

博士論文（要約）

固体-流体連成問題におけるマルチスケールシミュレーションに向けた数値解析モデルの開発

Development of the numerical model for the multiscale numerical simulation in the solid-fluid multiphase flow

森 勇稀

目次

目次	2
図目次	4
1. 緒言	1
1.1. 研究の背景.....	1
1.1.1. 産業分野における粉体および固体-流体混相流の応用	1
1.1.2. 粉体および固体-流体混相流に対する数値解析の応用	3
1.2. 既存の問題および先行研究	9
1.2.1. 大物体を伴う固気混相流.....	9
1.2.2. 大規模粉体システムに適用可能な液架橋モデル	9
1.2.3. 移動壁面を伴う楕円体粒子による固気混相流	9
1.3. 本研究の目的.....	9
1.3.1. 大物体を伴う固気混相流.....	10
1.3.2. 液架橋粗視化モデル	10
1.3.3. 移動壁面を伴う楕円体粒子による固気混相流	10
1.4. 本論文の構成.....	10
2. 数値解析手法.....	11
2.1. 粉体球粒子に対する離散要素法.....	11
2.1.1. DEM の基礎方程式	11
2.1.2. 液架橋力	17
2.1.3. 液架橋力	17
2.1.4. DEM 粗視化モデル	33
2.2. 大物体モデル	37
2.3. 楕円体粒子モデル.....	38

2.3.1. 非球形粒子の表現.....	38
2.3.2. 楕円体の支配方程式.....	39
2.3.3. 接触判定アルゴリズム.....	39
2.3.4. ラグランジュの未定乗数法による最小化問題の解法.....	41
2.3.5. 粒子-流体間力.....	44
2.4. 気相.....	47
2.4.1. 支配方程式.....	47
2.4.2. 射影法による時間的離散化.....	48
2.4.3. 森-酒井の抗力陰解法.....	49
2.4.4. 変数係数付き圧力ポアソン方程式の解法.....	52
2.4.5. 移流項の離散化.....	58
2.4.6. 粘性項の離散化.....	60
2.5. 壁面モデル.....	61
2.5.1. 符号付き距離関数による固相壁面モデル.....	61
2.5.2. 埋め込み境界法による気相壁面モデル.....	63
2.6. 混合度の評価.....	69
3. 大物体を伴う固気混相流数値解析.....	71
4. DEM 粗視化モデルにおける液架橋力モデルの構築.....	72
5. 移動壁面を伴う楕円体粒子による固気混相流シミュレーション.....	73
6. 結言.....	74
6.1. 大物体を伴う固気混相流.....	74
6.2. 液架橋粗視化モデル.....	74
6.3. 移動壁面を伴う楕円体粒子による固気混相流.....	74
6.4. まとめおよび今後の展望.....	74
参考文献.....	76
謝辞.....	91

図目次

図 2 Voigt モデル.....	16
図 3 空隙率計算手法の例.....	17
図 4 微小面積にかかるラプラス圧.....	28
図 5 液架橋形状の模式図.....	29
図 6 Israelachvili による粒子-粒子間力の近似.....	29
図 7 Israelachvili による粒子-壁面間力の近似.....	30
図 8 トロイダル近似における液架橋形状の近似.....	30
図 9 トロイダル近似における液架橋体積の図示.....	31
図 10 トロイダル近似の反復計算概念図.....	32
図 11 DEM 粗視化モデルの概念図.....	36
図 13 非球形粒子の表現方法.....	39
図 14 楕円体粒子間接触力の計算方法.....	41
図 15 Potential 法の詳細な図示.....	41
図 16 直接計算法および局所体積平均法の概念図.....	48
図 17 通常の射影法および森-酒井の抗力陰解法のアルゴリズムの比較.....	52
図 18 マルチグリッド前処理付き共役勾配法のアルゴリズム.....	55
図 19 マルチグリッド法の概念図.....	56
図 20 V-サイクルおよび W サイクルの概念図.....	57
図 21 スタガード格子の概念図.....	59
図 22 SDF の勾配および値の補完計算例.....	67
図 24 境界適合格子、アダプティブメッシュ法、および直交格子法の概念図.....	68

1. 緒言

1.1. 研究の背景

1.1.1. 産業分野における粉体および固体-流体混相流の応用

粉体は砂や食品、化粧品などのように我々が身近に扱う製品の形であるだけでなく、あらゆる産業分野において使用されている物体でもある。粉体や、粉体と流体の混在した流れである固体-流体混相流は、化学工学や原子力工学など、様々な産業分野に応用されている。化学工学分野においては、産業プロセスの多くの部分において粉体を扱っており、粉体に対して混合、造粒、乾燥、充填、被膜などの操作を行うことで様々な特性を持つ製品が製造されている。原子力工学分野においても、被覆燃料物質の造粒や燃料ペレットの製造など、様々な工程において粉体に関する技術が応用されている。このように、粉体や固体-流体混相流を利用するプロセスは数え切れないほど存在し、それぞれのプロセスにおいてその最適化や効率化は非常に重要な課題となっている。プロセスの最適化や運用改善を行うためには内部で発生している現象を解明することが必要不可欠であり、これらの現象解明が学術界および産業界から強く望まれている。

このような粉体および固体-流体混相流を用いるシステムの多くはマルチスケール現象である。すなわち、産業用プロセスにおいて使用される粉体が含まれる流れにおいては、粉体の粒子形状や表面物性がシステム全体の挙動に大きな影響を与え、また全体の挙動の変化が個々の粒子の運動に影響を与えることで、マクロな挙動とミクロな挙動が互いに影響を及ぼし合う流れとなっている。このようなマルチスケール現象について、化学工学および原子力工学分野における例を述べる。化学工学分野においては、流動層がマルチスケール現象の典型的な体系である。流動層は粉体を充填した層に対して下部から流体を流入させる装置である。流動層では粉体が複雑に運動を行うため、粉体粒子と流体の接する面積が非常に大きくなり、固体と流体を反応させやすいという利点を持つ。したがって、流動層は粒子に液体を添加することで粒子を凝集させ、サイズの大きな粒子を製造する流動層型造粒機[1]や、粒子層に対して熱風を通過させることで液体成分を取り除く流動層型乾燥機[2-4]、粒

子に対して液体などを噴霧させ粒子表面をコーティングする流動層型被覆[5-7]装置などに利用されている。流動層においては流入させる流体の速度によって全体の挙動が固定層状態、流動化、スラッキング、輸送層などに変化することが知られており[8-10]、これらの流動化状態の変化を把握することが重要である。このような流動層では、個々の粒子形状によって流動層の流動化開始速度が変化すること[11,12]や、粒子の付着性によって流動層内に細かな流体の流路が生じるチャネリングなどの現象が生じること[13]が知られている。したがって、流動層は個々の粒子の状態が全体の挙動に影響を及ぼすマルチスケール現象を伴う流れである。原子力工学分野においては、燃料ペレットを製造する際に粒子をコーティングするプロセスが使用される。高温ガス炉においては、高温の炉内の環境に耐えることができるように二酸化ウランの粉末原料に対して低密度の熱分解炭素、高密度の熱分解炭素、および炭化ケイ素によって3重に被覆されたTRISO型被覆燃料(Tri-structural isotropic particle fuel)が使用される。TRISO型被覆燃料は数百 μm の燃料核に対し、高温の噴流層を利用して被覆が行い[14,15]、1mm程度の粒子となる。噴流層は粉体層に対して流動層よりも大きな速度で流体を通過させることで噴水状の粒子挙動を発生させる装置である。噴流層を用いた被覆プロセスでは、粒子を循環させながら噴霧器によって被覆を行う。粒子に対して均等な厚みの被覆を行うために粒子の滞留時間を均一にすることが重要である。そのため、噴流層による被覆プロセスにおいてはドラフトチューブによる安定化[16]などが評価されている。このような噴流層においては流動層と同様に、粒子のミクロな形状によって流動挙動が大きく変化することが知られている[17]。そのため、したがって、このようなTRISO型被覆燃料製造過程における被覆プロセスも個々の粒子状態が全体の挙動に影響を及ぼすマルチスケール現象である。

このように粉体や固体-流体混相流はマルチスケール現象である場合が多いが、これらの現象解明や装置の設計最適化のためには、古くから実験による検討がなされてきた。しかし、粉体を伴う流れにおいては、粉体層が不透明であるために層内部の状態を確認することが困難であり、内部状態を把握することが非常に困難であるという問題があった。これに対し、古くは最終状態でのサンプリングから混合状態などの情報を得る手法[18]や、準2次元体系

での実験などが用いられていたが、近年では MRI による可視化[19]、X 線による内部状態撮影[20]、静電容量トモグラフィー[21]、ポジトロン断層法[22,23]による 3 次元追跡など、様々な実験観察法が開発・応用されている。しかし、これらの実験観察は比較的小規模な体系に限られており、体系や材質に制限があった。また、原子力工学分野に使用される体系は高温・高放射線の過酷環境であるため、実験を行うことが困難である。これらのことから、粉体の挙動を詳細に追跡でき、粉体層内部の観察を行うことが容易である数値解析の応用が期待されている。

1.1.2. 粉体および固体-流体混相流に対する数値解析の応用

本項ではまず、粉体に対する数値解析手法について述べ、次に固体-流体混相流の数値解析手法について述べる。その後、固体-流体混相流におけるマルチスケールシミュレーションについて述べる。

(1) 粉体の数値解析手法

粉体の現象は流体とも固体とも異なる興味深い現象を示すため、その数値解析においても様々な手法が提案されている。粉体の数値解析手法には大きく分けて粉体を連続体とみなす手法と、離散体とみなす手法の 2 通りのアプローチがある。粉体は流動性が高いとき、連続体のような振る舞いをするのが知られている。粉体を連続体とみなす手法としては、Gidaspow[24]らの開発した連続体近似による 2 流体モデルがある。2 流体モデルは特に固体-流体連成問題において広く使用されてきた実績がある。2 流体モデルは粉体流れを連続体と近似して表現する手法であるため、粉体粒子数による計算コスト増加が無く、大規模な体系であっても容易に計算が可能であるという利点がある。近年では、2 流体モデルに対し Energy Minimization Multi-Scale (EMMS) [25,26]による抗力モデルを適用する手法も開発されている。しかし、2 流体モデルでは粉体流を流体に近似するために複雑な構成方程式を利用しなければならず、多くの経験式やフィッティングパラメータを利用しなければならなかった。また、個々の粒子挙動を追跡できないため、混合挙動などの解析が困難であ

るという問題もあった。これらのことから、2 流体モデルでは粉体混合や粉末充填、液滴の添加などの工業的に重要な体系の解析が困難であった。その他に、Moving Particle Semi-implicit 法[27] (以下 MPS 法と記す) や Smoothed Particle Hydrodynamics 法[28] (以下 SPH 法と示す) のような連続体の Lagrange 的手法を粉体に適用して解析する手法[29]も提案されている。しかし、これらの手法は粉体の連続体としての挙動に主眼をおいており、映像分野などでは使用されているものの、2 流体モデルと同様に工業的に重要な体系への応用が困難であった。これに対し、粉体を離散体として解析する手法としては、粒子間の接触力を考慮し、個々の粒子を追跡する離散体の Lagrange 的手法が広く用いられている。この手法では個々の粒子を追跡するため、粒子に働く流体からの相互作用力や電気力、液架橋力などのモデルを導入することが容易であり、応用性が高いという利点を持つ。剛体球モデル (Hard-sphere model) [30]では、粒子同士が衝突するときに剛体の 2 体衝突が生じているとし、速度が交換されるモデルである。このモデルの概念や実装は非常に容易であるが、多体衝突を考慮できないことや、粒子同士が接触停止する際に粒子間で無限回衝突が起こる弾性崩壊と呼ばれる現象が生じるため、粒子間接触が希薄な体系[31]や 2 粒子間衝突のみしか存在しない体系[32]でのみ適用が可能である。これに対し、粒子が接触している際に粒子の変形を有限要素法 (Finite Element Method, 以下 FEM と記す) で計算する Finite Discrete Element Method (以下 FDEM 法と記す) [33]がある。この手法では粒子間衝突の際の粒子の変形を正確に計算できるため、粒子の圧密などの接触挙動を正確に模擬できる。しかし、各粒子に対して FEM による計算を実施するため、計算コストが非常に高く、応用できる体系が小規模な体系に限られるという問題があった。これらの手法に対し、離散要素法 (Discrete Element Method, 以下 DEM と記す) [34]は粒子が接触した際に粒子間のオーバーラップを許容し、そのオーバーラップ量に応じた接触力を計算する手法である。一般的に DEM では粒子間のオーバーラップに対してバネを、粒子の速度に対してダンパーをそれぞれ設定する Voigt モデルを用いて計算を行う。これにより剛体球モデルでは不可能だった複数球が同時に接触するような状態を計算することができる。また、FDEM 法と異なり粒子の変形はオーバーラップによってバネ・ダンパーの計算に近似されているため、

計算負荷が非常に小さいという利点も持つ。これらの理由から、DEM は粉体の数値解析において広く用いられている。DEM による粉体の数値解析は、スクリーン搬送[35]、混合機[36–38]、混練機[39]、金型充填装置[40,41]など、多くの体系に応用されている。

DEM においては粒子間の接触力を計算する際に粒子のオーバーラップ量が重要となるため、弾性を模擬できるバネモデルを計算コストと現象の再現性の両面を鑑みて設定することが重要である。DEM における接触力計算としては線形バネモデル[34]や非線形バネモデル[42]があり、様々なモデル式が提案されている。これらのモデル化によって精度良く粒子間接触力を計算することが可能となっているが、計算コストの面から、特に固体-流体混相流の数値解析においては線形バネモデルが広く用いられている。粉体粒子に対してはヤング率などから実際の物理的なばね定数を求めることが可能だが、このようにして求めた物理的なばね定数を用いると時間刻みを非常に小さく設定しなければならず、計算コストが非常に大きくなるという問題があった。そこで、Soft spring model[43]が提案された。この手法では、実際の物理量から計算されたばね定数よりも小さなばね定数を用いて計算を行うことで、時間刻みの条件を緩和し、計算コストを削減することに成功した。

また、産業用プロセスでは数兆以上といった莫大な粒子数を扱う場合がある。これに対し、DEM では個々の粒子をモデル化するため、産業用プロセスのように大規模な体系では計算コストが莫大になり、実質的に計算を行うことが困難である場合がある。この問題に対し、スーパーコンピューターや GPU を用いた大規模計算の取り組みも行われている[44,45]が、現在に至っても粒子数は数十億粒子規模までに留まっており、実際の産業用装置において数値解析を行い、設計最適化などのために試行錯誤を行うことは現実的に不可能であった。この問題を解決するため、DEM 粗視化モデル[46]が開発された。このモデルでは粒子群を 1 つの代表粒子によって計算することで計算コストを劇的に削減することを可能にした。DEM 粗視化モデルでは、2 つの粗視化粒子が衝突した際に、その 2 粒子に含まれる実粒子がそれぞれ 2 体衝突を行うと仮定している。これにより実粒子および粗視化粒子においてエネルギーが一致するため、実粒子の挙動を正確に模擬することが可能となる。DEM 粗視化モデルの有効性はこれまで流動層[46,47]や金型充填装置[48]、産業用焼却炉[49]など様々

な装置で検証されている。

(2) 固体-流体混相流の数値解析手法

次に、固体-流体混相流の数値解析手法について述べる。産業用装置において用いられる粉体プロセスでは、気体や液体の影響を考慮しなければならない場合が非常に多い。例として、気流搬送装置[50–52]や流動層[46,53–55]、サイクロン[56,57]などでは流入する気体が粉体に直接影響を与える。また、金型充填などの一見粉体単相流として解析可能な体系であっても、粉体の粒子径などによっては実験の挙動を模擬するためには気体の影響を考慮しなければならないことが近年判明している[40]。したがって、固体-流体混相流の現象を理解することは産業応用を考える上で非常に重要である。DEMは粉体を扱う手法であるため、流体相を扱うためには流体の数値解析手法（Computational Fluid Dynamics,以下 CFD と記す）、および固体-流体間の相互作用力モデルが必要となる。粒子を十分に解像するほど細かい格子を用いて流体解析を行い、固体-流体間相互作用力を直接計算する DEM-DNS 法[58–60]がある。DEM-DNS 法では固体-流体間力を精緻に計算できるが、粒子に対して非常に小さい格子を用いなければならず、計算コストが非常に高いという欠点を持つ。近年では流動層のような比較的大規模な体系にも DEM-DNS 法の応用が研究されている[61,62]が、粒子数は数百程度にとどまっており、産業用装置への応用は未だ困難である。また、粒子法である MPS 法や SPH 法によって流体の解析を行い、固体粒子を DEM によって模擬する DEM-MPS 法[63–65]や DEM-SPH 法[66,67]も開発されている。粒子法による解析手法は精度の面で格子法に劣るとされていたが、近年では高精度スキームの開発が進み、精度の良い数値解析が可能になっている[68,69]。粒子法による数値解析は、主に自由液面の存在する体系に応用されている。これらの手法に対し、固相を DEM によって解析し、流体を局所体積平均[70]を適用した CFD によって解析する DEM-CFD 法[71]がある。この手法では、粉体粒子径よりも大きな流体格子を用いて流体の計算を行い、固体-流体間相互作用力を Ergun 式[72]などの半経験式によって計算する。DEM-CFD 法では粒子径よりも大きな流体格子を用いて計算を行うため、大規模化が容易である。これらの背景から、産業用装置に

おける固体-流体連成問題の数値解析としては、大規模な体系へ応用が可能である DEM-CFD 法が広く用いられている。DEM-CFD 法による数値解析は流動層[13]や噴流層[73]、気流搬送[74]、帯電した粒子の金型充填[75]、粒子間に磁力が生じる流れ[76]、粒子間に液架橋が生じる体系[73,77]など、様々な体系へ応用されている。近年、著者らは DEM-CFD 法において移動壁面や複雑形状壁面を容易に取り扱うことができる Advanced DEM-CFD 法を開発した[40]。この手法では、固相壁面を符号付距離関数[35] (Signed Distance Function, 以下 SDF と記す)、気相の壁面を埋込境界法[78] (Immersed Boundary Method, 以下 IBM と記す) によってモデル化する。Advanced DEM-CFD 法による数値解析は、金型充填[40,48]、パイプの挿入された流動層[47]など、様々な体系に応用されている。また、近年、著者らは DEM-CFD 法において、流体抗力に起因する計算の不安定性が存在し、産業用装置のように流体抗力が大きくなる体系では計算が不安定になり、計算を行うことができないという問題を指摘した[79]。また、この問題に対して計算の不安定性条件を初めて導出し、この不安定性条件を克服する半陰解法 (以下、森-酒井の抗力陰解法と記す) を開発することに成功した。著者らはこの手法を Advanced DEM-CFD 法に導入することにより、任意形状壁面を持つ体系を簡便かつ安定的に解くことができる数値解析手法、Flexible Eulerian-Lagrangian Method with an Implicit algorithm (以下 FELMI と記す) を開発した[79]。FELMI により、粉体流入現象[47]、産業用焼却炉[49]などのこれまで計算が困難であったような複雑かつ大規模な体系に対し数値解析を応用することが可能になった。

(3) 固体-流体混相流におけるマルチスケールシミュレーション

前項で述べたように固体-流体混相流は多くの場合マルチスケールの現象を伴う。しかし、産業用装置のように大規模な体系において、すべての粉体粒子の形状や表面物性を正確に模擬して数値解析を行うことは現実的に不可能である。そのため、数値解析においてマルチスケールシミュレーションを適用することが必要不可欠である。マルチスケールシミュレーションでは、マイクロなスケールの数値解析結果を用いてモデル化などを行い、その結果を利用してマクロな全体挙動を模擬する。またマクロなシミュレーションの結果得られた全

体挙動を境界条件としてマイクロなシミュレーションに導入することで、マイクロな領域での精緻な現象把握を行う。マルチスケールシミュレーションは材料開発などの分野において広く応用されているシミュレーション手法である。マルチスケールシミュレーションを固体-流体混相流に対して適用する際には、以下のような手法が考えられる。すなわち、まずマクロなシミュレーションとしては粒子形状を球に近似し、体系全体の挙動を模擬する。次に、マイクロなシミュレーションでは、マクロなシミュレーションの結果得られた全体挙動を境界条件として粒子の粒子形状等を精緻にモデリングして数値解析を行う。また、マイクロなシミュレーションにおいて得られた粒子形状の影響等をモデリングし、マクロなシミュレーションに対して応用することでより精度の高いマクロなシミュレーションを行う。更に、マクロなシミュレーションよりも更に大規模な体系での数値解析が必要な場合、粗視化モデルを利用することでより大規模な体系の数値解析を行うことが考えられる。このようなマルチスケールシミュレーションの応用が期待される産業用装置の例として、産業用廃棄物のための流動層型焼却炉を挙げる。産業用廃棄物用流動層焼却炉は、産業用廃棄物および廃液を安全に処理するために使用される大型焼却炉の一種である。流動層型焼却炉では、砂の中に廃棄物や廃液を埋め、砂を熱風で流動させながら蒸し焼きの状態で行う。流動層型の焼却炉は熱容量の大きな砂粒子を用いるために温度変化が緩やかで温度の管理が容易であるという点や、砂の流動によって物体が攪拌・破碎するために加熱効率が低いという点などの利点がある。焼却炉では処理効率のみならず、排出される灰微粒子や排出ガスが環境に与える影響も大きいことから、環境への排出抑制も非常に重要であり、焼却炉においては、灰粒子排出弁の有無[49]や、熱風の流速[80]、含有物質成分[81]、内部における物体の占める量[80,81]による評価などが行われている。このような産業用廃棄物用流動層焼却炉は十数 m の高さを持つ大規模な体系であり、マルチスケールシミュレーションの応用が期待されている。すなわち、マイクロな数値解析においては粒子の形状や表面物性を考慮した数値解析を行い、マクロなシミュレーションとしては粒子を球と近似し、粒子に対してサイズ差の大きな大物体が混在する流れの解析を行う。また、マクロなシミュレーションとしては更に廃液によって粒子が湿潤化することによる影響を考慮した数値解析を行うことで、これ

らの数値解析を組み合わせることにより産業用廃棄物用流動層焼却炉内部の挙動を模擬するということが考えられる。このようにマイクロ・マクロのシミュレーションを組み合わせ、解析を行うことで、産業用装置のように大規模な体系における固体-流体混相流においても精緻かつ効率的な数値解析が可能になると考えられる。固体-流体混相流におけるマルチスケールシミュレーションは研究が進められており、粒子-流体間に働く力をマイクロなスケールで精緻にモデリングし、これを用いてマクロな数値解析を行う手法[82]や、化学反応によって発生する熱の影響をマイクロな解析を用いてモデリングし、マクロな数値解析を行う手法[83]などが研究されている。しかし、このようなマルチスケールシミュレーションを更に発展させ、産業用プロセスの設計最適化や現象把握のために利用するためには、マクロ・マイクロのシミュレーションそれぞれに数値解析の応用が困難な問題が未だ多く残存していた。以下で、それぞれの課題について詳細に述べる。

1.2. 既存の問題および先行研究

1.2.1. 大物体を伴う固気混相流

(5年以内に刊行予定)

1.2.2. 大規模粉体システムに適用可能な液架橋モデル

(5年以内に刊行予定)

1.2.3. 移動壁面を伴う楕円体粒子による固気混相流

(5年以内に刊行予定)

1.3. 本研究の目的

上述した研究の背景より、固体-流体連成問題に対してマルチスケールシミュレーションを行う際には、大物体を伴う流れの解析、大規模湿潤粉体流れの解析、移動壁面や複雑壁面を伴う非球形粒子による固気混相流数値解析に未だ解決していない問題があり、応用が困

難であるという問題があった。そこで、本研究ではこれらの問題を解決し、固体-流体連成問題におけるマルチスケールシミュレーションのための数値解析手法を開発することを目的とする。以下でそれぞれの課題に対する研究目的を詳細に述べる。

1.3.1. 大物体を伴う固気混相流

(5年以内に刊行予定)

1.3.2. 液架橋粗視化モデル

(5年以内に刊行予定)

1.3.3. 移動壁面を伴う楕円体粒子による固気混相流

(5年以内に刊行予定)

1.4. 本論文の構成

本論文は6章で構成されている。1章は緒言であり、研究の背景、既存の課題および研究の目的について述べた。2章は数値解析手法であり、FELMIを始めとした本研究で使用・開発した数値解析手法について述べる。3章は大物体を伴う固体-流体混相流について数値解析を行い、流動層において粉体層内に混在する粒径差の大きな物体の運動挙動について解析を行3044、開発手法により任意形状大物体を伴う固体-流体混相流の数値解析が可能であることを示す。4章は湿潤粉体について回転円筒容器において実粒子および粗視化モデルにおける数値解析を行い、開発した手法によって大規模な湿潤粉体の挙動を模擬することができることを示す。5章は楕円体粒子を用いた数値解析を行い、固体単相流および固体-流体混相流において妥当性の確認およびこれまで計算が不可能であった移動する壁面を伴う非球形粒子による固気混相流が可能になることを示す。6章は結言であり、本研究の総括を行う。

2. 数値解析手法

本研究では、著者らの開発した数値解析手法 Flexible Eulerian-Lagrangian Method with an Implicit (FELMI) [79]を基本に数値解析を行う。FELMI は DEM-CFD 法に対し、壁面のモデル化に Advanced DEM-CFD 法[40]を適用し、更に流体抗力を陰的に解く手法を適用した手法である。DEM-CFD 法は固相を離散要素法 (Discrete Element Method, 以下 DEM と記す) [34]、気相を局所体積平均法[70]を用いた数値流体力学 (Computational Fluid Dynamics, 以下 CFD と記す) を用いて解析を行う Euler-Lagrange 法である。

2.1. 粉体球粒子に対する離散要素法

2.1.1. DEM の基礎方程式

DEM は個々の固体粒子の挙動をバネ、ダッシュポットおよびフリクションスライダーによって模擬し、粉体の挙動を解析する Lagrange 的手法である。DEM-CFD 法における固相の挙動を表す支配方程式は並進および回転運動に対するオイラーの運動方程式で、

$$m \frac{d\mathbf{v}}{dt} = \sum \mathbf{F}_c + \mathbf{F}_d - V_s \nabla p + m\mathbf{g} \quad (1)$$

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

のように与えられる。ここで、 m 、 t 、 \mathbf{v} 、 \mathbf{F}_c 、 \mathbf{F}_d 、 V_s 、 p 、 \mathbf{g} 、 I 、 $\boldsymbol{\omega}$ 、および \mathbf{T} は、それぞれ、固体粒子の質量、時刻、速度、接触力、流体から受ける抗力、粒子体積、圧力、重力加速度、慣性モーメント、角速度、およびトルクである。球粒子においては、慣性モーメントはスカラー値であり、以下のように計算される。

$$I = \frac{1}{10} m d^2 \quad (3)$$

ここで、 d は粒子の直径である。

(1) 接触力計算

接触力 \mathbf{F}_c は図 2 のようにバネ-ダッシュポット-スライダーによる Voigt モデルによってモデル化され、各粒子間の接触力を模擬する。接触力は接触方向に対して垂直および鉛直方向に分解し、

$$\mathbf{F}_c = \mathbf{F}_{c_n} + \mathbf{F}_{c_t} \quad (4)$$

のように与えられる。添え字の n および t は、それぞれ、接触方向に対して鉛直および水平方向の成分であることを示している。接触力の垂直方向成分は、

$$\mathbf{F}_{c_n} = -k\delta_n - \eta\mathbf{v}_{r_n} \quad (5)$$

のように計算される。ここで、 k 、 δ 、 η および \mathbf{v}_r は、それぞれ、ばね定数、粒子間のオーバーラップ、粘弾性係数、および粒子間の相対速度である。DEM において、ばね係数および粘弾性係数は Hertz の弾性理論[84]による非線形ばねを用いる場合と線形ばねを用いる場合があるが、本研究では線形ばねを使用した。したがって、ばね係数および粘弾性係数は定数である。粘弾性係数は反発係数 e と以下の関係を持つ。

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

粒子間のオーバーラップは粒子間距離と粒子直径から算出される。

$$\delta_n = \left(\frac{d_i + d_j}{2} - |\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i| \right) \mathbf{n} \quad (7)$$

ここで、 d 、 \mathbf{x} および \mathbf{n} は、それぞれ、粒子の直径、粒子の位置、および接触方向の単位ベクトルである。添え字の i および j は、それぞれ、接触力を計算している粒子、およびその粒子に接触している粒子であることを示している。接触方向の単位ベクトル \mathbf{n} は

$$\mathbf{n} = \frac{\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j}{|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j|} \quad (8)$$

のように求められる。また、相対速度の鉛直方向成分 \mathbf{v}_{r_n} は、

$$\mathbf{v}_{r_n} = (\mathbf{n} \cdot \mathbf{v}_r) \mathbf{n} \quad (9)$$

のように求められる。 \mathbf{v}_r は粒子間の相対速度で、

$$\mathbf{v}_r = (\mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j) + \mathbf{v}_{surf} \quad (10)$$

である。 \mathbf{v}_{surf} は粒子表面間の相対速度で、

$$\mathbf{v}_{surf} = (\mathbf{x}_c - \mathbf{x}_i) \times \boldsymbol{\omega}_i - (\mathbf{x}_c - \mathbf{x}_j) \times \boldsymbol{\omega}_j \quad (11)$$

$$\mathbf{x}_c = \frac{d_j \mathbf{x}_i + d_i \mathbf{x}_j}{d_i + d_j} \quad (12)$$

と計算される。法線方向の接触力 \mathbf{F}_{C_t} は、

$$\mathbf{F}_{C_t} = \begin{cases} -k\delta_t - \eta\mathbf{v}_{r_t} & (|\mathbf{F}_{C_t}| < \mu|\mathbf{F}_{C_n}|) \\ -\mu\mathbf{F}_{C_n} \frac{\mathbf{v}_{r_t}}{|\mathbf{v}_{r_t}|} & (|\mathbf{F}_{C_t}| \geq \mu|\mathbf{F}_{C_n}|) \end{cases} \quad (13)$$

のように求められる。ここで、 μ は摩擦係数である。本研究ではばね定数および粘弾性係数は鉛直方向と水平方向で同じ値を用いた。 δ_t および \mathbf{v}_{r_t} は、それぞれ、

$$\delta_t = \int_{t_0}^{t_1} \mathbf{v}_{r_t} dt \quad (14)$$

$$\mathbf{v}_{r_t} = \mathbf{v}_r - \mathbf{v}_n \quad (15)$$

のように求められる。ここで、 t_0 および t_1 は、それぞれ、衝突を始めた時刻および現在の時刻である。トルク \mathbf{T} は

$$\mathbf{T} = \frac{d}{2} (\mathbf{n} \times \mathbf{F}_{C_t}) \quad (16)$$

のように計算される。

(2) 流体抗力計算

流体抗力 \mathbf{F}_d は

$$\mathbf{F}_d = \frac{\beta V_S (\mathbf{u} - \mathbf{v})}{(1 - \varepsilon)} \quad (17)$$

のように表される。ここで、 β 、 ε および \mathbf{u} は、それぞれ、運動量交換係数、流体の空隙率、および流体の速度である。球粒子の場合、運動量交換係数 β は Ergun[72]と Wen-Yu[85]によるモデル化が一般的に広く用いられている。Ergun および Wen-Yu の式では、以下のよ

うに計算が行われる。

$$\beta = \begin{cases} 150 \frac{(1-\varepsilon)^2 \mu_f}{\varepsilon d^2} + \frac{1.75(1-\varepsilon)\rho}{2d} |\mathbf{u} - \mathbf{v}| (\varepsilon \leq 0.8) \\ \frac{3}{4} \frac{C_D (|\mathbf{u} - \mathbf{v}| \varepsilon (1-\varepsilon))}{2d} \varepsilon^{-2.65} (\varepsilon > 0.8) \end{cases} \quad (18)$$

$$C_D = \begin{cases} \frac{24(1 + 0.15Re^{0.687})}{Re} (Re \leq 1000) \\ 0.44 (Re > 1000) \end{cases} \quad (19)$$

$$Re = \frac{|\mathbf{u} - \mathbf{v}| \rho \varepsilon d}{2\mu_f} \quad (20)$$

ここで、 ρ および μ_f は、それぞれ、流体密度および粘性係数である。DEM-CFD法において流体抗力を計算する際には空隙率 ε の計算が必要である。空隙率 ε は流体格子体積 V_{cell} および粒子体積 V_p から、以下のように計算される。

$$\varepsilon = 1 - \frac{\sum V_p}{V_{cell}} \quad (21)$$

ただし、流体格子内に含まれる粒子は格子内に完全に内包されているとは限らないため、粒子と流体格子の共通部分の体積を求める必要がある。一般的に任意の粒子位置および格子位置に対して共通部分体積を解析的に求める手法[86]では非常に多くの場合分けが必要となり、計算コストが増大するため、近似的な手法が提案されている。図3に様々な空隙率計算手法を列挙する。DEM-CFD法において ε を計算する際には、解析的な手法の他に、粒子の中心位置を用いるPCM法[30]、粒子に外接する立方体の体積率によって計算するDPVM法[87]、カーネル関数を用いる手法、および粒子内に仮想的に配置された点を数えるSatellite法などが存在する。本研究では、計算コストが低く、かつ安定的に計算が可能なDPVM法を用いて数値解析を行った。すなわち、図3に示した赤い領域の球欠体積 V_{pi} は、

$$V_{pi} = \frac{\delta_x}{d_p} V_p \quad (22)$$

として計算される。3次元の場合も各軸における格子に内包されている部分の長さ $\delta_x, \delta_y, \delta_z$

を用いて

$$V_{pi} = \frac{\delta_x}{d_p} \frac{\delta_y}{d_p} \frac{\delta_y}{d_p} V_p \quad (23)$$

として計算できる。

(3) 時間的離散化

DEM は Lagrange 的手法であり、空間的な離散化は不要である。固相に働く力はすべて陽的に計算される。支配方程式の時間離散化された式は、

$$m \frac{\mathbf{v}^{n+1} - \mathbf{v}^n}{\Delta t} = \mathbf{F}_{total}^n = \sum \mathbf{F}_c^n + \mathbf{F}_d^n - V_s \nabla p^n + m \mathbf{g} \quad (24)$$

$$I \frac{\boldsymbol{\omega}^{n+1} - \boldsymbol{\omega}^n}{\Delta t} = \mathbf{T}_{total}^n = \sum \mathbf{T}^n \quad (25)$$

のようになる。ここで、添字 n および $n+1$ は、それぞれ、現在のタイムステップおよび次のタイムステップを示す。本研究では、粒子の位置および回転の時間発展にシンプレクティックオイラー法を用いる。シンプレクティックオイラー法はシンプレクティック性を持ち、エネルギーの保存性が高いという特徴を持つ。粒子の位置、速度および回転速度は以下のように更新される。

$$\mathbf{v}^{n+1} = \mathbf{v}^n + \frac{\mathbf{F}_{total}^n}{m} \Delta t \quad (26)$$

$$\mathbf{x}^{n+1} = \mathbf{x}^n + \mathbf{v}^{n+1} \Delta t \quad (27)$$

$$\boldsymbol{\omega}^{n+1} = \boldsymbol{\omega}^n + \frac{\mathbf{T}_{total}^n}{I} \Delta t \quad (28)$$

DEM の数値解析において、数値解析を安定的に行うためには粒子間接触力を十分に解像できる時間刻みを使用しなければならない。DEM における二粒子間衝突を考えると、粒子間衝突の周期は

$$T_{collision} = 2\pi \sqrt{\frac{m}{k}} \quad (29)$$

となる。従って、 $T_{collision}$ を十分に解像できる時間刻みが必要とされ、定数 Ω を用いて

$$\Delta t < \frac{2\pi}{\Omega} \sqrt{\frac{m}{k}} \quad (30)$$

という時間刻みの上限が一般的に使用される[71,88]。一般的に Ω の値としては5から20程度の値が使用されるが、本研究では $\Omega = 20$ とした。

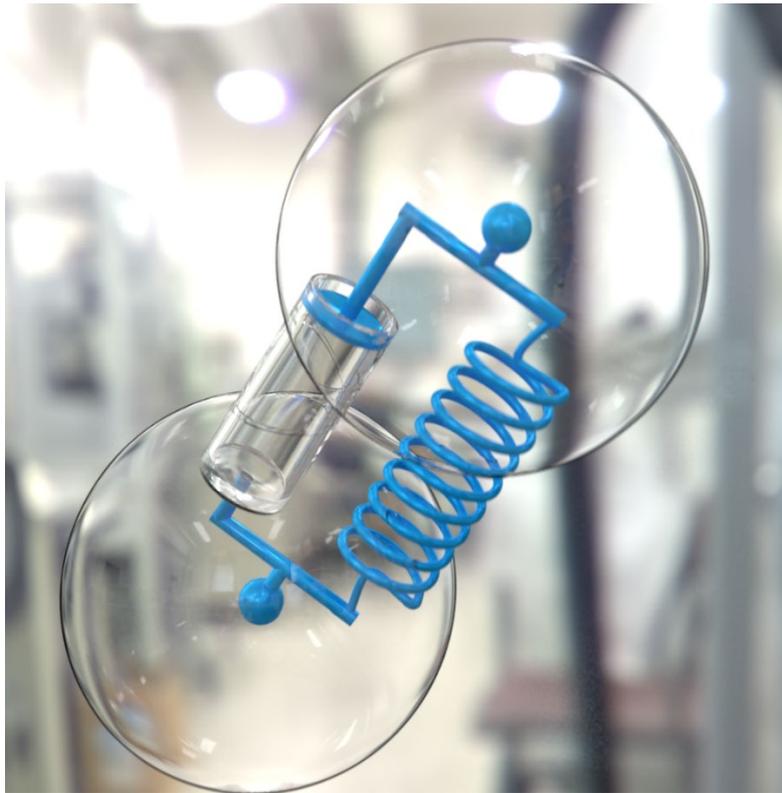


図 1 Voigt モデル

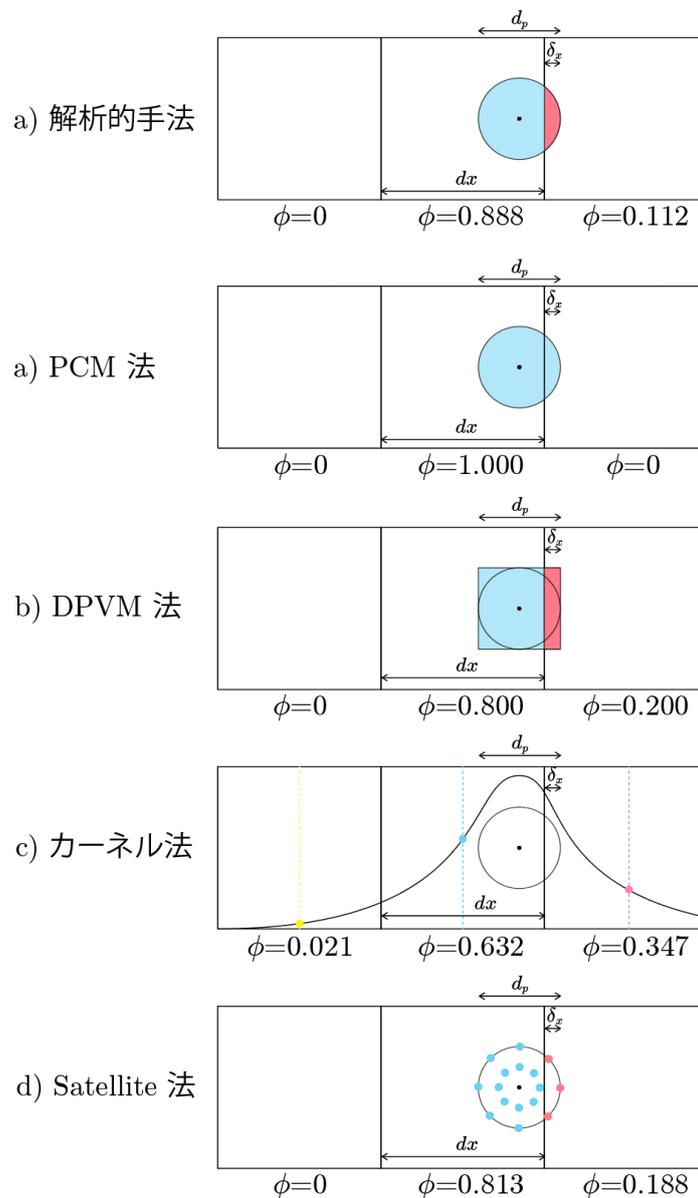


図 2 空隙率計算手法の例

2.1.2. 液架橋力

2.1.3. 液架橋力

DEM において液架橋の影響をモデル化する手法は多くの研究が行われている。液架橋力の算出方法には、直接計算法、形状最適化、トロイダル近似、回帰式によるモデル化がある。DEM-VOF-DNS 法[89]は直接計算法の一つで、粒子に働く表面張力やラプラス圧を直接計算することで液架橋力を計算する。しかし、このような直接計算法は粒子に対して非常に細

かい流体格子を用いて計算を行わなくてはならず、大規模化が困難である。そのため、液架橋の形状や液架橋力自体をモデル化することで近似的に計算する手法が広く用いられている。液架橋力 \mathbf{F}_{lb} は、粒子間距離方向にかかる毛管力 (capillary force) と、相対速度方向にかかる粘性力 (viscosity force) に分けられる。

$$\mathbf{F}_{lb} = \mathbf{F}_{cap} + \mathbf{F}_{vis} \quad (31)$$

粘性力 \mathbf{F}_{vis} は液体が水などの場合には全体の挙動に与える影響は非常に小さく、無視される場合が多い。本研究では粘性力 \mathbf{F}_{vis} は無視している。毛管力 \mathbf{F}_{cap} は粒子間に対して鉛直方向に働く力である。また、粒子間に液体が存在する際には、粒子の運動に対して液体が運動を妨げる力である潤滑力 (lubrication force) を発生させるが、既存研究において潤滑力を無視しても実現象をよく模擬できることが報告されている [90] ため、本研究においても潤滑力を無視している。液架橋のように界面が曲率を持っている場合、界面の内外でその曲率に応じた圧力差 (ラプラス圧) が生じる。以下でラプラス圧に対する方程式を導出する。まず、**図 3** のように主曲率半径が R_1, R_2 である微小な界面の運動を考える。はじめ $R_1\psi_1, R_2\psi_2$ によって張られる面が、それぞれ $(R_1 + dR)\psi_1, (R_2 + dR)\psi_2$ によって張られる面に拡大した場合、界面の表面積変化は

$$dA = (R_1 + dR)\psi_1(R_2 + dR)\psi_2 - R_1\psi_1R_2\psi_2 = (R_1 + R_2)\psi_1\psi_2dR \quad (32)$$

となる。表面張力は界面における自由エネルギーによって起きる力であり、界面の自由エネルギーは界面の面積に比例する。この比例定数を表面張力定数と呼び、 σ と表記する。すると、界面が拡大した際に与えられる表面自由エネルギー dW は

$$dW = \sigma dA = \sigma(R_1 + R_2)\psi_1\psi_2dR \quad (33)$$

となる。このエネルギーによって界面が dR 移動したことから

$$F = \frac{dW}{dR} = (R_1 + R_2)\psi_1\psi_2 \quad (34)$$

の力が生じたと考えられる。さて、界面には圧力差 Δp が存在するため、圧力による力

$R_1\psi_1R_2\psi_2\Delta p$ を受けている。今、液面が移動していないと考えた場合、外力（圧力）と内力（自由エネルギーによる仕事の微分）が釣り合っているため、

$$(R_1 + R_2)\psi_1\psi_2 = R_1\psi_1R_2\psi_2\Delta p \quad (35)$$

が成立する。よって、変形すると

$$\Delta p = \sigma \left(\frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} \right) \quad (36)$$

というラプラス圧に関する方程式（ヤング-ラプラス方程式）が得られる。

粒子間にはたらく液架橋は、架橋の形状によって各粒子間に 1 対の液架橋のみが存在する Pendular 形状、他粒子間に渡って液架橋が広がっている部分がある Funicular 形状、粒子間全体が液体に浸っている Capillary 形状に分類される。Lu ら[91]によれば、粒子体積に対する液量が 20%以下であれば Pendular 形状の液架橋のみが存在すると考えて良いということが示されている。本研究では 20%未満の液量のみを考えているため、Pendular 形状の液架橋についてのみ考える。Pendular 型の液架橋力は、ラプラス圧を用いて最も狭い首部分の半径 ρ によって以下のように表現される。

$$\mathbf{F}_{cap} = C\pi\mathbf{n} = (\pi\rho^2\Delta p + 2\pi\rho\sigma)\mathbf{n} \quad (37)$$

ここで、 \mathbf{n} は粒子に対して鉛直方向の法線ベクトルである。また、粒子の半径 R 、接触角 θ 、および図 4 に示す角度 α を用いて以下のように表現することもできる。

$$\mathbf{F}_{cap} = \pi \left(R^2 \sin^2 \alpha_1 \Delta p + 2R \sin \alpha_1 \sin(\alpha + \theta) \right) \mathbf{n} \quad (38)$$

ともできる。以下ではこれらの式を用いた液架橋力のモデル化手法について述べる。

(1) 形状最適化

液架橋の形状を求めるために、エネルギーの最小化問題として計算を行う手法がある[92]。

液架橋の持つエネルギーの総和は

$$W = S_{gs}\sigma_{gs} + S_{ls}\sigma_{ls} + S_{gl}\sigma_{gl} \quad (39)$$

となる。ここで添字の g 、 l 、 s はそれぞれ気相、液相、固相を示し、それぞれの相間での値を示す。 S は表面積、 σ は表面自由エネルギーである。ここで、粒子表面の面積は一定であるため、

$$S_{gs} + S_{ls} = C(\text{const.}) \quad (40)$$

であり、またヤングの式より

$$\sigma_{gs} = \sigma_{ls} + \sigma_{gl}\cos\theta \quad (41)$$

である。これらの式から表面自由エネルギーを1つにまとめられ、

$$W = \sigma_{gl}(S_{gl} - S_{sl}\cos\theta) + \text{const.} \quad (42)$$

となる。液架橋の形状はこのエネルギーを最小化するものと考えられるため、この最小化問題

$$\text{minimize} \left(\sigma_{gl}(S_{gl} - S_{sl}\cos\theta) \right) \quad (43)$$

を解くことで液架橋の形状を求める。制約条件はヤング-ラプラス方程式から求める際と同様で、液量および粒子との接触点での接触角である。この最小化問題を解いた後、最終的に液架橋力は粒子間距離が変化した際のこのエネルギーの変分

$$F_{cap} = \frac{dW}{dH} \quad (44)$$

として求められる。実際の数値解析では、液架橋界面上に点を配置し、その点群の位置を最小化問題で移動させながら最適化を行うことで計算が行われる。この手法は近似を行わず、直接液架橋形状を求めているため、精度が高く、多粒子間にまたがる液架橋形状（ファニキュラー・キャピラリー）などにも使用できるという利点があるが、粒子ごとに複数の点を用いて計算を行わなくてはならず、計算コストが非常に高いため、大規模化が困難であるという問題がある。

(2) 陽的な近似手法

近似的な計算として、いくつかの研究では液量などに制限を加えることで簡易的に液架橋力を計算できる手法を開発している。Israelachvili は液架橋に対して液量が非常に小さいこと、 ρ_{out} が ρ_{in} より非常に大きいこと、および接触角が小さいことを仮定し、以下のようなモデル式を提案した[93]。

1) 粒子-壁間

まず、粒子-壁面間について、 Δp は

$$\Delta p = \sigma \left(\frac{1}{\rho_{in}} - \frac{1}{\rho_{out}} \right) \simeq -\sigma \frac{1}{\rho_{out}} \quad (45)$$

とできる。また、液量が非常に小さい時、 ϕ も小さいので、

$$F_{cap} = \pi \left(R^2 \sin^2 \phi \Delta p + 2R \sin \phi \sin(\phi + \theta) \right) \simeq 2\pi R d \Delta p = -2\pi R d \frac{\sigma}{\rho_{out}} \quad (46)$$

となる。ここで、 θ, ϕ が小さいため表面張力による第二項を無視し、第一項に関しては図 6 上の粒子を円とみなした際の方べきの定理より

$$(R \sin \phi)(R \sin \phi) = d(2R - d) \simeq 2Rd \quad (47)$$

を用いた。また、縦方向の幾何学的関係から

$$H + d = \rho_{out} \cos(\phi + \theta) + \rho_{out} \cos(\theta) \simeq 2\rho_{out} \cos(\theta) \quad (48)$$

とできる。ここで、 θ, ϕ が小さいためにほぼ円形にフィッティングできることを使用した。

この式から求めた ρ_{out} を用いることで

$$F_{cap} = \frac{-4\pi R \sigma \cos \theta}{1 + \frac{H}{d}} \quad (49)$$

を得る。この式では d が未知数であるが、Israelachvili は近接している際に $H = 0$ として

$$F_{cap} = -4\pi R\sigma\cos\theta \quad (50)$$

を得ている。Rabinovich[94]らはこれに対し、 d を求める際、液架橋形状がほぼ円柱であると近似し、液量 V と d の関係を以下のように求めている。

$$V \simeq \pi(R\sin\phi)^2(d+H) - \frac{1}{3}\pi d^2(3R-d) \simeq 2\pi R d(d+H) - \pi d^2 R \quad (51)$$

ここで、固相で覆われている球冠部を除いており、 d^3 の項を無視している。これは d に関して2次方程式であり、解のうち正の値を取ると

$$d = -H + \sqrt{H^2 + \frac{V}{\pi R}} \quad (52)$$

となる。また、方ベキの定理による近似で用いた式より

$$(R\sin\phi)(R\sin\phi) \simeq R^2\phi^2 \simeq 2Rd \quad (53)$$

であるため、

$$\phi \simeq \sqrt{\frac{2d}{R}} \quad (54)$$

として ϕ を求めることもできる。Rabinovichら[94]は更にこの ϕ を用いて表面張力による項を無視せずに計算した、

$$F_{cap} = \frac{-4\pi R\sigma\cos\theta}{1 + \frac{H}{d}} + 2\sigma R\sin\phi\sin(\phi + \theta) \quad (55)$$

も提案している。

2) 粒子-粒子間

粒子間においても粒子-壁面間とほとんど同様に考えることができ、 7 上の幾何学的な情報から

$$H + 2d = 2\rho_{out}\cos(\phi + \theta) \simeq 2\rho_{out}\cos\theta \quad (56)$$

となるため、

$$F_{cap} = \frac{-4\pi R\sigma\cos\theta}{1 + \frac{H}{2d}} \quad (57)$$

が得られる。また d についても

$$V \simeq \pi(R\sin\phi)^2(2d + H) - 2\frac{1}{3}\pi d^2(3R - d) \simeq 2\pi R d(2d + H) - 2\pi d^2 R \quad (58)$$

となるため、

$$d = \frac{-H + \sqrt{H^2 + \frac{2V}{\pi R}}}{2} \quad (59)$$

が得られる。表面張力の項を考慮する際も同様で、

$$F_{cap} = \frac{-4\pi R\sigma\cos\theta}{1 + \frac{H}{2d}} + 2\sigma R\sin\phi\sin(\phi + \theta) \quad (60)$$

となる。これらの計算手法は、どれも陽的に計算が可能な手法であるが、液量が非常に小さいなどの仮定を行っているため、液量や接触角が大きい場合に精度が非常に悪くなってしまふという問題が報告されている[95]。

(3) トロイダル近似

上述したように、形状最適化では計算コストが非常に高く、また陽的な近似手法では液量が大きい場合に精度が非常に悪くなることが知られているため、より精度良くかつ効率的に解析を行うことができるモデル化手法が研究されている。その中で広く用いられる手法としてトロイダル近似を用いる手法がある。トロイダル近似では液架橋力の形状を円形にフィッティングすることによって計算を行う (図 8)。ここでは粒子が異なる接触角・粒子径を持つ場合にも適用できる、Sun らの手法[95]について述べる。トロイダル近似では、液架橋の最も深い部分の主曲率 ρ_{in} および ρ_{out} を用いて、式 (37)において圧力をラプラス方程式から $\Delta p = \sigma\left(\frac{1}{\rho_{out}} - \frac{1}{\rho_{in}}\right)$ とすると、

$$\mathbf{F}_{cap} = \pi\sigma\rho_{in}\left(1 + \frac{\rho_{in}}{\rho_{out}}\right)\mathbf{n} \quad (61)$$

を得る。この液架橋力を計算するために、以下では体積 V 、半径 R_1, R_2 、接触角 θ_1, θ_2 、粒子

間距離 H から ρ_{in}, ρ_{out} を計算する。

1) 幾何学的条件

まず、 ρ_{in}, ρ_{out} の関係を考える。縦方向の情報から、

$$\rho_{in} + \rho_{out} = R_1 \sin(\alpha_1) + \rho_{out} \sin(\alpha_1 + \theta_1) \quad (62)$$

より、

$$\rho_{in} = R_1 \sin(\alpha_1) - \rho_{out}(1 - \sin(\alpha_1 + \theta_1)) \quad (63)$$

である。同様に

$$\rho_{in} = R_2 \sin(\alpha_2) - \rho_{out}(1 - \sin(\alpha_2 + \theta_2)) \quad (64)$$

が成立する。以上の2式の両辺を引いて、

$$\begin{aligned} R_1 \sin(\alpha_1) - \rho_{out}(1 - \sin(\alpha_1 + \theta_1)) &= R_2 \sin(\alpha_2) - \rho_{out}(1 - \sin(\alpha_2 + \theta_2)) \\ \rho_{out} &= -\frac{R_1 \sin(\alpha_1) - R_2 \sin(\alpha_2)}{\sin(\alpha_1 + \theta_1) - \sin(\alpha_2 + \theta_2)} \end{aligned} \quad (65)$$

が得られる。また、横方向の情報から、

$$H + (R_1 - R_1 \cos(\alpha_1)) + (R_2 - R_2 \cos(\alpha_2)) = \rho_{out} \cos(\alpha_1 + \theta_1) + \rho_{out} \cos(\alpha_2 + \theta_2) \quad (66)$$

を变形し、

$$\rho_{out} = \frac{H + (R_1 - R_1 \cos(\alpha_1)) + (R_2 - R_2 \cos(\alpha_2))}{\cos(\alpha_1 + \theta_1) + \cos(\alpha_2 + \theta_2)} \quad (67)$$

を得る。これらの式から、

$$-\frac{R_1 \sin(\alpha_1) - R_2 \sin(\alpha_2)}{\sin(\alpha_1 + \theta_1) - \sin(\alpha_2 + \theta_2)} = \frac{H + (R_1 - R_1 \cos(\alpha_1)) + (R_2 - R_2 \cos(\alpha_2))}{\cos(\alpha_1 + \theta_1) + \cos(\alpha_2 + \theta_2)} \quad (68)$$

が得られる。この式内の未知数は α_1 と α_2 のみである。この式の両辺の分母に和積の公式を用

い、

$$-\frac{R_1 \sin(\alpha_1) - R_2 \sin(\alpha_2)}{\sin\left(\frac{\alpha_1 + \theta_1 - \alpha_2 - \theta_2}{2}\right)} = \frac{H + (R_1 - R_1 \cos(\alpha_1)) + (R_2 - R_2 \cos(\alpha_2))}{\cos\left(\frac{\alpha_1 + \theta_1 - \alpha_2 - \theta_2}{2}\right)} \quad (69)$$

とし、これを変形して

$$-\frac{R_1 \sin(\alpha_1) - R_2 \sin(\alpha_2)}{H + (R_1 - R_1 \cos(\alpha_1)) + (R_2 - R_2 \cos(\alpha_2))} = \tan\left(\frac{\alpha_1 + \theta_1 - \alpha_2 - \theta_2}{2}\right) \quad (70)$$

を得る。右辺は加法定理によって $\tan\left(\frac{\alpha_1}{2}\right), \tan\left(\frac{\alpha_2}{2}\right), \tan\left(\frac{\theta_1 - \theta_2}{2}\right)$ に分解でき、左辺も $\sin(\alpha_1) =$

$\frac{2 \tan\left(\frac{\alpha_1}{2}\right)}{1 + \tan^2\left(\frac{\alpha_1}{2}\right)}, 1 - \cos(\alpha_1) = \frac{2 \tan^2\left(\frac{\alpha_1}{2}\right)}{1 + \tan^2\left(\frac{\alpha_1}{2}\right)}$ のように $\tan\left(\frac{\alpha_1}{2}\right), \tan\left(\frac{\alpha_2}{2}\right)$ で表せる。よって、

$$\tan\left(\frac{\alpha_1}{2}\right) = A \quad (71)$$

$$\tan\left(\frac{\alpha_2}{2}\right) = B \quad (72)$$

$$\tan\left(\frac{\theta_1 - \theta_2}{2}\right) = C \quad (73)$$

とすれば、

$$-\frac{R_1 \frac{2A}{1+A^2} - R_2 \frac{2B}{1+B^2}}{H + R_1 \frac{2A^2}{1+A^2} + R_2 \frac{2B^2}{1+B^2}} = \frac{\frac{A-B}{1+AB} + C}{1 - \frac{A-B}{1+AB} C} \quad (74)$$

となり、Bについて解くと

$$B = \tan\left(\frac{\alpha_2}{2}\right) = \frac{R_1 A + \frac{AH}{2} + \frac{CH}{2}}{R_2 + \frac{H}{2} - AC \left(R_1 + R_2 + \frac{H}{2}\right)} \quad (75)$$

を得られる。この式(75)を用いて α_1 から α_2 を決定できる。

2) 液量保存

次に、液量保存について考えるため、液量 V を幾何学的に求める。まず、**図 9**の水色の部分を回転した体積を求める。液架橋の中心を $x = 0$ として考えると、この部分の体積は

$$V_b = \pi \int_0^{\cos(\alpha_2 + \theta_2)} (\rho_{in} + \rho_{out}(1 - \cos(\psi)))^2 dx \quad (76)$$

$$x = \rho_{out} \cos(\psi) \quad (77)$$

となる。 $dx = \rho_{out} \cos(\psi) d\psi$ より、

$$\begin{aligned} V_b &= \pi \int_0^{\frac{\pi}{2} - (\alpha_2 + \theta_2)} (\rho_{in} + \rho_{out} (1 - \cos(\psi)))^2 \rho_{out} \cos(\psi) d\psi \\ &= \pi \rho_{out}^2 (\rho_{in} + \rho_{out})^2 [\sin(\theta)]_0^{\frac{\pi}{2} - (\alpha_2 + \theta_2)} \\ &\quad + \pi \rho_{out}^2 (\rho_{in} + \rho_{out}) \left[\theta + \frac{1}{2} \sin(\theta) \cos(\theta) \right]_0^{\frac{\pi}{2} - (\alpha_2 + \theta_2)} \\ &\quad + \rho_{out}^3 \left[\sin(\theta) - \frac{1}{3} \sin^3(\theta) \right]_0^{\frac{\pi}{2} - (\alpha_2 + \theta_2)} \\ &= \pi \rho_{out}^2 (\rho_{in} + \rho_{out})^2 \cos(\alpha_2 + \theta_2) - \pi \rho_{out}^2 (\rho_{in} + \rho_{out}) (\pi/2 - (\alpha_2 + \theta_2)) \\ &\quad + \frac{1}{2} \sin(\alpha_2 + \theta_2) \cos(\alpha_2 + \theta_2) + \rho_{out}^3 \cos(\alpha_2 + \theta_2) - \frac{1}{3} \cos^3(\alpha_2 + \theta_2) \end{aligned} \quad (78)$$

である。この体積は球内部分(斜線部分)も含まれているため、これを除く。含まれてしまっている球冠部分は球冠部の体積公式より

$$V_2 = \frac{\pi}{3} R_2^3 (2 + \cos(\alpha_2)) (1 - \cos(\alpha_2))^2 \quad (79)$$

である。よって右側の体積は $V_b - V_2$ である。同様に左側も

$$\begin{aligned} V_a &= \pi \rho_{out}^2 (\rho_{in} + \rho_{out})^2 \cos(\alpha_1 + \theta_1) - \pi \rho_{out}^2 (\rho_{in} + \rho_{out}) (\pi/2 - (\alpha_1 + \theta_1)) \\ &\quad + \frac{1}{2} \sin(\alpha_1 + \theta_1) \cos(\alpha_1 + \theta_1) + \rho_{out}^3 \cos(\alpha_1 + \theta_1) - \frac{1}{3} \cos^3(\alpha_1 + \theta_1) \end{aligned} \quad (80)$$

$$V_1 = \frac{\pi}{3} R_1^3 (2 + \cos(\alpha_1)) (1 - \cos(\alpha_1))^2 \quad (81)$$

となるので、液滴の合計体積は

$$V = V_a - V_1 + V_b - V_2 \quad (82)$$

となる。この式は $\rho_{in}, \rho_{out}, \alpha_1, \alpha_2$ が未知数であるが、式(63)および式(67)によって未知数を α_1, α_2 のみにできる。従って、式(82)を式(75)と連立して解くことにより α_1, α_2 を求め、これらによって ρ_{in}, ρ_{out} を求めることで、最終的に式(61)から \mathbf{F}_{cap} を求めることができる。反復計算は割線法によって行われる。図 10 に詳細なアルゴリズムを示す。このトロイダル近似による計算手法は幅広い液量や接触角に対して精度の良い近似結果を示すことが知られている[95]。本研究ではこの Sun らのトロイダル近似モデルを用いて数値解析を行った。

(4) 経験的な方法

実験結果や解析的な解からの回帰分析によって経験的に値を求めるアプローチも研究されている。Mikami らは破断距離と液架橋力の関係から回帰分析を行い、以下のような経験式を導出している [96]。

$$\mathbf{F}_{cap} = \pi R \sigma \left(\exp \left(A \frac{H}{R} + B \right) + C \right) \mathbf{n} \quad (83)$$

ここで、各パラメーター A, B, C はそれぞれ粒子-粒子間と粒子-壁面間で異なる値を用い、

$$A = \begin{cases} -1.1 \left(\frac{V}{R^3} \right)^{-0.53} & \text{particle - particle} \\ -1.9 \left(\frac{V}{R^3} \right)^{-0.51} & \text{particle - wall} \end{cases} \quad (84)$$

$$B = \begin{cases} \left(-0.34 \ln \left(\frac{V}{R^3} \right) - 0.96 \right) \theta^2 - 0.019 \ln \left(\frac{V}{R^3} \right) + 0.48 & \text{particle - particle} \\ \left(-0.016 \ln \left(\frac{V}{R^3} \right) - 0.76 \right) \theta^2 - 0.12 \ln \left(\frac{V}{R^3} \right) + 1.2 & \text{particle - wall} \end{cases} \quad (85)$$

$$C = \begin{cases} 0.0042 \ln \left(\frac{V}{R^3} \right) + 0.078 & \text{particle - particle} \\ 0.0013 \ln \left(\frac{V}{R^3} \right) + 0.18 & \text{particle - wall} \end{cases} \quad (86)$$

である。

(5) 破断距離

液架橋力は全ての粒子対に働くわけではなく、ある程度以上の距離では液架橋が破断し、力が働かなくなる。この破断距離についても液架橋形状と同様に直接求めることは非常に困難であるため、様々な近似的な手法が提案されている。Lian らは液架橋力の安定性を解析的に考察した結果から、破断距離に対して以下のような近似式を提案している [97]。

$$h_{rup} = \left(1.0 + \frac{1}{2} \theta \right) V^{\frac{1}{3}} \quad (87)$$

この式は広く用いられている式であるが、流体の粘性が無視できない場合には近似精度が良くないという欠点が Pitois らによって指摘されている [98]。彼らは同じ論文内で Lian らの式を修正した

$$h_{rup} = \left(1.0 + \frac{1}{2}\theta\right) \left(1 + Ca^{\frac{1}{2}}\right) V^{\frac{1}{3}} \quad (88)$$

という式を提案している。ここで Ca はキャピラリ数で、粘性力と表面張力の比である。

$$Ca = \frac{\mu|\mathbf{v}_r|}{\sigma} \quad (89)$$

また、Mikami は毛管力の計算と同様に回帰分析から、以下のような破断距離の式を提案している [96]。

$$h_{rup} = \begin{cases} (0.62\theta + 0.99)(V)^{0.34} & \text{particle - particle} \\ (0.22\theta + 0.95)(V)^{0.32} & \text{particle - wall} \end{cases} \quad (90)$$

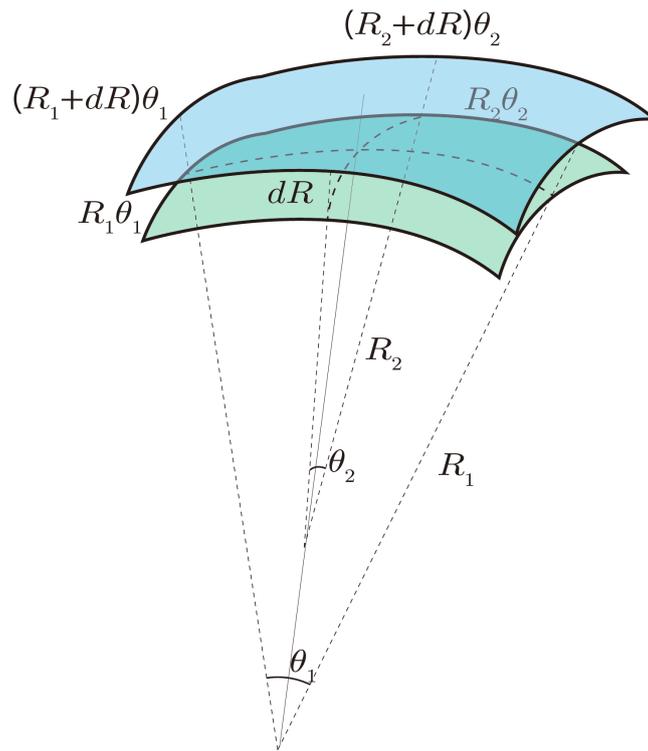


図 3 微小面積にかかるラプラス圧

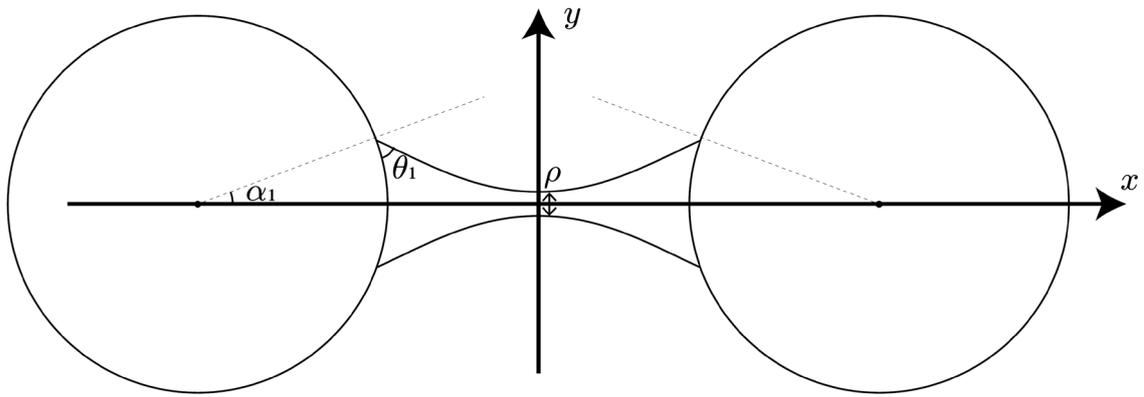


図 4 液架橋形状の模式図

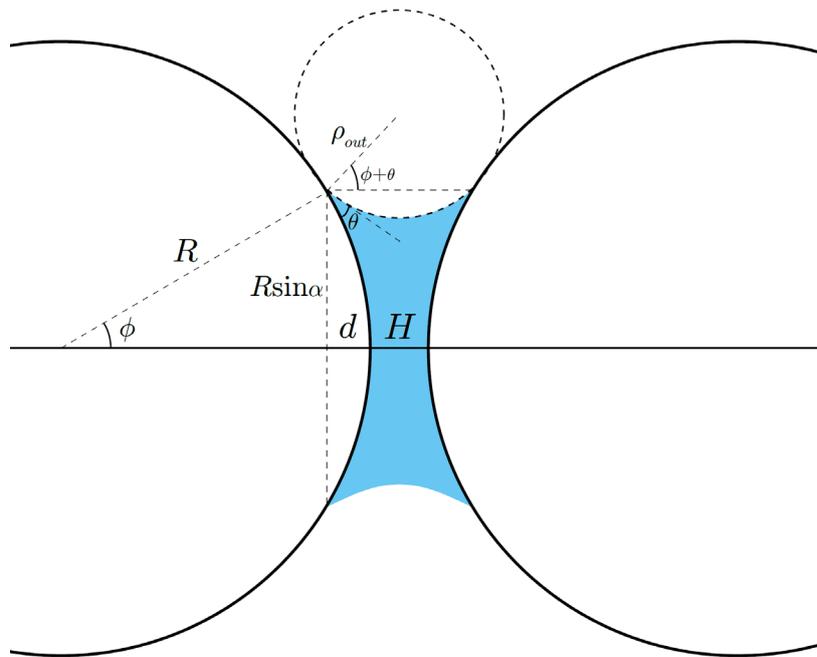


図 5 Israelachvili による粒子-粒子間力の近似

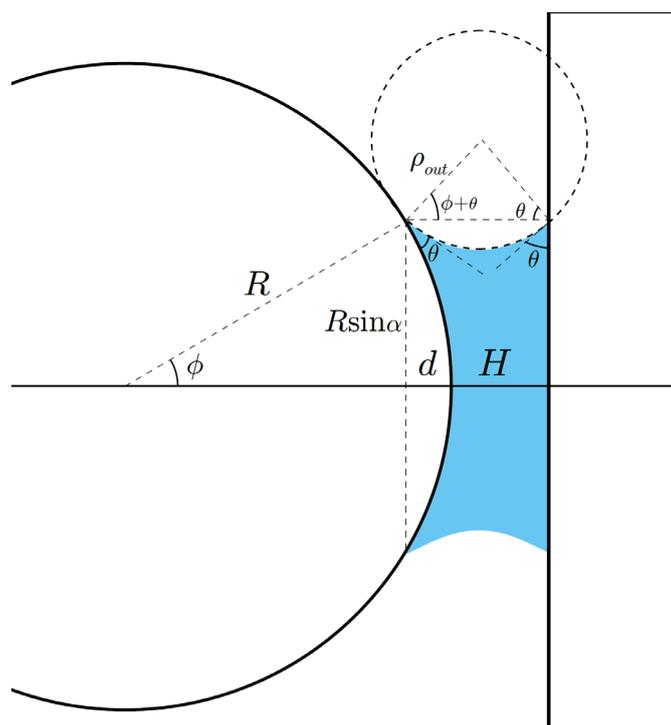


図 6 Israelachvili による粒子-壁面間力の近似

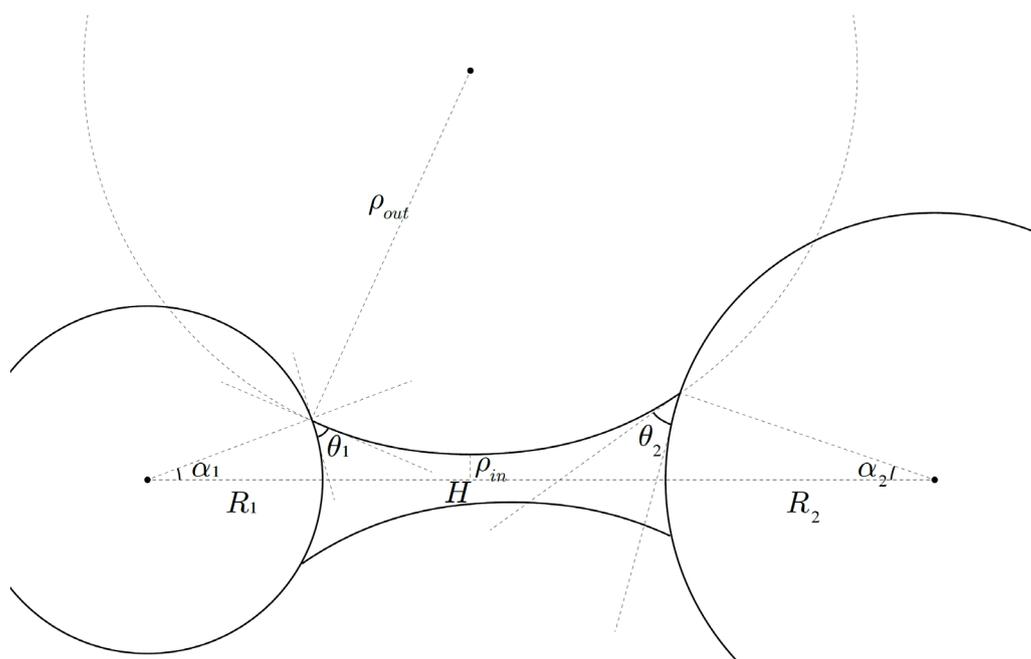


図 7 トロイダル近似における液架橋形状の近似

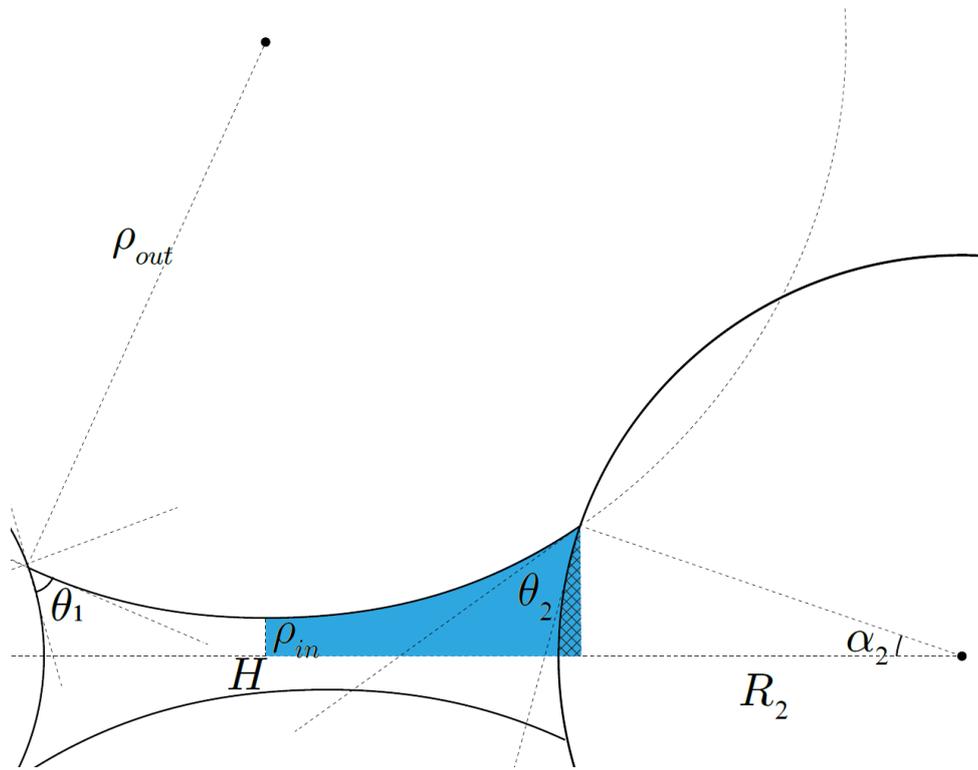


図 8 トロイダル近似における液架橋体積の図示

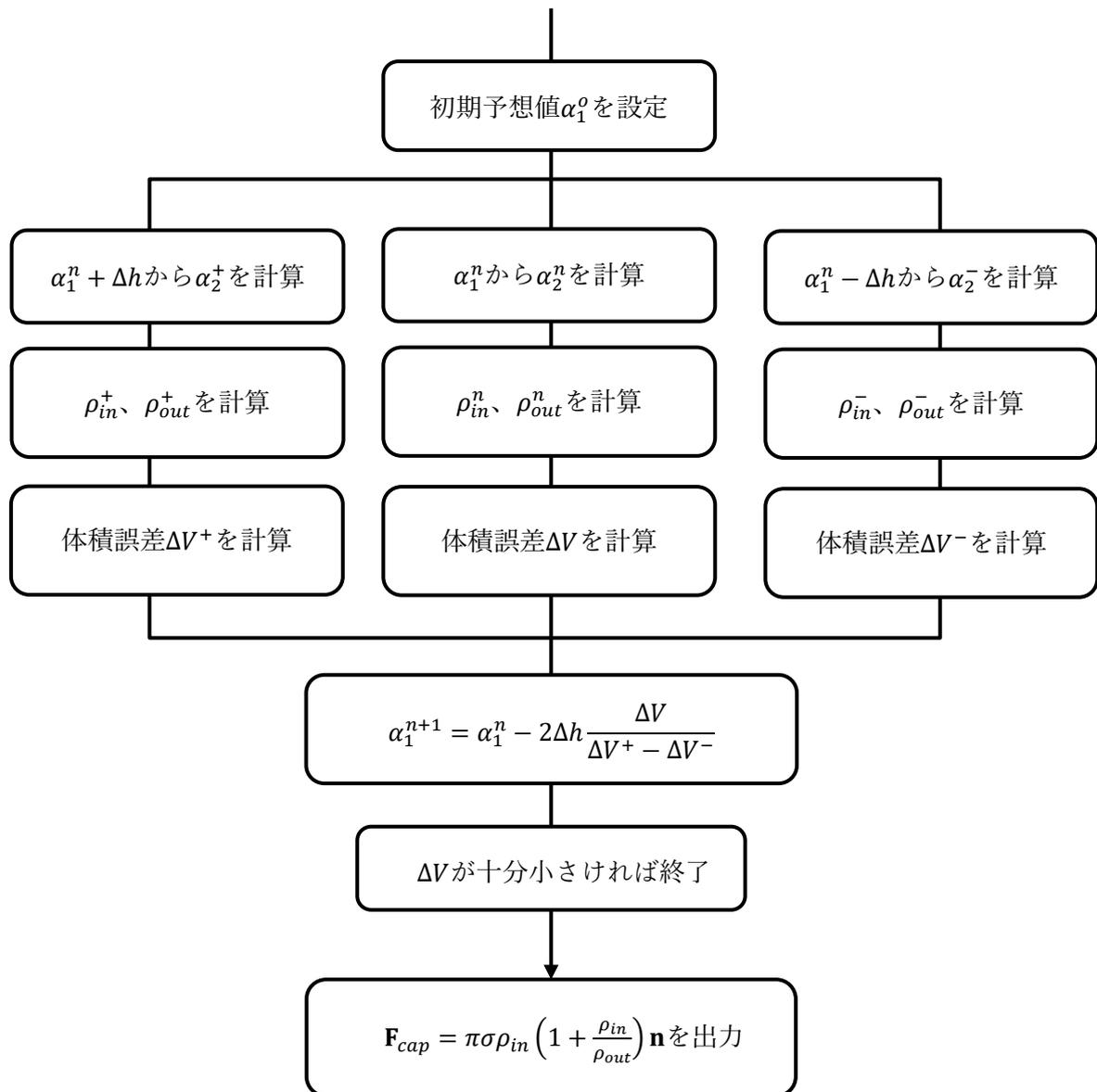


図 9 トロイダル近似の反復計算概念図

2.1.4. DEM 粗視化モデル

DEM による数値解析は様々な分野で非常に有効な方法であることが示されているが、DEM を大規模な体系に適用することを考えた場合、計算コストの問題が生じ、計算が困難であるという問題があった。これは DEM においては粒子数が増大するに従って接触力の計算回数が増大するためである。実際の産業用固気混相流等で使用される粒子数が数十億から数兆を超えるようなスケールであるのに対し、DEM において 1 つの PC で扱うことができる粒子数は数百万粒子程度である。従って元々の DEM を用いたモデリングによって産業用装置の数値解析を行うことは非常に困難であった。計算粒子数に関する問題を解決する有効な手法としてスケーリング則モデルによって実際より大きな粒子を用いて計算粒子数を削減する手法が提案されている。スケーリング則モデルによる計算粒子削減手法には固相・気相のパラメーターを変化させて計算するパラメータースケーリングモデル[99]や実粒子群を 1 つの計算粒子によって代表して計算する代表粒子モデル[51]などが存在する。本研究では代表粒子モデルの 1 つである DEM 粗視化モデル[51]を使用した。DEM 粗視化モデルは実粒子と粗視化粒子のエネルギーの一致性を考慮することによって、他のモデルより多くの粒子を削減しても精度よく解析できるという利点を持つ。DEM 粗視化モデルでは、粗視化粒子同士が衝突した際に内部に含まれるすべての粒子が 2 対衝突を行うと仮定している手法であるため、内部に含まれる粒子による剛体回転等を考慮しない手法である。DEM 粗視化モデルの有効性および妥当性は流動層[46]、気流搬送[51]、噴流層[88]などによって確認されている。DEM-CFD 法における DEM 粗視化モデルの支配方程式は通常の DEM と同様に、

$$m_{CGM} \frac{d\mathbf{v}_{CGM}}{dt} = \sum \mathbf{F}_{c_{CGM}} + \mathbf{F}_{d_{CGM}} - V_{s_{CGM}} \nabla p + m_{CGM} \mathbf{g} \quad (91)$$

$$I_{CGM} \frac{d\boldsymbol{\omega}_{CGM}}{dt} = \sum \mathbf{T}_{CGM} \quad (92)$$

のように表される。添字の CGM は粗視化粒子を示している。粗視化粒子の実粒子に対する倍率は粗視化率 l と呼ばれる値によって表される。従って、粗視化粒子と実粒子の大きさは

以下のような関係を持つ。

$$d_{CGM} = l d_o \quad (93)$$

添字の O は実粒子を示している。よって図 11 に示されるように、粗視化粒子は実粒子 l^3 個を代表した粒子となる。従って、運動方程式の左辺係数である粗視化粒子の質量および慣性モーメントは以下のように求められる。

$$m_{CGM} = l^3 m_o, I_{CGM} = l^5 I_o \quad (94)$$

各項の計算モデルについて、以下で述べる。

(1) 接触力項

DEM 粗視化モデルでは粒子間衝突の際には各粗視化粒子が代表している粒子が 2 対衝突を行うことを仮定する。よって接触力は以下の関係を持つ。

$$\mathbf{F}_{CGM} = \mathbf{F}_{CGMn} + \mathbf{F}_{CGMt} = l^3 \bar{\mathbf{F}}_{Co} = l^3 \bar{\mathbf{F}}_{Co_n} + l^3 \bar{\mathbf{F}}_{Co_t} \quad (95)$$

したがって、鉛直及び水平方向の接触力は以下のように書き下される。

$$\mathbf{F}_{CGMn} = l^3 \bar{\mathbf{F}}_{Co_n} = l^3 \left(-k_o \bar{\delta}_{o_n} - \eta_o \bar{\mathbf{v}}_{o_{r_n}} \right) \quad (96)$$

$$\mathbf{F}_{CGMt} = l^3 \bar{\mathbf{F}}_{Co_t} = \begin{cases} l^3 \left(-k_o \bar{\delta}_{o_t} - \eta_o \bar{\mathbf{v}}_{o_{r_t}} \right) & (|\bar{\mathbf{F}}_{Co_t}| < \mu |\bar{\mathbf{F}}_{Co_n}|) \\ -\mu_o l^3 \bar{\mathbf{F}}_{Co_n} \frac{\bar{\mathbf{v}}_{o_{r_t}}}{|\bar{\mathbf{v}}_{o_{r_t}}|} & (|\bar{\mathbf{F}}_{Co_t}| \geq \mu |\bar{\mathbf{F}}_{Co_n}|) \end{cases} \quad (97)$$

ここで、実粒子の速度およびオーバーラップの平均値 $\bar{\delta}_{o_n}, \bar{\mathbf{v}}_{o_{r_n}}, \bar{\delta}_{o_t}, \bar{\mathbf{v}}_{o_{r_t}}$ は未知の変数であるが、DEM 粗視化モデルにおいては粗視化粒子の値が実粒子の平均値を表すと考える。すなわち

$$\bar{\delta}_{o_n} = \delta_{CGMn}, \bar{\mathbf{v}}_{o_{r_n}} = \mathbf{v}_{CGMr_n}, \bar{\delta}_{o_t} = \delta_{CGMt}, \bar{\mathbf{v}}_{o_{r_t}} = \mathbf{v}_{CGMr_t} \quad (98)$$

と仮定する。従って、上述の 2 式(96)および(97)は、

$$\mathbf{F}_{CGMn} = l^3 \left(-k_o \delta_{CGMn} - \eta_o \mathbf{v}_{CGMr_n} \right) \quad (99)$$

$$\mathbf{F}_{CGM_t} = \begin{cases} l^3 \left(-k_0 \boldsymbol{\delta}_{CGM_t} - \eta_0 \mathbf{v}_{CGM_{r_t}} \right) & (|\mathbf{F}_{CGM_t}| < \mu |\mathbf{F}_{CGM_n}|) \\ -\mu_0 \mathbf{F}_{CGM_n} \frac{\bar{\mathbf{v}}_{r_{CGM_t}}}{|\bar{\mathbf{v}}_{r_{CGM_t}}|} & (|\mathbf{F}_{CGM_t}| \geq \mu |\mathbf{F}_{CGM_n}|) \end{cases} \quad (100)$$

となる。従って粗視化モデルの接触力の計算は実粒子での計算に対して、ばね定数、粘弾性係数、および摩擦係数を以下のように変更して計算したものと等しい。

$$k_{CGM} = l^3 k_0, \eta_{CGM} = l^3 \eta_0, \mu_{CGM} = \mu_0 \quad (101)$$

(2) 流体抗力項

流体抗力は粗視化粒子が代表しているすべての実粒子に同じ力が働くと考えられるので、

$$\mathbf{F}_{d_{CGM}} = l^3 \bar{\mathbf{F}}_{d_o} = l^3 \frac{\bar{\beta}_0 V_{S_o} (\mathbf{u} - \bar{\mathbf{v}}_o)}{(1 - \varepsilon)} = l^3 \frac{\bar{\beta}_0 V_{S_o} (\mathbf{u} - \mathbf{v}_{CGM})}{(1 - \varepsilon)} \quad (102)$$

のように計算される。 $\bar{\beta}_0$ は粒子径に対して非線形的に依存しているため、単純なスケールリングではなく実粒子径を用いて計算を行う必要がある。すなわち、

$$\bar{\beta}_0 = \begin{cases} 150 \frac{(1 - \varepsilon)^2 \mu_f}{\varepsilon d_o^2} + \frac{1.75(1 - \varepsilon)\rho}{2d_o} |\bar{\mathbf{v}}_o - \mathbf{u}| & (\varepsilon \leq 0.8) \\ \frac{3}{4} \frac{\bar{C}_{D_o} (|\bar{\mathbf{v}}_o - \mathbf{u}| \varepsilon (1 - \varepsilon))}{2d_o} \varepsilon^{-2.65} & (\varepsilon > 0.8) \end{cases} \quad (103)$$

$$= \begin{cases} 150 \frac{(1 - \varepsilon)^2 \mu_f}{\varepsilon d_o^2} + \frac{1.75(1 - \varepsilon)\rho}{2d_o} |\mathbf{v}_{CGM} - \mathbf{u}| & (\varepsilon \leq 0.8) \\ \frac{3}{4} \frac{\bar{C}_{D_o} (|\mathbf{v}_{CGM} - \mathbf{u}| \varepsilon (1 - \varepsilon))}{2d_o} \varepsilon^{-2.65} & (\varepsilon > 0.8) \end{cases}$$

$$\bar{C}_{D_o} = \begin{cases} \frac{24 (1 + 0.15 \overline{Re}_o^{0.687})}{\overline{Re}_o} & (\overline{Re}_o \leq 1000) \\ 0.44 & (\overline{Re}_o > 1000) \end{cases} \quad (104)$$

$$\overline{Re}_o = \frac{|\bar{\mathbf{v}}_o - \mathbf{u}| \rho \varepsilon d_o}{2\mu_f} = \frac{|\mathbf{v}_{CGM} - \mathbf{u}| \rho \varepsilon d_o}{2\mu_f} \quad (105)$$

である。

(3) 圧力勾配項、重力項およびトルク

圧力勾配項および重力項は粒子の体積および重量に比例するため、DEM 粗視化モデルでは単純に粗視化粒子の体積、重量を用いて計算を行えば良い。すなわち、

$$-V_{sCGM} \nabla p = -l^3 V_{s0} \nabla p \quad (106)$$

$$m_{CGM} \mathbf{g} = l^3 m_0 \mathbf{g} \quad (107)$$

である。これは実粒子での計算に対して粒子体積および重量を以下のように変更して計算したものと等しい。

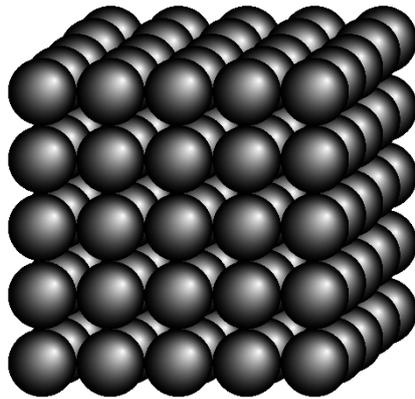
$$V_{sCGM} = l^3 V_{s0}, m_{CGM} = l^3 m_0 \quad (108)$$

トルクは通常の DEM と同様に接触力の水平方向から計算される。

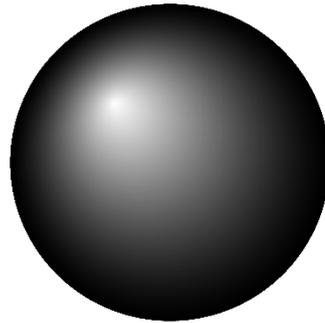
$$\mathbf{T}_{CGM} = \frac{d_{CGM}}{2} (\mathbf{n} \times \mathbf{F}_{CGM\tau}) \quad (109)$$

(4) 液架橋力

(5 年以内に刊行予定)



a) 実粒子群



b) 粗視化粒子

図 10 DEM 粗視化モデルの概念図

2.2. 大物体モデル

(5年以内に刊行予定)

2.3. 楕円体粒子モデル

2.3.1. 非球形粒子の表現

非球形粒子を用いた離散要素法はこれまで多くの研究がなされており[12,100–104]、様々な粒子の表現方法が利用されている。非球形粒子の表現方法を図 13 に示す。非球形粒子の表現方法としては関数で粒子形状を表現する方法[105,106]、メッシュを用いる手法[107–109]、および球粒子群によって表現する手法[17,110–112]が広く用いられる。関数を用いて表現する手法では、関数によって表現可能な形状のみしか扱えないが、なめらかな関数として形状を表現できるために拡張性が高いという利点を持つ。メッシュを用いる手法では様々な形状の粒子を自由に取り扱うことができるが、各粒子に対してメッシュ間の接触判定を行う必要があり、計算コストが高い。球粒子によって表現する手法では球粒子のアルゴリズムをそのまま適用できるという利点があるが、粒子表面のなめらかな表現を行うためには非常に多くの球粒子を用いる必要があるため、計算コストが高くなる。本研究では拡張性が高く計算コストが比較的低い関数による表現を用い、粒子形状として楕円体粒子を用いて計算を行った。粒子の形状は以下の楕円体方程式によって表される。

$$\left(\frac{x}{a}\right)^2 + \left(\frac{y}{b}\right)^2 + \left(\frac{z}{c}\right)^2 = 1 \quad (110)$$

ここで、 a, b, c はそれぞれ、 x, y, z 方向の軸半径である。楕円体粒子としては a, b, c のうち2つが一致する回転楕円体を使用することが多い。回転楕円体の場合、共通する軸半径の長さを X 、残り1つの軸半径を Y とすると、 $X > Y$ の場合、円盤状の粒子形状となり、この粒子形状を扁球 (Oblate particle) と呼ぶ。また $X < Y$ の場合、針状の粒子形状となり、この粒子形状を長球 (Prolate particle) と呼ぶ。 $X = Y$ の場合は球粒子を示す。また、粒子形状を1つの変数で表すため、アスペクト比 k を導入する。アスペクト比は X と Y の比 X/Y である。したがって、 $k < 1.0$ が長球、 $k = 1.0$ が球、 $k > 1.0$ が扁球を示す。

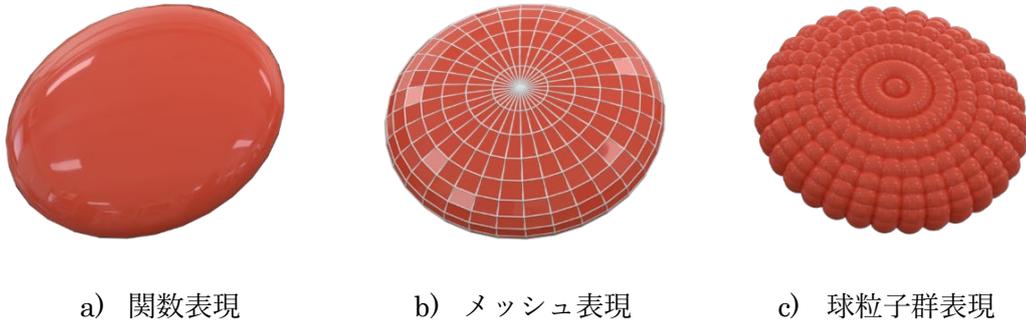


図 11 非球形粒子の表現方法

2.3.2. 楕円体の支配方程式

楕円体粒子の運動は大物体と同様に並進・回転運動に対する運動方程式で表される。

$$m \frac{d\mathbf{v}}{dt} = \sum \mathbf{F}_c + \mathbf{F}_d - V_s \nabla p + m\mathbf{g} \quad (111)$$

$$\frac{d(\mathbf{I}\boldsymbol{\omega})}{dt} = \sum \mathbf{T} \quad (112)$$

楕円体粒子における初期状態での慣性モーメント \mathbf{I}_0 は以下の式で計算される。

$$\mathbf{I}_0 = \frac{1}{5} m \begin{pmatrix} b^2 + c^2 & 0 & 0 \\ 0 & a^2 + c^2 & 0 \\ 0 & 0 & a^2 + b^2 \end{pmatrix} \quad (113)$$

楕円体粒子の時間進行アルゴリズムは大物体モデルと同様である。

2.3.3. 接触判定アルゴリズム

球粒子の場合と異なり、楕円体粒子間の接触判定および接触力計算は非常に困難な問題である。球粒子の場合には粒子の中心間を結んだ線分の中点が接触点として計算できるが、楕円体粒子でこのアルゴリズムを採用した場合接触点が粒子外になってしまうなどの問題が生じる。このため、楕円体粒子において安定して計算が可能な接触判定アルゴリズムが研究されている。図 14 に接触判定アルゴリズムの例を示す。接触判定アルゴリズムには、Cross-point method、Common normal method および Potential method がある。図 13 にこれらの手法の模式図を示す。Cross-point method[105]では粒子間の交点を結ぶ線分の中

点を接触点とする。このアルゴリズムは簡単に実装でき、計算コストも低い、3次元への応用が困難であるという問題がある。Common normal method[113]は粒子間が共通接平面を持つ際の接点を求め、その中点を接触点とするアルゴリズムである。このアルゴリズムは3次元に適用可能であるが、計算コストが高いという問題がある。Potential method[105]は粒子表面で0となるポテンシャル関数を用い、ポテンシャル関数が最小となる点を求め、それらの中点を接触点とするアルゴリズムである。この手法は3次元への応用が容易であり、計算コストもCommon normal methodと比較して低いという利点を持つ。本研究ではPotential法を採用し、粒子間接触力を計算した。Potential法における接触点計算の詳細な図を図14に示す。ここで、 ϕ_1, ϕ_2 はそれぞれ2つの楕円粒子の形状を示す関数で、

$$\phi_i(x, y, z) = \left(\frac{R_x}{a}\right)^2 + \left(\frac{R_y}{b}\right)^2 + \left(\frac{R_z}{c}\right)^2 - 1 \quad (114)$$

である。ここで R_x, R_y, R_z は点の座標を粒子の姿勢に合わせて回転させたもので、

$$\begin{pmatrix} R_x \\ R_y \\ R_z \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} q_x \\ q_y \\ q_z \\ q_w \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} q_x \\ q_y \\ q_z \\ q_w \end{pmatrix}^{-1} \quad (115)$$

である。ここで $\mathbf{q}^n = (q_x, q_y, q_z, q_w)$ は現在の粒子の姿勢を示すクォータニオンであり、各時間ステップで計算される。 $\mathbf{C}_1 = (x_1, y_1, z_1)$ は粒子1上かつ粒子2に最も深く埋まっている点であり、以下の最小化問題の解として計算される。

$$\text{minimize}(\phi_2(\mathbf{x})) \quad \text{such that: } \phi_1(\mathbf{x}) = 0 \quad (116)$$

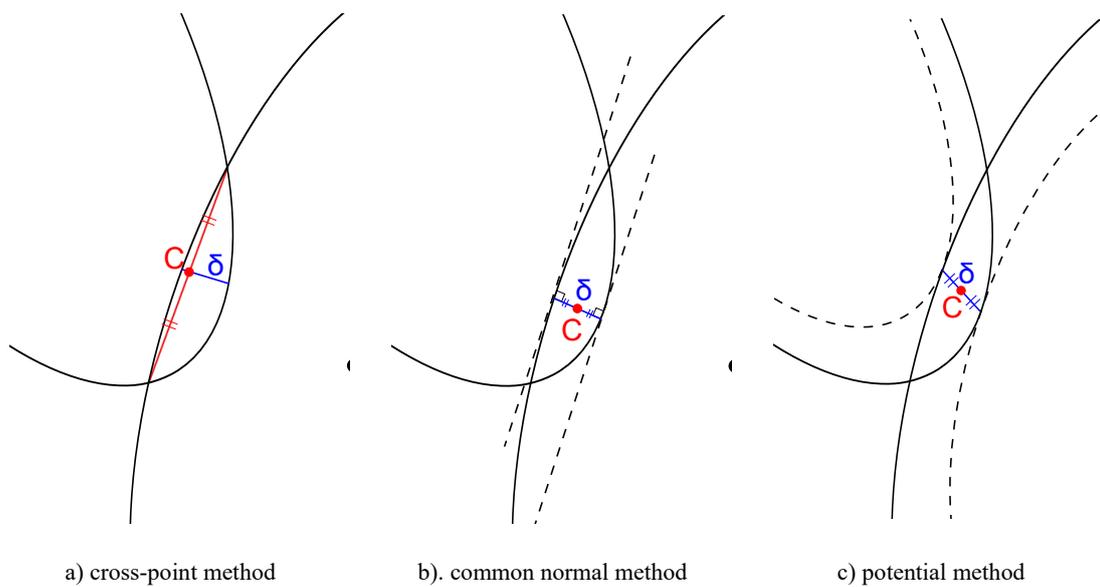


図 12 楕円体粒子間接触力の計算方法

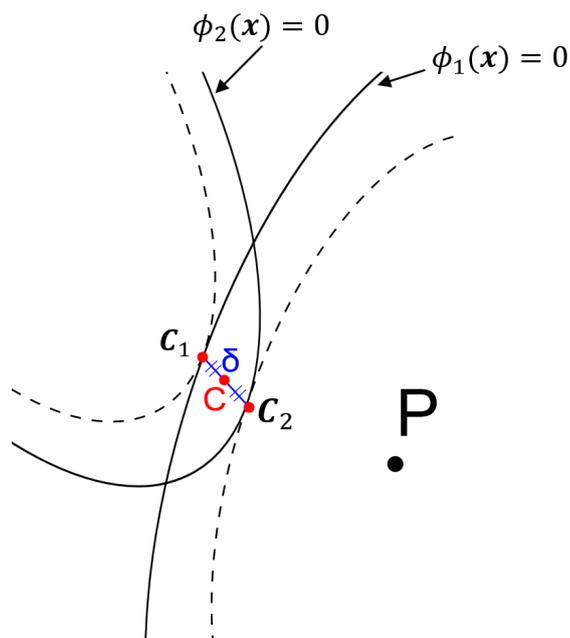


図 13 Potential 法の詳細な図示

2.3.4. ラグランジュの未定乗数法による最小化問題の解法

本研究では式(133)の最小化問題を解く際にラグランジュの未定乗数法を用いた。ラグランジュの未定乗数法では、未定定数 λ を用いて、式 (133)の解が以下の方程式を満たすこと

を利用する。

$$H(\mathbf{x}) = \phi_1 + \lambda\phi_2 \quad (117)$$

$$\frac{\partial H}{\partial x} = \frac{\partial H}{\partial y} = \frac{\partial H}{\partial z} = \frac{\partial H}{\partial \lambda} = 0 \quad (118)$$

これを連立方程式に書き下すと、以下のようになる。

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial \phi_1}{\partial x} + \lambda \frac{\partial \phi_2}{\partial x} \\ \frac{\partial \phi_1}{\partial y} + \lambda \frac{\partial \phi_2}{\partial y} \\ \frac{\partial \phi_1}{\partial z} + \lambda \frac{\partial \phi_2}{\partial z} \\ \phi_2 \end{pmatrix} = 0 \quad (119)$$

本研究ではこの連立方程式を多変数に拡張されたニュートン法によって解く。ニュートン法では n ステップ目の値 (x, y, z, λ) を用いて、次のステップへの増分 $(\Delta x, \Delta y, \Delta z, \Delta \lambda)$ を以下のように求める。

$$\partial \begin{pmatrix} \frac{\partial \phi_1}{\partial x} + \lambda \frac{\partial \phi_2}{\partial x} \\ \frac{\partial \phi_1}{\partial y} + \lambda \frac{\partial \phi_2}{\partial y} \\ \frac{\partial \phi_1}{\partial z} + \lambda \frac{\partial \phi_2}{\partial z} \\ \phi_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Delta x \\ \Delta y \\ \Delta z \\ \Delta \lambda \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial \phi_1}{\partial x} + \lambda \frac{\partial \phi_2}{\partial x} \\ \frac{\partial \phi_1}{\partial y} + \lambda \frac{\partial \phi_2}{\partial y} \\ \frac{\partial \phi_1}{\partial z} + \lambda \frac{\partial \phi_2}{\partial z} \\ \phi_2 \end{pmatrix} \quad (120)$$

左端の ∂ はヤコビ行列化を示しており、

$$\begin{aligned}
& \partial \begin{pmatrix} \frac{\partial\phi_1}{\partial x} + \lambda \frac{\partial\phi_2}{\partial x} \\ \frac{\partial\phi_1}{\partial y} + \lambda \frac{\partial\phi_2}{\partial y} \\ \frac{\partial\phi_1}{\partial z} + \lambda \frac{\partial\phi_2}{\partial z} \\ \phi_2 \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial\phi_1}{\partial x} + \lambda \frac{\partial\phi_2}{\partial x} \right) & \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial\phi_1}{\partial x} + \lambda \frac{\partial\phi_2}{\partial x} \right) & \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial\phi_1}{\partial x} + \lambda \frac{\partial\phi_2}{\partial x} \right) & \frac{\partial\phi_2}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial\phi_1}{\partial y} + \lambda \frac{\partial\phi_2}{\partial y} \right) & \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial\phi_1}{\partial y} + \lambda \frac{\partial\phi_2}{\partial y} \right) & \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial\phi_1}{\partial y} + \lambda \frac{\partial\phi_2}{\partial y} \right) & \frac{\partial\phi_2}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial\phi_1}{\partial z} + \lambda \frac{\partial\phi_2}{\partial z} \right) & \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial\phi_1}{\partial z} + \lambda \frac{\partial\phi_2}{\partial z} \right) & \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial\phi_1}{\partial z} + \lambda \frac{\partial\phi_2}{\partial z} \right) & \frac{\partial\phi_2}{\partial z} \\ \frac{\partial\phi_2}{\partial x} & \frac{\partial\phi_2}{\partial y} & \frac{\partial\phi_2}{\partial z} & 0 \end{pmatrix} \quad (121)
\end{aligned}$$

である。この行列は以下のようにブロック化できる。

$$\partial \begin{pmatrix} \frac{\partial\phi_1}{\partial x} + \lambda \frac{\partial\phi_2}{\partial x} \\ \frac{\partial\phi_1}{\partial y} + \lambda \frac{\partial\phi_2}{\partial y} \\ \frac{\partial\phi_1}{\partial z} + \lambda \frac{\partial\phi_2}{\partial z} \\ \phi_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{A} & \mathbf{B} \\ \mathbf{B}^T & 0 \end{pmatrix} \quad (122)$$

よって、解くべき行列方程式は、

$$\begin{pmatrix} \mathbf{A} & \mathbf{B} \\ \mathbf{B}^T & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Delta\mathbf{x} \\ \Delta\lambda \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{E} \\ \phi_2 \end{pmatrix} \quad (123)$$

となる。これは4×4の行列方程式であるが、右下が0であることから、Schurの補行列を用いて以下のような逆行列を利用することで効率的に計算できる。

$$\begin{pmatrix} \mathbf{A} & \mathbf{B} \\ \mathbf{B}^T & 0 \end{pmatrix}^{-1} = \begin{pmatrix} \mathbf{A}^{-1}(1 + \mathbf{B}(\mathbf{B}^t\mathbf{A}^{-1}\mathbf{B})\mathbf{B}^T\mathbf{A}^{-1}) & -\mathbf{A}^{-1}\mathbf{B}(\mathbf{B}^t\mathbf{A}^{-1}\mathbf{B}) \\ -(\mathbf{B}^t\mathbf{A}^{-1}\mathbf{B})\mathbf{B}^T\mathbf{A}^{-1} & (\mathbf{B}^t\mathbf{A}^{-1}\mathbf{B}) \end{pmatrix} \quad (124)$$

上式より、求める解は

$$\begin{aligned}
\begin{pmatrix} \Delta x \\ \Delta \lambda \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} \mathbf{A}^{-1}(1 + \mathbf{B}(\mathbf{B}^t \mathbf{A}^{-1} \mathbf{B}) \mathbf{B}^T \mathbf{A}^{-1}) & -\mathbf{A}^{-1} \mathbf{B}(\mathbf{B}^t \mathbf{A}^{-1} \mathbf{B}) \\ -(\mathbf{B}^t \mathbf{A}^{-1} \mathbf{B}) \mathbf{B}^T \mathbf{A}^{-1} & (\mathbf{B}^t \mathbf{A}^{-1} \mathbf{B}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{E} \\ \phi_2 \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} \mathbf{A}^{-1}(1 + \mathbf{B}(\mathbf{B}^t \mathbf{A}^{-1} \mathbf{B}) \mathbf{B}^T \mathbf{A}^{-1}) \mathbf{E} - \mathbf{A}^{-1} \mathbf{B}(\mathbf{B}^t \mathbf{A}^{-1} \mathbf{B}) \phi_2 \\ -(\mathbf{B}^t \mathbf{A}^{-1} \mathbf{B}) \mathbf{B}^T \mathbf{A}^{-1} \mathbf{E} + (\mathbf{B}^t \mathbf{A}^{-1} \mathbf{B}) \phi_2 \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} \mathbf{A}^{-1} \mathbf{E} - \mathbf{A}^{-1} \mathbf{B}(-(\mathbf{B}^t \mathbf{A}^{-1} \mathbf{B}) \mathbf{B}^T \mathbf{A}^{-1} \mathbf{E} + (\mathbf{B}^t \mathbf{A}^{-1} \mathbf{B}) \phi_2) \\ -(\mathbf{B}^t \mathbf{A}^{-1} \mathbf{B}) \mathbf{B}^T \mathbf{A}^{-1} \mathbf{E} + (\mathbf{B}^t \mathbf{A}^{-1} \mathbf{B}) \phi_2 \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} \mathbf{A}^{-1}(\mathbf{E} - \mathbf{B} \mathbf{D}) \\ \mathbf{D} \end{pmatrix}
\end{aligned} \tag{125}$$

となる。ここで、 $\mathbf{D} = -(\mathbf{B}^t \mathbf{A}^{-1} \mathbf{B}) \mathbf{B}^T \mathbf{A}^{-1} \mathbf{E} + (\mathbf{B}^t \mathbf{A}^{-1} \mathbf{B}) \phi_2$ とした。したがって、解くべき方程式は \mathbf{A}^{-1} を求め、その後 \mathbf{D} を求めることで、最後に $\mathbf{A}^{-1}(\mathbf{C} - \mathbf{B} \mathbf{D})$ を計算し解くことができる。 \mathbf{A}^{-1} は 3×3 の行列であり、サラスの公式より陽に書き下して計算ができる。この計算によって得られた値を用いて

$$\begin{aligned}
x^{n+1} &= x + \Delta x \\
y^{n+1} &= y + \Delta y \\
z^{n+1} &= z + \Delta z \\
\lambda^{n+1} &= \lambda + \Delta \lambda
\end{aligned} \tag{126}$$

として値を更新し、左辺のノルム

$$|\mathbf{C}|_{\phi_2} = \sqrt{\left(\frac{\partial \phi_1}{\partial x} + \lambda \frac{\partial \phi_2}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial \phi_1}{\partial y} + \lambda \frac{\partial \phi_2}{\partial y}\right)^2 + \left(\frac{\partial \phi_1}{\partial z} + \lambda \frac{\partial \phi_2}{\partial z}\right)^2 + (\phi_2)^2} \tag{127}$$

の大きさによって収束判定を行う。ここまでの計算において、各偏微分は楕円体では1次式で表される。

2.3.5. 粒子-流体間力

非球形粒子における粒子-流体間力のモデル化についてはいくつかの研究がなされており、様々なモデル式が提案されている。本研究では Holzer and Sommerfeld[114]による式を採用して計算を行った。Holzer and Sommerfeld の式は Ergun・Wen-Yu 式と同様に球粒子において広く用いられている Di Felice の式[115]を元にモデル化されている。Di Felice の式と同様に流体抗力を以下のようにモデル化する事を考える。

$$f_d = C_d \frac{1}{2} \rho |\mathbf{u}|^2 A_1 \varepsilon C(\varepsilon) \tag{128}$$

すると、運動量交換係数 β は

$$\beta = \frac{f_d(1-\varepsilon)}{V_p|\mathbf{u}|} = \frac{1}{2}C_d\rho|\mathbf{u}|\frac{A_\perp}{V_p}\varepsilon(1-\varepsilon)C(\varepsilon) \quad (129)$$

となる。ここで、 A_\perp は流速に対して垂直な面への投影面積であり、楕円体粒子の場合は以下のように計算される[116]。

$$A_\perp = \pi abc \sqrt{\left(\frac{n_x}{a}\right)^2 + \left(\frac{n_y}{b}\right)^2 + \left(\frac{n_z}{c}\right)^2} \quad (130)$$

ここで、 $\mathbf{n} = (n_x, n_y, n_z)$ は流速方向を示す方向ベクトル($\mathbf{n} = \frac{\mathbf{u}}{|\mathbf{u}|}$)である。また、補正関数 $C(\varepsilon)$ は Di Felice の式と同様に以下のようなべき関数で表されると考える。

$$C(\varepsilon) = \varepsilon^{-\chi} \quad (131)$$

$$\chi = 3.7 - 0.65 \exp\left[-\frac{1}{2}(1.5 - \log_{10} Re_p)^2\right] \quad (132)$$

また、Holzer and Sommerfield の式では実験および数値計算の結果から求めた経験式として、抗力係数 C_d を以下の式で計算する。

$$C_d = \frac{8}{Re_p} \frac{1}{\phi_\parallel^{0.5}} + \frac{16}{Re_p} \frac{1}{\phi^{0.5}} + \frac{3}{Re_p^{0.5}} \frac{1}{\phi^{0.75}} + 0.42 \times 10^{0.4(-\log\phi)^{0.2}} \frac{1}{\phi_\perp} \quad (133)$$

ここで、 ϕ, ϕ_\perp および ϕ_\parallel は、それぞれ、球形度、流速方向に対する垂直方向および水平方向の球形度である。球形度 ϕ は

$$\phi = \frac{\text{粒子と同体積の球の表面積}}{\text{粒子の表面積}} = \frac{4\pi d^2}{S_p} \quad (134)$$

であり、粒子の表面積 S_p は楕円体粒子の場合、

$$S_p = 2\pi c^2 + \frac{2\pi ab}{\sin\psi} (\sin^2\psi E(\psi, k) + \cos^2\psi F(\psi, k)) \quad (135)$$

$$\psi = \cos^{-1}\left(\frac{c}{a}\right), k = \sqrt{\frac{a^2(b^2 - c^2)}{b^2(a^2 - c^2)}} \quad (136)$$

$$E(\psi, k) = \int_0^\psi \sqrt{\frac{1 - k^2 t^2}{1 - t^2}} dt \quad (137)$$

$$F(\psi, k) = \int_0^\psi \frac{dt}{\sqrt{(1 - k^2 t^2)(1 - t^2)}} \quad (138)$$

として計算される。この計算は第一種・第二種楕円積分を含むが、時間進行において変化しない値であるため、事前に一度だけ計算すればよい。 ϕ_{\perp} は

$$\phi_{\perp} = \frac{\text{同体積球の投影面積}}{\text{垂直方向の投影面積}} = \frac{\pi d^2}{A_{\perp}} \quad (139)$$

となる。これに対し、 ϕ_{\parallel} は流速方向に対して水平な面を任意に取ることができるため、それらの平均値を用いなければならず、一般的に計算が非常に困難である。Holzer and Sommerfield は ϕ_{\parallel} を ϕ_{\perp} に置き換えても誤差は許容範囲であるとしており、以下の式が広く用いられている。

$$C_d = \frac{8}{Re_p} \frac{1}{\phi_{\perp}^{0.5}} + \frac{16}{Re_p} \frac{1}{\phi_{\perp}^{0.5}} + \frac{3}{Re_p^{0.5}} \frac{1}{\phi_{\perp}^{0.75}} + 0.42 \times 10^{0.4(-\log \phi)^{0.2}} \frac{1}{\phi_{\perp}} \quad (140)$$

本研究でも式(157)を採用し、数値解析を行った。

2.4. 気相

2.4.1. 支配方程式

固気混相流における気相の解析では、固体粒子周りの流れを詳細に解析する直接計算法 (Direct Numerical Simulation, 以下 DNS と記す) と局所的に平均化された流体の流れ場を固相とカップリングさせる手法が存在する(図 16)。DNS による解析を DEM とカップリングさせる手法である DEM-DNS 法[60]では、固相や気相の挙動を高解像度で解析することができるが、固体粒子より十分小さな計算格子を用いて計算する必要があり、大規模な体系の解析には適用が困難である。従って流動層等の大規模体系では局所体積平均法を適用した手法[71]が広く用いられる。本研究でも気相の解析には局所体積平均を適用した CFD を用いる。気相の支配方程式は非圧縮性流体のナビエ-ストークス方程式および連続の式であり、それぞれ、

$$\frac{\partial(\varepsilon\rho\mathbf{u})}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon\rho\mathbf{u}\mathbf{u}) = -\varepsilon\nabla p + \mathbf{F}_s + \nabla \cdot (\varepsilon\boldsymbol{\tau}) + \varepsilon\rho\mathbf{g} \quad (141)$$

$$\frac{\partial\varepsilon}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon\mathbf{u}) = 0 \quad (142)$$

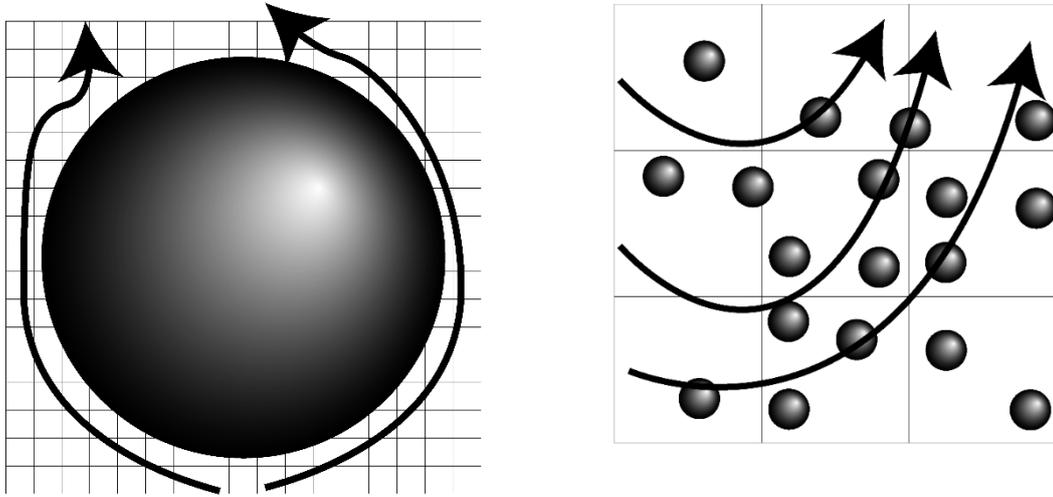
と表される。ここで、 \mathbf{F}_s および $\boldsymbol{\tau}$ は、それぞれ、固相から受ける抗力およびせん断応力テンソルである。 \mathbf{F}_s は粒子が流体から受ける力 \mathbf{F}_d と運動量を保存するため、以下の関係を持つ。

$$\mathbf{F}_s = -\frac{\Sigma\mathbf{F}_d}{V_{cell}} = -\frac{\Sigma(\beta V_s(\mathbf{u} - \mathbf{v}))}{V_{cell}(1 - \varepsilon)} \quad (143)$$

本研究ではニュートン流体を使用する。この場合せん断応力テンソルは以下のように表される。

$$\boldsymbol{\tau} = \mu_f(\nabla\mathbf{u} + (\nabla\mathbf{u})^T) = \mu_f \begin{pmatrix} 2\frac{\partial u}{\partial x} & \frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} & \frac{\partial w}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial z} \\ \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} & 2\frac{\partial v}{\partial y} & \frac{\partial w}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial z} \\ \frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} & \frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} & 2\frac{\partial w}{\partial z} \end{pmatrix} \quad (144)$$

ここで、 u 、 v 、 w は、それぞれ、流体速度の x 、 y および z 方向成分を示す。



a) 直接計算法

b) 局所体積平均法

図 14 直接計算法および局所体積平均法 of 概念図

2.4.2. 射影法による時間的離散化

CFD の時間離散化、および時間発展アルゴリズムは古くから非常に多くの研究がなされており、MAC 法[117]、SIMPLE 法[118]、射影法[119]などが存在する。特に DEM-CFD 法においては SIMPLE 法および射影法が広く使用される。SIMPLE 法は元々定常計算に用いられた手法であり、流動層などの非定常状態の計算に適用するためには PISO 法[120]などの応用的な手法を使用する必要がある。本研究では射影法によるアルゴリズムを基に計算を行った。射影法は圧力を陰的に解き、その他の項を陽的に解く半陰解法である。従って支配方程式は以下のように離散化される。

$$\rho \frac{\varepsilon^{n+1} \mathbf{u}^{n+1} - \varepsilon^n \mathbf{u}^n}{\Delta t} + \nabla \cdot (\varepsilon^n \rho \mathbf{u}^n \mathbf{u}^n) = -\varepsilon^{n+1} \nabla p^{n+1} + \mathbf{F}_s^n + \nabla \cdot (\varepsilon^n \boldsymbol{\tau}^n) + \varepsilon^n \rho \mathbf{g} \quad (145)$$

$$\frac{(\varepsilon^{n+1} - \varepsilon^n)}{\Delta t} + \nabla \cdot (\varepsilon^{n+1} \mathbf{u}^{n+1}) = 0 \quad (146)$$

射影法ではまずナビエ-ストークス方程式を仮速度 \mathbf{u}^* によって圧力項とそれ以外の項に分解する。

$$\rho \frac{\varepsilon^{n+1} \mathbf{u}^* - \varepsilon^n \mathbf{u}^n}{\Delta t} + \nabla \cdot (\rho \varepsilon^n \mathbf{u}^n \mathbf{u}^n) = \mathbf{F}_s^n + \nabla \cdot (\varepsilon^n \boldsymbol{\tau}^n) + \varepsilon^n \rho \mathbf{g} \quad (147)$$

$$\rho \frac{\varepsilon^{n+1} \mathbf{u}^{n+1} - \varepsilon^{n+1} \mathbf{u}^*}{\Delta t} = -\varepsilon^{n+1} \nabla p^{n+1} \quad (148)$$

前者の式は \mathbf{u}^* について陽的に解くことができ、

$$\mathbf{u}^* = \frac{\varepsilon^n}{\varepsilon^{n+1}} \mathbf{u}^n + \left(-\nabla \cdot (\rho \varepsilon^n \mathbf{u}^n \mathbf{u}^n) + \mathbf{F}_s^n + \nabla \cdot (\varepsilon^n \boldsymbol{\tau}^n) + \varepsilon^n \rho \mathbf{g} \right) \frac{\Delta t}{\rho \varepsilon^{n+1}} \quad (149)$$

となる。 ε^{n+1} は DEM の計算によりすでに求められている。また、式(165)から以下の式を得る。

$$\varepsilon^{n+1} \mathbf{u}^{n+1} = \varepsilon^{n+1} \mathbf{u}^* - \frac{\rho \varepsilon^{n+1}}{\Delta t} \nabla p^{n+1} \quad (150)$$

これを連続の式(163)に代入すると

$$\frac{\rho}{\Delta t} \nabla \cdot (\varepsilon^{n+1} \nabla p^{n+1}) = \frac{(\varepsilon^{n+1} - \varepsilon^n)}{\Delta t} + \nabla \cdot (\varepsilon^{n+1} \mathbf{u}^*) \quad (151)$$

を得る。これは変数係数付きポアソン方程式であり、行列解法により解くことができる。本研究ではマルチグリッド前処理つき共役勾配法[121,122]を用いて処理した。式(168)を解くことで求めた圧力 p^{n+1} を用い、最終的に次ステップの流体速度 \mathbf{u}^{n+1} は以下のように更新される。

$$\mathbf{u}^{n+1} = \mathbf{u}^* - \frac{\Delta t}{\rho} \nabla p^{n+1} \quad (152)$$

著者らはこれまで、固定層における安定性解析から、射影法では流体抗力項に起因する計算安定性条件

$$\Delta t < \frac{D^2 \rho \varepsilon^2}{(1 - \varepsilon)(150\mu/2 + 1.75\rho\varepsilon|\mathbf{u}|)} \quad (153)$$

が存在することを示した[79]。

2.4.3. 森-酒井の抗力陰解法

前述のように、射影法による混相流数値解析においては流体抗力項に起因する計算の不

安定性が発生する可能性がある。そのため、FELMI においては流体抗力項を半陰的に解くことによって計算の安定性をはかる（森・酒井の抗力陰解法）。FELMI では、流体抗力項を以下のように計算する。

$$\mathbf{F}_s^{n+1} = -\frac{\Sigma(\beta^n V_S(\mathbf{u}^{n+1} - \mathbf{v}^{n+1}))}{V_{Cell}(1 - \varepsilon^{n+1})} \quad (154)$$

このように項のうち一部のみを陰的に解く手法は Kim & Moin のフラクショナルステップ法[123]における粘性項などにも見られる。FELMI では、ナビエ-ストークス方程式は以下のように時間的に離散化される。

$$\begin{aligned} \rho \frac{\varepsilon^{n+1} \mathbf{u}^{n+1} - \varepsilon^n \mathbf{u}^n}{\Delta t} + \nabla \cdot (\varepsilon^n \rho \mathbf{u}^n \mathbf{u}^n) \\ = -\varepsilon^{n+1} \nabla p^{n+1} - \frac{\Sigma(\beta^n V_S(\mathbf{u}^{n+1} - \mathbf{v}^{n+1}))}{V_{Cell}(1 - \varepsilon^{n+1})} + \nabla \cdot (\varepsilon^n \boldsymbol{\tau}^n) + \varepsilon^n \rho \mathbf{g} \end{aligned} \quad (155)$$

式(172)を解く際、フラクショナルステップ法と同様に、ポテンシャル ϕ および仮速度 \mathbf{u}^* を用いて以下のように式(172)を

$$\rho \frac{\varepsilon^{n+1} \mathbf{u}^* - \varepsilon^n \mathbf{u}^n}{\Delta t} + \nabla \cdot (\rho \varepsilon^n \mathbf{u}^n \mathbf{u}^n) = -\frac{\Sigma(\beta^n V_S(\mathbf{u}^* - \mathbf{v}^{n+1}))}{V_{Cell}(1 - \varepsilon^{n+1})} + \nabla \cdot (\varepsilon^n \boldsymbol{\tau}^n) + \varepsilon^n \rho \mathbf{g} \quad (156)$$

$$\rho \frac{\varepsilon^{n+1} \mathbf{u}^{n+1} - \varepsilon^{n+1} \mathbf{u}^*}{\Delta t} = -\varepsilon^{n+1} \nabla \phi^{n+1} \quad (157)$$

の2式に分解する。まず ϕ と p の関係を求める。式(172)と式(173)を比較すると

$$\rho \frac{\varepsilon^{n+1} \mathbf{u}^{n+1} - \varepsilon^{n+1} \mathbf{u}^*}{\Delta t} = -\varepsilon^{n+1} \nabla p^{n+1} - \frac{\Sigma \beta^n V_p (\mathbf{u}^{n+1} - \mathbf{u}^*)}{(1 - \varepsilon^n) V_{grid}} \quad (158)$$

という関係式を得ることができる。また、式(175)と式(174)から、

$$-\varepsilon^{n+1} \nabla \phi^{n+1} = -\varepsilon^{n+1} \nabla p^{n+1} + \frac{\Sigma \beta^n V_p}{(1 - \varepsilon^n) V_{grid}} \frac{\Delta t}{\rho} \nabla \phi^{n+1} \quad (159)$$

の関係を得ることができる。従って、 ϕ と p の関係は以下ようになる。

$$\left(1 + \frac{\Sigma \beta^n V_p}{(1 - \varepsilon^n) V_{grid} \rho \varepsilon^{n+1}} \right) \nabla \phi^{n+1} = \alpha^{-1} \nabla \phi^{n+1} = \nabla p^{n+1} \quad (160)$$

次に、 \mathbf{u}^* を求める。式 (173)は完全に陽的に解け、以下のようになる。

$$\mathbf{u}^* = \alpha \left(\frac{\varepsilon^n}{\varepsilon^{n+1}} \mathbf{u}^n + \frac{\Delta t}{\rho \varepsilon^{n+1}} \mathbf{RHS}^n + \boldsymbol{\gamma} \Delta t \right) \quad (161)$$

ここで、 α 、 $\boldsymbol{\gamma}$ および \mathbf{RHS}^n は、それぞれ、

$$\alpha = \left(1 + \frac{\Sigma \beta^n V_p}{(1 - \varepsilon^n) V_{grid} \rho \varepsilon^{n+1}} \frac{\Delta t}{\rho \varepsilon^{n+1}} \right)^{-1} \quad (162)$$

$$\boldsymbol{\gamma} = \frac{\Sigma \beta^n V_p \mathbf{v}^{n+1}}{(1 - \varepsilon^n) \varepsilon^{n+1} \rho V_{grid}} \quad (163)$$

$$\mathbf{RHS}^n = -\nabla(\rho \varepsilon^n \mathbf{u}^n \mathbf{u}^n) + \varepsilon^n \rho \mathbf{g} + \nabla \cdot (\varepsilon^n \boldsymbol{\tau}^n) \quad (164)$$

である。連続の式

$$\frac{(\varepsilon^{n+1} - \varepsilon^n)}{\Delta t} + \nabla \cdot (\varepsilon^{n+1} \mathbf{u}^{n+1}) = 0 \quad (165)$$

と式(174)から、ポアソン方程式

$$\frac{\Delta t}{\rho} \nabla \cdot (\varepsilon^{n+1} \nabla \phi^{n+1}) = \frac{(\varepsilon^{n+1} - \varepsilon^n)}{\Delta t} + \nabla \cdot (\varepsilon^{n+1} \mathbf{u}^*) \quad (166)$$

が求められる。Kim & Moin のフラクショナルステップ法では ϕ に関するポアソン方程式を解いた後に p を求めているが、FELMI においては前述の ϕ と p の関係式(177)より、直接圧力ポアソン方程式

$$\frac{\Delta t}{\rho} \nabla \cdot (\alpha \varepsilon^{n+1} \nabla p^{n+1}) = \frac{(\varepsilon^{n+1} - \varepsilon^n)}{\Delta t} + \nabla \cdot (\varepsilon^{n+1} \mathbf{u}^*) \quad (167)$$

を得られる。また式(174)より \mathbf{u}^{n+1} は以下のように求められる。

$$\mathbf{u}^{n+1} = \mathbf{u}^* - \frac{\Delta t}{\rho} \cdot \alpha \nabla p^{n+1} \quad (168)$$

従って、実際の計算では式(178)から仮速度を求め、変数係数つき圧力ポアソン方程式(184)を解き、式(185)から次ステップの速度 \mathbf{u}^{n+1} を求める。ここで、特筆すべき点として、係数 α および $\boldsymbol{\gamma}$ を

$$\alpha = 1 \quad (169)$$

$$\boldsymbol{\gamma} = \frac{\Sigma \beta^n V_p (\boldsymbol{v}^{n+1} - \boldsymbol{u}^n)}{(1 - \varepsilon^n) \varepsilon^{n+1} \rho V_{grid}} \quad (170)$$

とすると通常の射影法と同一のアルゴリズムになることが挙げられる。これにより、通常の射影法を用いているソルバーに対し、抗力陰解法をオプションとして容易に実装できる。抗力陰解法のアルゴリズムを従来手法である射影法のアルゴリズムと比較したフローチャートを図 17 に示す。

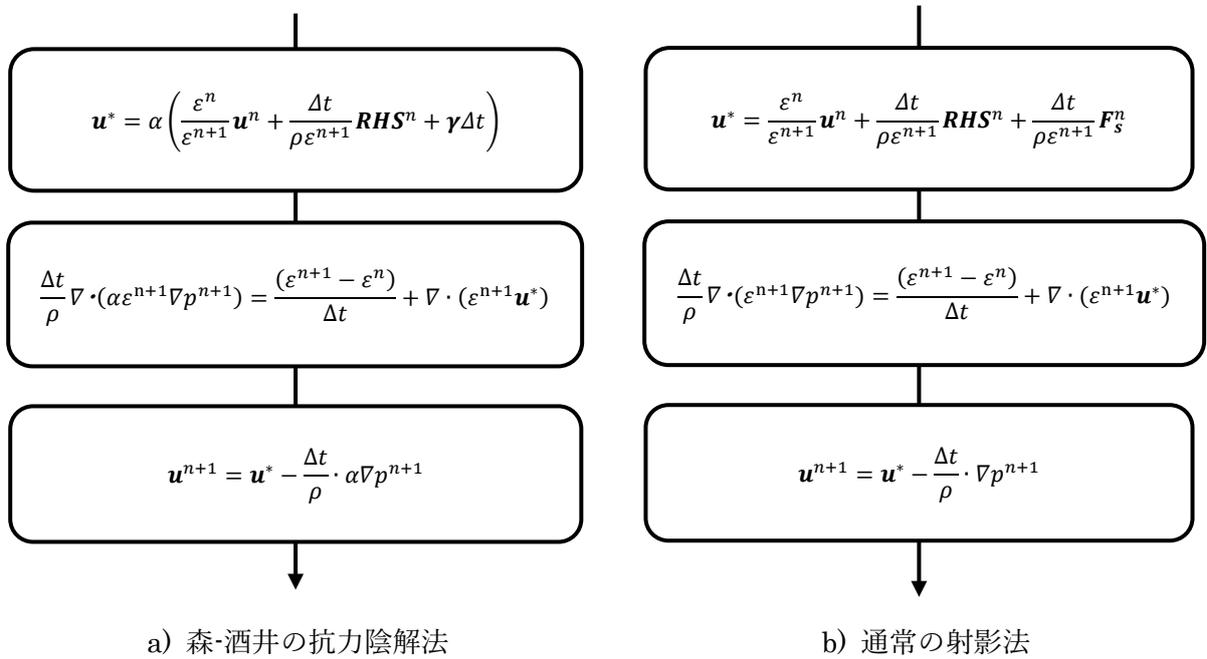


図 15 通常の射影法および森-酒井の抗力陰解法のアルゴリズムの比較

2.4.4. 変数係数付き圧力ポアソン方程式の解法

射影法や森-酒井の抗力陰解法では式(168)のような変数係数つき圧力ポアソン方程式を解く必要がある。変数係数つき圧力ポアソン方程式は以下のように一般化できる。

$$\nabla \cdot (A \nabla p) = \boldsymbol{b} \quad (171)$$

ここで、 A および \boldsymbol{b} は、それぞれ、任意のスカラー場およびベクトル場を示す。式(188)の右辺は以下のように空間的に離散化される。

$$\begin{aligned}
\nabla \cdot (A\nabla p)_{i,j,k} &= \frac{1}{(\Delta x)^2} \left(A_{i+\frac{1}{2},j,k} (p_{i+1,j,k} - p_{i,j,k}) - A_{i-\frac{1}{2},j,k} (p_{i,j,k} - p_{i-1,j,k}) \right) \\
&+ \frac{1}{(\Delta y)^2} \left(A_{i,j+\frac{1}{2},k} (p_{i,j+1,k} - p_{i,j,k}) - A_{i,j-\frac{1}{2},k} (p_{i,j,k} - p_{i,j-1,k}) \right) \\
&+ \frac{1}{(\Delta z)^2} \left(A_{i,j,k+\frac{1}{2}} (p_{i,j,k+1} - p_{i,j,k}) - A_{i,j,k-\frac{1}{2}} (p_{i,j,k} - p_{i,j,k-1}) \right)
\end{aligned} \tag{172}$$

よって、式(188)は線形連立方程式 $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ に帰着される。 \mathbf{A} および \mathbf{x} は式(189)によって計算される係数行列および各格子での圧力を並べたベクトルである。線形連立方程式はヤコビ法やガウスザイデル法、共役勾配法など様々な解法が存在するが、本研究では共役勾配法の一つであるマルチグリッド前処理つき共役勾配法[121,122]を用いて計算を行う。マルチグリッド前処理つき共役勾配法のアルゴリズムを図 18 に示す。マルチグリッド前処理つき共役勾配法では共役勾配法の初期探索方向を求めるためにマルチグリッド法を用いる。これにより行列の性質が悪い場合でも高速に計算を行うことができる。マルチグリッド手法ではまず初期ベクトルを \mathbf{x}^0 とする。この時初期残差は $\mathbf{r}^0 = \mathbf{b} - \mathbf{Ax}^0$ であるが、 \mathbf{r}^0 を用いて初期探索ベクトル \mathbf{s}^0 を $\mathbf{s}^0 = \widetilde{\mathbf{r}}^0$ とする。ここで $\widetilde{\mathbf{r}}^0$ は $\mathbf{A}\widetilde{\mathbf{r}}^0 = \mathbf{r}^0$ をマルチグリッド法で求めた近似値である。この初期探索ベクトルを用い、まず重み α^0 を以下のように求める。

$$\alpha^0 = \frac{\widetilde{\mathbf{r}}^0 \cdot \mathbf{r}^0}{\mathbf{s}^0 \cdot \mathbf{As}^0} \tag{173}$$

これを用いて \mathbf{x} および \mathbf{r} を以下のように更新する。

$$\mathbf{x}^1 = \mathbf{x}^0 + \alpha^0 \mathbf{s}^0 \tag{174}$$

$$\mathbf{r}^1 = \mathbf{r}^0 - \alpha^0 \mathbf{As}^0 \tag{175}$$

ここで、 \mathbf{r}^1 の大きさが十分に小さい場合には計算が収束したとみなし、計算を終了する。本研究では初期残差の 10^{-8} 倍を収束条件とした。収束していない場合、計算を続行する。まず $\mathbf{A}\widetilde{\mathbf{r}}^1 = \mathbf{r}^1$ をマルチグリッド法によって近似的に解き、その結果を用いて次の探索方向 \mathbf{s}^1 を

$$s^1 = \widetilde{r}^1 + \frac{\widetilde{r}^1 \cdot r^1}{r^0 \cdot r^0} s^0 \quad (176)$$

とする。以上のプロセスを収束するまで繰り返す。マルチグリッド法のアルゴリズムを図 19 に示す。マルチグリッド法は、CFD において格子が細かいほど高周波成分の収束のために反復回数が増加するという問題を解決するため、粗い格子で高周波成分を収束させ細かな格子に結果を投影する手法である。これにより格子が細かい場合でも反復回数を増加させずに計算を行うことができる。マルチグリッド法では格子上で反復計算によって行列計算を行う「前緩和」、その結果を粗い格子上に投影する「制限補完」、粗い格子上での結果を細い格子に投影する「延長補完」、最後に補完された結果を用いて反復計算を行う「後緩和」を各解像度の格子で再帰的に行うことによって計算を行う。特に前緩和および後緩和には行列計算の反復解法をそのまま用いることができるが、本研究ではレッド・ブラックガウスザイデル法を用いた。また、再帰の方法にも大きく分けて各深さに一度のみ入る「V-cycle」と 2 度入る「W-cycle」の二種類が存在するが(図 20)、本研究では W-cycle を採用した。

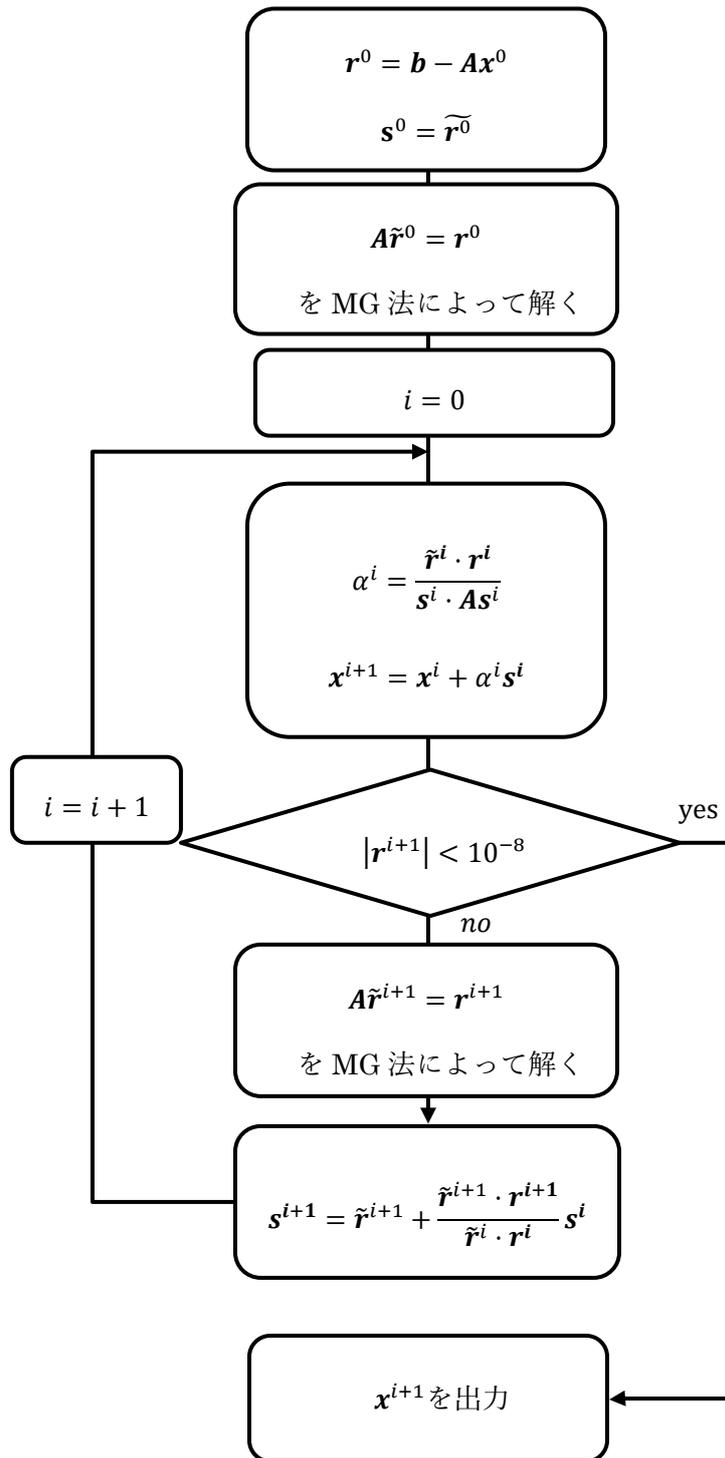


図 16 マルチグリッド前処理付き共役勾配法のアルゴリズム

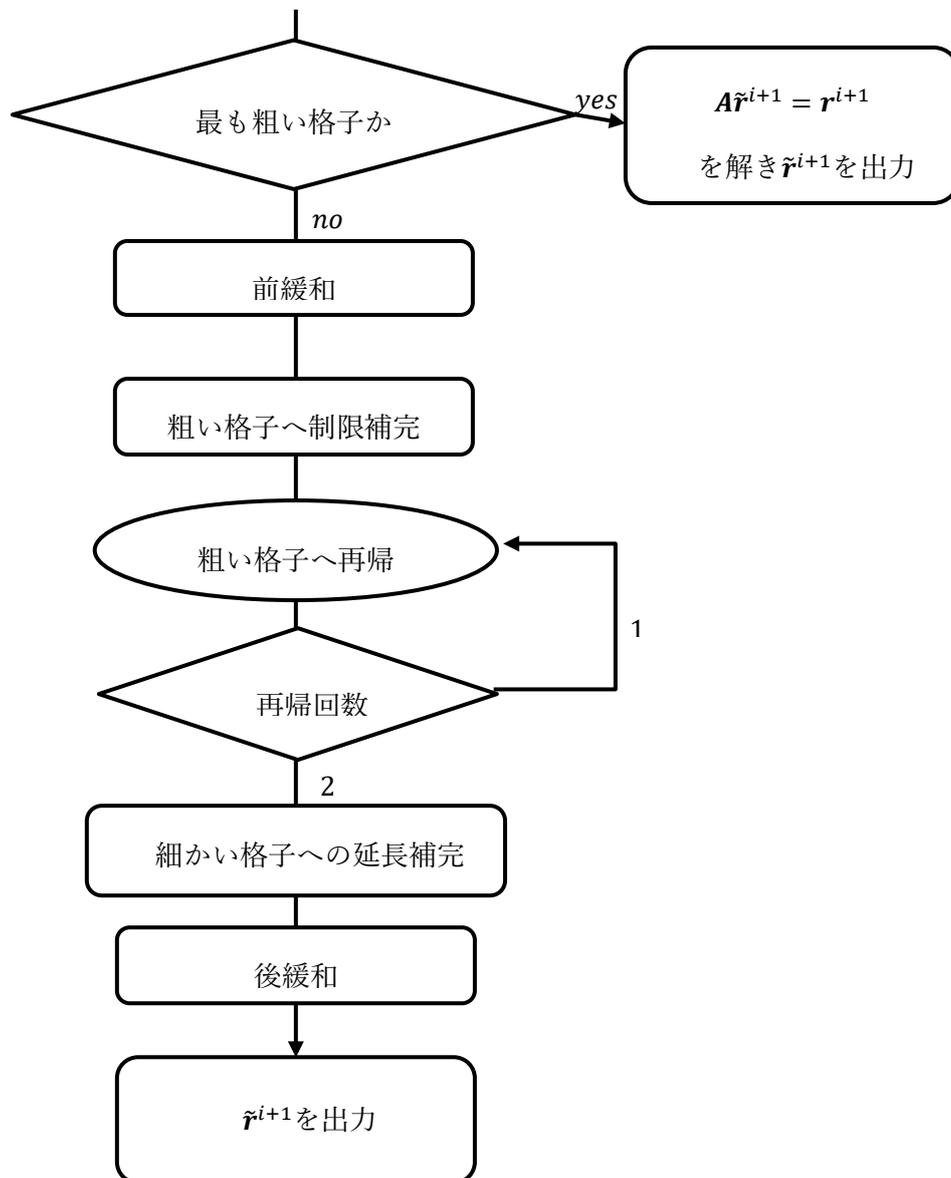
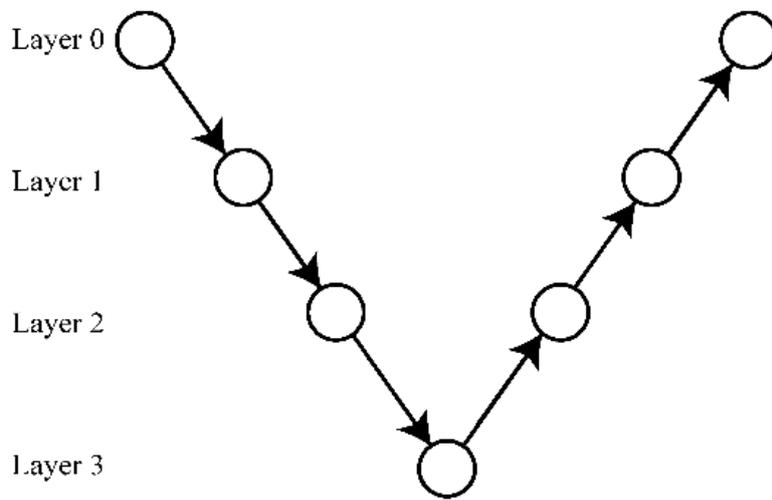
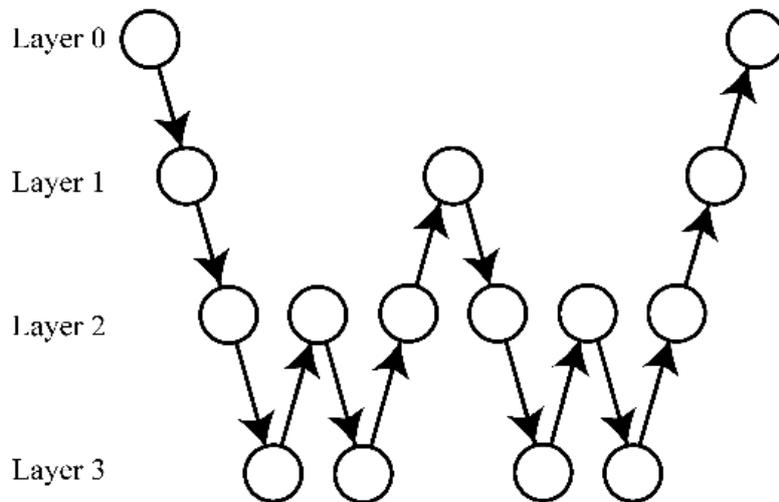


図 17 マルチグリッド法の概念図



(a) V-Cycle



(b) W-Cycle

図 18 V-サイクルおよび W サイクルの概念図

2.4.5. 移流項の離散化

本研究では、空間の離散化に際して、一般的に DEM-CFD 法で用いられるスタガード格子を用いて空間の離散化を行った (図 21)。スタガード格子において、流体のスカラー量は格子中心に、ベクトル量はそれぞれベクトル方向の格子面に定義される。本研究では常に格子幅が一定の構造格子を用いて計算を行った。スタガード格子における移流項および粘性項の離散化手法について以下で述べる。移流項 $\nabla \cdot (\varepsilon \rho \mathbf{u}\mathbf{u})$ は 3 次元構造格子上では

$$\nabla \cdot (\varepsilon \rho \mathbf{u}\mathbf{u}) = \rho \begin{pmatrix} \frac{\partial(\varepsilon uu)}{\partial x} + \frac{\partial(\varepsilon uv)}{\partial y} + \frac{\partial(\varepsilon uw)}{\partial z} \\ \frac{\partial(\varepsilon vu)}{\partial x} + \frac{\partial(\varepsilon vv)}{\partial y} + \frac{\partial(\varepsilon vw)}{\partial z} \\ \frac{\partial(\varepsilon wu)}{\partial x} + \frac{\partial(\varepsilon wv)}{\partial y} + \frac{\partial(\varepsilon ww)}{\partial z} \end{pmatrix} \quad (177)$$

のように書き下される。例として、移流項の x 成分第二項 $\frac{\partial(\varepsilon uv)}{\partial y}$ は x 方向の格子面に計算される。点 $(i + \frac{1}{2}, j, k)$ においては、以下のように離散化される。

$$\left. \frac{\partial(\varepsilon uv)}{\partial y} \right|_{i+\frac{1}{2}, j, k} = \frac{(\varepsilon uv)_{i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}, k} - (\varepsilon uv)_{i+\frac{1}{2}, j-\frac{1}{2}, k}}{\Delta y} \quad (178)$$

$(\varepsilon uv)_{i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}, k}$ は以下のように求められる。

$$(\varepsilon uv)_{i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}, k} = \frac{(\varepsilon_{i,j,k} + \varepsilon_{i+1,j,k} + \varepsilon_{i,j+1,k} + \varepsilon_{i+1,j+1,k})}{4} u_{i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}, k} v_{i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}, k} \quad (179)$$

$u_{i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}, k}$ および $v_{i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}, k}$ は定義されていない点での値であるので、何らかの差分スキームを用いて計算する必要がある。 $v_{i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}, k}$ は単純な平均として

$$v_{i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}, k} = \frac{v_{i+\frac{1}{2}, j, k} + v_{i+\frac{1}{2}, j+1, k}}{2} \quad (180)$$

として求められ、 $u_{i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}, k}$ は二次中心差分と一次風上差分のハイブリッドスキーム [124] を用いて、

$$u_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k} = \begin{cases} u_{i+\frac{1}{2},j,k} & (Pe < -2) \\ \frac{u_{i+\frac{1}{2},j,k} + u_{i+\frac{1}{2},j+1,k}}{2} & (-2 < Pe < 2) \\ u_{i+\frac{1}{2},j+1,k} & (2 < Pe) \end{cases} \quad (181)$$

のように求められる。ここで、 Pe はペクレ数であり、

$$Pe = \frac{(v_{i,j+\frac{1}{2},k} + v_{i+1,j+\frac{1}{2},k})\rho\Delta y}{\mu_f} \quad (182)$$

で定義される。その他の項についても同様の操作によって計算することができる。CFDにおける移流項の数値安定性条件には一般的に CFL 条件が用いられる。CFL 条件は移流拡散方程式の von-Neumann の数値安定性解析[125]より導かれる条件で、1 未満の正の実数であるクーラン数 C を用いて

$$\Delta t < \frac{C}{u} \Delta x \quad (183)$$

のように表される。

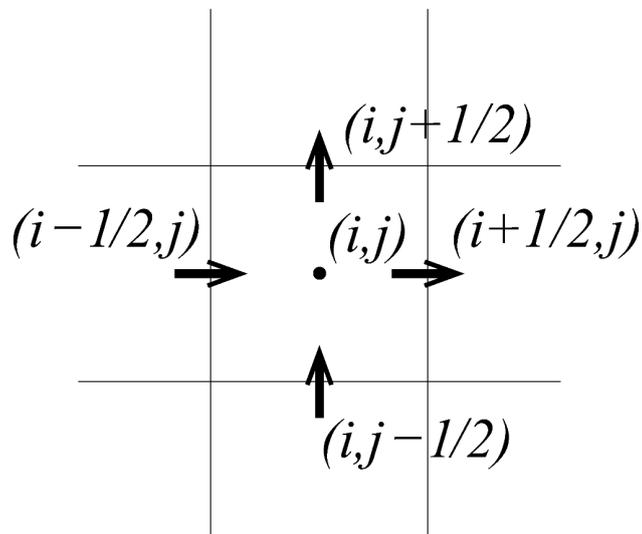


図 19 スタガード格子の概念図

2.4.6. 粘性項の離散化

粘性項 $\nabla \cdot (\varepsilon \boldsymbol{\tau})$ は

$$\nabla \cdot (\varepsilon \boldsymbol{\tau}) = \nabla \cdot \mu_f (\nabla(\varepsilon \mathbf{u}) + (\nabla \varepsilon \mathbf{u})^T) = \mu_f \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial(\varepsilon u)}{\partial x} + \frac{\partial(\varepsilon u)}{\partial y} + \frac{\partial(\varepsilon u)}{\partial z} \right) \\ \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial(\varepsilon v)}{\partial x} + \frac{\partial(\varepsilon v)}{\partial y} + \frac{\partial(\varepsilon v)}{\partial z} \right) \\ \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial(\varepsilon w)}{\partial x} + \frac{\partial(\varepsilon w)}{\partial y} + \frac{\partial(\varepsilon w)}{\partial z} \right) \end{pmatrix} \quad (184)$$

のように書き下される。x成分の $\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial(\varepsilon u)}{\partial y} \right)$ および $\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial(\varepsilon v)}{\partial x} \right)$ はそれぞれ、

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial(\varepsilon u)}{\partial y} \right) \right|_{i+\frac{1}{2},j,k} &= \frac{\left. \frac{\partial(\varepsilon u)}{\partial y} \right|_{i+1,j,k} - \left. \frac{\partial(\varepsilon u)}{\partial y} \right|_{i,j,k}}{\Delta x} \\ &= \frac{(\varepsilon u)_{i+1,j+\frac{1}{2},k} - (\varepsilon u)_{i+1,j-\frac{1}{2},k}}{\Delta x \Delta y} - \frac{(\varepsilon u)_{i,j+\frac{1}{2},k} - (\varepsilon u)_{i,j-\frac{1}{2},k}}{\Delta x \Delta y} \end{aligned} \quad (185)$$

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial(\varepsilon v)}{\partial x} \right) \right|_{i+\frac{1}{2},j,k} &= \frac{\left. \frac{\partial(\varepsilon v)}{\partial x} \right|_{i+1,j,k} - \left. \frac{\partial(\varepsilon v)}{\partial x} \right|_{i,j,k}}{\Delta x} \\ &= \frac{(\varepsilon v)_{i+\frac{3}{2},j,k} - (\varepsilon v)_{i+\frac{1}{2},j,k}}{(\Delta x)^2} - \frac{(\varepsilon v)_{i+\frac{1}{2},j,k} - (\varepsilon v)_{i-\frac{1}{2},j,k}}{(\Delta x)^2} \end{aligned} \quad (186)$$

のように求められる。u, vの値は定義されていない点での値なので、周り4点の中心差分として求められる。例として $u_{i+1,j+\frac{1}{2},k}$ は

$$u_{i+1,j+\frac{1}{2},k} = \frac{u_{i+\frac{3}{2},j,k} + u_{i+\frac{1}{2},j,k} + u_{i+\frac{3}{2},j+1,k} + u_{i+\frac{1}{2},j+1,k}}{4} \quad (187)$$

として求められる。εについても同様に定義されていない点での値なので、周り2点の平均として求められる。他の項についても同様に求められる。移流項と同様に、粘性項についても拡散方程式の von-Neumann の数値安定性解析より、安定的に解析を行うことができる時間刻みに

$$\Delta t < \frac{1}{2} (\Delta x)^2 \frac{\rho}{\mu} \quad (188)$$

という条件が課される。

2.5. 壁面モデル

2.5.1. 符号付き距離関数による固相壁面モデル

(1) 球粒子の場合

DEM を産業用装置へ応用する際には、産業用装置の複雑形状壁面に対応することができる壁面モデルが必要である。DEM における壁面モデルでは、方程式によって壁面形状を与える手法[51,126,127]、仮想粒子群によって壁面を模擬する手法[128]、メッシュを用いる手法[129–131]などが使用されている。方程式を用いて壁面を表現する手法では、壁面力を正確かつ簡易に計算することが可能であるが、方程式によって与えることができる壁面形状にしか適用できず、複雑な壁面形状に応用することが困難であるという問題があった。仮想粒子を用いる手法では、粒子-粒子間接触力と全く同じアルゴリズムで粒子-壁面間力を計算できるという利点がある。しかし、壁面が大規模である場合には仮想粒子数が膨大な数となり、計算コストが増大するという問題があった。また、メッシュを用いる手法では、任意形状の壁面をメッシュの組み合わせによって模擬することができ、複雑形状壁面への応用が可能だが、粒子がメッシュを接触した際にその面・辺・頂点のうちどこで接触しているかによって計算の場合分けをしなければならずアルゴリズムが複雑になり、また複雑形状壁面を模擬する際に多くのメッシュを使用すると計算コストが増大するという課題があった。これらの課題を解決するため、符号付き距離関数 (Signed Distance Function, 以下 SDF と記す) を用いた壁面モデルが開発された[35]。この手法では、計算領域内のサンプリングポイントにおいて壁面からの最小距離に対して壁面の内外を示す符号をつけた距離関数を予め計算し、これらのサンプリング点の値を用いて壁面-粒子間力の計算を行う。これにより、SDF による壁面モデルでは計算コストが壁面の複雑さに依存せず、計算効率が高いという利点を持つ。また、SDF による壁面モデルでは壁面が移動・回転する場合にも SDF のサンプリング点の座標を変換すればよく、移動壁面に対しても簡単に応用することができる。SDF による壁面モデルを利用した DEM シミュレーションは、これまでに羽付き回転円筒容器[35]、2軸混練機[39]、リボンミキサー[36,37]、バッチミキサー[38]、三軸ロールミル[132]、金型充填装置[40,41]など様々な体系に応用されている。SDF は壁面からの距離に壁

面の内外によって符号がつけられた関数であり、

$$\phi(\mathbf{x}) = s(\mathbf{x})d(\mathbf{x}) \quad (189)$$

のように定義される。ここで、 $s(\mathbf{x})$ および $d(\mathbf{x})$ は、それぞれ、壁面の中であれば負、外であれば正となる符号関数および壁面との最小距離である。数値解析においては、計算領域を構造格子に分割し、それぞれの点で SDF を計算、保持する。本研究では粒子径の 0.25 倍の間隔で SDF を生成した。スカラー場である SDF の勾配は壁面の法線方向となるため、壁面の単位法線ベクトルは、

$$\mathbf{n} = \frac{\nabla\phi}{|\nabla\phi|} \quad (190)$$

と表される。例として、**図 22** に示すような点に粒子が存在した場合を考える。立方体の各頂点は SDF が定義されている点であり、各距離は格子一辺の長さに対する比率を示す。この時勾配 $\nabla\phi$ の x 成分は、各頂点での SDF の値を Trilinear 法で補間し、

$$\begin{aligned} \nabla\phi|_x = & (1-a)(1-b)(1-c)\phi_{i,j+1,k} + (1-a)(1-b)c\phi_{i,j+1,k+1} \\ & + (1-a)b(1-c)\phi_{i,j,k} + (1-a)bc\phi_{i,j,k+1} - a(1-b)(1-c)\phi_{i+1,j+1,k} \\ & - a(1-b)c\phi_{i+1,j+1,k+1} - ab(1-c)\phi_{i+1,j,k} - abc\phi_{i+1,j,k+1} \end{aligned} \quad (191)$$

と計算される。 y および z 成分も同様に計算できる。 $|\nabla\phi|$ は連続場では 1 となるため無視できるが、離散化された場合 $|\nabla\phi|$ は 1 とならないため計算する必要がある。求めた単位法線ベクトルを用い、壁面と粒子の距離を表す変位 δ_n^{SDF} は

$$\delta_n^{SDF} = \left(\frac{d}{2} - \phi\right) \cdot \frac{\nabla\phi}{|\nabla\phi|} \quad (192)$$

となる。 ϕ は**図 22**の位置では、

$$\begin{aligned} \phi = & (1-a)(1-b)(1-c)\phi_{i,j+1,k} + (1-a)(1-b)c\phi_{i,j+1,k+1} \\ & + (1-a)b(1-c)\phi_{i,j,k} + (1-a)bc\phi_{i,j,k+1} + a(1-b)(1-c)\phi_{i+1,j+1,k} \\ & + a(1-b)c\phi_{i+1,j+1,k+1} + ab(1-c)\phi_{i+1,j,k} - abc\phi_{i+1,j,k+1} \end{aligned} \quad (193)$$

と計算される。これを用いて壁面・粒子間の相互作用が計算される。法線方向の接触力を求めるため、まず粘弾性項を無視し、エネルギー保存が成立する場合を考える。この時法線方

向の接触力はエネルギーの勾配から求められ、

$$\mathbf{F}_{C_n} = \nabla \left(\frac{1}{2} k \left(\frac{d}{2} - \phi \right)^2 \right) = -k \left(\frac{d}{2} - \phi \right) \cdot \nabla \phi = -k \delta_n^{SDF} |\nabla \phi| \quad (194)$$

となる。従って、法線方向の接触力は粘弾性項を含めて

$$\mathbf{F}_{C_n} = -k \delta_n^{SDF} |\nabla \phi| - \eta_{wall} \mathbf{v}_{r_n} \quad (195)$$

と計算される。ばね定数は粒子間と同じ値を用い、粘弾性係数 η_{wall} は、

$$\eta_{wall} = -2 \ln e \sqrt{\frac{mk}{\pi^2 + (\ln e)^2}} \quad (196)$$

と計算される。水平方向の接触力は粒子間と同様に

$$\mathbf{F}_{C_t} = \begin{cases} -k \delta_t - \eta \mathbf{v}_{r_t} & (|\mathbf{F}_{C_t}| < \mu |\mathbf{F}_{C_n}|) \\ -\mu \mathbf{F}_{C_n} \frac{\mathbf{v}_{r_t}}{|\mathbf{v}_{r_t}|} & (|\mathbf{F}_{C_t}| \geq \mu |\mathbf{F}_{C_n}|) \end{cases} \quad (197)$$

のように計算される。

(2) 楕円体粒子の場合

(5 年以内に刊行予定)

2.5.2. 埋め込み境界法による気相壁面モデル

DEM-CFD 法による数値解析においても、DEM と同様に壁面モデルが重要である。DEM-CFD 法や CFD において用いられる典型的な壁面モデル化手法として、直交格子法、壁面適合格子法、非構造格子法がある(図 24)。直交格子法では、壁面形状に関わらず直交格子を用いて計算を行う。この手法は最も簡単に計算を行うことができるが、壁面の影響を正確に考慮するためには小さな計算格子を使用する必要がある。境界適合格子法では、壁面に沿った形状の格子を用いることにより、壁面の影響を正確に模擬することができる。しかし、境界適合格子法では壁面に沿った形状の計算格子を配置する計算を行わなければならない、特に移動壁面において格子の再構成を行うコストが高いという問題がある。同様に、非構造格子を用いる手法も格子分割に大きな計算コストが発生することから、移動壁面に対して

応用することが困難であるという問題がある。また、DEM-CFD 法において境界適合格子や非構造格子を用いる場合、流体格子が固体粒子より十分大きくなくればならないという局所体積平均法の条件を満たすように格子を生成しなければならず、流体単相流よりも更に格子生成が困難であるという問題があった。これらの問題から、近年流体や混相流の数値解析において直交格子法を応用する研究が活発に行われている。直交格子法を用いながら壁面の影響を正確に考慮するため、壁面を流体に埋め込む形で計算を行う Immersed Boundary 法（以下、IBM と記す）が研究されている。IBM は変形する壁面の影響を解析するために Peskin[133]によって提案された手法である。Peskin によって提案された Original IBM では壁面を Lagrangian な点の集合によって模擬し、それらの間に仮想ばねを想定することによって流体と壁面間の力を計算する。しかし、Original IB 法では Lagrangian 点付近の流速を用いて重みつき平均を行うため、壁面の解像度が低くなってしまいう問題があった。これに対し、様々な修正手法が提案されている。Immersed Interface Method[134]では、壁面をシャープに捉えるために壁面境界を含む格子に直接修正項を導入する。しかしこの手法は境界が移動する場合に急激な圧力の変化が生じる問題があった。Cut cell 法[135]では壁面を含む格子を壁面に沿った形に切って計算を行うことで、壁面をシャープに捉える。この手法では非常に精度よく壁面を模擬できるが、格子を切る方法が複雑であったり、壁面位置によっては非常に小さな格子が生じてしまったりするという問題があった。また、力の計算を行うのではなく、壁面を含む格子において流速そのものを強制する Direct forcing 法も提案されている。この手法では壁面を含む格子にのみ影響が与えられるため、壁面の影響をシャープに捉えることができる。Kajishima らによって提案された体積力型の埋め込み境界法[136]は壁面の体積分率のみによって強制速度を計算することが可能な手法である。体積力型の埋め込み境界法において使用される壁面の体積分率は、一般的には計算が困難であり、特に移動壁面に対してはメッシュと格子の共通部分の計算を都度行わなくてはならなかったが、Yao ら[40]は体積分率の計算に SDF のサンプリング点を用いることで、移動壁面に対しても体積分率を効率的に計算することができる Advanced DEM-CFD 法を開発した。これにより、DEM-CFD 法による固体-流体連成問題

において、移動壁面や複雑形状壁面を持つ体系の数値解析が可能になった。本研究で使用している FELMI においても Advanced DEM-CFD 法と同様に、Kajishima らによって提案された体積力型の埋め込み境界法を用いて壁面をモデル化し、壁面の占める体積分率を SDF によって計算した。この手法では、合成速度 \mathbf{u}_c は、壁面含有率 α を用いて

$$\mathbf{u}_c = \alpha \mathbf{u}_{wall} + (1 - \alpha) \mathbf{u} \quad (198)$$

のように求められる。ここで、 \mathbf{u}_{wall} は、壁面の速度を表す。体積力型の IBM では、まず合成速度 \mathbf{u}_c を流体速度の代わりに使用してナビエ・ストークス方程式を解き、その後速度場を次ステップの値に強制することを考える。すなわち、合成速度 \mathbf{u}_c に対するナビエ・ストークス方程式と連続の式を解くことで、仮の次ステップ速度 \mathbf{u}^{**} を算出する。

$$\rho \frac{\varepsilon^{n+1} \mathbf{u}^{**} - \varepsilon^n \mathbf{u}_c^n}{\Delta t} + \nabla \cdot (\varepsilon^n \rho \mathbf{u}_c^n \mathbf{u}_c^n) = -\varepsilon^{n+1} \nabla p^{n+1} + \mathbf{F}_s^n + \nabla \cdot (\varepsilon^n \boldsymbol{\tau}^n) + \varepsilon^n \rho \mathbf{g} \quad (199)$$

$$\frac{(\varepsilon^{n+1} - \varepsilon^n)}{\Delta t} + \nabla \cdot (\varepsilon^{n+1} \mathbf{u}_c^n) = 0 \quad (200)$$

次に、この仮速度が、壁面から受ける体積力 \mathbf{f}_{IB} によって次ステップ速度 \mathbf{u}_c^{n+1} に修正されることを考える。

$$\mathbf{u}_c^{n+1} = \mathbf{u}^{**} + \mathbf{f}_{IB} \frac{\Delta t}{\rho} \quad (201)$$

ここで、この体積力 \mathbf{f}_{IB} について考えると、完全に壁面外である格子 ($\alpha^{n+1} = 0$) については $\mathbf{f}_{IB} = \mathbf{0}$ である。また、完全に壁面の内部に存在する格子 ($\alpha^{n+1} = 1$) においては、 $\mathbf{u}_c^{n+1} = \mathbf{u}_w^{n+1}$ となることから、 $\mathbf{f}_{IB} = \frac{\rho}{\Delta t} (\mathbf{u}_w^{n+1} - \mathbf{u}^{**})$ である。したがって、 \mathbf{f}_{IB} はこれらの値を α について線形補間した式

$$\mathbf{f}_{IB} = \frac{\alpha^{n+1} \rho (\mathbf{u}_{wall}^{n+1} - \mathbf{u}^{**})}{\Delta t} \quad (202)$$

によって近似的に計算できる。しかし、 α^{n+1} や壁面速度 \mathbf{u}_{wall}^{n+1} は未知数であり、陽に計算ができないため、近似的に

$$\mathbf{f}_{IB} = \frac{\alpha^n \rho (\mathbf{u}_{wall}^n - \mathbf{u}^{**})}{\Delta t} \quad (203)$$

として計算を行う。すると、最終的に流速の修正式は

$$\mathbf{u}_c^{n+1} = \mathbf{u}^{**} + \frac{\alpha^n \rho (\mathbf{u}_{wall}^n - \mathbf{u}^{**}) \Delta t}{\rho} = (1 - \alpha^n) \mathbf{u}^{**} + \alpha^n \mathbf{u}_{wall}^n \quad (204)$$

となる。ここで、仮の次ステップ速度 \mathbf{u}^{**} を求めたナビエ・ストークス方程式(式(220))およびを式(223)によって合成速度の式に戻すことを考えると、以下のようになる。

$$\begin{aligned} \rho \frac{\varepsilon^{n+1} \left(\mathbf{u}_c^{n+1} - \mathbf{f}_{IB} \frac{\Delta t}{\rho} \right) - \varepsilon^n \mathbf{u}_c^n}{\Delta t} + \nabla \cdot (\varepsilon^n \rho \mathbf{u}_c^n \mathbf{u}_c^n) \\ = -\varepsilon^{n+1} \nabla p^{n+1} + \mathbf{F}_s^n + \nabla \cdot (\varepsilon^n \boldsymbol{\tau}^n) + \varepsilon^n \rho \mathbf{g} \end{aligned} \quad (205)$$

変形すると、

$$\begin{aligned} \rho \frac{\varepsilon^{n+1} \mathbf{u}_c^{n+1} - \varepsilon^n \mathbf{u}_c^n}{\Delta t} + \nabla \cdot (\varepsilon^n \rho \mathbf{u}_c^n \mathbf{u}_c^n) \\ = -\varepsilon^{n+1} \nabla p^{n+1} + \mathbf{F}_s^n + \nabla \cdot (\varepsilon^n \boldsymbol{\tau}^n) + \varepsilon^n \rho \mathbf{g} + \varepsilon^{n+1} \mathbf{f}_{IB} \end{aligned} \quad (206)$$

となる。これはすなわち、体積力型の埋め込み境界法を用いて壁面の影響を計算することは、支配方程式に対して壁面力 \mathbf{f}_{IB} の項を追加していることと同等であるということを示している。

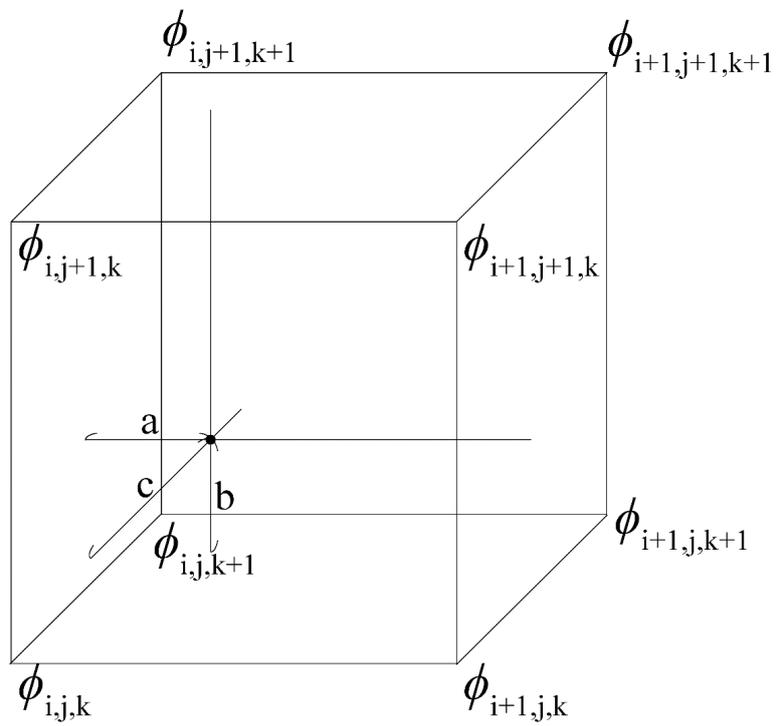
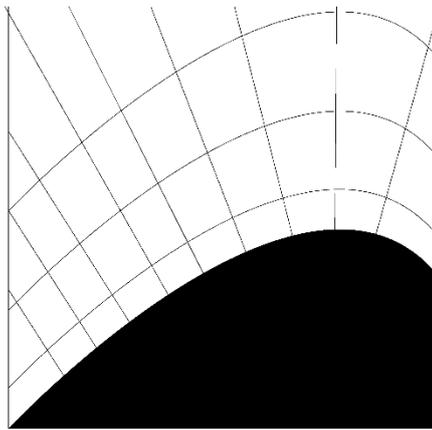
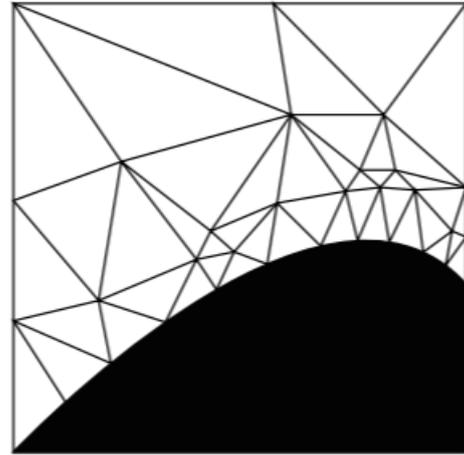


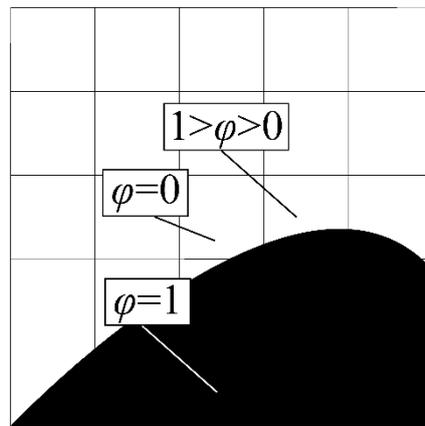
図 20 SDF の勾配および値の補完計算例



a) 境界適合格子



b) 非構造格子法



c) 直交格子法

図 21 境界適合格子、アダプティブメッシュ法、および直交格子法概念図

2.6. 混合度の評価

本研究では混合状態を解析するために Lacey's mixing index[18]を用いた。この指標では混合状態が 0 から 1 の範囲の無次元数によって評価される。0 は完全に分離された状態、1 は完全にランダムな混合状態を示す。Lacey's mixing index M は以下のように計算される。

$$M = \frac{\sigma_0^2 - \sigma^2}{\sigma_0^2 - \sigma_r^2} \quad (207)$$

ここで、 σ^2 は分散を示す。下付き文字 0 および r は、それぞれ、完全分離状態および完全にランダムな混合状態を示す。Lacey's mixing index では粒子を Type A および Type B の 2 種類に分け、Type A 粒子を対象粒子とする。このとき、分離状態の分散 σ_0^2 は以下のよう
に求められる。

$$\sigma_0^2 = \frac{N_a N_b}{(N_a + N_b)^2} \quad (208)$$

ここで、 N_a および N_b は、それぞれ、A タイプのおよび B タイプの粒子数を示す。統計学的な考察から、完全にランダムな混合状態の分散 σ_r^2 は次のように推定される。

$$\sigma_r^2 = \frac{\sigma_0^2}{N_{max}} \quad (209)$$

ここで、 N_{max} はサンプリングセルに入り得る最大の粒子数を示す。現在の分散 σ^2 は、以下のように求められる。

$$\sigma^2 = \frac{1}{N_{cell}} \sum (\chi_i - \bar{\chi})^2 \quad (210)$$

ここで、 N_{cell} 、 χ_i 、および $\bar{\chi}$ は、それぞれ、サンプリングセルの総数、サンプリングセル内の対象粒子割合、および対象粒子割合の平均値である。 χ_i は以下のように算出される。

$$\chi_i = \frac{n_{i,a}}{n_{i,a} + n_{i,b}} \quad (211)$$

ここで、 $n_{i,a}$ および $n_{i,b}$ は、それぞれ、 i 番目のサンプリングセル内のタイプ A 粒子およびタイプ B 粒子の粒子数である。 $\bar{\chi}$ は次のように計算される。

$$\bar{\chi} = \frac{N_a}{N_a + N_b} \quad (212)$$

本研究では混合挙動をより詳細に解析するために granular temperature を使用した。granular temperature は粒子速度の分散である。高い granular temperature は粒子の拡散効果が高いことを示し、逆も然りである。 i 番目のサンプリングセルにおける granular temperature θ_i は以下のように計算される。

$$\theta_i = \frac{1}{n_i} \sum (\mathbf{v}_{i,j} - \bar{\mathbf{v}}_i)^2 \quad (213)$$

ここで、 n_i 、 $v_{i,j}$ 、 \bar{v}_i は、それぞれ、サンプリングセル内の粒子数、粒子の速度、およびサンプリングセル内の平均粒子速度である。過去の研究[137]から、本研究では Lacey's mixing index および granular temperature のサンプリングセルサイズを $4d_v$ に設定した。 $d_v = (abc)^{\frac{1}{3}}$ は粒子の等価直径である。

3. 大物体を伴う固気混相流数値解析

(5年以内に刊行予定)

4. DEM 粗視化モデルにおける液架橋力モデルの 構築

(5年以内に刊行予定)

5. 移動壁面を伴う楕円体粒子による固気混相

流シミュレーション

(5年以内に刊行予定)

6. 結言

本研究では、固体-流体連成問題のマルチスケールシミュレーションに向けた数値解析モデルの開発を目的として、大物体を伴う固体-流体混相流の数値解析手法、大規模湿潤粉体のための液架橋粗視化モデル、および移動壁面を伴う非球形粒子による固体-流体混相流の数値解析手法を開発した。これにより、固体-流体連成問題におけるマルチスケールシミュレーションにおける重要な問題を解決することができ、産業用プロセスなどの大規模な体系においてマルチスケールシミュレーションによる現象の詳細な把握を行うことが可能になることが期待される。以下で各章において得られた結論について述べ、最後に今後の展望について述べる。

6.1. 大物体を伴う固気混相流

(5年以内に刊行予定)

6.2. 液架橋粗視化モデル

(5年以内に刊行予定)

6.3. 移動壁面を伴う楕円体粒子による固気混相流

(5年以内に刊行予定)

6.4. まとめおよび今後の展望

以上において、本研究では DEM-CFD-IBM 大物体モデル、粗視化 DEM の液架橋力モデル、および移動壁面を伴う非球形粒子固体-流体混相流数値解析モデルの開発を行った。またそれぞれにおいて実験および既存の数値解析手法による数値解析結果と比較することで妥当性の確認を行った。これらの結果から、本研究によって固体-流体混相流体系におけるマルチスケールシミュレーションの既存問題を解決することができた。今後の展望として、

本研究で開発した手法による数値解析モデルを用い、ミクロな数値解析とマクロな数値解析を精密に組み合わせることで産業用廃棄物のための流動層型焼却炉などの大規模かつ工業的に重要なプロセスにおいて内部挙動を正確に模擬することができるマルチスケールシミュレーション手法を開発し、産業用プロセスの設計最適化や運用改善に応用していきたい。

参考文献

- [1] K.C. Link, E.U. Schlünder, Fluidized bed spray granulation Investigation of the coating process on a single sphere, *Chem. Eng. Process. Process Intensif.* 36 (1997) 443–457. doi:10.1016/s0255-2701(97)00022-6.
- [2] M. Zielinska, M. Markowski, Drying behavior of carrots dried in a spout-fluidized bed dryer, *Dry. Technol.* 25 (2007) 261–270. doi:10.1080/07373930601161138.
- [3] S. Soponronnarit, A. Pongtornkulpanich, S. Prachayawarakorn, Drying characteristics of corn in fluidized bed dryer, *Dry. Technol.* 15 (1997) 1603–1615. doi:10.1080/07373939708917311.
- [4] G. Chaplin, T. Pugsley, C. Winters, The S-statistic as an early warning of entrainment in a fluidized bed dryer containing pharmaceutical granule, *Powder Technol.* 149 (2005) 148–156. doi:10.1016/j.powtec.2004.11.002.
- [5] L. Fries, S. Antonyuk, S. Heinrich, S. Palzer, DEM-CFD modeling of a fluidized bed spray granulator, *Chem. Eng. Sci.* 66 (2011) 2340–2355. doi:10.1016/j.ces.2011.02.038.
- [6] M. Hemati, R. Cherif, K. Saleh, V. Pont, Fluidized bed coating and granulation: Influence of process-related variables and physicochemical properties on the growth kinetics, *Powder Technol.* 130 (2003) 18–34. doi:10.1016/S0032-5910(02)00221-8.
- [7] A. Tsutsumi, S. Nakamoto, T. Mineo, K. Yoshida, A novel fluidized-bed coating of fine particles by rapid expansion of supercritical fluid solutions, *Powder Technol.* 85 (1995) 275–278. doi:10.1016/0032-5910(95)03021-X.
- [8] G.K. Jayatunga, B.M.W.P.K. Amarasinghe, Drying kinetics, quality and moisture diffusivity of spouted bed dried Sri Lankan black pepper, *J. Food Eng.* 263 (2019) 38–45. doi:10.1016/j.jfoodeng.2019.05.023.
- [9] Y.M. da Silva Veloso, M.M. de Almeida, O.L.S. de Alsina, M.L. Passos, A.S. Mujumdar, M.S. Leite, Hybrid phenomenological/ANN-PSO modelling of a deformable material in

- spouted bed drying process, *Powder Technol.* 366 (2020) 185–196.
doi:10.1016/j.powtec.2019.12.047.
- [10] W. Gu, H. Li, S. Liu, 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.* 354 (2019) 211–217. doi:10.1016/j.powtec.2019.05.055.
- [11] B. Liu, X. Zhang, L. Wang, H. Hong, Fluidization of non-spherical particles: Sphericity, Zingg factor and other fluidization parameters, *Particuology.* 6 (2008) 125–129. doi:10.1016/j.cpart.2007.07.005.
- [12] Z.Y. Zhou, D. Pinson, R.P. Zou, A.B. Yu, Discrete particle simulation of gas fluidization of ellipsoidal particles, *Chem. Eng. Sci.* 66 (2011) 6128–6145. doi:10.1016/j.ces.2011.08.041.
- [13] T. Kobayashi, T. Tanaka, N. Shimada, T. Kawaguchi, DEM-CFD analysis of fluidization behavior of Geldart Group A particles using a dynamic adhesion force model, *Powder Technol.* 248 (2013) 143–152. doi:10.1016/j.powtec.2013.02.028.
- [14] M. Liu, R. Liu, Y. Wen, B. Liu, Y. Shao, Foundation item: National Natural Science Foundation of China(21306097), 2014.
- [15] M. Liu, Coating Technology of Nuclear Fuel Kernels: A Multiscale View, in: *Mod. Surf. Eng. Treat.*, InTech, 2013. doi:10.5772/55651.
- [16] Y. Zhang, G. Huang, G. Su, Hydrodynamic behavior of silicon particles with a wide size distribution in a draft tube spout-fluid bed, *Chem. Eng. J.* 328 (2017) 645–653. doi:10.1016/j.cej.2017.07.071.
- [17] B. Ren, W. Zhong, B. Jin, Y. Shao, Z. Yuan, Numerical simulation on the mixing behavior of corn-shaped particles in a spouted bed, *Powder Technol.* 234 (2013) 58–66. doi:10.1016/j.powtec.2012.09.024.
- [18] P.M.C. Lacey, Developments in the theory of particle mixing, *J. Appl. Chem.* 4 (2007) 257–268. doi:10.1002/jctb.5010040504.

- [19] A. Penn, C.M. Boyce, N. Conzelmann, G. Bezinge, K.P. Pruessmann, C.R. Müller, Real-time magnetic resonance imaging of fluidized beds with internals, *Chem. Eng. Sci.* 198 (2019) 117–123. doi:10.1016/j.ces.2018.12.041.
- [20] K. Uchida, K. Okamoto, Measurement technique on the diffusion coefficient of powder flow in a screw feeder by X-ray visualization, *Powder Technol.* 187 (2008) 138–145. doi:10.1016/j.powtec.2008.02.005.
- [21] S. Liu, W.Q. Yang, H. Wang, G. Yan, Z. Pan, Flow pattern identification of fluidized beds using ECT, *J. Therm. Sci.* 10 (2001) 176–181. doi:10.1007/s11630-001-0062-1.
- [22] M.S. van Buijtenen, W.J. van Dijk, N.G. Deen, J.A.M. Kuipers, T. Leadbeater, D.J. Parker, Numerical and experimental study on multiple-spout fluidized beds, *Chem. Eng. Sci.* 66 (2011) 2368–2376. doi:10.1016/j.ces.2011.02.055.
- [23] F. Depypere, J.G. Pieters, K. Dewettinck, PEPT visualisation of particle motion in a tapered fluidised bed coater, *J. Food Eng.* 93 (2009) 324–336. doi:10.1016/j.jfoodeng.2009.01.042.
- [24] D. Gidaspow, *Multiphase Flow and Fluidization*, 1st ed., Elsevier, 1994. doi:10.1016/C2009-0-21244-X.
- [25] L. Lu, J. Xu, W. Ge, Y. Yue, X. Liu, J. Li, EMMS-based discrete particle method (EMMS-DPM) for simulation of gas-solid flows, *Chem. Eng. Sci.* 120 (2014) 67–87. doi:10.1016/j.ces.2014.08.004.
- [26] A. Stroh, A. Daikeler, M. Nikku, J. May, F. Alobaid, M. von Bohnstein, J. Ströhle, B. Epple, Coarse grain 3D CFD-DEM simulation and validation with capacitance probe measurements in a circulating fluidized bed, *Chem. Eng. Sci.* 196 (2019) 37–53. doi:10.1016/j.ces.2018.11.052.
- [27] S. Koshizuka, Y. Oka, Moving-Particle Semi-Implicit Method for Fragmentation of Incompressible Fluid, *Nucl. Sci. Eng.* 123 (1996) 421–434. doi:10.13182/NSE96-A24205.
- [28] L.B. Lucy, A numerical approach to the testing of the fission hypothesis, *Astron. J.* 82

- (1977) 1013. doi:10.1086/112164.
- [29] M. Ihmsen, A. Wahl, M. Teschner, A Lagrangian framework for simulating granular material with high detail, *Comput. Graph.* 37 (2013) 800–808. doi:10.1016/j.cag.2013.04.010.
- [30] C.T. Crowe, J.D. Schwarzkopf, M. Sommerfeld, Y. Tsuji, *Multiphase Flows with Droplets and Particles*, CRC Press, 2011. doi:10.1201/b11103.
- [31] J. Ouyang, A.B. Yu, R.H. Pan, Simulation of gas-solid flow in vertical pipe by hard-sphere model, *Part. Sci. Technol.* 23 (2005) 47–61. doi:10.1080/02726350590902479.
- [32] H. Kan, H. Nakamura, S. Watano, Numerical simulation of particle-particle adhesion by dynamic liquid bridge, *Chem. Eng. Sci.* 138 (2015) 607–615. doi:10.1016/j.ces.2015.08.043.
- [33] A. Munjiza, *The combined finite-discrete element method*, John Wiley & Sons, Ltd, Chichester, UK, 2004. doi:10.1002/0470020180.
- [34] P.A. Cundall, O.D.L. Strack, A discrete numerical model for granular assemblies, *Geotechnique*. 29 (1979) 47–65. doi:10.1680/geot.1979.29.1.47.
- [35] Y. Shigeto, M. Sakai, Arbitrary-shaped wall boundary modeling based on signed distance functions for granular flow simulations, *Chem. Eng. J.* 231 (2013) 464–476. doi:10.1016/j.cej.2013.07.073.
- [36] Y. Tsugeno, M. Sakai, S. Yamazaki, T. Nishinomiya, DEM simulation for optimal design of powder mixing in a ribbon mixer, *Adv. Powder Technol.* 32 (2021) 1735–1749. doi:10.1016/j.appt.2021.03.026.
- [37] G. Basinskas, M. Sakai, Numerical study of the mixing efficiency of a ribbon mixer using the discrete element method, *Powder Technol.* 287 (2016) 380–394. doi:10.1016/j.powtec.2015.10.017.
- [38] G. Basinskas, M. Sakai, Numerical study of the mixing efficiency of a batch mixer using the discrete element method, *Powder Technol.* 301 (2016) 815–829.

doi:10.1016/j.powtec.2015.10.017.

- [39] M. Sakai, Y. Shigeto, G. Basinskas, A. Hosokawa, M. Fuji, Discrete element simulation for the evaluation of solid mixing in an industrial blender, *Chem. Eng. J.* 279 (2015) 821–839. doi:10.1016/j.cej.2015.04.130.
- [40] H. Yao, Y. Mori, K. Takabatake, X. Sun, M. Sakai, Numerical investigation on the influence of air flow in a die filling process, *J. Taiwan Inst. Chem. Eng.* 90 (2018) 9–17. doi:10.1016/j.jtice.2017.11.031.
- [41] Y. Tsunazawa, Y. Shigeto, C. Tokoro, M. Sakai, Numerical simulation of industrial die filling using the discrete element method, *Chem. Eng. Sci.* 138 (2015) 791–809. doi:10.1016/j.ces.2015.09.014.
- [42] Y. Tsuji, T. Tanaka, T. Ishida, Lagrangian numerical simulation of plug flow of cohesionless particles in a horizontal pipe, *Powder Technol.* 71 (1992) 239–250. doi:10.1016/0032-5910(92)88030-L.
- [43] Y. Kaneko, T. Shiojima, M. Horio, DEM simulation of fluidized beds for gas-phase olefin polymerization, *Chem. Eng. Sci.* 54 (1999) 5809–5821. doi:10.1016/S0009-2509(99)00153-0.
- [44] D. Nishiura, M. Furuichi, H. Sakaguchi, Real-scale DEM simulations on the fault evolution process observed in sandbox experiments, *J. Soc. Powder Technol. Japan.* 56 (2019) 203–210. doi:10.4164/sptj.56.203.
- [45] N. Govender, R.K. Rajamani, S. Kok, D.N. Wilke, Discrete element simulation of mill charge in 3D using the BLAZE-DEM GPU framework, *Miner. Eng.* 79 (2015) 152–168. doi:10.1016/j.mineng.2015.05.010.
- [46] M. Sakai, M. Abe, Y. Shigeto, S. Mizutani, H. Takahashi, A. Viré, J.R. Percival, J. Xiang, C.C. Pain, Verification and validation of a coarse grain model of the DEM in a bubbling fluidized bed, *Chem. Eng. J.* 244 (2014) 33–43. doi:10.1016/j.cej.2014.01.029.
- [47] Y. Mori, C.Y.C.-Y. Wu, M. Sakai, Validation study on a scaling law model of the DEM

- in industrial gas-solid flows, *Powder Technol.* 343 (2019) 101–112. doi:10.1016/j.powtec.2018.11.015.
- [48] P.M. Widartiningsih, Y. Mori, K. Takabatake, C.Y. Wu, K. Yokoi, A. Yamaguchi, M. Sakai, Coarse graining DEM simulations of a powder die-filling system, *Powder Technol.* 371 (2020) 83–95. doi:10.1016/j.powtec.2020.05.063.
- [49] Y. Mori, M. Sakai, M. Taira, R. Samashima, Application of an Euler-Lagrange Method to an Industrial Incinerator, *J. Soc. Powder Technol. Japan.* 55 (2018) 262–268. doi:10.4164/sptj.55.262.
- [50] K.W. Chu, A.B. Yu, Numerical simulation of complex particle-fluid flows, *Powder Technol.* 179 (2008) 104–114. doi:10.1016/j.powtec.2007.06.017.
- [51] M. Sakai, S. Koshizuka, Large-scale discrete element modeling in pneumatic conveying, *Chem. Eng. Sci.* 64 (2009) 533–539. doi:10.1016/j.ces.2008.10.003.
- [52] S. Kuang, M. Zhou, A. Yu, CFD-DEM modelling and simulation of pneumatic conveying: A review, *Powder Technol.* 365 (2020) 186–207. doi:10.1016/j.powtec.2019.02.011.
- [53] X.T. Li, J.R. Grace, C.J. Lim, A.P. Watkinson, H.P. Chen, J.R. Kim, Biomass gasification in a circulating fluidized bed, *Biomass and Bioenergy.* 26 (2004) 171–193. doi:10.1016/S0961-9534(03)00084-9.
- [54] M. Fang, K. Luo, S. Yang, K. Zhang, J. Fan, LES-DEM investigation of gas-solid flow dynamics in an internally circulating fluidized bed, *Chem. Eng. Sci.* 101 (2013) 213–227. doi:10.1016/j.ces.2013.06.038.
- [55] N. Gui, J.R. Fan, K. Luo, DEM-LES study of 3-D bubbling fluidized bed with immersed tubes, *Chem. Eng. Sci.* 63 (2008) 3654–3663. doi:10.1016/j.ces.2008.04.038.
- [56] K. Chu, J. Chen, A. Yu, Applicability of a coarse-grained CFD-DEM model on dense medium cyclone, *Miner. Eng.* 90 (2016) 43–54. doi:10.1016/j.mineng.2016.01.020.
- [57] K.W. Chu, B. Wang, D.L. Xu, Y.X. Chen, A.B. Yu, CFD – DEM simulation of the gas – solid flow in a cyclone separator, *Chem. Eng. Sci.* 66 (2011) 834–847.

doi:10.1016/j.ces.2010.11.026.

- [58] K. Washino, E.L. Chan, T. Matsumoto, S. Hashino, T. Tsuji, T. Tanaka, Normal viscous force of pendular liquid bridge between two relatively moving particles, *J. Colloid Interface Sci.* 494 (2017) 255–265. doi:10.1016/j.jcis.2017.01.088.
- [59] H. Usono, K. Uruga, T. Tsukada, M. Sakai, Numerical study on rheological properties for dispersed and aggregated particle systems, *Powder Technol.* 361 (2020) 203–209. doi:10.1016/j.powtec.2019.09.041.
- [60] H. Usono, M. Sakai, A numerical study on dynamic inertial focusing of microparticles in a confined flow, *Granul. Matter.* 19 (2017) 79. doi:10.1007/s10035-017-0758-x.
- [61] Y. Zhang, Q. Chang, W. Ge, Coupling DPM with DNS for dynamic interphase force evaluation, *Chem. Eng. Sci.* 231 (2021) 116238. doi:10.1016/j.ces.2020.116238.
- [62] Y. Tang, Y.M. Lau, N.G. Deen, E.A.J.F. Peters, J.A.M. Kuipers, Direct numerical simulations and experiments of a pseudo-2D gas-fluidized bed, *Chem. Eng. Sci.* 143 (2016) 166–180. doi:10.1016/j.ces.2015.12.026.
- [63] X. Sun, M.M.T. Sakai, M.M.T. Sakai, Y. Yamada, A Lagrangian-Lagrangian coupled method for three-dimensional solid-liquid flows involving free surfaces in a rotating cylindrical tank, *Chem. Eng. J.* 246 (2014) 122–141. doi:10.1016/j.cej.2014.02.049.
- [64] Y. Yamada, M. Sakai, Lagrangian-Lagrangian simulations of solid-liquid flows in a bead mill, *Powder Technol.* 239 (2013) 105–114. doi:10.1016/j.powtec.2013.01.030.
- [65] M. Sakai, Y. Shigeto, X. Sun, T. Aoki, T. Saito, J. Xiong, S. Koshizuka, Lagrangian–Lagrangian modeling for a solid–liquid flow in a cylindrical tank, *Chem. Eng. J.* 200–202 (2012) 663–672. doi:10.1016/j.cej.2012.06.080.
- [66] A. V Potapov, M.L. Hunt, C.S. Campbell, Liquid-solid flows using smoothed particle hydrodynamics and the discrete element method, *Powder Technol.* 116 (2001) 204–213. doi:10.1016/S0032-5910(00)00395-8.
- [67] X. Sun, M. Sakai, Y. Yamada, Three-dimensional simulation of a solid–liquid flow by

- the DEM–SPH method, *J. Comput. Phys.* 248 (2013) 147–176. doi:10.1016/j.jcp.2013.04.019.
- [68] G. Duan, S. Koshizuka, A. Yamaji, B. Chen, X. Li, T. Tamai, An accurate and stable multiphase moving particle semi-implicit method based on a corrective matrix for all particle interaction models, *Int. J. Numer. Methods Eng.* 115 (2018) 1287–1314. doi:10.1002/nme.5844.
- [69] T. Tamai, S. Koshizuka, Least squares moving particle semi-implicit method: An arbitrary high order accurate meshfree Lagrangian approach for incompressible flow with free surfaces, *Comput. Part. Mech.* 1 (2014) 277–305. doi:10.1007/s40571-014-0027-2.
- [70] T.B. Anderson, R. Jackson, Fluid Mechanical Description of Fluidized Beds. Equations of Motion, *Ind. Eng. Chem. Fundam.* 6 (1967) 527–539. doi:10.1021/i160024a007.
- [71] Y. Tsuji, T. Kawaguchi, T. Tanaka, Discrete particle simulation of two-dimensional fluidized bed, *Powder Technol.* 77 (1993) 79–87. doi:10.1016/0032-5910(93)85010-7.
- [72] S. Ergun, Fluid Flow through Packed Columns, *Chem. Eng. Prog.* 48 (1952) 89–94.
- [73] H. Xu, W. Zhong, Z. Yuan, A.B. Yu, CFD-DEM study on cohesive particles in a spouted bed, *Powder Technol.* 314 (2017) 377–386. doi:10.1016/j.powtec.2016.09.006.
- [74] S.B. Kuang, K. Li, R.P. Zou, R.H. Pan, A.B. Yu, Application of periodic boundary conditions to CFD-DEM simulation of gas-solid flow in pneumatic conveying, *Chem. Eng. Sci.* 93 (2013) 214–228. doi:10.1016/j.ces.2013.01.055.
- [75] E.N. Nwose, C. Pei, C.-Y. Wu, Modelling die filling with charged particles using DEM/CFD, *Particuology.* 10 (2012) 229–235. doi:10.1016/j.partic.2011.11.010.
- [76] J. Lindner, K. Menzel, H. Nirschl, Simulation of magnetic suspensions for HGMS using CFD, FEM and DEM modeling, *Comput. Chem. Eng.* 54 (2013) 111–121. doi:10.1016/j.compchemeng.2013.03.012.
- [77] V.S. Sutkar, N.G. Deen, A. V. Patil, V. Salikov, S. Antonyuk, S. Heinrich, J.A.M.

- Kuipers, CFD–DEM model for coupled heat and mass transfer in a spout fluidized bed with liquid injection, *Chem. Eng. J.* 288 (2016) 185–197. doi:10.1016/j.cej.2015.11.044.
- [78] T. Kajishima, S. Takiguchi, H. Hamasaki, Y. Miyake, Turbulence structure of particle-laden flow in a vertical plane channel due to vortex shedding, *JSME Int. Journal, Ser. B Fluids Therm. Eng.* 44 (2001) 526–535. doi:10.1299/jsmeb.44.526.
- [79] Y. Mori, M. Sakai, Development of a robust Eulerian–Lagrangian model for the simulation of an industrial solid–fluid system, *Chem. Eng. J.* 406 (2021) 126841. doi:10.1016/j.cej.2020.126841.
- [80] F. Fotovat, J. Chaouki, J. Bergthorson, The effect of biomass particles on the gas distribution and dilute phase characteristics of sand-biomass mixtures fluidized in the bubbling regime, *Chem. Eng. Sci.* 102 (2013) 129–138. doi:10.1016/j.ces.2013.07.042.
- [81] R.B. Bates, A.F. Ghoniem, W.S. Jablonski, D.L. Carpenter, C. Altantzis, A. Garg, J.L. Barton, R. Chen, R.P. Field, Steam-air blown bubbling fluidized bed biomass gasification (BFBBG): Multi-scale models and experimental validation, *AIChE J.* 63 (2017) 1543–1565. doi:10.1002/aic.15666.
- [82] W. Wang, J. Li, Simulation of gas-solid two-phase flow by a multi-scale CFD approach of the EMMS model to the sub-grid level, *Chem. Eng. Sci.* 62 (2007) 208–231. doi:10.1016/j.ces.2006.08.017.
- [83] B. Peters, M. Baniasadi, M. Baniasadi, X. Besseron, A.E. Donoso, M. Mohseni, G. Pozzetti, XDEM multi-physics and multi-scale simulation technology: Review of DEM–CFD coupling, methodology and engineering applications, *Particuology*. 44 (2019) 176–193. doi:10.1016/j.partic.2018.04.005.
- [84] H. Hertz, On the Contact of Elastic Solids, 1881, *Misc. Pap. - Prim. Source Ed.* 92 (1896) 146–162.
- [85] C.Y. Wen, Y.H. Yu, a Generalized Method for Predicting the Minimum Fluidization Velocity.Pdf, *AIChE J.* 12 (1966) 610–612.

- [86] P. Zhao, J. Xu, W. Ge, J. Wang, A CFD-DEM-IBM method for Cartesian grid simulation of gas-solid flow in complex geometries, *Chem. Eng. J.* 389 (2020) 124343. doi:10.1016/j.cej.2020.124343.
- [87] D.A. Clarke, A.J. Sederman, L.F. Gladden, D.J. Holland, Investigation of Void Fraction Schemes for Use with CFD-DEM Simulations of Fluidized Beds, *Ind. Eng. Chem. Res.* 57 (2018) 3002–3013. doi:10.1021/acs.iecr.7b04638.
- [88] K. Takabatake, Y. Mori, J.G.J.G. Khinast, M. Sakai, Numerical investigation of a coarse-grain discrete element method in solid mixing in a spouted bed, *Chem. Eng. J.* 346 (2018) 416–426. doi:10.1016/j.cej.2018.04.015.
- [89] X. Sun, M. Sakai, Numerical simulation of two-phase flows in complex geometries by using the volume-of-fluid/immersed-boundary method, *Chem. Eng. Sci.* 139 (2016) 221–240. doi:10.1016/j.ces.2015.09.031.
- [90] Y. Tsunazawa, D. Fujihashi, S. Fukui, M. Sakai, C. Tokoro, Contact force model including the liquid-bridge force for wet-particle simulation using the discrete element method, *Adv. Powder Technol.* 27 (2016) 652–660. doi:10.1016/j.appt.2016.02.021.
- [91] N. Lu, T.-H. Kim, S. Sture, W.J. Likos, Tensile Strength of Unsaturated Sand, *J. Eng. Mech.* 135 (2009) 1410–1419. doi:10.1061/(ASCE)EM.1943-7889.0000054.
- [92] B. Ken, *Surface Evolver*, SpringerReference. (2011). doi:10.1007/SpringerReference_67732.
- [93] J.N. Israelachvili, *Intermolecular and Surface Forces*, Academic Press, 2011.
- [94] Y.I. Rabinovich, M.S. Esayanur, B.M. Moudgil, Capillary forces between two spheres with a fixed volume liquid bridge: Theory and experiment, *Langmuir.* 21 (2005) 10992–10997.
- [95] X. Sun, M. Sakai, A liquid bridge model for spherical particles applicable to asymmetric configurations, *Chem. Eng. Sci.* 182 (2018) 28–43. doi:10.1016/j.ces.2018.02.034.
- [96] T. Mikami, H. Kamiya, M. Horio, Numerical simulation of cohesive powder behavior in

- a fluidized bed, *Chem. Eng. Sci.* 53 (1998) 1927–1940. doi:10.1016/S0009-2509(97)00325-4.
- [97] G. Lian, C. Thornton, M.J. Adams, A theoretical study of the liquid bridge forces between two rigid spherical bodies, *J. Colloid Interface Sci.* 161 (1993) 138–147. doi:10.1006/jcis.1993.1452.
- [98] O. Pitois, P. Moucheront, X. Chateau, Rupture energy of a pendular liquid bridge, *Eur. Phys. J. B.* 23 (2001) 79–86. doi:10.1007/s100510170084.
- [99] K. Washino, C.-H. Hsu, T. Kawaguchi, Y. Tsuji, Similarity model for DEM simulation of fluidized bed, *J. Soc. Powder Technol. Japan.* 44 (2007) 198–205. doi:10.4164/sptj.44.198.
- [100] H. Ma, Y. Zhao, Investigating the fluidization of disk-like particles in a fluidized bed using CFD-DEM simulation, *Adv. Powder Technol.* 29 (2018) 2380–2393. doi:10.1016/j.appt.2018.06.017.
- [101] H. Ma, Y. Zhao, Y. Cheng, CFD-DEM modeling of rod-like particles in a fluidized bed with complex geometry, *Powder Technol.* 344 (2019) 673–683. doi:10.1016/j.powtec.2018.12.066.
- [102] Z.Y. Zhou, R.P. Zou, D. Pinson, A.B. Yu, Angle of repose and stress distribution of sandpiles formed with ellipsoidal particles, *Granul. Matter.* 16 (2014) 695–709. doi:10.1007/s10035-014-0522-4.
- [103] L. Vu-Quoc, X. Zhang, O.. Walton, A 3-D discrete-element method for dry granular flows of ellipsoidal particles, *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.* 187 (2000) 483–528. doi:10.1016/S0045-7825(99)00337-0.
- [104] S. Shrestha, S. Kuang, A. Yu, Z. Zhou, Particle shape effect on bubble dynamics in central air jet pseudo-2D fluidized beds: A CFD-DEM study, *Chem. Eng. Sci.* 201 (2019) 448–466. doi:10.1016/j.ces.2019.02.030.
- [105] J.M. Ting, A robust algorithm for ellipse-based discrete element modelling of granular

- materials, *Comput. Geotech.* 13 (1992) 175–186. doi:10.1016/0266-352X(92)90003-C.
- [106] X. García, D. Pavlidis, G.J. Gorman, J.L.M.A. Gomes, M.D. Piggott, E. Aristodemou, J. Mindel, J.P. Latham, C.C. Pain, H. Apsimon, A two-phase adaptive finite element method for solid-fluid coupling in complex geometries, *Int. J. Numer. Methods Fluids.* 66 (2011) 82–96. doi:10.1002/flid.2249.
- [107] N. Govender, D.N. Wilke, C.Y. Wu, U. Tuzun, H. Kureck, A numerical investigation into the effect of angular particle shape on blast furnace burden topography and percolation using a GPU solved discrete element model, *Chem. Eng. Sci.* 204 (2019) 9–26. doi:10.1016/j.ces.2019.03.077.
- [108] P.W. Cleary, M.L. Sawley, DEM modelling of industrial granular flows: 3D case studies and the effect of particle shape on hopper discharge, *Appl. Math. Model.* 26 (2002) 89–111. doi:10.1016/S0307-904X(01)00050-6.
- [109] Z. Zhan, L. Yaoming, L. Zhenwei, G. Zhiqiang, DEM simulation and physical testing of rice seed impact against a grain loss sensor, *Biosyst. Eng.* 116 (2013) 410–419. doi:10.1016/j.biosystemseng.2013.10.002.
- [110] B. Ren, W. Zhong, X. Jiang, B. Jin, Z. Yuan, Numerical simulation of spouting of cylindroid particles in a spouted bed, *Can. J. Chem. Eng.* 92 (2014) 928–934. doi:10.1002/ejce.21900.
- [111] B. Ren, W. Zhong, Y. Chen, X. Chen, B. Jin, Z. Yuan, Y. Lu, CFD-DEM simulation of spouting of corn-shaped particles, *Particuology.* 10 (2012) 562–572. doi:10.1016/j.partic.2012.03.011.
- [112] H. Tao, B. Jin, W. Zhong, X. Wang, B. Ren, Y. Zhang, R. Xiao, Discrete element method modeling of non-spherical granular flow in rectangular hopper, *Chem. Eng. Process. Process Intensif.* 49 (2010) 151–158. doi:10.1016/j.cep.2010.01.006.
- [113] X. Lin, T.-T. Ng, Contact detection algorithms for three-dimensional ellipsoids in discrete element modelling, *Int. J. Numer. Anal. Methods Geomech.* 19 (1995) 653–659.

doi:10.1002/nag.1610190905.

- [114] A. Hölzer, M. Sommerfeld, New simple correlation formula for the drag coefficient of non-spherical particles, *Powder Technol.* 184 (2008) 361–365. doi:10.1016/j.powtec.2007.08.021.
- [115] R. Di Felice, The voidage function for fluid-particle interaction systems, *Int. J. Multiph. Flow.* 20 (1994) 153–159. doi:10.1016/0301-9322(94)90011-6.
- [116] G.T. Vickers, The projected areas of ellipsoids and cylinders, *Powder Technol.* 86 (1996) 195–200. doi:10.1016/0032-5910(95)03049-2.
- [117] F.H. Harlow, J.E. Welch, Numerical Calculation of Time-Dependent Viscous Incompressible Flow of Fluid with Free Surface, *The Physic of Fluids.* 8 (1965) 2182–2189.
- [118] S. V. Patankar, D.B. Spalding, A calculation procedure for heat, mass and momentum transfer in three-dimensional parabolic flows, *Int. J. Heat Mass Transf.* 15 (1972) 1787–1806. doi:10.1016/0017-9310(72)90054-3.
- [119] A.J. Chorin, Numerical Solution of the Navier-Stokes Equations, *Math. Comput.* 22 (1968) 745. doi:10.2307/2004575.
- [120] R.I. Issa, A.D. Gosman, A.P. Watkins, The computation of compressible and incompressible recirculating flows by a non-iterative implicit scheme, *J. Comput. Phys.* 62 (1986) 66–82. doi:10.1016/0021-9991(86)90100-2.
- [121] O. Tatebe, The Multigrid Preconditioned Conjugate Gradient Method, in: *Sixth Copp. Mt. Conf. Multigrid Methods*, 1993: pp. 621–634.
- [122] X. Sun, M. Sakai, Immersed boundary method with artificial density in pressure equation for modeling flows confined by wall boundaries, *J. Chem. Eng. Japan.* 50 (2017) 161–169. doi:10.1252/jcej.16we115.
- [123] J. Kim, P. Moin, Application of a fractional-step method to incompressible Navier-Stokes equations, *J. Comput. Phys.* 59 (1985) 308–323. doi:10.1016/0021-

9991(85)90148-2.

- [124] D.B. Spalding, A novel finite difference formulation for differential expressions involving both first and second derivatives, *Int. J. Numer. Methods Eng.* 4 (1972) 551–559. doi:10.1002/nme.1620040409.
- [125] J. Crank, P. Nicolson, A practical method for numerical evaluation of solutions of partial differential equations of the heat-conduction type, *Math. Proc. Cambridge Philos. Soc.* 43 (1947) 50–67. doi:10.1017/S0305004100023197.
- [126] M. Sakai, Y. Yamada, Y. Shigeto, K. Shibata, V.M. Kawasaki, S. Koshizuka, Large-scale discrete element modeling in a fluidized bed, *Int. J. Numer. Methods Fluids.* 64 (2010) 1319–1335. doi:10.1002/flid.2364.
- [127] M. Sakai, H. Takahashi, C.C. Pain, J.P. Latham, J. Xiang, Study on a large-scale discrete element model for fine particles in a fluidized bed, *Adv. Powder Technol.* 23 (2012) 673–681. doi:10.1016/j.appt.2011.08.006.
- [128] J.M. Ottino, R.M. Lueptow, Materials science: On mixing and demixing, *Science* (80-). 319 (2008) 912–913. doi:10.1126/science.1152849.
- [129] Y. Shigeto, M. Sakai, Parallel computing of discrete element method on multi-core processors, *Particuology.* 9 (2011) 398–405. doi:10.1016/j.partic.2011.04.002.
- [130] P.W. Cleary, Large scale industrial DEM modelling, *Eng. Comput.* (Swansea, Wales). 21 (2004) 169–204. doi:10.1108/02644400410519730.
- [131] P.W. Cleary, R. Morrisson, S. Morrell, Comparison of DEM and experiment for a scale model SAG mill, *Int. J. Miner. Process.* 68 (2003) 129–165. doi:10.1016/S0301-7516(02)00065-0.
- [132] M. Sakai, K. Takabatake, K. Tamura, K. Hatano, A. Minakuchi, Why do wet-particles adhere to a high-speed roll in a three-roll mill?, *Phys. Fluids.* 033302 (2019). doi:10.1063/1.5085693.
- [133] C.S. Peskin, Flow patterns around heart valves: A numerical method, *J. Comput. Phys.*

10 (1972) 252–271. doi:10.1016/0021-9991(72)90065-4.

- [134] Z. Li, M.C. Lai, The immersed interface method for the navier-stokes equations with singular forces, *J. Comput. Phys.* 171 (2001) 822–842. doi:10.1006/jcph.2001.6813.
- [135] T. Ye, R. Mittal, H.S. Udaykumar, W. Shyy, An Accurate Cartesian Grid Method for Viscous Incompressible Flows with Complex Immersed Boundaries, *J. Comput. Phys.* 156 (1999) 209–240. doi:10.1006/jcph.1999.6356.
- [136] T. Kajishima, T. Satoshi, H. Hamasaki, Y. Miyake, Turbulence Structure of Particle-Laden Flow in a Vertical Plane Channel Due to Vortex Shedding, *JSME Int. J. Ser. B.* 44 (2001) 526–535. doi:10.1299/jsmeb.44.526.
- [137] H. Ma, Y. Zhao, Modelling of the flow of ellipsoidal particles in a horizontal rotating drum based on DEM simulation, *Chem. Eng. Sci.* 172 (2017) 636–651. doi:10.1016/j.ces.2017.07.017.

謝辞

本論文は著者が東京大学大学院工学系研究科原子力国際専攻の博士課程において行った研究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。ここに感謝の意を表します。

著者の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 酒井幹夫先生に、深く感謝申し上げます。学士課程 4 年からの 5 年間半という長い間、研究を遂行するにあたってのご助言だけでなく、研究を計画する段階でも多大なご指導をいただきました。また、国内外問わず数多くの学会発表や、海外留学などの機会をいただき、その中で国際的にも最先端の研究者の方々と交流させていただき、研究者として大きく成長することができました。更には大学院在学中および卒業後の生活設計等、公私を問わず様々なご指導をいただき、安心して研究活動に没頭することができました。心より感謝申し上げます。

また、本論文の副査を快くお引き受けいただいた、大阪大学大学院工学研究科の梶島岳夫教授、東京大学大学院工学系研究科の越塚誠一教授、同研究科の高木周教授、同研究科の高橋浩之教授、同研究科の山口彰教授には、学位論文審査において貴重なご指導、ご助言をいただき、より良い博士論文とする大きな助けとなりました。ここに謹んで感謝の意を表します。

所属研究室の学術専門職員であります飯島由江様、技術補佐員であります牧田みか様、鈴木悦子様、技術補佐員でありました市瀬多鶴子様には、学会への出張に関する手続きを始めとした様々な大学の事務手続きにつきまして、多大なご支援、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暁松博士、佐藤兼太博士には、研究活動や論文作成など、様々な面に対して多くのご助言をいただきました。心より御礼申し上げます。

所属研究室の先輩でありました高畑和弥博士、鶴殿寛岳博士には、学士課程 4 年の時分からご卒業されるまでの間、研究の進め方や研究発表、論文の書き方など、大変多くの面で

ご助言をいただきました。心より感謝申し上げます。

所属研究室の後輩の皆様からは、研究発表練習において大変多くのご助言をいただきました。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公益財団法人ホソカワ粉体工学振興財団には、在学中の研究活動および生活について経済的に多大なご支援をいただきました。ここに謹んで感謝申し上げます。

最後になりますが、大学院博士課程への進学を快諾するだけでなく、研究に専念できるような経済面および精神面で支えてくれた両親および家族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。

2021年6月1日

森勇稀