

# 粉粒体の流れの数値シミュレーション

湯 晋一\*1・梅景 俊彦\*2

Shinichi YUU and Toshihiko UMEKAGE  
Numerical Simulation of Granular Flow

## はじめに

個々の粒子の衝突やコスレあい運動を支配する粉粒体の流動現象は本質的に不均質かつ非線形現象であるために、数理的な取り扱いが困難で、経験的要素の強い分野という認識が一般的であった。しかし、近年のコンピュータの発達に伴い粉粒体の流れのシミュレーションにも実際の現象をよく説明する手法が考案されるようになってきた。そこで、本講ではそれらの代表的な2つの手法(と言うよりも粒子を個々にラグランジアン的に取り扱う手法はほとんど全てこの2つの方法の中に含まれる)、すなわち粒子どうしの多体衝突、コスレあいを近似的に表現する離散要素法(Distinct Element Method)と2体衝突、コスレあいを考慮するHard Sphere Modelについて主に解説する。離散要素法は高粒子濃度、すなわち通常の粉粒体の流動や高粒子濃度の流動層等に適用され、Hard Sphere Modelは低粒子濃度、すなわち高速あるいは乱流流動層や空気輸送等のシミュレーションに用いられる。

## 1 離散要素法

### 1.1 離散要素法について

離散要素法(Distinct Element Method)は円盤や球の集合体の力学的挙動を表せる数値計算モデルである。以下、これをDEMと呼ぶことにする。これはCundall<sup>1)</sup>により提唱された手法である。DEMは、不連続な要素の集合体に対して、個々の要素が運動方程式を満足し、要素間の力の伝達が作用・反作用の法則に従うのを条件として、粒子の動力学的挙動を数値解析するものである。その際用いられる作用力にはHookの法則などによる静的なつりあい式より求められる力を用いて、粒子の動力学的挙動を数値計算によ

り求める手法である。つまりDEMにおいては粒子の移動と粒子相互の重なりによる作用力の発生を交互に計算して行くことで漸次計算が進んでいく。故にその移動距離すなわち重なりはごくわずかなものとしなければならない。したがって、タイムステップは非常に小さくとることになる。また、このように移動による干渉がわずかであるということから、ある1つの粒子はそれに直接接触している粒子から影響を受け、直接接触している粒子を介してそれ以外のより遠方に存在している粒子へ作用する力は考えなくてよいとしている。この仮定により膨大な量の連立方程式を解かずにすみ、ある程度粒子数が増えても現実的な時間内および現実的な計算機で計算を行うことができる。この離散要素法を用いることによって、これまで計算できなかった流動層内の充填率分布やホッパーにおける死領域の形成、脈動流、粒子出口におけるアーチの形成等、これまで連続体と見なして計算していた数値解析では得られなかったものが定性的にはあるが得られるようになった。

### 1.2 離散要素法(3次元)の計算方法

離散要素法(DEM)を数式的に少し詳しく、ただしわかりやすく書くと次のようになる。

DEMでは絶対座標系( $x, y, z$ )と相対座標系( $n, s, b$ )の2つの座標系を用いる。Fig. 1にそれらを示す。3次元のDEMでは粒子の形状を球形と仮定して計算を行う。各粒子の位置とその移動を記述する場合には絶対座標系( $x, y, z$ )を用い、接触している粒子の間で作用する反力を計算する場合には各接点ごとに定義される相対座標系( $n, s, b$ )を用いる。この相対座標系とは、粒子 $i, j$ の中心座標( $x_i, y_i, z_i$ ), ( $x_j, y_j, z_j$ )を結ぶ直線を $n$ (法線)方向、 $n$ 方向と垂直で $x-y$ 平面に平行な方向を $s$ (接線)方向、 $n$ 方向と $s$ 方向の両者に垂直な方向を $b$ (従法線)方向とする球座標系である。

平成7年6月30日受付 平成7年9月25日受理 (Received on June 30, 1995; Accepted on Sep. 25, 1995) (依頼解説)

\* 1九州工業大学工学部教授 (Department of Mechanical Engineering, Kyushu Institute of Technology, 1-1 Sensui-cho Tobata-ku Kitakyushu 804)

\* 2九州工業大学工学部講師 (Department of Mechanical Engineering, Kyushu Institute of Technology)

Key words: distinct element method; hard sphere model; hopper; fluidized bed; granular material; modeling; multi-phase flow; simulation; three dimension.

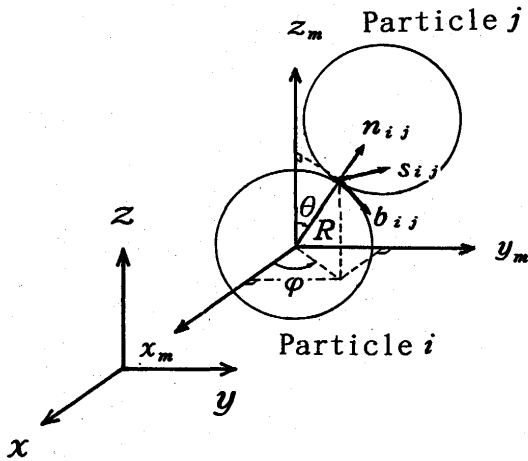


Fig. 1. Coordinates.

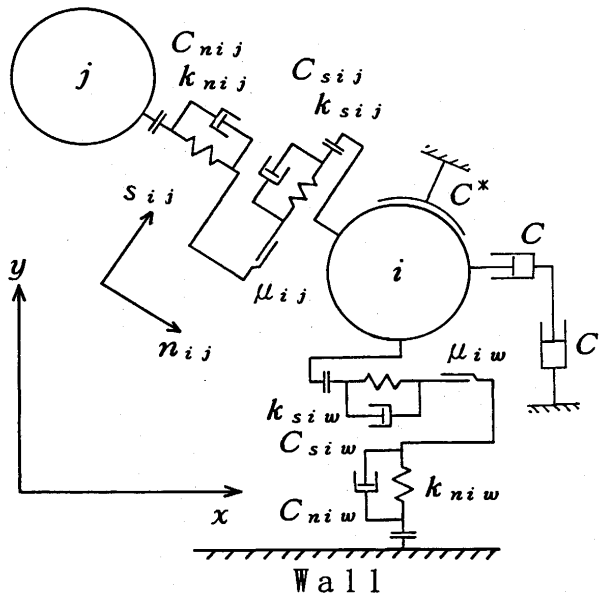


Fig. 2. Mechanical model at contact points.

2粒子が接触する点の  $n, s, b$  各方向には、2粒子の相対変位によって弾性変形し反力を発生するバネと相対速度に比例した抗力を発生する粘性ダッシュポットが並列に配置されたFig. 2に示すようなモデルを仮定する。

粒子間の力学的な相互作用は接触点のみで起こるので、まず、計算の対象となる全粒子について他の粒子との接触の有無を判定する。ここでは粒子  $i$  と粒子  $j$  の場合を考える。粒子  $i$  と粒子  $j$  の中心の座標がそれぞれ  $(x_i, y_i, z_i), (x_j, y_j, z_j)$  のとき、粒子  $i$  と粒子  $j$  の中心間距離  $D_{ij}$  は次式となる。

$$D_{ij} = \sqrt{(x_j - x_i)^2 + (y_j - y_i)^2 + (z_j - z_i)^2} \dots\dots\dots (1)$$

したがって、粒子  $i$  と粒子  $j$  の半径が  $R$  の場合には、粒子  $i$  と粒子  $j$  が接触する条件は次式となる。

$$D_{ij} < 2R \dots\dots\dots (2)$$

粒子  $i$  と粒子  $j$  が (2) 式を満たし接触状態にある事がわかれば、両者の接触点に作用する反力 (以下、接触力と呼ぶ) の計算を行う。

Fig. 1 の座標系で、粒子  $i$  と粒子  $j$  の接触点を基準とする相対座標系  $(n, s, b)$  の各軸に平行な単位ベクトル  $E_{nij}, E_{sij}, E_{bij}$  はそれぞれ (3) ~ (5) 式となる (回転の方向は各軸とも右ネジの進む向きを正とする)。

$$E_{nij} = (\sin\theta\cos\phi, \sin\theta\sin\phi, \cos\theta) \\ = \left( \frac{x_j - x_i}{D_{ij}}, \frac{y_j - y_i}{D_{ij}}, \frac{z_j - z_i}{D_{ij}} \right) \dots\dots\dots (3)$$

$$E_{sij} = (-\sin\theta\sin\phi, \sin\theta\cos\phi, 0) \\ = \left( -\frac{y_j - y_i}{D_{ij}}, \frac{x_j - x_i}{D_{ij}}, 0 \right) \dots\dots\dots (4)$$

$$E_{bij} = (\cos\theta\cos\phi, \cos\theta\sin\phi, -\sin\theta) \\ = \left( \frac{(x_j - x_i)(z_j - z_i)}{D_{ij}\sqrt{(x_j - x_i)^2 + (y_j - y_i)^2}}, \right. \\ \left. \frac{(y_j - y_i)(z_j - z_i)}{D_{ij}\sqrt{(x_j - x_i)^2 + (y_j - y_i)^2}}, \right. \\ \left. \frac{\sqrt{(x_j - x_i)^2 + (y_j - y_i)^2}}{D_{ij}} \right) \dots\dots\dots (5)$$

接触点における粒子  $j$  に対する粒子  $i$  の相対速度のベクトル  $\dot{\gamma}_{ij}$  を絶対座標系  $(x, y, z)$  で表すと次式になる (式中の  $\dot{\gamma}_i$  と  $\dot{\gamma}_j, \dot{\theta}_i$  と  $\dot{\theta}_j$  はそれぞれ粒子  $i$  と粒子  $j$  の並進運動と回転運動の速度ベクトルを表し、 $\dot{\gamma}_i = (\dot{x}_i, \dot{y}_i, \dot{z}_i), \dot{\gamma}_j = (\dot{x}_j, \dot{y}_j, \dot{z}_j), \dot{\theta}_i = (\dot{\theta}_{xi}, \dot{\theta}_{yi}, \dot{\theta}_{zi}), \dot{\theta}_j = (\dot{\theta}_{xj}, \dot{\theta}_{yj}, \dot{\theta}_{zj})$  である)。

$$\dot{\gamma}_{ij} = (\dot{\gamma}_i - \dot{\gamma}_j) + R(\dot{\theta}_i + \dot{\theta}_j) \dots\dots\dots (6)$$

したがって、この接触点における相対座標系  $(n, s, b)$  の各方向に平行な速度成分の大きさは、それぞれ次の (7) ~ (9) 式で表される。

$$\dot{n}_{ij} = (\dot{\gamma}_i - \dot{\gamma}_j) \cdot E_{nij} \dots\dots\dots (7)$$

$$\dot{s}_{ij} = (\dot{\gamma}_i - \dot{\gamma}_j) \cdot E_{sij} + R(\dot{\theta}_i + \dot{\theta}_j) \cdot E_{bij} \dots\dots\dots (8)$$

$$\dot{b}_{ij} = (\dot{\gamma}_i - \dot{\gamma}_j) \cdot E_{bij} + R(\dot{\theta}_i + \dot{\theta}_j) \cdot E_{sij} \dots\dots\dots (9)$$

DEMの計算時間ステップ幅を  $\Delta t$  とすると、 $\Delta t$  間の2粒子の移動による接触変位増分  $\Delta n_{ij}, \Delta s_{ij}, \Delta b_{ij}$  はそれぞれ  $\Delta n_{ij} = \dot{n}_{ij}\Delta t, \Delta s_{ij} = \dot{s}_{ij}\Delta t, \Delta b_{ij} = \dot{b}_{ij}\Delta t$  となるので  $n, s, b$  各方向のバネ定数を  $k_{nij}, k_{sij}, k_{bij}$  と置いたときの接触変位増分による  $n$  方向の圧縮力の増分  $\Delta F_{nij}$  と  $s, b$  各方向の剪断力の増分  $\Delta F_{sij}, \Delta F_{bij}$  はそれぞれ (10) ~ (12) 式となる。

$$\Delta F_{nij} = k_{nij}\Delta n_{ij} = k_{nij}\dot{n}_{ij}\Delta t \dots\dots\dots (10)$$

$$\Delta F_{sij} = k_{sij}\Delta s_{ij} = k_{sij}\dot{s}_{ij}\Delta t \dots\dots\dots (11)$$

$$\Delta F_{bij} = k_{bij}\Delta b_{ij} = k_{bij}\dot{b}_{ij}\Delta t \dots\dots\dots (12)$$

したがって、現在の時刻を  $t$  とすると、時刻  $t$  に接触点で作用している力は、 $\Delta t$  前の計算時間ステップで求めた接触力に直前の  $\Delta t$  間の接触力増分を加えた (13) ~ (15) 式で表される

(添え字の  $t$ ,  $t-\Delta t$  等で時刻を表す)。

$$(F_{nij})_t = (F_{nij})_{t-\Delta t} + \Delta F_{nij} \dots\dots\dots (13)$$

$$(F_{sij})_t = (F_{sij})_{t-\Delta t} + \Delta F_{sij} \dots\dots\dots (14)$$

$$(F_{bij})_t = (F_{bij})_{t-\Delta t} + \Delta F_{bij} \dots\dots\dots (15)$$

このとき、 $(F_{sij})_t$  と  $(F_{bij})_t$  の合力が接触点で作用する最大静止摩擦力と粒子間付着力の合計を上回る場合には、接触点で滑りが発生して接触力が変化する。そのため、(16)式で接触点における滑りの有無を判定する(式中の  $\mu_{ij}$  と  $f$  は静止摩擦係数と付着力を表す)。

$$\sqrt{(F_{sij})_t^2 + (F_{bij})_t^2} > \mu_{ij}(F_{nij})_t + f \dots\dots\dots (16)$$

粒子  $i$  と粒子  $j$  の接触状態が(16)式を満たし接触点で滑りが発生する場合には、 $(F_{sij})_t$  と  $(F_{bij})_t$  をそれぞれ  $(F_{sij})'_t$  と  $(F_{bij})'_t$  に置き換えて計算を行う。すなわち、滑りが発生すると接触点で剪断方向に作用する力はそれ以上増加しなくなるので、接触点に作用する剪断方向の力は2粒子が滑るときの摩擦力と付着力の和に等しくなる。このとき、摩擦力と付着力が作用する向きは滑りが起こる直前の  $s$  方向と  $b$  方向の弾性変形による反力の合力の向きと一致するので、摩擦力と付着力を(17)式と(18)式を用いて  $s$  方向と  $b$  方向の成分に分けて表すことができる。

$$(F_{sij})'_t = \frac{\mu_{ij}(F_{nij})_t + f}{\sqrt{(F_{sij})_t^2 + (F_{bij})_t^2}} (F_{sij})_t \dots\dots\dots (17)$$

$$(F_{bij})'_t = \frac{\mu_{ij}(F_{nij})_t + f}{\sqrt{(F_{sij})_t^2 + (F_{bij})_t^2}} (F_{bij})_t \dots\dots\dots (18)$$

接触点で滑りが発生しない場合には  $(F_{sij})_t$  と  $(F_{bij})_t$  をそのまま用いる。このとき、滑りの発生を判定する基準となる  $(F_{nij})_t$  は次の瞬間に滑りが発生するか否かによって変化しないので、そのまま用いることができる。

また、粒子  $i$  と粒子  $j$  には時刻  $t$  における相対速度に比例した減衰力  $(H_{nij})_t$ ,  $(H_{sij})_t$ ,  $(H_{bij})_t$  が作用するので、(19)~(21)式でそれらを求める。

$$(H_{nij})_t = C_{nij}(\dot{n}_{ij})_t \dots\dots\dots (19)$$

$$(H_{sij})_t = C_{sij}(\dot{s}_{ij})_t \dots\dots\dots (20)$$

$$(H_{bij})_t = C_{bij}(\dot{b}_{ij})_t \dots\dots\dots (21)$$

$C_{nij}$ ,  $C_{sij}$ ,  $C_{bij}$  は減衰係数を表し、接触点で滑りが発生する場合には  $H_{sij} = H_{bij} = 0$  とする。

なお、粒子と壁面の接触についても、粒子どうしの場合と同様に取り扱えばよいので説明は省略する。

以上のようにして、粒子  $i$  が他の粒子や壁面と接触している全ての接触点から受けている力を求め、それらを絶対座標系  $(x, y, z)$  の各方向に平行な力の成分に分けて、 $x$ ,  $y$ ,  $z$  各方向の力の和と各軸回りに作用する力のモーメントの和を計算すると(22)~(27)式が得られる。

$$\begin{aligned} \Sigma(F_{xi})_t = & [ \{ (F_{nij} - H_{nij})_t \sin\theta \cos\varphi \\ & + (F_{sij} - H_{sij})_t (-\sin\theta \sin\varphi) \\ & + (F_{bij} - H_{bij})_t \cos\theta \cos\varphi \} + \{ \dots \} + \dots ] \dots\dots (22) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Sigma(F_{yi})_t = & [ \{ (F_{nij} - H_{nij})_t \sin\theta \sin\varphi \\ & + (F_{sij} - H_{sij})_t \sin\theta \cos\varphi \\ & + (F_{bij} - H_{bij})_t \cos\theta \sin\varphi \} + \{ \dots \} + \dots ] \dots\dots (23) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Sigma(F_{zi})_t = & [ \{ (F_{nij} - H_{nij})_t \cos\theta + (F_{bij} - H_{bij})_t (-\sin\theta) \} \\ & + \{ \dots \} + \dots ] \dots\dots (24) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Sigma(M_{xi})_t = & [ \{ (M_{nij})_t \sin\theta \cos\varphi + (F_{bij} - H_{bij})_t \\ & R(-\sin\theta \sin\varphi) + (F_{sij} - H_{sij})_t R \cos\theta \cos\varphi \} \\ & + \{ \dots \} + \dots ] \dots\dots (25) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Sigma(M_{yi})_t = & [ \{ (M_{nij})_t \sin\theta \sin\varphi + (F_{bij} - H_{bij})_t R \sin\theta \cos\varphi \\ & + (F_{sij} - H_{sij})_t R \cos\theta \sin\varphi \} + \{ \dots \} + \dots ] \dots\dots (26) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Sigma(M_{zi})_t = & [ \{ (M_{nij})_t \cos\theta + (F_{sij} - H_{sij})_t R (-\sin\theta) \} \\ & + \{ \dots \} + \dots ] \dots\dots (27) \end{aligned}$$

なお、(25)~(27)式中の  $(M_{nij})_t$  は粒子  $i$  と粒子  $j$  の相対座標系の  $n$  軸回りの力のモーメントで、通常は2粒子の接触部にできる  $n$  軸回りのトルクアーム長は  $R$  にくらべて非常に小さくなることから  $(M_{nij})_t = 0$  としよ。

以上の結果を用いて、 $x$ ,  $y$ ,  $z$  各方向に関する粒子  $i$  の運動方程式を立てる。これ以後の計算式は  $x$ ,  $y$ ,  $z$  各方向とも同一になるので、(28), (29)式には  $x$  方向の並進と回転に関する運動方程式のみを示す。

$$m_i(\ddot{x}_i)_t = \Sigma(F_{xi})_t - C(\dot{x}_i)_t \dots\dots\dots (28)$$

$$I_i(\ddot{\theta}_{xi})_t = \Sigma(M_{xi})_t - C^*(\dot{\theta}_{xi})_t \dots\dots\dots (29)$$

式中の  $m_i$  と  $I_i$  は粒子  $i$  の質量と慣性モーメントで、 $C$  と  $C^*$  はそれぞれ並進運動と回転運動をしている粒子に周囲の流体がおよぼす抗力による減衰係数である。球形粒子の場合には、 $m_i$  と  $I_i$  は次式で表される ( $\rho_p$  は粒子密度を表す)。

$$m_i = \frac{4}{3}\pi R^3 \rho_p, \quad I_i = \frac{8}{15}\pi R^5 \rho_p \dots\dots\dots (30)$$

ここで(28), (29)式中の  $(\dot{x}_i)_t$ ,  $(\ddot{x}_i)_t$ ,  $(\dot{\theta}_{xi})_t$ ,  $(\ddot{\theta}_{xi})_t$  を、時刻  $(t-\Delta t)$  と時刻  $t$  における速度と角速度それぞれの平均値  $(\dot{x}_i)_{t-(1/2)\Delta t}$ ,  $(\dot{\theta}_{xi})_{t-(1/2)\Delta t}$  および時刻  $t$  と時刻  $(t+\Delta t)$  における速度と角速度それぞれの平均値  $(\dot{x}_i)_{t+(1/2)\Delta t}$ ,  $(\dot{\theta}_{xi})_{t+(1/2)\Delta t}$  によって表すために、次の(31)~(34)式を用いる。

$$(\dot{x}_i)_t = \frac{(\dot{x}_i)_{t+(1/2)\Delta t} + (\dot{x}_i)_{t-(1/2)\Delta t}}{2} \dots\dots\dots (31)$$

$$(\ddot{x}_i)_t = \frac{(\dot{x}_i)_{t+(1/2)\Delta t} - (\dot{x}_i)_{t-(1/2)\Delta t}}{\Delta t} \dots\dots\dots (32)$$

$$(\dot{\theta}_{xi})_t = \frac{(\dot{\theta}_{xi})_{t+(1/2)\Delta t} + (\dot{\theta}_{xi})_{t-(1/2)\Delta t}}{2} \dots\dots\dots (33)$$

$$(\ddot{\theta}_{xi})_t = \frac{(\dot{\theta}_{xi})_{t-(1/2)\Delta t} - (\dot{\theta}_{xi})_{t+(1/2)\Delta t}}{\Delta t} \dots\dots\dots (34)$$

(28)式に(31), (32)式, (29)式に(33), (34)式をそれぞれ代

入して整理すると、(35)～(38)式が導出できる。

$$\dot{(x_i)}_{t+(1/2)\Delta t} = \frac{(\dot{x_i})_{t-(1/2)\Delta t} \left[ 1 - \frac{C}{m_i} \frac{\Delta t}{2} \right] + \Sigma(F_{xi})_t \frac{\Delta t}{m_i}}{1 + \frac{C}{m_i} \frac{\Delta t}{2}} \dots\dots\dots (35)$$

$$\dot{(\theta_{xi})}_{t+(1/2)\Delta t} = \frac{(\dot{\theta_{xi}})_{t-(1/2)\Delta t} \left[ 1 - \frac{C^*}{I_i} \frac{\Delta t}{2} \right] + \Sigma(M_{xi})_t \frac{\Delta t}{I_i}}{1 + \frac{C^*}{I_i} \frac{\Delta t}{2}} \dots\dots\dots (36)$$

$$(x_i)_{t+\Delta t} = (x_i)_t + (\dot{x_i})_{t+(1/2)\Delta t} \Delta t \dots\dots\dots (37)$$

$$(\theta_{xi})_{t+\Delta t} = (\theta_{xi})_t + (\dot{\theta_{xi}})_{t+(1/2)\Delta t} \Delta t \dots\dots\dots (38)$$

y方向とz方向についても同様の式を導出し、これらの式を用いて時刻 $t+(1/2)\Delta t$ における粒子速度と時刻 $(t+\Delta t)$ における粒子位置を計算して粒子を移動させる。

以上の操作が全粒子について終われば、時刻 $t$ から時刻 $(t+\Delta t)$ までの1計算時間ステップの計算は終了し、次の計算時間ステップに進んで接触判定を行う。

DEMを用いて粒子運動の数値計算を行う場合には、その方程式系における解の収束条件に注意して $C, k, \Delta t$ の条件を決定しなければならない。

上述のようにDEMの基礎式は粘性摩擦による減衰自由振動の振動方程式 ( $m\ddot{X} + C\dot{X} + kX = 0$ ) であるので、その解を安定に収束させるためには、各接触点に仮定した $C$ と $k$ の関係が(39)式を満たすように $C$ を定める必要がある。

$$C = 2\sqrt{mk} \dots\dots\dots (39)$$

また、振動方程式を離散化した差分方程式の解が有界となるための条件から、 $\Delta t$ と $k$ の関係が(40)式を満たす範囲で $\Delta t$ を定める必要がある。

$$\Delta t < 2\sqrt{m/k} \dots\dots\dots (40)$$

(40)式は $k$ の値が大きい粒子の計算を行う場合には、 $\Delta t$ を小さくとる必要があることを示している。そのため、金属、ガラス、鉱物等の場合には、実際の物性値に基づく $k$ の値を用いると $\Delta t$ はきわめて微小な時間になるため、実際の計算はほとんど不可能になる。そのため、現在のほとんどのDEMによるシミュレーションでは、計算が可能になる $\Delta t$ (通常、 $10^{-6} \sim 10^{-4}$ s程度)から逆算した $k$ を便宜的に用いている場合が多い。なお、粒子どうしの接触点における $n, s, b$ 各方向の $k$ の表現方法には以下のようなものがある。

(1) Hookの法則を用いた表現

最も簡単な方法で、粒子 $i$ と粒子 $j$ の接触点における粒子の弾性変形を線形バネで近似し、粒子 $i$ の変形量と反力の関係を一定の比例関係で表す。

$$k_{nij} = (\text{一定}) \dots\dots\dots (41)$$

$$k_{sij} = k_{bij} = (0.2 \sim 0.3) k_{nij} \dots\dots\dots (42)$$

(2) Hertzの接触理論を用いた表現

粒子 $i$ と粒子 $j$ の接触点における $n$ 方向の粒子の弾性変形量 $\delta_{nij}$ と反力 $F_{nij}$ の関係をHertzの接触理論から求め、 $n$ 方向の変形量が $\delta_{nij}$ のときの $k_{nij}$ を(43)式を用いて表す( $E, \nu$ はそれぞれ縦弾性係数とポアソン比を表す)。

$$k_{nij} = \sqrt{\frac{2}{9} \delta_{nij} R \left( \frac{E}{1-\nu^2} \right)^2} \dots\dots\dots (43)$$

$s$ 方向と $b$ 方向の $k_{sij}, k_{bij}$ については(43)式の結果を用いて(44)式で表す。

$$k_{sij} = k_{bij} = (0.2 \sim 0.3) k_{nij} \dots\dots\dots (44)$$

(3) Mindlinの接触理論<sup>2)3)</sup>を用いた表現

粒子 $i$ と粒子 $j$ の接触点における $n, s, b$ 各方向の粒子の弾性変形量 $\delta_{nij}, \delta_{sij}, \delta_{bij}$ と反力 $F_{nij}, F_{sij}, F_{bij}$ の関係をMindlinの接触理論<sup>2)3)</sup>から求め $n, s, b$ 各方向の変形量が $\delta_{nij}, \delta_{sij}, \delta_{bij}$ のときの $k_{nij}, k_{sij}, k_{bij}$ を(45)～(47)式を用いて表す( $G$ と $\mu_{ij}$ はそれぞれ横弾性係数と静止摩擦係数を表す)。

$$k_{nij} = \sqrt{\frac{2}{9} \delta_{nij} R \left( \frac{E}{1-\nu^2} \right)^2} \dots\dots\dots (45)$$

$$k_{sij} = k_{nij} \frac{\delta_{nij} \mu_{ij}}{\delta_{sij}} \left[ 1 - \left\{ 1 - \frac{4(1-\nu^2)G}{(2-\nu)E\mu_{ij}} \frac{\delta_{sij}}{\delta_{nij}} \right\}^{3/2} \right] \dots\dots\dots (46)$$

$$k_{bij} = k_{nij} \frac{\delta_{nij} \mu_{ij}}{\delta_{bij}} \left[ 1 - \left\{ 1 - \frac{4(1-\nu^2)G}{(2-\nu)E\mu_{ij}} \frac{\delta_{bij}}{\delta_{nij}} \right\}^{3/2} \right] \dots\dots\dots (47)$$

1・3 計算結果と実験結果の比較

Table 1に粒子の物性値と計算条件を示す。C. G. S. 単位系を用いたのは $\Delta t$ が非常に小さいので桁落ちしないようにできるだけ大きい値を用いる必要があるからである。ただし、本計算は粒子間に付着力が作用しない場合であるため(16)～(18)式中の $f$ の値は零である。Fig. 3～5に粒子群がホッパーより排出流動する瞬時瞬時の状態を示す。各図において(a)が計算結果で、(b)が実験結果である。計算では最初3000個の粒子を角形ホッパーの底から粒子の半径だけ高い位置に規則配列し、それらの中から一様乱数を用いて577個の粒子を抜き取り、その後重力沈降させて落ち着かせた状態を粒子の初期充填状態とした。このとき、振動方程式を基礎式とするDEMの解は振動するために完全な静止

Table 1. Conditions of calculation and experiment.

Particle diameter	$D_p (= 2R)$ [cm]	1.0
Width of calculation time step	$\Delta t$ [s]	$1.0 \times 10^{-4}$
Stiffness (constant)	(Normal) $k_n$ [dyn/cm]	$7.0 \times 10^6$
	(Shear) $k_s, k_b$ [dyn/cm]	$1.4 \times 10^6$
Damping coefficient	(Normal) $C_n$ [g/s]	$7.0 \times 10^2$
	(Shear) $C_s, C_b$ [g/s]	$1.4 \times 10^2$
Friction coefficient	(Particle) $\mu_p$ [-]	0.25
	(Wall) $\mu_w$ [-]	0.30
Particle density	$\rho_p$ [g/cm <sup>3</sup> ]	2.5
Number of particles	$N_p$ [-]	2423

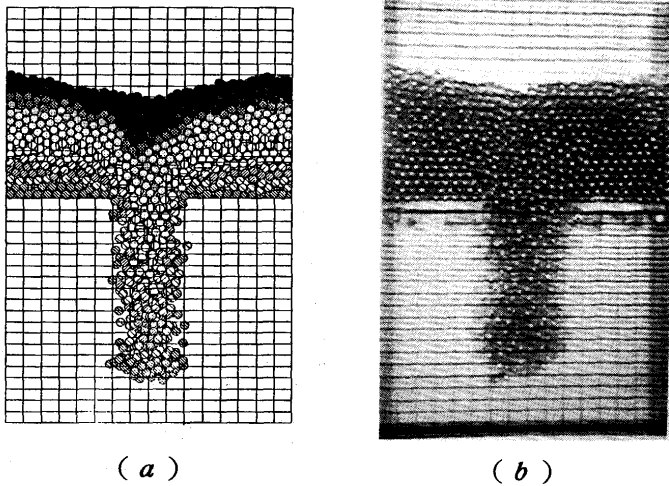


Fig. 3. Instantaneous locations of particles [t = 0.2s], (a) calculated result, (b) experimental result.

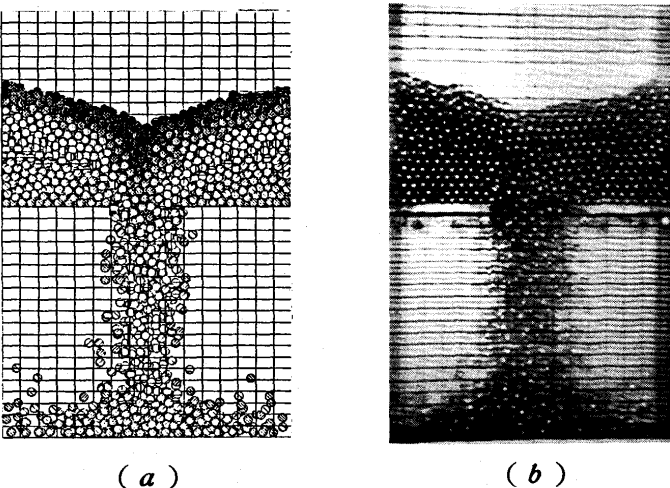


Fig. 4. Instantaneous locations of particles [t = 0.3s], (a) calculated result, (b) experimental result.

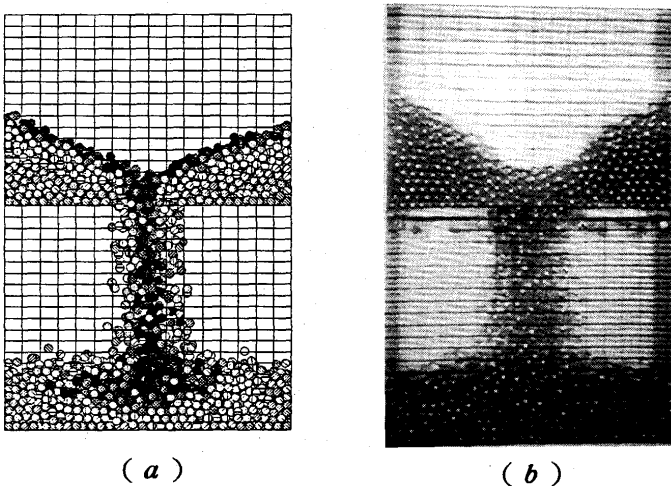


Fig. 5. Instantaneous locations of particles [t = 0.7s], (a) calculated result, (b) experimental result.

状態にはならないので、各粒子の1計算時間ステップ $\Delta t$ 当たりの並進運動と回転運動による位置の変動量がそれぞれ粒径の $10^{-3}$ と全周の $10^{-3}$ 以下になる速度まで落ち着かせた状態を粒子の初期充填状態としている。実験結果は計算結果と同一の条件にしてある。図からわかるように、計算結果は実験結果をよく表現している。

## 2 Hard Sphere Modelを用いた 3次元流動層の数値解析

近年、粒子をsoft sphereとして取り扱う離散要素法 (DEM)<sup>3</sup>が、流動層の解析にも適用されるようになった。DEMを用いた計算において粒子の流動現象を定量的に表現するためには物性値などに多くの仮定を必要とし、また計算できる粒子数に限界がある。したがって、実際の流動層の数値シミュレーションを行うことは、現在の計算機の容量、性能では難しい。

そこで、スーパーコンピュータにより、多くの粒子を計算できる分子動力学のhard sphereの理論<sup>4</sup>を用いた3次元流動層の数値シミュレーションを紹介する。本計算では約 $3.3 \times 10^5$ 個の粒子を計算している。また、気流の流れ場はNavier-Stokes式と連続の式を連立させてEulerian的に解き、さらに粒子軌跡はLagrangian形の運動方程式より求め、両者の相互作用を考慮しながら計算を行う。また、数値計算の妥当性を検証するため全く同一の条件で行った実験結果と比較する。流動層中の気流速度はレーザードップラー流速計 (L.D.A.) により測定し、粒子速度はビデオカメラで撮影し求めている。

### 2.1 気流の流れ場の計算

気流の基礎式には、粒子が存在する領域が大きいため、通常の流体のみを考慮したNavier-Stokes式と連続の式をそのまま用いることはできない。そこで、これらの式に1格子内で気流が占める割合つまり空隙率を考え、さらに1格子内では気流は一定速度として局所的に平均された値を用いる。この考え方はLarge Eddy Simulationと全く同じである。有次元の流体の運動方程式つまりNavier-Stokes式と連続の式は次式のように表される。

$$\frac{\partial \rho \underline{v}}{\partial t} + \nabla \cdot \rho \underline{v} \underline{v} = -\nabla P - \nabla \cdot \underline{\tau} - S_p \quad \dots\dots\dots (48)$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \rho \underline{v} = 0 \quad \dots\dots\dots (49)$$

ここで、 $\underline{v}$ ,  $P$ ,  $\rho$ ,  $\nabla$ は速度ベクトル, 圧力, 空気密度, ナブラ演算子であり,  $S_p$ は気流が粒子から受ける抗力の項 (Particle Source Terms) である。また,  $\underline{\tau}$ は粘性応力テンソルで次式で表される。

$$\underline{\tau} = \left\{ \begin{array}{ccc} -2\mu \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{2}{3}\mu \nabla \cdot \underline{v} & -\mu \left( \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) & -\mu \left( \frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right) \\ -\mu \left( \frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right) & -2\mu \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{2}{3}\mu \nabla \cdot \underline{v} & -\mu \left( \frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right) \\ -\mu \left( \frac{\partial w}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial z} \right) & -\mu \left( \frac{\partial w}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial z} \right) & -2\mu \frac{\partial w}{\partial z} + \frac{2}{3}\mu \nabla \cdot \underline{v} \end{array} \right\} \dots\dots\dots (50)$$

これらの式を局所的に空間平均を行う。

気流と粒子が存在する両方の空間をならした空間平均値  $\bar{v}$  は次式で表される。

$$\bar{v} = \frac{1}{V_0} \int_{V_0} g v dV = \bar{g} \bar{v} = \varepsilon \bar{v} \dots\dots\dots (51)$$

$$\varepsilon = \frac{1}{V_0} \int_{V_0} g dV \dots\dots\dots (52)$$

$\bar{v}$  は気流が存在する空間のみ平均を行った局所的空間平均値で、 $\varepsilon$  は空隙率である。 $g$  は粒子が占有している空間では 0、気流が占有している空間では 1 を表す関数である。(48)、(49) 式を気流と粒子が存在する両方の空間をならした局所空間平均し、無次元化をするとそれぞれ (53)、(54) 式のようになる。

$$\frac{\partial \varepsilon \bar{v}}{\partial t} + \nabla \cdot \varepsilon \bar{v} \bar{v} + \nabla \cdot \varepsilon \bar{v}' \bar{v}' = -\nabla \varepsilon \bar{P} - \frac{1}{Re} \nabla \cdot \varepsilon \underline{\tau} - Sp \dots\dots (53)$$

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + \nabla \cdot \varepsilon \bar{v} = 0 \dots\dots\dots (54)$$

(54) 式を (53) 式に代入すると (55) 式のようになる。

$$\varepsilon \frac{\partial \bar{v}}{\partial t} + \varepsilon \bar{v} \cdot \nabla \bar{v} + \nabla \cdot \varepsilon \bar{v}' \bar{v}' = -\nabla \varepsilon \bar{P} - \frac{1}{Re} \nabla \cdot \varepsilon \underline{\tau} - Sp \dots\dots\dots (55)$$

$\bar{v}$ ,  $\bar{P}$ ,  $\underline{\tau}$  は気流が存在する空間でのみ平均を行った局所的空間平均値の無次元値である。この (55) 式により粒子濃度が高くなった場合の流体に適用できる。ここで、(55) 式中の左辺第 3 項の  $\bar{v}' \bar{v}'$  は局所的空間変動値によって生じる応力項であるが<sup>3</sup>、これは S. G. S. モデル<sup>5)</sup>(Subgrid Scale Model)によって以下のように表した。

$$\overline{v'_i v'_j} = -v_T \left( \frac{\partial \bar{v}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{v}_j}{\partial x_i} \right) + \frac{1}{3} \delta_{ij} \overline{v'_k v'_k} \dots\dots\dots (56)$$

上式の  $v_T$  は

$$\left. \begin{array}{l} v_T = (C_s \Delta) \sqrt{2D} \\ D = (D_{ij} D_{ij})^{1/2} \\ D_{ij} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial \bar{v}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{v}_j}{\partial x_i} \right) \\ \Delta = (\Delta x \Delta y \Delta z)^{1/3} \end{array} \right\} \dots\dots\dots (57)$$

上式における Smagorinski 定数  $C_s$ <sup>4)</sup>には 0.1 を用いた。(55) 式の慣性項は次式のような運動エネルギー保存形に変形し、

$$\varepsilon \bar{v} \cdot \nabla \bar{v} = \frac{1}{2} (\varepsilon \bar{v} \cdot \nabla \bar{v} + \nabla \cdot \varepsilon \bar{v}' \bar{v}') \dots\dots\dots (58)$$

3 次の風上差分式を用いて計算した。その他の項には 2 次の中央差分式を用いている。また、(55) 式中の  $Sp$  の項は (59) 式のように表される<sup>6)</sup>。

$$Sp = \frac{3\pi D_p}{Re \Delta x \Delta y \Delta z} (1 + 0.15 Re_p^{0.687}) n (\underline{v} - \underline{v}_p) \frac{1}{\phi(\varepsilon)} \dots (59)$$

(59) 式中の  $D_p$ ,  $n$  はそれぞれ無次元粒子径、格子内に存在する粒子数であり、 $Re_p$  は粒子回りのレイノルズ数であり (60) 式のように表される。

$$Re_p = \frac{\rho |\underline{v} - \underline{v}_p| D_p}{\mu} \dots\dots\dots (60)$$

また、 $\phi(\varepsilon)$  は Steinour<sup>7)</sup>が実験により求めた粒子群中の 1 個の粒子が受ける抗力を求めるための補正関数であり、(61) 式のように表される。

$$\phi(\varepsilon) = \varepsilon^2 \times 10^{-1.82(1-\varepsilon)} \dots\dots\dots (61)$$

以上、(55) 式の Navier-Stokes 式と (54) 式の連続の式を基礎式として気流の流れ場を差分法によって計算する。差分法とは空間を規則正しい格子で区切り、各格子点で速度や圧力といった必要な物理量を考え、運動方程式からその物理量の間関係式を導き、計算により各格子点での値を求めるものである。

(55) 式の Navier-Stokes 式の発散をとり、圧力に関するポアソンの式に変形する。

$$\nabla^2 (\varepsilon P) = -\frac{\partial}{\partial t} (\nabla \cdot \varepsilon \underline{v}) - \nabla \cdot (\varepsilon \underline{v} \cdot \nabla \underline{v}) + \frac{1}{Re} \nabla^2 \cdot \varepsilon \underline{\tau} - \nabla \cdot Sp \dots\dots\dots (62)$$

上式を差分式に変換し圧力  $P$  を求める。求めた圧力により収束判定を行う。

$$RRM_{i,j,k} = (P_{i,j,k} - P'_{i,j,k}) \dots\dots\dots (63)$$

$P'_{i,j,k}$ : 1 回前の繰り返し計算で求められた  $P_{i,j,k}$   
 $RRM_{i,j,k}$  と収束判定係数  $\varepsilon$  を、繰り返し計算の毎回、計算空間内全点について比較する。その結果、内点のうち 1 点でも

$$RRM_{i,j,k} \geq \varepsilon \dots\dots\dots (64)$$

となった場合

$$P_{i,j,k} = P_{i,j,k} + \omega RRM_{i,j,k} \dots\dots\dots (65)$$

$\omega$ : 加速度係数 (=1.0)

として $P_{i,j,k}$ の値をすべての内点について改め、もう一度繰り返し計算を行う。

こうして計算空間内点すべての $RRM_{i,j,k}$ が<sup>3)</sup>

$$RRM_{i,j,k} < \epsilon \dots \dots \dots (66)$$

となるとその時間の圧力に対する繰り返し計算が収束したと見なす。以上のようにして、求めた圧力を(55)式を差分式に変換した式に代入し、1時間ステップ進んだ各方向速度を求める。こうして求められた新しい速度を用いて、次の繰り返し計算にはいる。

2・2 粒子の計算

2・2・1 粒子軌跡の計算

粒子軌跡の計算は、粒子のLagrangian形の運動方程式と粒子の回転に関する運動方程式より求める。無次元化された運動方程式はそれぞれ次のように表される。

$$\frac{\psi \cdot \phi(\epsilon)}{1 + 0.15 Re_p^{0.687}} \frac{d^2 s}{dt^2} + \frac{ds}{dt} - \underline{v} + \frac{G \cdot \phi(\epsilon)}{1 + 0.15 Re_p^{0.687}} = 0 \dots \dots (67)$$

$$\frac{C \cdot \phi(\epsilon)}{32.1 + 6.45 Re_{p\omega}^{0.5}} \frac{d\omega}{dt} + \underline{\omega} + \frac{1}{2} \nabla \times \underline{v} = 0 \dots \dots \dots (68)$$

$$\underline{s} = (x_p, y_p, z_p), \underline{G} = (G, 0, 0), \underline{\omega} = (\omega_{xp}, \omega_{yp}, \omega_{zp}),$$

$$\psi = \frac{1}{2} St = \frac{\rho_p D_p^2 U_0}{18 \mu D}, G = \frac{\rho_p D_p^2 g}{18 \mu U_0}, C = \frac{4\pi \rho_p D_p^2 U_0}{15 \rho D v}$$

ここで $St$ は粒子が気流中でストークスの抵抗を受けた際の停止距離を代表長さで無次元化したストークス数、 $G$ はストークスの沈降速度を代表速度で無次元化した無次元沈降速度である。また、 $\omega$ は粒子の回転角速度のベクトルである。メッシュ内で気流速度を一定とすると、各メッシュ内で式(67),(68)は解析的に解くことができ、それをつなぎ合わせれば粒子軌跡が求まる。

2・2・2 粒子の衝突の計算

粒子の衝突は粒子をhard sphereとして取り扱う。運動方程式の解析解によって求められた粒子位置より、最も接触量(粒子どうしの垂直重なり長さ)が大きい粒子と2粒子間でのみ起こるものとして、その衝突によりそれぞれの粒子速度、角速度が変化するものとして求めていく。計算では、(x, y, z)絶対座標系を(n, s, b)相対座標系(衝突される球形粒子の中心を原点とする球座標系)に変換する。衝突する粒子iと粒子jの衝突の運動方程式を粒子表面が完全に粗く滑らない場合と、不完全に粗く滑る場合にわけて解けばよい。式の詳細は省略する。

2・3 計算結果と実験結果の比較

Table 2 に計算条件を示す。用いた粒子の粒径は1.5mm、真密度は $10^3 \text{ kg/m}^3$ である。Fig. 6 に瞬時の流動状態を示す。左図が計算結果で、右図が実験結果である。粒子層中の粒子の分散状態の差異は、数値計算に含まれる微小な計算誤差が発端となって出現する。充填層下部のノズルの分布は不均一にはなっておらず、また数値計算には人工的な攪乱

Table 2. Conditions of calculation and experiment.

Nozzle diameter	$D$ [m]	$7.0 \times 10^{-3}$
Particle diameter	$D_p$ [m]	$1.56 \times 10^{-3}$
Nondimensional particle diameter	$\bar{D}_p$ [-]	0.25
Particle-particle restitution coefficient	$e_p$ [-]	0.90
Particle-wall restitution coefficient	$e_w$ [-]	0.95
Nondimensional settling velocity	$G$ [-]	3.42
Reynolds number	$Re$ [-]	9980
Nondimensional time step	$\Delta t$ [-]	0.01
Air velocity at nozzle outlet	$U_0$ [m/s]	21.4
Particle density	$\rho_p$ [kg/m <sup>3</sup> ]	$1.03 \times 10^3$
Particle-particle friction coefficient	$\mu_p$ [-]	0.25
Particle-wall friction coefficient	$\mu_w$ [-]	0.30
Inertia parameter	$\psi$ [-]	22836
Nondimensional cell size	[-]	$0.5 \times 0.5 \times 0.5$
Number of computational cells	[-]	$128 \times 32 \times 32$
Initial number of particles	[-]	$80 \times 64 \times 64$

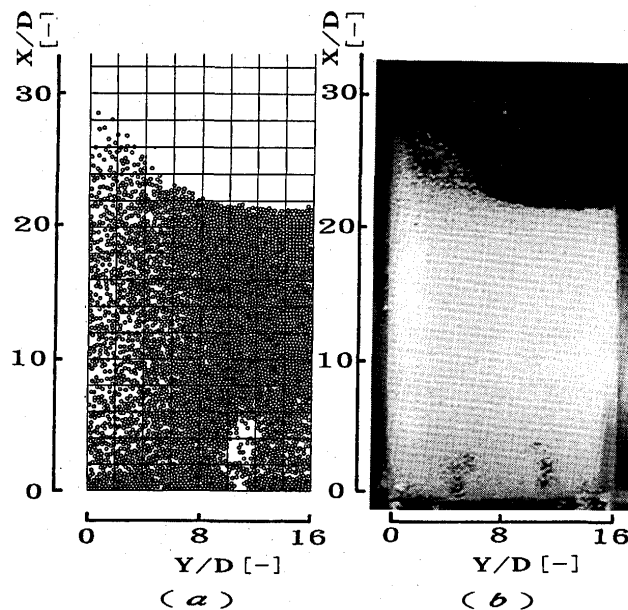


Fig. 6. Instantaneous locations of particles, (a) calculated result [t=0.057s, Z/D=15], (b) experimental result.

は一切加えていない。計算結果は実験結果をほぼ表現している。このような2粒子間衝突が粒子の運動に支配的となる流れ場、すなわち大部分の粒子が分散状態になっている高速の流れ場はHard Sphere Modelを用いてよく表現することができる。なお、流動層に特徴的な気泡の発生・成長・合体やウェイクがより顕著に現れるようになる、本計算の場合にくらべて粒径がはるかに小さい場合の現象の数値計

算を行うためには、計算する粒子の数を非常に多くとる必要がある。しかし、現在でも計算機の記憶容量と演算速度の制約のために計算可能な粒子数には上限があるので、計算する粒子の数を増やすという方法だけでは、これらの現象が顕著に現れる微小粒子の流動層中の気流と粒子の運動をシミュレーションすることは難しい。そこで、アルゴリズムをさらに改良する等して計算機で取り扱うことができる粒子数を限界まで増やすことと、それらの粒子の運動を代表粒子の運動として計算し、直接モンテカルロ法(DSMC法)を適用することが考えられる。直接モンテカルロ法を適用すると、現在の $10^3$ 倍~ $10^4$ 倍程度の数の粒子が存在する流れ場が数値計算できるようになるため、微小粒子の流動層の数値解析も可能になる。ただし、この場合も2粒子間衝突が粒子の運動に支配的となる流れ場、すなわち大部分の粒子が分散状態になっている高速の流れ場が解析の対象となる。この程度の粒子数が計算できるようになると、微

小粒子の場合の気泡の発生・成長過程やウェイクの挙動等も数値計算によって表現することが可能となる(また、実際の装置等の解析を行う場合においても、膨大な数の粒子の運動を取り扱う必要があるため直接モンテカルロ法を用いることが不可欠となる)。現在、著者らはこの方向に沿った研究も進めている。

## 文 献

- 1) P.A.Cundall and O.D.L.Strack : Geotechnique, **29** (1979), p.47
- 2) R.D.Mindlin : J.Applied Mech., **71** (1949), p.259
- 3) R.D.Mindlin and H.Deresiewicz : J.Applied Mech., **75** (1953), p.327
- 4) パソコン分子シミュレーション(分子動力学実験入門)(河村雄行), (1990), [海文堂]
- 5) 数値流体力学(基礎と応用)(保原充, 大宮司久明編), (1992), p.219, [東京大学出版会]
- 6) 湯 晋一, 野原浩樹, 梅景俊彦: 第27回乱流シンポジウム講演論文集(1995), p.219, [日本流体力学会]
- 7) H.H.Steinour : I.E.S., **36** (1944), p.618