粉体オートマトンを利用する大規模粉体シミュレーション

Development of Large Scale Simulation Method for Flow Behavior of Granular Materials Using Cellular Automaton

日高 重助, 桂 典史 *

Jusuke Hidaka, Norichika Katsura

A new method for a large-scale simulation of granular flow was developed using cellular automata. The automaton rule consists of the transition rule of constituent particles and the interaction rule between particles. The interaction rule is further divided into three rules; the collision rule, the static contact rule between particles, and propagation rule of impulsive force through the particle bed. The interaction rule was derived quantitatively on the basis of microscopic information on the interactive force between flowing particles under gravity obtained by DEM simulation. The evolution of granular flow with time can be simulated by defining the time equivalent to one step in automaton simulation, and the state variables in granular flow can be obtained by the proposed simulation method. The validity of the proposed powder cellular automaton method was confirmed by comparison of the simulated flow pattern of discharging flow from a hopper with the experimental one. Granular flows in real powder equipments can be simulated with a high speed by the proposed automaton method.

Keywords : Large-scale simulation, Cellular automata, New automaton rule, Granular flow

1. はじめに

粉体シミュレーションの一つである離散要素法

2006年11月13日受付

同志社大学工学部 物質化学工学科
(〒610-0321 京田辺市多々羅都谷1-3) TEL 0774-65-6608
Department of Chemical Engineering and Materials
Science, Doshisha University
(1-3, Tataru Miyakodani, Kyotanabe, Kyoto 610-0321,
Japan)

* 現 シャープ株式会社 ドキュメントシステム事業本部 ドキュメントシステム事業部 第2技術部
(〒639-1186 奈良県大和郡山市美濃町492)

< 著者紹介 >

日高重助
1972年同志社大学大学院工学研究科工業化学専攻終了, 1972年昭和電工株式会社(焙業研究所勤務), 1976年同志社大学工学部助手, 講師, 助教授を経て, 1990年同志社大学工学部教授, JST京都府地域結集型共同研究事業研究統括
専門: 粉体シミュレーション, 材料設計, 粉体力学など

桂 典史
1999年同志社大学大学院工業化学専攻博士課程後期課程単位取得退学, 1999年シャープ株式会社入社 現在に至る

(Distinct element method, DEM) は, 粉体特有の不連続流動挙動をよく表現し, これにより得られる微視的情報は粉体现象の基礎的理解を大いに進めた¹⁾。しかし, DEM シミュレーションの問題は計算負荷が非常に高く, 今後コンピュータの性能が飛躍的に向上したとしても, 膨大な個数の粒子が関与する実際の粉体现象のシミュレーションは不可能なことである。このことは, 実際の粉体操作や装置設計に関する情報をDEM シミュレーションから得るのが難しいことを示しており, 粉体シミュレーションのさらなる発展には粒子法による新しい大規模シミュレーション法を開発しなければならない。

DEM シミュレーションは粒子間相互作用力を逐一計算し, 個々の粒子を運動方程式により極めて小さな離散化時間で追跡するために計算負荷が大きい。したがって, 新しい粉体シミュレーション法の開発では, 粒子間相互作用に関する計算の高速化を図ることが最も大切である。これに対する有力な方法の一つは, セルオートマトン (cellular automaton, CA) を利用することであろう。

セルオートマトンは計算空間をセルで離散化し, 粒子運動の自由度を空間的かつ時間的に制限して, 粒子

Fig. 1 Cellular automata using 2-D triangular lattice

間相互作用や運動をルールで表現するシミュレーション法である。粉体粒子の挙動を正確に再現するオートマトンルールを見出すことができれば、計算機の負荷が激減し、大規模粉体シミュレーションを実現することができる。

粉体系に対するオートマトンの適用は1980年代後半から試みられている。円錐状に堆積した粉体層を自己組織化臨界現象 (self-organized criticality) とみなし、粉体粒子間の相互作用をもとにその自己組織化臨界現象を説明しようとする砂山モデル^{2,3)}が一種のオートマトンである。粉体流れへの本格的な適用はBaxter ら⁴⁾によりなされ、その後いくつかの研究がある。しかしこれらの研究は、粉体流れに対する特有のオートマトンルールを見出すことができず、格子気体オートマトン (LGA) のルールを少し拡張したGranular Media Lattice Gas (GMLG) 法⁵⁾、あるいは、粉体粒子の基本的な挙動のみに着目して発見的に導いたルールを適用している。したがって、粒子間摩擦相互作用に起因する粉体流動特有の挙動が表現できず、粉体現象の力学解析に適用できるほどの正確なシミュレーションレベルには達していない。

粉体工学におけるシミュレーションの役割は、粉体現象の基本的理解に加えて粉体装置や操作の設計を支援することであり、そのためには粉体挙動の時間発展を正確に追跡し、粉体流動過程における物理量が定量的に得られなければならない。

ここでは、粉体貯槽から均一粒径粒子群が排出される重力流動挙動を例にして、著者らが開発したオー

トマトンシミュレーション法⁶⁾を紹介する。まず、DEMにより粉体重力流動挙動のシミュレーションを行い、流動粒子間相互作用力の微視的な観察から粒子間相互作用ルールを定量的に導出する。つぎに時間の概念の導入について説明した後、粉体貯槽からの重力流動の二次元オートマトンシミュレーションを行い、オートマトンルールによるシミュレーションの信頼性と有用性について述べる。

2. 二次元粉体セルオートマトン法

簡単のために、均一粒径粒子群に対する二次元セルオートマトンシミュレーションを説明する。計算空間を一辺の長さが粒子径に等しい三角格子で覆い (Fig. 1 (a)), それぞれの三角格子点に粉体粒子、空隙、境界を定義する。いま、着目粒子が位置 $\vec{r}$ にある格子点を占めているとすると、その隣接格子点の位置は Fig. 1 (b) のように $\vec{e}_j (j=1 \sim 6)$ を単位ベクトルとして $\vec{r} + \vec{e}_j$ で表され、このとき着目格子とその周りの六つの最近接格子点をまとめてセルと呼ぶ。着目格子点にある粒子は周囲の隣接格子点にある粒子から作用力を受けて移動するが、その粒子は三角格子上のみを運動する。このとき粒子の運動の推進力となる粒子間相互作用力は、DEMのように力学計算をしないで、オートマトンルールにより決定する。したがって、粉体セルオートマトン法を開発する上で最も大切なことは、粉体現象を正確に再現する粒子間相互作用力と、その作用力による粒子の運動を表現するオートマトンルールを導き出すことである。

(a) Snapshot

(b) Contact time distribution between flowing particles

Fig. 2 DEM simulation of discharging flow behavior of particles from a hopper

重力場で着目粒子に働く力は、次式の通り着目粒子の質量力 $\vec{f}_g$ と近接粒子 i との相互作用力 $\vec{f}_i$ の和 $\vec{f}$ である。

$$\vec{f} = \vec{f}_g + \sum \vec{f}_i \quad (1)$$

その作用力を受けた粒子は格子点を移動ルールに従って運動し、粒子が存在した格子点の状態が更新される。したがって、Eq. (1) で与えられる作用力と、その作用力による粒子の運動を表すオートマトンルールを導出しなければならない。

いま、位置 $\vec{r}$ にあり、シミュレーションの繰り返し回数（ステップ）が t である格子の状態を $L(\vec{r}, t)$ で表すと、セルの状態は次式で表される。

$$\begin{aligned} cell(\vec{r}, t) = & \{L(\vec{r}, t), L(\vec{r} + \vec{e}_1, t), L(\vec{r} + \vec{e}_2, t), \\ & L(\vec{r} + \vec{e}_3, t), L(\vec{r} + \vec{e}_4, t), \\ & L(\vec{r} + \vec{e}_5, t), L(\vec{r} + \vec{e}_6, t)\} \end{aligned} \quad (2)$$

このとき、 $L(\vec{r}, t) = 1$ ならば粒子、 $L(\vec{r}, t) = 0$ ならば空隙と定義する。また、粒子への作用力に基づいて粒子が運動し、格子の状態を $L(\vec{r}, t)$ から $L(\vec{r}, t+1)$ に更新する運動ルールは、一般に移動ルールと呼ばれる。

2.1 粒子間相互作用ルール

粉体セルオートマトン法のルールの探索には、粉体現象を特徴づける粒子間相互作用力に関する定量的で、微視的な情報が必要である。これに対して、粉体系で定着している DEM シミュレーションが有効であ

る。DEM は粉体現象を引き起こす個々の粒子の挙動を時々刻々追跡するので、粒子間の相互作用に関する定量的、微視的情報を与える。

そこで、粉体重力流動挙動の DEM シミュレーション (Fig. 2 (a)) を行い、流動粒子の挙動や粒子間相互作用に関する詳しい観察を行った。その結果、Fig. 2 (b) のように、ホッパー内の粒子の接触時間分布は非常に広く、重力流動を表現するオートマトンルールとしては、粒子間衝突を表現する衝突ルールと、長時間接触している粒子に対する接触粒子間相互作用を表現する接触ルールが必要であることが分った。さらに、接触ルールは、次の三つのルールに分けるのが良いことも分った。すなわち、①静止平衡状態における接触相互作用ルール、②過渡状態の接触相互作用ルール；静止状態から運動状態へ移行するとき、近接粒子間作用力の平衡が崩れて不平衡力が生じる。このルールにより不平衡力を算出する。③衝撃的作用力の伝達ルール；接触状態にある粒子群に流動粒子群が衝突すると、衝撃的な作用力が接触状態にある粒子の接触点を介して遠方の粒子群まで伝播する。この衝撃的作用力の伝播を表現するルールである。

2.1.1 流動粒子間相互作用ルールの導出

流動過程では、流動粒子群の構造が時々刻々変化している。そこで、衝突速度と衝突力、ならびに、接触状態と接触相互作用力の関係を粒子構造の関数としてルール化すると、次式により粒子間相互作用力を表すことができる。

Fig. 3 Derivation of collision rule

Fig. 4 Possible orientation of flowing particles

$$\Sigma \tilde{f}_i = \begin{cases} \Sigma \tilde{f}^{\text{coll}} (\text{衝突}) \\ \text{あるいは} \\ \Sigma \tilde{f}^{\text{cont}} (\text{接触状態}) \end{cases} \quad (3)$$

$$\Sigma \tilde{f}^{\text{cont}} = \begin{cases} \Sigma \tilde{f}_{\text{st}}^{\text{cont}} (=0) \\ \text{あるいは} \\ \tilde{f}_{\text{s} \rightarrow \text{d}}^{\text{cont}} \\ \text{あるいは} \\ \Sigma \tilde{f}_{\text{press}}^{\text{cont}} \end{cases} \quad (4)$$

ここで、 $\tilde{f}^{\text{coll}}$ は衝突力、 $\tilde{f}^{\text{cont}}$ は接触力である。接触力 $\tilde{f}^{\text{cont}}$ はEq. (4)のように三つの異なる接触相互作用力、すなわち静止平衡状態における作用力 $\tilde{f}_{\text{st}}^{\text{cont}}$ 、静止平衡状態から運動状態への過渡状態における作用力 $\tilde{f}_{\text{s} \rightarrow \text{d}}^{\text{cont}}$ と衝撃的作用力 $\tilde{f}_{\text{press}}^{\text{cont}}$ の伝達を表現するルールであり、接触状態に応じてそれらルールのうちの必要なルールが適用される。このとき、静止平衡状態における作用力の合力は、粒子群で力の平衡が成り立っているために $\Sigma \tilde{f}^{\text{cont}}=0$ である。 Σ は、 $j=1 \sim 6$ 方向の格子点に存在する粒子から着目粒子に作用する力の和を表している。

一方、粒子間衝突あるいは接触時に働く摩擦相互作用力、衝突粒子間または接触粒子間の作用力と粒子間摩擦係数から定まるせん断力を与える。

(a) 粒子間衝突相互作用ルール

いま、Fig. 3 (a)の粒子配置を考える。着目粒子が下部の粒子と相対速度 v で衝突するものとする。このときの衝突力に関するルールを得るには、任意の相対速度 v と隣接粒子が受ける圧縮力 f_{c1} , f_{c2} , f_{c3} とせん断力 f_{s1} , f_{s2} , f_{s3} の関係が必要である。この関係は粒子特性ならびに近接粒子近傍の空隙率に依存するので、それらの関数として得なければならない。可能な近接粒子の配置はFig. 4に示すPattern IからPattern Vの5種類である。そこで、この5種類の粒子配置とその近傍の空隙率を考慮して、これらの関係をDEMシミュレーションにより求めた。

一例として、Pattern Iの粒子配置で、空隙率を考慮しない場合の衝突速度と衝突力の関係はFig. 3 (b)で示され、これらの直線の傾きを k_{cj} , k_{sj} ($j=1 \sim 3$)とするとEq. (5)で表せる。

$$\left\{ \begin{array}{ll} f_{c1} = k_{c1} \times v & k_{c1} = 0.3716 \\ f_{c2} = k_{c2} \times v & k_{c2} = 1.2573 \\ f_{c3} = k_{c3} \times v & k_{c3} = 0.3716 \\ f_{s1} = k_{s1} \times v & k_{s1} = 0.0738 \\ f_{s2} = k_{s2} \times v & k_{s2} = 0.0000 \\ f_{s3} = k_{s3} \times v & k_{s3} = -0.0738 \end{array} \right. \quad (5)$$

Table 1 (a) Reference-table for description of collision between particles ($\mu=0.20$, $e=0.70$)

(N×s/m)	Pattern I	Pattern II	Pattern III	Pattern IV	Pattern V
k_{c1}	$-0.1858 \times \varepsilon + 0.3716$	—	—	$-0.69135 \times \varepsilon + 1.3827$	—
k_{c2}	$-0.62865 \times \varepsilon + 1.2573$	$-0.83425 \times \varepsilon + 1.6685$	—	—	$-1.0219 \times \varepsilon + 2.0438$
k_{c3}	$-0.1858 \times \varepsilon + 0.3716$	$-0.31575 \times \varepsilon + 0.6315$	$-0.4450 \times \varepsilon + 0.8900$	$-0.69135 \times \varepsilon + 1.3827$	—
k_{s1}	$-0.0369 \times \varepsilon + 0.0738$	—	—	$-0.1302 \times \varepsilon + 0.2604$	—
k_{s2}	0	$0.0224 \times \varepsilon - 0.0448$	—	—	0
k_{s3}	$0.0369 \times \varepsilon - 0.0738$	$0.06315 \times \varepsilon - 0.1263$	$0.0890 \times \varepsilon - 0.1780$	$0.1302 \times \varepsilon - 0.2604$	—

Table 1 (b) Reference-table for description of inter-particle interaction in a static state ($\mu=0.20$, $\rho=2480$ (kg/m³))

(—)	Pattern I	Pattern II	Pattern III	Pattern IV
k_{c1}	0.261	—	—	0.417
k_{c2}	0.657	0.874	1	—
k_{c3}	0.261	0.0786	—	0.417
k_{s1}	0.0523	—	—	0.0833
k_{s2}	0	0.0369	0	—
k_{s3}	—0.0523	—0.0109	—	—0.0833
k'_{c1}	—0.4741	—	—	—0.2336
k'_{c2}	—0.4385	—0.76	—0.1046	—
k'_{c3}	0.1874	0.5548	—	0.3468
k'_{s1}	—0.0989	—	—	—0.0575
k'_{s2}	0.126	0.0822	0.1046	—
k'_{s3}	—0.0377	—0.1221	—	0.0584

Table 1 (c) Reference-table for description of transmission of impulse-force ($\mu=0.20$, $\rho_T=2480$ (kg/m³))

(—)	Pattern I	Pattern II	Pattern III	Pattern IV
k_{c1}	$-0.0007 \times \varepsilon + 0.0014$	—	—	$-0.0020 \times \varepsilon + 0.0040$
k_{c2}	$-0.0019 \times \varepsilon + 0.0038$	$-0.0026 \times \varepsilon + 0.0052$	—	—
k_{c3}	$-0.0007 \times \varepsilon + 0.0014$	$-0.0008 \times \varepsilon + 0.0016$	$-0.00135 \times \varepsilon + 0.0027$	$-0.0020 \times \varepsilon + 0.0040$
k_{s1}	$-0.00015 \times \varepsilon + 0.0003$	—	—	$-0.0004 \times \varepsilon + 0.0008$
k_{s2}	0	0	—	—
k_{s3}	$0.00015 \times \varepsilon - 0.0003$	$0.00015 \times \varepsilon - 0.0003$	$0.00025 \times \varepsilon - 0.0005$	$0.0004 \times \varepsilon - 0.0008$

同様に Pattern II, III, IV, V の粒子配置に対しても Eq. (6) の関係が成立する。

$$\begin{Bmatrix} f_{cj} \\ f_{sj} \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} k_{cj} \\ k_{sj} \end{Bmatrix} \times v, (j=1, 2, 3) \quad (6)$$

これらに空隙率を考慮して得た k_{cj} , k_{sj} の値をルール表としてまとめたのが **Table 1 (a)** である。なお、せん断力は、粒子が時計方向へ回転する方向を正方向とする。

Table 1 (d) Reference-table for description of inter-particle interaction in transition-process of a particle ($\mu=0.20$)

(—)	coefficient, a
Pattern I	$0.7549 \times \varepsilon + 0.2278$
Pattern II	$0.1570 \times \varepsilon + 0.7582$
Pattern III	$0.7180 \times \varepsilon + 0.2282$
Pattern IV	$1.0059 \times \varepsilon + 0.1265$

(a) Deviation of contact rule in a static state

(b) Possible orientation of particles

Fig. 5 Derivation of reference table on contact rule

Fig. 6 Relationship between f and contact force (Pattern I)

(b) 接触粒子間相互作用ルール

(i) 静止平衡状態における粒子間相互作用ルール $\vec{f}_{\text{st}}^{\text{cont}}$

いま, Fig. 5 (a) の粒子配置において, 上方の最近接粒子から着目粒子へ作用する力 $\vec{f} = (f_x, f_z)$ が, 下方の粒子に伝達されて静止平衡状態にあるものとする。このとき任意の作用力 $\vec{f}$ と下方粒子に分配される圧縮力 f_{c1}, f_{c2}, f_{c3} とせん断力 f_{s1}, f_{s2}, f_{s3} の関係を求める, Fig. 5 (b) に示すように, 粉体層内で現れる Pattern I から IV の 4 種類の最近接粒子の配置に対して, これらの関係を DEM シミュレーションにより求めた。Pattern I の粒子構造で z 軸方向のみの作用力が作用するとき, その作用力 $\vec{f}$ と接触力 f_c, f_s の関

係を Fig. 6 (a) に示す。この結果は Eq. (7) で表され, これらの直線の傾き k_{c1}, k_{c2}, k_{c3} は上部の 4, 5, 6 番の粒子からの合力が着目粒子を通じて下部にある 1, 2, 3 番の粒子へ伝達される割合を表している。

$$\left. \begin{aligned} f_{c1} &= k_{c1} \times f_z & k_{c1} &= 0.2610 \\ f_{c2} &= k_{c2} \times f_z & k_{c2} &= 0.6570 \\ f_{c3} &= k_{c3} \times f_z & k_{c3} &= 0.2610 \\ f_{s1} &= k_{s1} \times f_z & k_{s1} &= 0.0523 \\ f_{s2} &= k_{s2} \times f_z & k_{s2} &= 0.0000 \\ f_{s3} &= k_{s3} \times f_z & k_{s3} &= -0.0523 \end{aligned} \right\} \quad (7)$$

Pattern I

Fig. 7 Derivation of reference table for description of transmission of impulsive force

作用力の伝達割合 k_{c1} , k_{s1} ($j=1\sim3$) は水平方向の作用力 f_x に応じて変化する。水平と垂直方向作用力の比 $X=f_x/f_z$ と伝達割合 R_{c1} , R_{s1} ($j=1\sim3$) の関係を Fig. 6 (b) に示す。この結果から Eq. (8) が得られ, Eqs. (7), (8) から Eq. (9) の関係を得る。

$$\left\{ \begin{array}{l} R_{c1}=k'_{c1}X+k_{c1} \quad k'_{c1}=-0.4741 \\ R_{c2}=k'_{c2}X+k_{c2} \quad k'_{c2}=-0.4385 \\ R_{c3}=k'_{c3}X+k_{c3} \quad k'_{c3}=0.1874 \\ R_{s1}=k'_{s1}X+k_{s1} \quad k'_{s1}=-0.0989 \\ R_{s2}=k'_{s2}X+k_{s2} \quad k'_{s2}=0.1260 \\ R_{s3}=k'_{s3}X+k_{s3} \quad k'_{s3}=-0.0377 \end{array} \right\} \quad (8)$$

$$f_c=R_c \times f_z=(k_c+k'_cX) \times f_z \quad (9)$$

これにより, 任意の力が働いた時の圧縮力が得られ, せん断力は Eq. (10) から得られる。

$$f_s=R_s \times f_z=(k_s+k'_sX) \times f_z \quad (10)$$

同じ方法で Pattern I から Pattern IV の粒子配置に対して得た k_c , k_s ならびに k'_c , k'_s をルールとして表にまとめたのが **Table 1 (b)** である。

(ii) 過渡状態の粒子間相互作用力ルール

流動域と静止域の境界で静止平衡状態にある粒子が流動域の方向へ作用力を得ると, 流動域へ流れ込む。このとき, 粒子を流動域に移動させる力は, 粒子構造変化によって発生する不平衡力である。この不平衡力は, 前ステップの静止平衡状態と現ステップの状態で

着目粒子へ作用する力の差から求めることができる。Eq. (11) は, 1 ステップの間における可能な粒子配置の変化を示している。

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Pattern 1} \equiv \text{cell}(\vec{r}, t-1) = \{1, 1, 1, 1, 1, 1, 1\} \\ \quad \Rightarrow \text{cell}(\vec{r}, t) = \{1, 0, 1, 1, 1, 1, 1\} \\ \text{Pattern 2} \equiv \text{cell}(\vec{r}, t-1) = \{1, 1, 1, 1, 1, 1, 1\} \\ \quad \Rightarrow \text{cell}(\vec{r}, t) = \{1, 1, 0, 1, 1, 1, 1\} \\ \text{Pattern 3} \equiv \text{cell}(\vec{r}, t-1) = \{1, 1, 1, 1, 1, 1, 1\} \\ \quad \Rightarrow \text{cell}(\vec{r}, t) = \{1, 1, 1, 0, 1, 1, 1\} \\ \text{Pattern 4} \equiv \text{cell}(\vec{r}, t-1) = \{1, 1, 1, 1, 1, 1, 1\} \\ \quad \Rightarrow \text{cell}(\vec{r}, t) = \{1, 0, 0, 1, 1, 1, 1\} \\ \text{Pattern 5} \equiv \text{cell}(\vec{r}, t-1) = \{1, 1, 1, 1, 1, 1, 1\} \\ \quad \Rightarrow \text{cell}(\vec{r}, t) = \{1, 1, 0, 0, 1, 1, 1\} \\ \text{Pattern 6} \equiv \text{cell}(\vec{r}, t-1) = \{1, 0, 1, 1, 1, 1, 1\} \\ \quad \Rightarrow \text{cell}(\vec{r}, t) = \{1, 0, 0, 1, 1, 1, 1\} \\ \text{Pattern 7} \equiv \text{cell}(\vec{r}, t-1) = \{1, 0, 1, 1, 1, 1, 1\} \\ \quad \Rightarrow \text{cell}(\vec{r}, t) = \{1, 0, 1, 1, 1, 1, 0\} \\ \text{Pattern 8} \equiv \text{cell}(\vec{r}, t-1) = \{1, 1, 1, 0, 1, 1, 1\} \\ \quad \Rightarrow \text{cell}(\vec{r}, t) = \{1, 1, 0, 0, 1, 1, 1\} \\ \text{Pattern 9} \equiv \text{cell}(\vec{r}, t-1) = \{1, 1, 1, 0, 1, 1, 1\} \\ \quad \Rightarrow \text{cell}(\vec{r}, t) = \{1, 1, 1, 0, 0, 1, 1\} \\ \text{Pattern 10} \equiv \text{cell}(\vec{r}, t-1) = \{1, 0, 1, 0, 1, 1, 1\} \\ \quad \Rightarrow \text{cell}(\vec{r}, t) = \{1, 0, 0, 0, 1, 1, 1\} \\ \text{Pattern 11} \equiv \text{cell}(\vec{r}, t-1) = \{1, 1, 0, 1, 1, 1, 1\} \\ \quad \Rightarrow \text{cell}(\vec{r}, t) = \{1, 0, 0, 1, 1, 1, 1\} \\ \text{Pattern 12} \equiv \text{cell}(\vec{r}, t-1) = \{1, 1, 0, 1, 1, 1, 1\} \\ \quad \Rightarrow \text{cell}(\vec{r}, t) = \{1, 1, 0, 0, 1, 1, 1\} \end{array} \right\} \quad (11)$$

いま, シミュレーション回数 $t-1$ において粒子配置が $\text{cell}(\vec{r}, t-1) = \{1, 1, 1, 1, 1, 1, 1\}$ で静止平衡状態にあるとしよう。次のシミュレーション回数 t で, 2 方向に存在する粒子が移動して粒子配置が $\text{cell}(\vec{r}, t-1) = \{1, 1, 1, 1, 1, 1, 1\}$ に変化したとする。この粒子配置の変化により, 着目粒子と $t-1$ で存在した 2 方向の粒子とで均衡していた相互作用力が不均衡になる。そこで, 2 方向に位置した粒子と着目粒子との相互作用力を, 着目粒子への作用力として与える。その他の粒子配置の変化に対しても, 同様に不平衡力が得られる。

(iii) 衝撃的作用力の伝達ルール

いま, Fig. 7 の中央に位置する着目粒子が最近接の粒子に瞬間的な衝撃力を与えるものとする。このとき可能な近接粒子の配置は, Eq. (12) に示す 4 種類である。

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Pattern I} \equiv \text{cell}(\vec{r}, t) = \{1, 1, 1, 1, 0, 0, 0\} \\ \text{Pattern II}^* \equiv \text{cell}(\vec{r}, t) = \{1, 0, 1, 1, 0, 0, 0\} \\ \text{Pattern III}^* \equiv \text{cell}(\vec{r}, t) = \{1, 0, 0, 1, 0, 0, 0\} \\ \text{Pattern IV} \equiv \text{cell}(\vec{r}, t) = \{1, 1, 0, 1, 0, 0, 0\} \end{array} \right\} \quad (12)$$

ここで、*印は中心軸を対称とする粒子配置が存在することを示す。瞬間的な作用力と接触粒子間に働く圧縮力 f_{c1}, f_{c2}, f_{c3} とせん断力 f_{s1}, f_{s2}, f_{s3} の関係をDEMシミュレーションにより得た。空隙率を考慮して得た k_{cj}, k_{sj} の値をルール表にしたのが **Table 1 (c)** である。

2.2 移動ルール

着目粒子は近隣粒子からの作用力 $\vec{f}$ (Eq. (1)) を受けて格子点を移動する。このときシミュレーションの1ステップに相当する時間を Δt 、ステップ $t - \Delta t$ における着目粒子の運動速度を v とすると、ステップ t において着目粒子は $\vec{v}_{\text{temp}}(\vec{r}, t)$ の運動速度で作用力方向の格子点に向かって移動する。

$$\vec{v}_{\text{temp}}(\vec{r}, t) = \vec{v}(\vec{r}, t - \Delta t) + \{(\vec{f} - m\vec{g})/m\} \times \Delta t \quad (15)$$

ここで、 $\vec{v}$ は粒子の速度、 $\vec{g}$ は重力加速度ベクトルである。このとき、着目粒子が目指す格子点が空隙 ($L(\vec{r}, t) = 0$) の状態で移動可能であるとしても、この空隙に向かって他の複数の粒子が移動する場合がある。このとき空隙格子点を占める粒子を決定するために、Eq. (16) で表される粒子の空隙占有確率を定義し、その占有確率に基づいて一つの粒子が空隙格子点を占める。

$$p(j) = \frac{\text{vel}(\vec{r} + \vec{e}_j)}{\sum_{j=1}^6 \text{vel}(\vec{r} + \vec{e}_j)} \quad (16)$$

ここで、 $\text{vel}(\vec{r} + \vec{e}_j) = |\vec{v}_{\text{temp}}(\vec{r} + \vec{e}_j, t)|$ である。格子の状態はブール演算により更新されるので、粒子の移動をビットで表現される。位置 $\vec{r} + \vec{e}_j$ から位置 $\vec{r}$ への空隙に向かう粒子の移動を $\text{bit}(\vec{r} + \vec{e}_j \rightarrow \vec{r}) = 1$ 、それ以外を $\text{bit}(\vec{r} + \vec{e}_j \rightarrow \vec{r}) = 0$ とすると、 $L(\vec{r}, t)$ のとき、次のステップにおける格子の状態 $L(\vec{r}, t + \Delta t)$ は次式で表される。

$$\begin{aligned} L(\vec{r}, t + 1) \\ = [1 - L(\vec{r}, t)] \times L(\vec{r} + \vec{e}_1, t) \times \text{bit}(\vec{r} + \vec{e}_1 \rightarrow \vec{r}) \\ + [1 - L(\vec{r}, t)] \times L(\vec{r} + \vec{e}_2, t) \times \text{bit}(\vec{r} + \vec{e}_2 \rightarrow \vec{r}) \end{aligned}$$

Fig. 8 Particle orientation for derivation of interaction force in transition process of a particle

$$\begin{aligned} & + [1 - L(\vec{r}, t)] \times L(\vec{r} + \vec{e}_3, t) \times \text{bit}(\vec{r} + \vec{e}_3 \rightarrow \vec{r}) \\ & + [1 - L(\vec{r}, t)] \times L(\vec{r} + \vec{e}_4, t) \times \text{bit}(\vec{r} + \vec{e}_4 \rightarrow \vec{r}) \\ & + [1 - L(\vec{r}, t)] \times L(\vec{r} + \vec{e}_5, t) \times \text{bit}(\vec{r} + \vec{e}_5 \rightarrow \vec{r}) \\ & + [1 - L(\vec{r}, t)] \times L(\vec{r} + \vec{e}_6, t) \times \text{bit}(\vec{r} + \vec{e}_6 \rightarrow \vec{r}) \end{aligned}$$

これをまとめると $t + \Delta t$ における着目粒子の状態は Eq. (18) で与えられ、格子の状態を一斉に更新することにより全粒子が運動する。

$$\begin{aligned} L(\vec{r}, t + \Delta t) = [1 - L(\vec{r}, t)] \times \left\{ \sum_{j=1}^6 [L(\vec{r} + \vec{e}_j, t) \right. \\ \left. \times \text{bit}(\vec{r} + \vec{e}_j \rightarrow \vec{r}) \right\} \quad (18) \end{aligned}$$

このとき、移動後の粒子の速度 $\vec{v}(\vec{r}, t)$ は、次式で表される。

$$\begin{aligned} \vec{v}(\vec{r}, t) = \vec{v}(\vec{r} + \vec{e}_{j_{\text{max}}}, t - \Delta t) \\ + \{(\vec{f}(\vec{r} + \vec{e}_{j_{\text{max}}}, t) - m\vec{g})/m\} \times \Delta t \quad (19) \end{aligned}$$

2.3 1ステップ相当時間 Δt

粉体操作や装置設計のための粉体シミュレーションでは、現象の時間発展を知ることが重要であるが、導出したオートマツンルールは時間の概念を含んでいない。そこで、前述の1ステップ相当時間 Δt と実時間を対応づけることが必要である。

いま、静止している粒子径 d_p の着目粒子が周囲の粒子と相互作用することなく格子間距離 l を自由落下するに要する時間を Δt に設定すると、 Δt は $\Delta t = \sqrt{2 \times l/g}$ (s) となる。この1ステップ相当時間は、着目粒子が近隣粒子と相互作用することなく格子間を移動する時間であるが、実際には格子間を移動する粒子は近隣粒子との相互作用があるために Δt 時間内に1格子間を移動できない。そこで、Eq. (1) で得られる着目粒子への作用力 f の代わりに、格子間移動過程での相互作用の程度を考慮した次の換算力 f^* を求めると、Eq. (19) により1ステップ相当時間における粒子の移動速度と移動距離を得ることができ

(a) Values of transition-time T^* to void fraction as a function of f (Pattern I)

(b) Relationship between f and f^* calculated from T^* (Pattern I)

Fig. 9 Derivation of reference table for description of interaction force in transition-process of a particle

Fig. 10 Values of coefficient a as a function of void fraction (Pattern I, II, III, IV)

る。

いま、作用力 f を受ける質量 m の粒子が周囲の粒子から相互作用を受けることなく運動するものとする、その運動方程式は Eq. (20) で表される。

$$m \frac{d^2 x}{dt^2} = f \quad (20)$$

粒子の初速度を 0 として Eq. (20) を $t=0$ から格子間距離 l を移動するに要する時間 T まで積分すると、

$$l = \frac{f \times T^2}{2 \times m} \quad \text{となり次式が得られる。}$$

$$f \times T^2 = 2ml = \text{const.} \quad (21)$$

Experimental

$Ts = 0.00 (-)$ $Ts = 0.05 (-)$ $Ts = 0.10 (-)$ $Ts = 0.15 (-)$
Simulated

Fig. 11 Comparison of flow behavior of particles discharging from a hopper

前述の通り実際の粉体層中では、格子点間を移動する粒子には近隣粒子から相互作用が働き、その相互作用の大きさに応じて移動時間 T^* が変化する。この移動時間 T^* を知ることができれば、Eq. (21) の関係から、相互作用を受けることなく移動時間 T^* で移動する作用力 f^* を知ることができる。そこで、DEM シミュレーションにより Fig. 8 に示す Pattern I から Pattern IV の 4 種類の粒子配置に対する f と f^* の関係を空隙率の関数として得た。

Fig. 9 (a) は、Pattern I の粒子配置に対する作用力 f と移動時間 T^* の関係を示している。この T^* から f^* を算出し、作用力 f との関係を示したのが Fig. 9 (b) である。この関係は Eq. (22) で表され、傾き a は粒子構造、すなわち、粒子配置の種類と空隙率に依存する係数である。

Fig. 12 Displacement of marker particles arranged at 0.30m, 0.25m and 0.20m in initial packing state

$$f^* = a \times f; (0 \leq a \leq 1) \quad (22)$$

なお、Fig. 9 (a), (b) 中の●は、相互作用がない場合 ($\varepsilon = 1$) の結果であり、相互作用がない場合 ($\varepsilon = 1$) は $a = 1$ となる。Fig. 10 は、Pattern I から Pattern IV の粒子配置に対する係数 a と空隙率 ($0 \leq \varepsilon < 1$) との関係を表し、この係数を Table 1 (d) にルール表として示した。

3. 貯槽からの粒子群排出流動挙動のシミュレーション

オートマトンルールの信頼性を確認するために、平底粉体貯槽からの二次元排出流動挙動のオートマトンシミュレーションを行った。シミュレーションでは、貯槽内の空間を 1 辺の長さが実験試料であるガラスビーズの粒子径 (3mm) に等しい三角格子で離散化した。また、貯槽壁は対応する格子に速度 0 で質量無限大の粒子を配置して表現した。排出流動開始前の粒子群充填状態は、実験における充填かさ密度と一致するように粒子を格子上にランダムに配置した。観察実験とオートマトンシミュレーションから得られた流動模様を Fig. 11 に示す。Ts は排出流動終了時間で規格化した無次元時間である。排出過程における粉体表面の V 字形状の形成や流動模様ならびに流動の発達挙動も実験結果とよく一致している。

さらに、貯槽内に配置したマーカー粒子を追跡した結果を Fig. 12 に示す。Fig. 12 (a), (b), (c) は、粉体層充填時 ($t = 0s$) に粉体層表面からそれぞれ 0.30m, 0.25m, 0.20m に配置したマーカー粒子の各流動時刻における位置を表している。また、Fig. 12

中の破線はマーカー粒子位置●▲等を近似曲線で結んだものである。 $t = 0s$ におけるマーカー粒子位置が 0.30m のとき、オートマトンシミュレーションによる変位量が少し小さいが、時間に対するマーカー粒子の変位は定量的にも良く一致している。さらに、初期充填状態ならびに排出流動中の粒子間接触力分布も DEM で得られる結果とよく一致した。

このようにルールにもとづくシミュレーションであるが、DEM シミュレーションと同じように流動過程における作用力や流動速度などの物理量を得ることができる。シミュレーションで用いた流動粒子の個数は 17500 個であり、DEM でのシミュレーションでは計算時間が 1 週間程度かかるが、本法はリアルタイムでシミュレーションを行うことができる。

4. 結 言

セルオートマトンによる大規模粉体シミュレーション法を開発した。粒子間相互作用力と粒子の運動を表すオートマトンルールは、離散要素法シミュレーションから得られる粒子間相互作用と粒子の運動に関する微視的情報に基づいて定量的に導出した。また、オートマトンシミュレーションの 1 ステップ相当時間を定義することにより時間の概念を導入し、粉体現象の時間発展のシミュレーションを可能にし、流動過程での各種物理量を得ることを可能にした。オートマトンは並列計算が容易であるので、数百万個の粒子によるシミュレーションをリアルタイムで実行することができ、実際の粉体現象の直接シミュレーションに大きな可能性を持つ方法である。

Nomenclature

a	: constant value showing the relation between f^* and f	(-)	interaction	(s)
$cell$	: state of a cell	(-)	Ts	: scaled time (-)
d_p	: particle diameter	(m)	Δt	: equivalent time to CA 1 step (s)
e	: restitution coefficient	(-)	v	: velocity of particle (m/s)
f	: force acting on a specified particle	(N)	X	: ratio of f_x to f_z (-)
f^*	: force estimated inter-particle interaction in a transition process	(N)	μ	: friction coefficient (-)
g	: gravitational acceleration	(m/s ²)	ρ	: density of particle (kg/m ³)
l	: distance between a lattice and the nearest neighbor lattice	(m)	< Subscript >	
L	: state of a lattice site	(-)	c	: compression
m	: mass of particle	(kg)	g	: gravity
p	: occupancy probability of particles to a lattice site	(-)	i	: interaction
r	: position	(m)	$press$	: pressure
R	: transmission ratio of forces	(-)	s	: shear
t	: time	(s)	$s \rightarrow d$	: from static to dynamic
T	: transition time of a particle by the distance between lattice sites	(s)	st	: static
T^*	: transition time corresponding to inter-particle		$temp$	: temporary
			x	: x-axis
			z	: z-axis
			< Superscript >	
			$coll$	: collision
			$cont$	: contact

References

- 1) Hidaka, J.: "Introduction to Powder Simulation", ed. by Soc. Powder Technol. Japan, Sangyo-Tosyo (1998)
- 2) Bak Per, Chao Tang and Kurt Wiesenfeld, *Phys. Rev. Lett.*, **59**, 381-384 (1987)
- 3) Kadanoff, L. P., S. R. Nagel, L. Wu and S. Zhou, *Physical Review*, **A39**, 6524 (1989)
- 4) William, B. G. and R. P. Behringer, *Phys. Rev.*, **A42**, 1017 (1990)
- 5) Karolyi, A. and J. Kertesz, *Phys. Rev. E*, **57**, 852-856 (1998)
- 6) Katsura, N., T. Mitsuoka, A. Shimosaka, Y. Shirakawa and J. Hidaka, *ISIJ International*, **45**, 1396-1405 (2005)