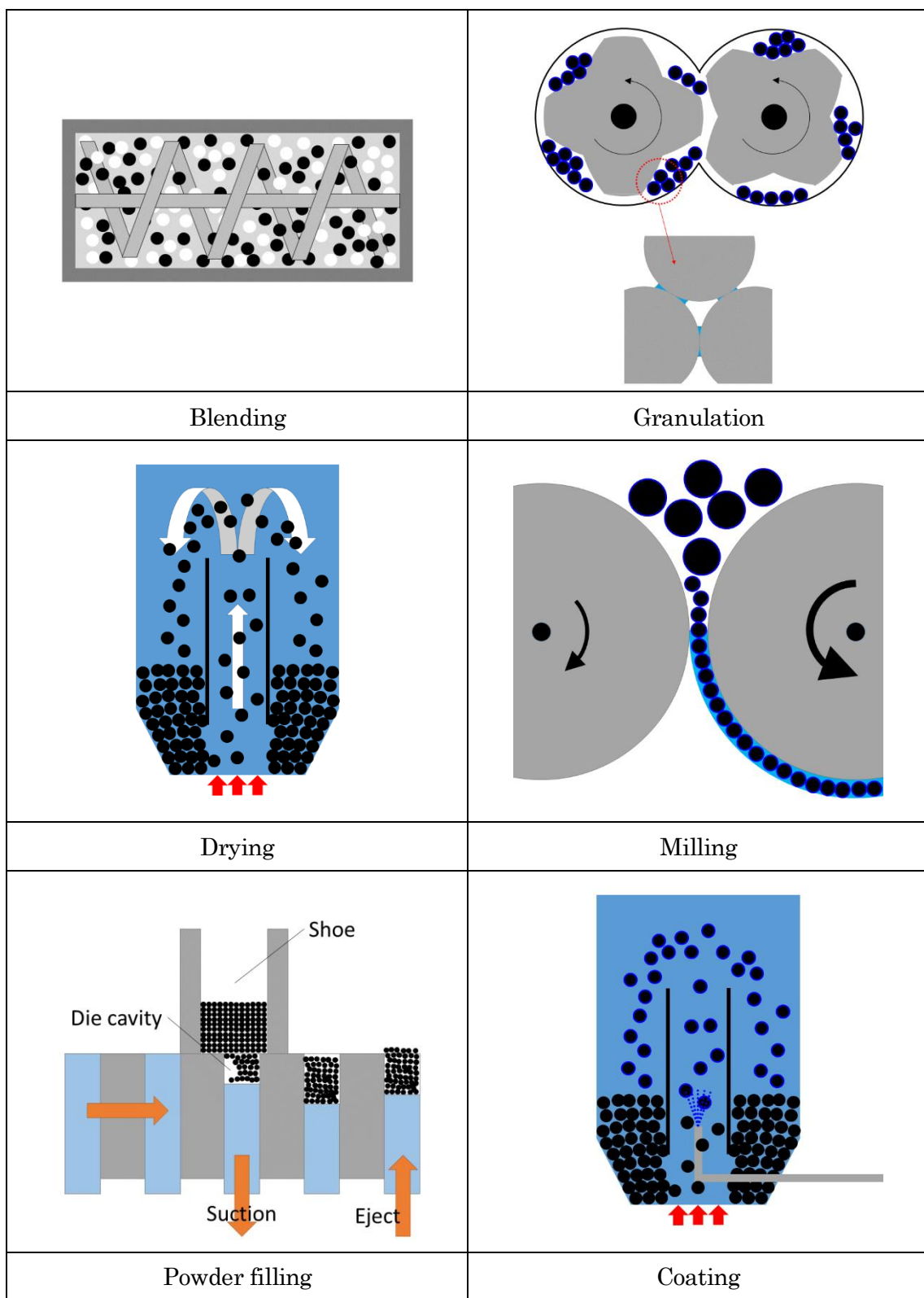


Fig. I-1 Schematic image of processes used for pharmaceutical tableting

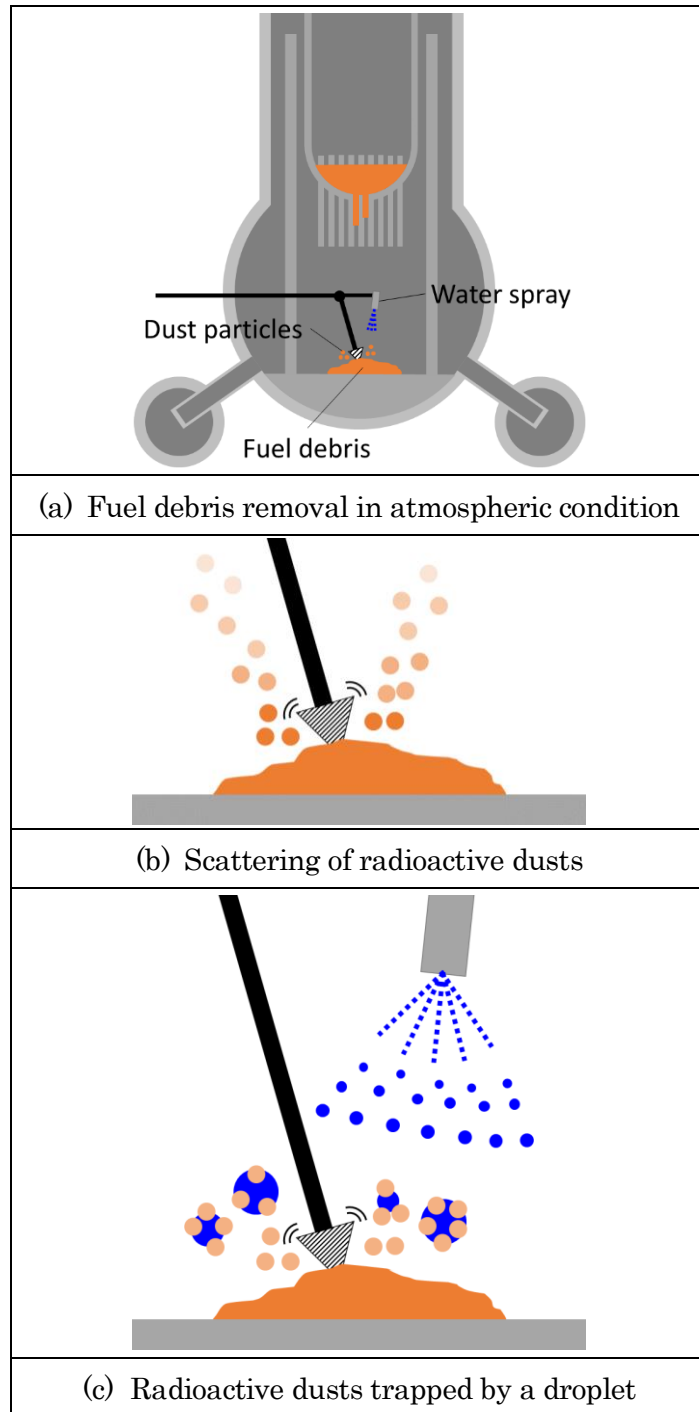


Fig. I-2 Schematic image of removal of fuel debris in atmospheric condition

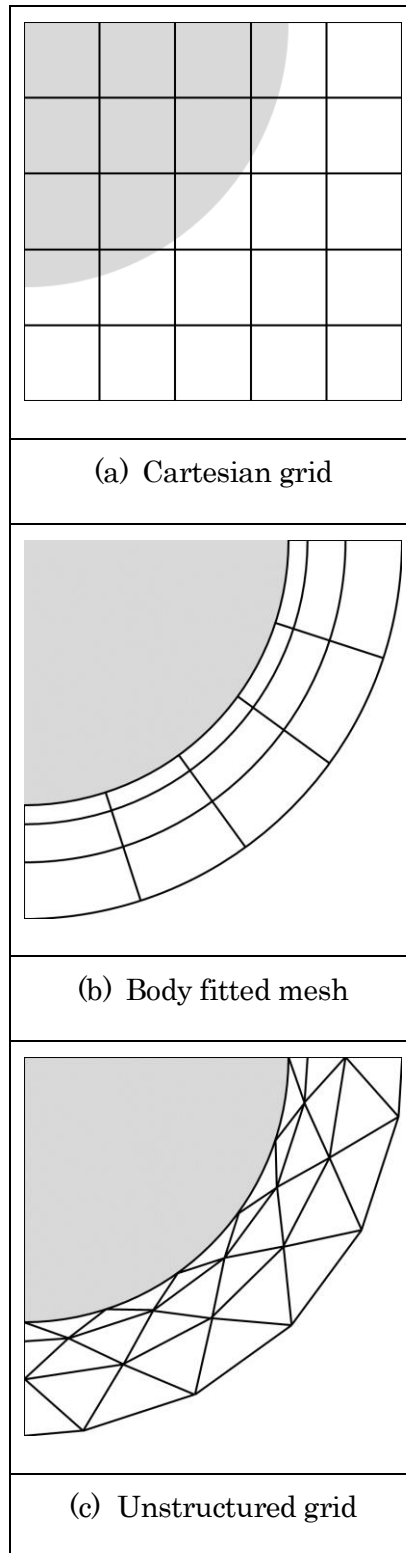


Fig. I-3 Typical computational grid used in CFD method

第 II 章 計算手法

1 DEM

1.1 支配方程式

DEM[38]では、固体粒子の挙動を Newton の第二法則に基づいて計算する。湿潤粉体流れの計算では、液架橋力のモデルを導入した DEM が用いられる。支配方程式は以下に示す並進と回転の式である。

$$m \frac{d\mathbf{v}}{dt} = \sum \mathbf{F}_c + \sum \mathbf{F}_{lq} + \mathbf{F}_g \quad (\text{II-1})$$

$$I \frac{d\boldsymbol{\omega}}{dt} = \sum \mathbf{T} \quad (\text{II-2})$$

ここで、 m 、 \mathbf{v} 、 t 、 \mathbf{F}_c 、 \mathbf{F}_{lq} 、 \mathbf{F}_g 、 I 、 $\boldsymbol{\omega}$ および \mathbf{T} は、それぞれ、質量、速度、時間、接触力、液架橋力、外力、慣性モーメント、角速度およびトルクである。液架橋力については、次項にて説明する。

接触力は、**Fig. II-1** に示すように、バネ、ダッシュポット、フリクションスライダーを用いたフォークトモデルで計算する。接触力は法線方向と接線方向に分解され、それぞれ、次式で計算する。

$$\mathbf{F}_c = \mathbf{F}_{c_n} + \mathbf{F}_{c_t} \quad (\text{II-3})$$

$$\mathbf{F}_{c_n} = -k\delta_n - \eta\mathbf{v}_n \quad (\text{II-4})$$

$$\mathbf{F}_{c_t} = \begin{cases} -k\delta_t - \eta\mathbf{v}_t & \text{if } |\mathbf{F}_{c_t}| < \mu_p |\mathbf{F}_{c_n}| \\ -\mu_p |\mathbf{F}_{c_n}| \frac{\mathbf{v}_t}{|\mathbf{v}_t|} & \text{otherwise} \end{cases} \quad (\text{II-5})$$

ここで、 k 、 δ 、 η および μ_p は、それぞれ、バネ定数、オーバーラップ、粘性減衰定数および摩擦係数、下添え字 n および t は、それぞれ、法線成分、接線成分である。粘性減衰定数は、次式で定義される。

$$\eta = 2 \ln e \sqrt{\frac{mk}{(\ln e)^2 + \pi^2}} \quad (\text{II-6})$$

ここで、 e は反発係数である。

固気・固液混相流の計算では、支配方程式に流体から受ける力として流体抗力および圧力勾配項を導入する。

$$m \frac{d\mathbf{v}}{dt} = \sum \mathbf{F}_c - V_p \nabla p + \mathbf{F}_{drag} + \mathbf{F}_g \quad (\text{II-7})$$

$$I \frac{d\boldsymbol{\omega}}{dt} = \sum \mathbf{T} \quad (\text{II-8})$$

ここで、 V_p 、 p および \mathbf{F}_{drag} は、それぞれ、粒子の体積、流体の圧力および流体抗力である。流体抗力は粒子と流体の相対速度を用いて計算する。

$$\mathbf{F}_{drag} = \frac{\beta V_p}{1 - \epsilon} (\mathbf{u}_f - \mathbf{v}) \quad (\text{II-9})$$

ここで、 β 、 ϵ および \mathbf{u}_f は、それぞれ、固体-流体相互作用項係数、空隙率および流速である。本研究では、固体-流体相互作用項係数には、Ergun[87]および Wen-Yu[88]のモデル式を用いる。

$$\beta = \begin{cases} 150 \frac{(1 - \epsilon)^2}{\epsilon} \frac{\mu_f}{d_p^2} + \frac{7}{4} (1 - \epsilon) \frac{\rho_f}{d_p} |\mathbf{u}_f - \mathbf{v}| & \text{if } \epsilon \leq 0.8 \\ \frac{3}{4} C_d \frac{\epsilon(1 - \epsilon)}{d_p} \rho_f |\mathbf{u}_f - \mathbf{v}| \epsilon^{-2.65} & \text{otherwise} \end{cases} \quad (\text{II-10})$$

ここで、 μ_f 、 d_p 、 ρ_f および C_d は、それぞれ、流体の粘性係数、粒子直径、流体の密度および抗力係数である。抗力係数は粒子レイノルズ数を用いて、次式で計算する。

$$C_d = \begin{cases} \frac{24}{Re_p} (1 + 0.15 Re_p^{0.687}) & \text{if } Re_p \leq 1,000 \\ 0.44 & \text{otherwise} \end{cases} \quad (\text{II-11})$$

$$Re_p = \frac{|\mathbf{u}_f - \mathbf{v}| \epsilon \rho_f d_p}{\mu_f} \quad (\text{II-12})$$

1.2 液架橋力モデル

粉体間に液体が存在するとき、気液界面での圧力差(ラプラス圧)および表面張力によって、粉体間に引力が生じる。液架橋の状態については、その液量によって3つの異なるフ

エーズが存在する。**Fig. II-2** に液架橋力の状態を示す。Lu ら[89]によると、液量が粒子体積の 20%程度までであれば個々の粒子間で液架橋が形成される Pendular 型(**Fig. II-2(a)**)、液量が 20%から 90%の範囲では複数の粒子間で合一した液架橋が形成される Funicular 型(**Fig. II-2 (b)**)、液量が 90%以上になると粒子間隙が完全に液体で満たされた Capillary 型(**Fig. II-2 (c)**)の構造となる。**Fig. II-3** に、各液架橋構造における液量と液架橋力の関係[89–91]を示す。Pendular 型の領域では、液量の増加に伴って付着力が急激に大きくなるが、Funicular 型の液架橋力では付着力の変化は緩やかになっている。一方 Capillary 型の液架橋力になると、液量の増加に伴って急激に付着力が減少する。これは、粒子間隙が完全に液体で満たされたため、表面張力による引力が働かなくなるためである。Pendular 型の液架橋力については、理想的に配置した 2 つの粒子を用いて導出したモデル式が提案されており、固体粒子の挙動を直接評価できる DEM に液架橋力モデルを導入することで、湿潤粉体の挙動を直接シミュレーションすることが可能となっている。DEM に導入されている液架橋力モデルとして代表的なものに、理論モデル[49, 50]が挙げられる。理論モデルを用いた解析は、ビーズミル[51, 64, 65]や、攪拌機[66]、振動流動層[67]、湿潤粉体の崩壊試験[53, 54]など広い分野で行われており、信頼性の高いモデルである。**Fig. II-4** に、理論モデルにおける粒子壁面間に形成された液架橋の模式図を示す。Israelachvili のモデル式[49]は、以下のように導出される。まず液中のラプラス圧は、表面張力係数 σ を用いて

$$\Delta p = \sigma \left(\frac{1}{\rho_{in}} - \frac{1}{\rho_{out}} \right) \quad (\text{II-13})$$

であらわされる。ここで、 Δp 、 ρ_{in} および ρ_{out} は、それぞれ、ラプラス圧、内曲率半径および外曲率半径である。ここで、Israelachvili のモデルでは、次の 3 つの仮定のもと、式を導出する。

$$\frac{1}{R} = \left(\frac{1}{R_p} + \frac{1}{R_w} \right) \cong \frac{1}{R_p} \quad \left(\because \frac{1}{R_w} = 0 \right) \quad (\text{II-14})$$

$$V_{lq} \ll V_p = \frac{4\pi R^3}{3} \quad (\text{II-15})$$

$$\rho_{out} \ll \rho_{in} \quad (\text{II-16})$$

ここで、 R 、 R_p 、 R_w 、 V_{lq} および V_p は、それぞれ、Derjaguin 近似による曲率半径、粒子の半径、壁面の曲率半径、液量および粒子の体積である。式(II-16)から、式(II-13)のラプラス圧は、次式のように書き換えられる。

$$\Delta p = -\frac{\sigma}{\rho_{out}} \quad (\text{II-17})$$

ラプラス圧による粒子平板間の引力は、表面間面積をかけることで求められる。このとき、式(II-15)の仮定から、偏角 α は十分に小さい値であると考えられる。従って、付着力は

$$\mathbf{F}_{lq_{pw}} = \pi(R \sin \alpha)^2 \Delta p \mathbf{n} = -2\pi R d \frac{\sigma}{\rho_{out}} \mathbf{n} \quad (\text{II-18})$$

で求められる。ここで、 $\mathbf{F}_{lq_{pw}}$ は粒子平板間の液架橋力、 \mathbf{n} は単位方向ベクトルである。外曲率半径は、**Fig. II-4** から幾何学的に導出できる。

$$(d + H) = \rho_{out}(\cos \theta + \cos(\theta + \alpha)) \cong 2\rho_{out} \cos \theta \quad (\text{II-19})$$

式(II-18)に式(II-19)を代入すると、

$$\mathbf{F}_{lq_{pw}} = -\frac{4\pi\sigma R \cos \theta}{1 + \frac{H}{d}} \mathbf{n} \quad (\text{II-20})$$

が得られる。2 粒子間の液架橋力については、式(II-14)において、Derjaguin 近似を用いて曲率半径を次式で定義する。

$$\frac{1}{R} = \left(\frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} \right) \quad (\text{II-21})$$

ここで、 R_1 および R_2 は、それぞれ、粒子 1 および粒子 2 の半径である。**Fig. II-5** に 2 粒子間の液架橋を示す。粒子間液架橋では、式(II-19)における外曲率半径と表面間距離の関係が次の式で表される。

$$(2d + H) = 2\rho_{out} \cos(\theta + \alpha) \cong 2\rho_{out} \cos \theta \quad (\text{II-22})$$

従って、2 粒子間における引力は式(II-18)の外曲率半径を式(II-22)で得られる外曲率半径に置き換えることで求められる。

$$\mathbf{F}_{lq_{pp}} = \pi(R \sin \alpha)^2 \Delta p \mathbf{n} = -2\pi R d \frac{\sigma}{\rho_{out}} \mathbf{n} = -\frac{2\pi\sigma R \cos \theta}{1 + \frac{H}{2d}} \mathbf{n} \quad (\text{II-23})$$

Israelachvili のモデル式では、式(II-14)から(II-16)に示したように、表面間距離、液量および外曲率半径が十分に小さいと仮定して導出している。従って、周に沿って働く表面張力の垂直成分を考慮していない。この力は、液量が少ない場合にはラプラス圧による引力と比べて無視できる程度に小さい[50]が、液量が増加に伴って無視できなくなる。そこで、Rabinovich[50]は、表面張力の垂直成分を考慮した次の式を提案している。

$$\mathbf{F}_{lq_{pw}} = -\left(\frac{4\pi\sigma R \cos \theta}{1 + \frac{H}{d}} + 2\pi\sigma R \sin \alpha \sin(\theta + \alpha) \right) \mathbf{n} \quad (\text{II-24})$$

$$\mathbf{F}_{lq_{pp}} = -\left(\frac{2\pi\sigma R \cos \theta}{1 + \frac{H}{d}} + 2\pi\sigma R \sin \alpha \sin(\theta + \alpha) \right) \mathbf{n} \quad (\text{II-25})$$

Israelachvili のモデル式について、Willet ら[92]によると、誤差は表面間距離というよりは偏角によって決まることが報告されている。偏角は表面間距離が 0 から離れていくにつれて次第に小さくなり、破断距離付近で再度大きくなる。このとき、算出された液架橋力についても、距離を離れていくにつれて誤差は徐々に小さくなり、破断距離に近づくにつれて徐々に増加する傾向が見られた。また、Rabinovich のモデルについては、Fujihashi ら[93]によると、表面間距離が粒子径に比べて十分に小さい領域では、Israelachvili の式よりも精度が低下することが報告されている。これは、Rabinovich のモデル(式(II-24)および(II-25))に付与された表面張力の垂直成分の項が影響している。ただし、いずれのモデルにおいても、式(II-14)に示した Derjaguin 近似を用いているため、液量が粒子体積の 4% を超えると精度が低下することが知られており[68]、液量が多い体系には適用することが難しいという問題がある。理論モデル以外では、トロイダル近似を用いた式が Pendular 型の液架橋のモデルとしてよく用いられる。Huppmann と Riegger のモデル式[69]は、**Fig. II-5** のパラメーターを用いると、

$$\mathbf{F}_{lqpp} = \left(2\pi\sigma R \sin\alpha \sin(\alpha + \theta) + \pi\sigma R^2 \left(\frac{1}{\rho_{out}} - \frac{1}{\rho_{in}} \right) \sin^2\alpha \right) \mathbf{n} \quad (\text{II-26})$$

と表される。ここで、外曲率半径は、

$$\rho_{out} = \frac{d + \frac{H}{2}}{\cos(\alpha + \theta)} = \frac{R(1 - \cos\alpha) + \frac{H}{2}}{\cos(\alpha + \theta)} \quad (\text{II-27})$$

と、幾何学的に求められる。また、内曲率半径と外曲率半径の関係式から、内曲率半径は次式で求められる。

$$\begin{aligned} \rho_{in} &= R \sin\alpha - \rho_{out}(1 - \sin(\alpha + \theta)) \\ &= R \sin\alpha - \left(R(1 - \cos\alpha) + \frac{H}{2} \right) \frac{1 - \sin(\alpha + \theta)}{\cos(\alpha + \theta)} \end{aligned} \quad (\text{II-28})$$

式(II-26)、式(II-27)および式(II-28)から、偏角が求まれば液架橋力を算出できる。ここで、これらの連立方程式を閉じるために液量に関する関係式を追加する。

$$\begin{aligned} V_{lq} &= 2\pi \left[\cos(\alpha + \theta) - \left\{ \frac{\pi}{2} - (\alpha + \theta) \right\} \right] (\rho_{out}^3 + \rho_{in}\rho_{out}^2) \\ &\quad + \pi\rho_{in}^2\rho_{out} \cos(\alpha + \theta) \end{aligned} \quad (\text{II-29})$$

計算の途中で液量が変わらないと仮定すると、 α に関する非線形方程式が得られる。理論モデルとの最大の違いは偏角や液量に関して仮定をしていない点であり、液量が多い体系でも適用することができる。しかしながら、式(II-29)で反復計算を要するため、理論モデルのように陽的に導出することができないという問題がある。Huppmann と Riegger のモデルでは粒子半径および接触角はともに同じ値のものにしか適用できなかった。Chen ら [70]は、異なるサイズの粒子間の液架橋について、トロイダル近似によるモデル式を提案した。Fig. II-6 に粒子間液架橋の模式図を示す。液架橋力は内曲率半径および外曲率半径をパラメーターとして、

$$\mathbf{F}_{lqpp} = \left(2\pi\sigma\rho_{in} + \pi\sigma\rho_{in}^2 \left(\frac{1}{\rho_{out}} \right) \right) \mathbf{n} \quad (\text{II-30})$$

で求められる。外曲率半径は、2 粒子の中心間距離から幾何学的に次式で計算できる。

$$\rho_{out} = \frac{R_1(1 - \cos \alpha_1) + R_2(1 - \cos \alpha_2) + H}{\cos(\alpha_1 + \theta) + \cos(\alpha_2 + \theta)} \quad (\text{II-31})$$

内曲率半径は、外曲率半径を用いて

$$\begin{aligned} \rho_{in} &= R_1 \sin \alpha_1 - \rho_{out}(1 - \sin(\alpha_1 + \theta)) \\ &= R_2 \sin \alpha_2 - \rho_{out}(1 - \sin(\alpha_2 + \theta)) \end{aligned} \quad (\text{II-32})$$

で求められる。液量については、液架橋の外周に沿って回転体の体積を積分によって計算し、液架橋内部に含まれる球冠部分を減算することで求める。

$$\begin{aligned} V_{lq} &= \pi \left\{ (a^2 + \rho_{out}^2) \rho_{out} (\cos \phi_1 + \cos \phi_2) - \frac{1}{3} \rho_{out}^3 (\cos^3 \phi_1 + \cos^3 \phi_2) \right. \\ &\quad \left. - a \rho_{out}^2 (\sin \phi_1 \cos \phi_1 + \sin \phi_2 \cos \phi_2) \right. \\ &\quad \left. + a \rho_{out}^2 (\phi_1 + \phi_2 - \pi) \right\} \\ &\quad - \frac{\pi}{3} \{ (2 - 3 \cos \alpha_1 + \cos^3 \alpha_1) R_1^3 \\ &\quad + (2 - 3 \cos \alpha_2 + \cos^3 \alpha_2) R_2^3 \} \end{aligned} \quad (\text{II-33})$$

ここで、 $a = \rho_1 \sin \phi_2 + R_2 \sin \alpha_2$ 、 $\phi_1 = \alpha_1 + \theta$ 、 $\phi_2 = \alpha_2 + \theta$ である。Chen らのモデルでは、液架橋の破断距離 H_{rup} に Lian らの式[94]を用いている。

$$H_{rup} = \frac{1}{2} (1 + 0.5\theta) V_{lq}^{\frac{1}{3}} \quad (\text{II-34})$$

Chen らは粒子壁面間の液架橋力についてもトロイダル近似から導出している。**Fig. II-7**に粒子壁面間の液架橋の模式図を示す。このとき、粒子間の時と同様にして、外曲率半径、内曲率半径および液量は次式で求められる。

$$\rho_{out} = \frac{R_1(1 - \cos \alpha_1) + H}{\cos(\alpha_1 + \theta) + \cos \theta} \quad (\text{II-35})$$

$$\rho_{in} = R_1 \sin \alpha_1 - \rho_{out}(1 - \sin(\alpha_1 + \theta)) \quad (\text{II-36})$$

$$\begin{aligned} V_{lq} = \pi \bigg\{ & (b^2 + \rho_{out}^2) \rho_{out} (\cos \phi_1 + \cos \theta) - \frac{1}{3} \rho_{out}^3 (\cos^3 \phi_1 + \cos^3 \theta) \\ & - b \rho_{out}^2 (\sin \phi_1 \cos \phi_1 + \sin \theta \cos \theta) \\ & + b \rho_{out}^2 (\phi_1 + \theta - \pi) \bigg\} - \frac{\pi}{3} (2 - 3 \cos \phi_1 + \cos^3 \phi_1) R_1^3 \end{aligned} \quad (\text{II-37})$$

ここで、 $b = \rho_{out} \sin \phi_1 + R_1 \sin \alpha_1$ である。Chen らのモデル式では、異なる粒子径 R_1 および R_2 に対しても Derjaguin 近似を用いずに液架橋力を評価できる。しかしながら、接触角 θ については同じ値でしか計算できなかった。近年、Sun と Sakai[71]によって、異なる粒径、異なる接触角を持つ体系にも適用可能なモデル式が提案された。**Fig. II-6**において左の粒子の接触角を θ_1 、右の粒子の接触角を θ_2 とすると、外曲率半径、内曲率半径および液量は次式で定義される。

$$\rho_{out} = \frac{R_1(1 - \cos \alpha_1) + R_2(1 - \cos \alpha_2) + H}{\cos(\alpha_1 + \theta_1) + \cos(\alpha_2 + \theta_2)} \quad (\text{II-38})$$

$$\begin{aligned} \rho_{in} &= R_1 \sin \alpha_1 - \rho_{out}(1 - \sin(\alpha_1 + \theta_1)) \\ &= R_2 \sin \alpha_2 - \rho_{out}(1 - \sin(\alpha_2 + \theta_2)) \end{aligned} \quad (\text{II-39})$$

$$\begin{aligned} V_{lq} = \pi \bigg\{ & (a^2 + \rho_{out}^2) \rho_{out} (\cos \phi'_1 + \cos \phi'_2) - \frac{1}{3} \rho_{out}^3 (\cos^3 \phi'_1 + \cos^3 \phi'_2) \\ & - a \rho_{out}^2 (\sin \phi'_1 \cos \phi'_1 + \sin \phi'_2 \cos \phi'_2) \\ & + a \rho_{out}^2 (\phi'_1 + \phi'_2 - \pi) \bigg\} \\ & - \frac{\pi}{3} \{ (2 - 3 \cos \phi'_1 + \cos^3 \phi'_1) R_1^3 \\ & + (2 - 3 \cos \phi'_2 + \cos^3 \phi'_2) R_2^3 \} \end{aligned} \quad (\text{II-40})$$

ここで、 $\phi'_1 = \alpha_1 + \theta_1$ 、 $\phi'_2 = \alpha_2 + \theta_2$ である。Sun と Sakai のモデルにおいて、破断距離の計算には Lian らの式[94]が用いられている。このモデル式では、粒子間および粒子平板間においても異なる接触角を設定することが可能となるため、既存の手法に比べて適用範

囲が広い点で優れている。先行研究において、このモデル式によって得られた計算結果は Rabinovich[50]や Lambert[95]の行った実験結果や Brakke[96]の開発した表面エネルギー最小化法を用いる **Surface Evolver** で求めた定常解とよく一致しており、精度よく計算ができることが示されている。しかしながら、検証計算は理想的な粒子配置で既存の理論モデルや実験結果との比較に留まっており、産業体系に適用可能であることを示すためには検証例を増やす必要がある。

Funicular 型および Capillary 型の液架橋力については、その構造の複雑さもあり、先行研究も Pendular 型のものと比べると非常に少ない。Urso ら[97]は、2次元の Funicular および Capillary 型の液架橋について、理想的な粒子配置を仮定してモデル式を提案している。**Fig. II-8** は理想的な配置における Funicular 型液架橋の模式図である。Urso らのモデルでは、液滴の面積が一定という過程をして導出している。液滴の面積を πr^2 とすると、**Fig. II-8** から偏角について次の関係式が得られる。

$$\begin{aligned} \pi r^2 = \frac{3}{2} R^2 & \left\{ 4 \sin \alpha - \sin 2\alpha - 2\alpha \right. \\ & \left. + 4 \left[\frac{\sin^2 \frac{\alpha}{2}}{\cos(\alpha + \theta)} \right]^2 \left[2\alpha + 2\theta - \frac{5}{3}\pi + \sin(2\alpha + 2\theta) \right] \right\} \quad (\text{II-41}) \\ & + R^2 \left(\sqrt{3} - \frac{\pi}{2} \right) \end{aligned}$$

粒子に作用する液架橋力については、Young-Laplace の式から、次式で求められる。

$$F_{lqpp} = \sigma \left(\pm \frac{L}{c} + 2 \sin(\alpha + \theta) \right) \quad (\text{II-42})$$

ここで、 L は液滴と粒子の接触面の長さ、 c は液架橋の気液界面の長さである。また、Urso ら[98]は、**Fig. II-9** に示すように、幾何学的形状から Funicular 型および Capillary 型における破断距離を次のように導出している。

$$e = \frac{R \left(\frac{1}{2} \sqrt{1 + \left(\frac{\delta}{R} \right)^2} - \cos \alpha \right)}{\cos(\alpha + \theta)} \quad (\text{II-43})$$

ここで、 e はメニスカスの半径である。Urso らのモデルでは、2次元体系において液滴の面積が一定という仮定の下、Young-Laplace の式で液架橋力を算出している。このモデルでは、液量に応じて Pendular/Funicular/Capillary 型のいずれの構造においても液架橋力を算出できるが、モデル式の適用可能な範囲は理想的な粒子配置に限定され、3次元体系への拡張が困難という問題がある。その他、3次元における Funicular 型および Capillary 型の液架橋の計算手法として、自由表面エネルギー最小化法[95, 96, 99]が挙げられる。自由表面エネルギー最小化法の模式図を **Fig. II-10** に示す。離散化された各点 $(P_0, P_1, \dots, P_i, \dots, P_N)$ において、次式を計算する。

$$\min_{\{P_i\}} W = \sigma(S_{GL} - S_1 \cos \theta_1 - S_2 \cos \theta_2) \quad (\text{II-44})$$

ここで、 S_{GL} は液架橋における気液界面の表面積であり、

$$S_{GL} = 2\pi \sum_{i=1}^N \frac{(r_i + r_{i-1})}{2} \sqrt{(x_i - x_{i-1})^2 + (r_i - r_{i-1})^2} \quad (\text{II-45})$$

で求められる。 S_1 および S_2 は、それぞれ、球 1 と球 2 における固液界面の接触面積であり、

$$S_1 = 2\pi R_1^2 (1 - \cos \alpha_1) \quad (\text{II-46})$$

$$S_2 = 2\pi R_2^2 (1 - \cos \alpha_2) \quad (\text{II-47})$$

$$\alpha_1 = \arctan \left(\frac{r_0}{x_0} \right) \quad (\text{II-48})$$

$$\alpha_2 = \arctan \left(\frac{r_N}{R_1 + H + R_2 - x_N} \right) \quad (\text{II-49})$$

で求められる。式(II-44)を計算する際には、以下の拘束条件を与える。

$$\sum_{i=1}^N V(P_i) = V_L \quad (\text{II-50})$$

$$R_1 = \sqrt{x_0^2 + r_0^2} \text{ and } R_2 = \sqrt{(x_N - (R_1 + H + R_2))^2 + r_N^2} \quad (\text{II-51})$$

$$x_i - x_0 = \frac{x_N - x_0}{N} i \quad (\text{II-52})$$

式(II-50)は、計算の途中で液量が一定であることを意味する。式(II-51)は接触点に関する拘束条件である。接触点が求まれば、偏角は式(II-48)および式(II-49)から算出できる。式(II-52)は計算点に関する拘束条件である。計算の最初は円柱型の液架橋を想定し、等間隔に計算点を配置する。計算の途中で液架橋の形状が変わっても、 x 軸方向に等間隔の条件は常に満たしたまま計算点を再配置する。先行研究[71]において、粒子径比が大きくなる ($\frac{R_1}{R_2} \gg 1$ or $\frac{R_2}{R_1} \gg 1$) と収束性が悪くなることが報告されている。また、静的なつり合いを求めるのには適した手法だが、液架橋力によって粒子が移動する場合や、逆に粒子の移動に伴う液架橋力の変化については適用することが難しいという問題がある。その他、液架橋力の直接計算手法として、粒子の挙動を DEM で、気液の計算を Direct Numerical Simulation (以下、DNS と記す)で、気液界面の計算を Volume of Fluid (以下、VOF と記す) 法で計算する DEM-DNS-VOF 法を用いた手法[68, 100]が挙げられる。**Fig. II-11** に固気液界面の模式図を示す。DEM-DNS-VOF 法では、粒子に働く流体力を圧力勾配項、粘性項、表面張力項およびラプラス圧の総和として次式で計算する。

$$\mathbf{F}_p = \int_S (-p\mathbf{I} + \boldsymbol{\tau}) \cdot \mathbf{n}_p dS + \int_S (-\boldsymbol{\Pi}) \cdot \mathbf{n}_p dS \quad (\text{II-53})$$

$$\boldsymbol{\Pi} = -\sigma(\mathbf{I} - \mathbf{n} \otimes \mathbf{n})\delta \quad (\text{II-54})$$

式(II-53)の右辺第一項は流体力、右辺第二項は液架橋力である。先行研究[68]では、粒子流体間の相互作用力の計算に埋込境界法[60]を用いており、式(II-53)はガウスの発散定理を用いて次式で計算する。

$$\mathbf{F}_p = \int_P \nabla \cdot (-\rho \mathbf{I} + \boldsymbol{\tau}) dV + \int_P \nabla \cdot (-\Pi) dV \quad (\text{II-55})$$

式(II-55)で求めた力によって、粒子の併進運動は

$$m \frac{d\mathbf{v}}{dt} = \mathbf{F}_c + \mathbf{F}_p + m\mathbf{g} \quad (\text{II-56})$$

で求められる。自由表面エネルギー最小化法と異なり、粒子に作用する力を直接評価し、粒子の位置および速度を更新できるため、粒子の移動に伴う液架橋力の変化や、液架橋力による粒子挙動の変化を逐次計算できる。他方、液架橋の形状を十分に解像できる格子数が必要なため、粒子径よりも小さい格子で計算を行う必要がある。そのため、1 台の PC で扱える粒子数が限られてしまい、大規模体系への適用が困難という問題がある。ここまで、Funicular 型および Capillary 型の液架橋力の計算手法について述べた。先にも述べた通り、これらの領域では Pendular 型と比較して、その形状の複雑さから、研究実績があまり多くないのが現状である。数値解析モデルについても、2 次元体系や理想的な粒子配置、粒子数の少ない体系における検証に限定される。DEM に直接導入可能なモデル式は、筆者の知り得る限りは存在しておらず、Funicular 型および Capillary 型の液架橋の数値解析モデルの開発は、今後の課題である。

ここまで代表的な液架橋力モデルについて述べた。本研究では DEM に適用可能で、かつ液量の多寡に依らず計算が可能な Sun と Sakai のトロイダル近似によるモデル式[71]を用いる。

2 CFD 法

気相および液相は、次式に示す局所体積平均法[55]を導入した連続の式および Navier-Stokes 方程式で計算する。

$$\frac{\partial \epsilon}{\partial t} + \nabla \cdot (\epsilon \mathbf{u}_f) = 0 \quad (\text{II-57})$$

$$\frac{\partial(\epsilon\rho_f\mathbf{u}_f)}{\partial t} + \nabla \cdot (\epsilon\rho_f\mathbf{u}_f\mathbf{u}_f) = -\epsilon\nabla p + \mathbf{f} + \nabla \cdot (\epsilon\rho_f\boldsymbol{\tau}) + \epsilon\rho_f\mathbf{g} \quad (\text{II-58})$$

ここで、 \mathbf{f} 、 $\boldsymbol{\tau}$ および \mathbf{g} は、それぞれ、流体抗力の反作用項、粘性テンソルおよび重力加速度である。反作用項については Newton の第 3 法則で計算される。

$$\mathbf{f} = -\frac{\sum_i^N \left(\frac{V_{s_i}}{V_p} \mathbf{F}_{drag} \right)}{V_{CFD}} \quad (\text{II-59})$$

式(II-59)において、複数の格子にまたがる粒子の反作用項を計算する際には、粒子の体積分率に基づいて各セルに分配する。 V_{s_i} は空隙率の計算と同様、**Fig. II-12**のように、比を用いて計算する。

3 任意形状壁面モデル

3.1 SDF

DEM における任意形状壁面モデルとして、最近傍の壁面までの距離および壁面の内外を示す符号によって表現する SDF を採用する。符号付距離は次式で定義される。

$$\phi_{SDF}(\mathbf{x}) = d(\mathbf{x}) \cdot s(\mathbf{x}) \quad (\text{II-60})$$

ここで、 $d(\mathbf{x})$ および $s(\mathbf{x})$ は、それぞれ、位置 \mathbf{x} における最近傍壁面までの距離および符号である。**Fig. II-13**に 2 次元体系における SDF の例を示す。図のように、円形の内部が計算領域で、外部が壁面内部とすると、円形内の任意の点において最近傍の壁面までの距離は点と面の距離公式から簡単に求められる。計算領域の内部に正の符号、壁面の内部に負の符号を与えると、図のように符号付距離が求められる。この符号付距離のゼロ等値面をとることで、スカラー場から壁面を再構築できる。壁面の法線ベクトルについては、レベルセット法と同様に勾配から求めることができる。

$$\mathbf{n} = \frac{\nabla\phi_{SDF}}{|\nabla\phi_{SDF}|} \quad (\text{II-61})$$

壁面との距離と壁面の法線ベクトルが与えられれば、DEM において粒子壁面間のオーバーラップについては簡単に求めることができる。

$$\delta_n^{wall} = (\phi_{SDF} - r) \cdot \mathbf{n} \quad (\text{II-62})$$

式(II-62)のオーバーラップを用いると、壁面と粒子の接触力の法線成分は次式のように書ける。

$$\mathbf{F}_{c_n}^{wall} = -k\delta_n^{wall} - \eta\mathbf{v}_n \quad (\text{II-63})$$

式(II-62)は、 $|\nabla\phi_{SDF}| = 1$ の条件下で成り立つ式である。しかしながら、実際には離散化誤差によって $|\nabla\phi_{SDF}| = 1$ は必ずしも全領域で成立するとは限らない。そこで、本モデルでは弾性エネルギーから符号付距離関数法を用いたときの接触力を導出する。粒子壁面の弾性エネルギーは、

$$E = \frac{1}{2}k|\delta_n^{wall}|^2 = \frac{1}{2}k(\phi_{SDF} - r)^2 \quad (\text{II-64})$$

となる。接触力のうち弾性力については式(II-64)の弾性エネルギーを微分して得られる。

$$\mathbf{F}_{spring}^{wall} = \nabla E = -k(r - \phi_{SDF}) \cdot \nabla\phi_{SDF} = -k\delta_n^{wall}|\nabla\phi_{SDF}| \quad (\text{II-65})$$

なお、接戦方向については従来手法と同じモデル化を行う。

SDF を用いた壁面モデルでは、粒子の座標における符号付距離は都度求めるのではなく、計算領域に計算点を等間隔に設置し、各点において符号付距離を予め準備しておく。これにより、それぞれの粒子はその時点での座標における近傍の格子点の値を平均するだけで、壁面との接触判定およびオーバーラップの量を算出できるため、計算コストを下げることができる。加えて、壁面の移動についても座標変換を用いるだけで簡単に記述することができるため、メッシュを用いる手法と比べても導入が容易である。

3.2 IB 法

IB 法は、仮想外力の評価方法によって、Classic IB 法[72]および Direct forcing IB 法[60, 101]に分類できる。Classic IB 法では、弾性体にはたらく力をフック則に基づいて計算し、流体側には反作用力として流体と物体の境界面に返す。**Fig. II-14** は流体 Ω_f 、壁面 Ω_s および境界面 Γ の模式図である。このとき、仮想外力は

$$\mathbf{f}_{IB}(\mathbf{X}_\Gamma) = \mathbf{M}(\mathbf{X}_\Gamma) \quad (\text{II-66})$$

で求められる。ここで \mathbf{M} は、物体の物性値を表すパラメーターである。式(II-66)で計算した力は、デルタ関数を用いて流体格子に分配される。

$$\mathbf{f}_{IB}(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{X} \in \Gamma} \mathbf{f}_{IB}(\mathbf{X}) \delta_h(\mathbf{x} - \mathbf{X}) \Delta \mathbf{X} \quad (\text{II-67})$$

Non-slip 境界条件を満たすため、境界面は周りの流体の速度によって移動する。

$$\frac{\partial \mathbf{X}_\Gamma}{\partial t} = \mathbf{u}_f(\mathbf{X}_\Gamma) \quad (\text{II-68})$$

$$\mathbf{u}_f(\mathbf{X}_\Gamma) = \sum_{\mathbf{x} \in \Omega} \mathbf{u}_f(\mathbf{x}) \delta_h(\mathbf{x} - \mathbf{X}_\Gamma) \Delta \mathbf{x} \quad (\text{II-69})$$

ここで、 Ω は流体と物体を含む全計算領域である。Classic IB 法では、相互作用力をフック則に基づく力の反作用力として計算しているため、剛体のように剛性が高い物体を扱う際には計算が不安定になる可能性がある。そこで、剛体の境界を扱うため、Direct forcing IB 法が開発された[101]。Direct forcing IB 法を導入した Navier-Stokes 方程式は、次のように離散化される。

$$\frac{\mathbf{u}_f^{n+1} - \mathbf{u}_f^n}{\Delta t} = \mathbf{rhs} + \mathbf{f}_{IB} \quad (\text{II-70})$$

ここで、 \mathbf{rhs} は、移流項、粘性項および圧力勾配項を指す。格子点が流体と物体の境界面に存在している場合、仮想外力は次式で直接求められる。

$$\mathbf{f}_{IB} = \frac{\mathbf{u}_f^{n+1} - \mathbf{u}_f^*}{\Delta t} \quad (\text{II-71})$$

ここで、 \mathbf{u}_f^* は境界面の移動を無視して更新した速度で、

$$\mathbf{u}_f^* = \mathbf{u}_f^n + \mathbf{rhs} \Delta t \quad (\text{II-72})$$

で定義される。Uhlmann[102]は Classic IB 法に Mohd-Yusof ら[101]の Direct forcing IB 法を導入した Explicit direct forcing IB 法を開発した。この手法では、仮想外力は次式で計算される。

$$\mathbf{f}_{IB}(\mathbf{X}_\Gamma) = \frac{\mathbf{u}_f^{n+1}(\mathbf{X}_\Gamma) - \mathbf{u}_f^*(\mathbf{X}_\Gamma)}{\Delta t} \quad (\text{II-73})$$

ここで、 $\mathbf{u}_f^{n+1}(\mathbf{X}_\Gamma)$ は物体の並進速度および回転速度を用いて、次式で計算される。

$$\mathbf{u}_f^{n+1}(\mathbf{X}_\Gamma) = \mathbf{u}_c + \boldsymbol{\omega}_c \times (\mathbf{X}_\Gamma - \mathbf{x}_c) \quad (\text{II-74})$$

ここで、 \mathbf{u}_c は物体の並進速度、 $\boldsymbol{\omega}_c$ は物体の回転速度、 \mathbf{x}_c は物体の重心位置である。 $\mathbf{u}_f^*(\mathbf{X}_\Gamma)$ は式(II-69)を用いて近傍の格子点から内挿して求める。Explicit direct forcing IB 法では、速度の境界条件を満たすように物体と流体の境界で力を計算し、流体格子に内挿して与えることで仮想外力を評価している。デルタ関数を用いて境界面での力を計算領域内部の各流体格子に分配しているため、物体の形状をはっきりと捉えることが難しいという問題があった。そこで、Kajishima ら[60]は仮想外力を直接計算せず、物体近傍の格子点で速度を強制することで相互作用を評価する手法を提案した。**Fig. II-15**は流体格子点(赤色の三角形)と IB 格子点(緑色の四角形)の模式図である。この手法では Navier-Stokes 方程式において、流体の速度の代わりに、格子内部の壁面の体積分率に基づいて重みづけ平均した速度を用いる。

$$\mathbf{u} = (1 - \phi_w)\mathbf{u}_f + \phi_w\mathbf{u}_B \quad (\text{II-75})$$

ここで、 ϕ_w は格子内部において壁面の占める体積分率、 \mathbf{u}_B は境界面の速度で、式(II-74)の右辺を用いて求める。このとき、Navier-Stokes 方程式は次のように離散化できる。

$$\frac{\mathbf{u}^* - \mathbf{u}^n}{\Delta t} = \mathbf{rhs} \quad (\text{II-76})$$

$$\frac{\mathbf{u}^{n+1} - \mathbf{u}^*}{\Delta t} = \mathbf{f}_{IB} \quad (\text{II-77})$$

ここで、式(II-77)において、 $\phi_w = 1$ すなわち物体内部では $\mathbf{u}^{n+1} = \mathbf{u}_B$ 、 $\phi_w = 0$ すなわち流体内部では $\mathbf{f}_{IB} = \mathbf{0}$ 、 $0 < \phi_w < 1$ では線形補間された力になると仮定すると、

$$\mathbf{f}_{IB} = \frac{\phi_w(\mathbf{u}_B - \mathbf{u}^*)}{\Delta t} \quad (\text{II-78})$$

が得られる。この方法では、仮想外力を直接評価する代わりに境界近傍での流速を強制しており、従来の **Explicit direct forcing IB** 法と比べて、境界面を精度よく捉えることが可能となっている。一方で、境界面が移動するような体系では、仮想外力において非物理的な振動が生じることが示唆されている。これは境界面の移動に伴い、境界付近の格子点が流体側から IB 側へ、または IB 側から流体側へと瞬時に切り替わることに起因する。**Borazjani** ら[73]によれば、境界面付近の格子幅を細かくすることで振動は抑制できることが報告されている。**Yang** と **Balaras**[61]は、流速及び圧力場について物体内部を周りの流体と同じ物性の疑似流体として計算することによって、移動境界における力の振動を低減する手法を提案した。**Lee** ら[74]によると、次の 2 つのことが原因で振動が生じると報告されている。1 つは IB 格子点が流体格子点に変わることによって圧力場が不連続になるため、もう 1 つは流体格子点が IB 格子点に変わることによって速度場が不連続になるためである。従って、IB 格子点においても速度場および圧力場を計算することでこうした不連続性が生じることを抑制できる。本研究では、空間に固定した計算格子で固体・流体連成項が計算可能な **Direct forcing IB** 法を採用する。壁面体積分率 ϕ_w の導出において、シンプルなアルゴリズムでより高精度に計算が可能な方法として、**SDF/IB** 法を用いる。詳細を次節にて述べる。

3.3 SDF/IB 法

流体における任意形状壁面モデルには **SDF/IB** 法を採用する。壁面の体積分率について、前述の **SDF** を導入した **SDF/IB** 法を用いることによって、非常に簡単に算出することができる。**Fig. II-16** は **SDF/IB** 法の 2 次元模式図である。**SDF** の計算点は **DEM** 粒子のサイズによって決定するものであり、およそ粒子径の 0.25 倍～0.50 倍に設定することが多い。**DEM-CFD** 法では局所体積平均法によって流体格子は粒子よりも十分に大きくなる必要があるため、流体格子の中には十分な数の **SDF** の計算点が存在している。格子内

部の SDF において負の点の割合を数えることで、壁面の占める割合を算出することが可能となる。

$$\phi_w = \frac{\sum \delta(\phi_{SDF})}{N_{SDF}} \quad (\text{II-79})$$

ここで、 N_{SDF} は格子内部の SDF の計算点の総数で、 δ は

$$\delta(\phi_{SDF}) = \begin{cases} 1 & (\phi_{SDF} \leq 0) \\ 0 & (\phi_{SDF} > 0) \end{cases} \quad (\text{II-80})$$

である。

4 薄板を有する固気混相流の計算手法

4.1 空隙率の評価手法

DEM-CFD 法では、空隙率に基づいて流体の計算をする局所体積平均法(Local volume average: 以下、LVA[55]と記す)を用いている。空隙率を精度よく計算するためには、流体格子は粒子径よりも十分に大きくとる必要がある。Peng ら[103]は、流体格子幅と粒子径の比(d_{CFD}/d_p)は 1.6 以上あれば十分としている一方で、Boyce らの研究[104]では 3.0 以上必要だと結論づけている。体系や使用している流体抗力のモデルにもよるが、流体格子幅の適切な値については具体的な基準はない[105]。明確な基準は存在しないが流体格子幅は粒子径よりも大きくとる必要があるため、薄板を有する体系では流体格子の解像度不足によって、IB 法では薄板の形状を解像できないという問題がある。この問題を解決するためには、粒子径と比較して同等か小さい流体格子でも空隙率を計算できる手法が必要となる。この手法の一つに、Smoothed void fraction method (以下、SVFM[80, 81]と記す)があげられる。**Fig. II-17** は SVFM の模式図である。図のように 3 つの格子のうち真ん中に粒子がある場合を考える。従来手法では、空隙率を

$$\epsilon = 1 - \frac{\sum V_p}{V_{grid}} \quad (\text{II-81})$$

で求める。粒子が複数の格子にまたがっている場合、デルタ関数を用いて体積分率を各格子に分配する。デルタ関数は、

$$H(\mathbf{r}) = \begin{cases} 1 & |\mathbf{r}| \leq 1 \\ 0 & |\mathbf{r}| > 1 \end{cases} \quad (\text{II-82})$$

で与えられる。ここで、 $\mathbf{r} = \mathbf{x}/r_p$ であり、 \mathbf{x} は粒子の重心からの位置ベクトル、 r_p は粒子の半径である。 $|\mathbf{r}| \leq 1$ は粒子の内部を、 $|\mathbf{r}| > 1$ は粒子の外部を意味する。式(II-82)を用いると、空隙率は

$$\epsilon = 1 - \sum_n \frac{\int \int \int_{cell} H(\mathbf{r}_n) dV}{\int \int \int_{cell} 1 dV} \quad (\text{II-83})$$

で求められる。式(II-81)および(II-83)では、いずれの場合でも、流体格子が粒子で完全に埋まっている場合には空隙率が0となり、計算の収束性に問題が生じる。そこで、SVFMでは、単調減少かつ連続の関数を用いて近傍の格子に粒子の体積分率を分配する。このとき、体積保存の観点から、この関数は次の条件を満たす必要がある。

$$\int \int \int_{\mathbf{R}^3} \tilde{H}(\mathbf{r}) dV = \int \int \int_{\mathbf{R}^3} H(\mathbf{r}) dV \quad (\text{II-84})$$

$$\lim_{|\mathbf{r}| \rightarrow \infty} \tilde{H}(\mathbf{r}) = 0 \quad (\text{II-85})$$

$$0 < \tilde{H}(\mathbf{r}) < 1 \quad (\text{II-86})$$

Capecelatro と Desjardins[80]は、ガウス関数を用いて分布関数を次式で定義している。

$$\tilde{H}(\mathbf{r}) = G(\mathbf{r}) = A \exp(-B|\mathbf{r}|^2) \quad (\text{II-87})$$

A および B は係数で、関係式は次式で定義される。

$$\int_0^\infty A \exp(-Br^2) 4\pi r^2 dr = \int_0^1 4\pi r^2 dr = \frac{4}{3}\pi \quad (\text{II-88})$$

式(II-88)を計算すると、

$$B = \left(\frac{3}{4} A \sqrt{\pi} \right)^{\frac{2}{3}} \quad (\text{II-89})$$

が得られる。 A には単分散における粒子の最大充填率 $A = \frac{\pi}{\sqrt{18}}$ が用いられる[81]。ガウス関数を用いた場合、式(II-84)および式(II-85)の条件は満たしているが、

$$\lim_{|\mathbf{r}| \rightarrow +0} \|G(\mathbf{r}) - H(\mathbf{r})\|^2 \neq 0 \quad (\text{II-90})$$

$$\lim_{|\mathbf{r}| \rightarrow +\infty} \|G(\mathbf{r}) - H(\mathbf{r})\|^2 \neq 0 \quad (\text{II-91})$$

であり、式(II-82)に示したデルタ関数には収束しない。収束性を改善するために、Wu ら[81]は疑似拡散関数(Pseudo-diffusion function)を用いる手法を提案している。これは、初期状態($t = 0$)では質量は粒子の内部に均質に存在しているが、時間の経過($t > 0$)に伴って粒子内部の質量を低濃度の外部へと拡散させる。拡散方程式及び境界条件は次の式で与えられる。

$$\frac{\partial w(x, y, z, t)}{\partial t} = a^2 \nabla^2 w(x, y, z, t), \quad -\infty < x, y, z < \infty, \quad t > 0 \quad (\text{II-92})$$

$$w(x, y, z, t)|_{t=0} = f(x, y, z) = H(\mathbf{r}) \quad (\text{II-93})$$

ここで、 w および f は、それぞれ、時間 t における濃度分布および初期濃度分布関数、 a は拡散係数である。 w は重みづけ関数 K を用いて、次式で定義する。

$$w(x, y, z, t) = \int \int \int_{\mathbf{R}^3} K(x - \chi, y - \xi, z - \zeta, t) \cdot f(\chi, \xi, \zeta) d\chi d\xi d\zeta \quad (\text{II-94})$$

$$K(x, y, z, t) = \frac{1}{(4\pi a^2 t)^{3/2}} \exp\left(-\frac{x^2 + y^2 + z^2}{4a^2 t}\right) \quad (\text{II-95})$$

分布関数は濃度分布関数を用いて次のように表される。

$$\begin{aligned} D(\mathbf{r}) &= w(x, y, z, t) \\ &= -\frac{1}{2} [\text{erf}(\kappa) - \text{erf}(\lambda)] - \frac{\sqrt{\tau} \exp(-\lambda^2)}{2\sqrt{\pi}|\mathbf{r}|} \left[\exp\left(\frac{4|\mathbf{r}|}{\tau}\right) - 1 \right] \end{aligned} \quad (\text{II-96})$$

$$\kappa = \frac{|\mathbf{r}| - 1}{\sqrt{\tau}} \quad (\text{II-97})$$

$$\lambda = \frac{|r| + 1}{\sqrt{\tau}} \quad (\text{II-98})$$

$$\text{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x \exp(-y^2) dy \quad (\text{II-99})$$

式(II-96)の分布関数は、式(II-84)、(II-85)および(II-86)を満たしており、ガウス関数を用いた手法の問題点である収束性が改善されている。しかしながら、分布関数を用いる手法では無限遠までの単調減少の関数を使用している。計算領域は有限であるから、分布関数に従って粒子濃度を拡散させた場合、体積保存を満たさないという問題がある。もう一つの手法として、粒子の体積分率と流体の計算に異なるサイズの格子を用いる **Dual grid model**[83]がある。**Fig. II-18** は、**Dual grid model** の模式図である。**Dual grid model** では、空隙率の計算は従来の **DEM-CFD** 法と同様に粒子より十分に大きい **Coarse grid** で、流体の計算は細かな **Fine grid** で行う。**Coarse grid** では、式(II-81)を用いることで従来手法と同様に空隙率を計算できる。**Coarse grid** で計算した空隙率は各 **Fine grid** にマッピングされる。この方法をとることで、従来手法では困難であった粒子径と同等かそれ以下の流体の計算格子に対しても空隙率を設定できる。**Fine grid** で空隙率が得られれば、局所体積平均法に基づく **NS** 方程式を計算することができるため、従来手法よりも高解像度な計算格子で流体の速度場および圧力場を得ることができる。分布関数を用いる **SVFM** と異なり、空隙率の計算は従来手法と同じ手順であるため、体積保存の点で問題は生じない。先行研究において **Dual grid model** は、高炉[84]、ダムブレイク[83]、粒子沈降[82]、3D プリンター[85]、水噴流加工[86]などに適用されており、既存手法よりも界面の追跡精度が向上したり、既存手法では扱うことが難しいような狭い流路における固気混相流が計算可能となることが示されている。一方で、**Dual grid model** では計算格子を従来手法より細かく分割するため、計算コストは大きく増加することが問題点として挙げられる。**Pozzetti** ら[106]は、**Dual grid model** を大規模体系へ適用させるため、並列計算手法を導入している。**Fig. II-19** に、**Dual grid model** における並列処理のための空間分割の例を示す。図に示すように、**DEM** と **Coarse grid** については従来手法と同じように分割を行う。他方、空隙率が得られれば流体の計算については **Coarse grid** の分割とは別に行うことができる。

これによって、Fine 格子においてシンプルなアルゴリズムで並列処理が可能となる。このように、Dual grid model を用いることで、従来手法では計算が困難であった粒子径と同等以下の流体格子による計算が可能となるため、狭い流路や複雑な気液界面追跡が期待できる。しかしながら、Dual grid model を用いた DEM-CFD 法では、これまで固体・流体連成項のみに着目されており、薄板を有する体系を計算するためには、任意形状壁面モデルの導入が必要である。そこで、本研究では、Dual grid model に SDF/IB 法を導入した Flexible Eulerian-Lagrangian Method (FELM) を新たに開発する。FELM の詳細は次節で述べる。

4.2 Dual grid model における任意形状壁面モデル

FELM では Dual grid model に SDF/IB 法を導入することで薄板を有する固気混相流の計算を行う。**Fig. II-20** にアルゴリズムを示す。図に示すように、2 種類のサイズの異なる格子を用いて計算する。1 つは空隙率や流体抗力、圧力勾配項の計算に使用する LVA 格子、もう 1 つは流体の計算に使用する RF 格子である。LVA 格子のサイズは既存の DEM-CFD 法と同様に、粒子径よりも大きく設定する。RF 格子はその LVA 格子をさらに分割して設定する。LVA 格子と RF 格子はサイズが異なるため、パラメーターのやり取りに特別なやり取りが必要となる。以下に計算の手順を示す。

(1) LVA 格子内における粒子が占める体積を求める。加えて、壁面が占める体積については、格子内において SDF のピクセルを数えることで求める。

$$V_s^{LVA} = \sum^{LVA} V_s \quad (\text{II-100})$$

$$V_w^{LVA} = V_{CFD}^{LVA} \cdot \frac{\sum^{LVA} \delta(\phi_{SDF})}{N_{SDF}^{LVA}} \quad (\text{II-101})$$

ここで、 N_{SDF}^{LVA} は LVA 格子内における SDF のピクセル数である。したがって、LVA 格子における空隙率は次式で得られる。

$$\epsilon^{LVA} = \frac{V_{CFD}^{LVA} - V_s^{LVA} - V_w^{LVA}}{V_{CFD}^{LVA} - V_w^{LVA}} = 1 - \frac{V_s^{LVA}}{V_{CFD}^{LVA} - V_w^{LVA}} \quad (\text{II-102})$$

(2) RF 格子における壁面の占める体積についても、格子内の SDF のピクセルを数えることで求める。

$$V_w^{RF} = V_{CFD}^{RF} \cdot \frac{\sum^{RF} \delta(\phi_{SDF})}{N_{SDF}^{RF}} \quad (\text{II-103})$$

各 RF 格子において、粒子の占める割合が均質であると仮定する。このとき、粒子の占める体積は、

$$V_s^{RF} = \frac{V_{CFD}^{RF} - V_w^{RF}}{V_{CFD}^{LVA} - V_w^{LVA}} \cdot V_s^{LVA} \quad (\text{II-104})$$

空隙率は粒子及び壁面の占める割合から求めることができる。

$$\epsilon^{RF} = \frac{V_{CFD}^{RF} - V_s^{RF} - V_w^{RF}}{V_{CFD}^{RF} - V_w^{RF}} = 1 - \frac{V_s^{RF}}{V_{CFD}^{RF} - V_w^{RF}} \quad (\text{II-105})$$

(3) RF 格子で更新した圧力や流速は LVA 格子で平均化される。格子中央の SDF の値 $\phi_{SDF_{center}}$ によって、その格子が壁面内部か計算領域内部かを判定する。もし格子中央の SDF の値が正であれば、流体格子と判定して平均化に用いる。このとき、圧力や流速は次式で計算される。

$$p^{LVA} = \frac{\sum p^{RF} (1 - \delta(\phi_{SDF_{center}}))}{\sum (1 - \delta(\phi_{SDF_{center}}))} \quad (\text{II-106})$$

$$\mathbf{u}^{LVA} = \frac{\sum \mathbf{u}^{RF} (1 - \delta(\phi_{SDF_{center}}))}{\sum (1 - \delta(\phi_{SDF_{center}}))} \quad (\text{II-107})$$

ここで

$$\delta(\phi_{SDF_{center}}) = \begin{cases} 1 & (\phi_{SDF_{center}} \leq 0) \\ 0 & (\phi_{SDF_{center}} > 0) \end{cases} \quad (\text{II-108})$$

である。

(4) 流体抗力と圧力抗力項は平均化した流速及び圧力を用いて LVA 格子で計算する。

$$\mathbf{F}_{drag} = \frac{\beta V_p}{1 - \epsilon^{LVA}} (\mathbf{u}^{LVA} - \mathbf{v}) \quad (\text{II-109})$$

$$\mathbf{F}_{pre} = V_p \nabla p^{LVA} \quad (\text{II-110})$$

(5a) Newton の第三法則に基づいて、LVA 格子で流体抗力の反作用項を計算する。

$$\mathbf{f}^{LVA} = - \frac{\Sigma \mathbf{F}_{drag}}{V_{CFD}^{LVA}} \quad (\text{II-111})$$

(5b) 最後に、式(II-111)で求めた反作用項を粒子の占める体積に基づいて分配する。

$$\mathbf{f}^{RF} = \frac{V_s^{RF}}{V_s^{LVA}} \cdot \mathbf{f}^{LVA} \quad (\text{II-112})$$

5 アルゴリズム

5.1 射影法/Fractional Step 法

流体の支配方程式である Navier-Stokes 方程式は、そのままでは計算することができないため、離散化して計算する。このとき、一般によく用いられる手法として射影法/Fractional Step 法[107]がある。簡単のため、まずは流体の単相流で説明する。

射影法では、任意のベクトルが発散なし(solenoidal)および渦なし(irrotational)のベクトルに分解できる Helmholtz の定理に基づいて計算を行う。Helmholtz 分解によって、流速ベクトルは

$$\mathbf{U} = \nabla \phi + \nabla \times \mathbf{A} \quad (\text{II-113})$$

と分解できる。ここで、 $\nabla \phi$ および $\nabla \times \mathbf{A}$ は、それぞれスカラーポテンシャルおよびベクトルポテンシャルを意味する。式(II-113)において、両辺の発散をとると $\text{divrot} = 0$ であるから、

$$\nabla \cdot \mathbf{U} = -\nabla^2 \phi \quad (\text{II-114})$$

というポアソン方程式が得られる。ここで、左辺の \mathbf{U} の値が既知(n ステップ目の値)であれば、ポアソン方程式を計算することができる。こうして計算した値を用いると、 $n + 1$ ステップ目の流速ベクトルは、式(II-113)から、

$$\mathbf{U}^{n+1} = \nabla \times \mathbf{A} = \mathbf{U}^n - \nabla \phi \quad (\text{II-115})$$

で求められる。この式変形において、連続の式 $\nabla \cdot \mathbf{U}^{n+1} = 0$ を満たしていることは、divrot = 0であることから容易に証明できる。この射影法を用いると、単相流における Navier-Stokes 方程式は次のように離散化できる。

$$\frac{\mathbf{u}^* - \mathbf{u}^n}{\Delta t} = -(\mathbf{u}^n \cdot \nabla) \mathbf{u}^n + \nu \nabla^2 \mathbf{u}^n \quad (\text{II-116})$$

$$\frac{\mathbf{u}^{n+1} - \mathbf{u}^*}{\Delta t} = -\frac{1}{\rho_f} \nabla p \quad (\text{II-117})$$

式(II-116)では、まず移流項および粘性項で流速を更新する。このとき得られた中間速度 \mathbf{u}^* については、Navier-Stokes 方程式を解いたものではないため、連続の式を満たしておらず、式(II-115)における左辺の \mathbf{U} に相当する流速を求めたことになる。式(II-117)において、式(II-114)と同様に両辺の発散をとれば、圧力に関するポアソン方程式が得られる。最終的に ∇p の値を代入することで、 $n + 1$ ステップ目の流速に更新できる。式(II-116)および(II-117)において、両辺を足し合わせると元の Navier-Stokes 方程式に戻るため、射影法は Navier-Stokes 方程式の数値解法として広く用いられている。

次に、固体粒子を含む混相流における Navier-Stokes 方程式の解法を示す。流れは単相流と同じであるが局所体積平均法を用いている都合、空隙率によって式がやや煩雑になる。まず、移流項、抗力項、粘性項および重力項によって中間速度を更新する。

$$\mathbf{u}^* = \mathbf{u}^n + \frac{\Delta t}{\epsilon^n \rho_f} \left(-\nabla \cdot (\epsilon \rho_f \mathbf{u} \mathbf{u})^n + \mathbf{f}^n + \nabla \cdot (\epsilon \rho_f \boldsymbol{\tau})^n + \epsilon^n \rho_f \mathbf{g} \right) \quad (\text{II-118})$$

この中間速度を用いて、圧力ポアソン方程式を計算する。

$$\nabla \cdot \left(\frac{\epsilon^{n+1}}{\rho_f} \nabla p^{n+1} \right) = \frac{1}{\Delta t} \left(\frac{\epsilon^{n+1} - \epsilon^n}{\Delta t} + \nabla \cdot (\epsilon^{n+1} \mathbf{u}^*) \right) \quad (\text{II-119})$$

圧力項によって、速度を更新する。

$$\mathbf{u}^{**} = \frac{\epsilon^n}{\epsilon^{n+1}} \mathbf{u}^* - \frac{\Delta t}{\rho_f} \nabla p^{n+1} \quad (\text{II-120})$$

最後に、IB 法による仮想外力によって、 $n + 1$ ステップ目の流速に更新する。

$$\mathbf{u}^{n+1} = \mathbf{u}^{**} + \phi_w(\mathbf{u}_B - \mathbf{u}^{**}) \quad (\text{II-121})$$

5.2 密度スケーリング手法

既存の IB 法では圧力ポアソン方程式を計算した際に、壁面内部に不自然な流れが生じることが報告されていた。密度スケーリング手法では、流体と壁面の格子の接続を弱めるため、スケーリングされた密度を壁面内部に与えている。式(II-119)および(II-120)は次式で書き換えられる。

$$\nabla \cdot \left(\frac{\epsilon^{n+1}}{\rho_{scaled}} \nabla p^{n+1} \right) = \frac{1}{\Delta t} \left(\frac{\epsilon^{n+1} - \epsilon^n}{\Delta t} + \nabla \cdot (\epsilon^{n+1} \mathbf{u}^*) \right) \quad (\text{II-122})$$

ρ_{scaled} はスケーリングされた密度であり、

$$\rho_{scaled} = \begin{cases} \gamma \rho_f & (\text{wall region}) \\ \rho_f & (\text{fluid region}) \end{cases} \quad (\text{II-123})$$

で計算する。 γ はスケーリング定数である。圧力項によって、速度を更新する。

$$\mathbf{u}^{**} = \frac{\epsilon^n}{\epsilon^{n+1}} \mathbf{u}^* - \frac{\epsilon^{n+1}}{\rho_{scaled}} \nabla p^{n+1} \quad (\text{II-124})$$

ここで、密度スケーリング定数について、 $\gamma \rightarrow \infty$ のとき、式(II-122)および(II-124)からも明らかなように、圧力勾配項の計算において壁面と流体の格子の接続を切るはたらきをする。これによって、壁面内部における不自然な流れを低減することが可能となる。式(II-123)において、スケーリング定数自体は流体と壁面の格子の連結を弱めるためのパラメータであり、それ自体に物理的な意味は持たない。

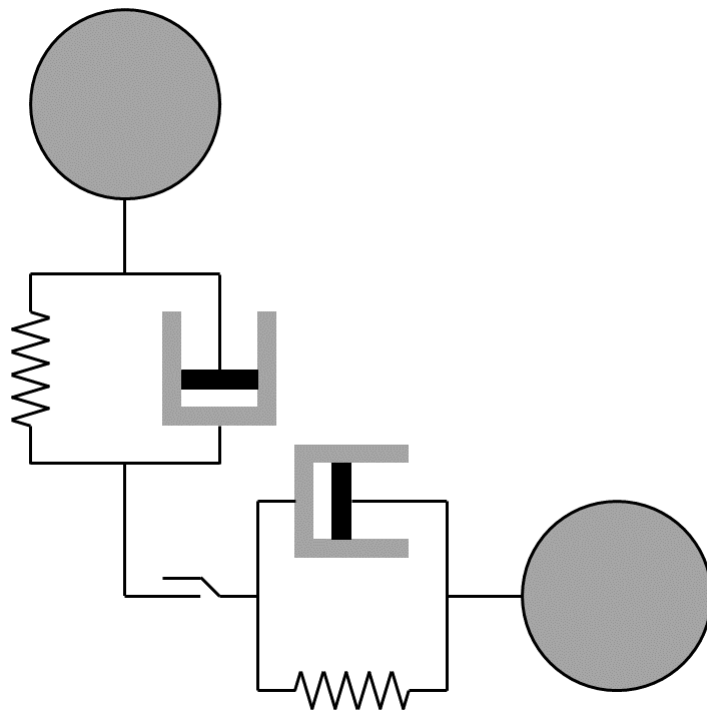
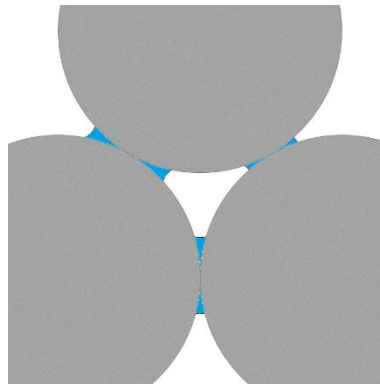
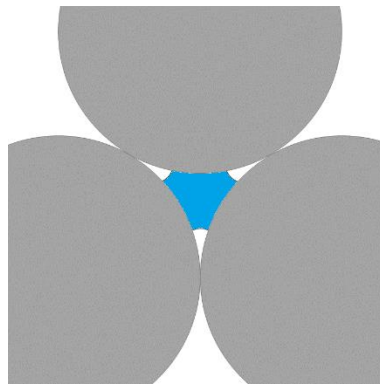


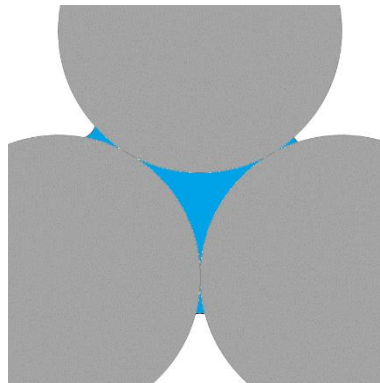
Fig. II-1 Schematic diagram of Voigt model



(a) Pendular



(b) Funicular



(c) Capillary

Fig. II-2 Taxonomy for the concave liquid bridge

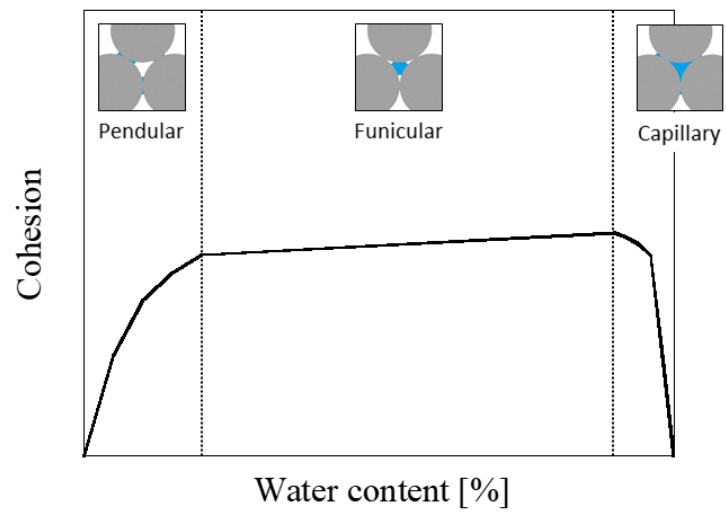


Fig. II-3 Conceptual graph of cohesion force in function of water content

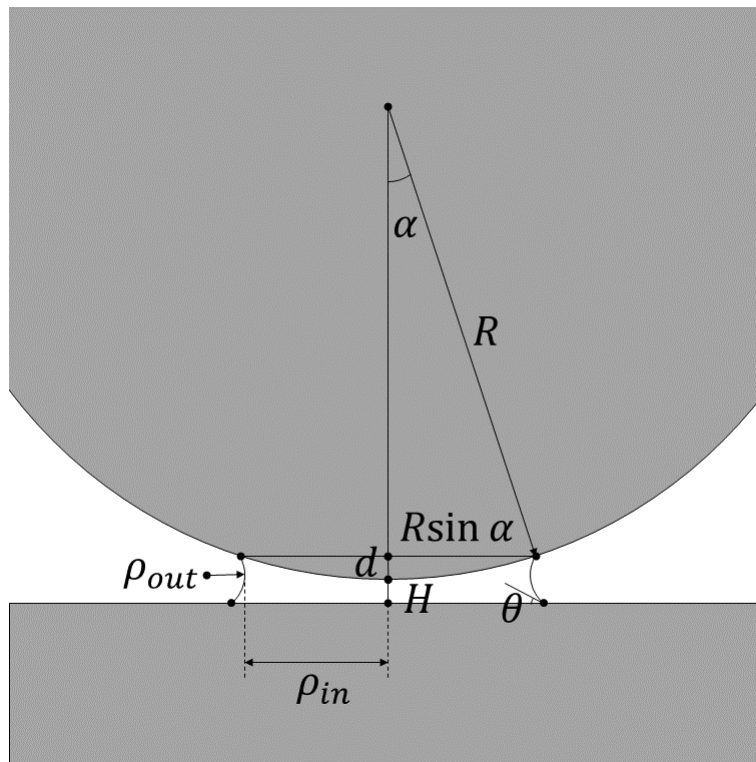


Fig. II-4 Geometrical configuration of a liquid bridge between a particle and a plate

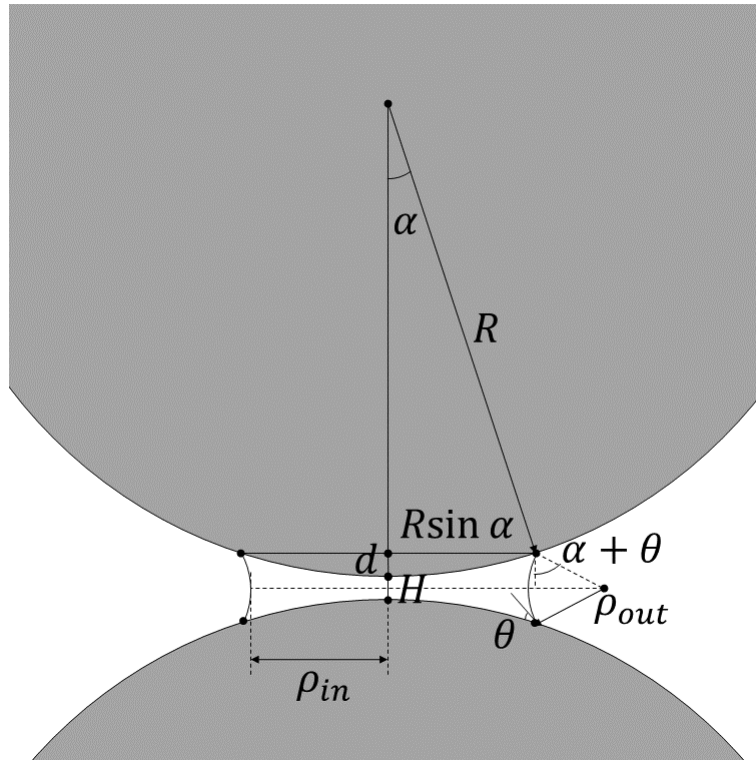


Fig. II-5 Geometrical configuration of a liquid bridge between two particles

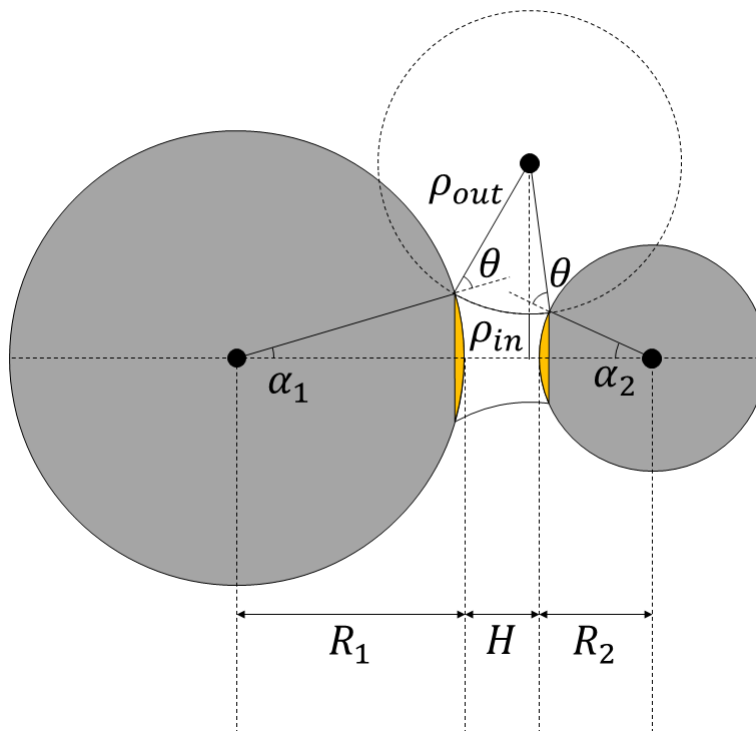


Fig. II-6 Geometrical configuration of a liquid bridge between two unequal-sized particles

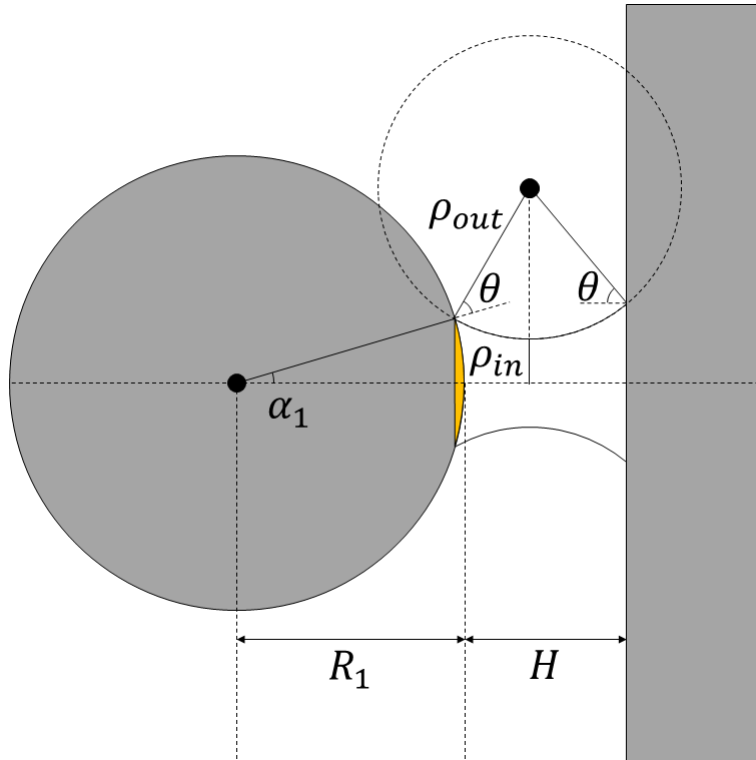


Fig. II-7 Geometrical configuration of a liquid bridge between a particle and a plane in toroidal approximation

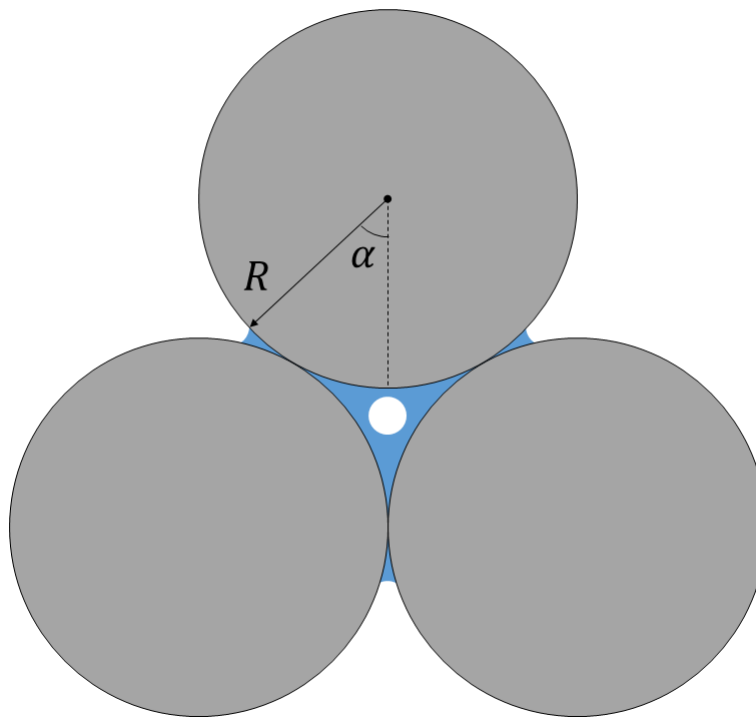


Fig. II-8 Geometrical configuration of a funicular liquid bridge

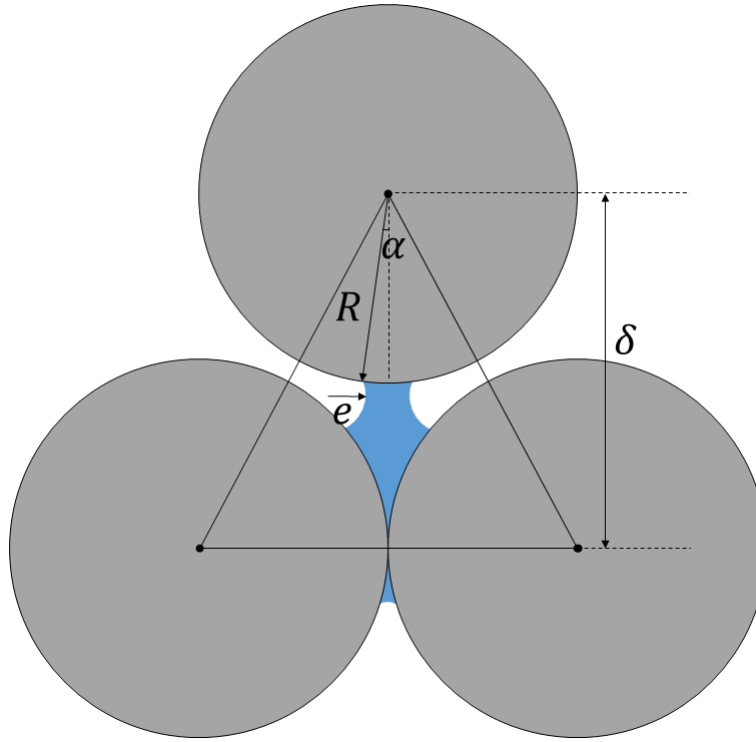


Fig. II-9 Geometrical configuration of rupture distance

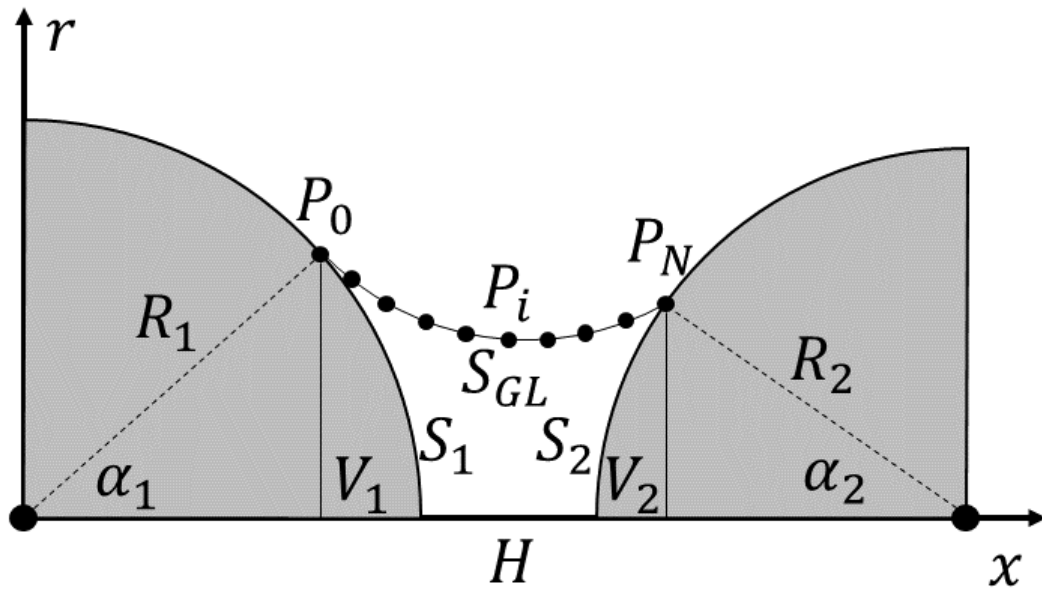


Fig. II-10 Geometrical configuration of liquid bridge between two spheres in the surface energy minimization method

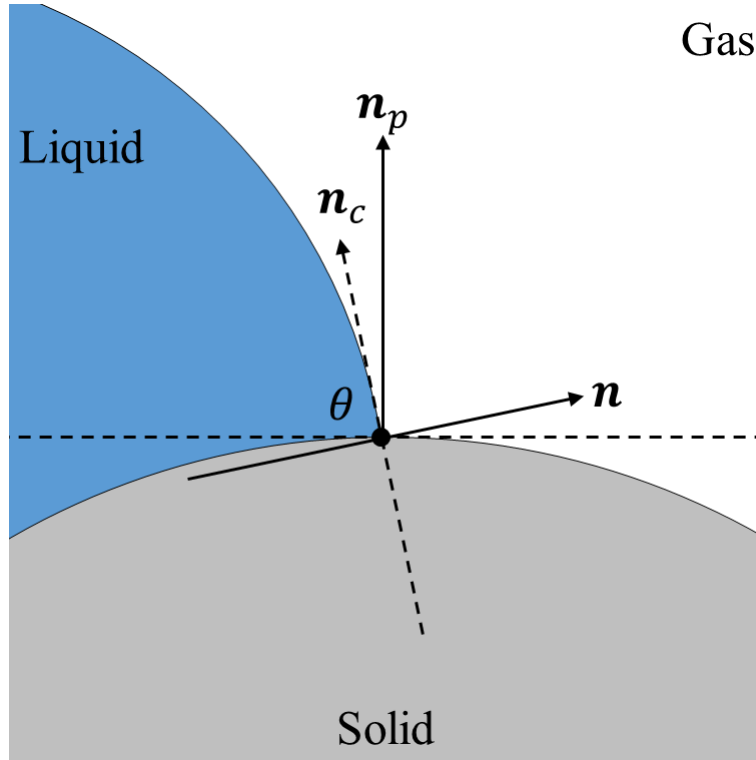


Fig. II-11 Geometrical configuration of gas-solid-liquid interaction point in DEM-DNS-VOF method

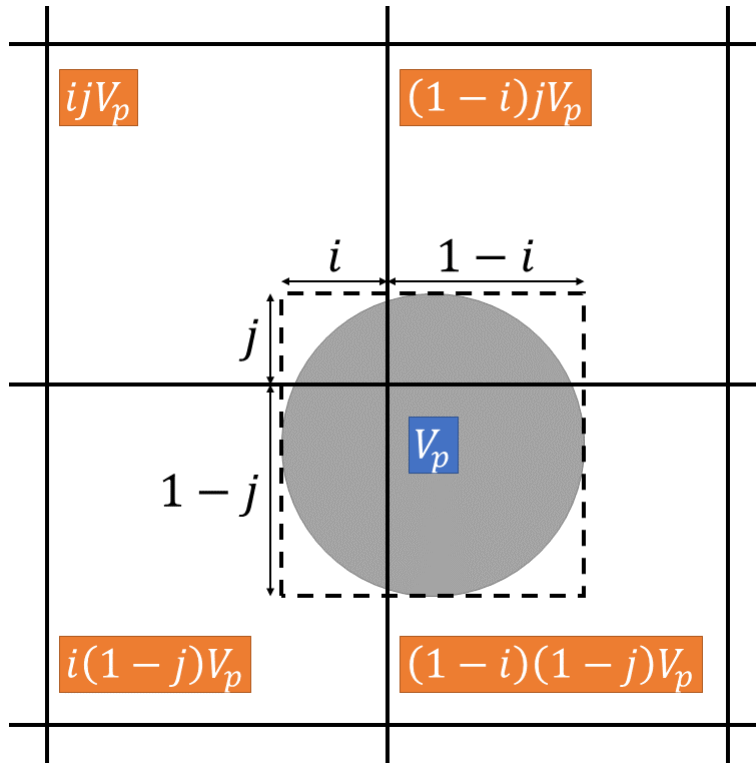


Fig. II-12 Schematic diagram of divided volume method

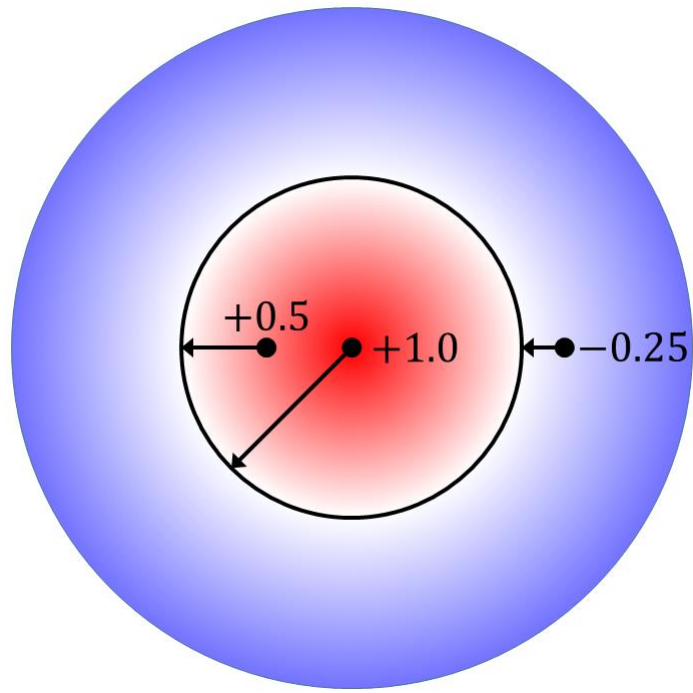


Fig. II-13 2D example of signed distance function

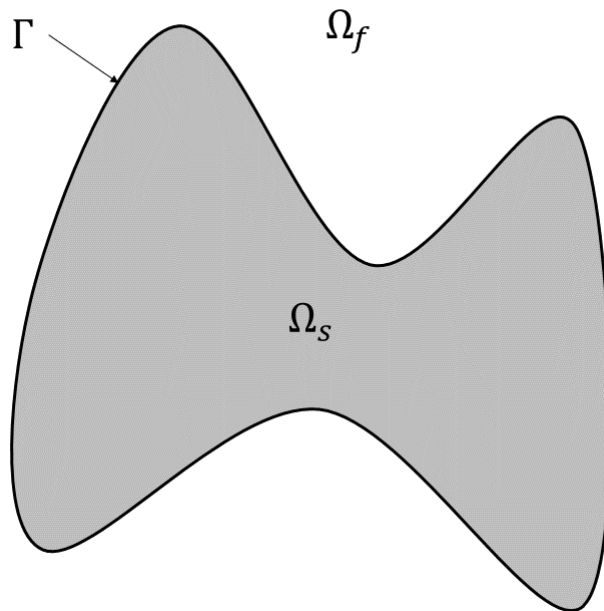


Fig. II-14 Schematic description of the classification of grids

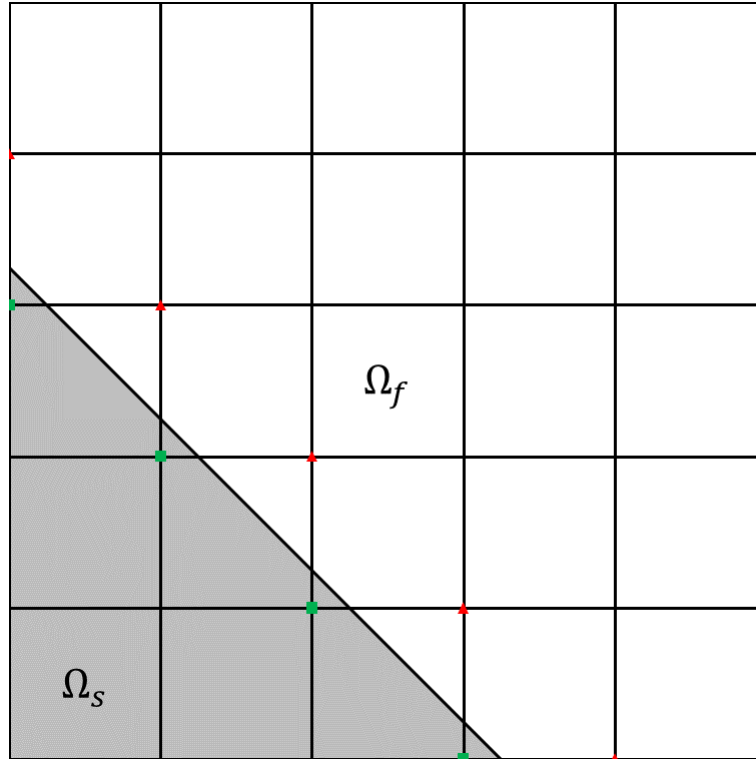


Fig. II-15 Schematic description of the classification of IB and fluid points

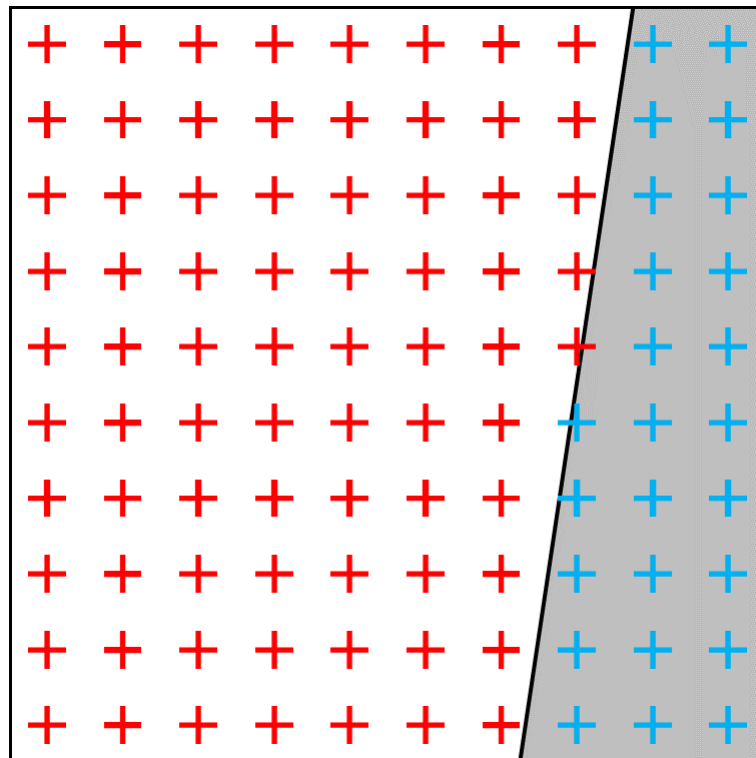


Fig. II-16 SDF points in a CFD grid for calculation of wall volume fraction in SDF/IB

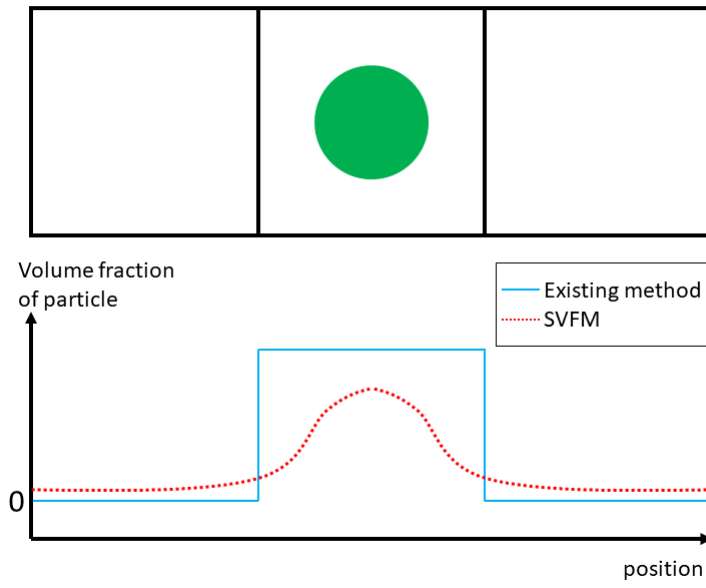


Fig. II-17 Distribution of volume fraction of particle in a simple case

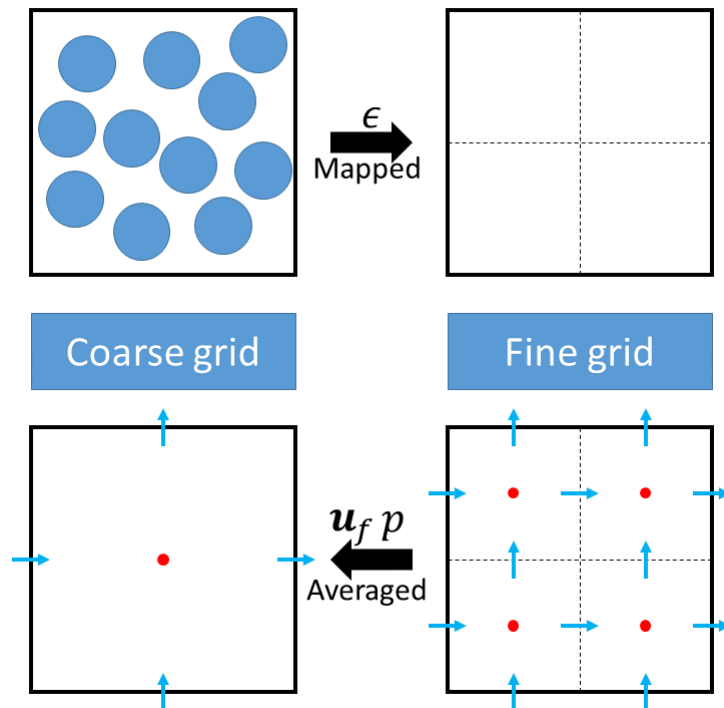


Fig. II-18 Schematic diagram of two different length scales for the dual grid model

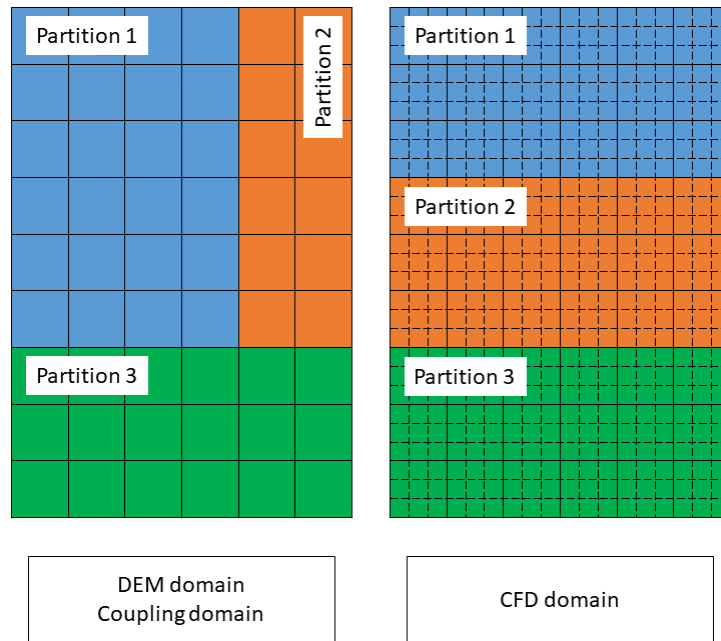


Fig. II-19 DEM-CFD domain partitioning in dual grid model

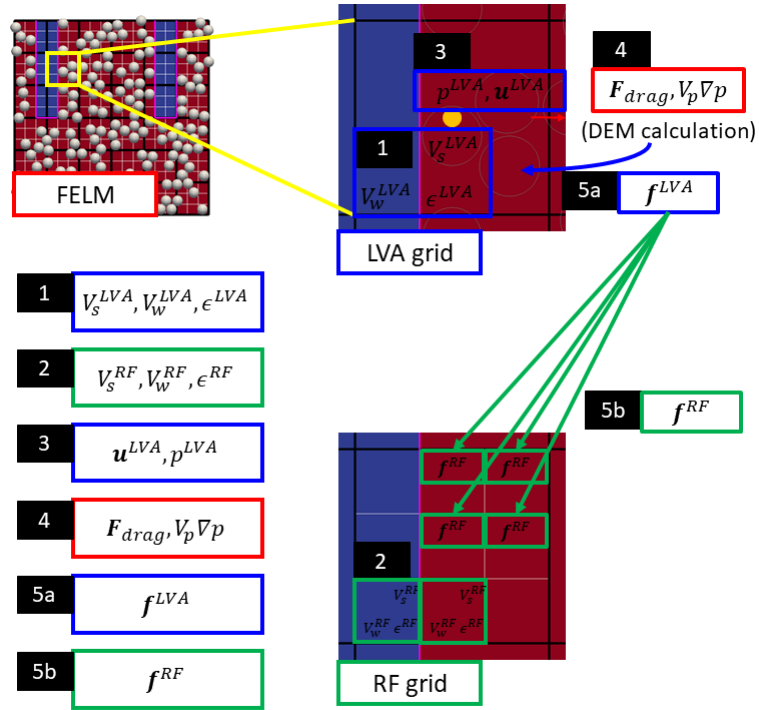


Fig. II-20 Diagram of the calculation algorithm in the FELM

第 III 章 トロイダル近似モデルを用いた液架橋力のシミュレーション

1 序論

粉体層に液体を添加すると粉体間に液架橋力が生じ、粉体間で引力が増大する。湿潤粉体流れは、粉体を扱うプロセスにおいて、流動層[108–110]、空気輸送システム[111–113]をはじめとして、幅広く取り扱われている現象である。湿潤粉体流れでは、凝集体を形成することで混合効率が低下する、空気を流入させた際にラットホール上の流路が形成され流動化が均一に起こらないなどといった、乾燥粉末とは異なる現象が生じることがある。湿潤粉体流れの解析には液架橋力の評価が重要だが、実験だけでは個々の粒子に働く液架橋力を直接評価することは実質的に不可能という問題がある。そのため、現象の把握に、数値シミュレーション手法の導入が期待されている。

数値シミュレーション手法において、液架橋力の評価には液架橋力モデルを導入した DEM が広く用いられる。幾何学的に液架橋力を算出する理論モデル[49, 50]は粒子間距離と液量から陽的に計算できるため、個々の粒子の座標を直接追跡する DEM と親和性が高く、先行研究[51, 53, 54, 64–67]において広く採用されている。しかしながら、理論モデルでは液量が粒子体積の 4% よりも多くなると計算精度が低下することが知られている[68]。産業体系では液量が粒子体積の数十% というケースも多く[9]、液量が多い体系も計算できる手法の導入が期待されている。

理論モデルに対し、液架橋が円形にフィッティングできると仮定して幾何学的に導出したトロイダル近似による液架橋モデルが提案されている。Huppmann と Rieger[69]は単一の粒径、単一の接触角に対して、粒子間液架橋力を幾何学的に導出した。その後、Chen ら[70]によって、異なる粒径の粒子間に働く液架橋力および粒子壁面間に働く液架橋力のモデル式が提案された。さらに近年、Sun と Sakai[71]によって、異なる粒径、異なる接触角の粒子間に働く液架橋力および粒子壁面間に働く液架橋力のモデル式が開発された。トロイダル近似による液架橋力モデルでは、液量の増加に伴って計算精度が低下するという理論モデルの欠点を克服できる。しかしながら、アルゴリズムが理論モデルより複雑なため、トロイダル近似による液架橋力モデルによる実用体系の計算はほとんどされておらず、これまで液量が 10% 以上の体系へ応用されていなかった。

そこで本研究では、トロイダル近似による液架橋力モデルを導入した DEM によって、実用体系における湿潤粉体流れの数値解析を行う。計算体系には、3 本ロールミルを採用する。3 本ロールミルとは、異なる速度と向きに回転する 3 本のロールによって構成される。**Fig. III-1** に 3 本ロールミルの装置を示す。湿潤粉体は **Feed** ロールと **Center** ロールの間に投入され、ロール間の狭い隙間を通過した後、高速で回転する **Center** ロール側に付着する。その後、同様に、**Center** ロールと **Apron** ロールを通過した湿潤粉体は、より高速の **Apron** ロール側に付着して回収される。3 本ロールミルにおいて、湿潤粉体が必ず高速のロール側に付着するメカニズムは解明されておらず、歩留まりの向上が困難という問題があった。高速のロール側に付着するメカニズムの解明には、速度の異なる 2 本のロールがあれば十分なため、検証計算では 2 本のロール間の隙間に湿潤粉体を投入して解析を行う。ロールの回転速度と湿潤粉体の含水率をパラメーターとして、湿潤粉体の付着挙動の解析を行う。3 本ロールミルにおける湿潤粉体の付着挙動メカニズムを解明するため、粒子が付着するロールと反対側のロールとで粒子壁面間の液架橋力のバランスを調べる。

2 解析モデル

解析に用いるのは、液架橋力モデルを導入した DEM である。支配方程式は並進及び回転の 2 式である。

$$m \frac{d\mathbf{v}}{dt} = \sum \mathbf{F}_c + \sum \mathbf{F}_{lq} + \mathbf{F}_g \quad (\text{III-1})$$

$$I \frac{d\boldsymbol{\omega}}{dt} = \sum \mathbf{T} \quad (\text{III-2})$$

ここで、 m 、 \mathbf{v} 、 t 、 \mathbf{F}_c 、 \mathbf{F}_{lq} 、 \mathbf{F}_g 、 I 、 $\boldsymbol{\omega}$ および \mathbf{T} は、それぞれ、質量、速度、時間、接触力、液架橋力、外力、慣性モーメント、角速度およびトルクである。

液架橋力は、第 II 章 1.2 節で述べた Sun と Sakai[71] のトロイダル近似によるモデル式を用いると、

$$\mathbf{F}_{lq} = \pi \sigma \rho_{in} \left(1 + \frac{\rho_{in}}{\rho_{out}} \right) \mathbf{n} \quad (\text{III-3})$$

のように与えられる。ここで、 σ は表面張力係数、 ρ_{in} および ρ_{out} は内曲率半径および外曲率半径、 \mathbf{n} は法線ベクトルである。液架橋の破断距離には Lian らの式[94]を用いる。

$$H_{rup} = \frac{1}{2}(1 + 0.5\theta)V_{lq}^{\frac{1}{3}} \quad (\text{III-4})$$

ここで、 θ は接触角、 V_{lq} は液量である。

DEM の壁面モデルには SDF を用いる。SDF では計算領域内部の計算点において、最近傍壁面までの距離および符号を予め計算しておく。

$$\phi_{SDF}(\mathbf{x}) = d(\mathbf{x})s(\mathbf{x}) \quad (\text{III-5})$$

ここで、 d は最近傍壁面までの距離、 s は壁面の内外を示す符号である。計算領域の内部では正の符号を、壁面の内部では負の符号を与える。粒子と壁面のオーバーラップは、粒子の近傍の計算点における符号付距離を内挿することで計算できるため、粒子壁面間の接触力計算の高速化が可能な点が特徴としてあげられる。

3 解析条件

3 本ロールミルにおける湿潤粉体が必ず高速のロール側に付着するメカニズムを解明するため、DEM シミュレーションを用いて粉体挙動の計算を行った。高速のロール側に付着する挙動については Feed/Center ロール間と Center/Apron ロール間でメカニズムに差異はないと考えられるため、体系をシンプルにするため、**Fig. III-2**に示すように左右の2本のロールを用いた体系で計算を行った。ロールの半径は 50 mm で、ロール間のギャップは 300 μm とした。**Fig. III-3**は SDF の断面図である。図に示すように、SDF を用いることでロールの曲面を滑らかに模擬できている。SDF は計算領域内全域に計算点を設置するため、計算領域が大きくなるとメモリの消費量が多くなってしまう。そこで、**Fig. III-3**のようにロール表面だけを切り取り、物体表面に速度を与えることで回転するロールを模擬した。ロール間中央の上部から、600 x 1200 x 300 μm^3 の直方体の中にランダムに 36,000 個の粒子を配置し、鉛直下向きに投入した。このとき、粒子群の幅はロール間のギャップより大きいため、ロール中央にて圧密されて変形が生じる。本研究では、液量および回転速度をパラメーターとして、検証計算を行った。

TableIII-1 に粒子の物性値を示す。密度は $2,500 \text{ kg/m}^3$ 、ばね定数は 10 N/m 、摩擦係数は 0.3 、反発係数は 0.9 、粒子間接触角は 60 度、粒子壁面間の接触角は 80.6 度および表面張力係数は 72.75 mN/m とした。

TableIII-2 に計算条件を示す。すべてのケースで、左のロールの回転速度は 0.25 m/s で固定し、右のロールの回転速度を(a) 0.25 m/s 、(b) 0.50 m/s 、(c) 0.75 m/s の3つで比較した。Case 1 では、液量を粒子体積の 10% ($6.36 \times 10^{-12} \text{ m}^3$) とした。粒子の初期配置依存性を調べるため、ランダムにパッキングした初期配置を2種類(Type 1 および Type 2)用意し、それぞれのケースを Case 1-1 および Case 1-2 とした。この初期配置は、左と右のロールの回転速度がともに 0.25 m/s で同じ時にそれぞれ左に付着するもの(Type 1)と右に付着するもの(Type 2)になっている。Case 2 および Case 3 においても同様の検証計算を行った。Case 2 では液量を 15% ($9.54 \times 10^{-12} \text{ m}^3$) とし、Type1 を用いる Case 2-1 と Type 2 を用いる Case 2-2 で検証を行った。Case 3 では液量を 20% ($1.27 \times 10^{-11} \text{ m}^3$) とし、Type 1 を用いる Case 3-1 と Type 2 を用いる Case 3-2 で検証を行った。いずれのケースにおいても左と右のロールの回転速度がともに 0.25 m/s のとき、Type 1 では左に付着し、Type 2 では右に付着するように、前もって準備したものを用いた。これら2種類の初期配置について右のロールの回転速度を変えて検証を行うことで、高速のロール側に付着するメカニズムを解明する。

4 数値解析

4.1 粒子初期配置による付着挙動への影響

Fig. III-4 に Case 1-1(a)のスナップショットを示す。Case 1-1(a)では液量が 10% 、右のロールの回転速度は 0.25 m/s 、初期粒子配置は Type 1 である。白の粒子はロール軸中央より上部、赤の粒子はロール軸中央より下部を意味しており、ともに同じ物性値である。湿潤粒子群はロール間のギャップを通過し、最終的には左側に付着する様子が見られた。

Fig. III-5 に Case 1-2(a)のスナップショットを示す。Case 1-2(a)では液量が 10% 、右ロールの回転速度は 0.25 m/s 、初期配置は Type 2 である。このとき、湿潤粉体は最終的に右側に付着した。このように、左右のロール速度が等速の場合には、粒子初期配置によって付着方向が変わることがシミュレーションによって模擬された。**Fig. III-6** に Case 1-1(a)

および Case 1-2(a)における空隙率の変化を示す。いずれのケースにおいても、ロール中央で圧密されている様子が見られ、固体粒子の体積分率はおよそ 0.25 から 0.5 程度まで増加した。このことから圧密過程によって、粒子の再配置が起こっていることが示唆された。ここで、湿潤粉体がロール軸中央を通過する瞬間(20.6 ms)の体積分率と片側のロールに付着した後(40.0 ms)の体積分率を比較すると、いずれも 0.5 付近の値であり、通過後に全体として再配置が起こっている様子は見られなかった。このことから、湿潤粉体がどちらのロールに付着するかについては粒子壁面間の液架橋力のバランスで整理できると考えられる。ロール中央までは圧密過程であり、中央を通過した後はロール間距離が開いていくため、圧縮による力が働かなくなる。そこで、粒子壁面間の液架橋力について、ロール中央を通過した後の粒子(Fig. III-4 および Fig. III-5 における赤色の粒子)に着目して、液架橋力の合計を左右のロールで比較した。液架橋力の推移を Fig. III-7 に示す。Case 1-1(a)では、僅かな差ではあるが左側で粒子壁面間の液架橋力が右側よりも大きくなっていた。一方、Case 1-2(a)では、右側で大きくなっていた。このことから、いずれのケースにおいても、湿潤粉体の付着方向はロール中央軸よりも下部における粒子の壁面との液架橋力の合計のバランスによって整理されることが示された。

4.2 ロール回転速度による付着挙動への影響

左のロールの回転速度を 0.25 m/s に固定し、右のロールの回転速度を 0.50 m/s、0.75 m/s にすることで、回転速度と付着方向の依存性を調べた。Fig. III-8 は Case 1-1(b)の結果である。Case 1-1(b)では、液量が 10%、右のロールの回転速度が 0.50 m/s、粒子初期配置が Type 1 である。Fig. III-9 は Case 1-2(b)の結果であり、液量が 10%、右のロールの回転速度が 0.50 m/s、粒子初期配置が Type 2 である。このとき、いずれのケースにおいても最終的には高速の右のロール側に付着する様子が見られた。Type 1 の初期配置については、ロールの回転速度が等速の場合に左のロール側に付着するものである。このことから、ロールの回転速度が左右で異なるときには、液架橋力のバランスにも変化が生じている可能性が示唆された。Fig. III-10 は Case 1-1(b)および Case 1-2(b)の固体粒子の体積分率の推移を示したものである。いずれのケースにおいても、ロールに付着した時点(5.6 ms)で高速の右のロール側で伸長が生じている様子が見られた。その後、高速の右側で先端が

伸びた形状のまま圧密され、中央を通過した後も圧密された体積分率のまま右側に付着する様子がシミュレーションによって模擬された。このとき、左右のロールでの液架橋力のバランスを **Fig. III-11** にプロットした。Case 1-1(a)および Case 1-2(a)と同様、ロール軸中央を通過した粒子(**Fig. III-8** および **Fig. III-9** における赤色の粒子)と壁面間の液架橋力の合計をプロットしている。**Fig. III-11** に示すように、どちらのケースにおいても明らかに右側で液架橋力が大きくなっている様子が確認できた。**Fig. III-7** と比較して、左右のロールで差が顕著になっている原因としては、先に述べた高速の右側における伸長が考えられる。つまり、ロールの回転速度差によって湿潤粒子群にせん断力が作用し、ロール中央下部で高速の右側に粒子が多く再配置される。これにより高速の右側で粒子壁面間の液架橋力が大きくなり、その結果として、高速のロール側に付着したと考えられる。以上の結果から、左右のロールの速度差に関係なく、3 本ロールミルにおける湿潤粉体の付着メカニズムについては、圧密から解放されるロール中央よりも下部での粒子壁面間の液架橋力のバランスによって決定されることが示された。

次に、右のロールの回転速度を 0.75 m/s にした場合の結果を示す。**Fig. III-12** および **Fig. III-13** は、それぞれ、Case 1-1(c)と Case 1-2(c)の結果である。いずれの場合も、湿潤粉体は最終的に右側に付着する様子がシミュレーションによって模擬された。ここで、Case 1-1(c)では Type 1 の初期配置を使っており、これは等速の場合には左のロールに付着することが確認されている。他方、Case 1-2(c)では、等速の場合も右のロールに付着する Type 2 の初期配置を使っている。このことから、Case 1-1(b)および Case 1-2(b)と同様に、ロール間に速度差がある場合は高速の右側に付着することが示された。**Fig. III-14** に体積分率の変化を示す。ロールに接触した 5.6 ms 時点で、いずれのケースにおいても右側で伸長が起こっている。伸長の度合いについては、Case 1-1(c)および Case 1-2(c)の方が Case 1-1(b)および Case 1-2(b)よりも大きくなっている。これは、左右のロールの速度差が大きくなり、せん断力が強くなったためと考えられる。**Fig. III-15** に、ロール中央より下部における粒子壁面間の液架橋力の推移をプロットした結果を示す。これまでのケースと同様に、粒子の初期配置によらず高速の右側で液架橋力が強くなっていた。液架橋力に差が生じた理由としては、せん断力によって拘束のロール側で伸長が生じ、その結果とし

て高速のロール側に粒子が再配置されたためと考えられる。以上の結果から、3 本ロールミルにおける湿潤粉体の付着挙動について、ロール中央下部での左右のロール間の粒子壁面間付着力のバランスだけで説明できることが示された。3 本ロールミルではロール間に速度差を持たせており、この速度差によって生じるせん断が高速のロール側への粒子の再配置を促している。これにより、選択的に付着方向を決定することができるため、最終的に Apron roll 側に輸送されることが、本研究によって初めて見いだされた。

液量に関する感度解析として、液量 15%(Case 2)および 20%(Case 3)についても同様の解析を行った。**Fig. III-16** から **Fig. III-19** にそれぞれのケースについて粒子初期配置 Type 1 および Type 2 の結果を示す。**Fig. III-16(1)**、**Fig. III-17(1)**、**Fig. III-18(1)**および **Fig. III-19(1)**に示すように、ロールの回転速度が同じ時には左のロールに付着する Type 1 では左側で、右のロールに付着する Type 2 では右側でトータルの液架橋力が強くなった。液量 10%の Case 1 と同じで、等速の場合にはせん断による粒子の初期配置が起こらないため、付着方向を選択的に決定できないことが示された。他方、ロール間に速度差がある場合、すなわち **Fig. III-16(2)**、**Fig. III-16(3)**、**Fig. III-17(2)**、**Fig. III-17(3)**、**Fig. III-18(2)**、**Fig. III-18(3)**、**Fig. III-19(2)**および **Fig. III-19(3)**に示すように、液架橋力は必ず高速の右側で大きくなっていた。以上の結果から、液量に依らず 3 本ロールミルにおける湿潤粒子の付着方向はロール中央下部での粒子壁面間にはたらく液架橋力のバランスで整理されることが示された。3 本ロールミルでは Feed roll、Center roll、Apron roll の順で回転速度が速くなっている。速度差がある場合、せん断力によって高速のロール側で伸長が生じ、その結果として粒子が高速のロール側に再配置される。そのため、高速のロール側で液架橋力が強くはたらき、最終的に Apron roll 側に粒子が付着していくと考えられる。本研究によって、3 本ロールミルにおいて湿潤粉体が必ず高速のロール側に付着するメカニズムが初めて解明された。

5 結論

3 本ロールミルでは、湿潤粉体は必ず高速のロール側に付着して輸送されるが、そのメカニズムについては解明されていなかった。実験では、湿潤粉体流れにおいて個々の粒子

に作用する液架橋力を直接評価することが困難なため、メカニズムの解明に数値シミュレーション手法の導入が期待されていた。

そこで本研究では、トロイダル近似を用いた DEM シミュレーションを用いて、3 本ロールミルにおける湿潤粉体の挙動の解析を行った。検証計算では、粒子の初期配置として、ロールの回転速度が等速の場合に左のロールに付着するものと右のロールに付着するものの 2 種類を準備し、ロールの回転速度と液量を変えた場合の付着挙動の変化について調べた。2 種類の初期配置について、ロールの回転速度が異なる場合には初期配置に依らず、必ず高速のロール側に付着することが数値シミュレーションによって示された。粒子の体積分率を調べたところ、ロール軸中央の狭いギャップでは湿潤粒子群が圧密されることが示された。また、ロール軸中央を通過する粒子群の形状から、ロールの回転速度差に起因するせん断力によって、高速のロール側で湿潤粒子群に伸長が生じており、圧密によって伸長が生じる高速のロール側に粒子が再配置されていることが示唆された。ロール軸中央を過ぎるとロール間の距離は広がっていくため、ロール軸中央よりも下部における液架橋力のバランスによって湿潤粉体の付着方向が決まると考えた。そこで、ロール軸中央よりも下部で左右のロールと粒子間の液架橋力の総和を調べたところ、ロールの速度比に依らず、液架橋力は必ず付着するロール側で大きくなっていることが見いだされた。ロールに速度差がある場合には、高速のロール側で伸長が起こり、伸長によってできた隙間に圧密された粒子が入り込むことによって、高速のロール側で顕著に液架橋力が大きくなる。その結果、湿潤粉体が必ず高速のロール側に付着することが、数値解析によって示され、本研究によって初めて、3 本ロールミルにおける湿潤粉体の付着メカニズムの解明に成功した。

Table. III-1 Physical properties

Item	Unit	Value
Density	kg/m ³	2,500
Spring constant	N/m	10
Friction coefficient	-	0.3
Restitution coefficient	-	0.9
Contact angle with particle	degree	60
Contact angle with wall	degree	80.6
Surface tension coefficient	N/m	72.75x10 ⁻³

Table. III-2 Calculation conditions

		Case 1		Case 2		Case 3	
Item	Unit	Case 1-1	Case 1-2	Case 2-1	Case 2-2	Case 3-1	Case 3-2
Initial particle location	-	Type 1	Type 2	Type 1	Type 2	Type 1	Type 2
Number of particles	-	36,000					
Particle diameter	μm	15					
Initial velocity	m/s	0.5					
Liquid volume	m³	6.36x10 ⁻¹²		9.54x10 ⁻¹²		1.27x10 ⁻¹¹	
Water content	%	10		15		20	
Rotational velocity of left roll	m/s	0.25					
Rotational velocity of right roll	m/s	0.25, (b) 0.50, and (c) 0.75					

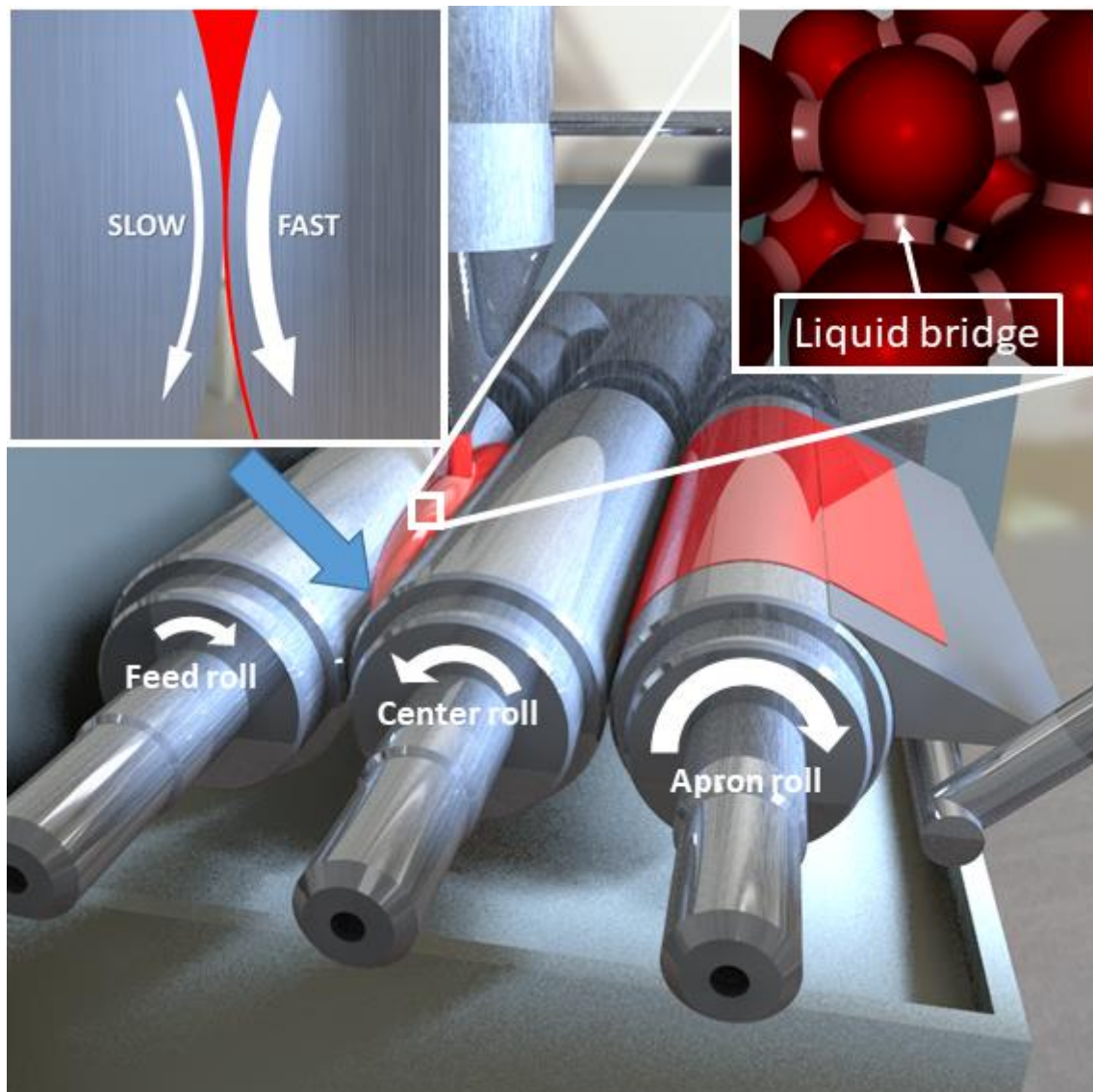


Fig. III-1 Geometry of three-roll mill

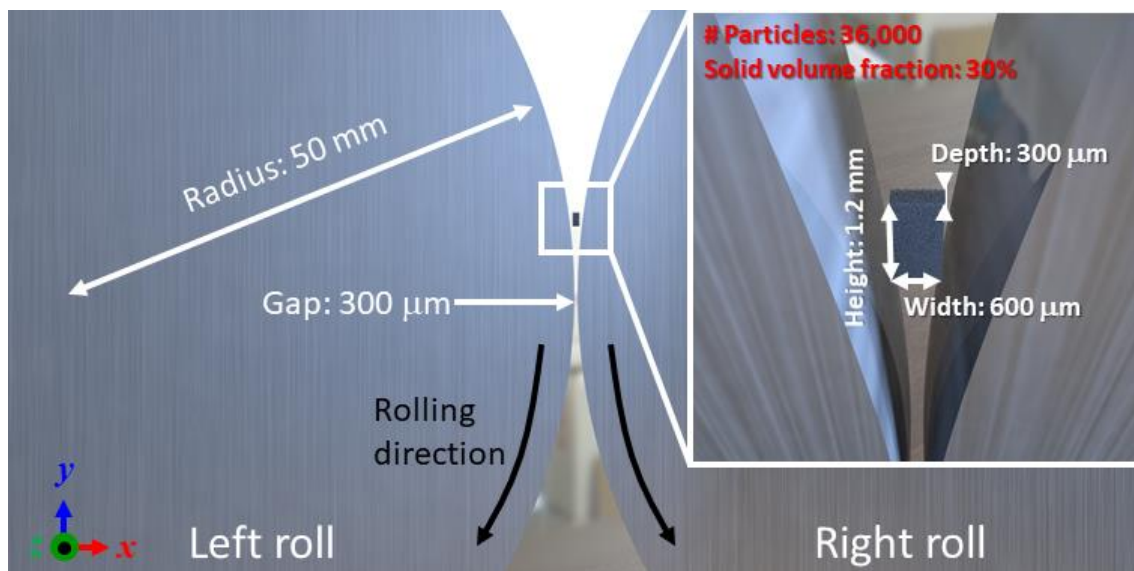


Fig. III-2 Geometrical diagram of simulation system

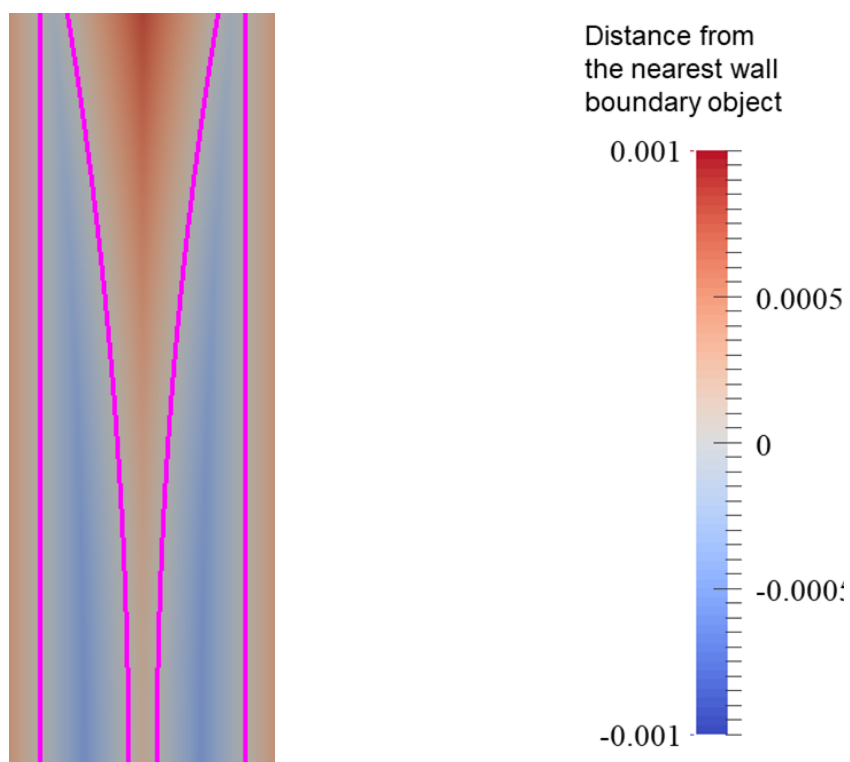


Fig. III-3 Cross-section of SDF

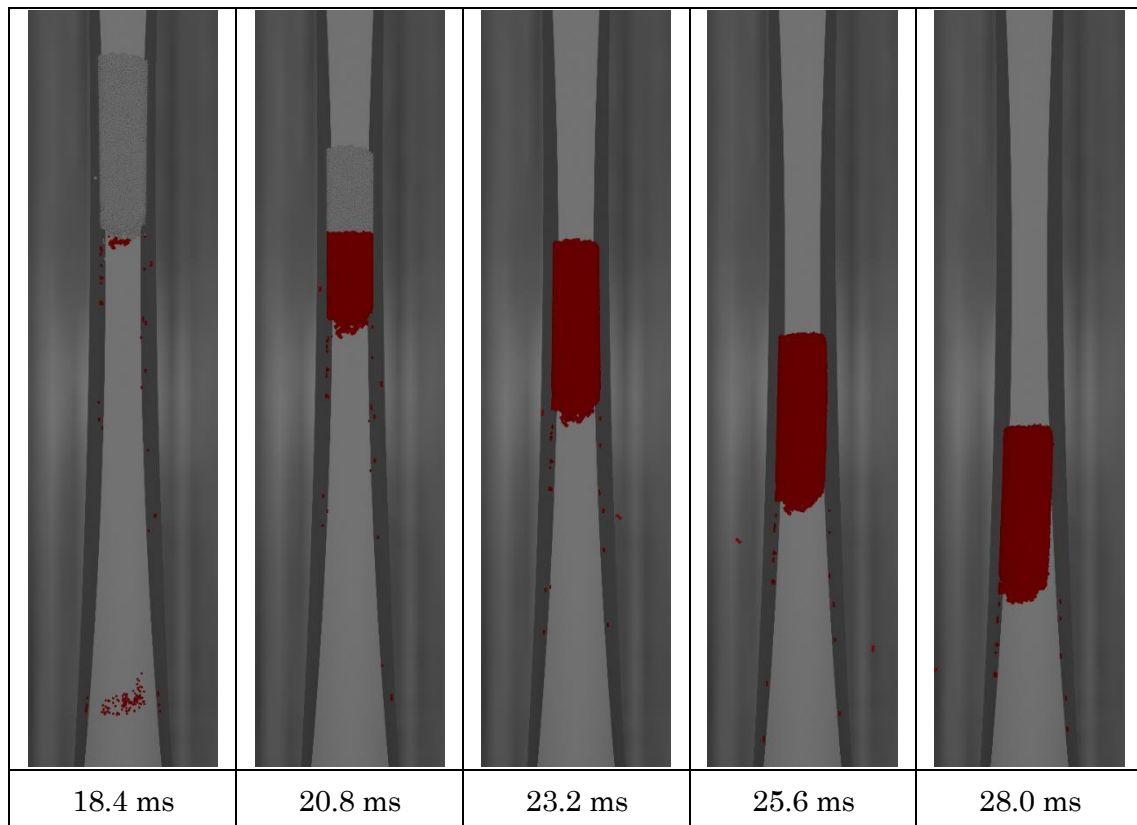


Fig. III-4 Particle distribution in Case 1-1(a) (Liquid content 10%, Left roll 0.25 m/s, Right roll 0.25 m/s, Initial location Type 1)

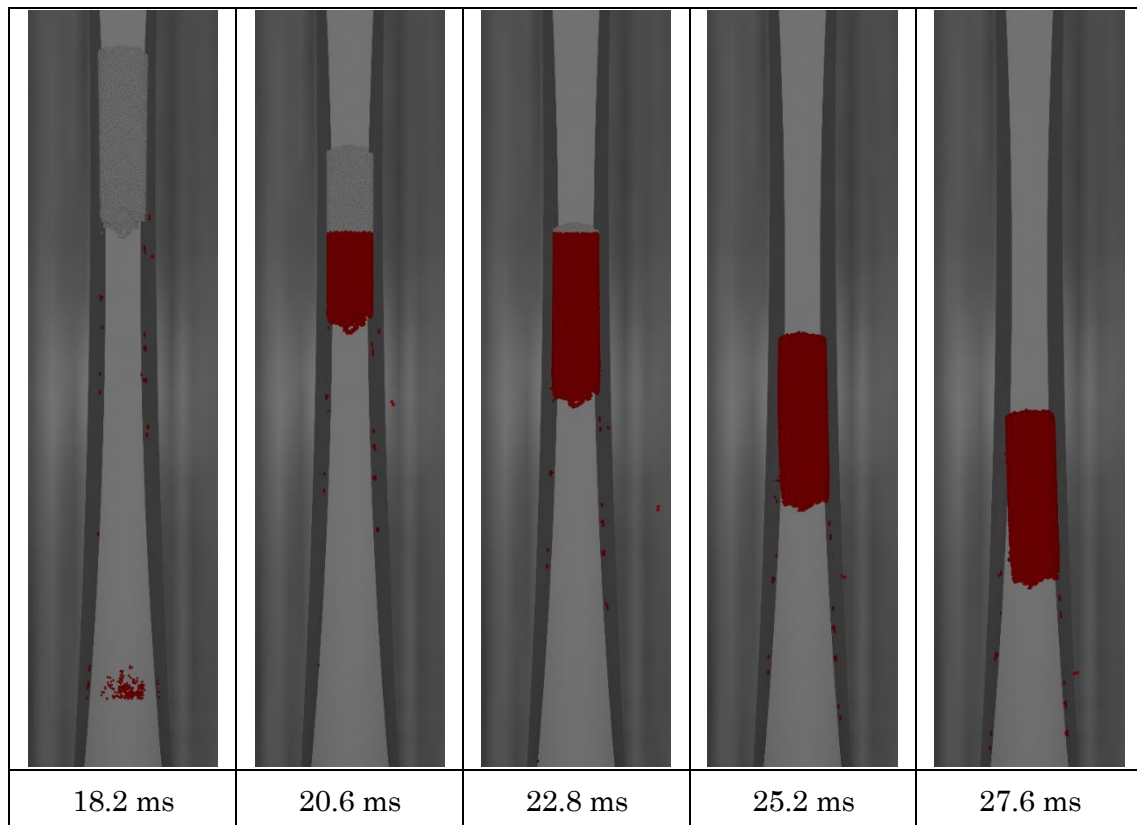


Fig. III-5 Particle distribution in Case 1-2(a) (Liquid content 10%, Left roll 0.25 m/s, Right roll 0.25 m/s, Initial location Type 2)

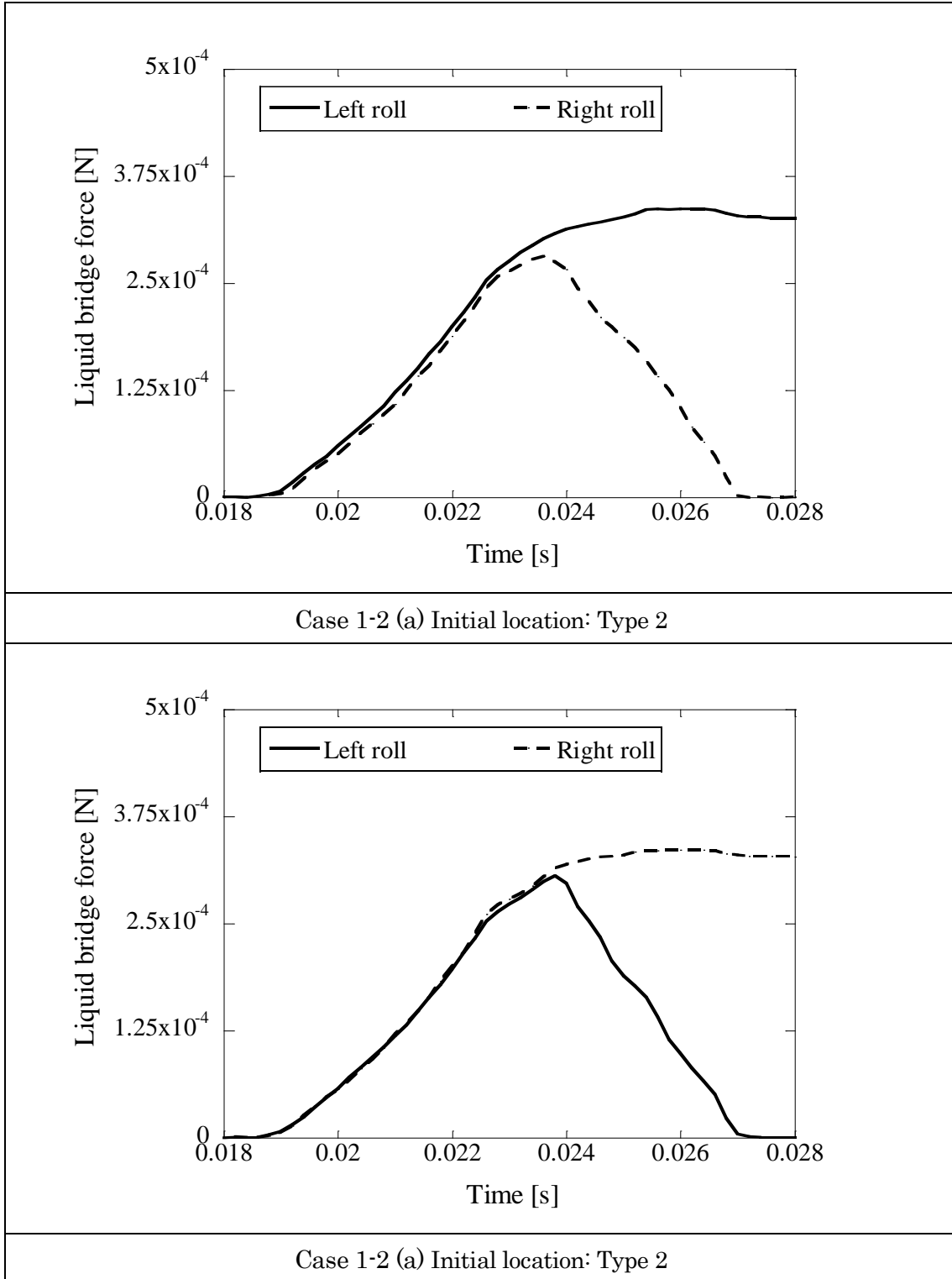


Fig. III-7 Balance of liquid bridge force in Case 1 (Liquid content 10%, Left roll 0.25 m/s, Right roll 0.25 m/s)

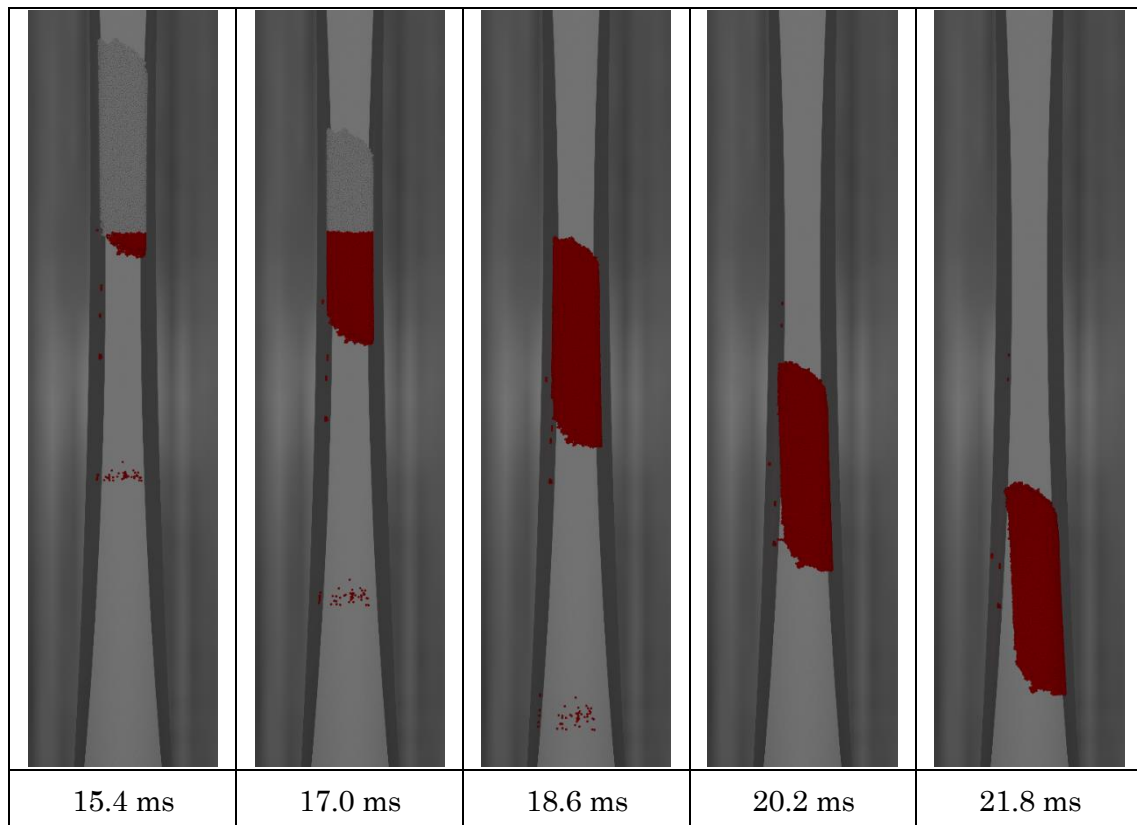


Fig. III-8 Particle distribution in Case 1-1(b) (Liquid content 10%, Left roll 0.25 m/s, Right roll 0.50 m/s, Initial location Type 1)

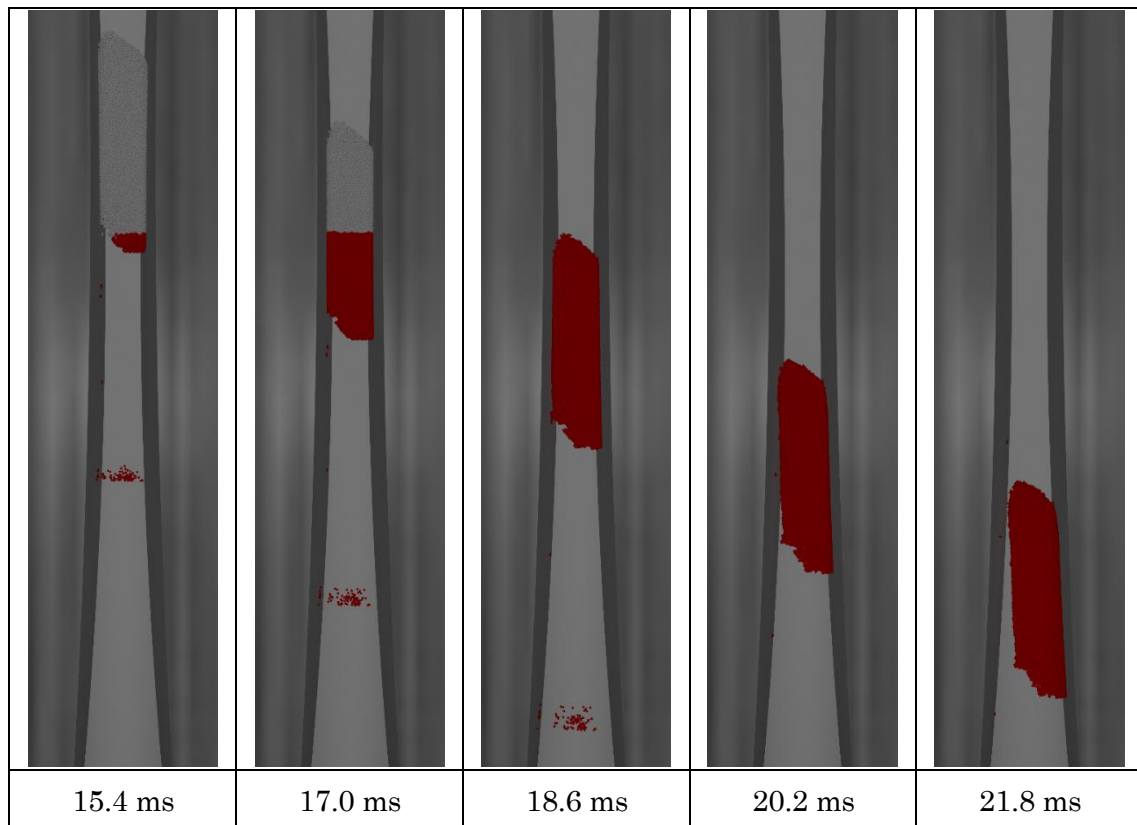


Fig. III-9 Particle distribution in Case 1-2(b) (Liquid content 10%, Left roll 0.25 m/s, Right roll 0.50 m/s, Initial location Type 2)

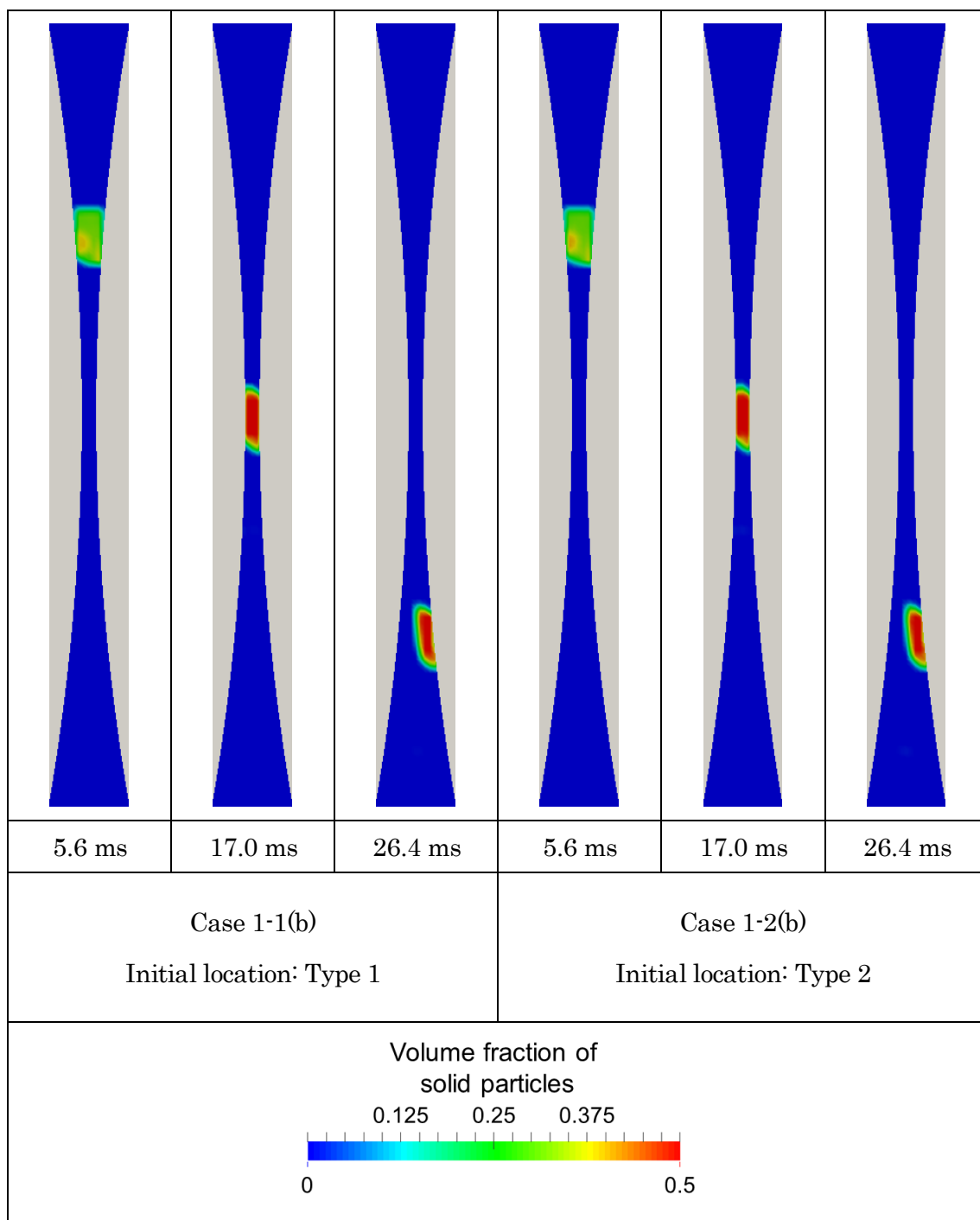


Fig. III-10 Volume fraction of solid particles (Liquid content 10%, Left roll 0.25 m/s, Right roll 0.50 m/s)

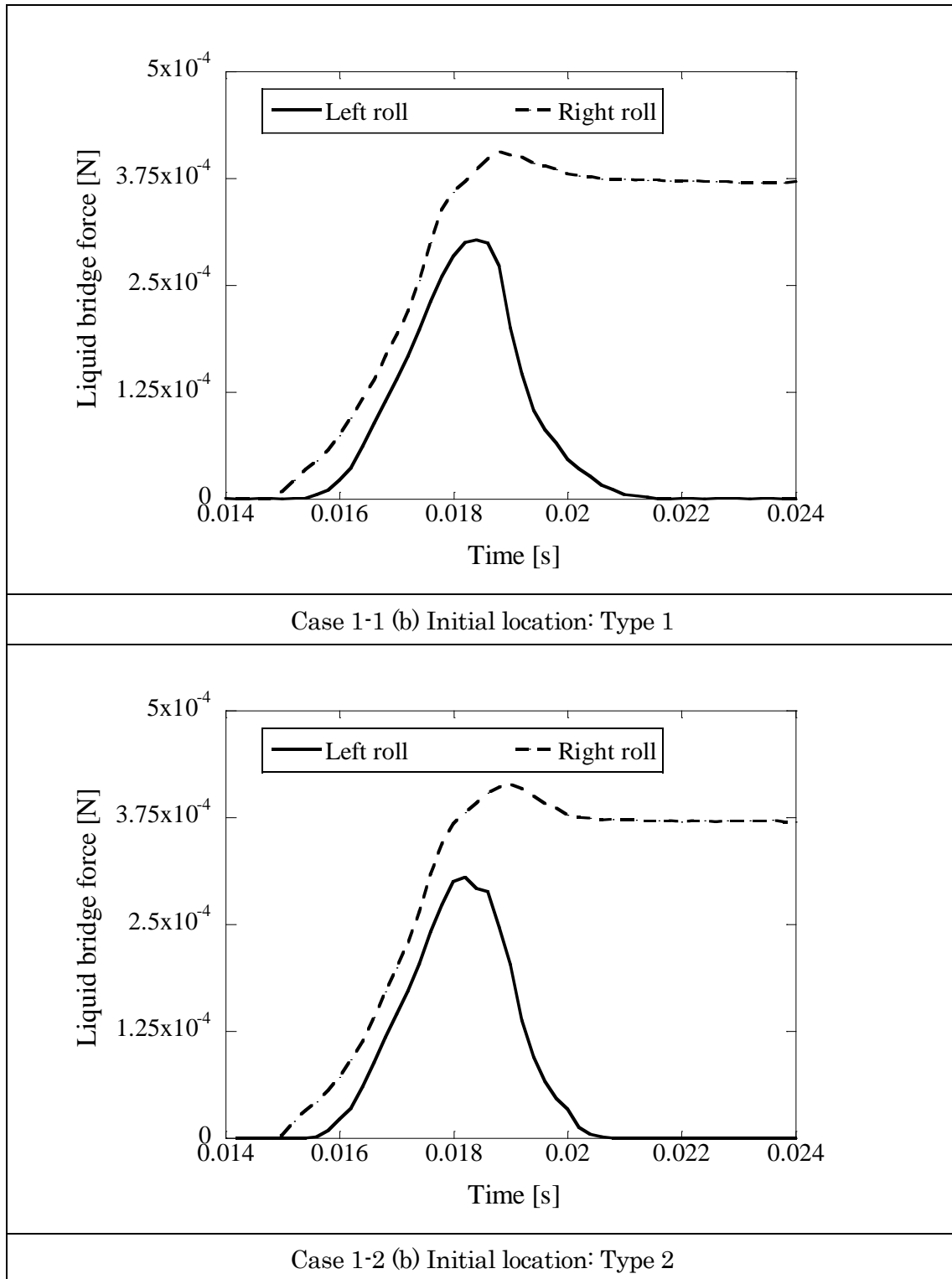


Fig. III-11 Balance of liquid bridge force in Case 1 (Liquid content 10%, Left roll 0.25 m/s, Right roll 0.50 m/s)

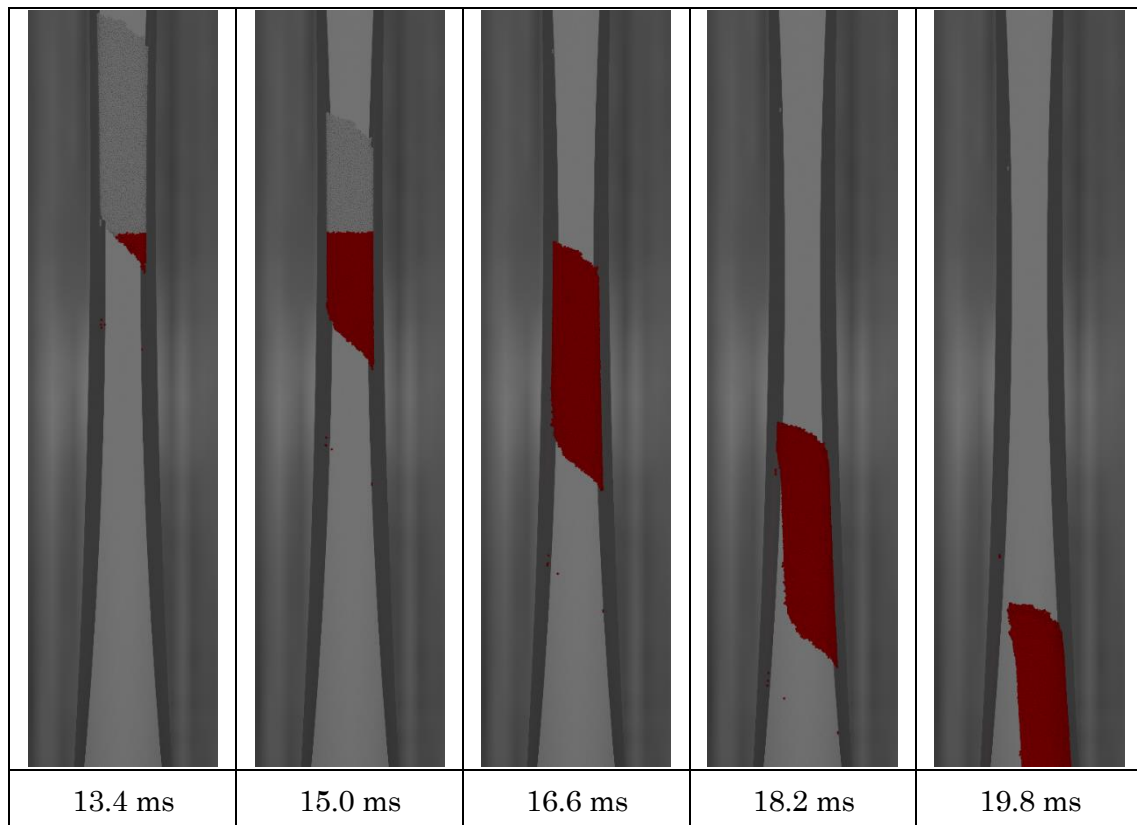


Fig. III-12 Particle distribution in Case 1-1(c) (Liquid content 10%, Left roll 0.25 m/s, Right roll 0.75 m/s, Initial location Type 1)

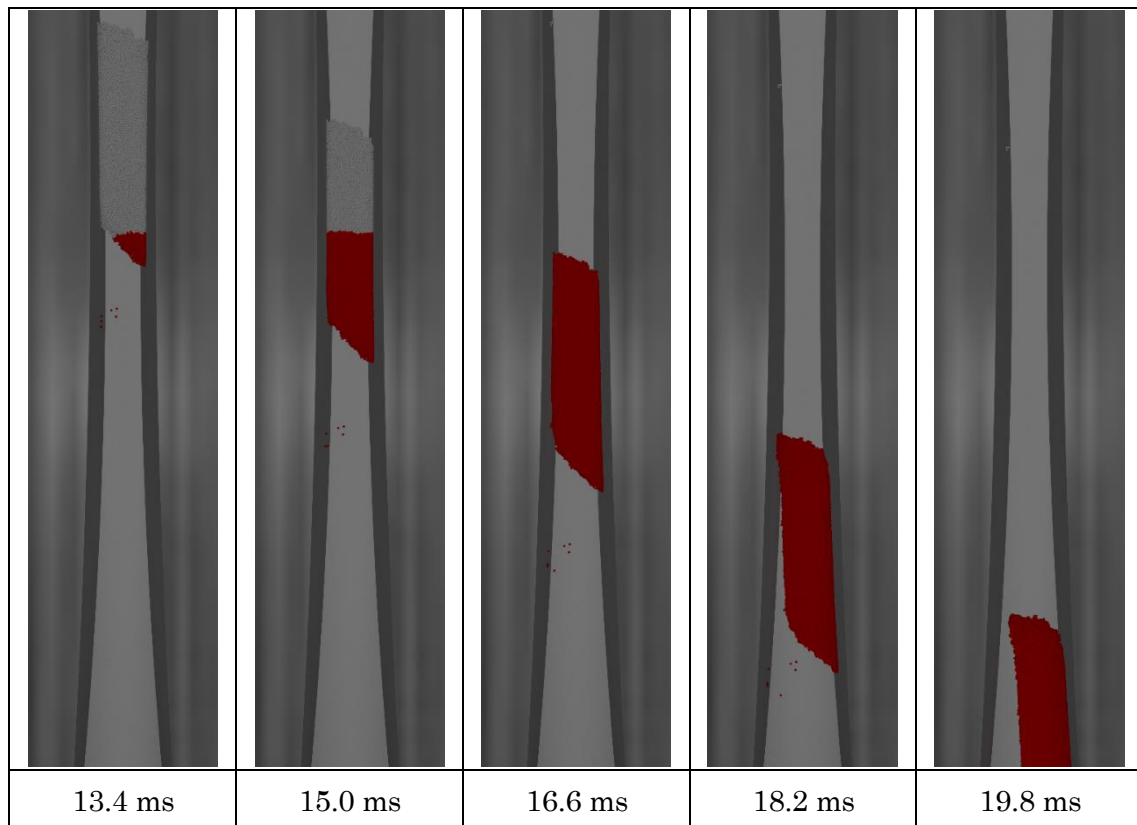


Fig. III-13 Particle distribution in Case 1-2(c) (Liquid content 10%, Left roll 0.25 m/s, Right roll 0.75 m/s, Initial location Type 2)

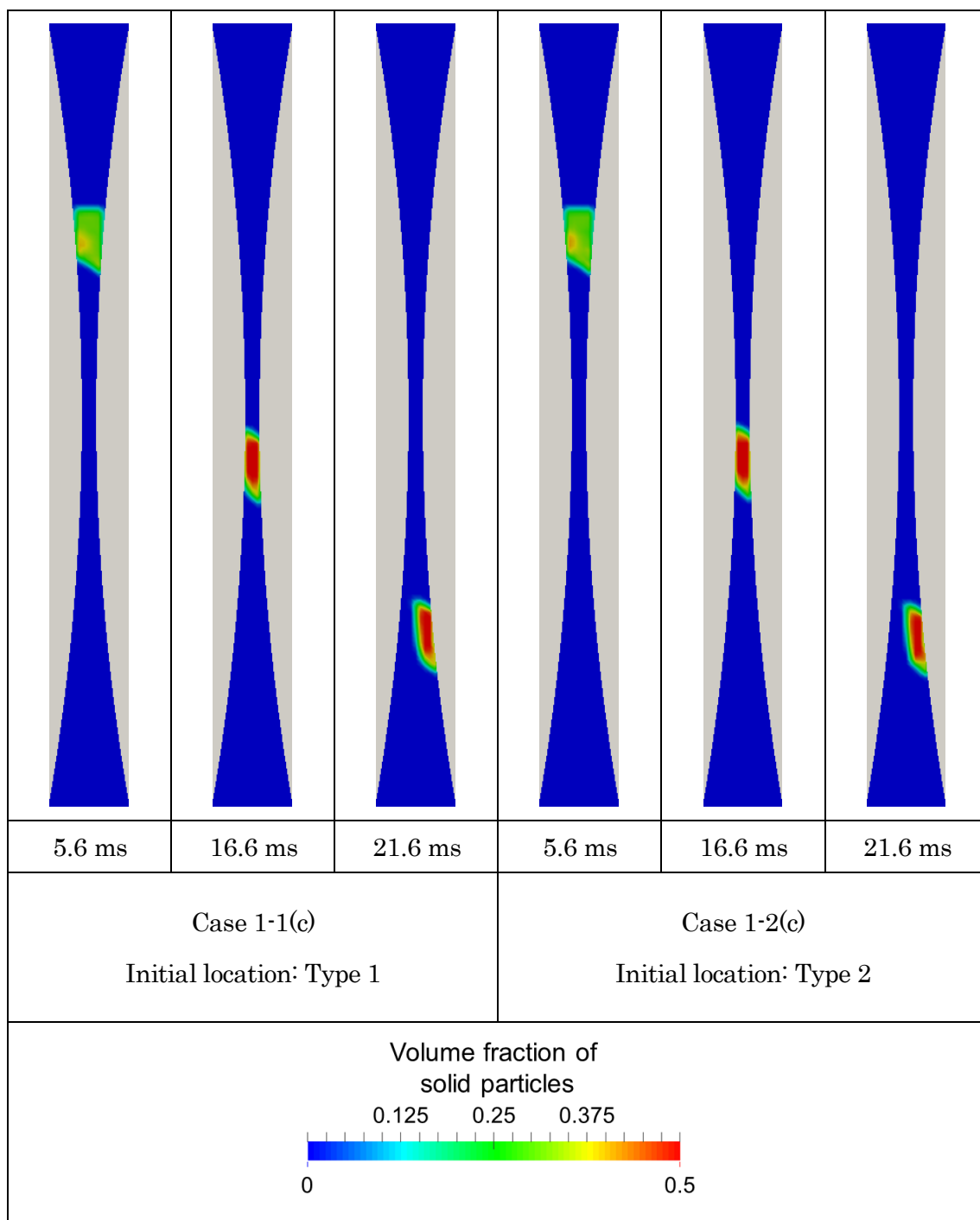


Fig. III-14 Volume fraction of solid particles (Liquid content 10%, Left roll 0.25 m/s, Right roll 0.75 m/s)

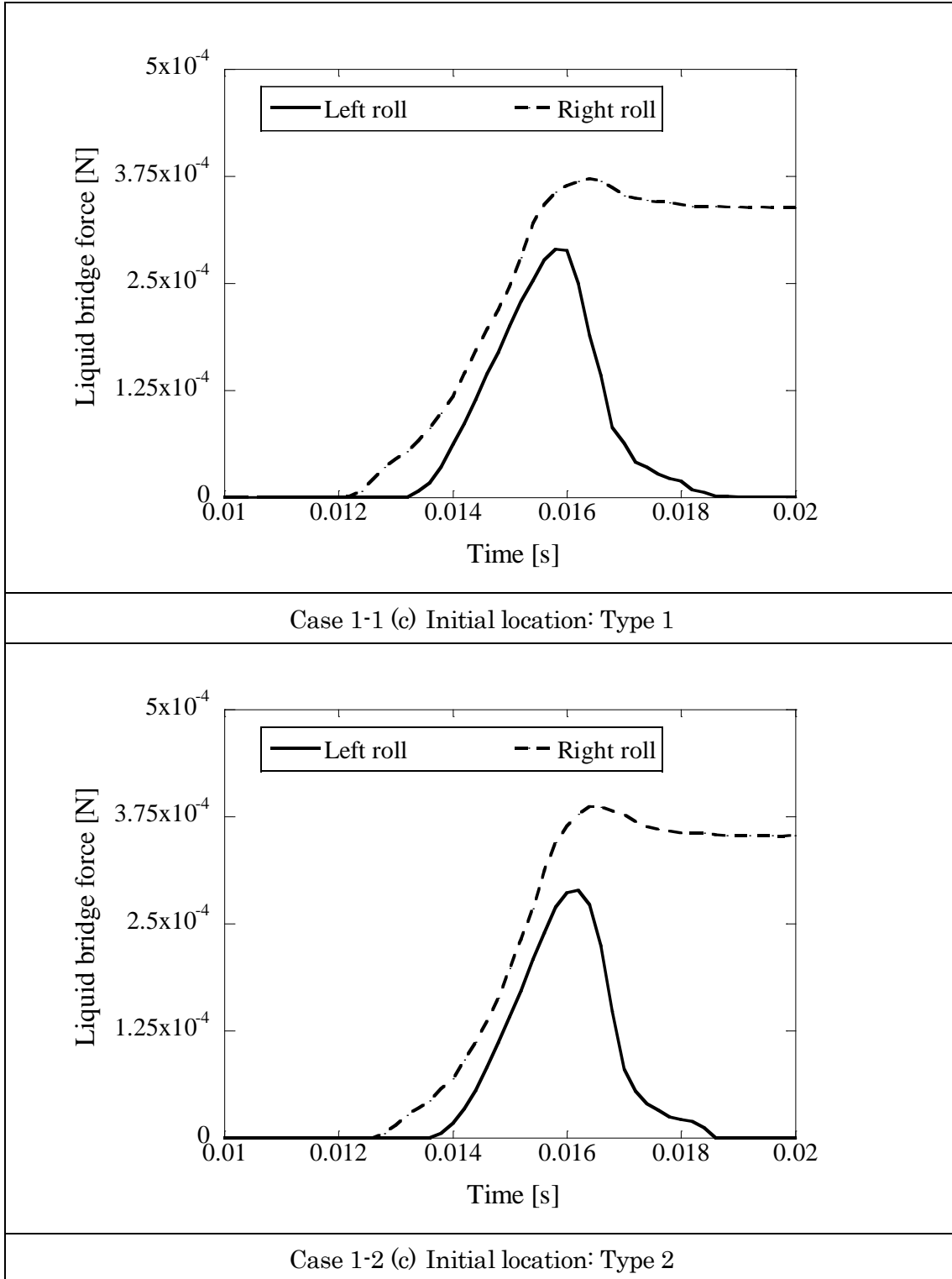


Fig. III-15 Balance of liquid bridge force in Case 1 (Liquid content 10%, Left roll 0.25 m/s, Right roll 0.75 m/s)

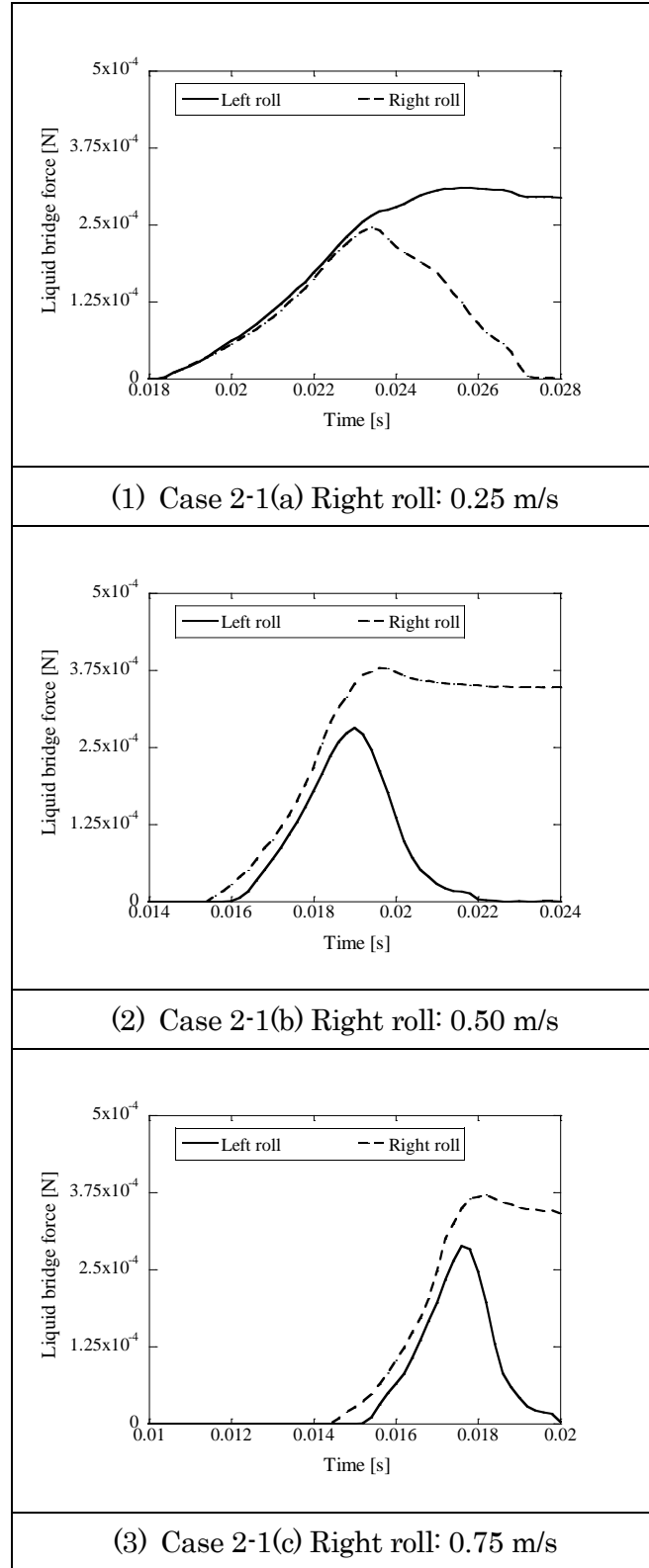


Fig. III-16 Balance of liquid bridge force in Case 2-1 (Liquid content 15%, Left roll 0.25 m/s, Initial location Type 1)

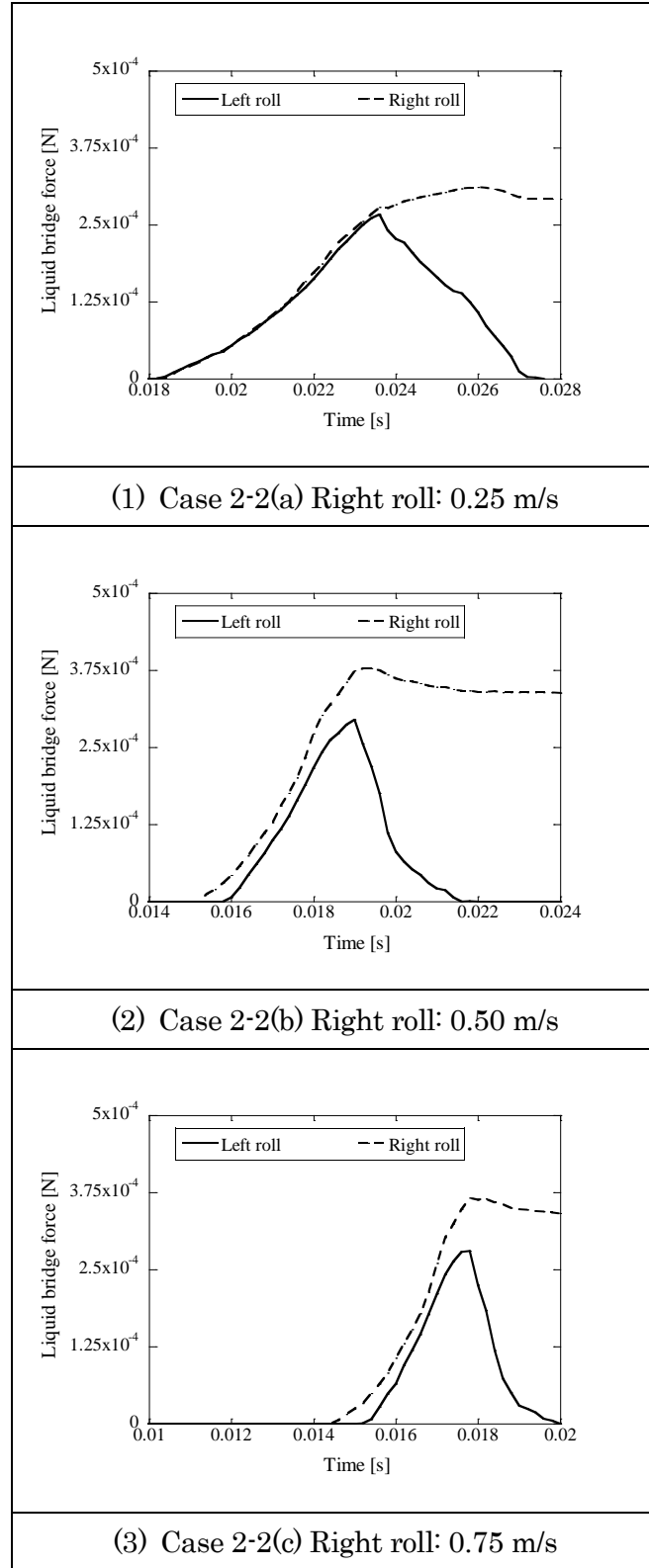


Fig. III-17 Balance of liquid bridge force in Case 2-2 (Liquid content 15%, Left roll, 0.25 m/s, Initial location Type 2)

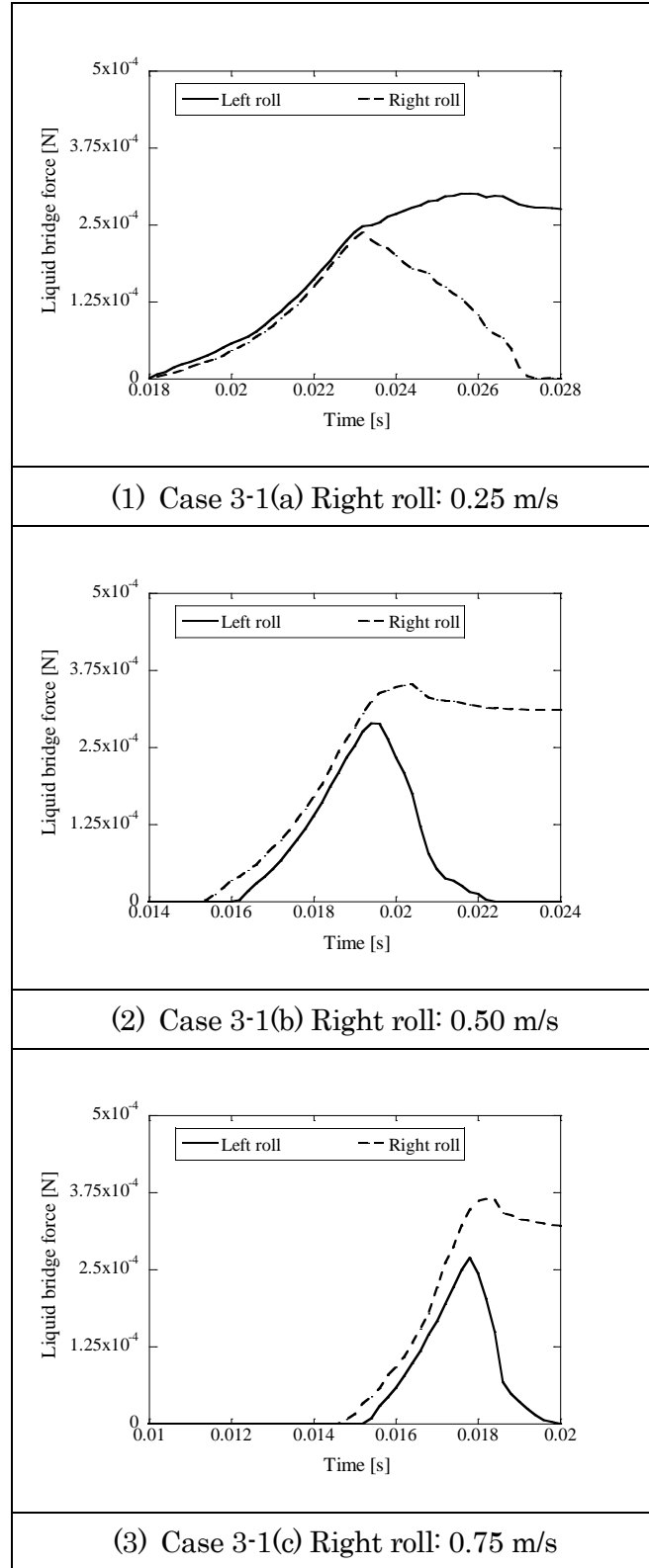


Fig. III-18 Balance of liquid bridge force in Case 3-1 (Liquid content 20%, Left roll 0.25 m/s, Initial location Type 1)

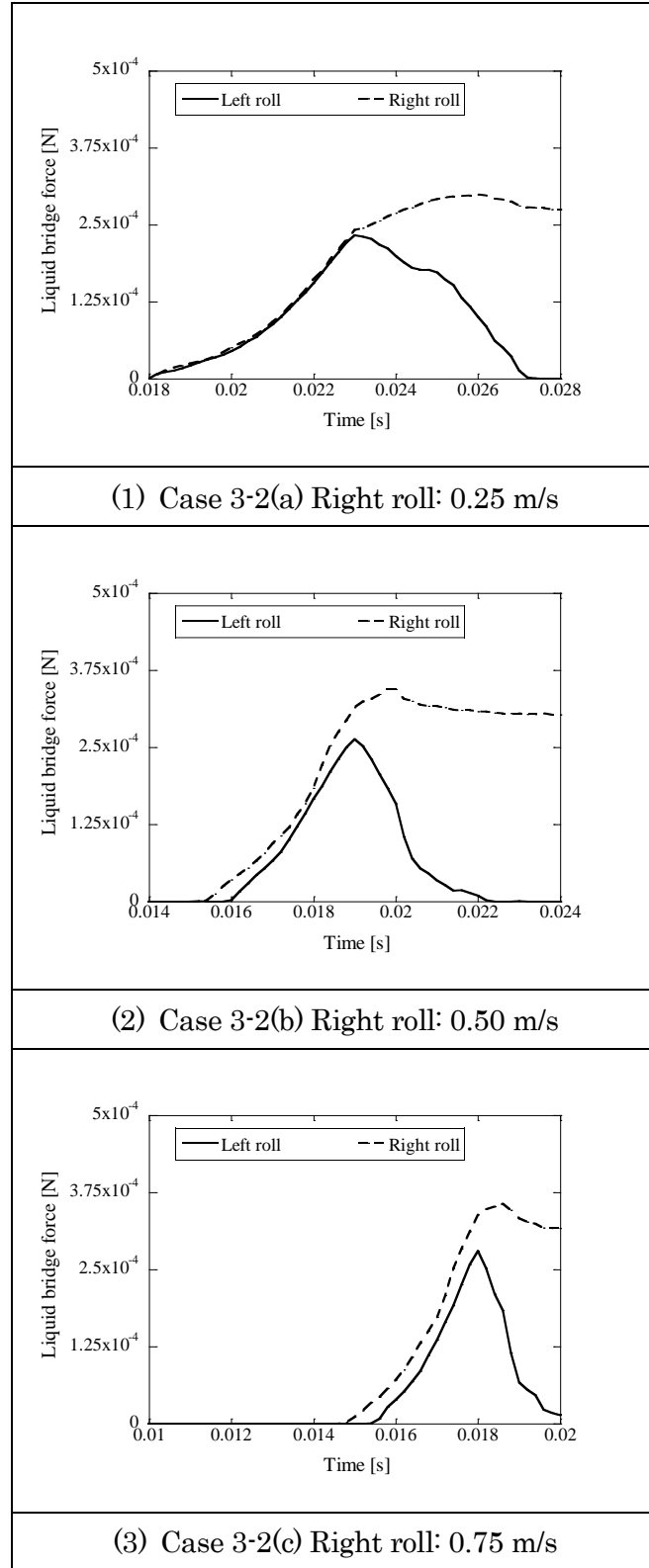


Fig. III-19 Balance of liquid bridge force in Case 3-2 (Liquid content 20%, Left roll 0.25 m/s, Initial location Type 1)

第Ⅳ章 密度スケーリング手法を用いた固気混相流シミュレーション

(5 年以内に刊行予定)

第 V 章 薄板を有する固気混相流シミュレーション

1 序論

産業において、任意形状壁面を有する固気混相流は広く扱われている。粉体を伴う混相流では、流体単相流れよりもバルクの観察が困難なため、実験による現象の把握が難しいという問題がある。そのため、現象の把握を目的として、数値シミュレーション手法の導入が期待されている。任意形状壁面を有する固気混相流の計算手法として、IB法を導入したDEM-CFD法があげられ、攪拌反応槽[76, 77]、バケットエレベーター[78]、流動層[79]など、様々な産業体系に応用されている。任意形状の移動境界を有する固気混相流体系への拡張を目的として、SDF/IB法を導入したAdvanced DEM-CFD法[25]が開発された。SDFは本来、DEMにおける任意形状壁面モデルとして開発された手法である。SDFでは、予め計算領域の内部で最近傍壁面までの距離を計算しておき、壁面の内外を示す符号を乗算することで、符号付距離を得る。SDFを用いると、粒子と壁面のオーバーラップは近傍の計算点から内挿するだけで求められるため、計算の高速化が可能となる。SDF/IB法では、流体格子内部においてSDFのピクセルを数えることで壁面の体積分率を計算しており、シンプルな手法で任意形状壁面の解析精度を向上させることができる。このように、SDF/IB法の導入によって、任意形状壁面を精度よく捉えることが可能となった。

このように、Advanced DEM-CFD法によって、任意形状の壁面を有する固気混相流がシンプルなアルゴリズムで精度よく計算できるようになったが、この手法を用いても計算が困難な体系が存在する。これは、DEM-CFD法において、流体の計算を空隙率に基づいて計算する局所体積平均法[55]が導入されていることに起因する。局所体積平均法を導入した場合、空隙率が0、すなわち流体の格子が粒子によって完全に塞がってしまうような体系は計算できないため、従来のDEM-CFD法では、流体の格子幅を粒子径に比べて十分に大きくとる必要がある。そのため、流体の計算格子の幅よりも薄い壁面を有するような体系は計算することが難しいという問題があった。

この問題を解決するためには、薄い壁面を解像できるような細かな流体格子を用いても空隙率が評価できる手法が必要となる。こうした手法の1つに、Smoothed void fraction method (以下、SVFM[80, 81]と記す)が挙げられる。これは、ガウス関数に代表される分布関数を用いて、粒子の体積分率を近傍の流体格子に分配する手法である。これによって、

粒子によって完全に閉塞している流体格子でも空隙率は 0 にならず、流体の計算が可能となる。SVFM では分布関数には無限遠までの単調減少の関数が採用されている。しかしながら、計算領域は有限の範囲であるため、分布関数によって分配した場合、粒子の体積保存を満たさないという問題がある。別の手法に、粒子の体積分率や粒子流体連成項の計算と流体の計算に、異なるサイズの格子を用いる Dual grid model[82]がある。細かい流体の計算格子において、空隙率は従来と同じように大きい格子で得られた空隙率をマッピングして得られる。そのため、SVFM で問題とされていた体積保存性については、Dual grid model で解決することが可能となる。流体の格子幅は従来の DEM-CFD 法よりも細かく設定できるため、流体の計算精度が向上することが先行研究によって示されている。しかしながら、Dual grid model において、薄板を有する体系に適用可能な手法は存在していなかった。

この問題を解決するため、本研究では DEM-CFD 法に Dual grid model と SDF/IB 法を導入した新たな離散化手法(Flexible Eulerian-Lagrangian Method: 以下、FELM と記す)を開発する。FELM では、空隙率や流体効力については粒子よりも大きい Local volume average(以下、LVA と記す)格子で、流体については Refined (以下、RF と記す)格子でそれぞれ計算する。SDF/IB 法を導入することで、任意形状壁面は細かい RF 格子で計算できるため、従来手法では困難であった薄板を有する体系も解析が可能となる。FELM の妥当性及び産業体系への適用可能性を示すため、既存の DEM-CFD 法および実験との比較を行う。検証計算を通して、FELM によって薄板を有する固気混相流が計算可能となることを示す。

2 数値解析手法

以下に、FELM について説明する。2.1 項では固相の計算手法である DEM について、2.2 項では気相の計算手法である CFD 法について述べる。また 2.3 項では、固相及び気相の任意形状壁面モデルである SDF および SDF/IB 法について述べる。最後に 2.4 項では、FELM における壁面体積分率や固体・流体連成項の扱いについて述べる。

2.1 固相

固相における支配方程式は並進および回転の式である。

$$m \frac{d\mathbf{v}}{dt} = \sum \mathbf{F}_c - V_p \nabla p + \mathbf{F}_{drag} + \mathbf{F}_g \quad (\text{IV-1})$$

$$I \frac{d\boldsymbol{\omega}}{dt} = \sum \mathbf{T} \quad (\text{IV-2})$$

ここで、 m 、 \mathbf{v} 、 t 、 \mathbf{F}_c 、 V_p 、 p 、 \mathbf{F}_{drag} 、 \mathbf{F}_g 、 I 、 $\boldsymbol{\omega}$ および \mathbf{T} は、それぞれ、質量、速度、時間、接触力、粒子の体積、圧力、流体抗力、外力、慣性モーメント、角速度およびトルクである。

2.2 気相

気相の計算には局所体積平均法を導入した連続の式および Navier-Stokes 方程式を用いる。

$$\frac{\partial \epsilon}{\partial t} + \nabla \cdot (\epsilon \mathbf{u}_f) = 0 \quad (\text{IV-3})$$

$$\frac{\partial (\epsilon \rho_f \mathbf{u}_f)}{\partial t} + \nabla \cdot (\epsilon \rho_f \mathbf{u}_f \mathbf{u}_f) = -\epsilon \nabla p + \mathbf{f} + \nabla \cdot (\epsilon \rho_f \boldsymbol{\tau}) + \epsilon \rho_f \mathbf{g} \quad (\text{IV-4})$$

ここで、 ϵ 、 \mathbf{u}_f 、 ρ_f 、 \mathbf{f} 、 $\boldsymbol{\tau}$ および \mathbf{g} は、それぞれ、空隙率、流速、流体の密度、固気相互作用力、粘性テンソルおよび重力加速度である。

2.3 任意形状壁面モデル

固相の任意形状壁面モデルには SDF[46]を用いる。符号付距離は次式で計算する。

$$\phi_{SDF}(\mathbf{x}) = d(\mathbf{x})s(\mathbf{x}) \quad (\text{IV-5})$$

ここで、 d は最近傍壁面までの距離、 s は壁面の内外を示す符号である。SDF では、計算の最初に符号付距離を各計算点で求めておく。粒子と壁面の接触判定は、予め計算しておいた計算点から内挿することで行う。壁面の法線ベクトルについては、レベルセット法と同様に SDF の勾配から求めることができる。

$$\mathbf{n} = \frac{\nabla \phi_{SDF}}{|\nabla \phi_{SDF}|} \quad (\text{IV-6})$$

壁面との距離と壁面の法線ベクトルが与えられれば、DEM において粒子壁面間のオーバーラップについては簡単に求めることができる。

$$\delta_n^{wall} = (\phi_{SDF} - r) \cdot \mathbf{n} \quad (\text{IV-7})$$

気相の任意形状壁面モデルには SDF/IB 法[62]を用いる。Direct forcing IB 法[60]では、各格子で壁面の体積分率を用いて重みづけ平均した合成速度を計算する。

$$\mathbf{u} = (1 - \phi_w) \mathbf{u}_f + \phi_w \mathbf{u}_B \quad (\text{IV-8})$$

ここで、 ϕ_w は壁面の体積分率、 \mathbf{u}_B は壁面の速度である。式(V-4)で、流体の速度の代わりに式(V-8)の合成速度を用いると、Navier-Stokes 方程式は次のように書き換えられる。

$$\frac{\partial(\epsilon \rho_f \mathbf{u})}{\partial t} + \nabla \cdot (\epsilon \rho_f \mathbf{u} \mathbf{u}) = -\epsilon \nabla p + \mathbf{f} + \nabla \cdot (\epsilon \rho_f \boldsymbol{\tau}) + \epsilon \rho_f \mathbf{g} + \mathbf{f}_{IB} \quad (\text{IV-9})$$

ここで、 \mathbf{f}_{IB} は流体が壁面から受ける仮想外力である。

壁面の体積分率の計算には、流体格子内部の SDF の計算点を用いる。

$$\phi_w = \frac{\sum \delta(\phi_{SDF})}{N_{SDF}} \quad (\text{IV-10})$$

$$\delta(\phi_{SDF}) = \begin{cases} 1 & (\phi_{SDF} \leq 0) \\ 0 & (\phi_{SDF} > 0) \end{cases} \quad (\text{IV-11})$$

ここで、 N_{SDF} は流体格子内部の SDF の計算点の総数である。

2.4 Dual grid model と SDF/IB 法

FELM では Dual grid model に SDF/IB 法を導入することで薄板を有する固気混相流の計算を行う。FELM では 2 種類のサイズの異なる格子を用いて計算する。1 つは空隙率や流体抗力、圧力勾配項の計算に使用する LVA 格子、もう 1 つは流体の計算に使用する RF 格子である。LVA 格子のサイズは既存の DEM-CFD 法と同様に、粒子径よりも大きく設定する。RF 格子はその LVA 格子をさらに分割して設定する。以下に計算の手順を示す。

まず、LVA 格子内における粒子が占める体積を求める。加えて、壁面が占める体積については、格子内において SDF のピクセルを数えることで求める。

$$V_s^{LVA} = \sum^{LVA} V_s \quad (\text{IV-12})$$

$$V_w^{LVA} = V_{CFD}^{LVA} \cdot \frac{\sum^{LVA} \delta(\phi_{SDF})}{N_{SDF}^{LVA}} \quad (\text{IV-13})$$

ここで、 N_{SDF}^{LVA} は LVA 格子内における SDF のピクセル数である。したがって、LVA 格子における空隙率は次式で得られる。

$$\epsilon^{LVA} = \frac{V_{CFD}^{LVA} - V_s^{LVA} - V_w^{LVA}}{V_{CFD}^{LVA} - V_w^{LVA}} = 1 - \frac{V_s^{LVA}}{V_{CFD}^{LVA} - V_w^{LVA}} \quad (\text{IV-14})$$

RF 格子における壁面の占める体積についても、格子内の SDF のピクセルを数えることで求める。

$$V_w^{RF} = V_{CFD}^{RF} \cdot \frac{\sum^{RF} \delta(\phi_{SDF})}{N_{SDF}^{RF}} \quad (\text{IV-15})$$

各 RF 格子において、粒子の占める割合が均質であると仮定する。このとき、粒子の占める体積は、

$$V_s^{RF} = \frac{V_{CFD}^{RF} - V_w^{RF}}{V_{CFD}^{LVA} - V_w^{LVA}} \cdot V_s^{LVA} \quad (\text{IV-16})$$

で求められる。空隙率は粒子及び壁面の占める割合から求めることができる。

$$\epsilon^{RF} = \frac{V_{CFD}^{RF} - V_s^{RF} - V_w^{RF}}{V_{CFD}^{RF} - V_w^{RF}} = 1 - \frac{V_s^{RF}}{V_{CFD}^{RF} - V_w^{RF}} \quad (\text{IV-17})$$

RF 格子で更新した圧力や流速は LVA 格子で平均化される。格子中央の SDF の値 $\phi_{SDF_{center}}$ によって、その格子が壁面内部か計算領域内部かを判定する。もし格子中央の SDF の値が正であれば、流体格子と判定して平均化に用いる。このとき、圧力や流速は次式で計算される。

$$p^{LVA} = \frac{\sum p^{RF} (1 - \delta(\phi_{SDF_{center}}))}{\sum (1 - \delta(\phi_{SDF_{center}}))} \quad (IV-18)$$

$$\mathbf{u}^{LVA} = \frac{\sum \mathbf{u}^{RF} (1 - \delta(\phi_{SDF_{center}}))}{\sum (1 - \delta(\phi_{SDF_{center}}))} \quad (IV-19)$$

ここで

$$\delta(\phi_{SDF_{center}}) = \begin{cases} 1 & (\phi_{SDF_{center}} \leq 0) \\ 0 & (\phi_{SDF_{center}} > 0) \end{cases} \quad (IV-20)$$

である。

流体抗力と圧力抗力項は平均化した流速及び圧力を用いて LVA 格子で計算する。

$$\mathbf{F}_{drag} = \frac{\beta V_p}{1 - \epsilon^{LVA}} (\mathbf{u}^{LVA} - \mathbf{v}) \quad (IV-21)$$

$$\mathbf{F}_{pre} = V_p \nabla p^{LVA} \quad (IV-22)$$

Newton の第三法則に基づいて、LVA 格子で流体抗力の反作用項を計算する。

$$\mathbf{f}^{LVA} = - \frac{\sum \mathbf{F}_{drag}}{V_{CFD}^{LVA}} \quad (IV-23)$$

最後に、式(V-20)で求めた反作用項を粒子の占める体積に基づいて分配する。

$$\mathbf{f}^{RF} = \frac{V_s^{RF}}{V_s^{LVA}} \cdot \mathbf{f}^{LVA} \quad (IV-24)$$

3 薄い壁面を有する固定層流れ

3.1 解析条件

本体系では、薄い壁面を有する体系として直管に薄い仕切りを設置して、固定層内流れの解析を行った。FELM が固気混相流体系に対して適用可能であることを示すため、内側の直管には粒子を等間隔に並べて固定層を設置した。また厳密解を得るため、計算領域を内側の直管のみに限定してシミュレーションを行い、内側の直管における圧力損失や速度

分布の比較を行った。**Fig. V-1** は解析に用いた装置図である。**Fig. V-1(a)**に厳密解の解析に用いた Single tube を示す。直管の断面積は $60 \times 60 \text{ mm}^2$ で長さは 60 mm である。直管の高さ $0 \sim 18 \text{ mm}$ には粒子を均等に並べた多孔質体を設置した。底面には流入境界を、上面には流出境界を設定した。**Fig. V-1(b)**に Double tube を示す。外側の直管は、断面積は $84 \times 84 \text{ mm}^2$ で長さは 60 mm である。内側の直管は、断面積は $60 \times 60 \text{ mm}^2$ で長さは 60 mm である。内側と外側の直管は薄板で仕切られている。内側の直管の高さ 0 mm から 18 mm には粒子を均等に配置した多孔質体を設置した。流入境界は内側の直管の底面だけに設定し、外側の直管には与えなかった。流出境界は、内側と外側の両方の直管の上面に設定した。固体粒子の直径は 1.5 mm 、気相の密度は 1.0 kg/m^3 、粘性係数は $1.0 \times 10^{-4} \text{ Pa s}$ とした。

Table V-1 に計算条件を示す。Case A1 は本体系における厳密解として、薄板を有さない Single tube で計算した。CFD の格子幅を 3.0 mm とし、 $19,200$ 個の粒子を均質に配置した。FELM の妥当性を示すため、薄板の厚みをパラメーターとして、2 つのケースで解析を行った。1 つは厚みが 3.6 mm (Case A2) で、もう 1 つは厚みが 1.2 mm (Case A3) である。粒子数はいずれのケースも $19,200$ とした。Case A2 では、2 つの条件で計算をおこなった。Case A2-1 では FELM を用いて解析を行い、LVA 格子幅は 3.0 mm 、RF 格子幅は 1.5 mm とした。計算体系には **Fig. V-1(b)** に示した Double tube を用いた。Case A2-2 では既存の DEM-CFD 法を用いて解析を行い、流体格子幅は 3.0 mm とした。計算体系には **Fig. V-1(b)** に示した Double tube を用いた。Case A3 においても同様に 2 つのケースで解析を行った。Case A2-1 では FELM を用いて解析を行い、LVA 格子幅は 3.0 mm 、RF 格子幅は 1.0 mm 、Double tube で計算を行った。Case A2-2 では既存の DEM-CFD 法を用いて解析を行い、流体格子幅は 3.0 mm 、Double tube で計算を行った。それぞれのケースで、空塔速度は 0.05 m/s とした。

Fig. V-2 に、Case A2 における薄板周りの SDF および壁面体積分率の断面図を示す。いずれのケースにおいても、SDF によって薄板からの距離が滑らかな空間分布で模擬されている様子が示された。また、壁面の体積分率について、Case A2 では板の厚みが 3.6 mm 、Case A2-1 では RF 格子幅が 1.5 mm 、Case A2-2 では CFD 格子幅が 3.0 mm と、いずれ

のケースにおいても流体の格子幅が壁面の厚みよりも小さいため、壁面と流体の境界が精度よく模擬できている。一方、Case A3 における SDF と壁面体積分率の断面図を Fig. V-3 に示す。SDF については Case A2 と同様に、滑らかな空間分布が得られた。他方、壁面の体積分率について、Case A3 では板の厚みが 1.2 mm に対し、Case A3-1 では RF 格子幅が 1.0 mm としたため、粒子径よりも薄い板であっても流体と壁面の境界が精度よく模擬できている。しかしながら、既存の DEM-CFD 法を用いた Case A3-2 では CFD 格子幅を 3.0 mm としたため、薄い板を精度よく模擬できていない様子が示された。

3.2 結果・考察

FELM による計算結果の妥当性検証として、多孔質体内部での圧力および入り口付近と出口付近での流速分布について、Single tube で計算した厳密解および既存の DEM-CFD 法の結果と比較を行った。まず、圧力の結果について述べる。Fig. V-4 に多孔質体内部における圧力分布を示す。Single tube で計算した Case A1 では、多孔質体内部で圧力勾配が見られた。FELM を用いた Case A2-1 でも圧力勾配が見られ、結果は厳密解の Case A1 と一致した。既存の DEM-CFD 法で計算した Case A2-2 においても、圧力分布はともに厳密解とよく一致した。Case A2 では CFD 格子幅 3.0 mm に対して壁面の厚みが 3.6 mm となっており、このことから、壁面に対して最低 1 層分の格子幅があれば薄板を模擬することが可能であることが示された。Fig. V-5 に多孔質体中央における圧力の分布をプロットした結果を示す。いずれの高さにおいても、圧力の値は FELM、既存手法のどちらも厳密解とよく一致した結果が得られた。圧力勾配は粒子流体の相互作用によって生じることから、FELM によって粒子径と同等のサイズの格子を用いても、流体抗力項が精度よく計算できていることが示された。

次に流速分布について述べる。Fig. V-6 に Case A1 および Case A2 における出口付近での流速分布を示す。高さ 0.057 m の出口付近において、流速の分布は FELM および既存手法ともに厳密解とよく一致した結果が得られた。同様に、Fig. V-7 に高さ 0.009 m の入り口付近における流速の分布を示す。いずれのケースにおいても、多孔質体内部を通過する流れが模擬できていることが示された。以上の結果から、格子幅とほぼ同等以上の薄板であれば、FELM は既存手法と同等の精度で計算が可能であることが示された。従来手

法では、局所体積平均法を用いているため、粒子径よりも十分に大きい格子を用いる必要があったが、この結果から、粒子径と同等の格子サイズを用いても粒子流体間相互作用力が精度よく評価できることが示された。このことから、FELM ではフレキシブルに流体格子幅を設定可能であることが示唆された。

感度解析として、壁面の厚みをパラメーターに Case A3 についても同様に、圧力および流速について、厳密解および既存手法との比較をおこなった。まず、圧力について説明する。Fig. V-8 に多孔質体内部における圧力分布および空気の流速分布を示す。Case 3-1 の結果から、FELM で得られた圧力分布は厳密解である Case A1 の結果とよく一致しており、本手法の妥当性が示された。他方、既存の DEM-CFD 法を用いた Case A3-2 では圧力はやや小さい値となっていることが示された。Case A3-2 では壁面の厚み 1.2 mm に対し、流体格子幅が 3.0 mm となっており、薄板が模擬できなかったことによって誤差が生じたと考えられる。Fig. V-9 に固定層中央における圧力分布を示す。FELM の結果と厳密解はよく一致している一方で、既存手法を用いた場合、圧力の値が過小評価されていることが示された。これは、薄板を模擬できなかったため、多孔質体内部における流速が過小評価されたと考えられる。

次に流速の結果について述べる。Fig. V-10 に出口付近での流速分布を示す。FELM を用いた Case A3-1 では、多孔質体を通過する流れが見られており、薄板を有する体系を計算できていることが示された。他方、既存の DEM-CFD 法を用いた Case A3-2 では出口付近での流速分布はほぼ一定の値となっており、厳密解とは異なる分布が得られた。流体の質量保存の観点から、Case A3-2 では空気が外側の流路に漏れ出ている可能性が示唆された。そこで、入り口付近(高さ 0.009 m)の流速について可視化した結果を Fig. V-11 に示す。FELM を用いた場合、Case A2 よりも薄い壁面であっても、空気は多孔質体内部を流れる様子が模擬された。これは、FELM では RF 格子幅を粒子径に依らず設定可能であるため、薄板に対して流体格子を 1 層以上設定することができ、薄板を模擬できたと考えられる。他方、既存手法を用いた場合、内側の流路から外側の流路へと空気が貫通して流れる様子が模擬された。既存手法では粒子径よりも十分に大きな格子を設定する必要があり、その結果として格子幅よりも薄い壁面を解像することができなかったためと考えられる。

こうした体系において、FELM では粒子径に依らず、流体の格子幅をフレキシブルに設定可能であるため、薄板を有する固気混相流体系に対して有効な手法であることが示された。

以上の結果から、FELM を用いることによって、既存手法では困難であった薄板を有する固気混相流体系が計算可能となることが示された。

4 薄いスリットを有する流動層シミュレーション

4.1 実験条件

Fig. V-12 に今回用いた体系の装置を示す。計算領域は断面積が $75 \times 18 \text{ mm}^2$ 、高さ 300 mm で、底部から空気を流入させた。厚さ 2.0 mm 、高さ 120 mm の薄いスリットを 6 枚、 9 mm 間隔で設置した。

TableV-2 に実験条件を示す。空塔速度をパラメーターに 2 つのケースを行った。1 つは空塔速度が 0.6 m/s の Case B1-E で、もう 1 つは 0.8 m/s の Case B2-E である。実験には平均粒径が 1 mm のガラスビーズ(UB-1921LN, UNION Co. Ltd., Osaka, Japan)を用いた。実験結果はハイスピードカメラである FASTCAM Mini WX100 (Photron Co. Ltd., Tokyo, Japan)を用い、フレームレートは 500 fps 、解像度は $2,048 \times 2,048$ 、シャッタースピードは 1 ms で撮影を行った。

4.2 解析条件

FELM の妥当性検証として、薄いスリットを有する流動層において、既存の DEM-CFD 法および実験と結果の比較を行った。**Fig. V-12** に用いた装置を示す。計算領域は断面積が $75 \times 18 \text{ mm}^2$ 、高さ 300 mm で、底部に流入境界、上部に流出境界を設定した。厚さ 2.0 mm 、高さ 120 mm の薄いスリットを 6 枚、 9 mm 間隔で設置した。**TableV-3** に物性値を示す。固相はガラスビーズで、密度は $2,500 \text{ kg/m}^3$ 、ばね定数は $1,000 \text{ N/m}$ 、摩擦係数は 0.3 、反発係数は 0.9 、粒子径は 1.0 mm である。気相は空気、密度は 1.0 kg/m^3 、粘性係数は $1.8 \times 10^{-5} \text{ Pa s}$ とした。

TableV-2 に計算条件を示す。空塔速度をパラメーターとして、2 つのケースで解析を行った。1 つは 0.6 m/s (Case B1)で、もう 1 つは 0.8 m/s (Case B2)である。すべてのケースで粒子数は $100,000$ とした。Case B1-1 および Case B2-1 では FELM を用いて解析を行い、LVA 格

子幅は 3.0 mm、RF 格子幅は 1.0 mm とした。Case B1-2 および Case B2-2 では既存の DEM-CFD 法を用いて解析を行い、格子幅は 3.0 mm とした。スリットの厚みは 2.0 mm であり、これは既存の DEM-CFD 法では解像できない厚みであるが、FELM では RF 格子幅を粒子径に依らず設定できるため、薄板の厚みに応じた格子を用いて計算を行うことができる。

Fig. V-13 に壁面体積分率を示す。**Fig. V-13(a)**および**Fig. V-13(b)**は Case B1-1 および B2-1 における壁面体積分率の全体図およびスリット近傍の拡大図である。FELM を用いた場合、流体格子と壁面格子の境界層が完全に捉えられている。これは細かな RF 格子内部で SDF/IB 法による壁面体積分率を計算できるためである。**Fig. V-13(c)**および**Fig. V-13(d)**は Case B1-2 と Case B2-2 における壁面体積分率の全体図およびスリット近傍の拡大図である。本来、壁内部における壁面体積分率は 1.0 になっているはずであるが、既存の DEM-CFD 法ではスリットを十分に解像できておらず、流体と壁面の境界層を明確に捉えられていない。このことから、FELM を用いることで壁面の解像度が向上することが示された。

4.3 結果・考察

Fig. V-14 に Case B1 の結果を示す。Case B1-E で見て取れるように、実験において流動化が起こっていることが示された。シミュレーションでは FELM を用いた Case B1-1 では流動化が見られたが、既存の DEM-CFD 法を用いた Case B1-2 では流動化が起らなかった。気泡や粒子の配置など、定性的な挙動は Case B1-1 と Case B1-E でよく一致しており、このことから FELM によって薄板を有する固気混相流体系が計算可能であることが示された。一方、既存の DEM-CFD 法では薄板を十分に解像できないため、流動化現象を模擬できなかったと考えられる。**Fig. V-15** に圧力損失の経時変化を示す。Case B1-E と Case B1-1 の結果はよく一致しており、このことから FELM によって実験で得られた圧力損失を精度よく模擬できることが示された。他方、Case B1-2 の結果は Case B1-E と比較すると圧力損失が低くなっており、このことから薄板を有する体系を既存手法では正確に模擬できないことが示された。**Fig. V-16** に流速と粒子の空間配置を示す。FELM を用いた Case B1-1 では細かい RF 格子を用いることで薄板を解像できているため、スリット近傍で流速が遅くなる non-slip 境界が模擬できている様子が確認できた。一方で Case B1-2 では、スリット近傍で流路中央よりも流速が速くなっている様子が見られた。これは、

既存の DEM-CFD 法では壁面と流体格子の境界層を精度よく解像できておらず、スリット上での non-slip 境界が模擬できなかったからと考えられる。このことから、FELM によって薄板を有する固気混相流が精度よく模擬できることが示された。

似た傾向が空塔速度を変えて行った Case B2 においても見られた。**Fig. V-17** は Case B2 の結果のスナップショットである。空塔速度を 0.8 m/s に増加させたため、すべてのケースで流動化が起こっている様子が見られた。しかしながら、その挙動において、FELM および実験結果である Case B2-1、B2-E と既存の DEM-CFD 法を用いた Case B2-2 の間で差異が見られた。Case B2-1 および B2-E ではすべての流路で流動化が見られたが、Case B2-2 では両端と中央の流路でのみ流動化が起こっていた。Case B1 と同様に、FELM を用いることで、実験と同じ現象を模擬できることが示された。これは細かい RF 格子を用いることで、壁面の解像度を向上できたためと考えられる。**Fig. V-18** に Case B2 における圧力損失の経時変化を示す。Case B2-E および B2-1 の圧力損失の推移はよく一致していたが、Case B2-2 は圧力損失は低くなっていた。これは、既存手法では薄板を精度よく模擬できなかったためと考えられる。**Fig. V-19** に流速と粒子の空間配置を示す。Case B1 と同様、Case B2-1 では細かい格子を用いたことで non-slip 境界の模擬に成功したが、既存手法を用いた Case B2-2 では non-slip 境界が精度よく模擬できておらず、壁面近傍で流速が速くなっていた。

薄いスリットを有する固気混相流体系において、FELM で得られた粒子配置や圧力損失は実験結果とよく一致しており、本手法の妥当性が示された。空隙率を大きい LVA 格子で計算した後、細かい RF 格子で得られた壁面体積分率に応じてマッピングすることで、薄板近傍であっても精度よく固気の相互作用項が計算できることが示された。以上の結果から、FELM の妥当性が実験との比較を通して証明された。

5 結論

DEM-CFD 法を用いた固気混相流のシミュレーションにおいて、薄板を有する体系の計算は困難な課題の 1 つであった。これは、流体の計算に局所体積平均法を導入しており、細かな格子を用いた場合に格子が粒子によって閉塞すると、計算の収束性に問題が生じるためである。この問題を解決するため、本研究では、空隙率と流体の計算に異なる大きさ

の格子を用いる Dual grid model に任意形状壁面モデルである SDF/IB 法を導入した新しい離散化手法(FELM)を開発した。FELM では空隙率や流体抗力、圧力勾配項の計算には粒子よりも大きい LVA 格子を、流体の計算には LVA 格子をさらに分割した RF 格子を用いており、SDF/IB 法を RF 格子内で評価することで従来よりも高解像度で壁面の形状を模擬できるようになる。本手法の妥当性を評価するため、既存の DEM-CFD 法および実験との比較検証を行った。

まず、薄い仕切りを有する 2 重直管において多孔質体を通過する流れのシミュレーションを行った。既存の DEM-CFD 法では薄い壁面を解像できておらず、薄板を貫通する不自然な流れが生じる様子が模擬された。他方、FELM を用いると、薄い壁面を精度よく模擬できており、多孔質体内部における圧力分布や流速分布について厳密解とよく一致した結果が得られた。このことから、FELM によって薄板を有する固気混相流が計算可能となることが示された。

次に、薄いスリットを有する流動層において、既存の DEM-CFD 法及び実験との比較を行った。FELM で計算した結果は、粒子層高さやバブルの挙動が実験の結果とよく一致していた。FELM では細かい RF 格子で壁面の体積分率を計算しているため、壁面と流体の境界が精度よく模擬でき、薄板と流体の境界面で non-slip 境界条件が評価できたためと考えられる。圧力損失の経時変化において、実験と FELM でよく一致した結果が得られており、本手法の妥当性が示された。他方、既存の DEM-CFD 法による結果は一部流路でしか流動化が起こらず、実験結果を再現できなかった。既存手法では流体の計算格子を細かくできないため、格子幅よりも薄い壁面を模擬できなかったためと考えられる。

以上の結果から、既存の手法では困難とされていた薄板を有する固気混相流が FELM によって計算可能となることが示された。

Table V-1 Calculation conditions of the channel flow simulation with a thin wall

Item	Unit	Case A1	Case A2-1	Case A2-2
Evaluation approach	-	DEM-CFD	FELM	DEM-CFD
CFD grid size	mm	3.0	-	3.0
LVA grid size	mm	-	3.0	-
RF grid size	mm		1.5	-
Thickness of wall	mm	-	3.6	
Number of particles	-	19,200	19,200	
Superficial velocity	m/s	0.05		
Calculation domain	-	Single tube Fig. V-1(a)	Double tube Fig. V-1(b)	

Item	Unit	Case A1	Case A3-1	Case A3-2
Evaluation approach	-	DEM-CFD	FELM	DEM-CFD
CFD grid size	mm	3.0	-	3.0
LVA grid size	mm	-	3.0	-
RF grid size	mm		1.0	-
Thickness of wall	mm	-	1.2	
Number of particles	-	19,200	19,200	
Superficial velocity	m/s	0.05		
Calculation domain	-	Single tube Fig. V-1(a)	Double tube Fig. V-1(b)	

Table V-2 Calculation conditions of the fluidized bed simulation with thin slits

Item	Unit	Case B1-1	Case B1-2	Case B1-E
Evaluation approach	-	Experiment	FELM	DEM-CFD
CFD/RF grid size	mm	-	1.0	3.0
LVA grid size	mm	-	3.0	-
Number of particles	-	-	100,000	
Particle mass	g	130.9	-	
Superficial velocity	m/s	0.6		

Item	Unit	Case B2-1	Case B2-2	Case B2-E
Evaluation approach	-	Experiment	FELM	DEM-CFD
CFD/RF grid size	mm	-	1.0	3.0
LVA grid size	mm	-	3.0	-
Number of particles	-	-	100,000	
Particle mass	g	130.9	-	
Superficial velocity	m/s	0.8		

Table V-3 Physical properties of the fluidized bed simulation with thin slits

Phase	Item	Unit	Value
Solid	Density	kg/m ³	2,500
	Spring constant	N/m	1,000
	Friction coefficient	-	0.3
	Restitution coefficient	-	0.9
	Diameter	mm	1.0
Gas	Density	kg/m ³	1.0
	Viscosity	Pa s	1.0x10 ⁻⁴

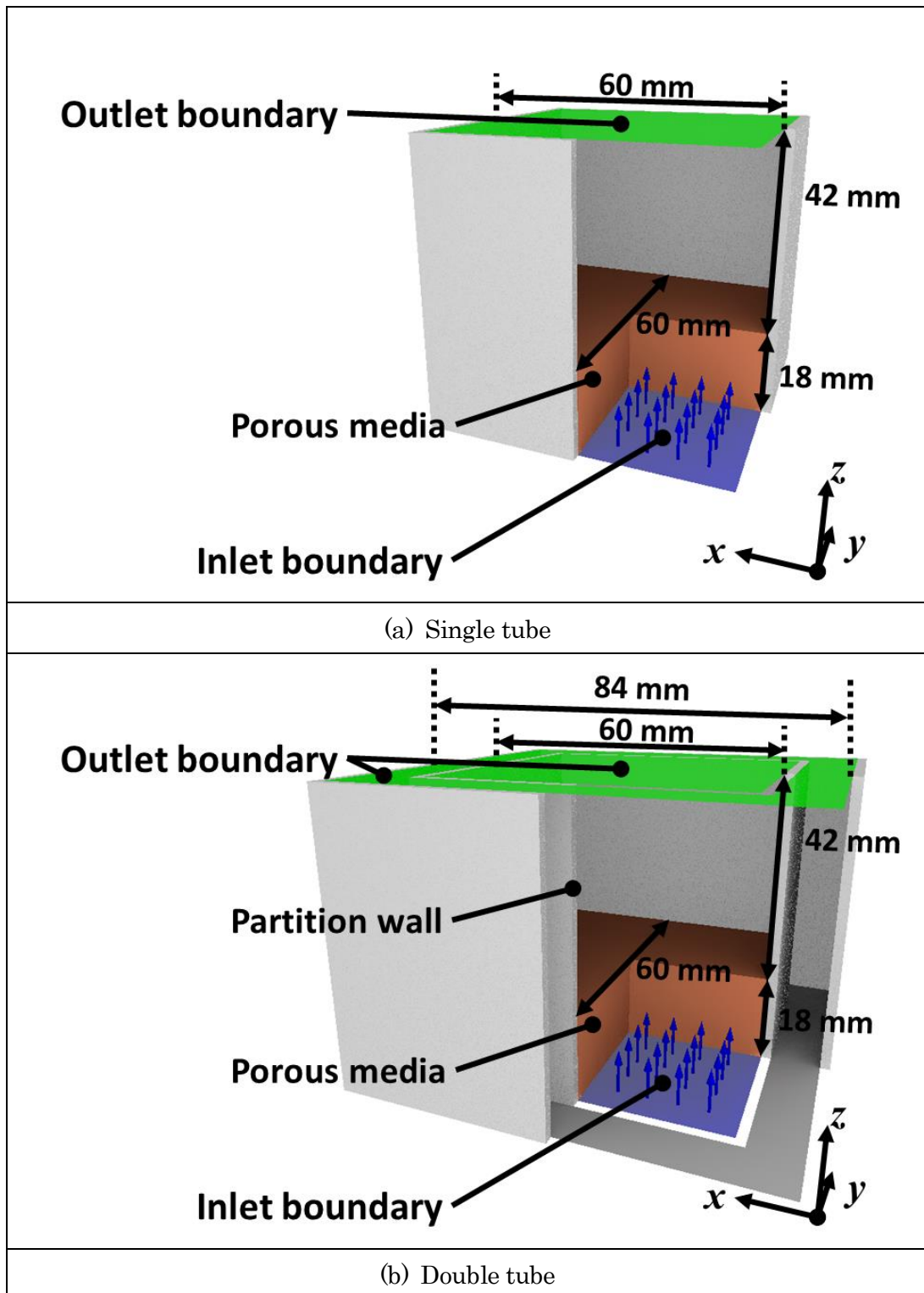


Fig. V-1 Geometrical diagram of the single tube and the double tube

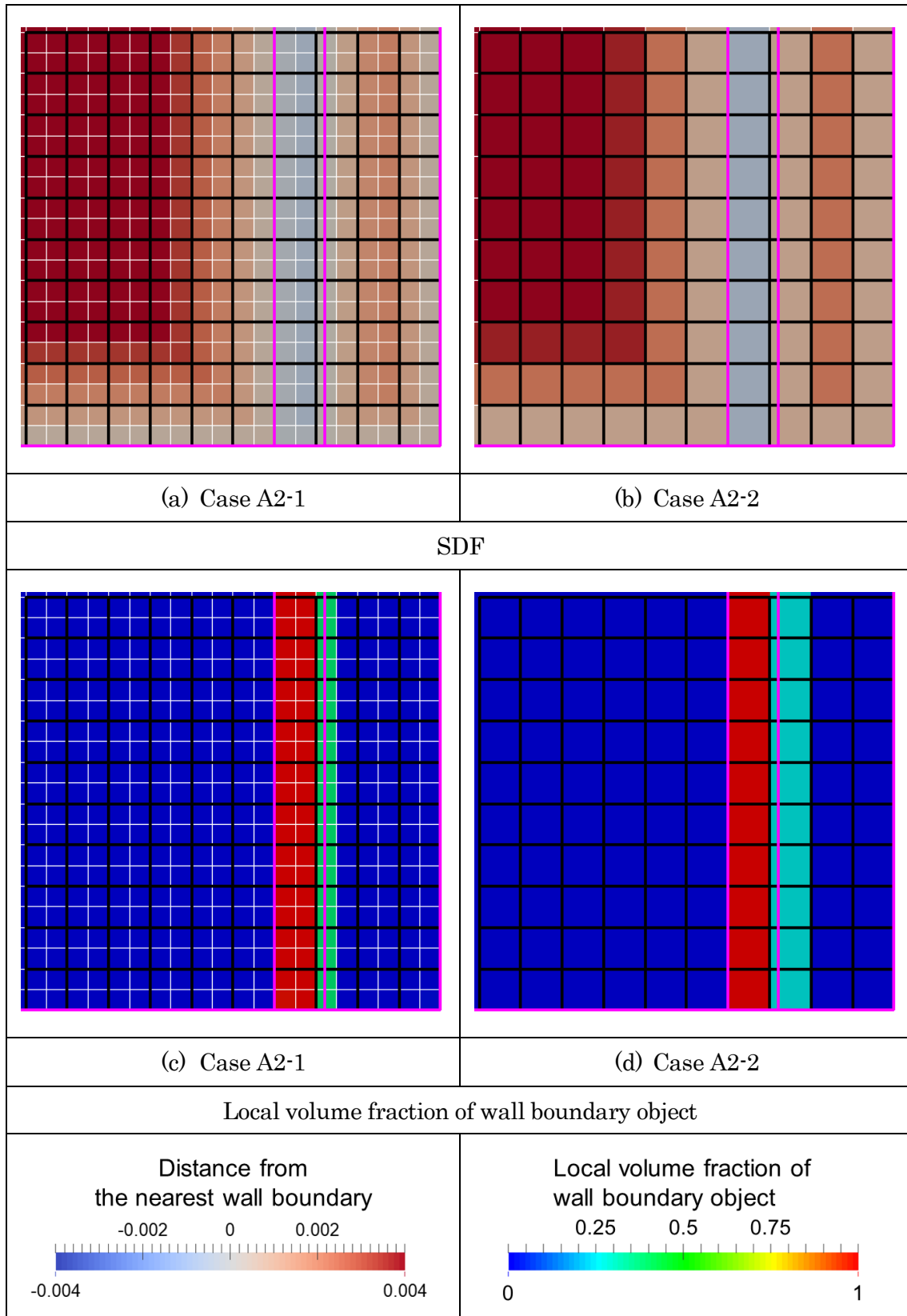


Fig. V-2 Cross-section of SDF and volume fraction of wall boundary in Case A2

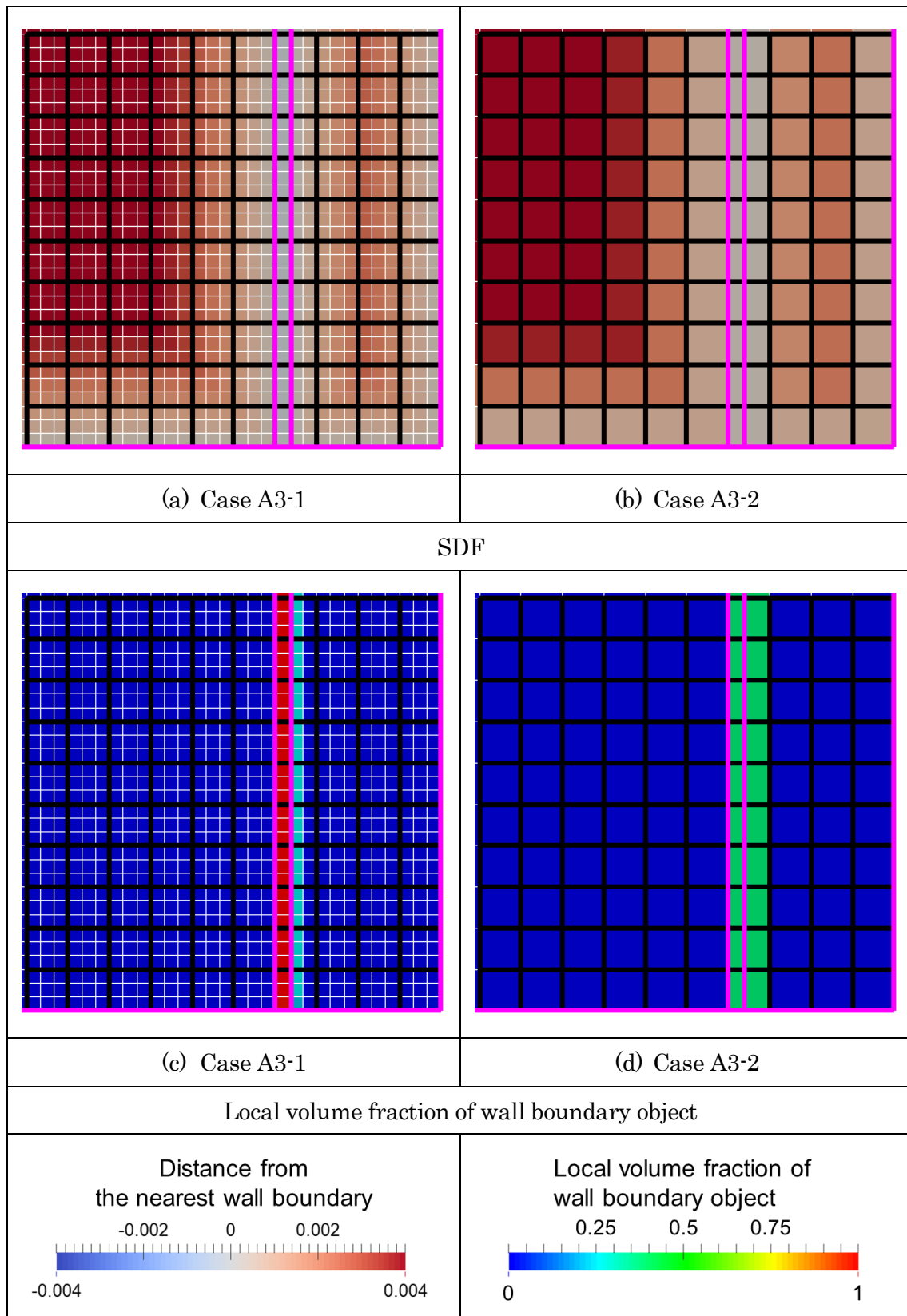


Fig. V-3 Cross-section of SDF and volume fraction of wall boundary in Case A3

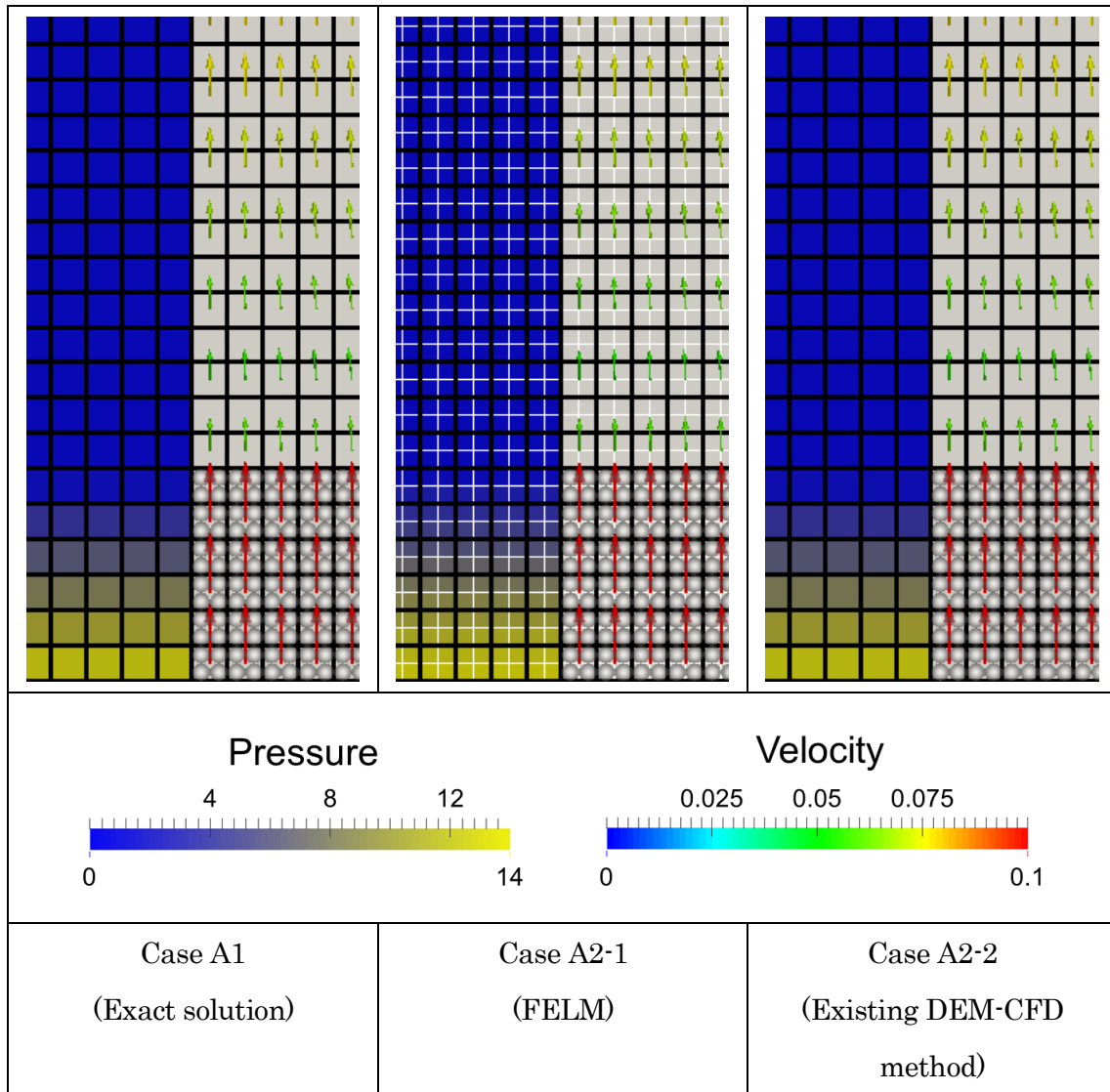


Fig. V-4 Gas pressure and velocity distribution inside inner tube

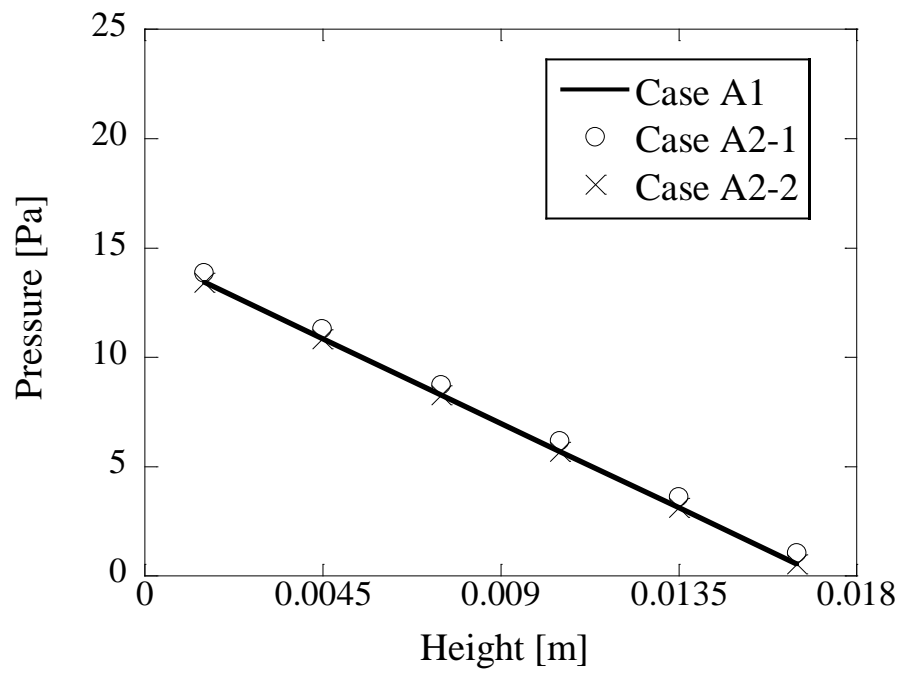


Fig. V-5 Gas pressure inside the fixed bed in Cases A1 and A2

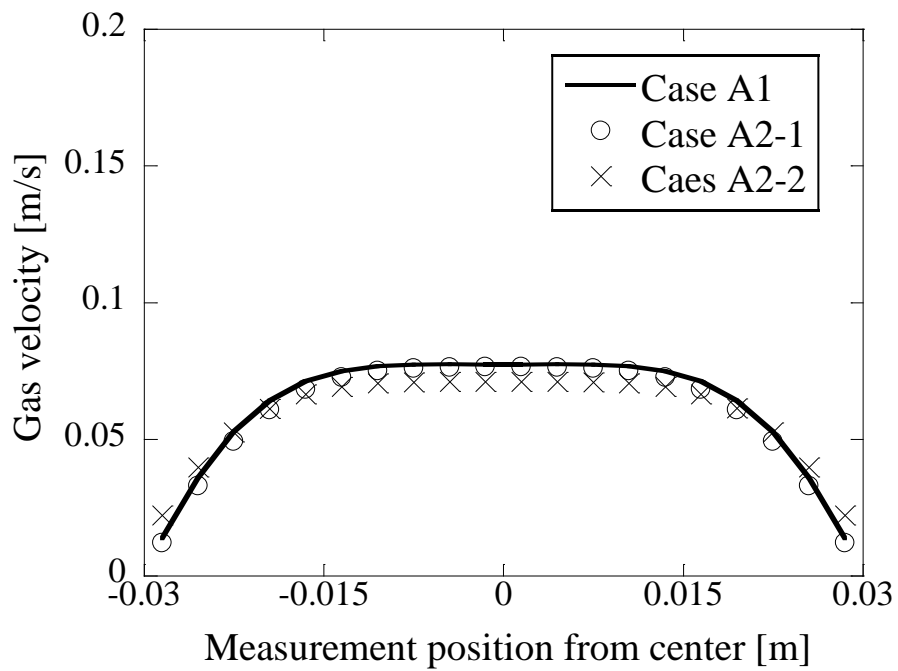


Fig. V-6 Gas velocity distribution at the horizontal cross-section A (Cases A1 and A2)

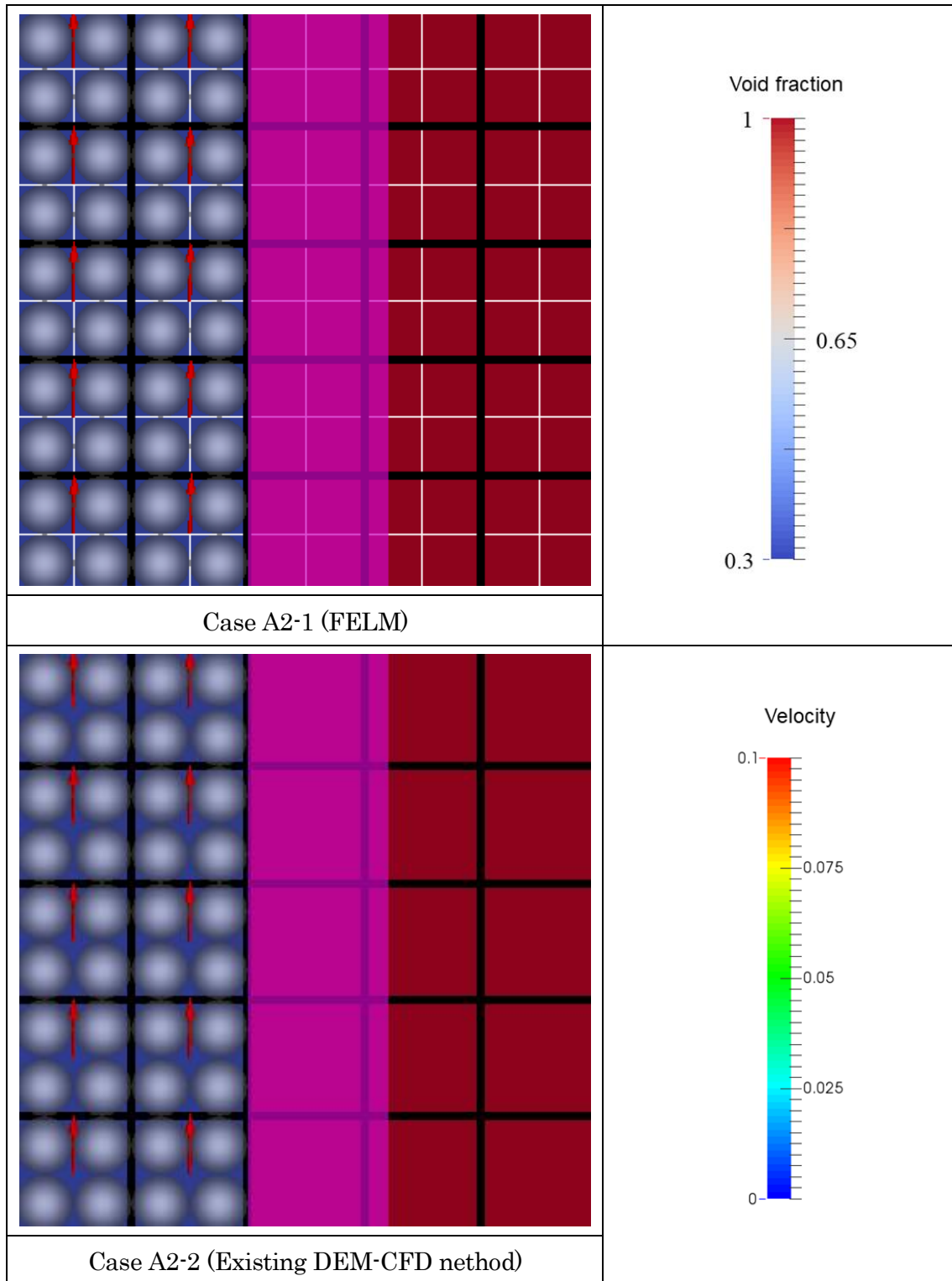


Fig. V-7 Gas velocity distribution at the horizontal cross-section B (Case A2)

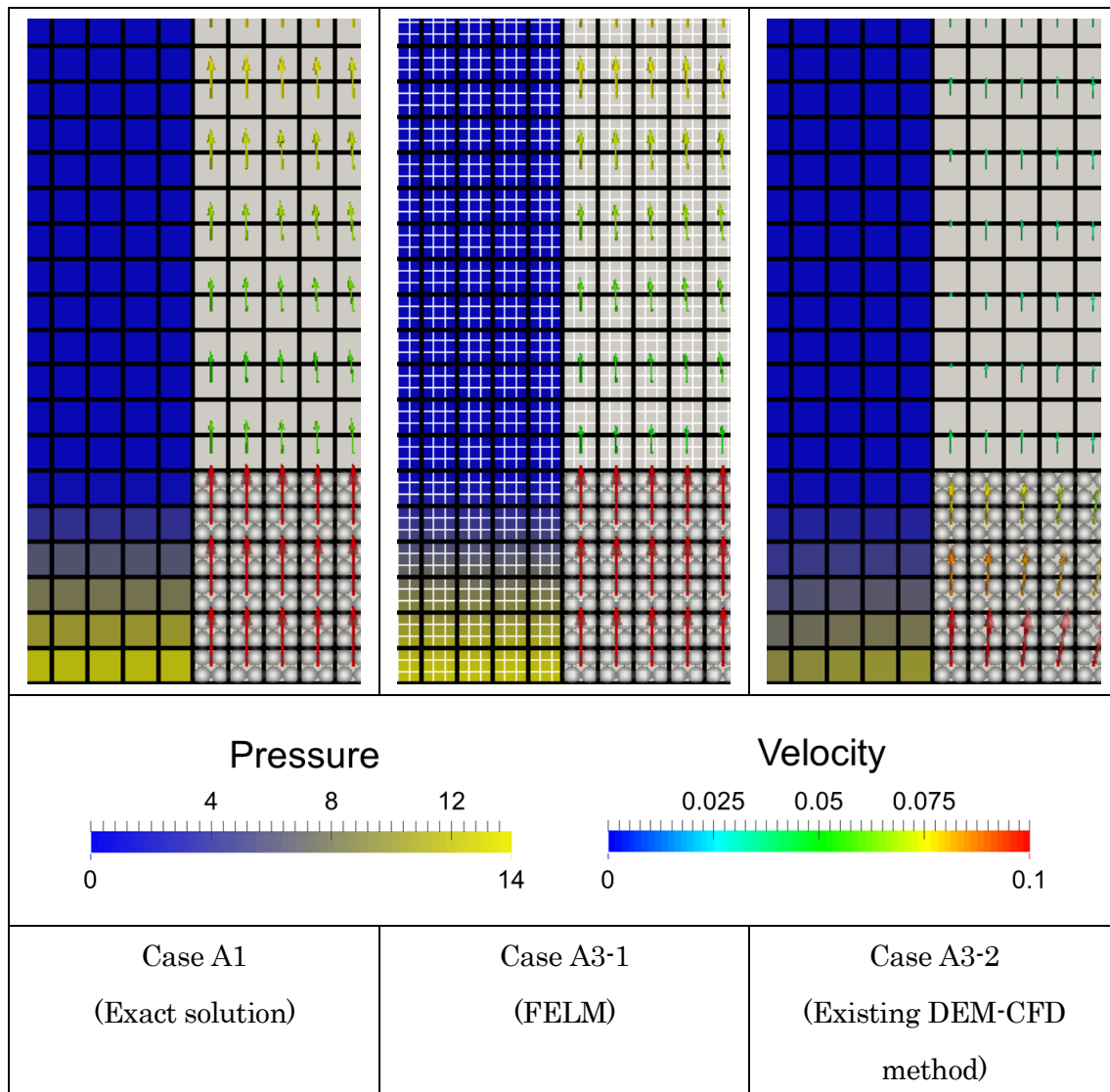


Fig. V-8 Pressure and gas velocity distribution inside the porous media (Cases A1 and A3)

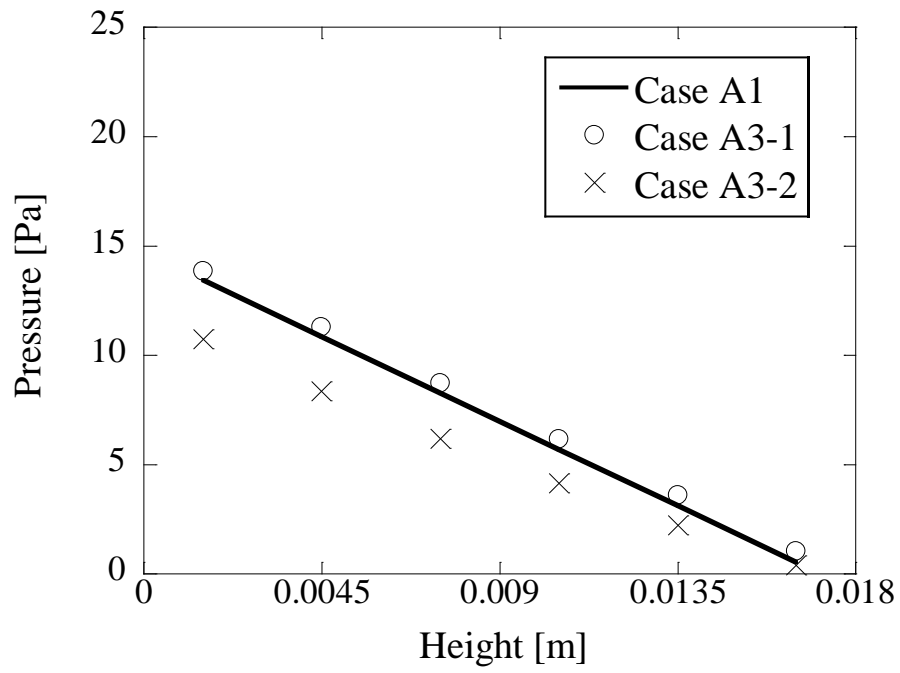


Fig. V-9 Gas pressure inside the fixed bed in Cases A1 and A3

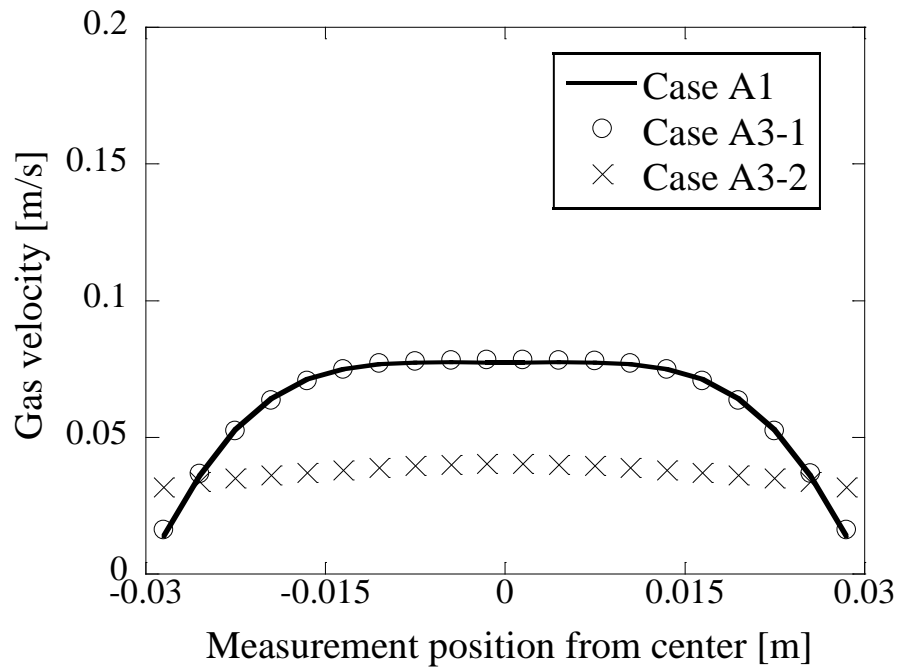


Fig. V-10 Gas velocity distribution at the horizontal cross-section A (Cases A1 and A3)

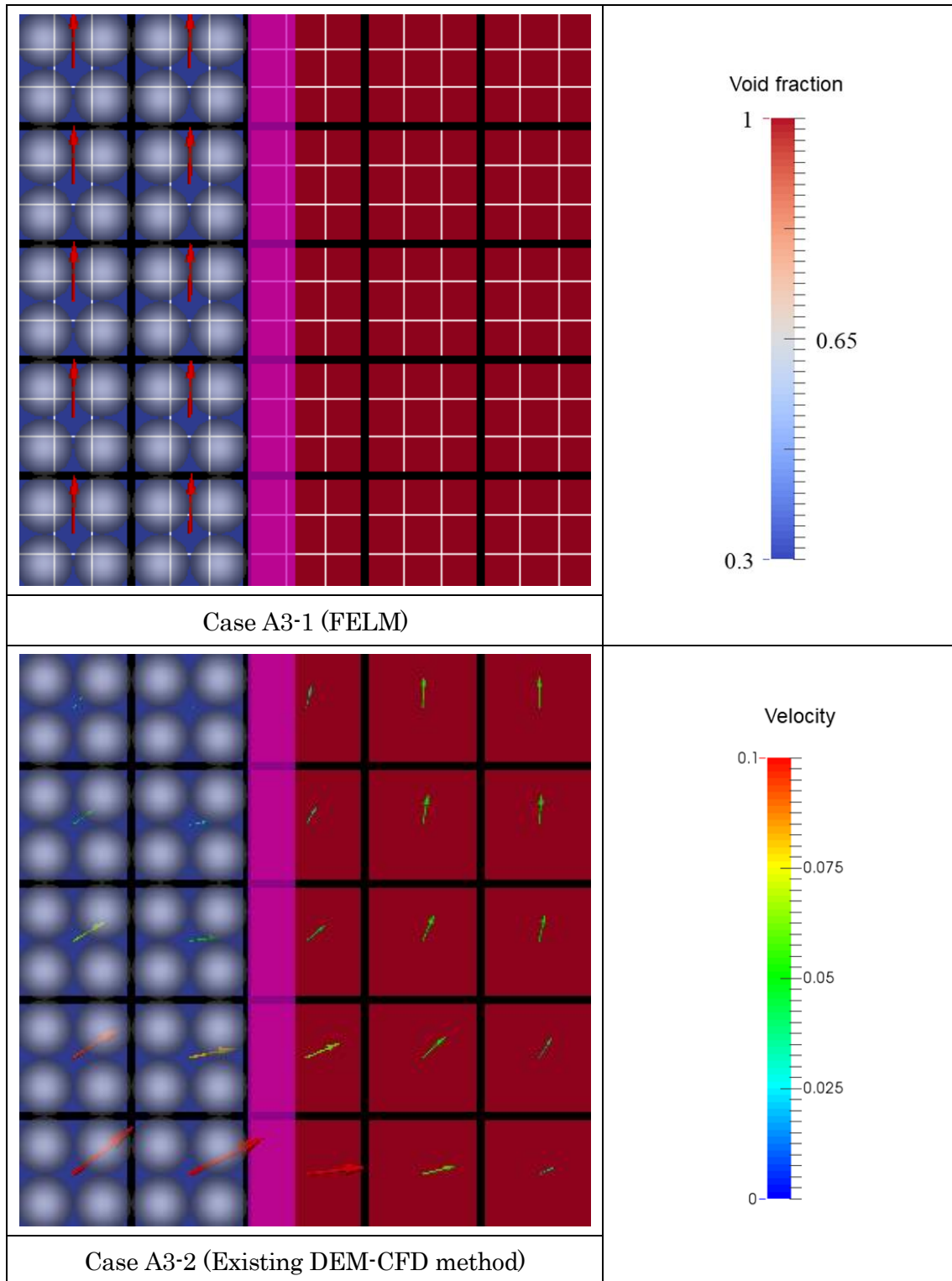


Fig. V-11 Gas velocity distribution at the horizontal cross-section B (Case A3)

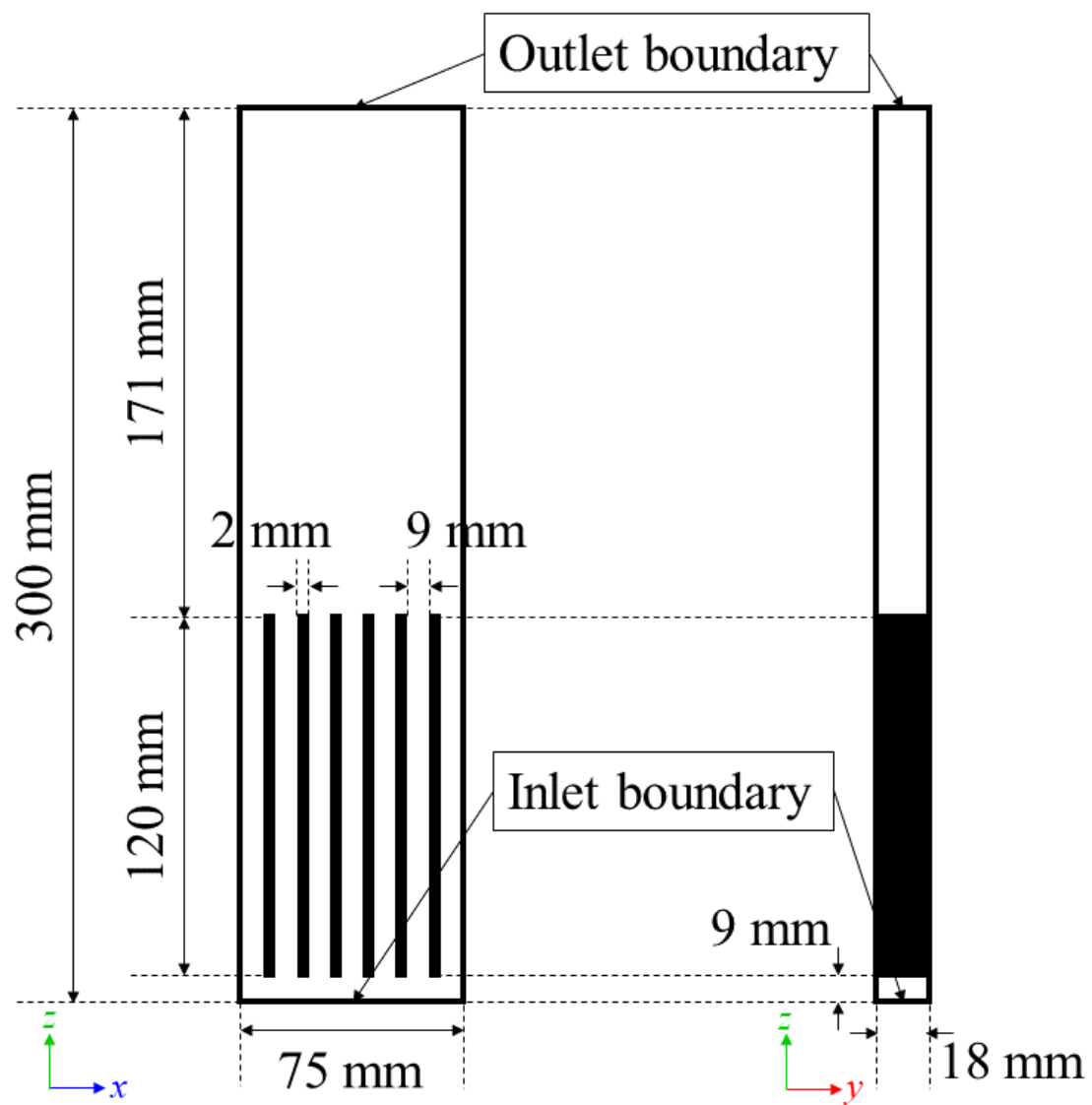


Fig. V-12 Geometrical diagram of the fluidized bed with thin slits

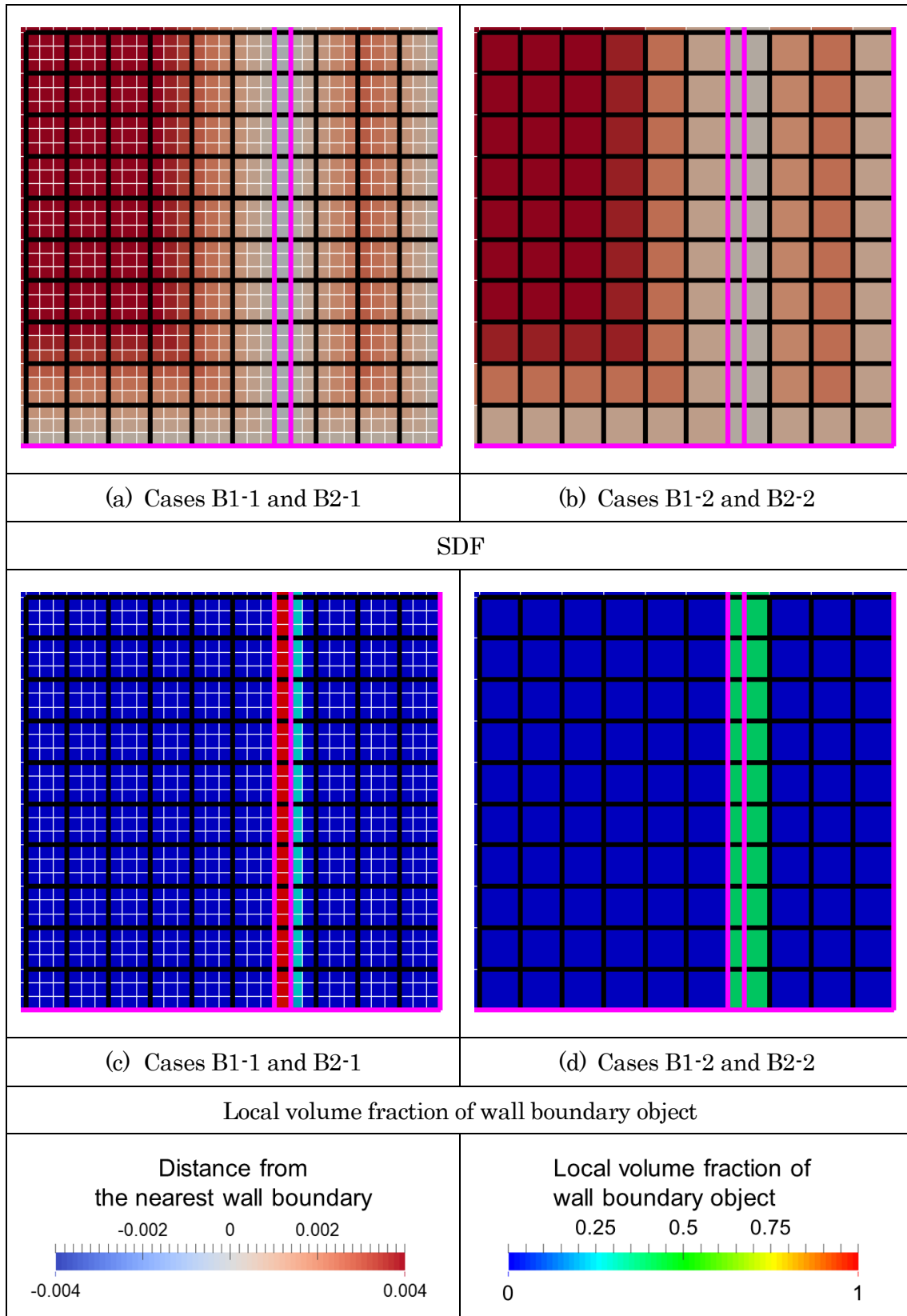


Fig. V-13 Volume fraction of wall boundary in the fluidized bed with thin slits

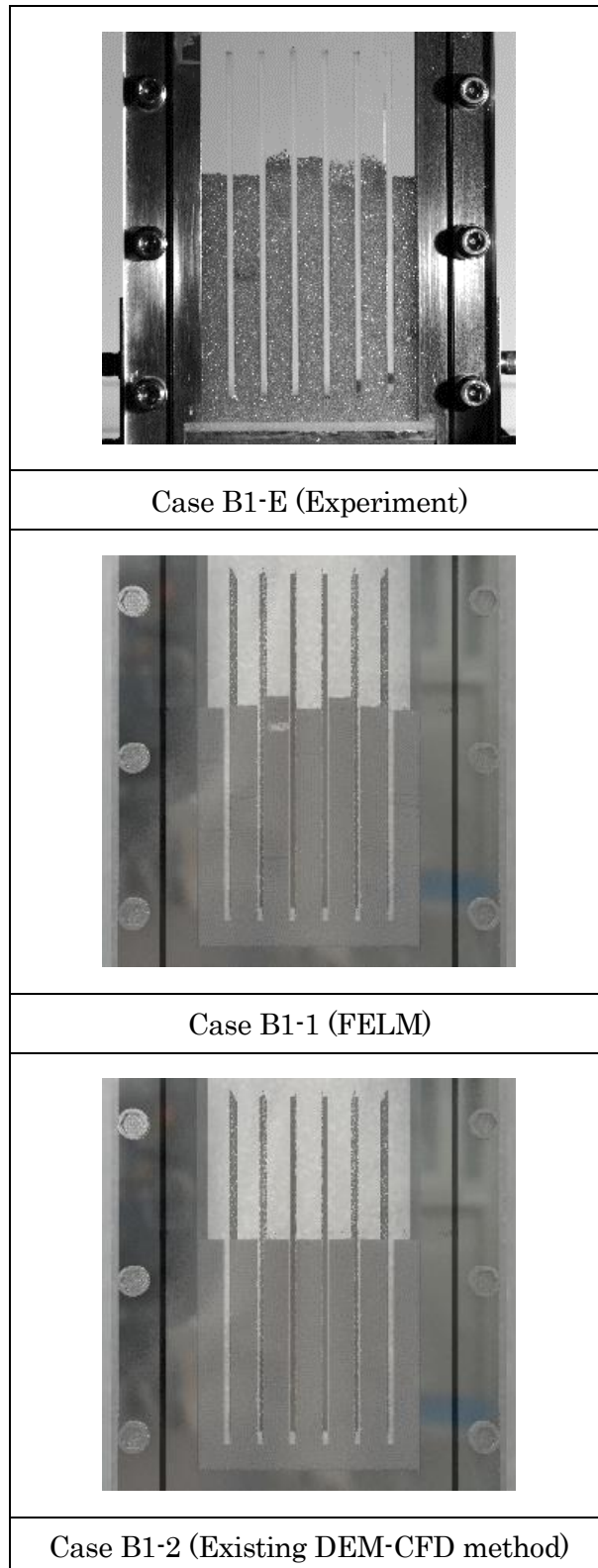


Fig. V-14 Snapshots of the particle distribution in Case B1 (Superficial velocity 0.6 m/s)

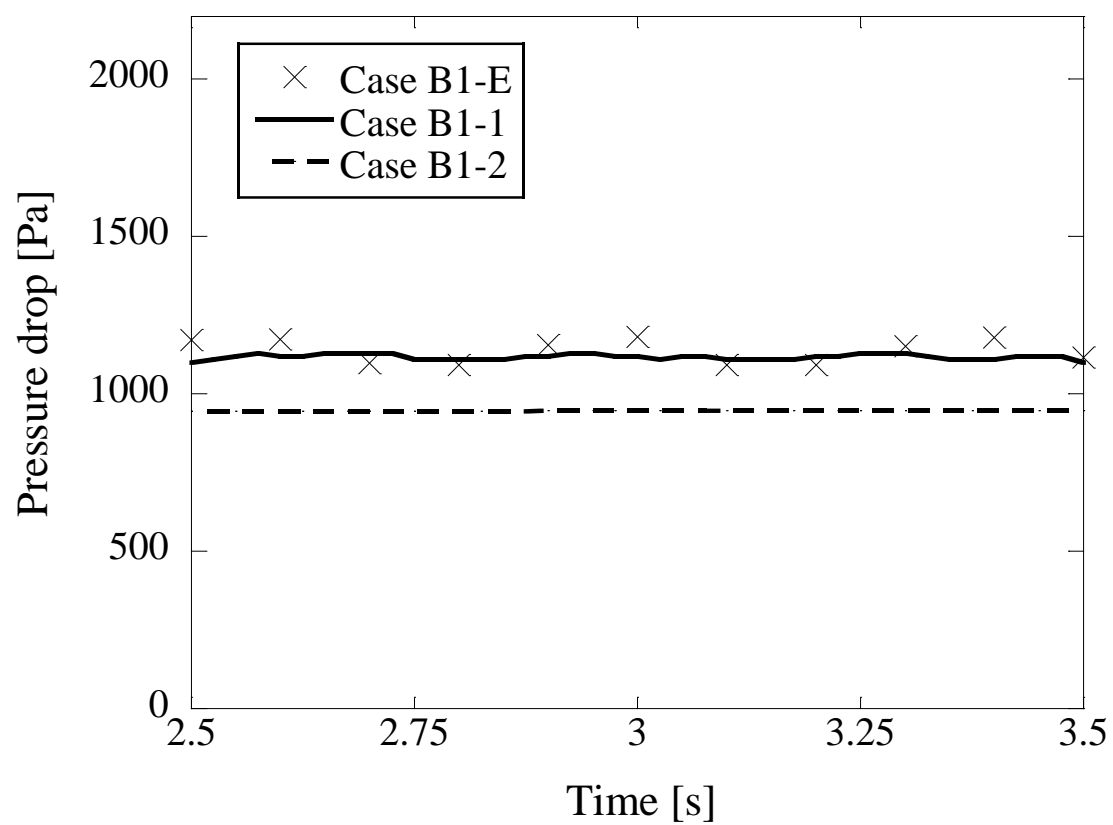


Fig. V-15 Transient change of the pressure drop in Case B1 (Superficial velocity 0.6 m/s)

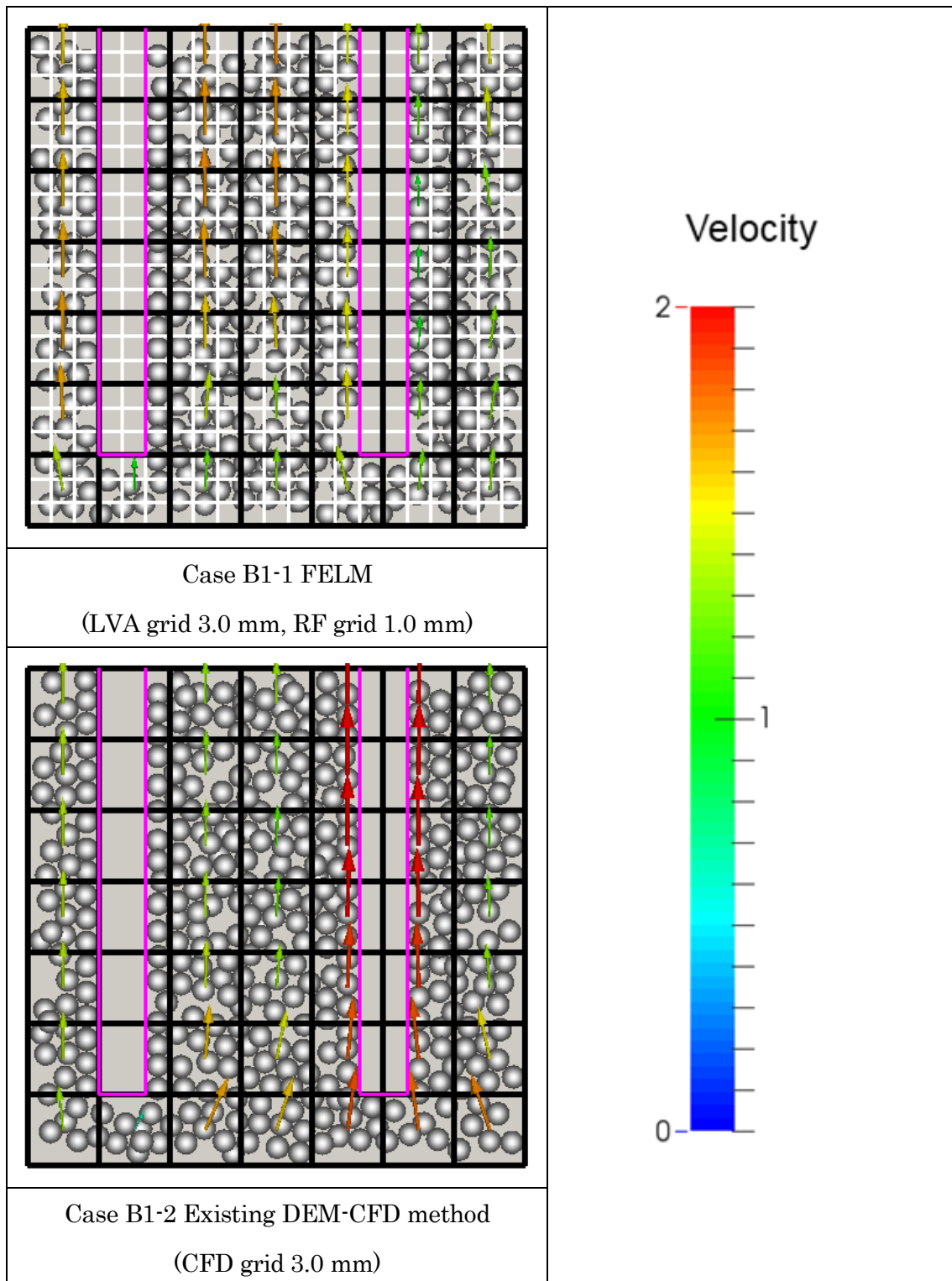


Fig. V-16 Gas velocity and particle distribution in Case B1 (Superficial velocity 0.6 m/s)

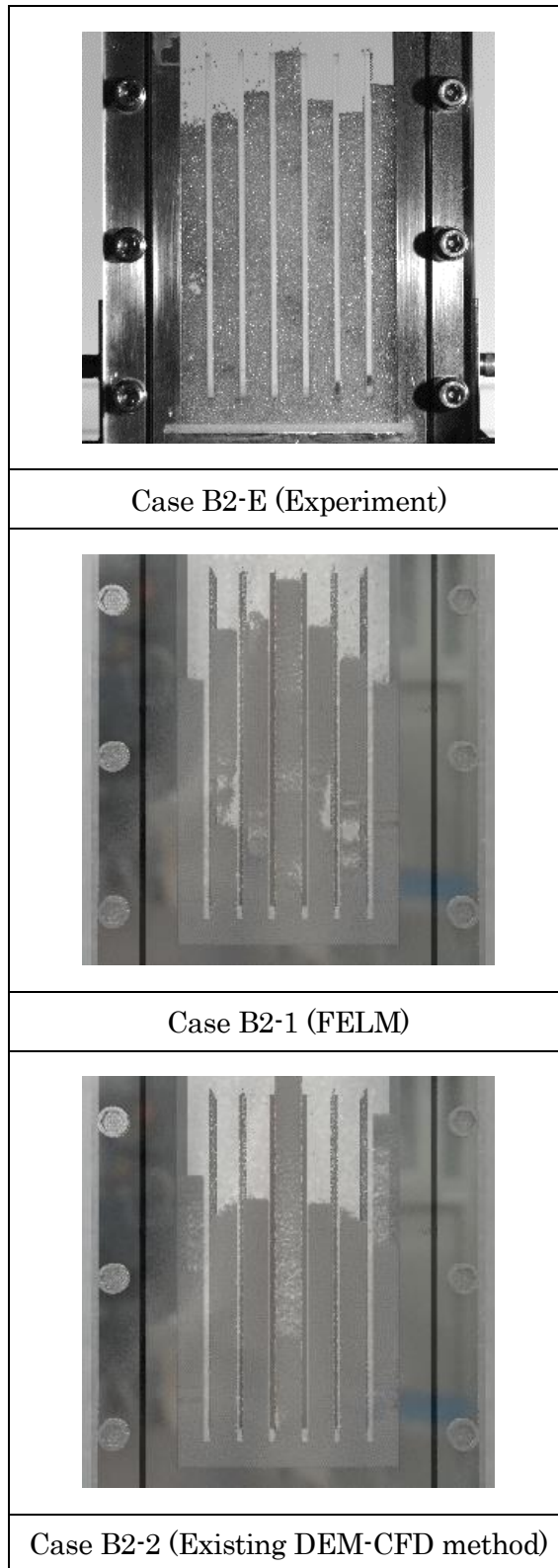


Fig. V-17 Snapshots of the particle distribution in Case B2 (Superficial velocity 0.8 m/s)

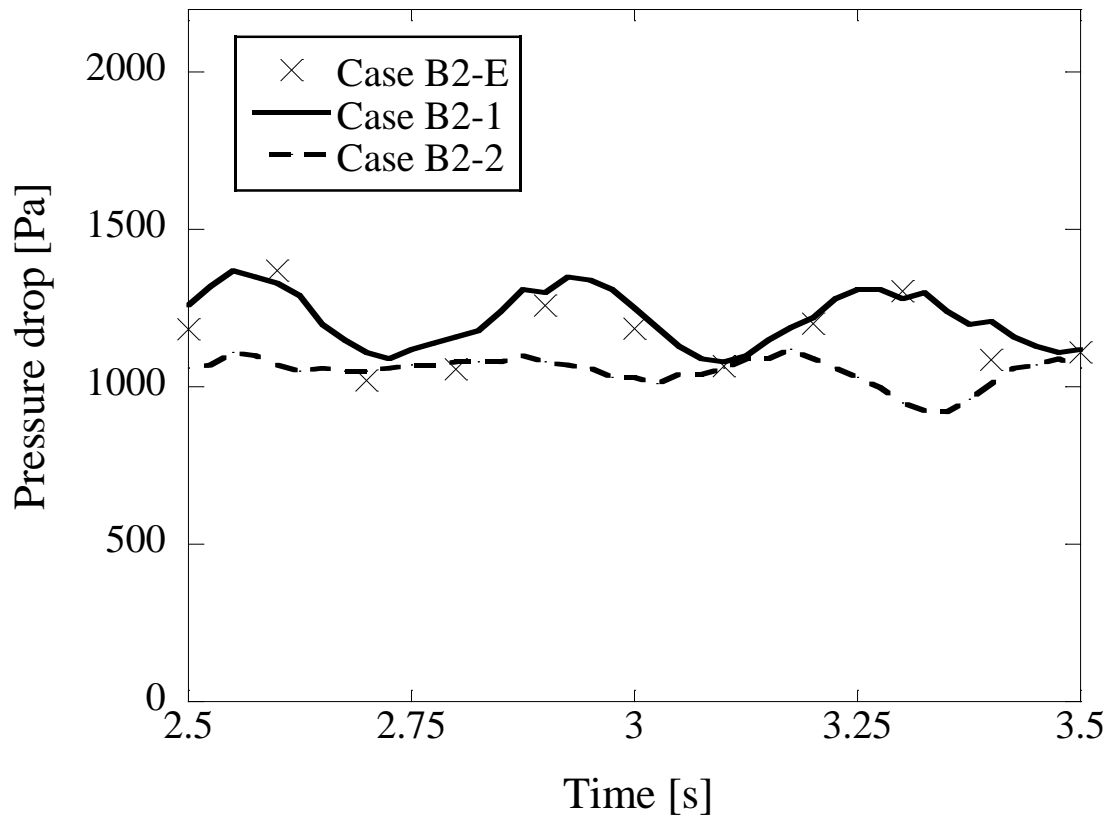


Fig. V-18 Transient change of the pressure drop in Case B2 (Superficial velocity 0.8 m/s)

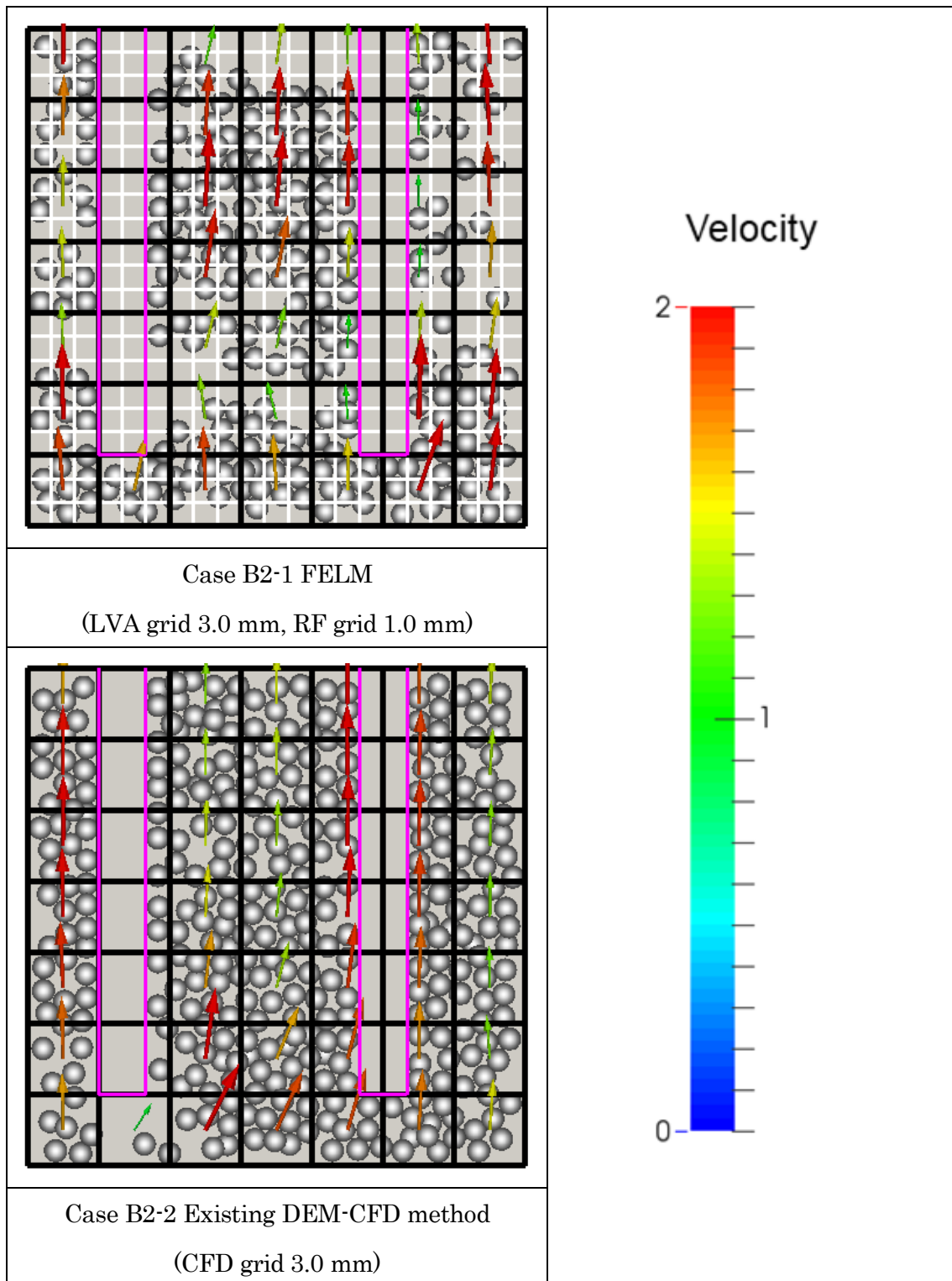


Fig. V-19 Gas velocity and particle distribution in Case B2 (Superficial velocity 0.8 m/s)

第 VI 章 結言

本研究では、数値シミュレーション手法の産業応用を目的として、液架橋力の評価、任意形状壁面を有する固気混相流の計算および薄板を有する固気混相流の計算といった、複数の現象を同時に模擬できるような手法の開発および検証を行った。第 III 章では、3 本ロールミル体系において湿潤粉体が必ず高速のロール側に付着するメカニズムを、DEM シミュレーションを通して明らかにし、トロイダル近似を用いた液架橋力モデルによって従来手法では扱えなかった液量が多い体系が計算可能となることを示した。第 IV 章では、噴流層体系に密度スケーリング手法を導入し、シンプルなアルゴリズムで任意形状壁面を有する固気混相流が計算可能となることを示した。さらに第 V 章では、厳密解や実験との比較を通して FELM の妥当性を評価するとともに、従来手法では困難であった薄板を有する固気混相流が計算可能となることを示した。これにより、液架橋力、任意形状壁面を有する固気混相流、薄板を有する固気混相流といった複数のプロセスが 1 つの手法で計算可能となるため、数値シミュレーション手法の実用体系への応用が容易になることが期待される。以下に、各章で得られた結論をまとめ、最後に今後の展望について述べる。

1 トロイダル近似を用いた液架橋力のシミュレーション

第 III 章では、トロイダル近似による液架橋力モデルによる実用体系の数値シミュレーションとして、3 本ロールミルにおける湿潤粉体の付着挙動の解析を行った。3 本のロールはそれぞれ異なる速度、異なる向きに回転しており、投入された湿潤粉体はロール軸中央で圧密されたのち、高速側のロールに付着して輸送される。3 本ロールミルにおいて、湿潤粉体が必ず高速のロール側に付着するメカニズムについては解明されておらず、歩留まりの向上が困難という問題があった。今回、2 本のロール間を通過する湿潤粉体の挙動をシミュレーションで解析したところ、実際の体系と同じように、ロールに速度差がある場合には粒子の初期配置を変えても必ず高速のロール側に付着する様子が見られた。湿潤粉体がロール間を通過する際、ロール軸中央の狭い隙間によって圧密されている様子が示された。また、ロール軸中央を通過する際の粒子群の形状を調べたところ、回転速度の差に起因するせん断力によって、粒子群が高速のロール側で伸長する様子が見られた。ロール軸中央を通過する際にロール間の狭い隙間で圧密されていることから、伸長によってできた隙間に粒子が再配置されたと考えられる。ロール中央を過ぎたところで圧密から解放

されロール間の距離が開いていくため、付着方向が決定するのはロール中央よりも下であると考えられる。そこで、ロール中央よりも下部でロール粒子間の液架橋力を調べたところ、ロールの回転速度差に依らず、最終的に粒子群が付着するロール側で液架橋力が大きくなっていることが数値シミュレーションによって示された。ロールに速度差がある場合、高速のロール側で伸長が生じた隙間に粒子の再配置が起こるため、伸長部分であるロール中央より下での液架橋力は、必ず高速のロール側で大きくなることが示唆された。以上のことから、3 本ロールミルにおける粒子の付着メカニズムとして、ロール中央よりも下部での左右のロールと湿潤粉体の液架橋力のバランスによって付着する方向が決定することが、数値シミュレーションを用いることによって初めて見出された。

2 密度スケーリング手法を用いた固気混相流シミュレーション

(5 年以内に刊行予定)

3 薄板を有する固気混相流シミュレーション

第 V 章では、Dual grid model に任意形状壁面モデルとして SDF/IB 法を導入した FELM を開発し、薄板を有する固気混相流体系において既存の DEM-CFD 法および実験との比較検証を行った。薄板を有する二重直管流れにおいて、FELM では、薄板が精度よく模擬されており、速度分布は厳密解とよく一致した。また、中央の流路に粒子を均等に並べて多孔質体を設置したところ、FELM は多孔質体内部で圧力損失が見られており、薄板を有する固気混相流が解析可能であることが示された。他方、既存の DEM-CFD 法では薄板を解像できず、薄板を貫通して外側の直管へと流れが生じる様子が模擬された。これは既存の DEM-CFD 法では流体格子で空隙率を評価しており、流体格子幅よりも薄い壁面を精度よく模擬できないためである。

また、薄いスリットを有する流動層において実験、FELM、および DEM-CFD 法で結果の比較を行った。流動化に伴う気泡の上昇や粒子配置は FELM と実験でよく一致していたが、既存の DEM-CFD 法では一部の流路でしか流動化が起こらないなど、実験の現象を模擬できなかった。また、圧力損失の経時変化を比較したところ、FELM と実験ではよく一致した結果が得られた。これは細かい格子で SDF/IB 法による壁面の体積分率を評価することで、壁面と流体の境界層が精度良く得られ、non-slip 境界が正しく計算できたためと考えられる。他方、既存の DEM-CFD 法では流体格子を粒子径よりも十分に大きく設定する必要があるため薄板を解像できず、壁面近傍での流れが正しく評価できなかったと考えられる。

以上の結果から、本研究で開発した FELM を用いることで、従来手法では計算が困難であった薄板を有する固気混相流体系が計算可能となることが示された。

4 今後の展望

今後の展望として、実際の粒子よりも大きいモデル粒子を用いることで計算粒子数を大幅に削減できる DEM 粗視化モデルの導入や、FELM において計算コストを抑えるため部分的に細かな格子を用いる Adaptive mesh refinement を導入することで大規模体系へ拡張し、数値解析手法の一層の活用を目指したい。

参考文献

- [1] M. Halidan, G. R. Chandratilleke, S. L. I. Chan, A. B. Yu, and J. Bridgwater, "Prediction of the mixing behaviour of binary mixtures of particles in a bladed mixer," *Chem. Eng. Sci.*, vol. 120, pp. 37–48, 2014.
- [2] O. Mihailova *et al.*, "Optimisation of mixing performance of helical ribbon mixers for high throughput applications using computational fluid dynamics," *Chem. Eng. Res. Des.*, vol. 132, pp. 942–953, 2018.
- [3] G. R. Chandratilleke, A. B. Yu, and J. Bridgwater, "A DEM study of the mixing of particles induced by a flat blade," *Chem. Eng. Sci.*, vol. 79, pp. 54–74, 2012.
- [4] G. Basinskas and M. Sakai, "Numerical study of the mixing efficiency of a ribbon mixer using the discrete element method," *Powder Technol.*, vol. 287, pp. 380–394, 2016.
- [5] P. Thapa, J. Tripathi, and S. H. Jeong, "Recent trends and future perspective of pharmaceutical wet granulation for better process understanding and product development," *Powder Technology*, vol. 344. Elsevier B.V., pp. 864–882, 15-Feb-2019.
- [6] S. Shirazian, H. Y. Ismail, M. Singh, R. Shaikh, D. M. Croker, and G. M. Walker, "Multi-dimensional population balance modelling of pharmaceutical formulations for continuous twin-screw wet granulation: Determination of liquid distribution," *Int. J. Pharm.*, vol. 566, pp. 352–360, 2019.
- [7] N. Veronica, H. P. Goh, C. Y. X. Kang, C. V. Liew, and P. W. S. Heng, "Influence of spray nozzle aperture during high shear wet granulation on granule properties and its compression attributes," *Int. J. Pharm.*, vol. 553, no. 1–2, pp. 474–482, 2018.
- [8] A. Tamrakar, S. W. Chen, and R. Ramachandran, "A DEM model-based study to quantitatively compare the effect of wet and dry binder addition in high-shear wet granulation processes," *Chem. Eng. Res. Des.*, 2019.
- [9] L. Vandevivere *et al.*, "Native starch as in situ binder for continuous twin screw wet granulation," *Int. J. Pharm.*, vol. 571, p. 118760, 2019.

- [10] G. K. Jayatunga and B. M. W. P. K. Amarasinghe, "Drying kinetics, quality and moisture diffusivity of spouted bed dried Sri Lankan black pepper," *J. Food Eng.*, vol. 263, pp. 38–45, 2019.
- [11] Y. M. da Silva Veloso, M. M. de Almeida, O. L. S. de Alsina, M. L. Passos, A. S. Mujumdar, and M. S. Leite, "Hybrid phenomenological/ANN-PSO modelling of a deformable material in spouted bed drying process," *Powder Technol.*, 2019.
- [12] W. Gu, H. Li, S. Liu, and Y. Zhou, "Influence of a sound field on the flow pattern of hollow microbeads in a spout-fluidized bed with a draft tube," *Powder Technol.*, vol. 354, pp. 211–217, 2019.
- [13] Y. Zhang, G. Huang, and G. Su, "Hydrodynamic behavior of silicon particles with a wide size distribution in a draft tube spout-fluid bed," *Chem. Eng. J.*, vol. 328, pp. 645–653, 2017.
- [14] M. Foroughi-Dahr, R. Sotudeh-Gharebagh, and N. Mostoufi, "Characterization of flow properties of pharmaceutical pellets in draft tube conical spout-fluid beds," *J. Ind. Eng. Chem.*, vol. 68, pp. 274–281, 2018.
- [15] A. Krok and C. Y. Wu, "Evolutions of temperature and density during roll compaction of a pharmaceutical excipient," *Int. J. Pharm.*, vol. 572, p. 118822, 2019.
- [16] S. Yu, M. Adams, B. Gururajan, G. Reynolds, R. Roberts, and C. Y. Wu, "The effects of lubrication on roll compaction, ribbon milling and tableting," *Chem. Eng. Sci.*, vol. 86, pp. 9–18, 2013.
- [17] X. He, P. J. Secreast, and G. E. Amidon, "Mechanistic study of the effect of roller compaction and lubricant on tablet mechanical strength," *J. Pharm. Sci.*, vol. 96, no. 5, pp. 1342–1355, 2007.
- [18] L. Perez-Gandarillas, A. Perez-Gago, A. Mazor, P. Kleinebudde, O. Lecoq, and A. Michrafy, "Effect of roll-compaction and milling conditions on granules and tablet properties," *Eur. J. Pharm. Biopharm.*, vol. 106, pp. 38–49, 2016.

- [19] S. Hong, D. Kim, S. Lee, B.-W. Kim, P. Theilmann, and S.-H. Park, "Enhanced thermal and mechanical properties of carbon nanotube composites through the use of functionalized CNT-reactive polymer linkages and three-roll milling," *Compos. Part A Appl. Sci. Manuf.*, vol. 77, pp. 142–146, 2015.
- [20] P. Theilmann, D. J. Yun, P. Asbeck, and S. H. Park, "Superior electromagnetic interference shielding and dielectric properties of carbon nanotube composites through the use of high aspect ratio CNTs and three-roll milling," *Org. Electron.*, vol. 14, no. 6, pp. 1531–1537, 2013.
- [21] A. Zakhvatayeva, C. Hare, and C. Y. Wu, "Size-induced segregation during die filling," *Int. J. Pharm. X*, 2019.
- [22] A. Zakhvatayeva, W. Zhong, H. A. Makroo, C. Hare, and C. Y. Wu, "An experimental study of die filling of pharmaceutical powders using a rotary die filling system," *Int. J. Pharm.*, vol. 553, no. 1–2, pp. 84–96, 2018.
- [23] S. Schiano, L. Chen, and C. Y. Wu, "The effect of dry granulation on flow behaviour of pharmaceutical powders during die filling," *Powder Technol.*, vol. 337, pp. 78–83, 2018.
- [24] E. N. Nwose, C. Pei, and C.-Y. Y. Wu, "Modelling die filling with charged particles using DEM/CFD," *Particuology*, vol. 10, no. 2, pp. 229–235, 2012.
- [25] H. Yao, Y. Mori, K. Takabatake, X. Sun, and M. Sakai, "Numerical investigation on the influence of air flow in a die filling process," *J. Taiwan Inst. Chem. Eng.*, 2017.
- [26] C. H. Cho, J. Y. Kim, and E. S. Park, "Effects of process parameters of rotary tablet press on die filling behavior during mini-tablet production: Comparison with conventional tablet," *Powder Technol.*, vol. 362, pp. 90–100, 2020.
- [27] S. Pietsch, A. Peter, P. Wahl, J. Khinast, and S. Heinrich, "Measurement of granule layer thickness in a spouted bed coating process via optical coherence tomography," *Powder Technol.*, vol. 356, pp. 139–147, 2019.

- [28] S. Pietsch, F. O. Poppinga, S. Heinrich, M. Müller, M. Schönherr, and F. Kleine Jäger, “A novel method of quantifying the coating progress in a three-dimensional prismatic spouted bed,” *Particuology*, vol. 42, pp. 137–145, 2019.
- [29] J. L. Plawsky, H. Littman, and J. D. Paccione, “Design, simulation, and performance of a draft tube spout fluid bed coating system for aerogel particles,” *Powder Technol.*, vol. 199, no. 2, pp. 131–138, 2010.
- [30] N. E. C. Lopes, V. A. S. Moris, and O. P. Taranto, “Analysis of spouted bed pressure fluctuations during particle coating,” *Chem. Eng. Process. Process Intensif.*, vol. 48, no. 6, pp. 1129–1134, 2009.
- [31] W. Y. Chen and H. P. Kuo, “Surface coating of group B iron powders in a spouted bed,” in *Procedia Engineering*, 2015, vol. 102, pp. 1144–1149.
- [32] H. Mitsuda, N. Sahboun, S. Miwa, M. Mori, R. Kikuchi, and K. Miyoshi, “Evaluation of the in-vessel heat transfer for the debris removal of the Fukushima Daiichi nuclear power plant,” *Prog. Nucl. Energy*, vol. 119, 2020.
- [33] A. Nakayoshi, C. Jegou, L. De Windt, S. Perrin, and T. Washiya, “Leaching behavior of prototypical corium samples: A step to understand the interactions between the fuel debris and water at the Fukushima Daiichi reactors,” *Nucl. Eng. Des.*, vol. 360, no. May 2019, p. 110522, 2020.
- [34] B. Grambow and C. Poinssot, “Interactions between nuclear fuel and water at the Fukushima Daiichi reactors,” *Elements*, vol. 8, no. 3, pp. 213–219, 2012.
- [35] W. Christoph Müller, “Review of debris bed cooling in the TMI-2 accident,” *Nucl. Eng. Des.*, vol. 236, no. 19–21, pp. 1965–1975, 2006.
- [36] N. Reinke, T. Drath, T. v. Berlepsch, H. E. Unger, and M. K. Koch, “Formation, characterisation and cooling of debris. Scenario discussion with emphasis on TMI-2,” *Nucl. Eng. Des.*, vol. 236, no. 19–21, pp. 1955–1964, 2006.

- [37] T. R. and D. C. Japan Atomic Energy Agency, “Fuel Debris Characterization and Treatment Technologies Development for TEPCO’s Fukushima Daiichi Nuclear Power Station,” 2013.
- [38] P. A. Cundall and O. D. L. Strack, “A discrete numerical model for granular assemblies,” *Geotechnique*, vol. 29, pp. 47–65, 1979.
- [39] M. Sakai and S. Koshizuka, “Large-scale discrete element modeling in pneumatic conveying,” *Chem. Eng. Sci.*, vol. 64, no. 3, pp. 533–539, 2009.
- [40] M. Sakai, Y. Yamada, Y. Shigeto, K. Shibata, V. M. Kawasaki, and S. Koshizuka, “Large-scale discrete element modeling in a fluidized bed,” *Int. J. Numer. Meth. Fluids*, vol. 64, pp. 1319–1335, 2010.
- [41] M. Sakai, H. Takahashi, C. C. Pain, J. P. Latham, and J. Xiang, “Study on a large-scale discrete element model for fine particles in a fluidized bed,” *Adv. Powder Technol.*, vol. 23, no. 5, pp. 673–681, 2012.
- [42] J. M. Ottino and R. M. Lueptow, “Materials science: On mixing and demixing,” *Science*, vol. 319, no. 5865. American Association for the Advancement of Science, pp. 912–913, 15-Feb-2008.
- [43] Y. Shigeto and M. Sakai, “Parallel computing of discrete element method on multi-core processors,” *Particuology*, vol. 9, no. 4, pp. 398–405, 2011.
- [44] P. W. Cleary and M. L. Sawley, “DEM modelling of industrial granular flows: 3D case studies and the effect of particle shape on hopper discharge,” *Appl. Math. Model.*, vol. 26, no. 2, pp. 89–111, 2002.
- [45] P. W. Cleary, “Extension of SPH to predict feeding , freezing and defect creation in low pressure die casting,” *Appl. Math. Model.*, vol. 34, no. 11, pp. 3189–3201, 2010.
- [46] Y. Shigeto and M. Sakai, “Arbitrary-shaped wall boundary modeling based on signed distance functions for granular flow simulations,” *Chem. Eng. J.*, vol. 231, pp. 464–476, 2013.

- [47] M. Sakai, Y. Shigeto, G. Basinskas, A. Hosokawa, and M. Fuji, "Discrete element simulation for the evaluation of solid mixing in an industrial blender," *Chem. Eng. J.*, vol. 279, pp. 821–839, 2015.
- [48] G. Basinskas and M. Sakai, "Numerical study of the mixing efficiency of a batch mixer using the discrete element method," *Powder Technol.*, vol. 301, pp. 815–829, 2016.
- [49] J. N. Israelachvili, *Intermolecular and Surface Forces*. Academic Press, 2010.
- [50] Y. I. Rabinovich, M. S. Esayanur, and B. M. Moudgil, "Capillary Forces between Two Spheres with a Fixed Volume Liquid Bridge: Theory and Experiment," *Langmuir*, vol. 21, no. 24, pp. 10992–10997, 2005.
- [51] P. Y. Liu, R. Y. Yang, and A. B. Yu, "Particle scale investigation of flow and mixing of wet particles in rotating drums," in *Physics of Fluids*, 2013, vol. 23, pp. 963–966.
- [52] H. Zhang and S. Li, "DEM simulation of wet granular-fluid flows in spouted beds: Numerical studies and experimental verifications," *Powder Technol.*, vol. 318, pp. 337–349, 2017.
- [53] A. C. Santomaso, S. Volpato, and F. Gabrieli, "Collapse and runout of granular columns in pendular state," *Phys. Fluids*, vol. 30, no. 6, 2018.
- [54] F. Gabrieli, R. Artoni, A. Santomaso, and S. Cola, "Discrete particle simulations and experiments on the collapse of wet granular columns," *Phys. Fluids*, vol. 25, no. 10, p. 103303, 2013.
- [55] T. B. Anderson and R. O. Y. Jackson, "A Fluid Mechanical Description of Fluidized Beds," *Ind. Eng. Chem. Fundam.*, vol. 6, no. 4, pp. 527–539, 1967.
- [56] Y. Tsuji, T. Kawaguchi, and T. Tanaka, "Discrete particle simulation of two-dimensional fluidized bed," *Powder Technol.*, vol. 77, no. 77, pp. 79–87, 1993.
- [57] J. F. Thompson, F. C. Thames, and C. W. Mastin, "Automatic numerical generation of body-fitted curvilinear coordinate system for field containing any number of arbitrary two-dimensional bodies," *J. Comput. Phys.*, vol. 15, no. 3, pp. 299–319, 1974.

- [58] R. Lohner, K. Morgan, J. Peraire, and M. Vahdati, "Finite element flux-corrected transport (FEM-PTC) for the Euler and Navier-Stokes equations," *Int. J. Numer. Methods Fluids*, vol. 7, pp. 1093–1109, 1987.
- [59] G. Yang, D. M. Causon, and D. M. Ingram, "Calculation of compressible flows about complex moving geometries using a three-dimensional Cartesian cut cell method," *Int. J. Numer. Methods Fluids*, vol. 33, no. 8, pp. 1121–1151, 2000.
- [60] T. Kajishima, S. Takiguchi, H. Hamasaki, and Y. Miyake, "Turbulence structure of particle-laden flow in a vertical plane channel due to vortex shedding," *JSME Int. J. Ser. B*, vol. 44, no. 4, pp. 526–535, 2001.
- [61] J. Yang and E. Balaras, "An embedded-boundary formulation for large-eddy simulation of turbulent flows interacting with moving boundaries," *J. Comput. Phys.*, 2006.
- [62] X. Sun and M. Sakai, "Numerical simulation of two-phase flows in complex geometries by using the volume-of-fluid/immersed-boundary method," *Chem. Eng. Sci.*, vol. 139, pp. 221–240, 2016.
- [63] Y. Mori, C.-Y. Wu, and M. Sakai, "Validation study on a scaling law model of the DEM in industrial gas-solid flows," *Powder Technol.*, vol. 343, pp. 101–112, 2019.
- [64] Y. Tsunazawa, D. Fujihashi, S. Fukui, M. Sakai, and C. Tokoro, "Contact force model including the liquid-bridge force for wet-particle simulation using the discrete element method," *Adv. Powder Technol.*, vol. 27, no. 2, pp. 652–660, 2016.
- [65] P. Y. Liu, R. Y. Yang, and A. B. Yu, "Dynamics of wet particles in rotating drums: Effect of liquid surface tension," *Phys. Fluids*, vol. 23, no. 1, 2011.
- [66] E. L. Chan and K. Washino, "Coarse grain model for DEM simulation of dense and dynamic particle flow with liquid bridge forces," *Chem. Eng. Res. Des.*, vol. 132, pp. 1060–1069, 2018.
- [67] E. W. C. Lima, "Pattern formation in vibrated beds of dry and wet granular materials," *Phys. Fluids*, vol. 26, no. 1, 2014.

- [68] X. Sun and M. Sakai, "Direct numerical simulation of gas-solid-liquid flows with capillary effects: An application to liquid bridge forces between spherical particles," *Phys. Rev. E*, vol. 94, no. 6, p. 063301, 2016.
- [69] W. J. Huppmann and H. Riegger, "Modeling of rearrangement processes in liquid phase sintering," *Acta Met.*, vol. 23, 1975.
- [70] Y. Chen, Y. Zhao, H. Gao, and J. Zheng, "Liquid bridge force between two unequal-sized spheres or a sphere and a plane," *Particuology*, vol. 9, no. 4, pp. 374–380, 2011.
- [71] X. Sun and M. Sakai, "A liquid bridge model for spherical particles applicable to asymmetric configurations," *Chem. Eng. Sci.*, vol. 182, pp. 28–43, 2018.
- [72] C. S. Peskin, "Flow patterns around heart valves: A numerical method," *J. Comput. Phys.*, 1972.
- [73] I. Borazjani, L. Ge, and F. Sotiropoulos, "Curvilinear immersed boundary method for simulating fluid structure interaction with complex 3D rigid bodies," *J. Comput. Phys.*, 2008.
- [74] J. Lee, J. Kim, H. Choi, and K. S. Yang, "Sources of spurious force oscillations from an immersed boundary method for moving-body problems," *J. Comput. Phys.*, 2011.
- [75] X. Sun and M. Sakai, "Immersed boundary method with artificial density in pressure equation for modeling flows confined by wall boundaries," *J. Chem. Eng. Japan*, vol. 50, no. 3, pp. 161–169, 2017.
- [76] S. Di and W. Ge, "Simulation of dynamic fluid-solid interactions with an improved direct-forcing immersed boundary method," *Particuology*, vol. 18, pp. 22–34, 2015.
- [77] B. Blais and F. Bertrand, "CFD-DEM investigation of viscous solid-liquid mixing: Impact of particle properties and mixer characteristics," *Chem. Eng. Res. Des.*, 2017.
- [78] M. D. Sinnott, J. E. Hilton, W. McBride, and P. W. Cleary, "Coupled gas-particulate discharge from a bucket elevator," *Powder Technol.*, 2017.

- [79] Y. Guo, C. Y. Wu, and C. Thornton, "Modeling gas-particle two-phase flows with complex and moving boundaries using DEM-CFD with an immersed boundary method," *AIChE J.*, vol. 59, no. 4, pp. 1075–1087, 2013.
- [80] J. Capecelatro and O. Desjardins, "An Euler-Lagrange strategy for simulating particle-laden flows," *J. Comput. Phys.*, vol. 238, pp. 1–31, 2013.
- [81] H. Wu, N. Gui, X. Yang, J. Tu, and S. Jiang, "A smoothed void fraction method for CFD-DEM simulation of packed pebble beds with particle thermal radiation," *Int. J. Heat Mass Transf.*, 2018.
- [82] G. Pozzetti and B. Peters, "On the choice of a phase interchange strategy for a multiscale DEM-VOF method," *J. Chem. Phys.*, vol. 1863, p. 124505, 2017.
- [83] G. Pozzetti and B. Peters, "A multiscale DEM-VOF method for the simulation of three-phase flows," *Int. J. Multiph. Flow*, vol. 99, pp. 186–204, 2018.
- [84] E. Rabadan Santana, G. Pozzetti, and B. Peters, "Application of a dual-grid multiscale CFD-DEM coupling method to model the raceway dynamics in packed bed reactors," *Chem. Eng. Sci.*, 2019.
- [85] B. Peters and G. Pozzetti, "Flow characteristics of metallic powder grains for additive manufacturing," *Powders & Grains*, vol. 140, 2017.
- [86] G. Pozzetti and B. Peters, "A numerical approach for the evaluation of particle-induced erosion in an abrasive waterjet focusing tube," *Powder Technol.*, 2018.
- [87] S. Ergun, "Fluid flow through packed columns," *Chem. Eng. Prog.*, vol. 48, pp. 89–94, 1952.
- [88] C. Y. Wen and Y. H. Yu, "Mechanics of fluidization," *Chem. Eng. Prog. Symp. Ser.*, vol. 62, pp. 100–111, 1966.
- [89] N. Lu, F. Asce, T.-H. Kim, M. Asce, ; Stein Sture, and W. J. Likos, "Tensile Strength of Unsaturated Sand."

- [90] J. P. Wang, E. Gallo, B. François, F. Gabrieli, and P. Lambert, “Capillary force and rupture of funicular liquid bridges between three spherical bodies,” *Powder Technol.*, vol. 305, pp. 89–98, 2017.
- [91] D. J. Hornbaker, R. Albert, I. Albert, A. L. Barabasi, and P. Schiffer, “What keeps sandcastles standing? [4],” *Nature*, vol. 387, no. 6635, p. 765, 1997.
- [92] C. D. Willett, M. J. Adams, S. A. Johnson, and J. P. K. Seville, “Capillary Bridges between Two Spherical Bodies,” *Langmuir*, vol. 16, no. 24, pp. 9396–9405, 2000.
- [93] D. Fujihashi, Y. Tsunazawa, C. Tokoro, and M. Sakai, “DEM Simulation of Particle Behavior in Pan-type Pelletizer Considering the Effect of the Capillary Force,” *J. Soc. Powder Technol. Japan*, vol. 51, pp. 828–836, 2014.
- [94] G. Lian, C. Thornton, and M. J. Adams, “A Theoretical Study of the Liquid Bridge Forces between Two Rigid Spherical Bodies,” *J. Colloid Interface Sci.*, vol. 161, no. 1, pp. 138–147, 1993.
- [95] P. Lambert, A. Chau, A. Delchambre, and S. Régnier, “Comparison between Two Capillary Forces Models,” *Langmuir*, vol. 24, no. 7, pp. 3157–3163, 2008.
- [96] K. Brakke, “The Surface Evolver and the stability of liquid surfaces,” *Philos. Trans. R. Soc. A Math. Phys. Eng. Sci.*, vol. 354, pp. 2143–2157, 1996.
- [97] M. E. D. Urso, C. J. Lawrence, and M. J. Adams, “Pendular, Funicular, and Capillary Bridges: Results for Two Dimensions,” *J. Colloid Interface Sci.*, vol. 220, no. 1, pp. 42–56, 1999.
- [98] M. E. D. Urso, C. J. Lawrence, and M. J. Adams, “A two-dimensional study of the rupture of funicular liquid bridges,” *Chem. Eng. Sci.*, vol. 57, no. 4, pp. 677–692, 2002.
- [99] C. Semperebon, M. Scheel, S. Herminghaus, R. Seemann, and M. Brinkmann, “Liquid morphologies and capillary forces between three spherical beads,” *Phys. Rev. E*, vol. 94, no. 1, p. 012907, 2016.

- [100] K. Washino, E. L. Chan, H. Midou, T. Tsuji, and T. Tanaka, "Tangential viscous force models for pendular liquid bridge of Newtonian fluid between moving particles," *Chem. Eng. Sci.*, vol. 174, pp. 365–373, 2017.
- [101] J. Mohd-Yusof, "Combined immersed-boundary/B-spline methods for simulations of flow in complex geometries," *Cent. Turbul. Res. Annu. Res. Briefs*, pp. 317–327, 1997.
- [102] M. Uhlmann, "An immersed boundary method with direct forcing for the simulation of particulate flows," *J. Comput. Phys.*, 2005.
- [103] Z. Peng, E. Doroodchi, C. Luo, and B. Moghtaderi, "Influence of void fraction calculation on fidelity of CFD-DEM simulation of gas-solid bubbling fluidized beds," *AIChE J.*, vol. 60, no. 6, pp. 2000–2018, 2014.
- [104] C. M. Boyce, D. J. Holland, S. A. Scott, and J. S. Dennis, "Limitations on Fluid Grid Sizing for Using Volume-Averaged Fluid Equations in Discrete Element Models of Fluidized Beds," *Ind. Eng. Chem. Res.*, vol. 54, no. 43, pp. 10684–10697, 2015.
- [105] D. A. Clarke, A. J. Sederman, L. F. Gladden, and D. J. Holland, "Investigation of Void Fraction Schemes for Use with CFD-DEM Simulations of Fluidized Beds," *Ind. Eng. Chem. Res.*, vol. 57, no. 8, pp. 3002–3013, 2018.
- [106] G. Pozzetti, H. Jasak, X. Besseron, A. Rousset, and B. Peters, "A parallel dual-grid multiscale approach to CFD-DEM couplings," *J. Comput. Phys.*, vol. 378, pp. 708–722, 2019.
- [107] A. J. Chorin, "A Numerical Method for Solving Incompressible Viscous Flow Problems," *J. Comput. Phys.*, vol. 135, no. 2, pp. 118–125, 1997.
- [108] C. M. Boyce, "Gas-solid fluidization with liquid bridging: A review from a modeling perspective," *Powder Technology*, vol. 336. Elsevier B.V., pp. 12–29, 01-Aug-2018.
- [109] C. M. Boyce, A. Penn, M. Lehnert, K. P. Pruessmann, and C. R. Müller, "Effect of liquid bridging on bubbles injected into a fluidized bed: A magnetic resonance imaging study," *Powder Technol.*, vol. 343, pp. 813–820, 2019.

- [110] Y. Zhou, Q. Shi, Z. Huang, J. Wang, and Y. Yang, "Particle agglomeration and control of gas-solid fluidized bed reactor with liquid bridge and solid bridge coupling actions," *Chem. Eng. J.*, vol. 330, pp. 840–851, 2017.
- [111] H. Zhou and Y. Xiong, "Conveying mechanisms of dense-phase pneumatic conveying of pulverized lignite in horizontal pipe under high pressure," *Powder Technol.*, vol. 363, pp. 7–22, 2020.
- [112] H. Zhou, Y. Xiong, and Y. Pei, "Effect of moisture content on dense-phase pneumatic conveying of pulverized lignite under high pressure," *Powder Technol.*, vol. 287, pp. 355–363, 2016.
- [113] Y. Ji, S. Liu, and J. Li, "Experimental and numerical studies on dense-phase pneumatic conveying of spraying material in venturi," *Powder Technol.*, vol. 339, pp. 419–433, 2018.
- [114] Y. Dufresne, V. Moureau, G. Lartigue, and O. Simonin, "A massively parallel CFD/DEM approach for reactive gas-solid flows in complex geometries using unstructured meshes," *Comput. Fluids*, vol. 198, p. 104402, 2020.
- [115] H. Zhou, Q. Y. Tu, and H. G. Wang, "Investigation of the complex gas-solids flow characteristics in a fluidized bed with a Wurster tube by process tomography and CFD simulation," *Powder Technol.*, vol. 357, pp. 117–133, 2019.
- [116] J. F. Dietiker, T. Li, R. Garg, and M. Shahnam, "Cartesian grid simulations of gas-solids flow systems with complex geometry," *Powder Technol.*, 2013.
- [117] Y. Liu, M. R. Thompson, and K. P. O'Donnell, "Function of upstream and downstream conveying elements in wet granulation processes within a twin screw extruder," *Powder Technol.*, vol. 284, pp. 551–559, 2015.
- [118] S. Yao, Y. Zhang, N. Deng, X. Yu, and S. Dong, "Performance research on a power generation system using twin-screw expanders for energy recovery at natural gas pressure reduction stations under off-design conditions," *Appl. Energy*, vol. 236, pp. 1218–1230, 2019.

謝辞

本論文は、東京大学大学院工学系研究科原子力国際専攻の博士後期課程における研究成果をまとめたものです。本研究を遂行するにあたり、様々な方から多大なご協力およびご支援をいただきました。ここに、謝意を表します。

指導教官であります東京大学大学院工学系研究科レジリエンス工学研究センター准教授の酒井幹夫先生に深く感謝申し上げます。修士課程からの5年間、公私を問わずご指導いただきました。時には厳しく賜ったご助言は、私の心の中に金言として深く刻まれています。また、大学を卒業してからの将来設計についても多大なご支援をいただき、安心して研究に専念することができました。国内外を問わず数多くの学会での研究発表の機会や、国際的に活躍している研究者の先生方との交流の機会も数多くいただき、研究者として大きく成長する機会に恵まれた、非常に充実した5年間を過ごすことができました。心より、感謝申し上げます。

そして、本論文の副査を快く引き受けてくださった東京大学大学院工学系研究科の山口彰教授、同研究科の越塚誠一教授、同研究科の杉山弘和准教授、同大学大学院新領域創成科学研究科の奥田洋司教授、産業技術総合研究所の近藤雅裕研究員には、学位論文審査において貴重なご指導およびご助言をいただきました。ここに感謝の意を表します。

所属研究室の秘書であります飯島由江様、市瀬多鶴子様、牧田みか様には学会発表など出張の手配をはじめ、大学の事務の面で多大なご協力をいただきました。心より感謝申し上げます。

所属研究室の特別研究員でありました孫曉松博士には、修士課程の時分から、研究面において多くの助言を賜りました。心より感謝申し上げます。

所属研究室の特別研究員であります佐藤兼太博士には、学位論文審査に進む上でご助言をいただき、よりよい論文作成の大きな助けとなりました。また、私的にも飲み会などの様々な交流を通して、学生生活における心の癒しとなりました。心よりお礼申し上げます。

研究室同期の鶴殿寛岳さんとは、修士課程からの5年間、研究の相談のみならず、飲み会などを通して学生生活を楽しく過ごすことができました。時に研究について助言しあったり、また時には切磋琢磨したりと、よい刺激を受けることができました。心より感謝申し上げます。

また、長い研究生活において、後輩の皆様には刺激を受けるとともに、私の趣味であるボードゲームにもお付き合いいただき、研究生活を楽しく過ごすことができました。ありがとうございます。

産業技術総合研究所の綱澤有輝研究員は、博士課程の研究に対する姿勢や心構えの面で規範を示してくださいました。また、早稲田大学大学院を卒業され産業技術総合研究所に進まれた後も、私生活において楽しい時間を共にすることができ、精神的に大きな支えとなりました。心よりお礼申し上げます。

千葉大学大学院共生応用科学専攻の山田真澄准教授、慶應義塾大学大学院開放環境科学専攻の藤岡沙都子講師には、3大学間交流会において研究内容について助言をいただきました。また、それぞれの大学の学生の皆様からは、異なる分野ではありますが、活発な議論をいただき、新たな気付きを得る良い機会をいただきました。心よりお礼申し上げます。

研究を進めるにあたり、公私に渡りご支援・ご協力を頂きながら、ここにお名前を記すことができなかった多くの方々に心より感謝申し上げます。

独立行政法人日本学術振興会および一般社団法人日本電気協会からは、在学中の金銭面において、多大なるご支援をいただきました。ここに謝意を表します。

最後になりますが、博士課程への進学を快く認めていただき、研究に専念できるように支えてくださった両親に感謝の気持ちを伝えたいと思います。ありがとうございました。