中-高濃度固気二相流の数値解析モデル

Models for Numerical Simulations of Moderate or Dense Gas-Solid Flows

田 中 敏 嗣*

Toshitsugu TANAKA

Key Words : Gas-Solid Flow, Numerical Simulation, Modeling, Dense Flow

1. はじめに

一般に固気二相流は、気流速度や粒子濃度などの条件によって様々な流動様式をとることが知られている。そのような流動様式は、たとえば管内流中のプラグや、流動層中の気泡、スラグ、クラスターなどの粒子の大規模構造の存在によって特徴づけられるものが多い。粒子の大規模構造をとまなう流れでは、固体粒子間の衝突や接触などの粒子間相互作用が重要となるほか、両相間での大きな相互作用が問題となる。このような複雑な流れも、最近では数値シミュレーションにより計算機上で再現することが可能となっており、様々な流動が計算により求められるようになった。

とくに、粉粒体挙動一般に広く利用されるようになった、離散要素法¹⁾ (Discrete element method, 以下DEM) に代表される離散粒子モデルを用いる方法により、非常に幅広い流動の数値シミュレーションが可能になった。ここでは、固体粒子群の大規模構造が問題となるような中濃度から高濃度の領域にわたる固気二相流の数値解析モデルの現状について述べるとともに、著者らの計算結果を中心に離散粒子モデルの応用例を紹介する。

2. 連続体モデルと離散粒子モデル

流体-固体混相流の流動のモデルには、固体粒子群の流動に関して連続体モデル (Continuum model) と離散粒子モデル (Discrete particle model) がある。連続体モデルでは巨視的な視点から、流体と粒子の混合物あるいは粒子群は一種の流体としてモデル化される。分子からなる気体の流れを連続体として取り扱う場合に、それに含まれる分子数が問題にならないのと同様、固体粒子群の連続体モデルでも膨大な数の粒子を含む問題を取り扱うことができる。しかし連続体モデルは、粒子群の連続体としての性質を決める構成方程式に対して適用範囲の広いモデルを構築することが困難であるという問題を抱えている。

連続体モデルには、流体と粒子の混合物を一種の流体とみなす混合体モデル (Mixture model) と、粒子群を一種の流体として2種類の相互に透過できる流体が相互作用しながら流れる場を取り扱う二流体モデル (Two-fluid model) がある。ここでは粒子の慣性の効果が大きく、周囲の流体との相対速度が無視できないような流れを問題とするが、そのような流れを取り扱うためには二流体モデルを用いる必要がある。

これに対して、微視的な視点から個々の粒子の運動を追跡することにより粉粒体全体の流れを求めようとするものが離散粒子モデルによる方法である。流体力、接触力あるは衝突などの影響は粒子レベルの特性からモデル化されることになる。このモデルでは、計算機的能力により運動を追跡する粒子の数は限定されるが、希薄から高濃度までの幅広い流動条件に対して良好な予測を与えることがこれまでに確認されている。離散粒子モデルを用いる数値シミュレーションに

1998年4月13日受付

*大阪大学大学院工学研究科機械物理工学専攻

(〒565-0871 吹田市山田丘2-1) TEL 06-879-7316

tanaka@mech.eng.osaka-u.ac.jp

http://www-mupf.mech.eng.osaka-u.ac.jp/~tanaka/

(著者紹介)

昭和57年大阪大学工学部卒、昭和59年同大学院工学研究科博士前期課程修了、大阪大学助手を経て平成8年から助教授、工学博士。専門：流体工学、固気二相流および粉粒体流動。現在、離散粒子モデルを用いた数値流動解析による研究を行っている。

においても、流体流動は連続体として取り扱われるので、二流体モデルの流体相に対する基礎式とモデルが用いられる。

3. 連続体モデル

3.1 局所平均量と二流体モデルの基礎式

一般に連続体モデルにおける基礎式は、流体および粒子運動の保存則に体積平均、アンサンブル平均あるいは時間平均などの平均化を行うことにより求められる。しかし、例えば流動層における気泡の発生を伴うような非定常な流れを取り扱う場合には、時間平均の考え方は適さない。ここでは Anderson と Jackson²⁾により求められた、各相ごとに局所平均化された速度や圧力などを用いて記述される基礎式を紹介する。

時間 t 、位置 $\mathbf{x}$ における k 相の体積率 α_k は次式で定義される。

$$\alpha_k(\mathbf{x}, t) = \int_{V_k} w(|\mathbf{y} - \mathbf{x}|) dV_y \quad (1)$$

ここで、 $w(r)$ は重み関数であり、積分は $\mathbf{y}$ に関して k 相が占める空間全体 (V_k) にわたって行われる。以下では、添え字 k によって k 相に関する量であることを示し、流体相については f 、粒子相については p で表すことにする。流体の体積率 α_f と粒子相の体積率 α_p との間には、 $\alpha_f + \alpha_p = 1$ の関係がある。 $w(r)$ は $r \geq 0$ に対して正の値をとる微分可能な単調減少関数であり、空間全体での積分値が 1 となるように正規化されているものとする。また、 $w(r)$ の空間的広がりには多くの粒子を含む程度に大きく、巨視的な流れのスケールに比べて小さくとられるものとする。通常の点で定義される量を q'_k とすると、局所平均量 q_k は次式で定義される。

$$q_k(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{\alpha_k(\mathbf{x}, t)} \int_{V_k} q'_k(\mathbf{y} - \mathbf{x}) w(|\mathbf{y} - \mathbf{x}|) dV_y \quad (2)$$

上式から明らかなように、ここで定義される局所平均量は、 $w(r)$ で重み付けされた各相ごとの局所体積平均値を表している。例えば、粒子群の間を流れる流体速度の局所平均量は、空塔速度のようなものではなく、粒子の存在によって狭くなった流路を流れる流体の平均流速に対応する。式 (2) の体積積分の範囲をその相の占める体積から全空間に拡張したものは単純な体積平均となり、例えば空塔速度に対応する量を与えることになる。

両相を非圧縮として、粒子と流体間で物質移動がない場合を考えると、局所平均量に対する連続の式は次式で与えられる。

$$\frac{\partial \alpha_k}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\alpha_k u_{kj}) = 0 \quad (3)$$

ここで u_{kj} は k 相の速度である。

流体に体する運動方程式は次式で与えられる。

$$\begin{aligned} \rho_f \frac{\partial}{\partial t} (\alpha_f u_{fi}) + \rho_f \frac{\partial}{\partial x_j} (\alpha_f u_{fi} u_{fj}) \\ = \alpha_f \left(\frac{\partial \tau_{fij}}{\partial x_j} - \frac{\partial p}{\partial x_i} \right) - f_i + \rho_f \alpha_f g_i \end{aligned} \quad (4)$$

ここで p 、 τ_{fij} 、 f_i はそれぞれ流体の圧力、せん断応力、粒子に働く流体力の成分であり、いずれも局所平均量を表す。式 (4) では、 $\partial p / \partial x_i$ および $\partial \tau_{fij} / \partial x_j$ の寄与は流体力から分離されているが、これらを f_i に含める場合もあるので注意を要する。また、 g_i は重力加速度の成分である。ここでは、固気系の場合を想定し、浮力を無視している。式 (4) 中で、応力テンソル τ_{fij} と流体力 f_i については、一般の条件に対して理論解はないので、問題に応じて実験式などにもとづく適切な構成式が与えられなければならない。応力テンソル τ_{fij} については粘性応力の他に、乱流であれば乱流のレイノルズ応力が問題となり、乱流がない場合であっても、粒子の運動にともなう流速変動によりレイノルズ応力が発生する。とくに粒子濃度が大きく、粒子の影響が無視できない場合について、これらの構成式の問題には未解決な部分が多く、実際の応用では τ_{fij} について粘性応力のみを考慮するもの、非粘性として $\tau_{fij} = 0$ とするものなどがある。 τ_{fij} を無視した非粘性のモデルによっても流動層におけるバブリングやスラッシングなどの特徴的な流動パターンがよく予測されることが示されている³⁾。

粒子相に対する運動方程式は次式で与えられる。

$$\begin{aligned} \rho_p \frac{\partial}{\partial t} (\alpha_p u_{pi}) + \rho_p \frac{\partial}{\partial x_j} (\alpha_p u_{pi} u_{pj}) = \alpha_p \left(\frac{\partial \tau_{pji}}{\partial x_j} - \frac{\partial p}{\partial x_i} \right) \\ + \frac{\partial T_{pji}}{\partial x_j} + f_i + \rho_p \alpha_p g_i \end{aligned} \quad (5)$$

ここで T_{pji} は粒子相の応力テンソルの成分であり、流体の場合と同様、適当な構成式により与えられなければならない。

3.2 粒子相の応力のモデル

Anderson と Jackson²⁾ は T_{pji} の構成式として二

ニュートン流体と類似のモデルに言及した。Pritchettら⁴⁾は、その考え方に従い、実験式にもとづく粒子相の粘性係数のモデルを用い、2次元気系流動層での気泡の形成過程を得ることに成功した。その後、ニュートン粘性を仮定した数値シミュレーションがいくつか行われている⁵⁻⁸⁾。このモデルでは、与えられた粒子に対して実験により粒子相の粘性係数を決める必要があるが、粘性係数を一定とするモデルなどではその妥当性に疑問があり、さらに空隙率や速度勾配などの幅広いパラメータの範囲に対して実験により構成式を決めることが困難であるという問題がある。

粒径、粒子密度、反発係数などの粒子物性、さらに空隙率や局所的な速度勾配などの影響をモデル中に組み込んだものとして、気体運動論を用いる方法がある。DingとGidaspow⁹⁾は、JenkinsとSavage¹⁰⁾、Savage¹¹⁾らの粒子流に対する気体運動論を2次元気系流動層の数値シミュレーションに適用した。このアプローチは、気体運動論を用いることから明らかなように衝突支配のいわゆる rapid granular flow に対して有効なものであって、粒子が詰まった状態にあって接触を維持する領域が無視できないような流れには適用できない。この方法は中濃度から高濃度系において有望な方法と考えられるが、速度分布関数に仮定されている Maxwell 分布が有効な条件の範囲などに問題が残されている。この他、HopkinsとLouge¹²⁾は離散粒子モデルを用いた粒子群の単純せん断の数値シミュレーションを行い、非弾性衝突の効果により形成される粒子の小規模クラスターのため、粒子相の応力が気体運動論の予測からずれることを指摘している。これらの問題の他、流体の影響の導入などが必要と思われる。

気体運動論とは異なるが、衝突支配流動に対する構成方程式に、加納ら¹³⁾によるセルモデルを用いたものがある。加納らはセルモデルという概念を導入し、近隣の粒子との衝突によるエネルギー消散を、仮想の球形セル内壁との衝突に置き換えることによって粒子相応力の構成式を導いた。加納¹⁴⁾はその構成式を用い、さらにSPH (Smoothed Particle Hydrodynamics) の手法によって粒子相を離散化する計算法を提案している。

T_{pij} のモデリングに関して、離散粒子モデルを用いた数値シミュレーションを利用する研究も行われている。多くの研究は、粒子流に対する気体運動論の観点から行われたものが多いが (Campbell と Gong¹⁵⁾、Walton と Brown¹⁶⁾、Campbell¹⁷⁾)、DEM による粒子

せん断層の数値実験から構成式を決定する試みも行われている (湯ら¹⁸⁾)。DEM により構成式を決定する方法は、実験によるせん断試験を数値シミュレーションで置き換えるものであるが、実験では測定が困難な条件に対して威力を発揮することが期待できる。

3.3 流体力のモデル

粒子相に働く流体力 f_i としては、粒子レイノルズ数が小さな単一の微小粒子に対しては理論解が求められているが (Maxey と Riley¹⁹⁾)、一般的には種々の経験式などを用いて表される。粒子の濃度が低い場合には、単一の粒子の流体力が用いられ、固気系の場合には定常抗力、回転揚力、流体の速度勾配による揚力などが問題となる。固液系では、その他に仮想質量力や履歴力を考慮する必要がある。これらの流体力についても多くの理論式および経験式が求められており、例えば Clift ら²⁰⁾、Crowe ら²¹⁾の解説が参考になる。高濃度領域の問題では、例えば気系流動層内の流動の数値シミュレーションにおいては、これまで定常抗力のみが考慮されてきている。さらに付加的な要因の影響についても興味のあるところではあるが、粒子相の応力など他の構成式の精度の向上がその前に必要であろう。ここでは中濃度から高濃度の領域に対する定常抗力のモデルを紹介する。粒子相に働く流体力 f_i を流体抵抗係数 β を用いて次のように表す。

$$f_i = \beta(u_{fi} - u_{pi}) \quad (6)$$

β は、高濃度に対しては Ergun の式²²⁾、低濃度域に対しては Wen と Yu の式²³⁾を用いると次の様に表される。

$$\beta = \begin{cases} \frac{\mu \alpha_p}{d_p^2 \alpha_f} [150 \alpha_p + 1.75 Re] & (\alpha_f \leq 0.8) \\ \frac{3}{4} C_D \frac{\mu \alpha_p}{d_p^2} \alpha_f^{-2.7} Re & (\alpha_f > 0.8) \end{cases} \quad (7)$$

$$C_D = \begin{cases} 24(1 + 0.15 Re^{0.687}) / Re & (Re \leq 1000) \\ 0.43 & (Re > 1000) \end{cases} \quad (8)$$

$$Re = \frac{|u_f - u_p| \rho_f \alpha_f d_p}{\mu} \quad (9)$$

ここで C_D は単一球に対する抵抗係数であり、 $Re \leq 1000$ に対する式は Schiller と Nauman²⁴⁾ によるものである。

式 (7) の $\alpha_f \leq 0.8$ に対する式は Ergun の式に対応するものであるが、よく知られている公式と次の二点について異なっているので、注意すべきである。まず、

流体の速度が空塔速度に対応する単純な体積平均ではなく、局所平均流速 u_f は流体の占める体積における相平均であるという点である。体積平均速度を U_f とすると、 u_f との間に $U_f = \alpha_f u_f$ という関係がある。二点目は、流体抵抗の結果発生する圧力勾配により粒子群に働く力 $-\alpha_f \partial p / \partial x_i$ が取り除かれていることである。この成分を取り除いておかなければ、式 (5) の圧力勾配項により、気流圧力勾配からの影響を二重に加算することになる。

4. 離散粒子モデル

離散粒子モデルは直接接触による固体間相互作用の取り扱いにより、剛体粒子モデル (Hard particle model) と柔軟粒子モデル (Soft particle model) にさらに分類できる。剛体粒子モデルでは、粒子同士あるいは粒子と固体壁とが直接接触する際の相互作用が衝突モデルにより与えられる。これは、接触に要する時間を無視して、衝突による粒子速度の変化が瞬時に起こると見なすものである。これに対して、柔軟粒子モデルでは固体間の直接接触の際の接触力がモデルにより与えられる。剛体粒子モデルでは常に粒子の分散状態が維持される場合に適用が限定されるのに対し、柔軟粒子モデルでは持続的な接触をともなう粒子群の運動も扱うことができる。図1は柔軟粒子モデルを用いる DEM により求められた水平管内のプラグ流の流動である (田中ら²⁵⁾)。このような流動は高濃度空気輸送装置内でみられるもので、実際の流動をよく表している。図からわかるように、粒子は水平管の底部に粒子堆積層を形成し、その上をプラグが波動状に輸送される。粒子堆積層内やプラグ内では粒子は近隣の粒子と接触を保つため、このような流れを衝突モデルを用いる剛体粒子モデルで取り扱うことは不可能である。

図1 水平管内プラグ流動²⁵⁾
(管内径50mm, 粒径10mm, 管長800mm,
空塔速度2.4m/s, 周期境界条件)

4. 1 柔軟粒子モデル

4. 1. 1 基礎式

図1の粒子堆積層およびプラグ中では、粒子は周囲の複数の粒子と同時に接触し、これらの粒子から各接触点において接触力を受ける。したがって、粒子の運動方程式中の外力項にこれらの合力 F_c を加えて数値積分すれば粒子の運動が求められる。接触力以外に流体力 F_f と重力を考えれば、粒子の並進運動の運動方程式は

$$\dot{\mathbf{v}} = \frac{1}{\rho_p} (\nabla \cdot \boldsymbol{\tau}_f - \nabla p) + \frac{1}{m} (\mathbf{F}_c + \mathbf{F}_f) + \mathbf{g} \quad (10)$$

となる。ここで $\mathbf{v}$ は粒子の速度、 m は粒子の質量、 $\mathbf{g}$ は重力加速度であり、記号の上についたドットは時間 t に関する微分を表す。

さらに粒子の回転運動に対しては接触力のみの影響を考え、球形粒子を仮定すれば、回転運動に対する運動方程式は次式のようにになる。

$$\dot{\boldsymbol{\omega}} = \frac{1}{I} (\mathbf{T}_c + \mathbf{T}_f) \quad (11)$$

ここで $\boldsymbol{\omega}$ は粒子の角速度、 $\mathbf{T}_c$ は着目する粒子に働く接触力によるトルクの総和、 $\mathbf{T}_f$ は流体からの抵抗トルク、 I は粒子の慣性モーメントである。近隣の粒子と接触を続けるような場合、あるいは粒子の緩和時間に比べて粒子間衝突の間の時間間隔が小さいような高濃度の条件下では、 $\mathbf{T}_c$ の影響に比べて $\mathbf{T}_f$ は無視できる。各粒子に対して、以上の運動方程式を数値積分することにより粒子群の運動が求められる。

4. 1. 2 接触力モデル

以上の運動方程式に現れる接触力を表す接触力モデルとしては、いくつかのモデルが提案されている^{1, 16, 25, 27, 28)}。接触力モデルはいずれも弾性的な反発力と接触要素間の相対運動によるエネルギー消散を与える要素を最小限含んでいる。ここでは柔軟粒子モデルとして最初に提案され、広く用いられている

図2 DEMの接触力モデル

Cundall と Strack¹⁾ のモデル (図2) を紹介する。

以下では添え字 n により接触面に対して法線方向の値, t により接線方向の値を示すことにする。接触点において粒子 i が受ける法線方向および接線方向の反発力 $\mathbf{f}_{cn}$, $\mathbf{f}_{ct}$ はバネの弾性反発力およびダッシュポットの粘性減衰力の和として,

$$\mathbf{f}_{cn} = (-k_n \delta_n - \eta_n \mathbf{V}_{ij} \cdot \mathbf{n}) \mathbf{n} \quad (12)$$

$$\mathbf{f}_{ct} = -k_t \delta_t - \eta_t \mathbf{V}_{ij} \quad (13)$$

のように与えられる。ただし, δ_n は接触点に加わる法線方向の変位量, $\mathbf{V}_{ij} (= \mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j)$ は粒子 i の粒子 j に対する相対速度, $\mathbf{n}$ は接触面に対して粒子 i から粒子 j に向かう法線方向単位ベクトル, δ_t は粒子 i の粒子 j に対する接触点における接線方向相対変位ベクトル, $\mathbf{V}_{ij}$ は接触点における粒子 i の粒子 j に対する接線方向相対速度ベクトルであり, それぞれの粒子半径を a_i および a_j として次式で与えられる。

$$\mathbf{V}_{ij} = \mathbf{V}_{ij} - (\mathbf{V}_{ij} \cdot \mathbf{n}) \mathbf{n} + (a_i \boldsymbol{\omega}_i + a_j \boldsymbol{\omega}_j) \times \mathbf{n} \quad (14)$$

式 (13) で与えられる $\mathbf{f}_{ct}$ の大きさが $\mu |\mathbf{f}_{cn}|$ を越える場合には接触点で滑りが発生したとされ, $\mathbf{f}_{ct}$ は以下に示す摩擦スライダーによる摩擦力で与えられる。

$$\mathbf{f}_{ct} = -\mu |\mathbf{f}_{cn}| \mathbf{t} \quad (15)$$

ただし, $\mathbf{t} = \mathbf{V}_{ij} / |\mathbf{V}_{ij}|$ 。

4. 1. 3 接触力モデルのパラメータについて

接触力モデル中のバネとダッシュポットの特性についてはいくつかのモデルが提案されている^{16, 25-27)}。上記の線形のバネとダッシュポットの利点は, その特性を解析的に決定することができることにある。しかし, 実際の粒子の変形に対する弾性反発力の関係は必ずしも線形ではない。例えば, Hertz の弾性接触の理論²⁸⁾ によれば, 一様な等方性弾性体の球同士の間で働く法線方向の弾性反発力は接近量の $3/2$ 乗に比例するものとなる。しかし, 2次元流動層の数値シミュレーションは, 以下のようにバネの特性が重要ではないことを示している。川口ら²⁶⁾ は2次元流動層内の球形粒子の流動に対して, 実際の物性に比べて非常に小さなバネ定数をもつ線形バネのモデルを用いた数値シミュレーションを行い, 実験で観測される流動様式の変化がよく表されることを示した。また, 同じく線形バネを用いた Mikami²⁹⁾ による2次元流動層の数値シミュレーションの結果では, 粒径に対する粒子の変形量が無視できる程度に選ばれていれば, 流動パターンや圧力変動などの特性はバネ定数に依存しないこ

図3 2次元流動層内の流動に対するバネ定数の影響 ($k = k_n = k_t$)

とが指摘されている。参考のため, 図3に川口ら²⁶⁾ の2次元流動層の数値シミュレーション ($d_p = 4\text{mm}$, $\rho_p = 2700\text{kg/m}^3$, $k_n = k_t = 800\text{N/m}$, 粒子数2400個, 流路幅150mm, 静止層高220mm) に対して, バネ定数のみを変えた場合の粒子流動のスナップショットを示す。以上の結果を参考にすれば, 流動層内の流動に関して粒子間接触の弾性反発力の特性は重要ではなく, 粒径に対して大きな変形を起こさない範囲で線形バネのモデルを使用すればよい。ただし, 対象とする現象によりバネの特性が問題になる場合があり, 種々の現象に対するデータの蓄積が必要である。

DEM による数値解析では, 計算を安定に行うための限界の時間ステップは, 接触力モデル中のバネ定数に大きく依存する。線形バネのモデルでは, 法線方向の質量-バネ系の固有振動の周期 $T = 2\pi \sqrt{m/k_n}$ が限界時間ステップの基準となり, 安定かつ妥当な計算結果を得るためには約 $T/10$ 以下の時間ステップが必要であることが知られている²⁶⁾。したがって, バネ定数が大きな, つまり硬い粒子の条件は小さな時間ステップが必要になるため, 柔らかい粒子に比べて長時間の計算時間を要する。バネ定数を実際よりも小さく設定することが計算時間の点から有利である。

粘性減衰係数は粒子の反発係数にもとづいて与えることができる^{25, 26)}。線形バネを用いるモデルでは, 反発係数 e にもとづいて粘性減衰係数が以下のように与えられる²⁶⁾。

$$\eta_n = -\frac{2 \ln e}{\sqrt{\pi^2 + \ln e}} \sqrt{mk_n} \quad (16)$$

これに対して接線方向のダッシュポットの特性は, 例えば粘性減衰係数比を法線方向と等しくするなど, 便宜的に決められることが多い。

図4 2次元流動層内の粒子流動⁽²⁶⁾

4. 1. 4 応用例

DEMにより固気二相流の数値解析を行ったものには、水平管内プラグ流⁽²⁵⁾、2次元流動層^(26, 29-31)、3次元流動層^(29, 32)、3次元噴流層⁽³³⁾などがある。また流動層における液架橋による付着力の導入も試みられている^(29, 34)。

図4は川口ら⁽²⁷⁾の2次元流動層の計算で得られた空塔速度の変化による流動パターンの変化を示している。4. 1. 3節で述べたように、計算の時間ステップを大きくするため $k_n=800\text{N/m}$ という非常に小さなバネ定数が採用され、粒子運動に関する計算の時間ステップとして $2\times 10^{-4}\text{s}$ が用いられた。流体は非粘性として、解法にはSIMPLE法⁽³⁵⁾が用いられている。流体の局所平均化は、矩形の形状をもつ流体の各計算セル内においてなされた。図のように、空塔速度の増加とともにスラッシングや気泡の発生などの流動パターンの変化する様子が得られている。この流動パターンの変化は、同時に行われた実験とも一致しており、気泡の発生周期もよく一致した。この計算を3次元に拡張した結果を図5に示す⁽³²⁾。容器形状は断面が一辺150mmの正方形であり、粒子数は8万個、粒子の特性は2次元の場合と同じである。図のように容器の角に沿って気泡が吹き抜けているが、これは実験で観測された流動パターンと一致した。

4. 2 剛体粒子モデル

4. 2. 1 基礎式

粒子間の相互作用が衝突とみなせる場合には、粒子間相互作用は粒子の流体中での運動の運動方程式から分離でき、衝撃運動方程式により記述される。このような粒子運動のモデルが剛体粒子モデルである。運動の基礎式は、直接接合による固体間相互作用を含まな

図5 流動層内の3次元流動⁽³²⁾ ($U=2.7\text{m/s}$)

い運動方程式と衝撃運動方程式である。直接接合による相互作用のない運動方程式は、柔軟粒子モデルの運動方程式の式(10)および(11)において $\mathbf{F}_c=\mathbf{T}_c=0$ としたものである。球形の粒子 i と粒子 j の衝突を考えると、粒子 i に対する並進運動と回転運動の衝撃運動方程式はそれぞれ次のようになる。

$$\mathbf{v}_i^* = \mathbf{v}_i + \frac{\mathbf{J}}{m_i} \quad (17)$$

$$\boldsymbol{\omega}_i^* = \boldsymbol{\omega}_i + \frac{a_i}{I_i} \mathbf{n} \times \mathbf{J} \quad (18)$$

ここで $\mathbf{n}$ は接触面に対して粒子 i から粒子 j に向かう法線方向単位ベクトル、 $\mathbf{J}$ は粒子 i に働く衝撃力、 a_i および I_i は粒子 i の半径および慣性モーメントであり、衝突後の状態には*が添えられている。

4. 2. 2 粒子間衝突モデル

衝撃力 $\mathbf{J}$ はどのような衝突のモデルを考えるかにより、異なったものとなる。実際の粒子運動で問題となる固体粒子では、粒子間衝突に関する特性は様々であり、粒子形状や表面粗さなど種々の因子の影響を受けるが、ここでは滑らかな表面をもつ球形剛体粒子の衝突モデルを紹介する。

反発係数は衝突の条件に関係なく一定、さらに、衝突の期間中で接触点での滑りがある間は粒子間の摩擦力はクーロンの法則に従う、と仮定すれば、衝撃力は反発係数 e と摩擦係数 μ_f を用いて記述できる。 $\mathbf{J}$ を次のように法線方向と接線方向の成分に分割する。

$$\mathbf{J} = -J_n \mathbf{n} - J_t \mathbf{t} \quad (19)$$

ここで $\mathbf{t}$ は接線方向の単位ベクトルであり、衝突直前

の粒子 j に対する粒子 i の接触点での相対速度ベクトル V_{ji} の向きをもつ。柔軟粒子モデルの場合と同様に $V_{ij} = v_i - v_j$ とすると、 V_{ji} は式(14)で与えられ、 t は $t = V_{ji}/|V_{ji}|$ と表される。これらから、衝撃力の法線方向成分 J_n と接線方向成分 J_t は次式のようになる。

$$J_n = (1+e)Mn \cdot V_{ij} \quad (20)$$

$$J_t = \min[\mu_f(1+e)Mn \cdot V_{ij}, \frac{2}{7}M|V_{ji}|] \quad (21)$$

ここで、 $\min[A, B]$ は A, B のうち最小のものを与えるものとする。また、 M は $M = m_i m_j / (m_i + m_j)$ で定義される換算質量である。式(21)の右辺の括弧内において、左の項は衝突終了時まで滑りが残っている場合に対応しており、右の項は衝突終了時に滑りが消滅している場合に対応している。

4. 2. 3 DSMC 法

粒子間衝突がいつどこで発生するかは、個々の粒子間の相対運動を調べることにより検出できる³⁶⁾。そのような決定論的方法では、計算の時間ステップごとに粒子の近傍に存在するすべての粒子との衝突の判定を行う必要があり、この手続きは大きな計算時間を要する。これに対して衝突を確率論的に取り扱う Direct Simulation Monte-Carlo (DSMC) 法³⁷⁾では、衝突の判定に要する計算時間を短縮できるほか、計算で取り扱う粒子数も決定論的方法に比べて大幅に減じることができる。

DSMC 法は Bird³⁷⁾により希薄気体の流れの数値シミュレーションとして提案されたものであり、実在の分子に比べて極めて少数の分子の運動をもとに、確率法則にもとづいて分子間衝突を与えながら分子の流れを計算する手法である。分子間衝突の考え方はそのまま粒子間衝突に応用することができ、固気二相流への適用が行われている³⁸⁻⁴⁴⁾。粒子運動に対する DSMC 法の詳細については、著者による解説⁴⁵⁾を参照されたい。

4. 2. 4 応用例

低濃度から中濃度の流れの領域では、柔軟粒子モデルを用いる方法は効率が悪く、通常は剛体粒子モデルが用いられる。しかし、流動層のような高濃度の流れに対しても剛体粒子モデルの適用が行われている。Hoomans ら⁴⁶⁾は、剛体球モデルを用いて 2 次元流動層内での気泡の形成などを予測することができることを示している。また、湯ら⁴⁷⁾は、実時間にして約 0.1 秒という非常に短時間のものではあるが、約 33 万個の粒子からなる 3 次元流動層内の流動に対して剛体球モ

図6 粒子クラスターの3次元構造⁴²⁾ (上段：鉛直断面、下段：水平断面、粒径 $61 \mu\text{m}$ 、計算領域：横幅 60mm 、奥行き 60mm 、高さ 120mm 、周期境界条件)

デルによる数値解析を行っている。

DSMC 法の固気二相流への応用では、Kitron ら³⁸⁾による対向噴流の解析が最初のもので、その後、著者ら³⁹⁻⁴³⁾および湯ら⁴⁴⁾が用いた。著者らは鉛直上昇流中での粒子クラスターの形成を DSMC 法により求めた⁴⁰⁻⁴³⁾。図6に3次元の流動解析の結果を示す⁴²⁾。計算には約 300 万個の標本粒子が用いられた。図は粒子体積分率の分布を示しており、Horio と Kuroki⁴⁸⁾の実験の条件で計算は行われている。黒い部分が粒子濃度の高いクラスターを示している。クラスターの形状や大きさは、Horio と Kuroki の測定に近いものとなっている。

湯ら⁴⁴⁾は 3 次元乱流流動層に対して DSMC 法による数値シミュレーションを行なった。計算結果は概ね実験と一致したが、高濃度域での実験との不一致が指摘され、これと剛体粒子モデルの関連が指摘されている。高濃度流れでは、粒子間の接触時間が無視できない状態が現れた場合に計算が破綻することになるので、この点については注意が必要であろう。

5. おわりに

中濃度から高濃度の固気二相流の数値解析モデルについて、著者の知る範囲で紹介した。なお、ここでは粒子間の直接の接触が問題となるような場合を取り扱ったが、粒子レイノルズ数が小さく流体力を介した粒子間相互作用が支配的となる場合に対する数値解析が Ichiki と Hayakawa⁴⁹⁾により行われていることにも触れておく。

連続体モデルと離散粒子モデルの得失についても述べたが、粒子数などの条件が離散粒子モデルの守備範囲であれば、離散粒子モデルがよい結果を与えることが期待できる。現状では多いもので、柔軟粒子モデル

では10万個オーダー、剛体粒子モデルでは100万個オーダーの粒子の3次元運動が取り扱われており、問題によっては実現象と同じ条件での計算が可能となっている。DSMC法のような確率論的な手法を用いれば、さらに多数の粒子の存在する場を扱うことができる。

大容量の粉体が存在するような問題で、離散粒子モデルによるアプローチが不可能な場合、連続体モデルによらなければならない。連続体モデルの構成式の開

発においても、離散粒子モデルはすでに利用されており^{13, 18)}、今後すぐれた構成式が提案されることを期待する。

なお、本解説では中濃度から高濃度の問題を対象としたが、低濃度を含む混相流の数値シミュレーション全般に関しては湯⁵⁰⁾による総説を参照されたい。また、離散粒子モデルの粉粒体動力学への応用については田口⁵¹⁾による解説が参考になるので、紹介しておく。

記号表

a : 粒子半径	(m)	u_k : k 相の速度 (局所平均量)	(m/s)
C_D : 抵抗係数	(-)	v : 粒子速度	(m/s)
d_p : 粒径	(m)	V : 相対粒子速度	(m/s)
e : 反発係数	(-)	V_k : k 相の占める体積	(m ³)
f : 粒子に働く流体力 (局所平均量)	(N/m ³)	V_f : 接触点での接線方向相対速度ベクトル	(m/s)
f_c : 粒子に働く接触力	(N)	w : 重み関数	(-)
F_c : 粒子に働く接触力の総和	(N)	x, y : 位置ベクトル	(-)
F_f : 粒子に働く流体力	(N)	α_k : k 相の体積率	(-)
g, g : 重力加速度	(m/s ²)	β : 流体抵抗係数	(N・s/m ⁴)
I : 粒子の慣性モーメント	(kg・m ²)	δ, δ : 接触点の相対変位	(m)
J : 衝撃力	(N・s)	μ_f : 摩擦係数	(-)
k : バネ定数	(N/m)	μ : 流体の粘性係数	(N・s/m ²)
m : 粒子質量	(kg)	η : 粘性減衰係数	(N・s/m)
M : 換算質量	(kg)	ω : 粒子の角速度	(rad/s)
n : 法線方向単位ベクトル	(-)	τ_f, τ_f : 流体のせん断応力	(N/m ²)
p : 流体の圧力 (局所平均量)	(N/m ²)	ρ_k : k 相の密度	(kg/m ³)
q_k : k 相に関する局所平均量	(-)	指 標	
Re : 粒子レイノルズ数	(-)	f : 流体	
T : 固有振動の周期	(s)	i, j : 粒子あるいは座標成分	
t : 接線方向単位ベクトル	(-)	n : 法線方向成分	
T_c : 粒子に働く接触力によるトルク	(N・m)	p : 粒子	
T_f : 粒子に働く流体力によるトルク	(N・m)	t : 接線方向成分	
T_{pi} : 粒子相の応力テンソル (局所平均量)	(N/m ²)	*	衝突後の状態

参考文献

- 1) Cundall, P. A. and O. D. L. Strack : *Geotechnique*, **29**, 47-65 (1979)
- 2) Anderson, T. B. and R. Jackson : *I&EC Fundamentals*, **6**, 527-539 (1967)
- 3) Gidaspow, D. : "Multiphase Flow and Fluidization : Continuum and Kinetic Theory Descriptions", p. 129, Academic Press, London (1994)
- 4) Pritchett, J. W., T. R. Blake and S. K. Garg : *AIChE Symp. Ser.*, **74**, 134-148 (1978)
- 5) Richner, D. W., T. Minoura, J. W. Pritchett and T. R. Blake : *AIChE J.*, **36**, 361-369 (1990)
- 6) Kuipers, J. A. M., Tammes, W. Rins and W. P. M. van Swaaij : *Powder Technol.*, **71**, 87-99 (1992)
- 7) Nieuwland, J. J., M. J. Veenendaal, J. A. M. Kuipers and W. P. M. van Swaaij : *Chem. Eng. Sci.*, **51**, 4087-4102 (1996)
- 8) Tsuo, Y. P. and D. Gidaspow : *AIChE J.*, **36**, 885-896 (1990)
- 9) Ding, J. and D. Gidaspow : *AIChE J.*, **36**, 523-538 (1990)
- 10) Jenkins, J. T. and S. Savage : *J. Fluid Mech.*, **130**, 187-202 (1983)
- 11) Savage, S. : *J. Fluid Mech.*, **194**, 457-478 (1990)
- 12) Hopkins, M. A. and M. Y. Louge : *Phys. Fluids*, **3**, 47-57 (1991)
- 13) 加納純也, 下坂厚子, 日高重助 : 粉体工学会誌, **33**, 95-101 (1996)
- 14) 加納純也 : "粒子法による粉体シミュレーションに関する研究", 同志社大学学位論文, (1996)
- 15) Campbell, C. S. and A. Gong : *J. Fluid Mech.*, **164**, 107-125 (1986)
- 16) Walton, O. R. and R. L. Brown : *J. Rheology*, **30**, 949-

- 980 (1986)
- 17) Campbell, C. S. : *J. Fluid Mech.*, **203**, 449-473 (1989)
- 18) 湯 晋一, 林 昭久, 脇 昌裕, 梅景俊彦 : 粉体工学会誌, **34**, 212-220 (1997)
- 19) Maxey, M. R. and J. J. Riley : *Phys. Fluids*, **26**, 883-889 (1983)
- 20) Clift, R., J. R. Grace and M. E. Weber : "Bubbles, Drops, and Particles" Academic Press, London (1978)
- 21) Crowe, C., M. Sommerfeld and Y. Tsuji : "Multiphase Flows with Droplets and Particles", p. 67, CRC Press, Boca Raton (1994)
- 22) Ergun, S. : *Chem. Eng. Prog.*, **48**, 89-94 (1952)
- 23) Wen, C. Y. and Y. H. Yu : *Chem. Eng. Prog. Symp. Ser.*, **6**, 100-111 (1966)
- 24) Schiller, L. and A. Z. Nauman : *Ver. Deut. Ing.*, **77**, 318-321 (1933)
- 25) 田中敏嗣, 石田俊哉, 辻 裕 : 日本機械学会論文集 (B編), **57**, 456-463 (1991)
- 26) 川口寿裕, 田中敏嗣, 辻 裕 : 日本機械学会論文集 (B編), **58**, 2119-2125 (1992)
- 27) Taguchi, Y-h. : *Phys. Rev. Letters*, **69**, 1367-1370 (1992)
- 28) Johnson, K. L. : "Contact Mechanics", p. 90, Cambridge University Press, New York (1987)
- 29) Mikami, T. : "Agglomerating Fluidization of Liquid/Solid Bridging Particles and its Control", p. 62, Doctor Thesis of Tokyo Univ. of Agriculture and Tech. (1998)
- 30) 川口寿裕, 田中敏嗣, 辻 裕 : 日本機械学会論文集 (B編), **61**, 3169-3175 (1995)
- 31) Xu, B. H. and A. B. Yu : *Chem. Eng. Sci.*, **52**, 2785-2809 (1997)
- 32) 川口寿裕, 福嶋正造, 田中敏嗣, 辻 裕 : 日本機械学会第75期通常総会講演会講演論文集 (I), 327-328 (1998)
- 33) 川口寿裕, 坂本昌穂, 田中敏嗣, 辻 裕 : 日本機械学会論文集 (B編), **64**, 717-723 (1998)
- 34) Mikami, T., H. Kamiya and M. Horio : *Chem. Eng. Sci.*, **50**, 1927-1940 (1998)
- 35) Patankar, S. V. (水谷幸夫, 香月正司, 共訳) : "コンピュータによる熱移動と流れの数値解析", p. 130, 森北出版 (1985)
- 36) Tanaka, T. and Y. Tsuji : *ASME FED*, **121**, 123-128 (1991)
- 37) Bird, G. A. : "Molecular Gas Dynamics", p. 118, Oxford Univ. Press, London (1976)
- 38) Kitron, A., T. Elperin and A. Tamir : *Int. J. Multiphase Flow*, **16**, 1-17 (1990)
- 39) Tanaka, T., K. Kiribayashi and Y. Tsuji : *Proc. Int. Conf. on Multiphase Flows*, **2**, 439-442 (1991)
- 40) 田中敏嗣, 米村 茂, 霧林 謙, 辻 裕 : 日本機械学会論文集 (B編), **59**, 2982-2989 (1993)
- 41) 米村 茂, 田中敏嗣, 辻 裕 : 日本機械学会論文集 (B編), **61**, 3671-3678 (1995)
- 42) 田中敏嗣, 大田 史, 米村 茂, 辻 裕 : 混相流シンポジウム'97講演論文集, 49-50 (1997)
- 43) Tsuji, Y., T. Tanaka and S. Yonemura : *Powder Technol.*, **95**, 254-264 (1998)
- 44) 湯 晋一, 野原浩樹, 二井大祐, 梅景俊彦 : 化学工学論文集, **23**, 811-819 (1997)
- 45) 田中敏嗣 : 混相流学会誌, **8**, 41-47 (1994)
田中敏嗣 : 混相流学会誌, **8**, 140-146 (1994)
田中敏嗣 : 混相流学会誌, **8**, 315-323 (1994)
- 46) Hoomans, B. P. B., J. A. M. Kuipers, W. J. Briels and W. P. M. van Swaaij : *Chem. Eng. Sci.*, **51**, 99-118 (1996)
- 47) 湯 晋一, 池田憲治, 梅景俊彦, 野原浩樹 : 化学工学論文集, **22**, 67-75 (1996)
- 48) Horio, M. and H. Kuroki : *Chem. Eng. Sci.*, **49**, 2413-2421 (1994)
- 49) Ichiki, K. and H. Hayakawa : *Int. J. Modern Phys. B*, **7**, 1899-1911 (1993)
- 50) 湯 晋一 : 粉体工学会誌, **30**, 194-200 (1993)
- 51) 田口善弘 : 粉体工学会誌, **32**, 240-246 (1995)
田口善弘 : 粉体工学会誌, **32**, 330-336 (1995)
田口善弘 : 粉体工学会誌, **32**, 412-418 (1995)