

博士学位論文

格子ボルツマン法と個別要素法を用いた
固液二相ハイブリッドシミュレーションの
資源工学分野への応用

京都大学大学院
工学研究科 社会基盤工学専攻
地殻工学講座 地質工学分野

大槻 敏

2010年3月

Ph.D. Thesis

Applications of Solid-Liquid Two-Phase System
to Resource Engineering
by Using Hybrid LB-DEM Simulation

*Lab. of Engineering Geology,
Dept. of Civil and Earth Resources Engineering,
Kyoto University*

Satoshi Ohtsuki

March, 2010

要旨

固体と液体が混在する固液二相問題は、土石流、河床浸食、液状化、流動床のような自然および工学的現象を評価する上で重要である。しかしながら、固液相間および粒子間相互作用から成る複雑な構造を実験計測のみで検討することは困難である。このような背景から、離散要素を用いた粒子ベースの数値計算手法は、固液二相問題の評価に有効であると考えられる。

液相中における粒子分散相の数値計算は、流れ場に対する流体力学および固液境界面を介して移動する固体粒子に対するニュートン力学を組み込むことの複雑さにより、非常に困難であるとされる。本研究では、格子ボルツマン法と個別要素法を連成したマイクロメカニカルな固液二相モデルに基づく直接数値計算手法を構築した。格子ボルツマン法は、複雑かつ時間変化する計算境界内の流れ場のシミュレーションに適した手法として知られている。一方、個別要素法は大変形問題に対する有効なシミュレーション手法として注目を浴びている。これらの計算手法の連成により、液相中における粒子分散相の複雑な挙動がシミュレートできる。

本研究において構築された計算手法を検証するため、はじめに円環状クエット流れを計算した。この流れは理論解があり、計算結果と直接的に比較することにより、計算スキームの精度を定量的に評価することができる。次に、異なる Reynolds 数を有する流体中で、単一円形粒子の沈降挙動を計算し、これを有限要素法の結果と比較した。さらに、流体中の2つの粒子間での DKT (Drafting, Kissing, and Tumbling) 現象をシミュレートし、妥当な結果が得られた。

次に本論文では、この計算手法を次のような工学的な対象に適用し、現象の解明を試みた。

(1) 傾斜分離装置は、水の浄化あるいはオイルサンドの分離のような工業スラリーの相分離を促進することを目的に用いられている。本論文では、分離速度と容器傾斜角あるいは粒度分布の関係を検討するため、流体中の固体粒子群の沈降挙動を計算した。その結果、容器傾斜角の増加に伴う大規模な対流が生じた。これは実験でも観察されている現象である。また、この対流はスラリーからの流体の効率的な分離だけではなく、固体粒子群の沈降速度の加速にも寄与していることが明らかになった。

(2) 多孔質体の粒子輸送は、水理特性に大きな影響を及ぼす。土木工学では、グラウト圧入が岩の透水率を低下させるために実施される。資源工学では、石油貯留層内でのアスファルテン析出によって引き起こされる孔隙閉塞によって石油生産障害が生じる。また、メタンハイドレート開発における水とガスの流れに伴う微粒子の輸送は、生産性の低下を引き起こすことがある。浸透性のような水理特性に粒子濃度が与える影響を評価するため、多孔質体を通る微粒子の移動挙動をシミュレートした。その結果、微粒子の移動と堆積が浸透率の低下を引き起こすことが数値計算的に確認された。また、粒子濃度が浸透率の低下に大きな影響を及ぼすことが明らかになった。

(3) 出砂は、石油貯留層の砂粒子が流体に伴って移動し、生産井内に流入する現象を指す。この現象は、チュービング・パイプを閉塞し生産量の低下を引き起こす。また、坑内および地上機器に大きな損傷を与えることもある。出砂のメカニズムを解明するために、

ケーシング穿孔部近傍におけるサンドアーチの形成および崩壊の再現を試みた。その結果は、粒子配列の攪乱がサンドアーチの不安定性を助長する傾向を示した。

これらの結果は、本連成計算手法が多くの工学的問題をシミュレートする効果的な手法であり、現象の解明に大きな役割を果たすことを示している。

Abstract

Particle-fluid dynamics is important in a number of natural and industrial problems such as debris flow, river-bed erosion, soil liquefaction, and fluidized bed. It is difficult to examine the complex system consisted of particle-fluid and interparticle interaction with only experimental researches. Because of these factors, the particle-based simulations with discrete element could be of advantage for investigating these phenomena.

Numerical simulations on particle suspensions in fluid flow are quite difficult due to the complexity of incorporating the hydrodynamics for fluid flow and the Newtonian dynamics for solid particles moving through the solid-fluid interface. In this study, I have developed a direct numerical simulation based on the micromechanical particle-fluid system that couples the lattice-Boltzmann method (LBM) and the discrete/distinct element method (DEM). LBM is known as a suitable technique for simulating fluid flow in complex and time-varying geometries with boundaries. On the other hand, DEM has attracted much attention as a useful simulation technique for large deformation problems. With the coupling of both methods, the complex motion of solid particles in a fluid can be simulated.

To verify this computational technique, I first examine cylindrical Couette flow. Because there is an analytical solution to this type of flow, the accuracy of the scheme can be quantified through a direct comparison of the numerical and exact results. Then, the sedimentation behavior of a single circular particle is simulated in a fluid with different Reynolds numbers, and the results are compared with the finite element modeling. In addition, the drafting, kissing, and tumbling (DKT) phenomenon between two particles in a fluid is simulated and reasonable results are obtained.

In this dissertation, I attempt to apply this technique to three following engineering studies:

(1) The inclined-plate separator has often been used to enhance the phase separation of the slurry in such fields as water clarification and bitumen production from oil sands. This dissertation presents the simulation study of the enhanced sedimentation in inclined vessel. To investigate the relationship between the phase separation rate and the inclination angle of the vessel or the grain size distribution of the slurry, the settling behavior of multi-particle in a fluid is computed. As a result, the global convection is occurred with increasing the inclination angle of the vessel. This phenomenon has also observed in many experiments. It is cleared numerically that this convection contributes not only to the efficient draining of the fluid from the slurry, but also to the acceleration of the settling velocity.

(2) The migration and sedimentation of micro particles through porous media affect strongly the hydraulic characteristics. The grout injection is performed to reduce the permeability of rock in civil engineering. In resource engineering, the decline of oil production might be due to the blockage of pore space caused by the asphaltene deposition in oil reservoir. Also in methane hydrate development, the transport of micro particles with water and gas flow could cause the production decrease. To estimate the effect of particle concentration in the hydraulic characteristics such as permeability, the migration behavior of micro particles through porous

media is simulated. As a result, it is confirmed numerically that the migration and sedimentation of micro particles cause the decline of permeability. Also, it is cleared that particle concentration has a large impact on it.

(3) Sand production means that sand grains in the oil reservoir move with fluid flow and flow into the oil production well-bore. This phenomenon blocks up a tubing pipe and causes the production loss. This also gives a serious damage in the well-bore and for the ground-based instruments. I attempt to reproduce the formation and collapse process of sand arch around a perforated cavity to clarify the mechanism of sand production. This result shows that the mechanical disturbance of particle arrangement tends to promote its instability.

The results of the above mentioned case studies suggest that this hybrid method becomes an effective technique for simulating many kinds of engineering problems related to particle-fluid dynamics.

目次

第1章	緒論	1
1.1	本研究の概要	1
1.2	本論文の構成	2
第2章	固液二相問題に関する数値計算	5
2.1	数値流体計算手法の分類	5
2.1.1	Euler 的解法	6
2.1.2	Lagrange 的解法	6
2.1.3	Cellular automaton 解法	7
2.2	固液二相モデルの分類と既往の研究	8
2.2.1	Euler-Euler カップリング	9
2.2.2	Euler-Lagrange カップリング	9
2.2.3	Lagrange-Lagrange カップリング	11
2.2.4	その他のモデリング手法	11
第3章	格子ボルツマン法の理論	13
3.1	格子ボルツマン法の位置付け	13
3.1.1	特長と動向	13
3.1.2	格子気体法	13
3.2	計算手法	14
3.3	理論的背景	16
3.3.1	平衡分布関数	16
3.3.2	Navier-Stokes 方程式	23
3.3.3	体積力	26
3.4	境界条件	28
3.4.1	滑りなし境界条件	29
3.4.2	圧力境界条件	29
3.4.3	速度境界条件	30
第4章	個別要素法の理論	33
4.1	個別要素法の位置付け	33
4.1.1	粒子間衝突	33
4.1.2	剛体粒子モデル	34
4.2	計算手法	36
4.2.1	基礎式	37

4.2.2	粒子間相互作用力	37
4.2.3	粒子の初期配列	40
4.3	モデル定数の選択	40
4.3.1	線形モデル	41
4.3.2	ヘルツの弾性接触モデル	41
第 5 章	固液二相連成計算手法	45
5.1	移動境界条件	45
5.1.1	Ladd's model	45
5.1.2	Noble and Torczynski's model	47
5.2	可変時間ステップ法	49
5.3	無次元化	50
第 6 章	連成計算手法の妥当性の検証	53
6.1	緒言	53
6.1.1	既往の研究	53
6.1.2	本研究の目的	53
6.2	円環状クエット流れ	54
6.2.1	円環状クエット流れの理論解	54
6.2.2	シミュレーション条件	55
6.2.3	シミュレーション結果	56
6.3	単一粒子の沈降挙動	59
6.3.1	Reynolds 数に対応する沈降挙動	59
6.3.2	シミュレーション条件	60
6.3.3	シミュレーション結果	66
6.4	二粒子の沈降挙動	66
6.4.1	DKT 現象	66
6.4.2	シミュレーション条件	67
6.4.3	シミュレーション結果	67
6.5	結言	79
第 7 章	傾斜沈降による固液分離促進効果	81
7.1	緒言	81
7.1.1	既往の研究	82
7.1.2	本研究の目的	82
7.2	傾斜容器内におけるスラリーのモデリング	83
7.3	シミュレーション結果	85
7.3.1	傾斜角および粒度分布が分離速度に与える影響	85
7.3.2	対流の形成が沈降速度に与える効果	85
7.4	結言	96

第 8 章	多孔質体内の粒子輸送による浸透率の低下	97
8.1	緒言	97
8.1.1	既往の研究	97
8.1.2	本研究の目的	98
8.2	チャネル狭窄部における粒子の挙動	98
8.2.1	チャネル狭窄部における単一円形粒子の挙動	99
8.2.2	円形粒子によるチャネル狭窄部の閉塞	101
8.3	多孔質体内における流体挙動	102
8.3.1	シミュレーション条件	102
8.3.2	多孔質体内の流れに対する経験式	105
8.3.3	シミュレーション結果	106
8.4	多孔質体内を流動する粒子挙動	107
8.4.1	シミュレーション条件	107
8.4.2	多孔質体内の浸透率	108
8.4.3	微粒子の流入による孔隙閉塞と流体パスの変化	108
8.4.4	微粒子濃度が多孔質体の浸透率に与える影響	110
8.5	結言	116
第 9 章	サンドアーチの崩壊が出砂に与える影響	119
9.1	緒言	119
9.1.1	発生メカニズムと対策	119
9.1.2	既往の研究	121
9.1.3	本研究の目的	121
9.2	パーフォレーション孔内のモデリング	122
9.3	シミュレーション結果	127
9.3.1	ケーシング穿孔部近傍における砂粒子群の挙動	127
9.3.2	圧力勾配とサンドアーチの形成および崩壊	127
9.4	結言	134
第 10 章	結論と今後の課題	135
付録 A	Chapman-Enskog 展開	137
	参考文献	141

目次

2.1	Eulerian and Lagrangian description	5
2.2	View-points of fluid-phase modeling	10
3.1	D2Q9 model	15
3.2	Rotation of unit vector	18
3.3	Boundary conditions	28
3.4	Bounce-back rule	29
4.1	Discrete particle models	34
4.2	Interparticle collision	35
4.3	Interparticle contact model; Voigt model	37
4.4	Interparticle relative displacement	38
4.5	Elastic contact of two cylinders	42
5.1	Modified bounce-back rule for a moving particle	46
5.2	Immersed boundary scheme of Noble and Torczynski	48
6.1	Definition sketch for circular Couette flow	55
6.2	Definition sketch for circular Couette flow in this study	56
6.3	Model for the simulation of circular Couette flow	57
6.4	Azimuthal component of fluid velocity	58
6.5	Global error of fluid velocity	59
6.6	Model for the simulation of a settling circular particle	61
6.7	Sedimentation behavior of a single circular particle; Case1 ($Re = 0.67$)	62
6.8	Sedimentation behavior of a single circular particle; Case2 ($Re = 2.98$)	63
6.9	Sedimentation behavior of a single circular particle; Case3 ($Re = 6.08$)	64
6.10	Settling particle trajectories computed by FEM (Feng <i>et al.</i> , 1994a)	65
6.11	Settling particle trajectories in this study	65
6.12	Model for simulating the DKT cycle	68
6.13	First DKT cycle; Case1 ($R = 1.00, Re = 7.49$)	71
6.14	Second DKT cycle; Case1 ($R = 1.00, Re = 7.49$)	72
6.15	First DKT cycle; Case2 ($R = 1.05, Re = 7.92$)	73
6.16	Second DKT cycle; Case2 ($R = 1.05, Re = 7.92$)	74
6.17	First DKT cycle; Case3 ($R = 1.10, Re = 9.03$)	75
6.18	Second DKT cycle; Case3 ($R = 1.10, Re = 9.03$)	76
6.19	The distance between two settling circular particles vs. simulation duration	77

6.20	The x -axis position of two settling circular particles vs. simulation duration; Case1 ($R = 1.00$)	77
6.21	The x and y components of the hydrodynamic forces exerted on two settling circular particles; Case1 ($R = 1.00$)	78
6.22	The x and y components of the settling velocity of two circular particles; Case1 ($R = 1.00$)	78
6.23	The effect of diameter ratio R on the interaction of the two particles	79
7.1	Sedimentation enhanced by inclined plates	81
7.2	Initial arrangement of solid particles	83
7.3	Model for the simulation of the hindered settling in inclined vessel	84
7.4	The behavior of hindered settling particles and flow velocity distribution; Model A-1 ($\theta = 0^\circ$)	86
7.5	The behavior of hindered settling particles and flow velocity distribution; Model A-1 ($\theta = 20^\circ$)	87
7.6	The behavior of hindered settling particles and flow velocity distribution; Model A-1 ($\theta = 40^\circ$)	88
7.7	Phase separation rate; Model A-1, A-2 and A-3	89
7.8	Phase separation rate; Model B-1, B-2 and B-3	90
7.9	Flow velocity vs. simulation duration; Model A-1	91
7.10	Settling particle trajectories and enhanced settling zone by convective flow; Model A-1 (a)-(c)	92
7.10	Settling particle trajectories and enhanced settling zone by convective flow; Model A-1 (d)-(f)	93
7.11	Hindered settling velocity vs. free settling velocity; Model A-1 (a)-(c)	94
7.11	Hindered settling velocity vs. free settling velocity; Model A-1 (d)-(f)	95
8.1	Model for the simulation of a moving circular particle	99
8.2	The trajectories of a single circular particle in a channel with the stenosis throat	100
8.3	The velocities of the particle with respect to the x -axis position	101
8.4	Model for the simulation of a moving circular particle	101
8.5	Moving particles trajectories in a channel with the stenosis throat; Case4	102
8.6	The velocities of the particle with respect to the x -axis position; Case4	103
8.7	Moving particles trajectories in a channel with the stenosis throat; Case5	103
8.8	The velocities of the particle with respect to the x -axis position; Case5	104
8.9	Model for the simulation of fluid flow in porous media	104
8.10	Flow velocity distribution in porous media; $\tau = 1.0$	106
8.11	Pressure distribution in porous media; $\tau = 1.0$	107
8.12	Friction factor vs. Reynolds number	108
8.13	Migration behavior of micro particles in porous media; Case1	111
8.14	Migration behavior of micro particles in porous media; Case2	112
8.15	Migration behavior of micro particles in porous media; Case3	113

8.16	Flow velocity distribution in porous media; Case2	114
8.17	Pressure distribution in porous media; Case2	114
8.18	Flow velocity distribution in porous media; Case3	115
8.19	Pressure distribution in porous media; Case3	115
8.20	Permeability in porous media	116
9.1	Conceptual diagram for sand production mechanism	120
9.2	Model for the simulation of packing particles	122
9.3	Process of particles packed by a moving left wall; (a)-(d)	124
9.3	Process of particles packed by a moving left wall; (e)-(h)	125
9.4	Model for the simulation of sand production	126
9.5	Migration behavior of solid particles with fluid flow near a cavity; Case1	128
9.6	Migration behavior of solid particles with fluid flow near a cavity; Case2	129
9.7	Migration behavior of solid particles with fluid flow near a cavity; Case3	130
9.8	The number of particles flowing out from perforation tunnel vs. simulation duration	131
9.9	Sand bridge and streamline near a cavity; Case3 (a)-(e)	132
9.9	Sand bridge and streamline near a cavity; Case3 (f)-(j)	133

表 目 次

5.1	Conversions between physical and lattice units	51
6.1	Input parameters for the simulation of circular Couette flow # 1	56
6.2	Input parameters for the simulation of circular Couette flow # 2	58
6.3	Input parameters for the simulation of a settling circular particle	61
6.4	Relaxation times and kinematic viscosity coefficients	61
6.5	Diameter ratio R between two settling circular particles	68
6.6	Input parameters for the simulation of two settling circular particles	69
7.1	Data of solid particles in the slurry	83
7.2	Input parameters for the simulation of the hindered settling in inclined vessel	84
8.1	Input parameters for the simulation of a moving circular particle	100
8.2	Input parameters for the simulation of fluid flow in porous media	104
8.3	Relaxation times and kinematic viscosity coefficients	105
8.4	Input parameters for the simulation of particle transport with fluid flow in porous media	109
9.1	Input parameters for the simulation of particles packed by a moving left wall	123
9.2	Input parameters for the simulation of particle transport around perforation tunnel #1	123
9.3	Input parameters for the simulation of particle transport around perforation tunnel #2	126

第1章 緒論

1.1 本研究の概要

固液二相問題は、気液二相問題や固気二相問題と並んで混相流分野の重要な位置を占めるものである。固液二相流 (Solid-liquid two-phase flow) は、固体 (粒子) と液体が混在する流れと定義される (日本混相流学会, 2004)。この固液二相問題は、固気二相問題と比較して、その液相密度が気相よりも3桁、粘度は2桁も大きいことから、固体粒子のスケール、その数や形状そして液相の流れ状態に複雑に左右される特徴を有している。

液相中における粒子分散相の挙動が重要となる現象としては、固体粒子群の重力沈降がある。これは土砂の堆積などの自然現象のみでなく、様々な工学分野において広く観察することができる現象である。資源工学分野では、オイルサンド採掘におけるビチューメンと微粒子の分離プロセス (Madge *et al.*, 2005; Gray *et al.*, 2009) において、経験に基づいてではあるが、固液分離を促進させる傾斜シックナー (Thickener) が実用化されている。

またその他の固液二相問題としては、坑井掘削段階の掘屑運搬 (Cuttings transport)、また生産段階の出砂障害 (Sand trouble)、メタンハイドレート開発における細粒分移動など多くの現象が挙げられる。傾斜坑井の掘削時には坑井内に掘屑の滞留や堆積が生じやすく、泥水ポンプ圧力の上昇、さらには掘管の抑留および逸泥などの重大な掘削トラブルの原因となり得る (田中, 1983; Ozbayoglu *et al.*, 2005; 長縄, 2006; 長縄ほか, 2006; Espinosa-Paredes *et al.*, 2007; 長縄ほか, 2007; Espinosa-Paredes and Salazar-Mendoza, 2008)。そのため、掘屑運搬挙動をより正確に把握することが求められている。

また出砂 (Sand production) は、未固結砂岩などで構成される貯留層から流体を生産する場合、あるいはオイルサンドなど粘性の高い流体を生産する場合、坑井近傍にて発生する生産障害の1つである (秋林ほか, 1992)。出砂対策には、生産量の調整、グラベル・パッキングおよびスクリーンなどのサンド・コントロール (Sand control) (沼澤と満田, 2005; 関口と森田, 2008) がなされるが、坑井近傍での砂粒子の挙動評価が求められている。さらに、メタンハイドレート開発でのハイドレート分解で解放された細粒分や圧密による粒子破碎の破片がパーフォレーション孔周辺に集積することにより、生産障害が発生することがある (山本, 2009)。

しかしながら、高濃度粒子分散相を有する場合は勿論、粒子間衝突が頻繁に発生しない程度の粒子濃度の流動現象における固液相間の相互作用力および粒子間相互作用力などの混相流構造を実験計測から評価することは非常に困難であり (原田ほか, 2007a)、数値計算によるアプローチが期待されている (柳ほか, 2008)。このような背景から、離散要素を用いた粒子ベースの数値計算による検討が必要になると考えられる。

本研究では、数値計算手法として、(Cook *et al.*, 2000, 2001, 2004) によって提案された格子ボルツマン法 (Lattice-Boltzmann method; LBM) (McNamara and Zanetti, 1988) と個別

要素法 (Discrete/Distinct element method; DEM) (Cundall and Strack, 1979) をカップリングしたハイブリッドシミュレータを自主開発し、先に述べた固液二相問題へ適用を試みたものである。

セルオートマトン (Cellular automaton) 法の 1 つである格子ボルツマン法は、流れ場の支配方程式に基づいた解法ではないが、すでに格子ボルツマン方程式と流れ場の支配方程式との整合性も証明されている (蔦原ほか, 1999)。また、格子ボルツマン法は、コーディングあるいはベクトル化・並列化の容易性、境界条件の設定の簡便性、混相流モデルへの拡張性などの特長を有しており、近年、注目を集めている計算手法である。

固体粒子分散相の運動を解く数値計算上のコンセプトには、剛体粒子モデルと軟体粒子モデルがあるとされている。剛体衝突理論に基づく剛体粒子モデル (Hard particle/sphere model) は、希薄な粒子分散相すなわち衝突が支配的な系に用いられる。一方、個別要素法に代表される軟体粒子モデル (Soft particle/sphere model) は、衝突のみではなく接触が卓越した系にも適用することができる。

格子ボルツマン法で用いられる等間隔直交格子系の中で、固体粒子表面を正確に捕捉することは一般的には困難である。そこで、固液界面における連成モデリングには、境界埋め込み法 (Immersed boundary method; IMB) を応用した移動境界条件 (Noble and Torczynski, 1998) を採用した。これは、粒子表面を階段状で捕捉していた従来の Ladd (1994a,b) による移動境界条件とは異なり、コントロール・セルを導入することで、より正確な固液界面を捕捉することが可能となる。これにより、固体粒子に作用する流体力および流体トルクのバラツキを少なくし (Feng *et al.*, 2007)、高い計算精度が保証される。また、本連成モデリングは、直接数値計算法 (Direct numerical simulation; DNS) (瀧口ほか, 1998) の範疇、つまり計算格子幅が粒子スケールよりも小さい高解像度の手法である。このため、計算コストが高い反面、局所平均流れ場の下にて固体粒子を駆動させる粒子追跡法よりも正確な固液二相の挙動を再現できるものであると考えられる。

1.2 本論文の構成

本論文は、格子ボルツマン法と個別要素法を連成させた数値シミュレータを用いて、資源工学分野に関連した流体中での固体粒子群の沈降、堆積あるいは輸送挙動をマイクロメカニクスの観点から考察することを主な目的とし、以下のように構成されている。まず第 2 章においては、本研究の基礎となる固液二相問題に関する数値計算を概説する。特に、連成計算手法として、Euler-Euler カップリング、Euler-Lagrange カップリングおよび Lagrange-Lagrange カップリングを中心に、近年の研究事例と併せて述べている。

第 3 章では、流体運動を解く格子ボルツマン法の位置付けや基礎方程式とともに、理論的背景を記述することで、流れ場の支配方程式との整合性を証明している。また、代表的な境界条件である滑りなし境界条件、圧力境界条件および速度境界条件の具体的な設定方法について説明を行なっている。第 4 章では、固体粒子分散相の運動を解く個別要素法について述べている。剛体粒子モデルと個別要素法に代表される軟体粒子モデルそれぞれのコンセプトと計算手法を述べた後、個別要素法の粒子間モデルである線形モデルおよびヘルツの弾性接触理論について記述している。

第 5 章では、格子ボルツマン法と個別要素法の連成システムの計算スキームについて説

明した。主に、固液界面における固相および液相間の相互作用力を求める移動境界条件について記している。また、共通の無次元係数を用いた空間および時間スケールの統合方法にも触れている。

第 6 章では、本連成計算手法の妥当性の検証を行なっている。まず予備解析として、円環状クエット流れを計算することにより、Navier-Stokes 方程式の理論解との比較をした。次に、粘性流体中の単一あるいは 2 個の円形粒子の沈降挙動を詳細に検討した。

第 7 章では、傾斜容器内におけるスラリーの固液分離促進現象に対して、本連成計算手法を適用した。傾斜沈降装置を単純化したモデル内での固相および液相の運動を追跡することによって、固液分離促進現象の再現とメカニズム解明を試みた。

第 8 章では、流体流動に伴う粒子輸送が多孔質体の浸透率低下に与える影響の検討を行なっている。粒子輸送が多孔質体内の孔隙を閉塞するプロセスを再現し、また同時に多孔質体内の流速分布および圧力分布を評価した。

第 9 章では、出砂障害を計算対象とし、パーフォレーション孔内に集積した砂粒子がケーシング穿孔部から流出するプロセスを再現することを試みた。特に、ケーシング穿孔部にて形成されるサンドアーチと出砂量の関係について検討した。最後に、第 10 章にて、本論文の各章における結論をまとめ、全体の総括を行なっている。

第2章 固液二相問題に関する数値計算

2.1 数値流体計算手法の分類

流体運動を記述する場合、オイラー (Euler) 表示 (空間表示) とラグランジュ (Lagrange) 表示 (物質表示) と呼ばれる立場がある (小林, 2003; 平野, 2004)。前者は、速度、密度、圧力および温度などの流れの状態を空間点 x と時間 t の関数として記述する方法である。一方、後者は、時間とともに移動する流体粒子に関して運動を記述する方法である。ここでの流体粒子は、流体を構成する分子や原子ではなく、連続体的な意味での微小部分を意味する。Fig.2.1 はその違いを模式的に示したものである。

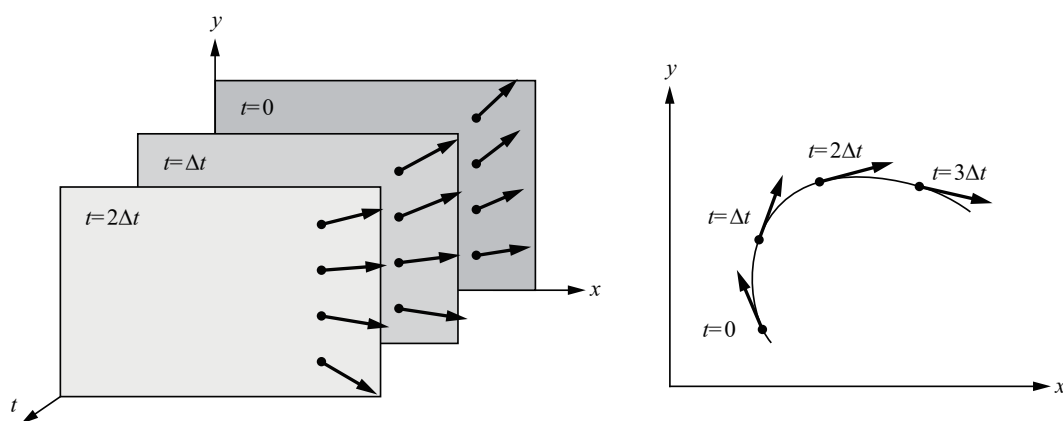


Fig. 2.1: Eulerian and Lagrangian description

ここでは、オイラー表示法とラグランジュ表示法に関連付けて数値解析法の分類を試みる。流れの基礎方程式の解を単純な数式で表すことは困難である。そこで、数値計算を行なうために様々な離散化が行なわれる。

まず、区分的に低次の多項式で近似する考え方がある。これに基づく手法が (有限) 差分法 (Finite difference method; FDM)、有限体積法 (Finite volume method; FVM)、有限要素法 (Finite element method; FEM) である。これらはオイラー的に計算されることが多い。一方、流れを有限個の渦や流体粒子で近似しようとする方法もあり、ラグランジュ的に追跡される。これらは、渦法 (Vortex method) や粒子法 (Particle method) に代表される。さらに、渦や流体粒子とは別のルールで動く仮想粒子で流体の流れを表現しようとするセルオートマトン (Cellular automaton; CA) 法 (格子点での状態が隣接の格子点の情報のみにより時間発展する系) (日本機械学会, 2007) に立脚した解法にも可能性が期待されている (小林, 2003)。以下に、オイラー的解法、ラグランジュ的解法およびセルオートマトン解法の詳細と代表的な計算手法について述べる。

2.1.1 Euler 的解法

オイラー的解法では、流れ場に格子を設け、格子点で空間微分を差分化したり、あるいは格子セルで物理量の収支を記述したりすることが多い(小林, 2003)。規則的な格子配置である構造格子は、1格子あたりの精度と効率がよく、流れ現象の基礎研究のための高品位な計算に適しているが、扱うことのできる流れ場は比較的単純な形状に限られる。離散点を不規則に配置しても構わない非構造格子はその対極にあり、複雑な形状の流れ場における実用計算向きと言える。非構造格子は、特定の領域に必要なに応じて自由に格子を追加して、局所的な解像度を高めることができるという利点もある。

オイラー的方法に基づき、流れ場の状態を区分的に低次の多項式で表現する方法としては、(有限)差分法、有限体積法、有限要素法が代表的である。

A. 有限差分法

微分型の流れの方程式を基礎とし、格子点の上でのその解を求めるものである。基礎方程式の中の微係数、つまり速度や圧力の勾配は差分商によって近似される。したがって、差分法では構造格子が使用される。特に、差分法の特長を最大限に引き出すためには、直交性が良く滑らかに配置された格子が好ましいとされる。

B. 有限体積法

積分型の流れの方程式を基礎とする。変数を格子点上に配置するのではなく、検査体積(セル)の代表値を求めるものである。保存則をセルの境界からの流入・流出と内部での発生・消滅によって表わし、この関係を計算していく。構造格子でも非構造格子でも構わない。構造格子の場合でも、差分法ほど格子配置の滑らかさを必要としない。

C. 有限要素法

基礎方程式としては微分型ではなく、基底関数を乗じて積分した弱形式を用いる。セルの内部の分布状態はセル頂点上の変数値と補間関数によって与えられる。これを支配方程式に代入し、重みをつけて積分すると、セル頂点上に配置された変数の関係式が得られる。構造格子でも非構造格子でも構わない。

2.1.2 Lagrange 的解法

ラグランジュ的な方法では、連続的な渦度や速度を多数の微小な渦や粒子のような離散要素で表現し、比較的簡潔なアルゴリズムに基づいてこれらを追跡して流れ場を解析する。その特徴から、基本的には非定常計算であり、定常問題に対しても非定常解の時間平均操作が必要となる。保存則は離散要素の数と、それぞれの要素が保持する物理量によって表現される。そのため、保存則が破綻するとすれば、オイラー的方法では離散化に起因するのに対して、ラグランジュ的方法では要素の表現方法に起因する。ラグランジュ的解法の代表例として、渦法(Leonard, 1980)と粒子法を略述する。

A. 渦法

渦法の基礎式は、運動方程式の回転から導かれる渦度輸送方程式、渦による誘起速度を表すビオ・サバル (Biot-Savart) の式、および渦要素の移流の式 ($dx/dt = v$) である。また、圧力分布を知りたい場合には別に圧力方程式を扱うが、渦法そのものには圧力の計算は必須ではない。以上のように、渦法は比較的単純なスキームで構成されているが、複雑な流れ場への適用にあたっては、渦要素の適切な選択と発生方法が決め手となる。

B. 粒子法

ラグランジュ表記はもともと流体粒子の運動に着目したものであり、これを最も明確に反映しているのが粒子法である。この方法で扱われるのはマクロな流体粒子である。粒子間の相互作用は、分子動力学法などで使用される分子間相互作用のようなモデルとはまったく異なる。

最初の粒子法は、PAF (Particle-and-Force) 法であり、米国ロスアラモス国立研究所で開発された (Daly *et al.*, 1965)。その後、対流項を粒子で、その他の項を格子で計算する PIC (Particle in cell) 法 (Amsden, 1966) や、界面形状を捕捉するためだけに流体のトレーサとしての粒子を用いる MAC (Marker and cell) 法 (Harlow and Welch, 1965) が提案された。特に MAC 法の格子による計算法の部分には、スタッガード格子や半陰的アルゴリズムのアイデアが使われており、差分法における流体解析の標準的な方法として現在まで受け継がれている。

Lucy (1977) は、新しい粒子法として SPH (Smoothed particle hydrodynamics) 法を開発し、宇宙物理学の問題に適用した。宇宙物理学では、真空のような低密度から星の内部のような高密度まで、著しい圧縮性のある流れを扱う必要がある。そして、計算精度の観点からは、高密度の領域の空間解像度を高くしなければならない。粒子法では、粒子は移動する計算点であり、ある一定の質量を保持しながらラグランジュ法の運動を行なうのであるから、高密度の領域には粒子が集中して自動的に空間解像度も高くなる。したがって、圧縮性流れにおいて粒子法は計算点密度の自動調節機能も兼ね備えていることになる。こうした利点のため、宇宙物理学の問題に SPH 法は広く使われている (Monaghan, 1988)。

さらに、Koshizuka and Oka (1996) は、非圧縮性流れのための粒子法として、MPS (Moving particle semi-implicit) 法を開発した。MPS 法は、微分演算子に対応する粒子相互作用モデルを用いて、連続体の支配方程式を離散化する手法である。また、MAC 法で用いられたような半陰的アルゴリズムを粒子法の枠組みの中で実現している。MPS 法を用いて水柱の崩壊や砕波が計算され、自由表面の大変形のみならず、流体の分裂や合体に対しても適用できることが示されている。

SPH 法も MPS 法も、微分方程式に対する一般的な離散化法であり、どちらも流体解析のみならず構造解析にも適用されている (Libersky *et al.*, 1993; Chikazawa *et al.*, 2001)。粒子法による構造解析では、その特徴を生かして大変形や破壊の問題が解かれている (越塚, 2005)。

2.1.3 Cellular automaton 解法

以上のオイラー的解法およびラグランジュ的解法は、いずれも流体の基礎方程式にのった解法であるが、それとは全く別の法則で流体の運動を表現しようという試みもある。

その代表例がセルオートマトン法であり、下記の格子気体法 (Lattice gas method) と格子ボルツマン法 (Lattice-Boltzmann method; LBM) は、流れの基礎方程式との整合性も理論的に説明されている (蔦原ほか, 1999)。なお、格子ボルツマン法の詳細については、第3章にて述べている。

A. 格子気体法

格子気体法は、格子気体セルオートマトン (Lattice gas cellular automaton) 法とも呼ばれ、空間に格子を作成し、格子に沿って仮想粒子を移動させるものである。格子はオイラー的方法における格子とは異なり、仮想粒子もラグランジェ的方法における離散要素とは異なる。

粒子は、格子に沿った移動と、格子点上で出あった別の粒子との衝突を繰り返す。粒子は、平衡分布関数に基づいて与えられるルールに従って衝突前後で運動方向を変える。多数の粒子に対して、このような操作をくり返し、全体として場のダイナミクスを表現するものである。その際、計算で取り扱う変数が0か1かのブール (Bool) 変数であるため、計算機のビット演算との相性が良く、高い計算効率が期待される (蔦原ほか, 1999)。

ブール変数を使うことは格子気体法の大きなメリットではあるが、仮想粒子は衝突をくり返しながら常に運動しているので、巨視的な流れの状態を知るには時間と空間のいずれかまたは両方での統計処理が必要となる。

B. 格子ボルツマン法

格子点で隣接する各方向の格子に向かう粒子の割合 (アンサンブル平均) を計算するのが格子ボルツマン法である。基本変数は、各格子点での分布関数であり、衝突による粒子分布の変化は衝突演算子によって表現される。なお、格子ボルツマン法は仮想的な粒子に対する発展方程式を与えるもので、いわゆるボルツマン方程式とは異なるものである。

格子気体法と格子ボルツマン法は、ともに規則的で等間隔の格子が基本となっており、粒子速度が拘束されている。そのため、複雑な境界の近傍、境界層などの大きな変化がある領域などでは解像度を高めることは困難である (小林, 2003)。

格子ボルツマン法の計算スキームは、規則格子に対する差分スキームとなっているが、これを曲線格子に拡張することにより、上記の困難を取り除くことが可能となる。この手法は、差分格子ボルツマン法 (Finite difference lattice-Boltzmann method; FDLBM) と呼ばれている (McNamara *et al.*, 1995; Cao *et al.*, 1997; 蔦原ほか, 2002; Sofonea and Sekerka, 2003; 蔦原ほか, 2003)。

また Imamura (2003) は、一般座標系格子ボルツマン法 (Generalized interpolation-based lattice Boltzmann method, GILBM) と呼ばれる物体構造格子への適用を可能にした新たな格子ボルツマン法を提案している (武田と甲斐, 2007)。

2.2 固液二相モデルの分類と既往の研究

本研究で取り扱う現象、つまり流体中における固体粒子群の沈降、堆積あるいは輸送挙動を考える場合には、液相と固相の素過程のスケールが大きく異なる。すなわち、液相の

素過程の空間スケールは流体を構成する分子の平均移動距離程度であるのに対して、固相の素過程の空間スケールは、砂粒子径程度である。したがって、液相を分子レベルで解析するのは事実上不可能であり、液相は原則として連続系として扱うことになる。一方、固相については、連続系、離散系としての扱いが選択できる。

また、固液混相問題の一般論として考えると、固相および液相の素過程の空間スケールの差が十分に小さければ、共に分子レベルで扱うことも可能であろう。この種の方法論は、分子動力学 (Molecular dynamics; MD) 法として知られている。

固液二相モデルは、各相を連続系または離散系、あるいは Euler 型または Lagrange 型で分類することができる。後藤 (2004) は、固相および液相のそれぞれについて、(1) 連続系・Euler 型、(2) 連続系・Lagrange 型、(3) 離散系・Lagrange 型、の3つの範疇があるとして、固液二相流モデルを詳細にまとめている。

ここでは、固相の液相とのアナロジー (analogy) を前提とする方法である Euler-Euler カップリング、固体粒子の追跡を行なう方法である Euler-Lagrange カップリング、粒子法に代表される Lagrange-Lagrange カップリングを近年の研究事例と併せて述べることにする。

2.2.1 Euler-Euler カップリング

流れ場および粒子分散相ともに Euler 型で評価する Euler-Euler カップリングには、次のような手法が提案されている。赤羽と中山 (2005) は、有限要素法と GFM (Ghost fluid method) (Fedkiw *et al.*, 1999; Fedkiw, 2002) を併用することにより、静止した円形物体周りの流れを計算している。GFM では、流体領域と固体領域をレベルセット (Level set) 関数 ϕ の符号の違い (流体領域は $\phi > 0$ 、固体領域は $\phi < 0$ とし、固液界面で $\phi = 0$) で識別する。このとき、固体表面近傍の固体領域にある節点に対して、固体表面で滑りなし条件が満たされるように仮想的な速度が与えられる。GFM と同じく、仮想境界法の1つである Fictitious domain method (Glowinski *et al.*, 1999) を有限要素法に用いた手法で、静止または運動する円形物体周りの流れ場の計算もされている (卯野と中山, 2005)。

また岡澤と中尾 (2007) は、混合物理論 (Mixture Theory) を用いた有限要素法で解く計算手法の構築を試みている。混合物理論は、固液界面に存在し得る2物質以上を含む要素、すなわちマルチ-マテリアル要素に対して、応力を平均化する処理を行なうものである。また水柱が崩れ、弾塑性体である壁に衝突するシミュレーションを行っており、その有効性も示されている。

黒田と牛島 (2009) は、多相場の解法 (牛島ほか, 2008) に、有限要素法によって線形弾性体の有限変形を計算する固体モデルを導入した。また、この計算手法の3次元キャピティ内における複雑形状の弾性体の変形と運動に適用している。

2.2.2 Euler-Lagrange カップリング

流れ場の評価に Euler 型、粒子分散相の評価に Lagrange 型のモデルを採用した Euler-Lagrange カップリングは、評価可能な粒子分散相周りの流れ場の解像度に応じて分類することができる (原田ほか, 2007a)。流れ場のモデリングには、Fig.2.2 に示したように2種類の視点がある (田中, 2008)。Fig.2.2(a) は、個々の粒子周りのミクロな流れ場を計算する、つ

まり計算格子幅が粒子スケールよりも小さい高解像度の手法である。これは、粒子に作用する駆動力をモデル化せずに直接計算するという意味で、直接数値計算法 (Direct numerical simulation; DNS) (瀧口ほか, 1998) と呼ばれている (後藤, 2004)。一方、Fig.2.2(b) は、粒子スケール以下の流れは問題とせず、粒子スケールよりも大きい計算格子幅で平均化されたマクロあるいはメソスケールの流れ場、いわゆる局所平均流れ場の下で粒子を駆動させる手法である。このとき、粒子の駆動力は、粒子近傍の格子点の液相の物理量から粒子周囲の流体の物理量を内挿して推定される。また、Euler-Lagrange カップリング手法における粒子運動計算には、個別要素法 (Discrete/Distinct element method; DEM) が採用されることが非常に多い。個別要素法の詳細については、第4章にて述べている。

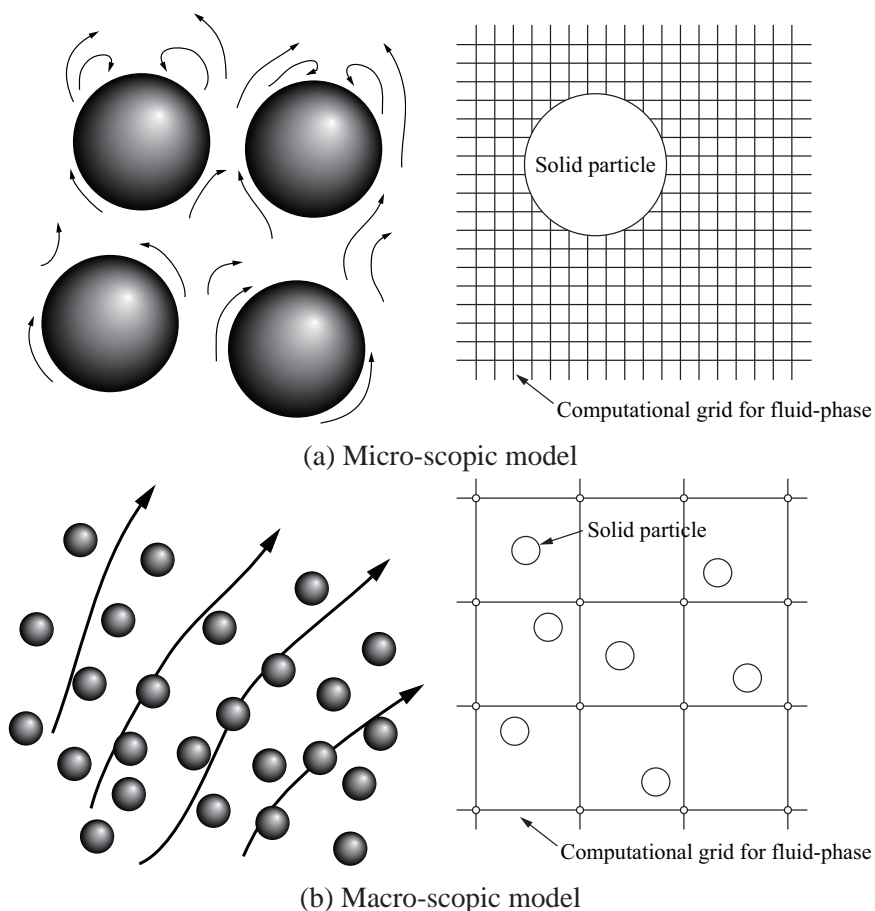


Fig. 2.2: View-points of fluid-phase modeling

清水ほか (2003) は、オイラー的流体解析と個別要素法を連成させた解析手法に粒子流の平衡流動数値実験を行なっている。岡ほか (2008) は、浸透時や液状化時の堤防の大変形問題を解くため、間隙流体を有限差分法で定式化し、物体には MPM (Material point method) を用いて固液二相連成解析法への拡張を試みている。MPM は、物体を Lagrange 粒子で離散化し、全体の運動方程式の計算は Euler 格子で行なうもので、要素の絡み合いの問題を回避することができる。

また、直接数値計算法と個別要素法を用いた事例としては、西浦ほか (2006) による地球

シミュレータを用いた粒子群干渉沈降挙動のシミュレーションが挙げられる。

2.2.3 Lagrange-Lagrange カップリング

流れ場および粒子分散相ともに Lagrange 型で評価する Lagrange-Lagrange カップリングは、MPS 法に代表される粒子法の登場により、急速に発展している。剛体は MPS 法において複数の粒子で形状が表現され、その運動については一体として計算される。また、流体の計算のアルゴリズム中に簡単に埋め込むことができ、各時間ステップにおいて、まず、剛体粒子も流体粒子とまったく同じに流体としての計算をおこなった後、剛体全体としての並進運動量と角運動量が保たれるように各剛体粒子の速度と座標を更新する。

剛体（構造物）と流体の相互作用に関する 2 次元計算の例としては、斜面に発生する砕波と浮体との相互作用がある (Koshizuka *et al.*, 1998)。さらに、流木群による堰き止め (後藤ほか, 2001a)、構造物下面への接岸浮遊物の潜込過程 (後藤ほか, 2001b)、礫の運動と流れの相互作用 (後藤ほか, 2002b)、マンホールの浮上と水の噴出 (後藤ほか, 2002c) などがある。

また、土砂と流体との相互作用に関する次のような問題にも、MPS 法やこれと個別要素法を組み合わせた手法が適用されている。土砂の海洋投棄 (後藤と Fredsoe, 1999)、土砂崩壊が引き起こす津波 (後藤ほか, 2000, 2002e)、波と底泥との相互作用 (後藤ほか, 2001c)、水流による洗掘 (後藤ほか, 2002a)、越流水による堤防の侵食 (後藤ほか, 2002d) などが、後藤 (2003) は、個別要素法と MPS 法を組み合わせる手法の開発も行なっている。さらに、地震による斜面崩壊誘発型津波の発生過程の計算も実施されている (五十里ほか, 2009)。

2.2.4 その他のモデリング手法

最後に、上記の分類の範疇に組み入れることができなかったが、非常に興味深いモデリング手法を取り上げておきたい。個別要素法に流体パス・ネットワークモデルを組み込んだ計算手法が提案されている。これは、流体の流れるパスとして固体粒子間隙をネットワークで結合し、粒子間の流れと流体圧力（間隙水圧）を粒子の運動と関連付けて解くものである (Hakuno and Tarumi, 1988; Tarumi and Hakuno, 1988; Hakuno and Uchida, 1991; 木山ほか, 1994; 伯野, 1997)。清水ほか (2009) は、この流体パス・ネットワークモデルを飽和、不飽和の両条件に適用した個別要素法を用いて、土石流のシミュレーションを実施している。

第3章 格子ボルツマン法の理論

ここでは、本研究における流体挙動の計算手法として用いた格子ボルツマン法 (Lattice-Boltzmann Method; LBM) の理論について論じる。はじめに、格子ボルツマン法を概説し、次に実際の計算手法について述べる。さらに、理論的な背景について考えるため、格子ボルツマン方程式から Navier-Stokes 方程式を導出するプロセスを示す。また、格子ボルツマン法の様々なアプリケーションへの適用を図るため、基本的な境界条件についても説明する。

3.1 格子ボルツマン法の位置付け

3.1.1 特長と動向

数値流体解析分野において、近年、格子ボルツマン法と呼ばれる計算手法が注目されている (蔦原ほか, 1999)。格子ボルツマン法が注目されているのは、コーディングおよびベクトル化・並列化の容易性、境界条件の設定の簡便性、混相流モデルへの高拡張性などの特長がある為であると考えられる。

格子ボルツマン法は、McNamara and Zanetti (1988) によって発表され、既に 20 年以上の歴史がある。その間に、幾多の画期的な発見があった。当初の格子ボルツマン法は非線形方程式を逐次近似法で解くものであり、大変扱いにくいものであった。しかし、単一緩和時間近似を用いた簡略化、いわゆる格子 BGK (Bhatnagar-Gross-Krook) モデル (Qian, 1992) が開発されて以降広く普及するようになった。また、格子 BGK モデルの方程式が、実は連続空間上のボルツマン方程式を空間座標と速度座標に関して離散化したものに他ならない事が発見され (He and Lou, 1997)、外力の正確な導入が可能になった。さらに、複数の緩和時間係数を用いた MRT (multi-relaxation time) モデル (Lallemand and Luo, 2000) が開発され、より自由度の高い解析を行なうことができるようになった (林, 2009)。

近年では、自由界面を取り扱うことができるモデル (Thürey *et al.*, 2006; 荒木と越村, 2009) も提案されている。

3.1.2 格子気体法

格子ボルツマン法は、その前身である格子気体法から生まれた。ここでは、格子気体法について簡単に紹介し、それから如何にして格子ボルツマン法が導かれたかを述べる。

セルオートマトン法の 1 種に格子気体モデルがある。このモデルの 1 つである HPP (Hardy, Pomeau, and Pazzis) モデル (Hardy *et al.*, 1973) は、2 次元の正方格子上で、単位時間ステップの間に最近接格子点に飛び移る速度を持つ粒子を、同一格子点上で同一速度を有する粒

子は高々1個となるように配置される。粒子は速度ベクトルに応じて格子点間を飛び移るが、同一格子点で複数の粒子が出会った場合、そこで運動量を保存する衝突が発生し速度ベクトルの変更が生じる。格子気体法は、この格子気体モデルの粒子数と速度ベクトルの複数の格子点に渡る平均値を流体の密度と流速と見なして流体解析を行なう計算手法である。

格子気体モデルの研究が進むに連れて、HPPモデルは正方格子に起因する異方性が生ずるため、流体運動の記述には適用できない事が分かってきた。Frisch *et al.* (1986) は、2次元の三角格子上の格子気体モデルであるFHP (Frisch, Hasslacher, and Pomeau) モデルを考察し、これが記述する流体運動が等方的であり、格子気体モデルを用いて流体解析を行なう事が可能である事を示し一躍注目を浴びた。格子気体法を用いるならば、整数演算のみで流体解析が可能であり、実数演算が必要な Navier-Stokes 方程式の離散化による解析に比べて高速に実行できると考えられたからである。

しかしながら、格子気体法による流体解析は実用には不向きであった。その理由は、等方的な3次元格子気体モデルが難解であること、滑らかな流体運動を得るためには多くの格子点に渡る平均を取る必要があること、流体の粘性係数が取りうる値の範囲が狭いため高い Reynolds 数の場合の解析が困難であることなどである。

格子気体法の時間発展方程式の衝突項に、ボルツマンの分子カオス仮定を適用した方程式は、格子ボルツマン方程式と呼ばれる。格子ボルツマン法は、この格子ボルツマン方程式を用いて流体解析を行なう計算手法である。格子ボルツマン法により、上記格子気体法の欠点が解消されるが、格子ボルツマン方程式の解法には実数演算が必要となるため、整数演算のみの格子気体法の絶対安定性は損なわれる。

3.2 計算手法

格子ボルツマン法は、Navier-Stokes 方程式を離散化する従来の数値流体力学的手法と異なり、仮想的な流体粒子の密度分布関数を定義して、その分布関数の発展方程式を解く手法である。つまり、格子ボルツマン法で用いる方程式は、流体を構成する微視的かつ離散的な粒子運動を記述するものであり、巨視的かつ連続的な流体運動そのものを表しているわけではない。しかしながら、格子ボルツマン法で用いる方程式から Navier-Stokes 方程式を導出することができ、理論的にその整合性を証明することができる (蔦原ほか, 1999)。これに関しては、次節で詳しく述べることにする。

格子ボルツマン法では、計算領域は格子によって空間離散化され、流体粒子の運動には極めて規則的なモデルが用いられる。同時に、流れの保存則を満足する適切な衝突項を適用することが必要であり、様々な衝突項や速度モデル用いる多くの計算モデルが提案されている。本研究では、2次元非圧縮性流体流れを x, y 方向それぞれ幅 Δx の規則的な格子で分割された計算領域内でシミュレートする。また、衝突演算子および速度モデルに対して、それぞれ格子BGKモデルと2次元9速度モデル (Fig.3.1) を用いている (Qian, 1992; Succi *et al.*, 1993)。

本計算手法では、時刻 t 、位置 r で α 方向の速度 c_α を持つ粒子の密度分布関数 $f_\alpha(r, t)$ の時間発展を格子ボルツマン方程式により解く。格子ボルツマン方程式は仮想粒子の並進と衝突の2つの過程を表している。並進過程においては、仮想粒子は速度に応じた方向の

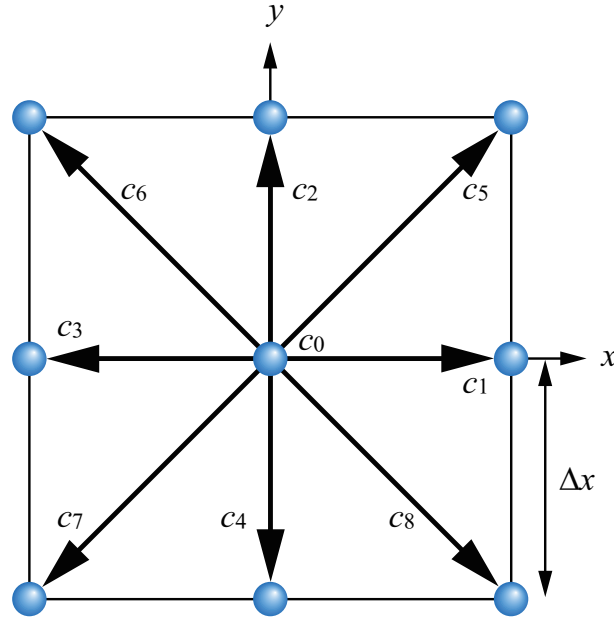


Fig. 3.1: D2Q9 model

隣接する格子点へと移動し、また衝突過程においては、密度分布が単一割合で局所平衡状態へ再配分される。

$$f_{\alpha}(\mathbf{r} + \mathbf{c}_{\alpha}\Delta t, t + \Delta t) = f_{\alpha}(\mathbf{r}, t) - \frac{1}{\tau} \left\{ f_{\alpha}(\mathbf{r}, t) - f_{\alpha}^{eq}(\mathbf{r}, t) \right\} \quad (\alpha = 0, 1, 2, \dots, 8) \quad (3.1)$$

ここで、 τ :(単一)緩和時間係数、 f_{α}^{eq} :平衡分布関数であり、その格子点におけるマクロな流体密度を ρ 、流速を \mathbf{u} とすれば、

$$f_{\alpha}^{eq} = \rho w_{\alpha} \left\{ 1 + 3 \frac{\mathbf{c}_{\alpha} \cdot \mathbf{u}}{c^2} - \frac{3 u^2}{2 c^2} + \frac{9 (\mathbf{c}_{\alpha} \cdot \mathbf{u})^2}{2 c^4} \right\} \quad (3.2)$$

$$w_{\alpha} = \begin{cases} 4/9 & \text{for } \alpha = 0 \\ 1/9 & \text{for } \alpha = 1, 2, 3, 4, \\ 1/36 & \text{for } \alpha = 5, 6, 7, 8 \end{cases}, \quad |\mathbf{c}_{\alpha}| = \begin{cases} 0 & \text{for } \alpha = 0 \\ c & \text{for } \alpha = 1, 2, 3, 4 \\ \sqrt{2}c & \text{for } \alpha = 5, 6, 7, 8 \end{cases} \quad (3.3)$$

と定義される。ここで、 w_{α} :重み係数、 c :流体粒子の格子速度、 Δx :格子幅、 Δt :離散化時間であり、

$$c = \frac{\Delta x}{\Delta t} \quad (3.4)$$

緩和時間係数は、密度分布関数が平衡分布関数に近づくのに要する無次元の時間的尺度である。マクロな流体変数である密度 ρ 、流速 \mathbf{u} および圧力 p は、次のように表わされる(巨視化)。

$$\rho(\mathbf{r}, t) = \sum_{\alpha} f_{\alpha}(\mathbf{r}, t) \quad (3.5)$$

$$\mathbf{u}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\rho(\mathbf{r}, t)} \sum_{\alpha} f_{\alpha}(\mathbf{r}, t) \mathbf{c}_{\alpha} \quad (3.6)$$

$$p(\mathbf{r}, t) = c_s^2 \rho(\mathbf{r}, t) \quad (3.7)$$

ここで、 c_s : 音速であり、本モデルにおいては、 $c_s = c/\sqrt{3}$ と表される。
また、流体の動粘性係数 ν は、以下のように表わすことができる。

$$\nu = \frac{1}{3} \left(\tau - \frac{1}{2} \right) \frac{\Delta x^2}{\Delta t} \quad (3.8)$$

また、数値計算上のマッハ数 Ma は、次のように定義される。

$$Ma = \frac{u_{max}}{c} \quad (3.9)$$

ここで、 u_{max} : 流れ場の最大流速であり、以下を満たす必要がある。

$$Ma \ll 1 \quad (3.10)$$

これは、適当な計算精度を保証するためには、格子速度 c を最大流速 u_{max} より十分大きく設定するべきであることを示している。Feng *et al.* (2007) は、マッハ数 Ma を少なくとも 0.1 より小さい値にするように推奨している。

3.3 理論的背景

3.3.1 平衡分布関数

格子ボルツマン法は、格子点上を移動する仮想流体粒子の粒子分布関数を解くことにより、その分布関数を用いて巨視的な流体の速度等を評価するものである。例えば、Fig.3.1 に示す D2Q9 モデルの格子ボルツマン法では、格子点 0 にいた流体粒子は 2 次元平面に配置した格子点の内の隣接する格子点 1, 2, ..., 8 のどれかに移動することが可能である。移動しないでそのままそこに留まることも含めて、9 個の速度が可能で、それぞれの微視的速度をもって微小時間 Δt の間に隣接格子点に移動することが可能である。その方向を表わす添字を α で表せば、 $\alpha = 0, 1, 2, \dots, 8$ の値を取る。 α 方向の速度を c_{α} 、着目する格子点を \mathbf{r} とすると、現時点 t での粒子分布関数 $f_{\alpha}(\mathbf{r}, t)$ は、格子点での流体粒子の衝突、格子点への流体粒子の流入・流出を評価することにより求まる。BGK 格子ボルツマン法では、 Δt 時間後の粒子分布関数 $f_{\alpha}(\mathbf{r} + \mathbf{c}_{\alpha}\Delta t, t + \Delta t)$ が次の式から求まる。

$$f_{\alpha}(\mathbf{r} + \mathbf{c}_{\alpha}\Delta t, t + \Delta t) = \tilde{f}_{\alpha}(\mathbf{r}, t) \quad (3.11)$$

$$\tilde{f}_{\alpha}(\mathbf{r}, t) = f_{\alpha}(\mathbf{r}, t) + \frac{1}{\tau} \{ f_{\alpha}^{(0)}(\mathbf{r}, t) - f_{\alpha}(\mathbf{r}, t) \} \quad (3.12)$$

Eq.(3.12) で格子点 \mathbf{r} での衝突後の粒子分布関数 $\tilde{f}_{\alpha}(\mathbf{r}, t)$ を求め、それが α 方向の隣接点 ($\mathbf{r} + \mathbf{c}_{\alpha}\Delta t$) に移動することが、Eq.(3.11) の意味することである。Eq.(3.12) の右辺第 2 項は衝突項を意味し、通常 $\Omega_{\alpha}(\mathbf{r}, t)$ の記号で表される。すなわち、

$$\Omega_{\alpha}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\tau} \{ f_{\alpha}^{(0)}(\mathbf{r}, t) - f_{\alpha}(\mathbf{r}, t) \} \quad (3.13)$$

上述の粒子分布関数を用いて、巨視的な流体の密度 $\rho(\mathbf{r}, t)$ および運動量 $\rho(\mathbf{r}, t) \mathbf{u}(\mathbf{r}, t)$ は次のように表される。

$$\rho(\mathbf{r}, t) = \sum_{\alpha} f_{\alpha}(\mathbf{r}, t) \quad (3.14)$$

$$\rho(\mathbf{r}, t) \mathbf{u}(\mathbf{r}, t) = \sum_{\alpha} f_{\alpha}(\mathbf{r}, t) \mathbf{c}_{\alpha} \quad (3.15)$$

さらに、温度 T が一定で平衡状態にある系を扱う場合、次のエネルギー等分配則が成り立たなければならない。

$$kT = \sum_{\alpha} \frac{m}{2} (\mathbf{c}_{\alpha} - \mathbf{u})^2 \frac{f_{\alpha}}{\rho} \quad (3.16)$$

ここに、 m : 流体粒子の質量である。

さて、格子ボルツマン法での速度の平衡分布は、分子動力学法で用いられる平衡分布とは異なる。これは、格子ボルツマン法での流体粒子が隣接格子点への運動のみに限定され、自由に運動できないことに起因している。通常の一様流速 \mathbf{u} の系の熱力学的平衡状態においては、3次元空間で自由に運動する分子（流体粒子）の速度 \mathbf{c} は、マクスウェル (Maxwell) の粒子分布 $f^{(eq)}(\mathbf{c})$ で表される。

$$f^{(eq)}(\mathbf{c}) = \rho \left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{3/2} \exp \left\{ -\frac{m}{2kT} (\mathbf{c} - \mathbf{u})^2 \right\} \quad (3.17)$$

格子ボルツマン法の平衡分布関数 $f_{\alpha}^{(0)}$ は、Eq.(3.17) の右辺の指数関数をテイラー級数展開し、次のように仮定して導出される。

$$f_{\alpha}^{(0)} = \rho w_{\alpha} \left\{ 1 + b \frac{\mathbf{c}_{\alpha} \cdot \mathbf{u}}{c^2} + e \frac{u^2}{c^2} + h \frac{(\mathbf{c}_{\alpha} \cdot \mathbf{u})^2}{c^4} \right\} \quad (3.18)$$

ここに、 w_{α}, b, e, h が求めるべき未定係数で、 w_{α} : 重み係数、 c : 流体粒子の格子速度で $c = \Delta x / \Delta t$ である。

格子ボルツマン法では領域を格子点に置き換え、流体粒子がその格子点上を移動するが、物理現象として、物理量は格子点の取り方に依存しないはずである。すなわち、格子を任意に回転させても、Eq.(3.14) から Eq.(3.16) はその回転角に依存せず成り立たなければならない。このような条件を付加することにより、未定係数を決定することができる。これらの未定係数の値は用いるモデルによって異なるが、本論文では、D2Q9 モデルについて論じる。

D2Q9 モデル

Fig.3.1 に示したように xy 座標系と α 方向を設定する。前述したように、この格子全体を回転角 ϕ 回転させて、その平衡分布関数を用いて得た Eq.(3.14) から Eq.(3.16) の右辺の値が、回転角 ϕ に依存しないように未定係数 w_{α}, b, e, h の値を決定すれば、Eq.(3.18) で表された平衡分布関数が陽に決定されることになる。そこで、導出に先立ち、いくつかの有用な予備的關係式を導いた後に、これらの未定係数を決定することにする。なお、決定に際して、Eq.(3.14) から Eq.(3.16) の他に、運動量流束の關係式も必要であることを前もって述べておく。

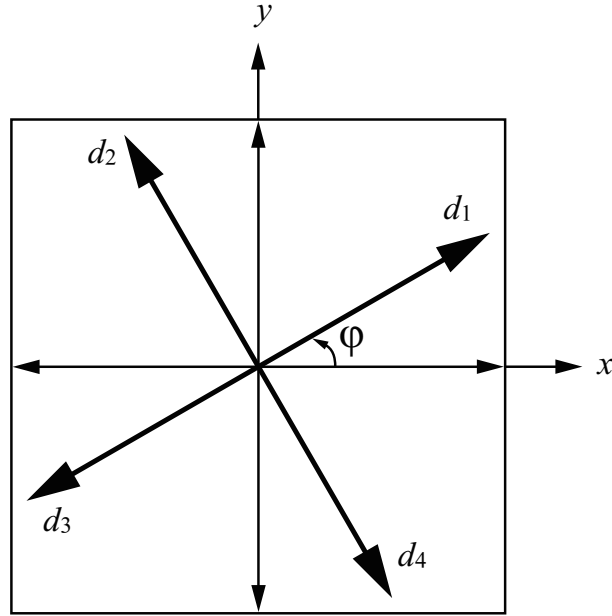


Fig. 3.2: Rotation of unit vector

Fig.3.2 に示すように、直交座標系の座標軸に沿った単位ベクトルを角度 ϕ 回転させて作った単位ベクトルを b_1, b_2, b_3, b_4 とすれば、これらは成分表示で次のように表される。

$$\left. \begin{aligned} b_1 &= (d_{1x}, d_{1y}) = (\cos \phi, \sin \phi) \\ b_2 &= (d_{2x}, d_{2y}) = \left\{ \cos \left(\phi + \frac{\pi}{2} \right), \sin \left(\phi + \frac{\pi}{2} \right) \right\} \\ b_3 &= (d_{3x}, d_{3y}) = \{ \cos (\phi + \pi), \sin (\phi + \pi) \} \\ b_4 &= (d_{4x}, d_{4y}) = \left\{ \cos \left(\phi + \frac{3\pi}{2} \right), \sin \left(\phi + \frac{3\pi}{2} \right) \right\} \end{aligned} \right\} \quad (3.19)$$

これらの式を用いて、後の導出に役立つ $\sum_k d_{kx}^2 d_{ky}^2$ 、などの値を求めることになる。ここでは、複素数の概念を利用して簡潔に導出することを試みる。複素数に関するオイラーの公式 $e^{i\theta} = \cos \theta + i \sin \theta$ を用いると次の関係式が得られる。

$$\sum_{k=1}^4 (d_{kx} + id_{ky})^4 = \sum_{k=0}^3 \left\{ e^{i \left(k \frac{\pi}{2} + \phi \right)} \right\}^4 = \sum_{k=0}^3 e^{i(2\pi k + 4\phi)} = e^{i4\phi} \sum_{k=0}^3 e^{i2\pi k} = 4e^{i4\phi} \quad (3.20)$$

同様に、

$$\left. \begin{aligned} \sum_{k=1}^4 (d_{kx} + id_{ky})^3 (d_{kx} - id_{ky}) &= 0 \\ \sum_{k=1}^4 (d_{kx} + id_{ky})^2 (d_{kx} - id_{ky})^2 &= 0 \end{aligned} \right\} \quad (3.21)$$

ここで、Eq.(3.20) の左辺を展開し、左辺と右辺の実数同士および虚数同士が等しいことから、

$$\left. \begin{aligned} \sum_{k=1}^4 (d_{kx}^4 + d_{ky}^4 - 6d_{kx}^2 d_{ky}^2) &= 4 \cos 4\phi \\ \sum_{k=1}^4 4(d_{kx}^3 d_{ky} - d_{kx} d_{ky}^3) &= 4 \sin 4\phi \end{aligned} \right\} \quad (3.22)$$

同様に、Eq.(3.21) より、

$$\left. \begin{aligned} \sum_{k=1}^4 (d_{kx}^4 - d_{ky}^4) &= 0 \\ \sum_{k=1}^4 (d_{kx}^3 d_{ky} + d_{kx} d_{ky}^3) &= 0 \\ \sum_{k=1}^4 (d_{kx}^4 + d_{ky}^4 + 2d_{kx}^2 d_{ky}^2) &= 4 \end{aligned} \right\} \quad (3.23)$$

Eq.(3.22) と Eq.(3.23) を用いると必要な予備的關係式を次のように導くことができる。

Eq.(3.22) の第1式と Eq.(3.23) の第3式より、

$$\sum_{k=1}^4 d_{kx}^2 d_{ky}^2 = \frac{1}{2} (1 - \cos 4\phi) \quad (3.24)$$

Eq.(3.22) の第2式と Eq.(3.23) の第2式より、

$$\left. \begin{aligned} \sum_{k=1}^4 d_{kx}^3 d_{ky} &= \frac{1}{2} \sin 4\phi \\ \sum_{k=1}^4 d_{kx} d_{ky}^3 &= -\frac{1}{2} \sin 4\phi \end{aligned} \right\} \quad (3.25)$$

Eq.(3.23) の第1式と第3式より、

$$\sum_{k=1}^4 d_{kx}^4 = \sum_{k=1}^4 d_{ky}^4 = 2 - \sum_{k=1}^4 d_{kx}^2 d_{ky}^2 = \frac{3}{2} + \frac{1}{2} \cos 4\phi \quad (3.26)$$

同様の導出手順により、1乗、2乗、3乗に関する項が次のように得られる。

$$\left. \begin{aligned} \sum_{k=1}^4 d_{kx} &= \sum_{k=1}^4 d_{ky} = 0 \\ \sum_{k=1}^4 d_{kx}^2 &= \sum_{k=1}^4 d_{ky}^2 = 2, \quad \sum_{k=1}^4 d_{kx} d_{ky} = 0 \\ \sum_{k=1}^4 d_{kx}^3 &= \sum_{k=1}^4 d_{ky}^3 = \sum_{k=1}^4 d_{kx}^2 d_{ky} = \sum_{k=1}^4 d_{kx} d_{ky}^2 = 0 \end{aligned} \right\} \quad (3.27)$$

以上で、予備的な関係式が導出できたので、本論に入り、未定係数 w_α, b, e, h の値を決定する作業に入る。

Fig.3.1 に示したような D2Q9 モデルの格子を、角度 ϕ 回転させることを考える。まず、次の量を計算すると、

$$\begin{aligned} \sum_{\alpha=0}^8 w_\alpha c_{\alpha x}^2 c_{\alpha y}^2 &= w_1 \sum_{\alpha=1}^4 c_{\alpha x}^2 c_{\alpha y}^2 + \sum_{\alpha=5}^8 c_{\alpha x}^2 c_{\alpha y}^2 \\ &= w_1 c^4 \frac{1}{2} (1 - \cos 4\phi) + w_5 (\sqrt{2}c)^4 \frac{1}{2} \left\{ 1 - \cos 4 \left(\phi + \frac{\pi}{4} \right) \right\} \end{aligned} \quad (3.28)$$

ここで、

$$w_1 = 4w_5 \quad (3.29)$$

とすると、Eq.(3.28) は ϕ に依存しなくなる。すなわち、

$$\sum_{\alpha=0}^8 w_\alpha c_{\alpha x}^2 c_{\alpha y}^2 = w_1 c^4 \quad (3.30)$$

同様に、計算を実行すると、

$$\left. \begin{aligned} \sum_{\alpha=0}^8 w_\alpha c_{\alpha x}^3 c_{\alpha y} &= \sum_{\alpha=0}^8 w_\alpha c_{\alpha x} c_{\alpha y}^3 = 0 \\ \sum_{\alpha=0}^8 w_\alpha c_{\alpha x}^4 &= \sum_{\alpha=0}^8 w_\alpha c_{\alpha y}^4 = 3w_1 c^4 \end{aligned} \right\} \quad (3.31)$$

以上より、

$$\sum_{\alpha=0}^8 w_\alpha c_{\alpha i} c_{\alpha j} c_{\alpha k} c_{\alpha l} = w_1 c^4 (\delta_{ij} \delta_{kl} + \delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk}) \quad (3.32)$$

同様にすると、

$$\left. \begin{aligned} \sum_{\alpha=0}^8 w_\alpha c_{\alpha x} &= \sum_{\alpha=0}^8 c_{\alpha y} = 0, & \sum_{\alpha=0}^8 w_\alpha c_{\alpha i} c_{\alpha j} &= 3w_1 c^2 \delta_{ij} \\ \sum_{\alpha=0}^8 w_\alpha c_{\alpha x}^2 &= \sum_{\alpha=0}^8 c_{\alpha y}^2 = 3w_1 c^2, & \sum_{\alpha=0}^8 w_\alpha c_{\alpha x} c_{\alpha y} &= 0 \\ \sum_{\alpha=0}^8 w_\alpha c_{\alpha x}^3 &= \sum_{\alpha=0}^8 w_\alpha c_{\alpha y}^3 = \sum_{\alpha=0}^8 w_\alpha c_{\alpha x}^2 c_{\alpha y} = \sum_{\alpha=0}^8 w_\alpha c_{\alpha x} c_{\alpha y}^2 = 0 \end{aligned} \right\} \quad (3.33)$$

次に、平衡分布関数の Eq.(3.28) の係数 b, e, h および w_α を求める。満足すべき式は少なくとも Eq.(3.14) に示す質量の式と Eq.(3.15) の運動量の式、さらにエネルギー等分配

の Eq.(3.16) である。ただし、 f_α として平衡分布関数 $f_\alpha^{(0)}$ を用いる。Eq.(3.14) の右辺に Eq.(3.18) を代入整理すると、

$$\begin{aligned} \sum_{\alpha=0}^8 f_\alpha^{(0)} &= \sum_{\alpha=0}^8 \rho w_\alpha \left\{ 1 + b \frac{\mathbf{c}_\alpha \cdot \mathbf{u}}{c^2} + e \frac{u^2}{c^2} + h \frac{(\mathbf{c}_\alpha \cdot \mathbf{u})^2}{c^4} \right\} \\ &= \rho \left\{ w_{sum} + w_{sum} \frac{u^2}{c^2} e + 3w_1 \frac{u^2}{c^2} h \right\} \end{aligned} \quad (3.34)$$

この式の導出に際しては、次の関係式などが用いられた。

$$\left. \begin{aligned} \sum_{\alpha=0}^8 w_\alpha (\mathbf{c}_\alpha \cdot \mathbf{u}) &= \sum_{\alpha=0}^8 w_\alpha (c_{\alpha x} u_x + c_{\alpha y} u_y) = 0 \\ \sum_{\alpha=0}^8 w_\alpha (\mathbf{c}_\alpha \cdot \mathbf{u})^2 &= \sum_{\alpha=0}^8 w_\alpha (c_{\alpha x}^2 u_x^2 + c_{\alpha y}^2 u_y^2 + 2u_x u_y c_{\alpha x} c_{\alpha y}) = 3w_1 c^2 u^2 \end{aligned} \right\} \quad (3.35)$$

Eq.(3.14) より、Eq.(3.34) の量が ρ に等しくなければならないので、次の関係式が得られる。

$$w_{sum} = 1, \quad w_{sum} e + 3w_1 h = 0 \quad (3.36)$$

ここに、 $w_{sum} = w_0 + 4w_1 + 4w_5 = w_0 + 5w_1$ である。

同様にして、次の式が得られる。

$$\sum_{\alpha=0}^8 c_{\alpha i} f_\alpha^{(0)} = \sum_{\alpha=0}^8 \rho w_\alpha c_{\alpha i} \left\{ 1 + b \frac{\mathbf{c}_\alpha \cdot \mathbf{u}}{c^2} + e \frac{u^2}{c^2} + h \frac{(\mathbf{c}_\alpha \cdot \mathbf{u})^2}{c^4} \right\} = 3\rho w_1 u_i b \quad (3.37)$$

ここでは、次の関係式が用いられている。

$$\left. \begin{aligned} \sum_{\alpha=0}^8 w_\alpha c_{\alpha x} (\mathbf{c}_\alpha \cdot \mathbf{u}) &= \sum_{\alpha=0}^8 w_\alpha (c_{\alpha x}^2 u_x + c_{\alpha x} c_{\alpha y} u_y) = 3w_1 c^2 u_x \\ \sum_{\alpha=0}^8 w_\alpha c_{\alpha x} (\mathbf{c}_\alpha \cdot \mathbf{u})^2 &= \sum_{\alpha=0}^8 w_\alpha (c_{\alpha x}^3 u_x^2 + 2c_{\alpha x}^2 c_{\alpha y} u_x u_y + c_{\alpha x} c_{\alpha y}^2 u_y^2) = 0 \end{aligned} \right\} \quad (3.38)$$

運動量の式である Eq.(3.15) を満足しなければならないので、 b が次のように表せる。

$$b = \frac{1}{3w_1} \quad (3.39)$$

さらに、運動量流束 $\Pi_{ij}^{(0)}$ を評価すると、

$$\begin{aligned} \Pi_{ij}^{(0)} &= \sum_{\alpha=0}^8 c_{\alpha i} c_{\alpha j} f_\alpha^{(0)} = \sum_{\alpha=0}^8 \rho w_\alpha c_{\alpha i} c_{\alpha j} \left\{ 1 + b \frac{\mathbf{c}_\alpha \cdot \mathbf{u}}{c^2} + e \frac{u^2}{c^2} + h \frac{(\mathbf{c}_\alpha \cdot \mathbf{u})^2}{c^4} \right\} \\ &= \rho w_1 \left\{ 3c^2 \left(1 + \frac{u^2}{c^2} e \right) \delta_{ij} + u^2 h \delta_{ij} \right\} + 2\rho w_1 u_i u_j h \end{aligned} \quad (3.40)$$

ただし、この式の導出に際して、次の関係式が用いられている。

$$\left. \begin{aligned} \sum_{\alpha=0}^8 w_{\alpha} c_{\alpha x} c_{\alpha y} (\mathbf{c}_{\alpha} \cdot \mathbf{u}) &= \sum_{\alpha=0}^8 w_{\alpha} c_{\alpha x}^2 (\mathbf{c}_{\alpha} \cdot \mathbf{u}) = \sum_{\alpha=0}^8 w_{\alpha} c_{\alpha y}^2 (\mathbf{c}_{\alpha} \cdot \mathbf{u}) = 0 \\ \sum_{\alpha=0}^8 w_{\alpha} c_{\alpha x} c_{\alpha y} (\mathbf{c}_{\alpha} \cdot \mathbf{u})^2 &= 2w_1 c^4 u_x u_y \\ \sum_{\alpha=0}^8 w_{\alpha} c_{\alpha x}^2 (\mathbf{c}_{\alpha} \cdot \mathbf{u})^2 &= 2w_1 c^4 u_x^2 + w_1 c^4 u^2 \end{aligned} \right\} \quad (3.41)$$

平衡状態の場合、 $\Pi_{ij}^{(0)}$ は圧力を p とすると、次式で表せる。

$$\Pi_{ij}^{(0)} = p\delta_{ij} + \rho u_i u_j \quad (3.42)$$

ゆえに、Eq.(3.40) と Eq.(3.42) を比較することで、次式が得られる。

$$f = \frac{1}{2w_1}, \quad p = 3\rho w_1 c^2 \quad (3.43)$$

$$3e + h = 0 \quad (3.44)$$

圧力は、音速 c_s と $p = \rho c_s^2$ で関係付けられるので、

$$c_s = \sqrt{3w_1 c} \quad (3.45)$$

最後に運動エネルギーを評価する。まず、必要となる式を Eq.(3.33) を用いて導出すると、次のようになる。

$$\left. \begin{aligned} \sum_{\alpha=0}^8 w_{\alpha} c_{\alpha}^2 &= 6w_1 c^2 \\ \sum_{\alpha=0}^8 w_{\alpha} c_{\alpha x}^2 (\mathbf{c}_{\alpha} \cdot \mathbf{u}) &= \sum_{\alpha=0}^8 w_{\alpha} c_{\alpha y}^2 (\mathbf{c}_{\alpha} \cdot \mathbf{u}) = \sum_{\alpha=0}^8 w_{\alpha} c_{\alpha}^2 (\mathbf{c}_{\alpha} \cdot \mathbf{u}) \\ \sum_{\alpha=0}^8 w_{\alpha} c_{\alpha}^2 (\mathbf{c}_{\alpha} \cdot \mathbf{u})^2 &= 4w_1 c^4 u^2, \quad \sum_{\alpha=0}^8 w_{\alpha} (\mathbf{c}_{\alpha} \cdot \mathbf{u})^3 = 0 \end{aligned} \right\} \quad (3.46)$$

以上の関係を用いると、Eq.(3.16) の右辺が次のように計算できる。

$$\begin{aligned} \sum_{\alpha=0}^8 \frac{m}{2} (\mathbf{c}_{\alpha} - \mathbf{u})^2 \frac{f_{\alpha}^{(0)}}{\rho} &= \frac{m}{2} \sum_{\alpha=0}^8 w_{\alpha} (c_{\alpha}^2 + u^2 - 2\mathbf{c}_{\alpha} \cdot \mathbf{u}) \\ &\times \left\{ 1 + b \frac{\mathbf{c}_{\alpha} \cdot \mathbf{u}}{c^2} + e \frac{u^2}{c^2} + h \frac{(\mathbf{c}_{\alpha} \cdot \mathbf{u})^2}{c^4} \right\} \\ &= \frac{m}{2} \left\{ 6w_1 \left(1 + e \frac{u^2}{c^2} \right) c^2 + 4w_1 h u^2 + w_{sum} \left(1 + e \frac{u^2}{c^2} u^2 \right) + 3w_1 h \frac{u^4}{c^2} - 6w_1 b u^2 \right\} \end{aligned} \quad (3.47)$$

ここで、Eq.(3.36)、Eq.(3.39)、Eq.(3.43) の関係を考慮すれば、上式は次のように簡単になる。

$$\sum_{\alpha=0}^8 \frac{m}{2} (\mathbf{c}_\alpha - \mathbf{u})^2 \frac{f_\alpha^{(0)}}{\rho} = \frac{m}{2} (6w_1c^2 + 6w_1u^2e + w_{sum}u^2) \quad (3.48)$$

ゆえに、Eq.(3.16) は次の式に帰着する。

$$\frac{2}{2}kT = \frac{m}{2} (6w_1c^2 + 6w_1u^2e + w_{sum}u^2) \quad (3.49)$$

温度は巨視的な速度 u に依存しないので、この式より、最終的に次の関係式が得られる。

$$6w_1e + w_{sum} = 0 \quad (3.50)$$

$$3mw_1c^2 = kT \quad (3.51)$$

以上で、未知数と同数の方程式が得られたので、解は簡単に得られる。最終結果は次の通りである。

$$b = 3, \quad e = -\frac{3}{2}, \quad h = \frac{9}{2} \quad (3.52)$$

$$w_{sum} = 1, \quad w_0 = \frac{4}{9}, \quad w_1 = \frac{1}{9}, \quad w_5 = \frac{1}{36} \quad (3.53)$$

まとめると、D2Q9 モデルの場合の平衡分布関数は次のように書くことができる。

$$f_\alpha^{(0)} = \rho w_\alpha \left\{ 1 + 3 \frac{\mathbf{c}_\alpha \cdot \mathbf{u}}{c^2} - \frac{3}{2} \frac{u^2}{c^2} + \frac{9}{2} \frac{(\mathbf{c}_\alpha \cdot \mathbf{u})^2}{c^4} \right\} \quad (3.54)$$

$$w_\alpha = \begin{cases} 4/9 & \text{for } \alpha = 0 \\ 1/9 & \text{for } \alpha = 1, 2, 3, 4 \\ 1/36 & \text{for } \alpha = 5, 6, 7, 8 \end{cases}, \quad |\mathbf{c}_\alpha| = \begin{cases} 0 & \text{for } \alpha = 0 \\ c & \text{for } \alpha = 1, 2, 3, 4 \\ \sqrt{2}c & \text{for } \alpha = 5, 6, 7, 8 \end{cases} \quad (3.55)$$

音速 c_s は次の通りである。

$$c_s = c / \sqrt{3} \quad (3.56)$$

3.3.2 Navier-Stokes 方程式

本節では、付録 A で導出した基礎式から出発して、流れ問題の巨視的な支配方程式である Navier-Stokes 方程式を導出する。D2Q9 モデルの場合は、 $\alpha = 0, 1, \dots, 8$ 、座標に対する添え字は $i = x, y$ の値を取る。

導出の基礎となる式は、Eq.(A.27) である。改めて書き直すと、

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho u_i) + \sum_j \frac{\partial}{\partial r_j} \Pi_{ij} + \sum_j \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial}{\partial r_j} \left\{ \varepsilon \frac{\partial}{\partial t_1} \Pi_{ij}^{(0)} + \sum_k \frac{\partial}{\partial r_k} S_{ijk}^{(0)} \right\} = 0 \quad (3.57)$$

もう1つ導出の基礎となる式は、Eq.(A.31)である。

$$-\frac{1}{\tau\Delta t}f_\alpha^{(1)} = -\frac{\partial f_\alpha^{(0)}}{\partial\rho}\frac{\partial}{\partial r_1}\cdot(\rho\mathbf{u}) - \sum_i\sum_j\frac{\partial f_\alpha^{(0)}}{\partial(\rho u_i)}\frac{\partial}{\partial r_{1j}}\Pi_{ij}^{(0)} + \sum_i\frac{\partial}{\partial r_{1i}}(c_{ai}f_\alpha^{(0)}) \quad (3.58)$$

ここに、

$$f_\alpha = f_\alpha^{(0)} + \varepsilon f_\alpha^{(1)} + \varepsilon^2 f_\alpha^{(2)} + \dots \quad (3.59)$$

$$\Pi_{ij}^{(0)} = \sum_\alpha c_{ai}c_{aj}f_\alpha^{(0)} = p\delta_{ij} + \rho u_i u_j = \frac{\rho}{3}c^2\delta_{ij} + \rho u_i u_j \quad (3.60)$$

$$S_{ijk}^{(0)} = \sum_\alpha c_{ai}c_{aj}c_{ak}f_\alpha^{(0)} \quad (3.61)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} = \varepsilon\frac{\partial}{\partial t_1} + \varepsilon^2\frac{\partial}{\partial t_2}, \quad \frac{\partial}{\partial r_1} = \varepsilon\frac{\partial}{\partial r_{1i}} \quad (3.62)$$

さて、Eq.(3.58)を用いて、 $f_\alpha^{(1)}$ の解を求める。オーダー $(u/c)^2$ 以上の項を無視すると、

$$f_\alpha^{(0)} = \rho w_\alpha \left\{ 1 + 3\frac{\mathbf{c}_\alpha \cdot \mathbf{u}}{c^2} \right\} \quad (3.63)$$

$$\Pi_{ij}^{(0)} = \frac{\rho}{3}c^2\delta_{ij} + \rho u_i u_j \quad (3.64)$$

$$\frac{\partial f_\alpha^{(0)}}{\partial\rho} = w_\alpha \quad (3.65)$$

$$\frac{\partial f_\alpha^{(0)}}{\partial(\rho u_j)} = w_\alpha \frac{\partial}{\partial(\rho u_i)} \left\{ \frac{3}{c^2} \sum_j c_{aj}(\rho u_j) \right\} = w_\alpha \frac{3}{c^2} c_{ai} \quad (3.66)$$

$$\frac{\partial}{\partial r_{1j}} \Pi_{ij}^{(0)} = \frac{c^2}{3} \frac{\partial\rho}{\partial r_{1j}} \delta_{ij} + \frac{\partial}{\partial r_{1j}}(\rho u_i u_j) \quad (3.67)$$

$$\frac{\partial}{\partial r_{1i}}(c_{ai}f_\alpha^{(0)}) = w_\alpha \frac{\partial}{\partial r_{1i}}(\rho c_{ai}) + 3w_\alpha \frac{1}{c^2} \frac{\partial}{\partial r_{1i}} \left\{ \sum_j \rho c_{ai} c_{aj} u_j \right\} \quad (3.68)$$

これらの関係式を基礎式であるEq.(3.58)に整理代入すると、最終的に $f_\alpha^{(1)}$ が次のように得られる。

$$f_\alpha^{(1)} = -3w_\alpha \Delta t \tau \frac{1}{c^2} \sum_k \sum_l \left(c_{ak} c_{al} - \frac{1}{3} c^2 \delta_{kl} \right) \frac{\partial}{\partial r_{1l}}(\rho u_k) \quad (3.69)$$

$f_\alpha^{(1)}$ が求まったので、次の量が評価できることになる。

$$\begin{aligned}
\varepsilon \Pi_{ij}^{(1)} &= \varepsilon \sum_{\alpha} c_{\alpha i} c_{\alpha j} f_{\alpha}^{(1)} \\
&= -3\Delta t \tau \frac{1}{c^2} \sum_k \sum_l \left(\sum_{\alpha} w_{\alpha} c_{\alpha i} c_{\alpha j} c_{\alpha k} c_{\alpha l} \right) \frac{\partial}{\partial r_l} (\rho u_k) \\
&\quad + \Delta t \tau \left(\sum_{\alpha} w_{\alpha} c_{\alpha i} c_{\alpha j} \right) \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \cdot (\rho \mathbf{u}) \\
&= -\frac{\Delta t \tau c^2}{3} \left\{ \frac{\partial}{\partial r_j} (\rho u_i) + \frac{\partial}{\partial r_i} (\rho u_j) \right\}
\end{aligned} \tag{3.70}$$

この式の導出に際して、Eq.(3.32)、Eq.(3.33) の関係式が用いられた。したがって、

$$\sum_j \frac{\partial}{\partial r_j} (\varepsilon \Pi_{ij}^{(1)}) = -\frac{\Delta t \tau c^2}{3} \left\{ \frac{\partial^2}{\partial r^2} (\rho u_i) + \frac{\partial}{\partial r_i} \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \cdot (\rho \mathbf{u}) \right) \right\} \tag{3.71}$$

一方、 $\Pi_{ij}^{(0)}$ に関しては、

$$\sum_j \frac{\partial}{\partial r_j} (\Pi_{ij}^{(0)}) = \sum_j \frac{\partial}{\partial r_j} (p \delta_{ij} + \rho u_i u_j) \tag{3.72}$$

$\Pi_{ij} \approx \Pi_{ij}^{(0)} + \varepsilon \Pi_{ij}^{(1)}$ とすれば、Eq.(3.71) と Eq.(3.72) を用いると、

$$\sum_j \frac{\partial}{\partial r_j} \Pi_{ij} = \sum_j \frac{\partial}{\partial r_j} (p \delta_{ij} + \rho u_i u_j) - \frac{\Delta t \tau c^2}{3} \left\{ \frac{\partial^2}{\partial r^2} (\rho u_i) + \frac{\partial}{\partial r_i} \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \cdot (\rho \mathbf{u}) \right) \right\} \tag{3.73}$$

さらに、Eq.(A.17) と Eq.(A.11) を考慮すれば、

$$\frac{\Delta t}{2} \varepsilon \frac{\partial}{\partial t_1} \Pi_{ij}^{(0)} = \frac{1}{6} \Delta t c^2 \delta_{ij} \varepsilon \frac{\partial \rho}{\partial t_1} = -\frac{1}{6} \Delta t c^2 \delta_{ij} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \cdot (\rho \mathbf{u}) \tag{3.74}$$

この式より、

$$\frac{\Delta t}{2} \varepsilon \sum_j \frac{\partial}{\partial r_j} \left(\frac{\partial}{\partial t_1} \Pi_{ij}^{(0)} \right) = -\frac{1}{6} \Delta t c^2 \frac{\partial}{\partial r_i} \left\{ \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \cdot (\rho \mathbf{u}) \right\} \tag{3.75}$$

次に $S_{ijk}^{(0)}$ に関する量を求める。まず、

$$S_{ijk}^{(0)} = \sum_{\alpha} c_{\alpha i} c_{\alpha j} c_{\alpha k} f_{\alpha}^{(0)} = \sum_{\alpha} w_{\alpha} c_{\alpha i} c_{\alpha j} c_{\alpha k} \rho \left(1 + 3 \frac{\mathbf{c}_{\alpha} \cdot \mathbf{u}}{c^2} \right) \tag{3.76}$$

この式を用いて、Eq.(3.57) に現れている偏微分を求めると、

$$\begin{aligned}
\sum_j \sum_k \frac{\partial}{\partial r_j} \frac{\partial}{\partial r_k} (S_{ijk}^{(0)}) &= \frac{1}{3} c^2 \sum_j \sum_k \frac{\partial}{\partial r_j} \frac{\partial}{\partial r_k} (\rho u_k \delta_{ij} + \rho u_j \delta_{ik} + \rho u_i \delta_{jk}) \\
&= \frac{2}{3} c^2 \left\{ \frac{\partial}{\partial r_i} \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \cdot (\rho \mathbf{u}) \right) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial r^2} (\rho u_i) \right\}
\end{aligned} \tag{3.77}$$

以上で、Navier-Stokes 方程式の導出の準備ができた。Eq.(3.57) の左辺の第1項と第2項の和を A 、第3項と第4項の和を B とすれば、次のようになる。

$$\begin{aligned} A &= \frac{\partial}{\partial t} (\rho u_i) + \sum_j \frac{\partial}{\partial r_j} (p \delta_{ij} + \rho u_i u_j) - \frac{\Delta t \tau c^2}{3} \left\{ \frac{\partial^2}{\partial r^2} (\rho u_i) + \frac{\partial}{\partial r_i} \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \cdot (\rho \mathbf{u}) \right) \right\} \\ &= \frac{\partial}{\partial t} (\rho u_i) + \sum_j \frac{\partial}{\partial r_j} (\rho u_i u_j) + \frac{\partial p}{\partial r_i} - \frac{\Delta t \tau c^2}{3} \left\{ \frac{\partial^2}{\partial r^2} (\rho u_i) + \frac{\partial}{\partial r_i} \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \cdot (\rho \mathbf{u}) \right) \right\} \end{aligned} \quad (3.78)$$

$$\begin{aligned} B &= \frac{\Delta t}{2} \varepsilon \sum_j \frac{\partial}{\partial r_j} \left(\frac{\partial}{\partial t_1} \Pi_{ij}^{(0)} \right) + \frac{\Delta t}{2} \sum_j \sum_k \frac{\partial}{\partial r_j} \left(\frac{\partial}{\partial r_k} S_{ijk}^{(0)} \right) \\ &= \frac{1}{6} \Delta t c^2 \left\{ \frac{\partial^2}{\partial r^2} (\rho u_i) + \frac{\partial}{\partial r_i} \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \cdot (\rho \mathbf{u}) \right) \right\} \end{aligned} \quad (3.79)$$

Eq.(3.78) と Eq.(3.79) を Eq.(3.57) に代入整理すると、非圧縮性流体の場合 $\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0$ なので、求める Navier-Stokes 方程式が次のように得られる。

$$\rho \left\{ \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} \right\} = -\nabla p + \mu \nabla^2 \mathbf{u} \quad (3.80)$$

ここに、 μ は粘性係数であり、動粘性係数を ν で表すと、次のように書ける。

$$\mu = \frac{\rho \Delta t c^2}{3} \left(\tau - \frac{1}{2} \right), \quad \nu = \frac{\mu}{\rho} = \frac{\Delta t c^2}{3} \left(\tau - \frac{1}{2} \right) \quad (3.81)$$

3.3.3 体積力

ここでは、格子ボルツマン方程式における体積力の取り扱いについて述べる。

$$\left. \begin{aligned} f_\alpha(\mathbf{r} + \mathbf{c}_\alpha \Delta t, t + \Delta t) &= \tilde{f}_\alpha(\mathbf{r}, t) \\ \tilde{f}_\alpha(\mathbf{r}, t) &= f_\alpha(\mathbf{r}, t) + \Omega_\alpha + g_\alpha \end{aligned} \right\} \quad (3.82)$$

ここに、

$$\Omega_\alpha(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\tau} \left\{ f_\alpha^{(0)}(\mathbf{r}, t) - f_\alpha(\mathbf{r}, t) \right\} \quad (3.83)$$

$$g_\alpha = \begin{cases} 0 & \text{for } \alpha = 0 \\ \frac{3\Delta t}{c^2} w_\alpha \mathbf{c}_\alpha \cdot \mathbf{F} & \text{for } \alpha \neq 0 \end{cases} \quad (3.84)$$

$$\left. \begin{aligned} \sum_\alpha g_\alpha &= 0 \\ \sum_\alpha \mathbf{c}_\alpha g_\alpha &= \sum_\alpha \frac{3\Delta t}{c^2} w_\alpha (\mathbf{c}_\alpha \mathbf{c}_\alpha) \cdot \mathbf{F} = \Delta t \mathbf{F} \end{aligned} \right\} \quad (3.85)$$

この変形に際して、次の関係式を用いた。

$$\sum_{\alpha} w_{\alpha} c_{\alpha} c_{\alpha} = (c^2/3) \mathbf{I} \quad (3.86)$$

ここで、 \mathbf{I} : 単位テンソルである。 g_{α} の式が Eq.(3.84) で表せることは、体積力 F が作用する方向に粒子分布が移行するので、 $g_{\alpha} \propto c_{\alpha} \cdot F$ となることから、容易に予想できる。

さて、Eq.(3.82) から出発し、3.3.2 で行なったように、Navier-Stokes 方程式を導出することにより、妥当な形で Navier-Stokes 方程式に現れるかを検討する。3.3.2 で行なった導出過程において、 g_{α} による新たな項が付加される以外、新しい概念は無いので、ポイントとなる式を示していくことにする。

付録 A より、オーダー ε とオーダー ε^2 の関係式は次のようになる。

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t_1} &= \nabla_1 \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \\ \frac{\partial}{\partial t_1} (\rho u_i) + \sum_j \frac{\partial}{\partial r_{1j}} \Pi_{ij}^{(0)} &= \frac{1}{\varepsilon} F_i \\ \frac{\partial \rho}{\partial t_2} + \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial^2 \rho}{\partial t_1^2} + \frac{\Delta t}{2} \sum_i \sum_j \frac{\partial}{\partial r_{1i}} \frac{\partial}{\partial r_{1j}} \Pi_{ij}^{(0)} + \Delta t \sum_i \frac{\partial}{\partial t_1} \frac{\partial}{\partial r_{1i}} (\rho u_i) &= 0 \end{aligned} \right\} \quad (3.87)$$

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t_2} (\rho u_i) + \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial^2}{\partial t_1^2} (\rho u_i) + \sum_j \frac{\partial}{\partial r_{1j}} \Pi_{ij}^{(1)} + \frac{\Delta t}{2} \sum_i \sum_j \frac{\partial}{\partial r_{1j}} \frac{\partial}{\partial r_{1k}} S_{ijk}^{(0)} \\ + \Delta t \sum_j \frac{\partial}{\partial t_1} \frac{\partial}{\partial r_{1j}} \Pi_{ij}^{(0)} &= 0 \end{aligned} \right\} \quad (3.88)$$

これらの式から得られる基礎式は次の通りである。

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (3.89)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho u_i) + \sum_j \frac{\partial}{\partial r_j} \Pi_{ij} + \sum_j \frac{\Delta t}{2} \frac{\Delta t}{\partial r_j} \left\{ \varepsilon \frac{\partial}{\partial t_1} \Pi_{ij}^{(0)} + \sum_k \frac{\partial}{\partial r_k} S_{ijk}^{(0)} \right\} = F_i \quad (3.90)$$

また、 $f_{\alpha}^{(1)}$ は次のようになる。

$$\begin{aligned} f_{\alpha}^{(1)} &= -\tau \Delta t \left\{ \frac{\partial f_{\alpha}^{(0)}}{\partial t_1} + \sum_i \frac{\partial}{\partial r_{1i}} (c_{\alpha i} f_{\alpha}^{(0)}) \right\} + \frac{\tau}{\varepsilon} g_{\alpha} \\ &= -3w_{\alpha} \Delta t \tau \frac{1}{c^2} \sum_k \sum_l \left(c_{\alpha k} c_{\alpha l} - \frac{1}{3} c^2 \delta_{kl} \right) \frac{\partial}{\partial r_{1l}} (\rho u_k) \end{aligned} \quad (3.91)$$

結局、これらを用いると、前節とほぼ同じのプロセスにより、体積力を含んだ次のような Navier-Stokes 方程式が得られる。

$$\rho \left\{ \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} \right\} = -\nabla p + \mu \nabla^2 \mathbf{u} + \mathbf{F} \quad (3.92)$$

ここに、 μ は Eq.(3.81) に示した通りである。以上より、流体に体積力 F が作用した場合、格子ボルツマン方程式には Eq.(3.84) で表された g_{α} が新たに含まれるようになることが証明できた。

3.4 境界条件

格子ボルツマン法を用いてシミュレーションを行なう場合、シミュレーション領域の境界における密度分布関数の処理、すなわち境界条件の取り扱いが非常に重要である。したがって、現在でも、より精度の高い有用な境界条件の提案を主とする論文が多く発表され続けている (Stordos, 1993; Inamuro *et al.*, 1995; Maier *et al.*, 1996; Chen *et al.*, 1996; 日置と梶島, 2002; 佐藤, 2009)。

格子ボルツマン法では、境界条件として、流速あるいは圧力を直接取り扱うことはできない。これは、本手法が仮想的な流体粒子の密度分布関数の時間発展を解いているためである。ここでは、滑りなし境界条件 (No-slip boundary conditions)、圧力境界条件 (Pressure boundary conditions)、速度境界条件 (Velocity boundary conditions) について説明する。滑りなし境界条件は、格子気体法で用いられていた手法であり、格子ボルツマン法における最も基本的な境界条件である。また、ここで述べる圧力境界条件および速度境界条件は、Zou and He (1997) によって提案されたものである。その他の境界条件としては、周期境界条件 (Periodic boundary conditions)、滑り境界条件 (Stress-free/Slip boundary condition) などが挙げられる (Aidun *et al.*, 1998; Ginzburg and d'Humières, 2003)。

上述した3つの境界条件を Fig.3.3 に示した計算領域を例として、以下に説明する。計算領域の上下端は固体壁が存在し、左端が流入部、右端が流出部である。固体壁領域の格子点を固体格子点 (Solid node)、流体領域の格子点を流体格子点 (Fluid node) と呼ぶ。さらに、隣り合う固体格子点と流体格子点間を境界リンク (Boundary link) とする。

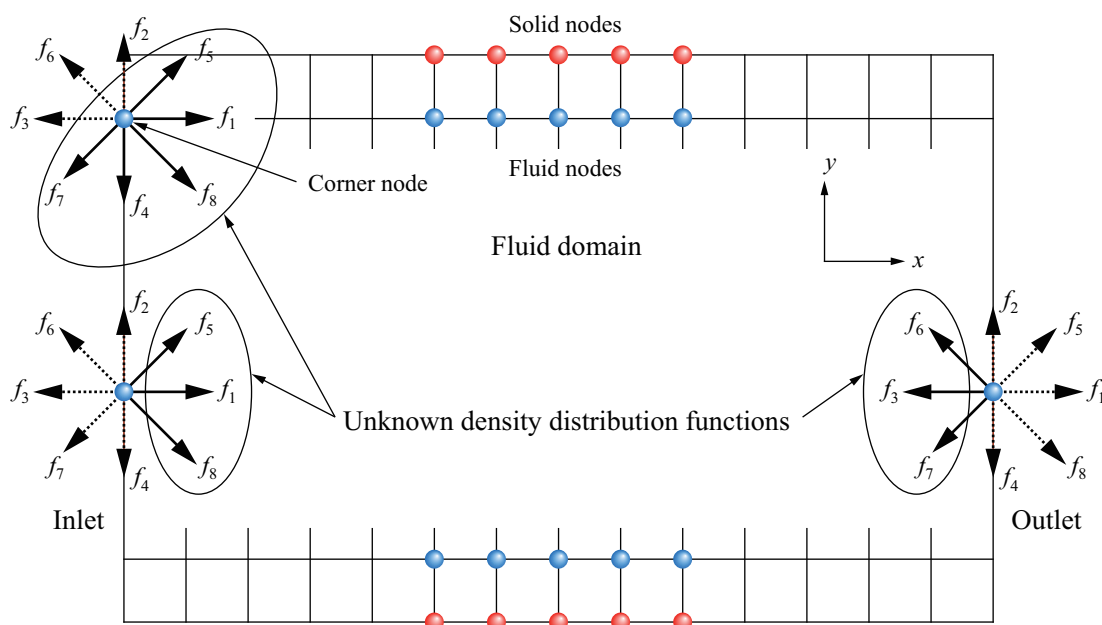


Fig. 3.3: Boundary conditions

3.4.1 滑りなし境界条件

滑りなし境界条件は、流体と静止している固体壁あるいは固体粒子の境界（固液界面）を比較的容易に表わすことができ、一般的にバウンス・バック（Bounce-back rule）法とも呼ばれている (Ladd, 1994a,b)。この境界条件は、境界リンクにて以下の操作を密度分布関数に行なう (Fig.3.4)。

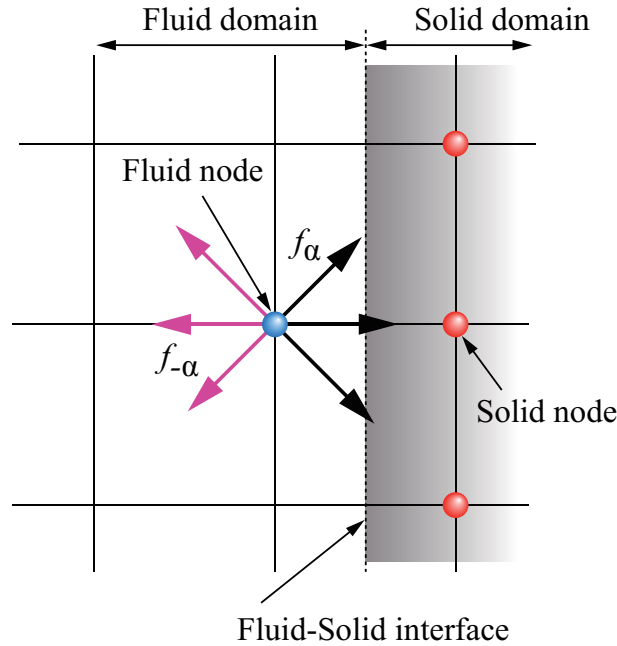


Fig. 3.4: Bounce-back rule

$$f_{-\alpha}(\mathbf{r}, t + \Delta t) = f_{\alpha}(\mathbf{r}, t) - \frac{1}{\tau} \{f_{\alpha}(\mathbf{r}, t) - f_{\alpha}^{eq}(\mathbf{r}, t)\} \quad (3.93)$$

ここで、 $-\alpha : \alpha$ の逆向きの方向を意味する。
 この操作により、固液界面に対する接線方向の流速がゼロ、つまり滑りなし条件が達成されることになる。なお、この場合の固液界面は固体格子点と流体格子点の中間点となることに留意する必要がある。

3.4.2 圧力境界条件

圧力境界条件は、Fig.3.3 に示した計算領域の流入部（左端）と流出部（右端）において、任意の密度差（密度勾配）を設定することにより、領域内に流体運動を生じさせるものである。この境界条件は、流入部あるいは流出部では $u_y = 0$ 、隅角部では $u_x = u_y = 0$ という仮定の下で、格子点上の全方向の密度分布関数を求める。

並進過程後の流入部では、密度分布関数 f_{α} ($\alpha = 2, 3, 4, 6, 7$) は既知である (Fig.3.3)。ここで、流入部の密度および流速をそれぞれ、 ρ_{in} および u_x とすると、未知の密度分布関数

f_α ($\alpha = 1, 5, 8$) は、次のように表わすことができる (Zou and He, 1997; Feng *et al.*, 2007)。

$$\left. \begin{aligned} u_x &= 1 - \frac{f_0 + f_2 + f_4 + 2(f_3 + f_6 + f_7)}{\rho_{in}} \\ f_1 &= f_3 + \frac{2}{3}\rho_{in}u_x \\ f_5 &= f_7 - \frac{1}{2}(f_2 - f_4) + \frac{1}{6}\rho_{in}u_x \\ f_8 &= f_6 + \frac{1}{2}(f_2 - f_4) + \frac{1}{6}\rho_{in}u_x \end{aligned} \right\} \quad (3.94)$$

同様に、流出部の密度および流速をそれぞれ、 ρ_{out} および u_x とすると、未知の密度分布関数 f_α ($\alpha = 3, 6, 7$) は、次のように表わすことができる。

$$\left. \begin{aligned} u_x &= -1 + \frac{f_0 + f_2 + f_4 + 2(f_1 + f_5 + f_8)}{\rho_{out}} \\ f_3 &= f_1 - \frac{2}{3}\rho_{out}u_x \\ f_6 &= f_8 - \frac{1}{2}(f_2 - f_4) - \frac{1}{6}\rho_{out}u_x \\ f_7 &= f_5 + \frac{1}{2}(f_2 - f_4) - \frac{1}{6}\rho_{out}u_x \end{aligned} \right\} \quad (3.95)$$

さらに、流体領域の隅角部における未知の密度分布関数を求める必要がある。例えば、左上の隅角部における格子点 (Corner node) 上では、密度分布関数 f_α ($\alpha = 1, 4, 5, 7, 8$) が未知となり (Fig.3.3) 次のように表わされる。

$$\left. \begin{aligned} f_1 &= f_3, \quad f_4 = f_2, \quad f_8 = f_6 \\ f_5 &= f_7 = \frac{1}{2}\{\rho - f_0 - 2(f_1 + f_2 + f_6)\} \end{aligned} \right\} \quad (3.96)$$

3.4.3 速度境界条件

速度境界条件は、任意の流速 u_x 、 u_y を特定の境界に与える条件である。並進過程後の流入部では、圧力境界条件の場合と同様、密度分布関数 f_α ($\alpha = 2, 3, 4, 6, 7$) は既知である。流入部の流速および密度をそれぞれ、 u_x および ρ_{in} とすると、未知の密度分布関数 f_α ($\alpha = 1, 5, 8$) は、次のように表わすことができる。

$$\left. \begin{aligned} \rho_{in} &= \frac{1}{1 - u_x} \{f_0 + f_2 + f_4 + 2(f_3 + f_6 + f_7)\} \\ f_1 &= f_3 + \frac{2}{3}\rho_{in}u_x \\ f_5 &= f_7 - \frac{1}{2}(f_2 - f_4) + \frac{1}{6}\rho_{in}u_x + \frac{1}{2}\rho_{in}u_y \\ f_8 &= f_6 + \frac{1}{2}(f_2 - f_4) + \frac{1}{6}\rho_{in}u_x - \frac{1}{2}\rho_{in}u_y \end{aligned} \right\} \quad (3.97)$$

同様に、流出部の流速および密度をそれぞれ、 u_x および ρ_{out} とすると、未知の密度分布関数 f_α ($\alpha = 3, 6, 7$) は、次のように表わすことができる。

$$\left. \begin{aligned} \rho_{out} &= \frac{1}{1+u_x} \{f_0 + f_2 + f_4 + 2(f_1 + f_5 + f_8)\} \\ f_3 &= f_1 - \frac{2}{3}\rho_{out}u_x \\ f_6 &= f_8 - \frac{1}{2}(f_2 - f_4) - \frac{1}{6}\rho_{out}u_x + \frac{1}{2}\rho_{out}u_y \\ f_7 &= f_5 + \frac{1}{2}(f_2 - f_4) - \frac{1}{6}\rho_{out}u_x - \frac{1}{2}\rho_{out}u_y \end{aligned} \right\} \quad (3.98)$$

なお、速度境界条件を適用する場合の隅角部の取り扱いは、圧力境界条件と同様である。

第4章 個別要素法の理論

本章では、本研究における固体粒子運動の計算手法として用いた個別要素法 (Discrete/Distinct element method; DEM)¹の理論を中心に述べる。はじめに、粒子間衝突のモデリングを概説する。次に個別要素法の計算手法について述べ、基礎式と粒子間相互作用力の求め方について示す。最後に、個別要素法の代表的なモデル定数の種類とその選択について言及する。

4.1 個別要素法の位置付け

固液二相問題では、個々の粒子をラグランジェ的に記述する視点は極めて自然なもので理解しやすい(小林, 2003)。また一般に、個々の粒子の慣性運動が支配的な条件では固相を連続体とするオイラー的取り扱いはできないため、ラグランジェ的に取り扱われる(田中ほか, 1990)。さらに、ラグランジェ的に記述する手法を選択すれば、壁面との反発、粒子間の相互作用などの影響因子を粒子の物性に基づいて考慮することができる。

4.1.1 粒子間衝突

ラグランジェ的に粒子運動を記述するモデルには、衝突モデルを用いるものと接触力モデルを用いるものがあり、それぞれ剛体粒子モデル (Hard particle/sphere model) および軟体粒子モデル (Soft particle/sphere model) と呼ばれる (Fig.4.1) (小林, 2003)。いずれのモデルにおいても、非接触・非衝突時の粒子の運動は、運動方程式に基づく粒子追跡により評価されるが、粒子間接触あるいは粒子間衝突の扱いが、両者で大きく異なる(後藤, 2004)。

剛体粒子モデルは、粒子間衝突に古典力学の剛体衝突問題を適用するモデルであり、個々の粒子は剛体であって、衝突時間は無限に短いという前提に立っている。このモデルでは、並進運動が卓越した(回転運動が無視できる)状態を想定すると、衝突前後の粒子の相対速度の変化は反発係数に依存する。

一方、軟体粒子モデルは、粒子間のオーバーラップを一定の範囲で許容する近似モデルである。接触中の粒子間には、オーバーラップの大きさに応じて反発力と摩擦力が作用する。個別要素法は、この軟体粒子モデルを用いるアプローチである。

¹多くの文献では、Discrete element methodの略としてDEMを用いているが、これはDistinct element methodも含む、もっと広い枠組を指す言葉と認識されている(松島, 2010)。Cundallが創業者の一人であるItasca社の商用DEMコードのマニュアルによれば、Discrete element methodは「離散的な物体群の接触と分離を自動解析し、物体群の有限並進および回転変位を計算できる手法」、Distinct element methodは「(バネ-ダッシュポット-スライダモデルによって)接触点の変形を表現し、粒子運動を陽的な時間積分によって解き進める手法」としている。

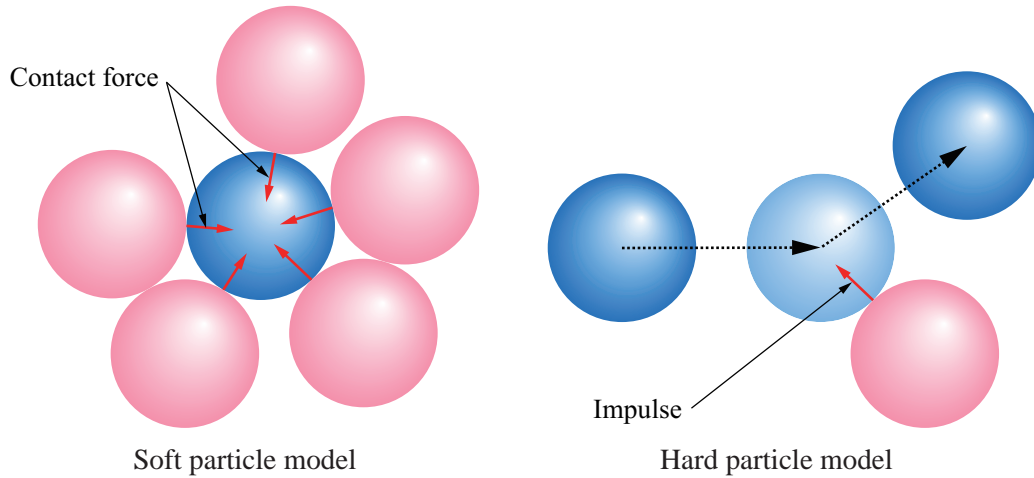


Fig. 4.1: Discrete particle models

このようなモデルのコンセプトの相違により、剛体粒子モデルと軟体粒子モデルでは、対象となる現象が異なる。剛体粒子モデルが衝突モデルであるのに対して、軟体粒子モデルは衝突（短時間のほぼ瞬時的接触）と（持続的な）接触を表わすモデルである。剛体粒子モデルでは、剛体衝突の力学過程を直接的に扱うので、3体以上の多体同時衝突を扱うことができない（後藤, 2004）。

4.1.2 剛体粒子モデル

このモデルでは、二体衝突に比べて三体以上の同時衝突の生じる確率は十分小さいものとして、すべて Fig.4.2 に示すような二体衝突として取り扱われる（田中ほか, 1990; Duran, 2002）。

粒子を剛体球と仮定すると衝撃運動方程式は次のようになる。

$$\mathbf{v}_{pi}^* = \mathbf{v}_{pi} + \frac{\mathbf{J}}{m_i} \quad (4.1)$$

$$\mathbf{v}_{pj}^* = \mathbf{v}_{pj} + \frac{\mathbf{J}}{m_j} \quad (4.2)$$

$$\boldsymbol{\omega}_i^* = \boldsymbol{\omega}_i + \frac{r_{pi}}{I_{pi}} \mathbf{n} \times \mathbf{J} \quad (4.3)$$

$$\boldsymbol{\omega}_j^* = \boldsymbol{\omega}_j + \frac{r_{pj}}{I_{pj}} \mathbf{n} \times \mathbf{J} \quad (4.4)$$

ここで、 \mathbf{v}_p ：並進速度（添字 i, j は粒子 i, j を表わす）、 $\boldsymbol{\omega}$ ：回転速度、 m ：粒子の質量、 I_p ：粒子の重心まわりの慣性モーメント、 r_p ：粒子の半径、 \mathbf{n} ：粒子 i, j の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} ：粒子 i に作用する衝撃力である。なお、衝突後の状態には * を添えることにする。

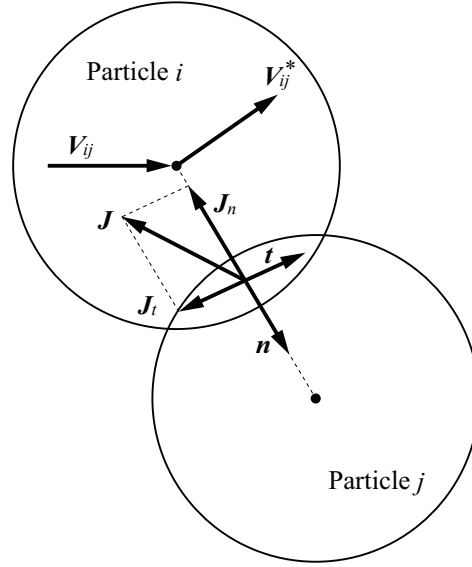


Fig. 4.2: Interparticle collision

相対速度 V_{ij} は、次式で得ることができる。

$$\mathbf{V}_{ij} = \mathbf{v}_{pj} - \mathbf{v}_{pi} \quad (4.5)$$

これを用いて、衝突前の粒子 i に対する粒子 j の接触点での相対速度 \mathbf{V}_{fij} は

$$\mathbf{V}_{fij} = \mathbf{V}_{ij} - (\mathbf{V}_{ij} \cdot \mathbf{n})\mathbf{n} - r_{pi}\boldsymbol{\omega}_i \times \mathbf{n} - r_{pj}\boldsymbol{\omega}_j \times \mathbf{n} \quad (4.6)$$

で与えられる。衝突時の摩擦力は接触点の相対速度の方向に働くので、衝撃力 \mathbf{J} を次のように法線方向と接線方向の成分に分割できる。

$$\mathbf{J} = J_n \mathbf{n} - J_t \mathbf{t} \quad (4.7)$$

ただし、接線方向単位ベクトル \mathbf{t} は

$$\mathbf{t} = \frac{\mathbf{V}_{fij}}{|\mathbf{V}_{fij}|} \quad (4.8)$$

である。

衝突前後の相対速度には、次のような関係がある。

$$\mathbf{n} \cdot \mathbf{V}_{ij}^* = -e (\mathbf{n} \cdot \mathbf{V}_{ij}) \quad (4.9)$$

ここで、 e : 粒子間の反発係数である。

Eq.(4.1)、Eq.(4.2)、Eq.(4.5)、Eq.(4.7) および Eq.(4.9) より J_n は次のようになる。

$$J_n = \frac{(1+e)\mathbf{n} \cdot \mathbf{V}_{ij}}{1/m_i + 1/m_j} \quad (4.10)$$

接触点での滑りがある場合には、粒子間の動摩擦係数を用いて、クーロンの法則

$$J_t = -\mu_f J_n \quad (4.11)$$

により摩擦力を与える。衝突直後の粒子表面速度は、Eq.(4.1) から Eq.(4.7) を用いて

$$\mathbf{V}_{fij}^* = \alpha \mathbf{t} \quad (4.12)$$

$$\alpha = |\mathbf{V}_{fij}| - \frac{1}{2} \left(\frac{7}{m_i} + \frac{7}{m_j} \right) J_t \quad (4.13)$$

と表わされる。Eq.(4.11) が適用できるのは、 α が正の場合のみである。したがって、Eq.(4.13) の J_t に Eq.(4.11) を代入し、 $\alpha \geq 0$ として

$$J_n = \frac{-2|\mathbf{V}_{fij}|}{(7/m_i + 7/m_j)\mu_f} \quad (4.14)$$

の条件が満足されるとき Eq.(4.11) により J_t が与えられる。Eq.(4.14) の条件が満たされないとき、接触点での滑りは衝突過程において一旦停止することになる。ここで滑りが停止した後は、再び滑らないと仮定すると、Eq.(4.13) において $\alpha = 0$ として

$$J_t = \frac{2|\mathbf{V}_{fij}|}{7/m_i + 7/m_j} \quad (4.15)$$

となる。Eq.(4.10) および Eq.(4.14)、Eq.(4.11)、Eq.(4.15) より衝撃力が求められ、Eq.(4.1) から Eq.(4.4) により衝突後の速度および角速度を得ることができる。

また、粒子間衝突の発生を判定する方法は決定論的方法と確立論的方法に大別される。決定論的方法では、判定を行なう粒子近傍に存在する全ての粒子について、粒子運動に基づいて決定論的に衝突の判定が行なわれる。決定論的方法により、鉛直管内固気二相流(田中ほか, 1990)、固気二相流中でのクラスター形成(Yamamoto *et al.*, 2001)への応用が行なわれている。

衝突判定に伴う計算負荷を軽減するため、粒子の衝突確率に基づくモンテカルロシミュレーションにより衝突の発生などを与える確率論的方法が提案されている。確率論的方法の1つに、希薄気体中の分子運動を計算するために開発された DSMC (Direct simulation Monte-Carlo) 法を固体粒子の運動に応用するものがある(Tanaka *et al.*, 1996)。DSMC の利用により大幅に計算負荷を軽減することができるため、大規模計算への応用が期待されている。

4.2 計算手法

極端に粒子濃度が増加して、粒子間隙の流体が粒子の分散流動状態を維持するのに十分な運動量が供給を担えない状態に至ると、粒子は相互に接触し始める(後藤, 2004)。個々の粒子が多数の接触点で近傍の粒子と接触している状態では、剛体粒子モデルは全く機能せず、異なる発想のモデリングが必要となる。粒子運動に対して軟体粒子モデルを用いるアプローチは、個別要素法(Cundall and Strack, 1979)の登場によって広く普及した。以下に、個別要素法の計算スキームについて述べる。

4.2.1 基礎式

ここでは、粒子間作用力と重力、また媒質である流体の影響を考慮した場合の基礎式を考える。2次元場を対象とすると、粒子*i*のグローバル座標系(x, y)上での並進運動および回転運動は、次のように定式化される。

$$m_i \frac{d^2 \mathbf{r}_i}{dt^2} = \mathbf{F}_{pi} + \mathbf{F}_{hydro} + m_i \mathbf{g} \quad (4.16)$$

$$I_{pi} \frac{d^2 \phi_i}{dt^2} = \mathbf{T}_{pi} + \mathbf{T}_{hydro} \quad (4.17)$$

ここで、 m_i ：粒子*i*の質量（添字*i*は粒子*i*を表わす）、 I_{pi} ：粒子*i*の重心周りの慣性モーメント、 \mathbf{r}_i ：粒子の位置ベクトル（成分 (x_{pi}, y_{pi}) ）、 ϕ_i ：粒子*i*の角変位ベクトル、 \mathbf{F}_{pi} ：粒子*i*に作用する接触力ベクトル、 \mathbf{T}_{pi} ：粒子*i*に作用するトルク、 \mathbf{F}_{hydro} ：粒子*i*に作用する流体力ベクトル、 \mathbf{T}_{hydro} ：粒子*i*に作用する流体トルク、 \mathbf{g} ：重力加速度ベクトルである。なお、粒子に作用する流体力および流体トルクの求め方は、5.1.2で述べている。

個別要素法では、差分近似した基礎式に陽解法が適用されることが一般的であり、逐次代入によって漸進的に粒子群の運動の時間発展過程が計算される。しかし、複雑な境界条件下で流動抵抗が増加すると、粒子間の過大なオーバーラップによる異常反発が発生することがある。この対応策として、粒子間接触力の計算ルーチンに陰解法を導入した修正陰解法が提案されている（後藤ほか, 2006）。

また、粒状体シミュレーションの大きな課題としては、計算負荷の大きさに伴う計算粒子数の不足により産業界で要求される大規模体系の解析の困難さが挙げられる。そこで、近年、計算機に付属するグラフィックプロセッサ（Graphic Processing Unit; GPU）を用いた超高速化手法も紹介されている（原田ほか, 2007b; 酒井ほか, 2009）。

4.2.2 粒子間相互作用力

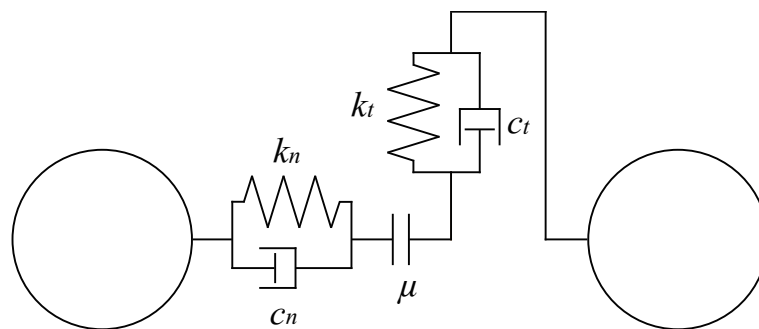


Fig. 4.3: Interparticle contact model; Voigt model

個々の粒子間作用力は、Fig.4.3に示すように、粒子間の接点に弾性スプリング、粘性ダッシュポット、スライダーという要素を組み合わせたレオロジーモデル（日本材料学会, 2002）を導入し、これらの要素は接平面内とその法線方向に配置される。粒子間作用力は接点上

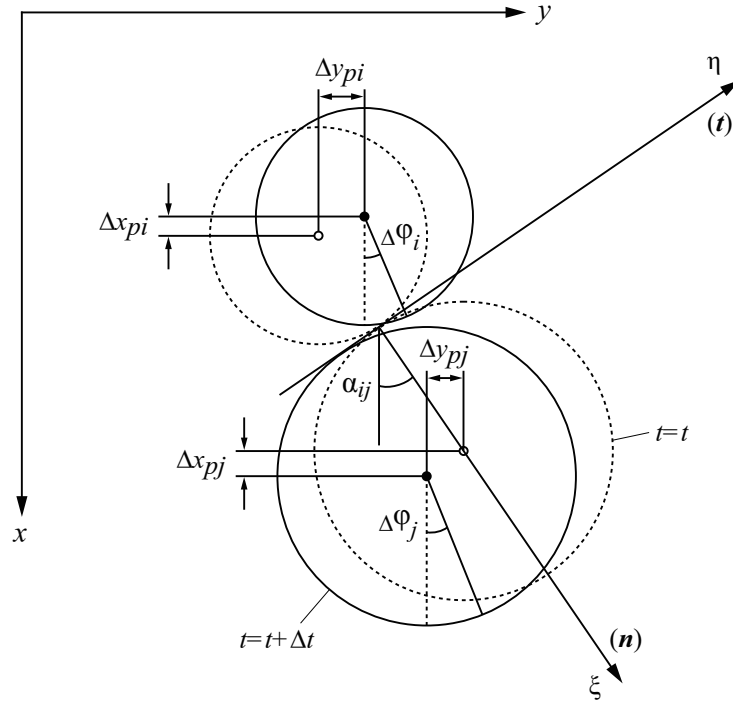


Fig. 4.4: Interparticle relative displacement

でのローカル座標系で定式化されるので、粒子の運動方程式が定義されるグローバル座標系との間で頻繁な座標変換が必要となる (後藤, 2004)。なお、Fig.4.3 の要素配置は粘弾性体の性質を表現し、フォークト (Voigt)・モデル (粉体工学会, 1998) と呼ばれる。粒子は2次元では円 (3次元では球) であり、粒子間のオーバーラップを計算上許容するが、粒子は剛体的に挙動し、他の粒子と重なっても変形しないとする。以下に、2次元における粒子間作用力の算定法を示す。

粒子 i, j の接触判定は、次式で評価される。

$$L_{ij} \leq r_{pi} + r_{pj} \quad (4.18)$$

$$L_{ij} = \sqrt{(x_{pi} - x_{pj})^2 + (y_{pi} - y_{pj})^2} \quad (4.19)$$

ここで、 L_{ij} : 粒子 i, j の中心間距離、 r_p : 粒子の半径 (添字 i, j は粒子 i, j を表わす)、 x_p, y_p : グローバル座標系での粒子の位置座標とする。

粒子 i の時間 Δt 間における変位および角変位を、それぞれ $\Delta x_{pi}, \Delta y_{pi}, \Delta \phi_i$ とし、Fig.4.4 に示す座標軸方向の並進運動を正、反時計回りの回転方向を正と定義する。時刻 t における粒子 i, j の接触点を原点とし、共通接線に対する法線方向 (粒子 から粒子 に向かう方向を正) および接線方向にローカル座標系 (ξ, η) を配置する。法線および接線方向の相対増分は、次式で表わすことができる。

$$\begin{bmatrix} \Delta \xi_{ij} \\ \Delta \eta_{ij} \end{bmatrix} = [T_{GL}] \begin{bmatrix} \Delta x_{pi} - \Delta x_{pj} \\ \Delta y_{pi} - \Delta y_{pj} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ \Delta \phi_i & \Delta \phi_j \end{bmatrix} \begin{bmatrix} r_{pi} \\ r_{pj} \end{bmatrix} \quad (4.20)$$

$$[T_{GL}] = \begin{bmatrix} \cos \alpha_{ij} & \sin \alpha_{ij} \\ -\sin \alpha_{ij} & \cos \alpha_{ij} \end{bmatrix} \quad (4.21)$$

$$\sin \alpha_{ij} = -\frac{y_{pi} - y_{pj}}{L_{ij}}, \quad \cos \alpha_{ij} = -\frac{x_{pi} - x_{pj}}{L_{ij}} \quad (4.22)$$

ここで、 T_{GL} ：グローバル座標・ローカル座標間の座標変換行列、 α_{ij} ：共通接線が ξ 軸となす角（反時計回りを正とする）である。

Eq.(4.20) 右辺第1項が並進運動の変位による成分、右辺第2項が回転運動による接線方向の変位による成分を表わしている。

接触状態にある粒子 i, j の間には、Fig.4.3に示したようなフォークト・モデルが導入されている。すなわち、法線方向には引っ張りに抵抗しないジョイントを介して、弾性スプリング（バネ定数 k_n ）と粘性ダッシュポット（粘性定数 c_n ）を配置される。さらに、接線方向には、一定の限界を越えると滑動するジョイント（静止摩擦係数 μ ）を介して弾性スプリング（バネ定数 k_t ）と粘性ダッシュポット（粘性定数 c_t ）が配置される。

スプリングは相対変位、ダッシュポットは相対速度に、それぞれ比例した抗力を及ぼすため、Eq.(4.20)で算定される法線および接線方向の相対増分に対する作用力 F_ξ, F_η は、以下のように表わすことができる。

$$\left. \begin{aligned} F_\xi(t) &= e_n(t) + d_n(t) \\ e_n(t) &= e_n(t - \Delta t) + k_n \Delta \xi_{ij} \\ d_n(t) &= c_n \frac{\Delta \xi_{ij}}{\Delta t} \end{aligned} \right\} \quad (4.23)$$

$$\left. \begin{aligned} F_\eta(t) &= e_t(t) + d_t(t) \\ e_t(t) &= e_t(t - \Delta t) + k_t \Delta \eta_{ij} \\ d_t(t) &= c_t \frac{\Delta \eta_{ij}}{\Delta t} \end{aligned} \right\} \quad (4.24)$$

法線方向に配置された引っ張りに抵抗しないジョイントは、圧縮を正として、次式のようになる。

$$F_\xi(t) = F_\eta(t) = 0 \quad \text{when } e_n(t) < 0 \quad (4.25)$$

また、接線方向に滑動するジョイントは、次式のように表わされる。

$$F_\eta(t) = \mu \cdot \text{Sign}[e_n(t), e_t(t)] \quad \text{when } |e_t(t)| < \mu e_n(t) \quad (4.26)$$

ここで、 $\text{Sign}[a, b]$ は、 a の絶対値に b の符号を付す操作である。

以上のようにして、接触点上のローカル座標系における接触力が評価される。この操作を粒子 i と接触状態にある全ての粒子に施し、個々の粒子間の接触点に定義されたローカル座標系上で記述された粒子間作用力をグローバル座標系に変換して和をとると、粒子 i における並進方向の作用力 F_{pxi}, F_{pyi} およびトルク T_{pi} を求めることができる。

$$\begin{bmatrix} F_{pxi} \\ F_{pyi} \end{bmatrix} = - \sum_j [T_{GL}]_{ij}^{-1} \begin{bmatrix} F_\xi \\ F_\eta \end{bmatrix}_{ij} \quad (4.27)$$

$$T_{pi} = -r_{pi} \sum_j [F_{\eta}]_{ij} \quad (4.28)$$

このようにして、並進および回転運動の運動方程式である Eq.(4.16)、Eq.(4.17) に導入された粒子間作用力が評価されたので、運動方程式を積分して時間 Δt 間の粒子の変位を計算すればよい。

4.2.3 粒子の初期配列

粒子の初期配列を決定するには、粒子間に接触力が作用して安定した堆積状態を求める必要がある。この過程をパッキング (Packing) という。地盤工学における諸問題では、完全に規則的な配列が計算対象となることは稀であるから、砂粒子のランダム配列を求めることに主眼が置かれる。ランダムパッキングの方法としては、以下のものがある (伯野, 1997)。

棄却法

疑似乱数を発生させて粒子の位置 (混合粒径なら粒子径もともに) を与え、その位置がすでに領域内にある他の粒子と重なる場合には、その粒子を抹消 (棄却) する。

局所移動法

局所移動法は予め全ての粒子を格子上に配置し、その後一定の許容範囲内で個々の粒子の位置をランダムに移動させてパッキングする。

落下法

計算領域を重力場として、ある位置から順に粒子を落下させて堆積させる。この方法では、本計算と同様の計算がパッキングで実施されることとなる。

成長法

疑似乱数を発生させて粒子の位置を与え、その点から周囲粒子に接触するまで粒子径を増大させる。

個別要素法のパッキングには、落下法がよく用いられるが、堆積層表面に落下する個々の粒子の運動を順に追跡するのは計算効率が良くない。この点を改善するには、局所移動法と落下法を折衷した方法が有効である (後藤, 2004)。

4.3 モデル定数の選択

個別要素法の接触力モデルには、線形モデルとヘルツ (Hertz) の弾性接触モデルがあり、実際の応用に際しては適切なモデルを選定する必要がある (小林, 2003)。例えば、粉粒体層の固体の性質など、粒子間接触力と変形量の定量的な関係が問題となる場合、あるいは粒子濃厚相中の圧力波の伝播などの高速の現象を取り扱うためには、より厳密なヘルツ接触モデル (田中ほか, 1991) を適用する必要があるが、遅い流動を取り扱う場合には以下に示す線型モデルで十分である。

4.3.1 線形モデル

流動層内の粒子流動などの問題では、接触力モデル中のバネの特性などは粉粒体全体の挙動に対して大きな影響はなく、 k_n, c_n, k_t および c_t を一定とする線形モデルを用いることができる。このような場合は、計算で発生する粒子間の法線および接線方向のオーバーラップ δ, b が粒径に比べて十分小さくなる程度に k_n, k_t を選択する必要がある。線形モデルにおいて、 c_n を粒子の反発係数 e に基づいて決定するモデルが提案されている (川口ほか, 1992)。

$$c_n = -2 \ln e \sqrt{\frac{mk_n}{\pi^2 + (\ln e)^2}} \quad (4.29)$$

ただし、このモデルでは反発係数は、衝突速度に依存せず一定となることが仮定されている。一般的に衝突速度の増加によって、反発係数は減少することが知られており、上記のモデルは比較的衝突速度の小さな領域の衝突を近似的に表すものである。法線方向のダッシュポットの特性が以上のように、粒子の反発係数に応じて決定されるのに対して、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、現状では便宜的に決められることが多い。

線形バネは、実際の粒子の変形と反発力の関係を正確に表すものではない。しかし、以下に示すように、2次元流動層内の流動の計算結果は、バネの特性変化に対して敏感ではない。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有する線形バネのモデルを用いた数値シミュレーションにより、実験で観測される流動様式の変化がよく表されることが報告されている (川口ほか, 1992)。また、同様の線形モデルを用いたオイラー・ラグランジェ法のシミュレーションにより、流動層 (Kawaguchi *et al.*, 1998)、噴流層 (Kawaguchi *et al.*, 2000) などの流動化挙動が良好に再現できることが示されている。

さらに、計算時間間隔 Δt_p は、差分の収束性と安定性の条件から、以下を満足する必要がある。

$$\Delta t_p \leq 2 \sqrt{\frac{m_i}{k_n}} \quad (4.30)$$

また、質点の上下にバネを配置した1自由度振動系の固有周期 T を基準とした計算時間ステップに関する次のような推定式も提案されており、 $\alpha_m = 20.0$ が最適値として与えられている (吉田ほか, 1988)。

$$\Delta t_p = \frac{T}{\alpha_m}, \quad T \leq 2\pi \sqrt{\frac{m_i}{2k_n}} \quad (4.31)$$

4.3.2 ヘルツの弾性接触モデル

モデル定数すなわち弾性スプリングのバネ定数およびダッシュポットの粘性定数の設定については、弾性接触理論 (早川, 2003) を準用して推定する方法が知られている (木山と藤村, 1983)。弾性スプリングについては、ヘルツ (Hertz) の弾性接触理論によって、粒子群の材料特性 (縦弾性係数 E , ポアソン比 ν) と関連付けて与えることができる。2次元接

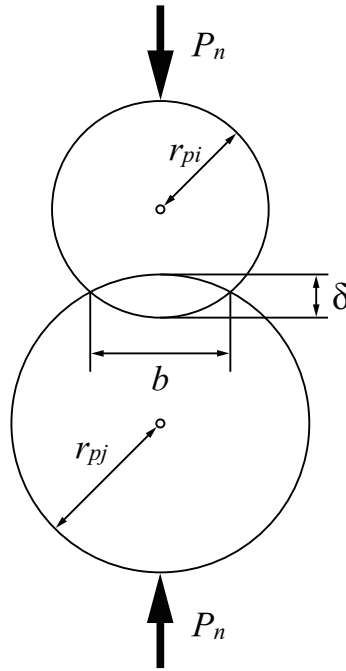


Fig. 4.5: Elastic contact of two cylinders

触のモデルとして円柱を想定すると (Fig.4.5)、オーバーラップ δ は、次式で表わすことができる (粉体工学会, 1998; 後藤, 2004)。

$$\delta = \frac{2(1-\nu^2)}{\pi} \frac{P_n}{E} \left(\frac{2}{3} + \ln \frac{4r_{pi}}{b} + \ln \frac{4r_{pj}}{b} \right) \quad (4.32)$$

$$b^2 = \frac{8}{\pi} \left(\frac{1-\nu^2}{E} \frac{r_{pi}r_{pj}}{r_{pi}+r_{pj}} P_n \right) \quad (4.33)$$

ここで、 P_n : 弾性変形による反発力 (法線方向に受ける圧縮力の反作用)、 r_p : 半径、 b : 円柱のオーバーラップ幅である。

Eq.(4.32) より、 $P_n = e_n(t - \Delta t)$ とすると、法線方向のバネ定数 k_n は次のようになる。

$$k_n = \frac{P_n}{\delta} = \frac{\pi E}{2(1-\nu^2) \left(\frac{2}{3} + \ln \frac{4r_{pi}}{b} + \ln \frac{4r_{pj}}{b} \right)} \quad (4.34)$$

$$b = \sqrt{\frac{8}{\pi} \left(\frac{1-\nu^2}{E} \right) \frac{r_{pi}r_{pj}}{r_{pi}+r_{pj}} e_n(t - \Delta t)} \quad (4.35)$$

一方、接線方向のバネ定数 k_t については、逓減率 s_0 を導入し、横弾性係数 G と縦弾性係数 E の比で与えられる。

$$s_0 = \frac{k_t}{k_n} = \frac{G}{E} = \frac{1}{2(1+\nu)} \quad (4.36)$$

ダッシュポットは、粒子間の接触・衝突に起因するエネルギーの減衰を表現しているの
で、1次元減衰振動系（フォークト・モデル）の振幅減衰特性と関連付けた評価が合理的
である。1次元減衰振動系の臨界減衰の条件を用いると、粘性定数は次のようになる。

$$c_n = 2\sqrt{m_i k_n}, \quad c_t = c_n \sqrt{s_0} \quad (4.37)$$

第5章 固液二相連成計算手法

本章では主に、第3章、第4章で述べた格子ボルツマン法および個別要素法の固液二相連成手法の計算スキームについて説明する。ここで、重要なことは、固液界面における相互作用力の取り扱いおよび移動固体粒子に作用する流体力および流体トルクの求め方にある。はじめに、Ladd (1994a,b) が開発した従来の移動境界条件について論じる。次に Noble and Torczynski (1998) が提案した境界埋め込み法をベースにした移動境界条件 (Cook *et al.*, 2000, 2001, 2004; Feng *et al.*, 2007; Han *et al.*, 2007) について述べる。さらに、格子ボルツマン法と個別要素法に対して共通の無次元係数を用いた空間および時間スケールの統一を図るため、可変時間ステップ法 (Sub-cycling time integration)、無次元化についても触れる。

5.1 移動境界条件

固体粒子のサスペンション系を対象としたシミュレーションを行なう場合、流体と固体粒子の運動を同時に解くために、粒子に作用する力およびトルクを計算する必要がある。静止固体粒子に対しては、3.4.1 で述べたバウンス・バック (Bounce-back rule) 法を適用することによって、固液界面に滑りなし条件が達成されると同時に、相互作用力も計算することができる。しかし、移動固体粒子の場合は、バウンス・バック法によって固液界面に滑りなし条件を発現させることは困難である。ここでは、流体と移動固体粒子の相互作用力を求めることができる2つの境界条件について説明する。

5.1.1 Ladd's model

Ladd (1994a,b) は、流体中における固体粒子の運動を考慮するため、バウンス・バック法の改良を提案した。Fig.5.1 に示したように、境界リンク α を形成する流体格子点 (Fluid node) と固体格子点 (Solid node) 上での密度分布関数に対して、次のような操作を行なう。

$$f_{-\alpha}(\mathbf{r}, t + \Delta t) = \tilde{f}_{\alpha}(\mathbf{r}, t) - S_{\alpha} \mathbf{c}_{\alpha} \cdot \mathbf{v}_b \quad (5.1)$$

$$\tilde{f}_{\alpha}(\mathbf{r}, t) = f_{\alpha}(\mathbf{r}, t) - \frac{1}{\tau} \left\{ f_{\alpha}(\mathbf{r}, t) - f_{\alpha}^{eq}(\mathbf{r}, t) \right\} \quad (5.2)$$

$$S_{\alpha} = \frac{6w_{\alpha}\rho}{c_s^2} \quad (5.3)$$

ここで、 $-\alpha : \alpha$ の逆向き方向、 \mathbf{v}_b : 固液界面速度であり、境界リンク α の中間点における速度である。

$$\mathbf{v}_b = \mathbf{v}_c + \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{r}_c \quad (5.4)$$

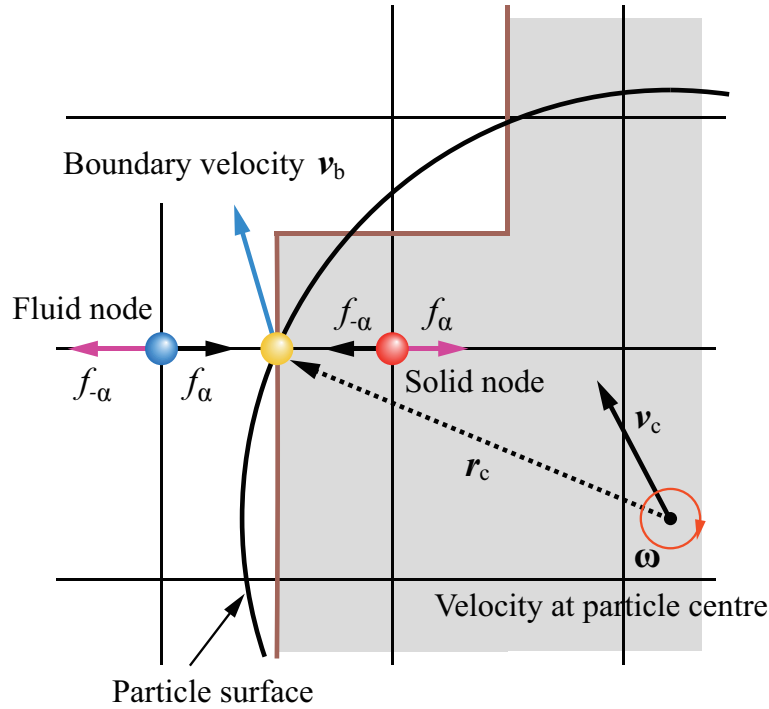


Fig. 5.1: Modified bounce-back rule for a moving particle

$$\mathbf{r}_c = \mathbf{r} + \frac{\mathbf{c}_\alpha \Delta t}{2} - \mathbf{x}_c \quad (5.5)$$

ここで、 \mathbf{v}_c : 固体粒子の並進速度、 ω : 固体粒子の角速度、 \mathbf{x}_c : 固体粒子の中心座標を示している。ただし、Eq.(5.1)は、境界リンクでの衝突過程においてのみ適用されることに注意を要する。

Eq.(5.1)を用いると、境界リンク α から固体粒子に作用する相互作用力 \mathbf{F}_α および固体粒子の中心に対する流体トルク \mathbf{T}_α は次式のようになる。

$$\mathbf{F}_\alpha = \frac{2\{\tilde{f}_\alpha(\mathbf{r}, t) - S_\alpha \mathbf{c}_\alpha \cdot \mathbf{v}_b\}}{\Delta t} \quad (5.6)$$

$$\mathbf{T}_\alpha = \mathbf{r}_c \times \mathbf{F}_\alpha \quad (5.7)$$

したがって、固体粒子に作用する流体力 \mathbf{F}_{hydro} および流体トルク \mathbf{T}_{hydro} は、それに関連する全ての境界リンクについての総和を取ることによって求めることができる。

$$\mathbf{F}_{hydro} = \sum_{\alpha} \mathbf{F}_\alpha \quad (5.8)$$

$$\mathbf{T}_{hydro} = \sum_{\alpha} \mathbf{T}_\alpha \quad (5.9)$$

このLadd's modelでは、2つの特徴について議論されてきている。(1)プログラム・コードへの実装性に優れている反面、固液相間での流体の移流を許容している。そのため、固

体粒子内部で生じる流体の慣性力が固体粒子に作用する流体力に及ぼす効果、すなわち計算精度への影響が懸念されている (Aidun *et al.*, 1998)。しかし、この計算スキームの正当性は、Ladd (2001) で報告されている。また、Aidun *et al.* (1998) は、固体粒子内部への流体の移流計算を必要としない代替モデルを提案し、固液界面のみで運動量交換が生じるものとした。(2) 固体粒子が高速で格子点上を通過する場合、固体粒子に作用する流体力にバラツキが生じることがある。これは、固液界面を構成する境界リンク (流体および固体格子点) が劇的に時間変化するためである。これに関するモデル改良は、Ladd (2001) で提案されている。さらに、曲面を有する固液界面を階段状に単純化して捕捉していることが起因しているとも言えるであろう。

5.1.2 Noble and Torczynski's model

Immersed moving boundary (IMB) 法あるいは境界埋め込み法 (Immersed boundary method; IBM) (森口と青木, 2007) は、流体と変形構造体との相互作用問題のモデリングに用いられる数値計算手法の1つである (Feng *et al.*, 2007)。これは、直交格子を用いて複雑形状周りの流れを解くための手法であり、最近注目されている (水谷と山本, 2008)。これまでに提案された代表的な境界埋め込み法に共通していることは、物体表面を近似表現する外力項の物体近傍流速を補間する際に、固体領域の格子点の一部を使用するというものである。Noble and Torczynski (1998); Feng and Michaelides (2004) は、境界埋め込み法のコンセプトの格子ボルツマン法への導入を試みている。本研究では、Noble and Torczynski (1998) の移動境界条件を用いている。

導入の基本的な目的は、直交格子を用いて複雑形状をより精度良く滑らかに表現し、流体力のバラツキを抑制することにある。また、同時に、固液界面での滑りなし条件を保証するために、固体粒子内部の密度分布関数を再配分することである。ここで、Fig.5.2 で描かれている緑色の正方形が示すように、各格子点を中心とした一辺 Δx のコントロール・セル (Control cell) を設定する。これを用いて、コントロール・セルに対する固体粒子の局所的占有面積率 γ を定義する。

固体粒子内部の格子点に対する Eq.(3.1) は、以下のように拡張される。

$$f_{\alpha}(\mathbf{r} + \mathbf{c}_{\alpha}\Delta t, t + \Delta t) = f_{\alpha}(\mathbf{r}, t) - \frac{1}{\tau}(1 - \beta)\{f_{\alpha}(\mathbf{r}, t) - f_{\alpha}^{eq}(\mathbf{r}, t)\} + \beta f_{\alpha}^m \quad (5.10)$$

$$\beta = \frac{\gamma(\tau - 0.5)}{(1 - \gamma) + (\tau - 0.5)} \quad (5.11)$$

$$f_{\alpha}^m = f_{-\alpha}(\mathbf{r}, t) - f_{\alpha}(\mathbf{r}, t) + f_{\alpha}^{eq}(\rho, \mathbf{v}_b) - f_{-\alpha}^{eq}(\rho, \mathbf{v}) \quad (5.12)$$

ここで、 β : 固体粒子の局所的占有面積率 γ に基づく重み関数、 f_{α}^m : 密度分布関数の非平衡成分のバウンス・バックを考慮した追加衝突項である。

重み関数 β および追加衝突項 f_{α}^m の組み合わせには、他にも以下のような式 (Noble and Torczynski, 1998) が提案されているが、最終的な結果に大きな差異は無いことが確認されている (Feng *et al.*, 2007)。

$$\left. \begin{aligned} \beta &= \gamma \\ f_{\alpha}^m &= f_{-\alpha}(\mathbf{r}, t) - f_{\alpha}(\mathbf{r}, t) + f_{\alpha}^{eq}(\rho, \mathbf{v}_b) - f_{-\alpha}^{eq}(\rho, \mathbf{v}) \end{aligned} \right\} \quad (5.13)$$

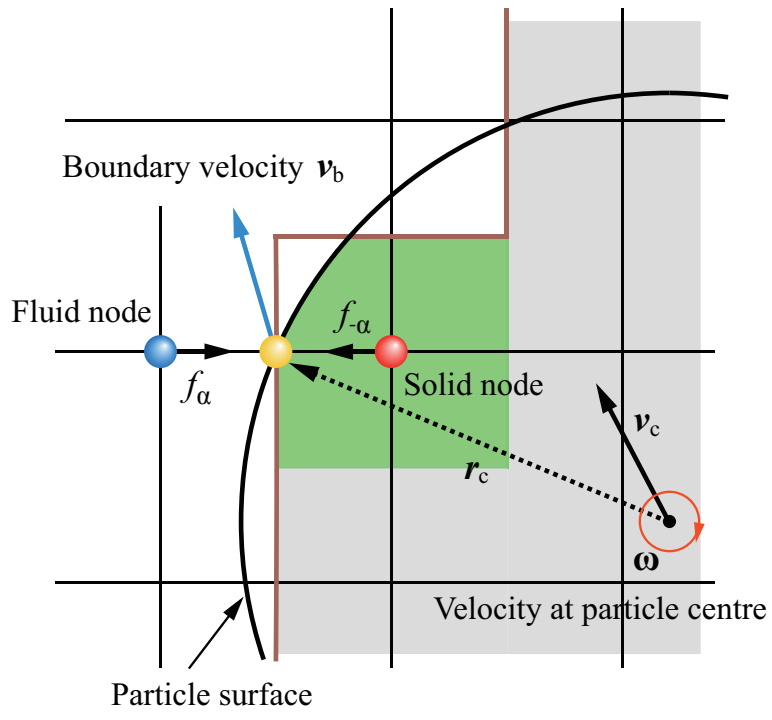
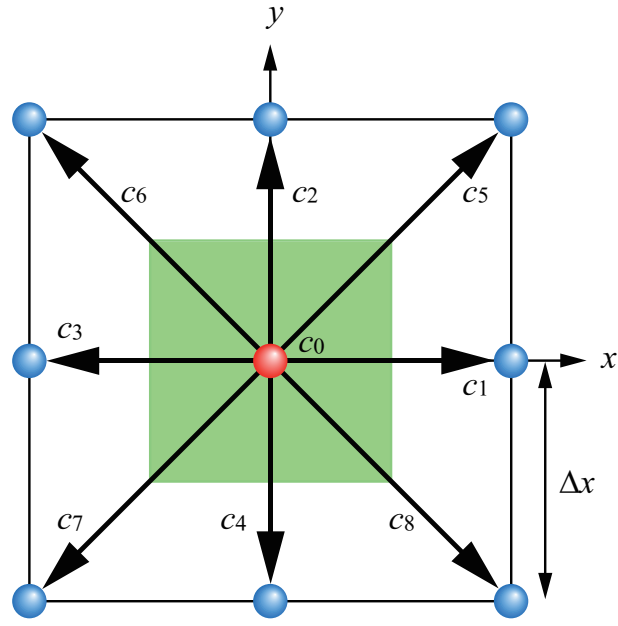


Fig. 5.2: Immersed boundary scheme of Noble and Torczynski

$$\left. \begin{aligned} \beta &= \gamma \\ f_{\alpha}^m &= f_{\alpha}^{eq}(\rho, \mathbf{v}_b) - f_{\alpha}(\mathbf{r}, t) + \left(1 - \frac{1}{\tau}\right) \left\{ f_{\alpha}(\mathbf{r}, t) - f_{\alpha}^{eq}(\rho, \mathbf{v}) \right\} \end{aligned} \right\} \quad (5.14)$$

また、Eq.(5.12) の右辺第 4 項の速度に固液界面速度 \mathbf{v}_b を用いた、以下のような追加衝突項 f_{α}^m も提案されている (Strack and Cook, 2007)。

$$f_{\alpha}^m = f_{-\alpha}(\mathbf{r}, t) - f_{\alpha}(\mathbf{r}, t) + f_{\alpha}^{eq}(\rho, \mathbf{v}_b) - f_{-\alpha}^{eq}(\rho, \mathbf{v}_b) \quad (5.15)$$

さらに、固体粒子に作用する流体力 \mathbf{F}_{hydro} および流体トルク \mathbf{T}_{hydro} は、次のように計算することができる。

$$\mathbf{F}_{hydro} = \frac{\Delta x^2}{\Delta t} \left\{ \sum_n \left(\beta_n \sum_{\alpha} f_{\alpha}^m \mathbf{c}_{\alpha} \right) \right\} \quad (5.16)$$

$$\mathbf{T}_{hydro} = \frac{\Delta x^2}{\Delta t} \left\{ \sum_n (\mathbf{r}_n - \mathbf{r}_c) \times \sum_n \left(\beta_n \sum_{\alpha} f_{\alpha}^m \mathbf{c}_{\alpha} \right) \right\} \quad (5.17)$$

ここで、 n : 固体粒子内部に位置する格子点 (数)、 \mathbf{r}_n : 格子点 n の位置ベクトルを示す。この Noble and Torczynski's model は、Ladd's model に比べて実装が僅かに困難であり、計算コストも高くなるが、計算で得られる流体力のバラツキは少ない。

5.2 可変時間ステップ法

本連成計算手法では、格子ボルツマン法による流体計算と個別要素法による固体粒子運動の計算が時刻を合わせて時間発展的に実施される。格子ボルツマン法における離散化時間 Δt は、Eq.(3.8) より Eq.(5.18) を満たす必要がある。一方、個別要素法においても安定な計算を行なうために、4.3.1 で述べたように Eq.(5.19) に示す離散化時間 t_p を適切に設定する必要となる。このとき、2 つの離散化時間 Δt および Δt_p が異なる場合には、計算の安定化を図るために、どちらか小さい方を使わなければならない。このため、次に示すような可変時間ステップ法 (牛島ほか, 2003) を用いる。

$$\Delta t = \left(\tau - \frac{1}{2} \right) \frac{\Delta x^2}{3\nu} \quad (5.18)$$

$$\Delta t_p \leq 2 \sqrt{\frac{m_i}{k_n}} \quad (5.19)$$

$$N_{sub} \Delta t_p = \Delta t \quad (5.20)$$

ここで、 N_{sub} : 1 以上の整数である。

これは、流体計算 1 回に対して、 N_{sub} 回の固体粒子運動の計算がなされることを意味する。このとき、固体粒子に作用する流体力は一定値とする。この方法を用いることにより、シミュレーションの計算の増加を抑制することができる。

5.3 無次元化

複数の数値計算手法を連成する場合には、共通の無次元係数による空間および時間スケールの統合を図ることが重要となる。本節では、自主開発したプログラム・コード上で行なった無次元化について説明する。以下に、無次元化した格子ボルツマン法と個別要素法の主要な式およびパラメータについて記しておくことにする。ここでは主に、物理単位系 (Physical unit system) と、無次元されたパラメータを定義付ける単位系である格子単位系 (Lattice unit system) の関連を中心に述べる。物理単位系と格子単位系のパラメータとその関係は、Table.5.1 にまとめてある。また、格子単位系でのパラメータには、その記号の上に“-”を付けた。

格子ボルツマン法

密度分布関数 f_α および緩和時間係数 τ は元々、無次元定数として定義されているため、物理単位系および格子単位系で同じ値である。格子単位系では、格子幅および離散化時間は $\Delta\bar{x} = \Delta\bar{t} = 1$ であり、これにより仮想流体粒子の格子速度は $\bar{c} = 1$ となる。また、流体密度 $\bar{\rho}$ は次式で表わされる。

$$\bar{\rho} = \frac{\rho}{\rho_0} \quad (5.21)$$

ここで、 ρ_0 : 真の流体密度である。

流体密度に関するパラメータ ρ, ρ_0 は厳密には、異なる値である。ただし、非圧縮性流体流れを再現するという条件下では、 $\rho = \rho_0$ として良い。したがって、 $\bar{\rho} = 1$ となる。

さらに、空間座標ベクトル \bar{r} 、時刻 \bar{t} を決定すると、格子単位系での格子ボルツマン方程式、すなわち無次元変換した Eq.(3.1) から Eq.(3.3) は次のようになる。

$$f_\alpha(\bar{r} + \bar{c}_\alpha, \bar{t} + 1) = f_\alpha(\bar{r}, \bar{t}) - \frac{1}{\tau} \{f_\alpha(\bar{r}, \bar{t}) - f_\alpha^{eq}(\bar{r}, \bar{t})\} \quad (\alpha = 0, 1, 2, \dots, 8) \quad (5.22)$$

$$f_\alpha^{eq} = \bar{\rho} w_\alpha \left\{ 1 + 3\bar{c}_\alpha \cdot \bar{u} - \frac{3}{2}\bar{u}^2 + \frac{9}{2}(\bar{c}_\alpha \cdot \bar{u})^2 \right\} \quad (5.23)$$

$$w_\alpha = \begin{cases} 4/9 & \text{for } \alpha = 0 \\ 1/9 & \text{for } \alpha = 1, 2, 3, 4, \\ 1/36 & \text{for } \alpha = 5, 6, 7, 8 \end{cases}, \quad |\bar{c}_\alpha| = \begin{cases} 0 & \text{for } \alpha = 0 \\ 1 & \text{for } \alpha = 1, 2, 3, 4 \\ \sqrt{2} & \text{for } \alpha = 5, 6, 7, 8 \end{cases} \quad (5.24)$$

個別要素法

個別要素法も格子ボルツマン法と同様の無次元化操作を行なう。格子単位系での並進運動および回転運動に関する基礎式 Eq.(4.16) および Eq.(4.17) は、次のように変換される。

$$\bar{m}_i \frac{d^2 \bar{r}_i}{d\bar{t}^2} = \bar{F}_{pi} + \bar{F}_{hydro} + \bar{m}_i \bar{g} \quad (5.25)$$

$$\bar{I}_{pi} \frac{d^2 \bar{\phi}_i}{d\bar{t}^2} = \bar{T}_{pi} + \bar{T}_{hydro} \quad (5.26)$$

Table 5.1: Conversions between physical and lattice units

Variable	Physical unit	Lattice unit	Relationship
Density	ρ	$\bar{\rho}$	$\rho = \rho_0 \bar{\rho}$
Density funtion	f_α	f_α	–
Relaxation time	τ	τ	–
Lattice spacing	Δx	$\Delta \bar{x} = 1$	–
Time step	Δt	$\Delta \bar{t} = 1$	–
Lattice velocity	$c = \frac{\Delta x}{\Delta t}$	$\bar{c} = 1$	–
Viscosity	$\nu = \frac{1}{3} \left(\tau - \frac{1}{2} \right) \frac{\Delta x^2}{\Delta t}$	$\bar{\nu} = \frac{1}{3} \left(\tau - \frac{1}{2} \right)$	$\nu = c \Delta x \bar{\nu}$
Coor./Disp.	\mathbf{r}	$\bar{\mathbf{r}}$	$\mathbf{r} = \Delta x \bar{\mathbf{r}}$
Velocity	$\mathbf{u} = \frac{d\mathbf{r}}{dt}$	$\bar{\mathbf{u}} = \frac{d\bar{\mathbf{r}}}{d\bar{t}}$	$\mathbf{u} = c \bar{\mathbf{u}}$
Acceleration	$\mathbf{a} = \frac{d^2\mathbf{r}}{dt^2}$	$\bar{\mathbf{a}} = \frac{d^2\bar{\mathbf{r}}}{d\bar{t}^2}$	$\mathbf{a} = \frac{c}{\Delta t} \bar{\mathbf{a}}, \quad \mathbf{g} = \frac{c}{\Delta t} \bar{\mathbf{g}}$
Hydrodynamic force	\mathbf{F}_{hydro}	$\bar{\mathbf{F}}_{hydro}$	$\mathbf{F}_{hydro} = \rho_0 c^2 \Delta x \bar{\mathbf{F}}_{hydro}$
Mass	m_p	\bar{m}_p	$m_p = \rho_0 \Delta x^2 \bar{m}_p$
Stiffness	k_n	\bar{k}_n	$k_n = c^2 \bar{k}_n$

第6章 連成計算手法の妥当性の検証

6.1 緒言

流体中における粒子（群）の重力沈降は、自然現象のみでなく石油工学、土木工学および化学工学など様々な工学分野において広く観察することができる問題である (Davis and Acrivos, 1985)。この問題に関して、長年、理論的あるいは実験的に研究がなされてきた。近年では、数値シミュレーションを用いた単一粒子の沈降、二粒子および粒子群の干渉沈降などの固液二相問題への取り組みが進んでいる (Qi, 1999)。

6.1.1 既往の研究

Brady and Bossis (1988) は、ストークス (Stokes) 流れ中における粒子運動シミュレーションを開発し、極めて小さい Reynolds 数でのコロイド粒子の挙動に対して適用した。また Chang and Powell (1993) も、球状粒子の 2 つの浮遊モードについて計算している。しかしながら、有限の Reynolds 数を持つ流れを取り扱う場合には、慣性項は固体粒子と流体の運動に大きな影響を及ぼすため、Navier-Stokes 方程式を解く手法が妥当である (Qi, 1999)。Johnson and Tezduyar (1997) は、有限要素法を用いて、 $Re = 100$ における場合の固体粒子 100 個の管内の沈降挙動を 3 次元で計算している。

さらに、2 次元有限要素法を用いて、数百のオーダーまでの Reynolds 数での円形粒子および楕円粒子の沈降挙動、ニュートン (Newtonian) 流体のクエット (Couette) 流れやポアズイユ (Poiseuille) 流れ中での円形粒子の挙動も計算されている (Hu *et al.*, 1992; Feng *et al.*, 1994a,b; Hu, 1995)。Hu (1996) は、同じく数百のオーダーまでの Reynolds 数での円形粒子 400 個の沈降挙動とせん断流れ中での挙動に成功している。

上述した固液二相 (粒子沈降) 問題に関するシミュレーション事例は、全て有限要素法あるいは有限差分法に基づいたものである。その一方で、固液界面の取り扱いなど連成手法は異なるものの流体計算を格子ボルツマン法で解くアプローチも研究されている (Ladd, 1994a,b; Aidun and Lu, 1995; Qi, 1999; Inamuro *et al.*, 2000; Niu *et al.*, 2006; Strack and Cook, 2007; 三善, 2009)。これらは、ラグランジェ粒子あるいはラグランジェ・メッシュを用いた手法であり、固相の分散運動を直接計算できることがその利点として挙げられる。なお、単一粒子および二粒子の沈降に関する既往の研究の詳細はそれぞれ、6.3.1 および 6.4.1 で紹介することにする。

6.1.2 本研究の目的

本章では、主に格子ボルツマン法と個別要素法を連成した数値計算手法の妥当性について検討した結果について述べる。はじめに、本手法を円環状クエット流れ (Circular/Cylindrical

Couette flow) に適用し、Navier-Stokes 方程式の理論解と比較することにより、その解析精度を検証した。また同時に、固体円形粒子周りの流体運動を精度良く計算することができる最適な格子数を評価することも目的としている。これは、次章以降で述べるアプリケーションの前提として、非常に重要な予備解析となる。

次に、粘性流体中における単一円形粒子の沈降挙動を計算し、Reynolds 数の大きさに応じた沈降モードを再現した。また、この計算結果を Feng *et al.* (1994a) による計算結果と比較した。さらに、互いに影響を及ぼし合う程度に近接した状態で沈降する円形粒子2個の運動形態のシミュレーションも試みた (Ohtsuki and Matsuoka, 2009)。

6.2 円環状クエット流れ

ここでは、円環状クエット流れと呼ばれている半径 r_1 と r_2 の2つの同心円で囲まれたアニュラス部を流れる流体運動を考える。本研究では、この円環状クエット流れを計算することで連成計算手法の精度を検証することにする。この精度検証には、次の2つの利点があると考えられる。

1. 円環状クエット流れは、Navier-Stokes 方程式の理論解が存在する数少ない特殊なケースである (Kundu, 1990)。したがって、環状の流体計算領域の各格子点上での数値計算結果を理論解と比較することができる。
2. また円環状クエット流れは、直交等間隔座標系つまり格子ボルツマン法で用いる正方形格子での取り扱いが困難となる曲面境界の影響に支配されている (Cook *et al.*, 2004)。したがって、このクエット流れを計算することにより、固体円形粒子周りの流体計算の定量的評価が可能になる。

6.2.1 円環状クエット流れの理論解

Fig.6.1 に示したような円環状クエット流れの境界条件において、極座標系で Navier-Stokes 方程式を解くと、動径 r 、偏角 θ 、時刻 t における流速 $u_\theta(r, t)$ は、Eq.(6.1) のようになることが知られている (O'Neill and Chorlton, 1989)。

$$\frac{\partial u_\theta}{\partial t} = \nu \frac{\partial}{\partial r} \left\{ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (ru_\theta) \right\} \quad (6.1)$$

ここで、 ν : 動粘性係数を示す。

さらに定常状態の場合では、Eq.(6.1) は Eq.(6.2) のような理論解を持つ。

$$u_\theta(r) = Ar + \frac{B}{r} \quad (6.2)$$

$$A = \frac{\Omega_2 r_2^2 - \Omega_1 r_1^2}{r_2^2 - r_1^2}, \quad B = \frac{(\Omega_1 - \Omega_2) r_1^2 r_2^2}{r_2^2 - r_1^2} \quad (6.3)$$

ここで、 r_1 : 内側の円の半径、 r_2 : 外側の円の半径、 Ω_1 : 内側の円の角速度、 Ω_2 : 外側の円の角速度を示している。

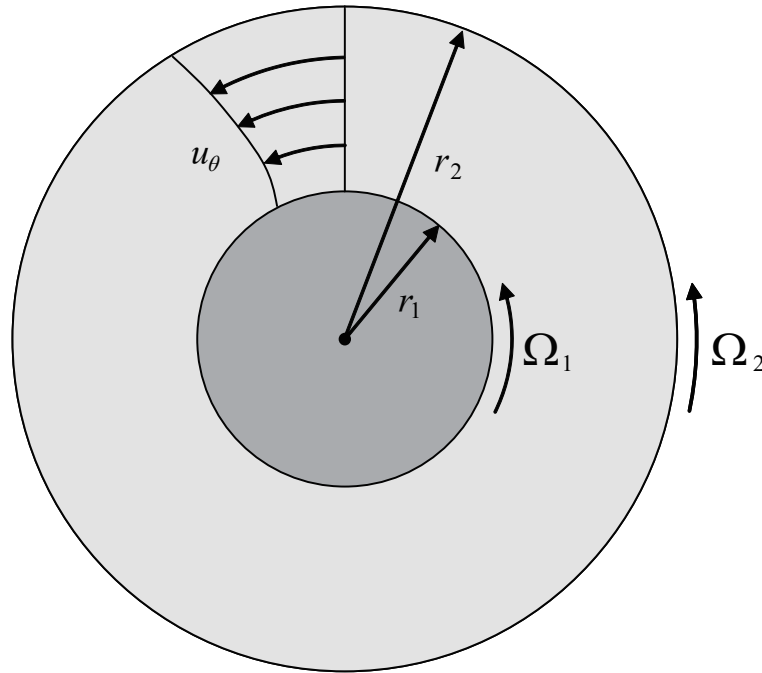


Fig. 6.1: Definition sketch for circular Couette flow

6.2.2 シミュレーション条件

本研究では、上述の円環状クエット流れにおける外側の円の角速度を $\Omega_2 = 0$ とし、内側の円のみが一定の角速度 Ω_1 で回転するケースの計算を実施する。つまり、強制的に回転運動を生じさせられた固体円形粒子周りの流体挙動を支配方程式の解と比較することを目的とする。また、格子数（離散化幅）に依存する計算精度についても考察を行ない、固体円形粒子のサイズに対する最適な格子数を検討する。 $\Omega_2 = 0$ の条件下での Eq.(6.3) は、Eq.(6.4) のようになる。したがって、求めるアニュラス部における流速分布は、Eq.(6.5) で表わされる。

$$A = -\frac{\Omega_1 r_1^2}{r_2^2 - r_1^2}, \quad B = \frac{\Omega_1 r_1^2 r_2^2}{r_2^2 - r_1^2} \quad (6.4)$$

$$u_\theta(r) = -\frac{\Omega_1 r_1^2}{r_2^2 - r_1^2} \left(r - \frac{r_2^2}{r} \right) \quad (6.5)$$

Fig.6.2 は、シミュレーションモデルの概要を描いたものである。計算領域は1辺25mmの正方形であり、この中心部に半径7.5mm(r_2)の流体領域が設定されている。さらに、流体領域の内部には、半径2.5mm(r_1)の固体円形粒子がある。固体円形粒子は回転運動のみを許容し、並進運動はしないものとする。また、流体領域と固定壁間には、バウンス・バック (Bounce-back rule) 法による滑りなし条件が課されている。

Table.6.1 および Table.6.2 は、入力パラメータを示している。固体円形粒子と流体の密度比は2.0である。また、動粘性係数 ν は Eq.(3.8) に示したように緩和時間係数 τ 、離散化

時間 Δt および格子幅 Δx の関数である。本研究では動粘性係数が一定値となるように離散化時間および格子幅を決定し、同じサイズのシミュレーションモデルを用いた 6 ケースにおける格子数依存の計算精度を求める。なお、格子ボルツマン法と個別要素法の離散化時間は、共通の値を用いている。

Fig.6.3(a-b) はそれぞれ、Case1 および Case6 におけるシミュレーションモデルを示している。 $\zeta (= 2r_1/\Delta x)$ は固体円形粒子の直径に対する格子数を示しており、Case1 は 5 格子、Case6 は 15 格子である。

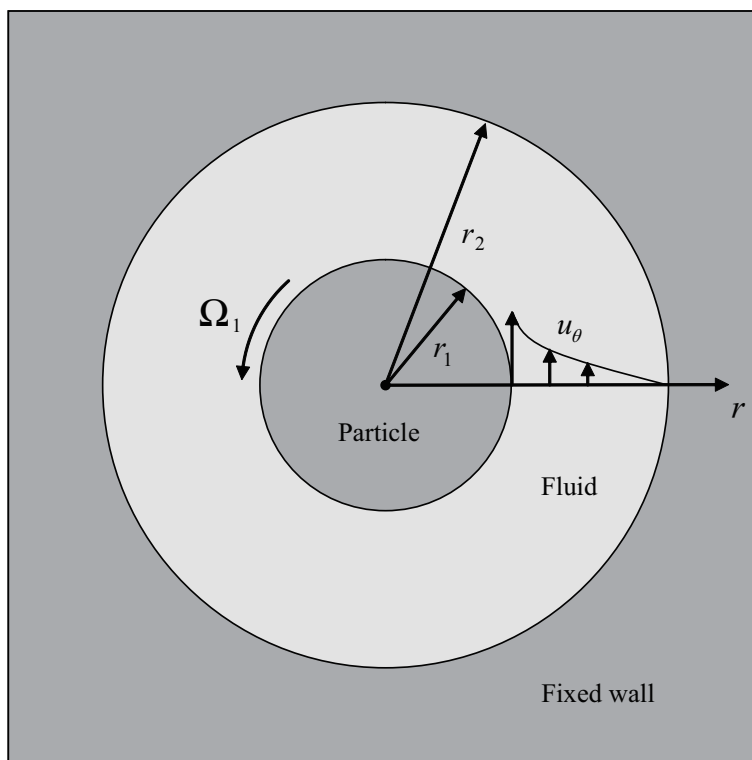


Fig. 6.2: Definition sketch for circular Couette flow in this study

Table 6.1: Input parameters for the simulation of circular Couette flow # 1

DEM	Solid density	2.0×10^3	[kg/m ³]
LBM	Fluid density	1.0×10^3	[kg/m ³]
	Relaxation time	1.0	[-]

6.2.3 シミュレーション結果

Fig.6.4 は、アニュラス部での半径方向の断面における流速分布である。図中の実線は、Eq.(6.5) で示した Navier-Stokes 方程式の理論解を示している。理論解および各ケースの計

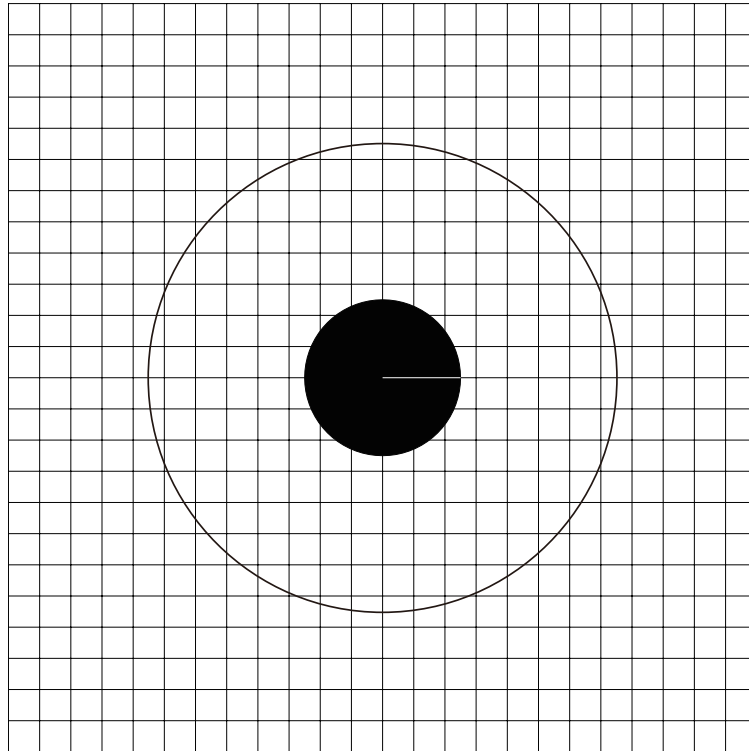
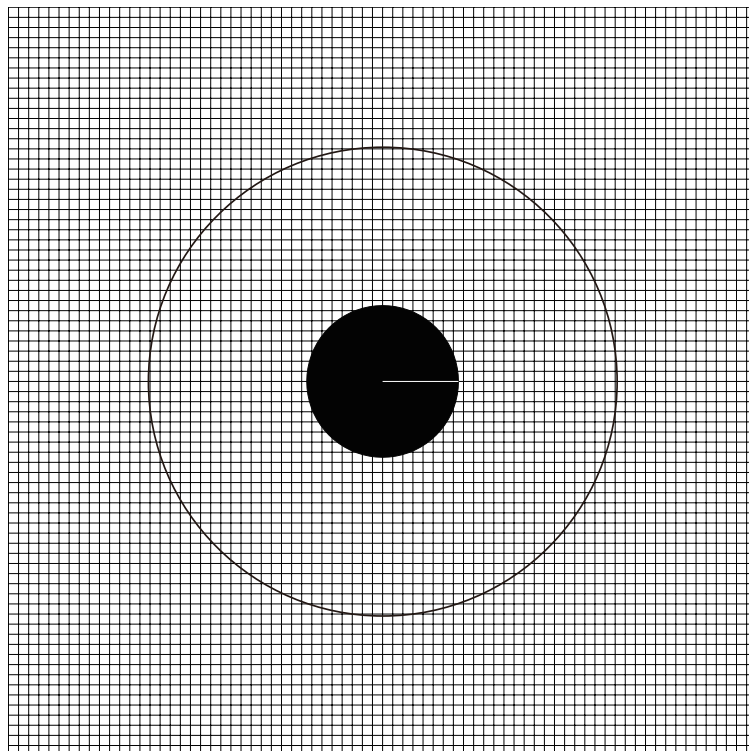
(a) Case1 ($\zeta = 5$)(b) Case6 ($\zeta = 15$)

Fig. 6.3: Model for the simulation of circular Couette flow

Table 6.2: Input parameters for the simulation of circular Couette flow # 2

	Number of nodes [-]	Discrete time step Δt [sec]	Lattice spacing Δx [m]
Case1	25×25	1.000×10^{-4}	1.000×10^{-3}
Case2	35×35	5.102×10^{-5}	7.143×10^{-4}
Case3	45×45	3.086×10^{-5}	5.556×10^{-4}
Case4	55×55	2.066×10^{-5}	4.545×10^{-4}
Case5	65×65	1.479×10^{-5}	3.846×10^{-4}
Case6	75×75	1.111×10^{-5}	3.333×10^{-4}

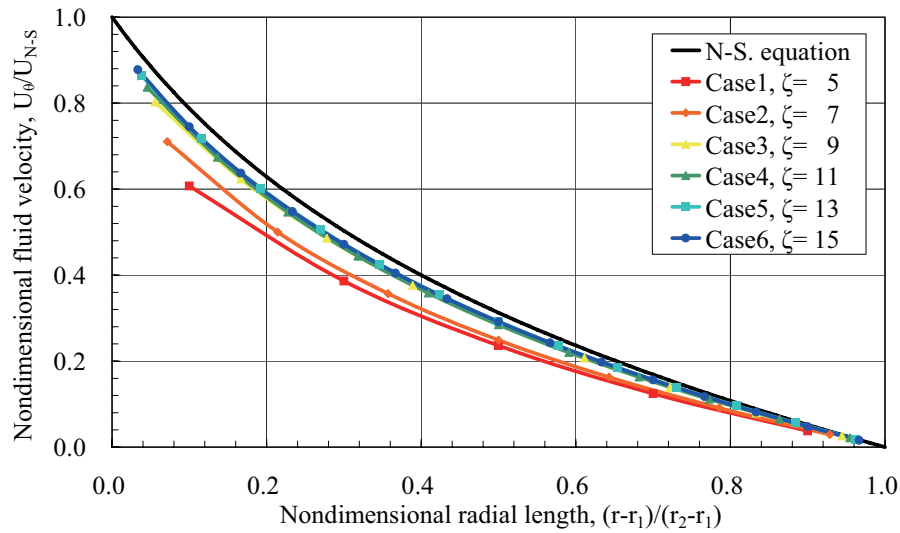


Fig. 6.4: Azimuthal component of fluid velocity

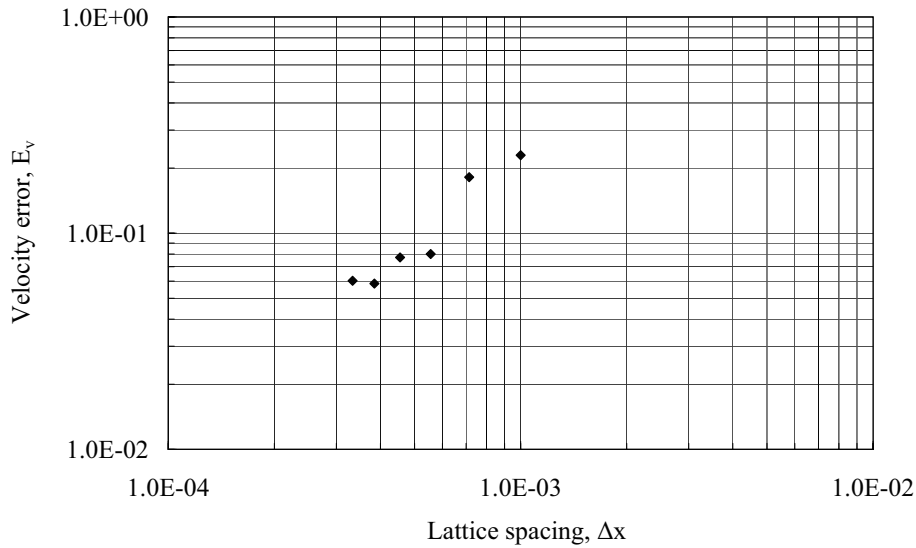


Fig. 6.5: Global error of fluid velocity

算結果は、理論解の値 U_{N-S} で無次元化したものである。また、Fig.6.5 は、アニュラス領域全体の流速分布の理論解と計算値の誤差 E_v である。なお、誤差は以下に示す Eq.(6.6) で求めた。

$$E_v = \frac{\sqrt{\sum \|(\mathbf{u}_{sim} - \mathbf{u}_{N-S})_{n_i}\|^2}}{\sqrt{\sum \|(\mathbf{u}_{N-S})_{n_i}\|^2}} \quad (6.6)$$

ここで、 \mathbf{u}_{sim} : 本研究によって得られた流速、 \mathbf{u}_{N-S} : 流速の理論解、 n_i : アニュラス部の格子数を示している。

固体円形粒子の直径に対する格子数 ζ の増加に対応して、計算値が Navier-Stokes 方程式の理論解に漸近する結果が得られた。また、格子数がおおよそ $\zeta = 9$ 以上で理論値との誤差が数 % 以内となり、固体円形粒子周りの流体挙動が精度良く計算できることがわかった。なお、本計算では、固体円形粒子と流体領域との境界条件には、Noble & Torczynski モデル (Noble and Torczynski, 1998; Feng *et al.*, 2007; Han *et al.*, 2007) を用いている。一方、流体とその外側に位置する固定壁との境界には従来通り滑りなし条件であるバウンス・バック (Bounce-back rule) 法を用いている。したがって、固定壁近傍における流体運動は階段状の境界条件の下での計算であり、ここで示した計算結果は固定壁近傍の誤差を含むことに注意を要する。

6.3 単一粒子の沈降挙動

6.3.1 Reynolds 数に対応する沈降挙動

Feng *et al.* (1994a) は、2次元有限要素法を用いて、平行な壁面に挟まれた鉛直方向のチャンネル内における単一粒子の沈降挙動についての研究を行ない、次の知見を報告している。

単一円形粒子は、Reynolds 数の大きさに応じて、5 つの異なる沈降挙動形態 (Regime A-E) を示す。

Regime A ($0.1 < Re < 2$): 円形粒子は、その初期位置とは無関係に、チャンネルの中心軸上の平衡点へ向かって単調に沈降する。中心軸から離れた位置から放たれた円形粒子は回転運動をしながら沈降し、やがて中心軸上に達するとその回転は止まる。

Regime B ($3 < Re < Re_{crit}$): Regime A と同様、チャンネルの中心軸上に平衡点が存在する。しかし、円形粒子は平衡点を一度越えた後、減衰振動をしながら沈降する。

Regime C ($Re_{crit} < Re < 60$): Reynolds 数が臨界値を超えると、チャンネルの中心軸上にあった平衡点が不安定となる。円形粒子は、中心軸からわずかに外れた平衡点を中心とした小さい振幅の振動を繰り返しながら沈降する。この中心軸と平衡点との乖離は Reynolds 数の増加に伴い大きくなる。

Regime D ($60 < Re < 300$): Regime C と比較して、中心軸と平衡点との乖離が大きくなる。円形粒子は、この平衡点を中心として、より大きな振幅の振動を繰り返しながら沈降する。

Regime E ($Re > 300$): 規則的振動から不規則な振動へ遷移し、カオスの運動と数値計算上の影響を区別することが困難な沈降形態をとる。

なお、Feng *et al.* (1994a) は、 $L = 1.5D, 4D, 8D$ の 3 条件の下で計算を行なっている。ここで、 L はチャンネルの幅、 D は円形粒子の直径を示す。特に $L = 4D$ の場合、 Re_{crit} は 20 程度となることも示している。本研究では、幾つかの Reynolds 数に対応する沈降形態に関して、連成計算手法による計算結果と Feng *et al.* (1994a) の結果を比較した結果について報告する。なお、ここでの Reynolds 数は代表速度を沈降粒子の終端速度、代表長さを円形粒子の直径 D で定義したものである。

6.3.2 シミュレーション条件

Fig.6.6 は、シミュレーションモデル (初期状態) を示している。 x 軸は左側壁から鉛直方向下向き、 y 軸は水平方向右向きに設定されている。チャンネルの幅 L は、円形粒子の直径 D を基準にして、 $L = 1.5D$ とした。これは Feng *et al.* (1994a) による計算と同じ条件である。また円形粒子は、チャンネルの中心軸からずらして配置され、その y 座標は $0.6D$ である。ただし、実際の計算領域は x 軸方向にも有限であり、チャンネルには上壁および下壁が存在する。チャンネルの幅は 18mm、高さは 390mm である。このとき、円形粒子の直径は 12mm である。また円形粒子は、上壁から十分離れた位置に配置され、その中心座標は左側壁より 7.2mm、上壁より 120mm とした。

Table.6.3 は、入力パラメータを示している。また、円形粒子と流体の密度比は 2.0 である。緩和時間係数 τ は、流体の粘性を決定するパラメータの 1 つである。Eq.(3.8) が示すように、この値を変化させることによって、様々な動粘性係数を有する流体を得ることができる。Table.6.4 は、シミュレーションに用いた緩和時間係数 τ および、それぞれの値に対応する動粘性係数 ν を示している。

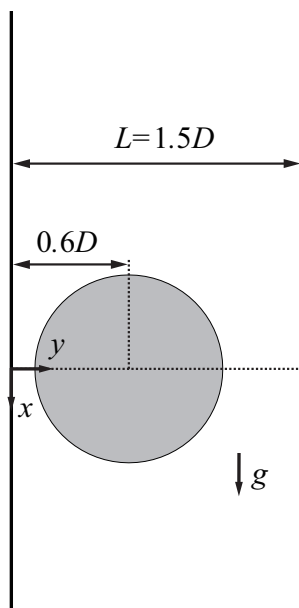


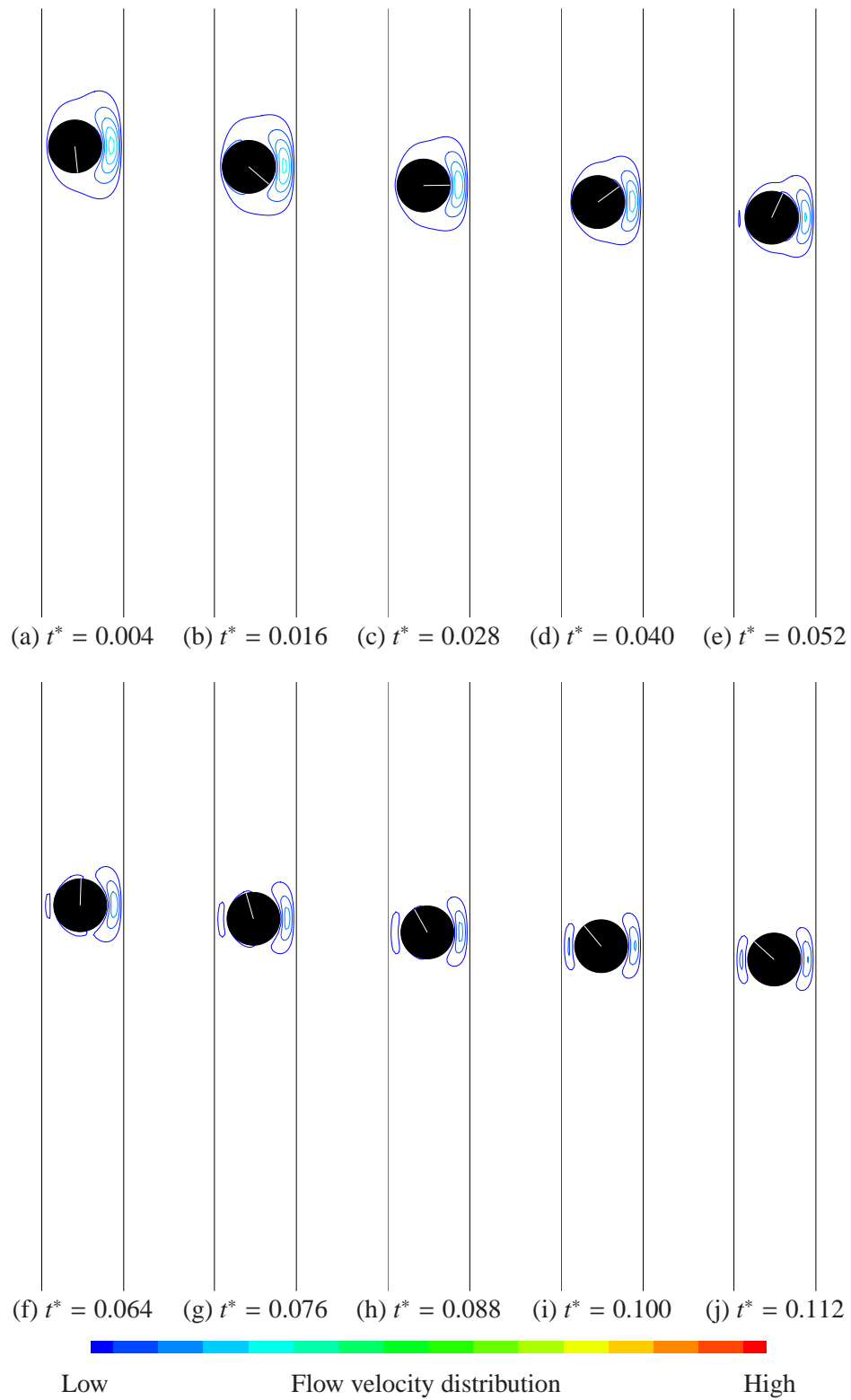
Fig. 6.6: Model for the simulation of a settling circular particle

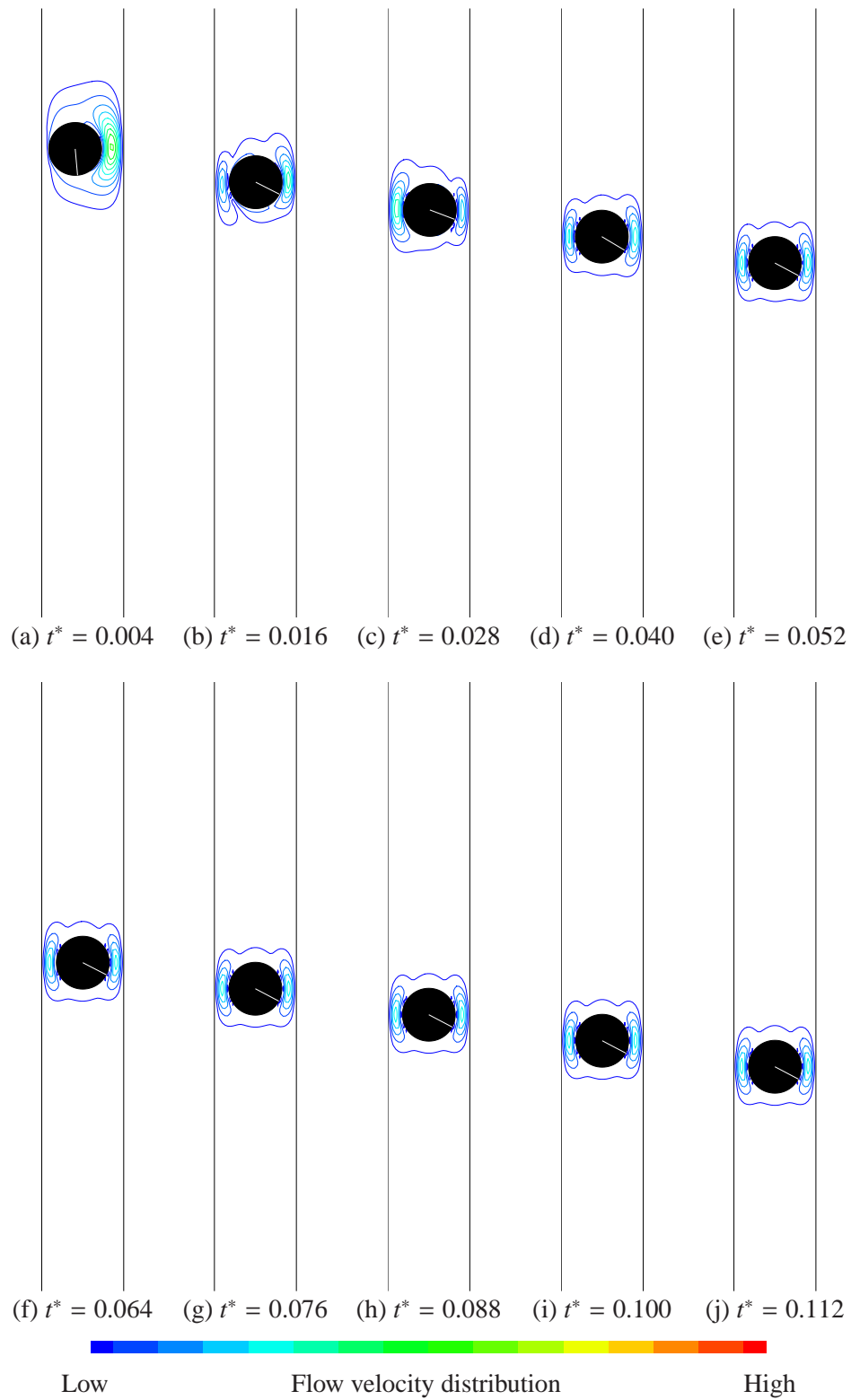
Table 6.3: Input parameters for the simulation of a settling circular particle

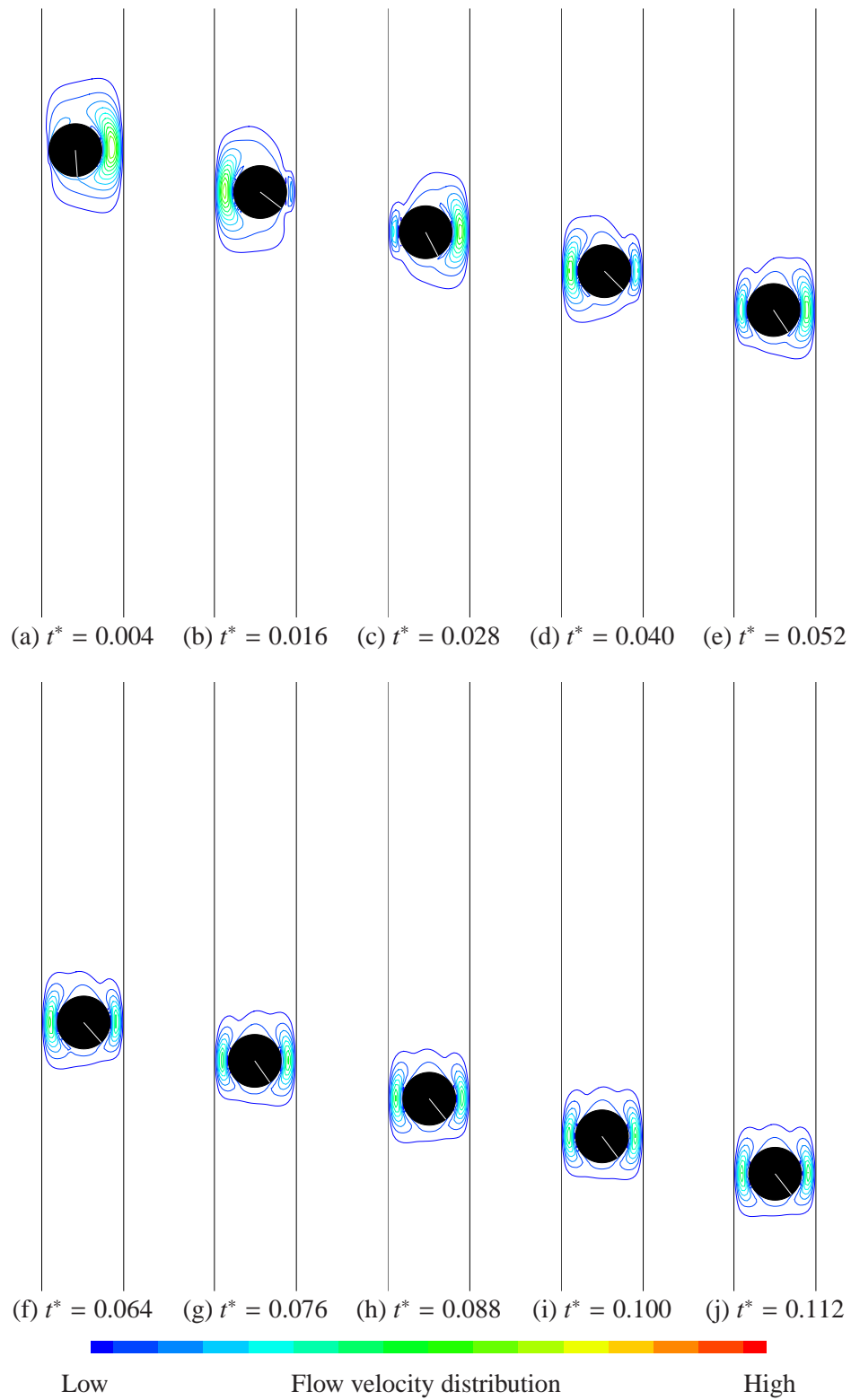
DEM	Discrete time step	3.6×10^{-5}	[sec]
	Solid density	2.0×10^3	[kg/m ³]
	Particle radius	6.0×10^{-3}	[m]
LBM	Discrete time step	3.6×10^{-5}	[sec]
	Fluid density	1.0×10^3	[kg/m ³]
	Number of nodes	652×32	[-]
	Lattice spacing	6.0×10^{-4}	[m]
	Gravitational acceleration	9.8	[m/sec ²]
	Simulation duration	1.8×10^1	[sec]

Table 6.4: Relaxation times and kinematic viscosity coefficients

	Relaxation time τ [-]	Kinematic viscosity coefficient ν [m ² /sec]
Case1	0.570	2.33×10^{-4}
Case2	0.533	1.10×10^{-4}
Case3	0.523	7.66×10^{-5}

Fig. 6.7: Sedimentation behavior of a single circular particle; Case1 ($Re = 0.67$)

Fig. 6.8: Sedimentation behavior of a single circular particle; Case2 ($Re = 2.98$)

Fig. 6.9: Sedimentation behavior of a single circular particle; Case3 ($Re = 6.08$)

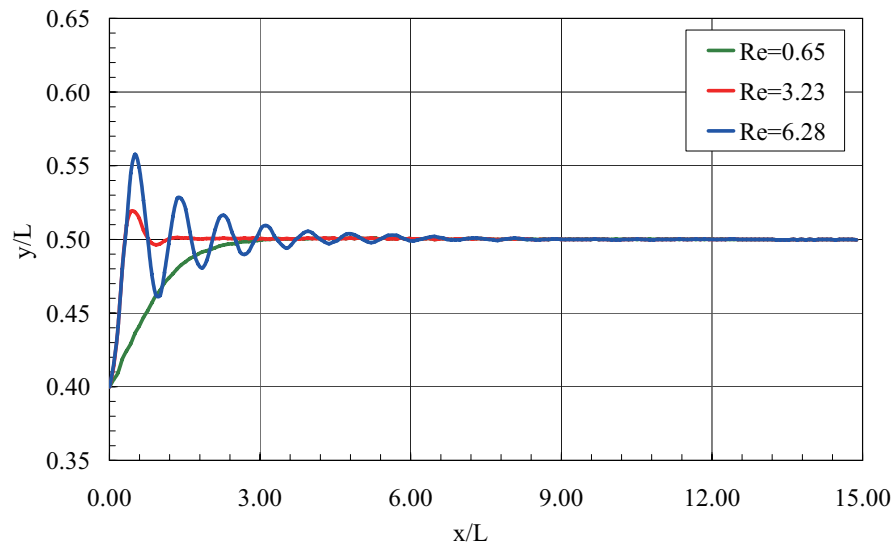
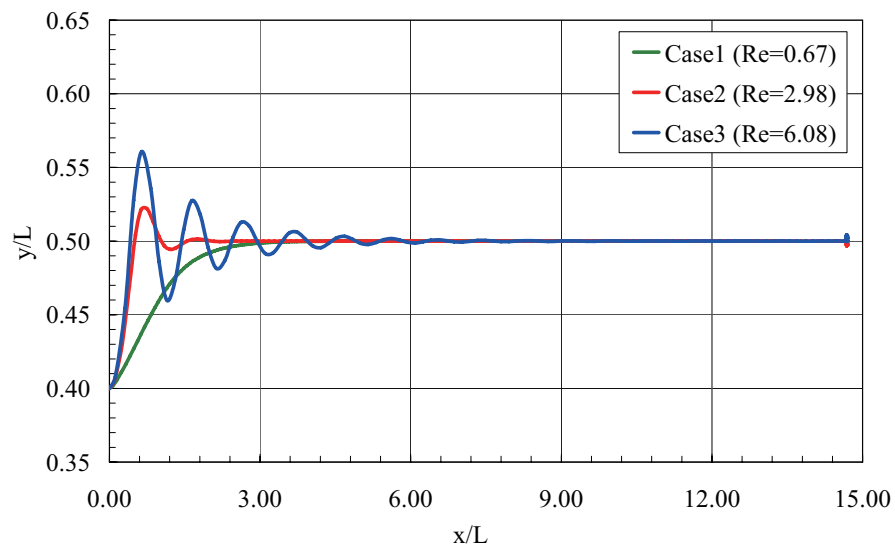
Fig. 6.10: Settling particle trajectories computed by FEM (Feng *et al.*, 1994a)

Fig. 6.11: Settling particle trajectories in this study

6.3.3 シミュレーション結果

Fig.6.7、Fig.6.8 および Fig.6.9 はそれぞれ、Case1 から Case3 の円形粒子の沈降挙動を示したものである。ラインコンターは、チャンネル内の流速分布を表している。各図とも (a) $t^* = 0.004$ (2,000step) から (j) $t^* = 0.112$ (56,000step) までの結果である。ここで、 t^* は計算終了ステップ数で無次元化した時間を意味する。平衡点へ推移する過程では、円形粒子周りの流速分布が左右非対称であり、円形粒子は不安定な状態であると言える。また、このとき円形粒子は半時計回りに回転していることがわかる。その後、平衡点上で安定すると、この回転運動は無くなり、 x 軸方向の並進運動のみとなる。

次に Feng *et al.* (1994a) の計算結果 (Fig.6.10) と、本研究のシミュレーション結果 (Fig.6.11) を比較した。これは、6.3.1 で述べた Regime A と Regime B に分類される沈降挙動形態であり、円形粒子はチャンネルの中心軸上にある平衡点に向かって沈降している。Case1 ($Re = 0.67$) は単調に平衡点へ向かって沈降する。また Case2 ($Re = 2.98$) では平衡点を一度大きく通過した後、平衡点上を沈降する。さらに Case3 ($Re = 6.08$) では、平衡点上を何度も通過する減衰振動を繰り返しながら平衡点上を沈降する。それぞれの Reynolds 数に対応する沈降粒子の軌跡は、Feng *et al.* (1994a) の計算結果と似た傾向を示していることがわかる。

本研究では、緩和時間係数 τ を減少させることにより、流体の動粘性係数 ν を低下させている（これは Reynolds 数の増加に相当する）。したがって、流体粘性が最も小さい条件である Case3 では、円形粒子に作用する抗力が小さく、平衡点を何度も通過する結果になったと考えられる。

6.4 二粒子の沈降挙動

6.4.1 DKT 現象

流体中を沈降する複数個の固体粒子（群）の沈降挙動を考える上で、粒子間相互作用はその系全体を支配する主要な要因の 1 つであると思われる。DKT (Drafting, Kissing, and Tumbling) 現象 (Joseph *et al.*, 1987; Fortes *et al.*, 1987) は、水で満たされた実験装置内の固体粒子運動を観察し、発見されたものである。この現象は、次に示すように沈降する複数の固体粒子の離間間隔によって、Drafting、Kissing および Tumbling の 3 つのステージから成り立っている。ここでは、2 個の固体粒子間における DKT 現象について述べることにする。

Drafting stage: 先行して沈降する固体粒子の背後に形成される後流領域が低圧力場となる。このとき、後流領域内に進入した後続の固体粒子の沈降速度は加速され、先行粒子との離間距離が減少する。

Kissing stage: 後続して沈降する固体粒子が先行粒子に接近あるいは接触する。このときの 2 粒子は、ほぼ鉛直方向に並び、不安定な位置関係となる。

Tumbling stage: 先行粒子は水平（チャンネルの側壁）方向に押し出され、後続して沈降していた固体粒子との位置関係が入れ替わる。

一定の条件を満足する場合には、このプロセスは連続的に繰り返され、これを DKT cycle と呼ぶ。なお、この DKT 現象は、慣性力が重要となる有限の Reynolds 数を持つ流れ場でのものであり、比較的ゆったりと流れるクリープ流 (Creeping flow) の場合には生じることはない (Qi, 1999)。

この DKT 現象の数値シミュレーションからのアプローチは、Hu *et al.* (1992) および Feng *et al.* (1994a) による 2 次元有限要素法を用いた計算を端緒としている。Johnson and Tezduyar (1996) および Johnson and Tezduyar (1997) は、3 次元有限要素法での計算へ発展させている。また 2 次元有限体積法による計算事例もある (Ritz and Caltagirone, 1999)。さらに、DLM/FD (Distributed Lagrange multiplier/fictitious domain) 法と用いた計算事例も報告されている (Glowinski *et al.*, 1999; Patankar *et al.*, 2000; Shao *et al.*, 2005)。ここで、DLM/FD 法とは、流体の Euler メッシュ中に剛体あるいは弾性体の Lagrange メッシュを埋め込んだ定式化がなされ、両メッシュ間での速度の内挿と力の分散が行われる解析手法である。また、格子ボルツマン法とラグランジェ粒子との連成手法による DKT 現象の再現も行なわれている (Qi, 1999; 三善, 2009)。

6.4.2 シミュレーション条件

Fig.6.12 は、シミュレーションモデル (初期状態) を示している。6.3.2 と同様、 x 軸は左側壁から鉛直方向下向き、 y 軸は水平方向右向きに設定されている。2 つの円形粒子は、チャンネルの中心軸からずらして x 軸方向に並べて配置される。下側の円形粒子 (灰色) および上側の円形粒子 (黒色) の直径をそれぞれ、 D_1 および D_2 とする。これらの円形粒子の y 座標および離間間隔はともに $2D_1$ である。チャンネルの幅 L は、下側に配置された円形粒子の直径 D_1 を基準にして、 $L = 8D_1$ とした。ただし、実際の計算領域は x 軸方向に有限であり、チャンネルには上壁および下壁が存在する。チャンネルの幅は 96mm、高さは 1000mm である。このとき、円形粒子の直径は 12mm である。上側の円形粒子の中心座標は、左側壁より 24mm、上壁より 20mm とした。また下側の円形粒子の中心座標は、左側壁より 24mm、上壁より 44mm である。

また、2 つの円形粒子の直径が異なる場合における DKT 現象の発生条件を検証するため、以下の 5 ケースの計算を実施した (Table.6.5)。ここで、初期状態での上側の円形粒子と下側の円形粒子の直径比を $R (= D_2/D_1)$ と定義する。Table.6.6 は、入力パラメータを示している。円形粒子と流体の密度比は 2.5 である。

6.4.3 シミュレーション結果

Fig.6.13 から Fig.6.18 はそれぞれ、Case1 から Case3 で生じた 1 回目および 2 回目の DKT cycle を示している。各図を構成する (a) から (e) のスナップショットは、DKT 現象の発生直前から発生直後までの結果を描いたものである。 t^* は計算終了ステップ数で無次元化した時間を意味する。ラインコンターは、チャンネル内の流速分布を表している。なお、Reynolds 数は、初期状態にて上側に配置した円形粒子 (黒色) によって定義している。したがって、代表速度を沈降粒子の終端速度、代表長さを円形粒子の直径 D_2 とした。どのケースも概ねチャンネルの中心軸上で接近し、両者の位置が入れ替わる過程を再現することができた。

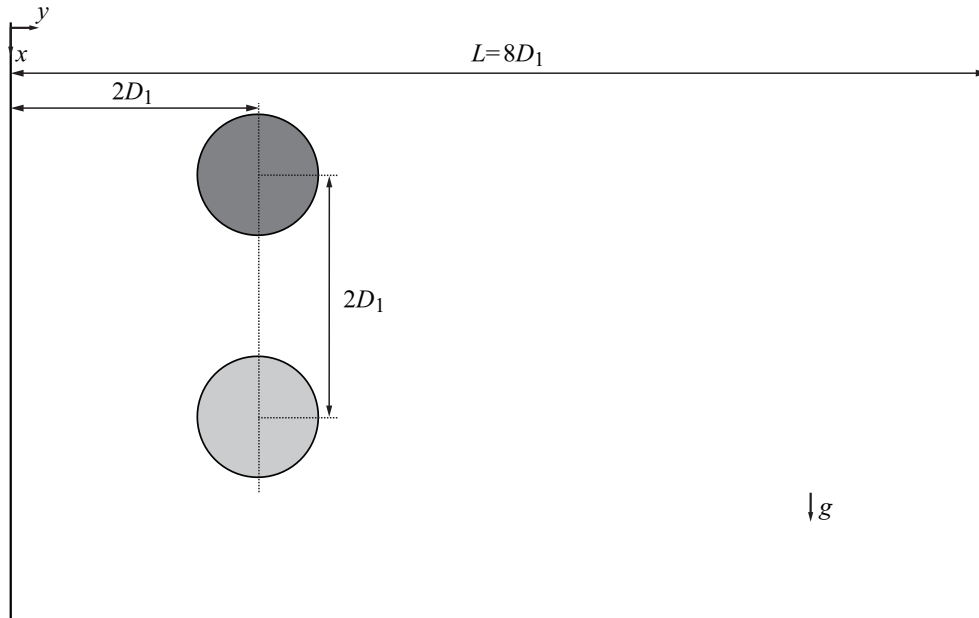


Fig. 6.12: Model for simulating the DKT cycle

Table 6.5: Diameter ratio R between two settling circular particles

	Lower particle diameter D_1 [m]	Upper particle diameter D_2 [m]	Diameter ratio R [-]
Case1	1.20×10^{-2}	1.20×10^{-2}	1.00
Case2	1.20×10^{-2}	1.26×10^{-2}	1.05
Case3	1.20×10^{-2}	1.32×10^{-2}	1.10
Case4	1.20×10^{-2}	1.38×10^{-2}	1.15
Case5	1.20×10^{-2}	1.44×10^{-2}	1.20

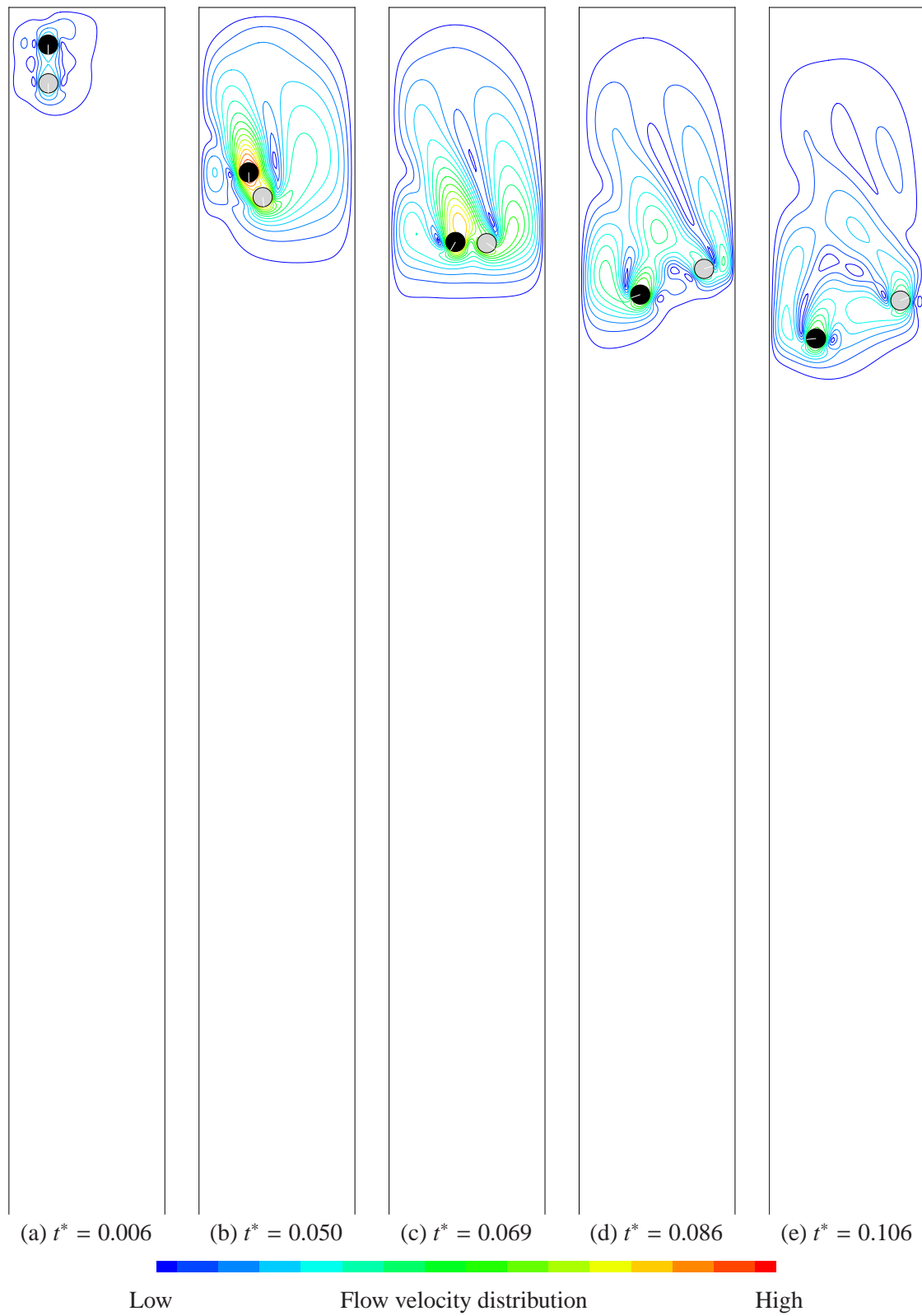
Table 6.6: Input parameters for the simulation of two settling circular particles

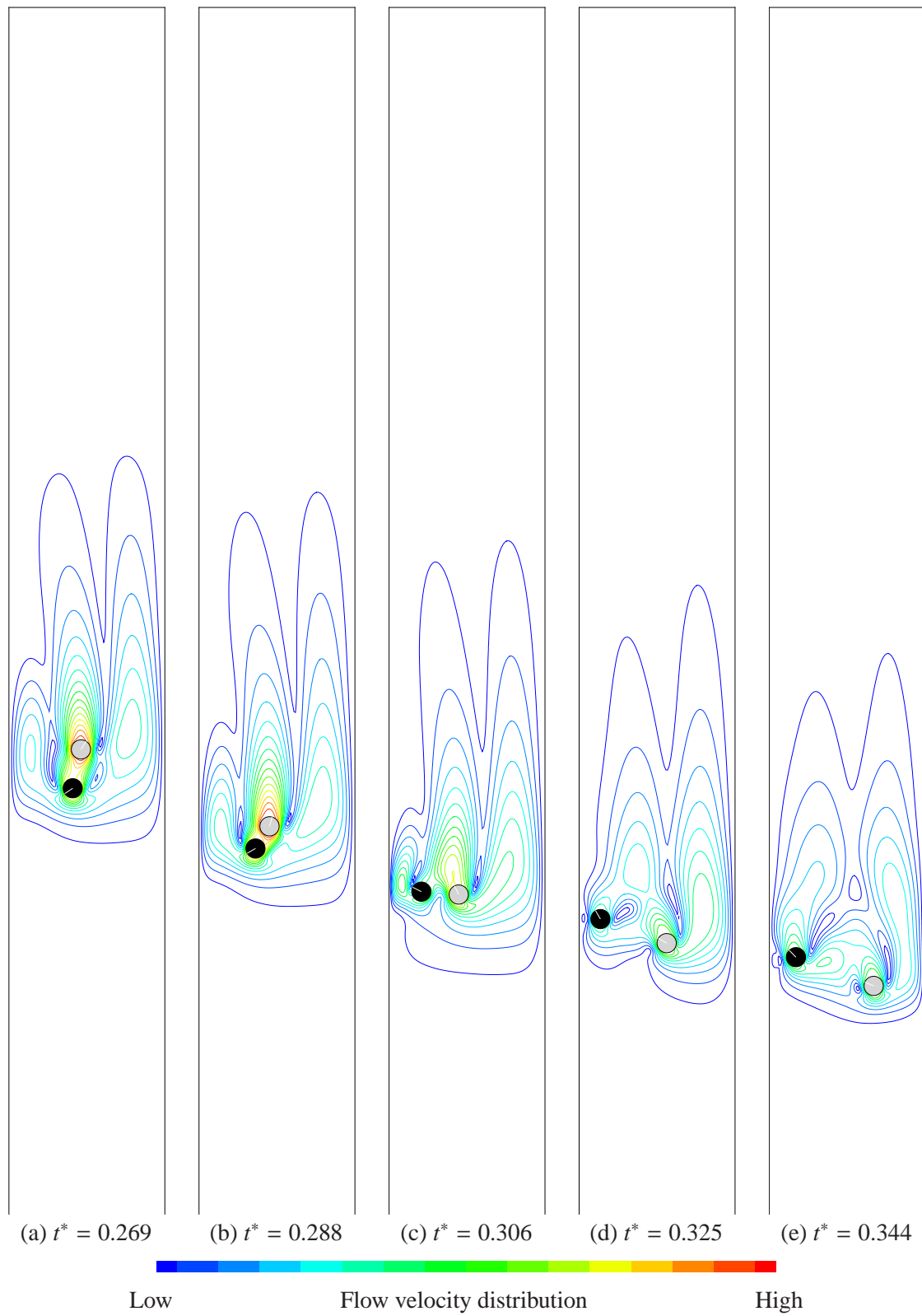
DEM	Discrete time step	5.0×10^{-6}	[sec]
	Solid density	2.5×10^3	[kg/m ³]
	Friction coefficient between particles	0.25	[-]
	Friction coefficient between particle and wall	0.17	[-]
	Spring stiffness (normal)	2.5×10^6	[N/m]
	Spring stiffness (tangential)	1.0×10^6	[N/m]
	Damping coefficient (normal)	1.0	[Nsec/m]
	Damping coefficient (tangential)	0.63	[Nsec/m]
LBM	Discrete time step	1.0×10^{-4}	[sec]
	Fluid density	1.0×10^3	[kg/m ³]
	Number of nodes	1502×98	[-]
	Lattice spacing	1.0×10^{-3}	[m]
	Relaxation time	0.65	[-]
	Gravitational acceleration	9.8	[m/sec ²]
	Simulation duration	8.0	[sec]

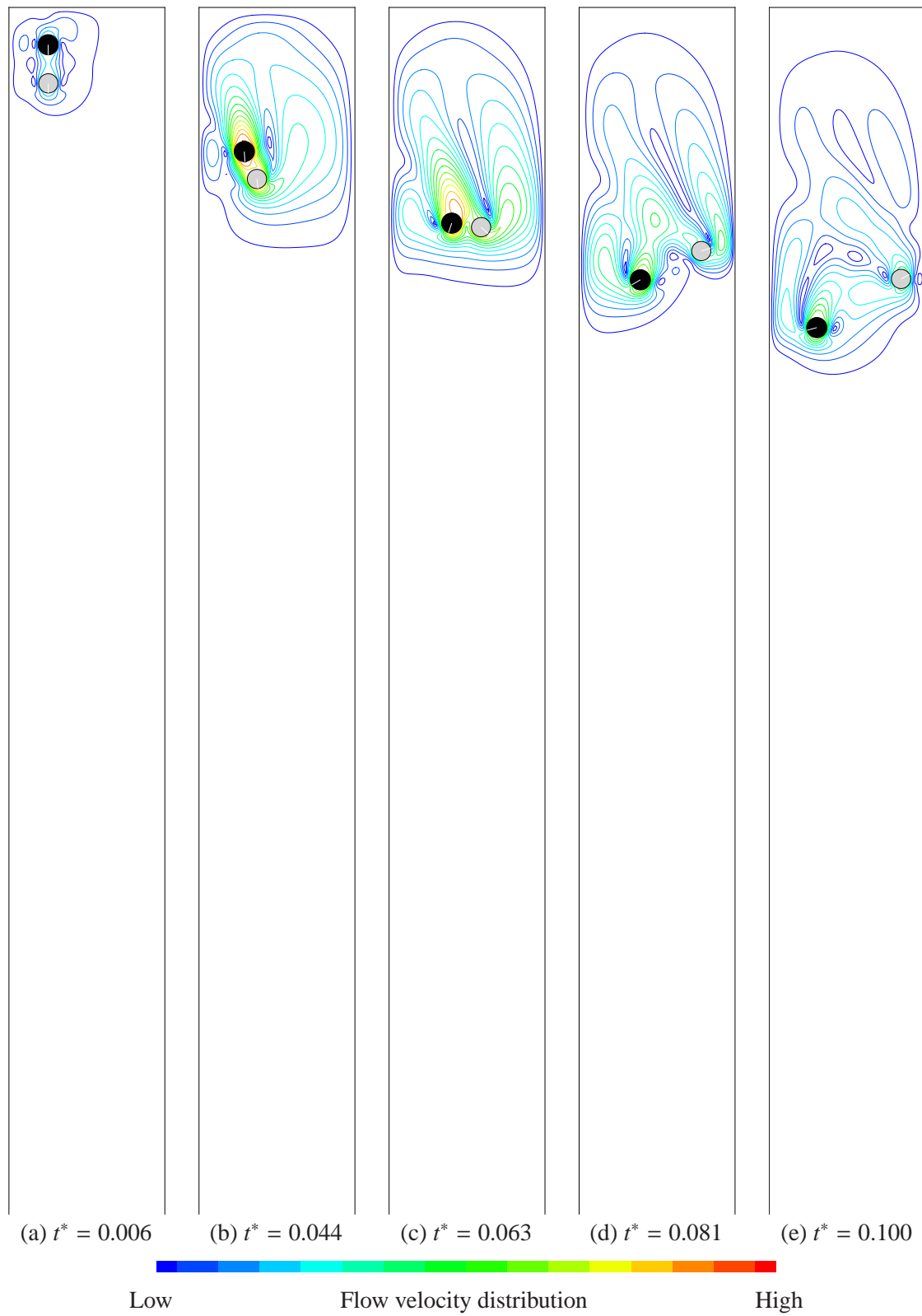
また Fig.6.19 は、円形粒子の中心間距離 δd の経時変化を示している。つまり、この中心間距離が極小値となる時刻において、Kissing stage に到達したことを表わす。各ケースの沈降開始から $t^* = 0.700$ までの中心間距離の最小値を D_{min} とすると、それぞれ 1.318 (Case1)、1.071 (Case2)、1.050 (Case3) となった。つまり、今回の計算における円形粒子は、接近はするものの、接触 ($D_{min} = 1.000$) には至っていないことがわかる。

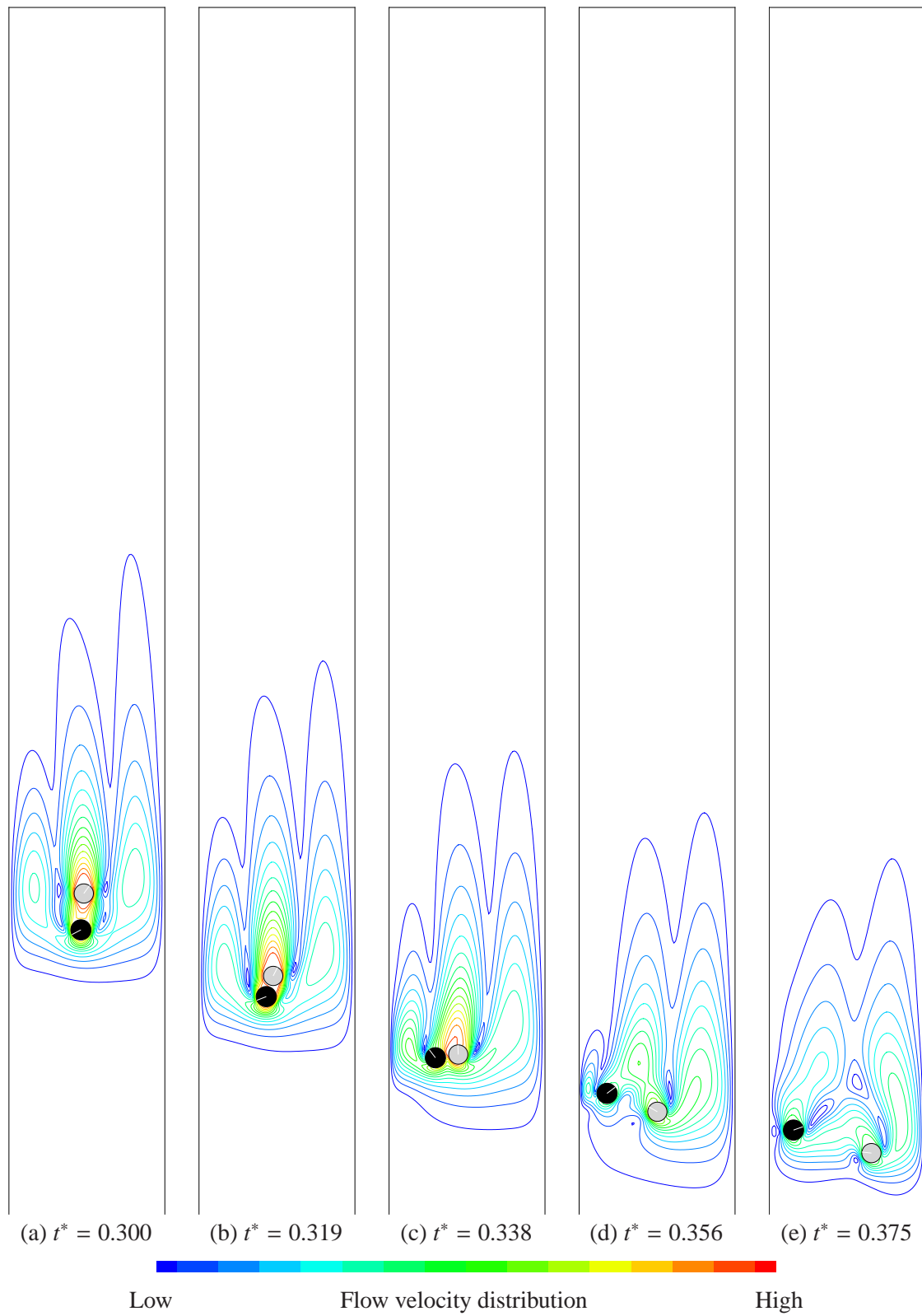
同じ直径を有する円形粒子 2 個を沈降させた Case1 では、3 回の DKT cycle が生じたことを確認することができる (Fig.6.20)。Fig.6.21、Fig.6.22 はそれぞれ、円形粒子に作用する流体力および円形粒子の沈降速度の x 軸成分、 y 軸成分を示している。流体力および沈降速度はそれぞれ、初期状態で下側に配置した円形粒子に作用する流体力の y 軸成分の ($t^* = 0.250$ までの) 最大値 $|F_{hydro-y}|_{max}$ および円形粒子の沈降速度の y 軸成分の最大値 $|V_y|_{max}$ で無次元化されている。特に x 軸成分に着目すると、後続の黒色粒子と比較して、先行の灰色粒子により大きな抗力が作用している ($t^* = 0.000 - 0.063$)。このため、後続の黒色粒子の沈降速度が灰色粒子の沈降速度を超え、両者の離間距離が縮まったことがわかる。その後、互いに水平方向に並んだ時刻において、ほぼ等しい抗力が作用している ($t^* = 0.069$)。さらに、両者の位置が入れ替わると、黒色粒子への抗力が卓越する ($t^* = 0.075 - 0.100$)。

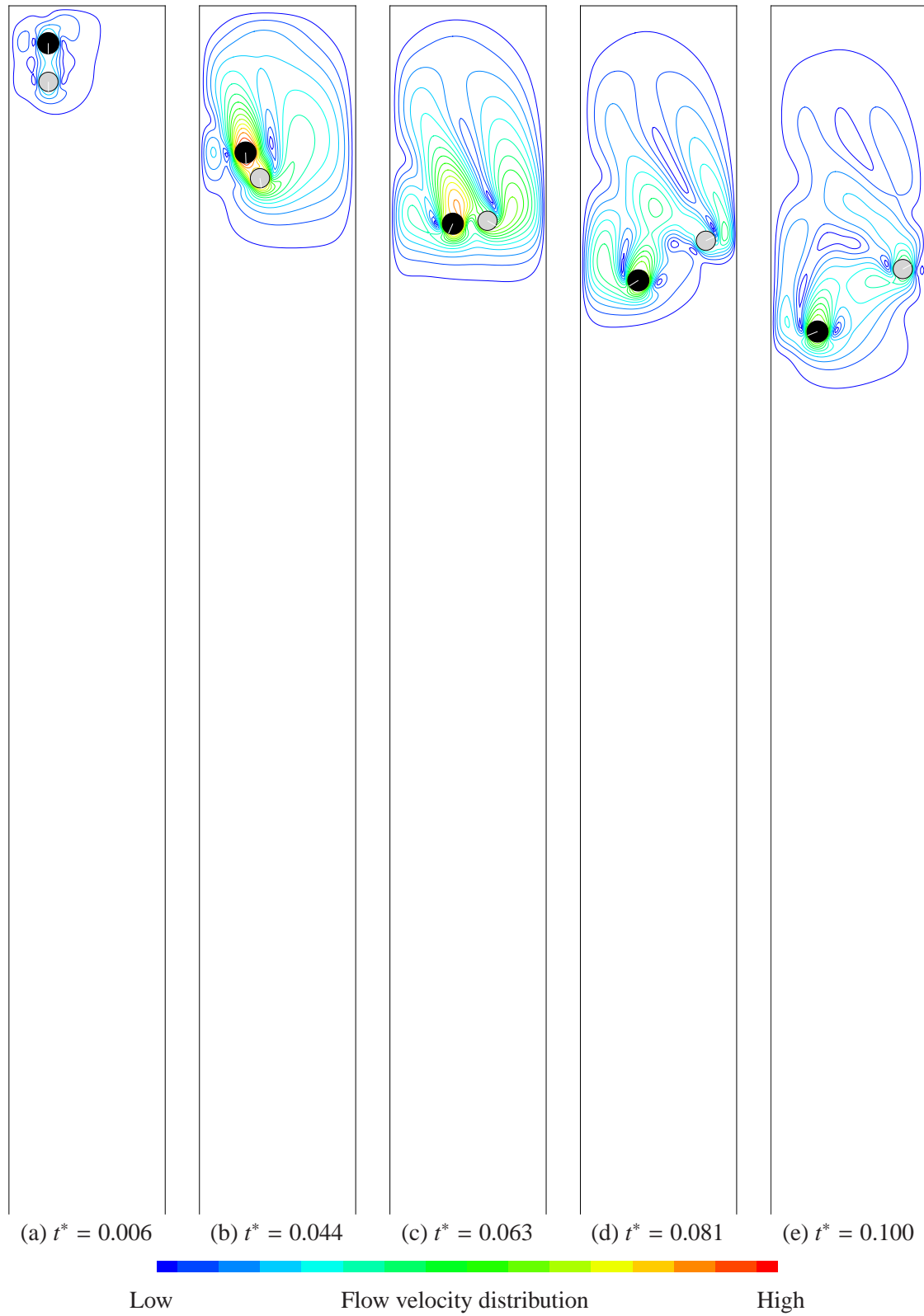
Fig.6.23 は、2 つの円形粒子の直径比 R が沈降粒子の相互作用に与える効果についてまとめたものである。縦軸は、黒色粒子と灰色粒子の位置の x 軸成分の差 δx である。 δx の符号が変わることは、DKT cycle が生じたことを意味する。どのケースにおいても、およそ $t^* = 0.063$ 経過時に第 1 回目の DKT cycle が起きていることがわかる。ただし、Case4 ($R = 1.15$) 以上に円形粒子のサイズに差異があると、第 2 回目以降の DKT cycle は起きない結果となった。つまり、本条件下において、DKT cycle の発生に関する R の臨界値は、 $1.10 < R < 1.15$ の間にあるものと推測される。

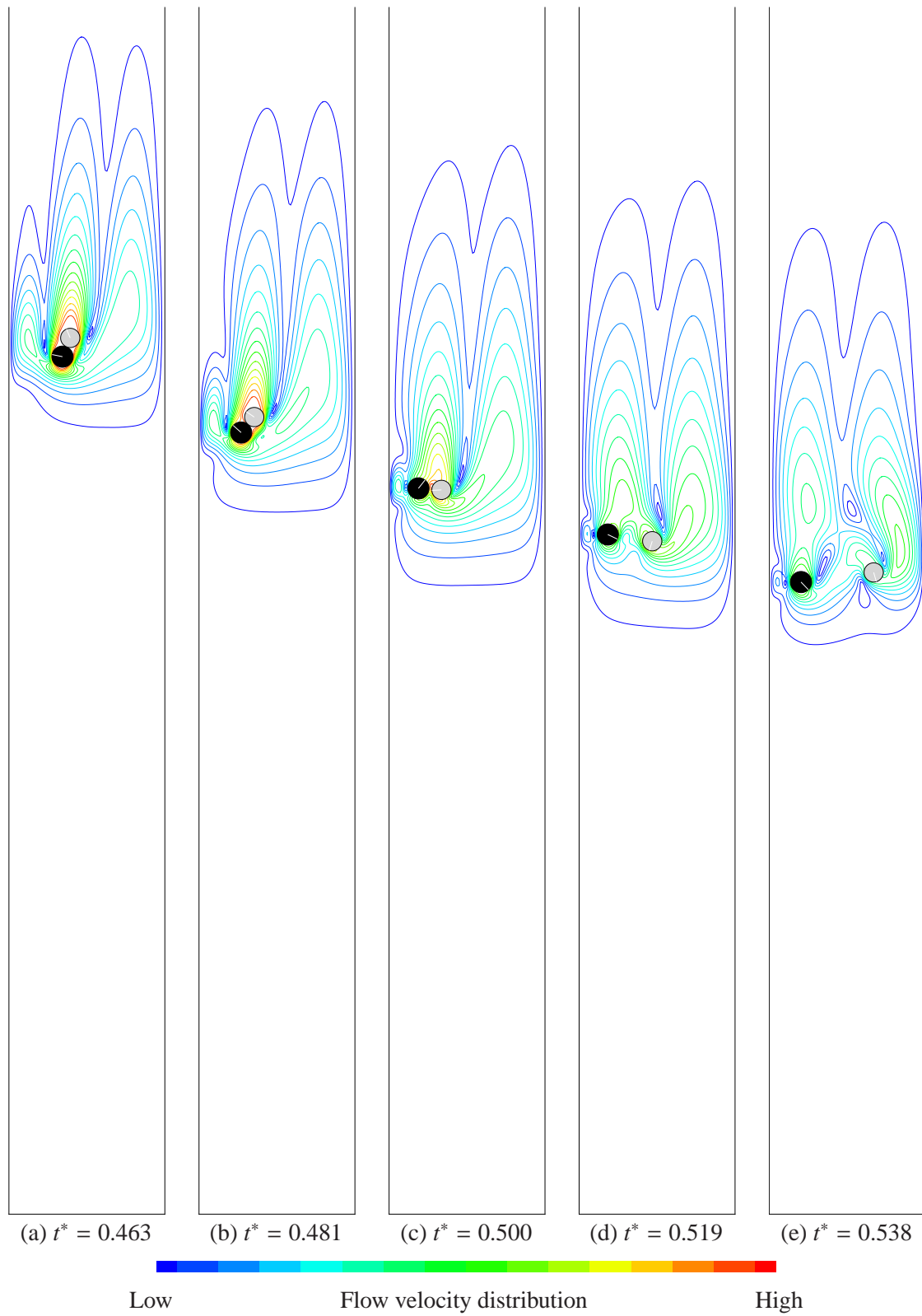
Fig. 6.13: First DKT cycle; Case1 ($R = 1.00$, $Re = 7.49$)

Fig. 6.14: Second DKT cycle; Case1 ($R = 1.00, Re = 7.49$)

Fig. 6.15: First DKT cycle; Case2 ($R = 1.05, Re = 7.92$)

Fig. 6.16: Second DKT cycle; Case2 ($R = 1.05, Re = 7.92$)

Fig. 6.17: First DKT cycle; Case3 ($R = 1.10, Re = 9.03$)

Fig. 6.18: Second DKT cycle; Case3 ($R = 1.10, Re = 9.03$)

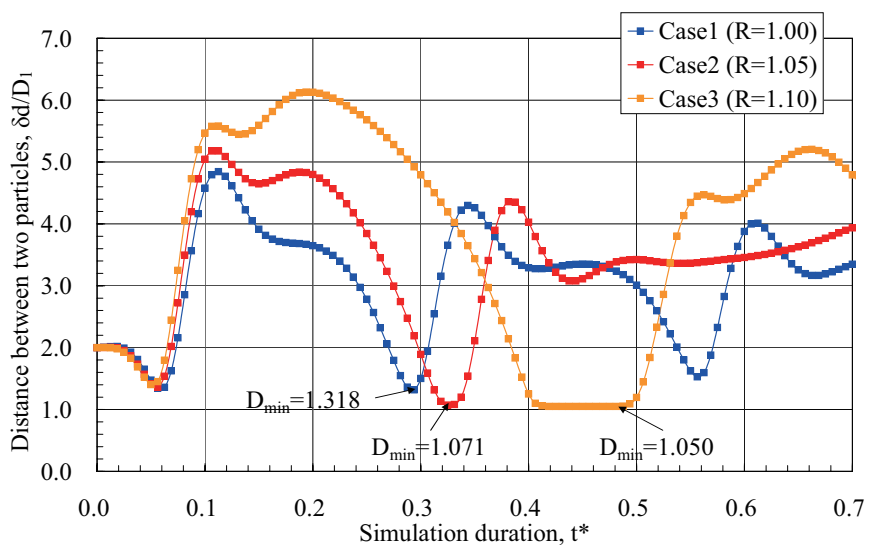


Fig. 6.19: The distance between two settling circular particles vs. simulation duration

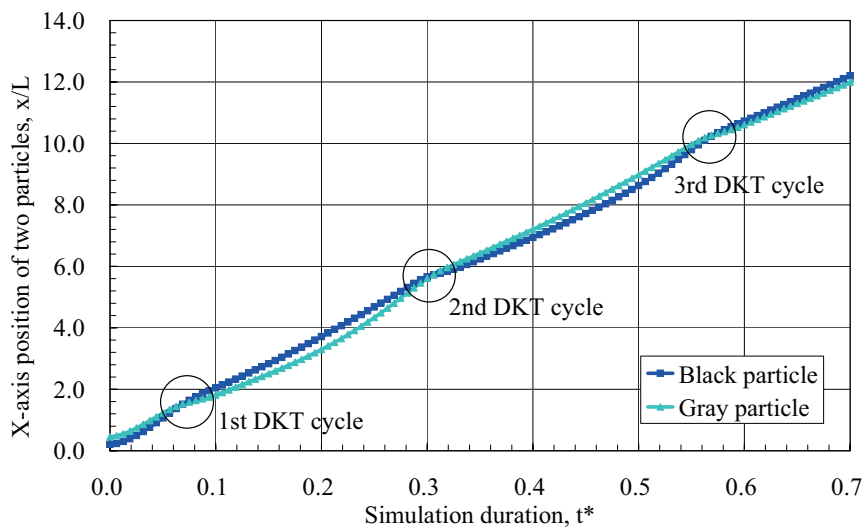


Fig. 6.20: The x -axis position of two settling circular particles vs. simulation duration; Case1 ($R = 1.00$)

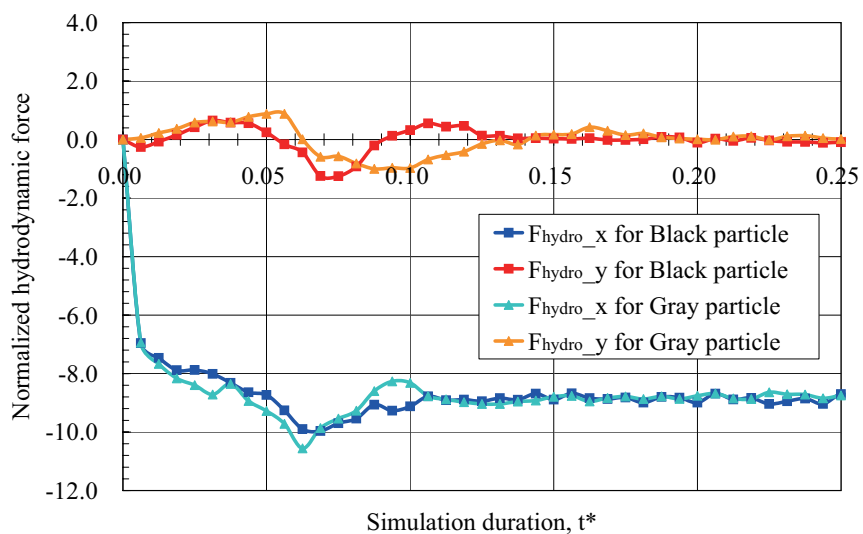


Fig. 6.21: The x and y components of the hydrodynamic forces exerted on two settling circular particles; Case1 ($R = 1.00$)

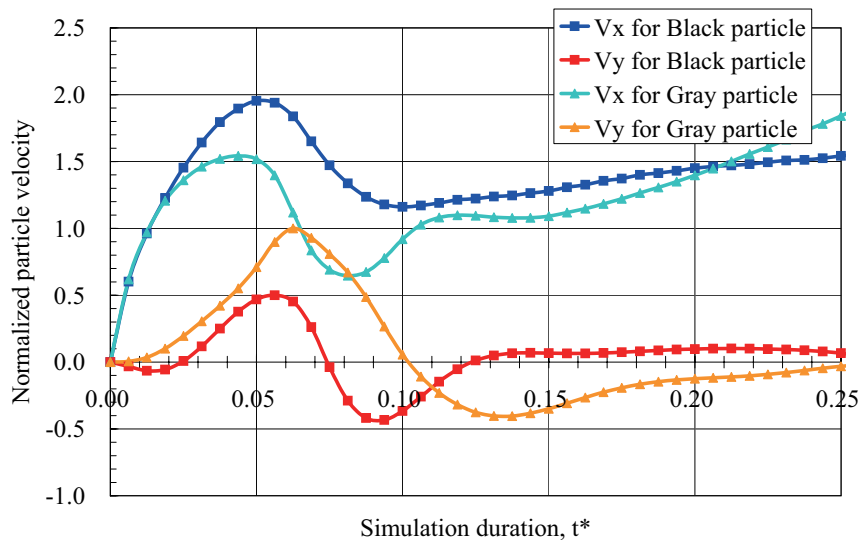


Fig. 6.22: The x and y components of the settling velocity of two circular particles; Case1 ($R = 1.00$)

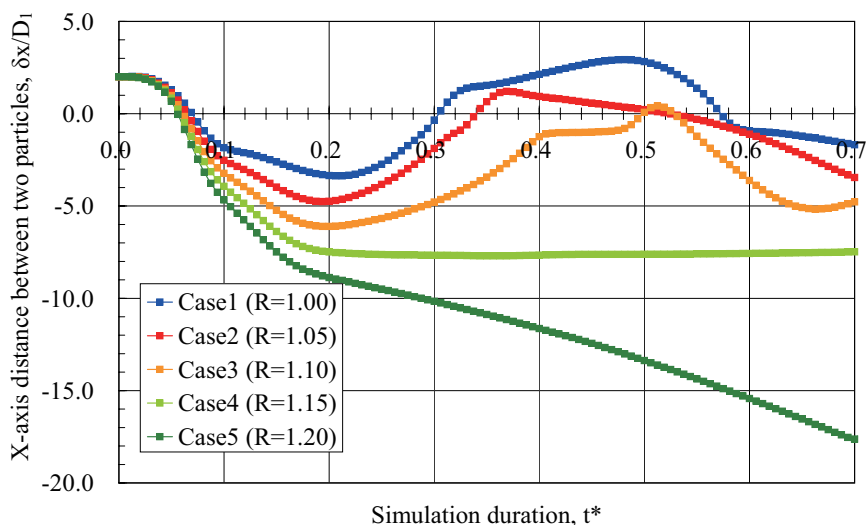


Fig. 6.23: The effect of diameter ratio R on the interaction of the two particles

6.5 結言

本章では、格子ボルツマン法と個別要素法を Noble & Torczynski モデルを用いて連成した数値計算手法の妥当性について検討した。はじめに、円環状クエット流れのシミュレーションにて、Navier-Stokes 方程式の理論解に近い数値解を得るために必要となる回転固体円形粒子の直径に対する格子数 ζ を求めた。本手法では、おおよそ $\zeta = 9$ 以上で理論値との誤差が数 % 以内となることがわかった。

次に、粘性流体中における単一円形粒子の沈降挙動を計算し、Reynolds 数の大きさに対応する沈降モードの再現を試みた。また、Feng *et al.* (1994a) による 2 次元有限要素法を用いた計算結果と比較し、Regime A ($0.1 < Re < 2$) および Regime B ($3 < Re < Re_{crit}$) の範囲内に相当する粒子沈降形態を計算することができることを確認した。

最後に、2 つの円形粒子間における DKT 現象の計算を実施した。円形粒子の沈降速度あるいは円形粒子に作用する抗力から、Drafting、Kissing および Tumbling の各ステージを考察することができた。また、2 つの円形粒子の直径比 R が 1.15 以上になると、第 2 回目以降の DKT cycle は生じないことがわかった。

第7章 傾斜沈降による固液分離促進効果

7.1 緒言

前章でも述べたように、流体中における粒子沈降は、様々な工学的領域において重要な現象である。流体中に浮遊している粒子の密度が大きい場合、流体の流動を抑制すれば、沈降分離操作（Sedimentation）による固液分離が可能である。沈降分離は、清浄水を得ることを目的とする清浄化（Clarification）と、濃厚なスラッジを得ることを目的とする濃縮化（Thickening）に分類される（日本混相流学会, 2004）。これらは重力を利用したものであるが、粒子によっては時間がかかりすぎて経済性に欠ける場合がある。その場合には、化学薬品を投入してコロイド状の物質の凝集を促す、あるいは遠心分離など液体に加速度を与えて処理時間を短縮する手法がある。

次に、傾斜シックナー（Thickener）を用いた沈降促進問題について述べる。これは、沈降装置を傾斜させる、あるいは平行傾斜板を設置することによって、界面沈降速度の促進を図るものである（平野ほか, 2009）。一般に、重力による沈降分離では、粒子群沈降速度の緩慢さのために広い面積と長い滞留時間が必要とされる。しかし、傾斜シックナーは、比較的 low コストで沈降分離を効率良く達成することができ、水処理問題（藤崎, 2004）やオイルサンド採掘におけるピチューメンと微粒子の分離プロセス（Madge *et al.*, 2005; Gray *et al.*, 2009）において実用化されている。

Fig.7.1 は、傾斜板による沈降促進のメカニズムを描いたものである（日本混相流学会, 2004）。左図のように沈殿池の中に傾斜板を配列させておくと、各傾斜板の表壁面に粒子が沈降・集積し、裏壁面近傍では希薄となる。このとき、平均密度の差によって右図のように媒体に対流が生じる。粒子濃度の高い部分で下降流が生じるため、粒子の平均沈降速度を増大させ、処理時間を早めることができる。

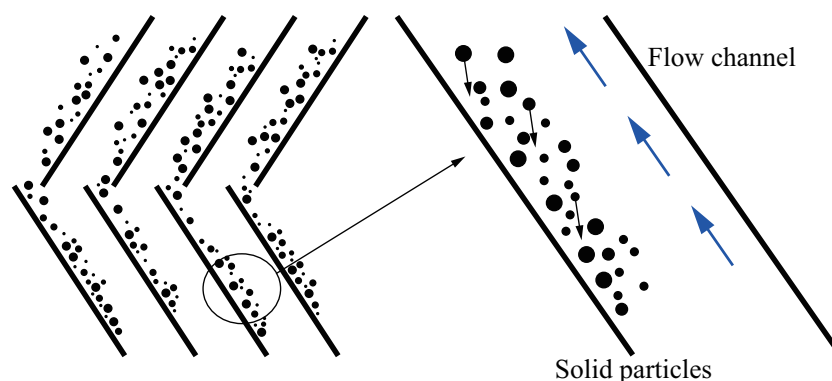


Fig. 7.1: Sedimentation enhanced by inclined plates

7.1.1 既往の研究

このような傾斜沈降による分離促進現象の研究は、赤血球集合体の沈降過程において、集合体の下降運動と下降した集合体に置き換わる血漿の上昇流が観察されたことが端緒となっている。Boycott (1920) は沈降管を傾けると、赤血球の沈降が速くなる現象を発見した。これは傾斜管の上側の管壁に沿って血漿の上昇流が発生し、下側の管壁に沿って形成された集合体が速く沈降するためであり、ボイコット効果 (Boycott effect) と呼ばれている。

この効果を説明するために、Ponder (1925)、Nakamura and Kuroda (1937) はそれぞれ、傾斜容器内のスラリーの沈降速度を予測するための理論モデルを提案した。これはPNK理論と呼ばれており、傾斜界面沈降速度が水平面への投影面積の増加に比例して垂直界面沈降速度より大きくなるというものである (平野ほか, 2009)。しかしながら、この理論は一般工業スラリーには適用できるものではない。傾斜シックナーを用いた沈降分離装置について、理論的に装置を設計し操作条件を決定するまでに至っておらず、経験的に操作条件を決めて運転しているのが現状である (平野ほか, 2009)。また Kinoshita (1949) は、実験によって傾斜管内で界面沈降速度の100倍もの大きさの流速を有する対流が生じうることを示した。

Hill *et al.* (1977) は、連続体モデルを提案した。その後、Acivros and Herbolzheimer (1979)、Borhan and Acivros (1988)、Kapoor and Acivros (1995) によって引き継がれている。これらの研究の中で Acivros らの研究グループは、傾斜容器の側面および底面上の堆積層や上昇流の様々なモデルを提案し、従来のPNK理論より実験データとよく一致することを示した (Xu and Michaelides, 2005)。

McCaffery *et al.* (1998a,b) は、ボイコット効果を表現する連続体理論に基づく詳細な数値モデルを提案した。ここでは、スラリー濃度の低下、あるいは容器の傾斜角およびアスペクト比 (幅に対する沈降距離の比) の増加に伴い、沈降速度が促進されることがシミュレーションによって示された。また、Snider *et al.* (1998) は粒子シミュレーションの1つであるMP-PIC (Multiphase particle-in-cell) によって、堆積層および清澄層を再現している。

7.1.2 本研究の目的

連続体モデルは、一般的に粒子-粒子間あるいは粒子-壁間の相互作用が考慮されておらず、沈降粒子の軌跡を追跡すること、対流 (渦) の効果を捉えること、沈降粒子群と流れ場の相互関係などを直接計算することが困難である (Xu and Michaelides, 2005)。

本章では、格子ボルツマン法と個別要素法を Noble & Torczynski モデルを用いて連成した数値計算手法を流体中における固体粒子群の沈降挙動に適用することを目的としている。傾斜容器内での固体粒子群の沈降分離促進現象を再現し、容器傾斜角の増加および粒度分布が沈降速度に与える影響を検討した。これは、閉空間内におけるシミュレーションであり、境界条件としては最もシンプルな条件であると言える。しかし、粒子ベースの数値計算手法による分離促進現象のメカニズムの把握においては、基礎的研究になりうると考える。ここでは特に、最大の分離促進効果を期待することができる容器傾斜角を評価することを目的とする。また、容器内で生じる対流が粒子群の沈降速度の向上に寄与していることを示す (Ohtsuki, 2009; 大槻と松岡, 2009b)。

7.2 傾斜容器内におけるスラリーのモデリング

モデルは、粒子直径が均一である Model A と正規分布に基づくバラツキを与えた Model B に分けられる。さらに、固体粒子の初期座標が計算結果に影響を与えることを考慮し、Model A および Model B それぞれに対し、固体粒子が異なる初期座標に配置されたものを3種類ずつ作成した。スラリー濃度は全て20%に設定されている。これらの固体粒子群は、スラリー濃度が目標値(20%)に到達するまで、繰り返し計算によって発生させたものである。固体粒子の位置は一様乱数(Model A, B)、直径は正規乱数によって決定されている(Model Bのみ)。ただし、初期状態では固体粒子の接触は認めていない。Table.7.1 および Fig.7.2 は、それぞれ固体粒子群データ、固体粒子の初期配置を示したものである。

Table 7.1: Data of solid particles in the slurry

	Model A-1	Model A-2	Model A-3
Slurry concentration [%]	20.1	20.1	20.1
Number of particles [-]	114	114	114
Particle diameter [mm]	15.0	15.0	15.0
	Model B-1	Model B-2	Model B-3
Slurry concentration [%]	20.1	20.0	20.1
Number of particles [-]	118	116	110
Particle diameter [mm]	7.3-23.3	7.8-21.7	8.2-23.0

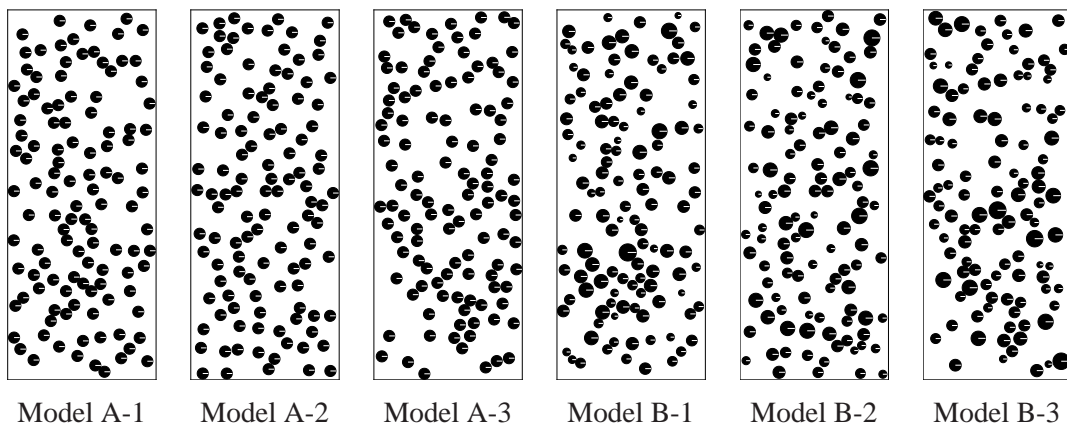


Fig. 7.2: Initial arrangement of solid particles

また計算領域は、幅200mm(W)、長さ500mm(H)であり、四方を壁で囲まれている。壁における境界条件には、バウンス・バック(Bounce-back rule)法を用いている。本研究では、このモデルの傾斜角 θ が 10° 間隔で 0° から 50° までの計6ケースにおける固体粒子群の沈降挙動を計算した(Fig.7.3)。さらに、Table.7.2は入力パラメータを示している。各

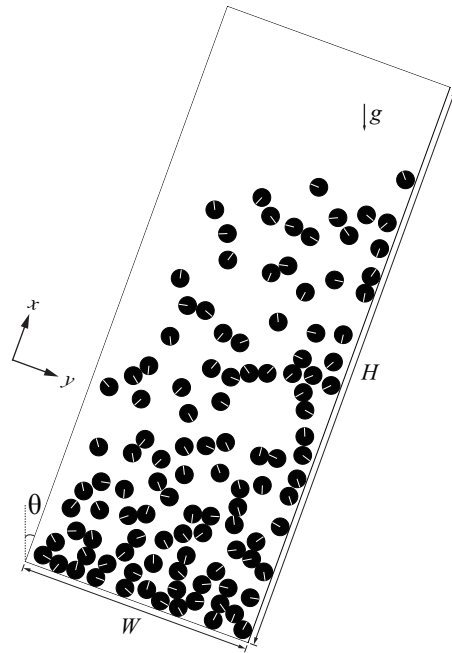


Fig. 7.3: Model for the simulation of the hindered settling in inclined vessel

Table 7.2: Input parameters for the simulation of the hindered settling in inclined vessel

DEM	Discrete time step	5.0×10^{-6}	[sec]
	Solid density	2.5×10^3	[kg/m ³]
	Friction coefficient between particles	0.25	[-]
	Friction coefficient between particle and wall	0.17	[-]
	Spring stiffness (normal)	2.5×10^6	[N/m]
	Spring stiffness (tangential)	1.0×10^6	[N/m]
	Damping coefficient (normal)	1.0	[Nsec/m]
	Damping coefficient (tangential)	0.63	[Nsec/m]
LBM	Discrete time step	1.0×10^{-4}	[sec]
	Fluid density	1.0×10^3	[kg/m ³]
	Number of nodes	502×202	[-]
	Lattice spacing	1.0×10^{-3}	[m]
	Relaxation time	1.0	[-]
	Gravitational acceleration	9.8	[m/sec ²]
	Simulation duration	1.0×10^1	[sec]

モデルおよび各ケースとも入力パラメータは共通である。なお、固体粒子と流体の密度比は2.5とした。

7.3 シミュレーション結果

7.3.1 傾斜角および粒度分布が分離速度に与える影響

Fig.7.4 から Fig.7.6 は、Model A-1 を用いた場合の傾斜角 0° 、 20° および 40° の計算結果を示している。各ケースとも、 $t^* = 1.000$ (100,000step) までの結果である。ここで、 t^* は計算終了ステップ数で無次元化した時間を意味する。重力下における固体粒子の沈降によって、固体粒子周辺の流体運動が誘起されている。傾斜角の増加に伴い、容器中央部での沈降過程において固液相（右側壁）と液相（左側壁）が顕著に現れることが再現されている。左側壁に沿って形成された流れは、効率的に固液相から液体を排出していることが観察できる。

Fig.7.7 および Fig.7.8 は、各モデルにおける傾斜角 0° から 50° までの分離速度を示している。本研究では、分離を Eq.(7.1) に示した沈降する固体粒子の位置座標に対するバラツキ（分散） D_p で表わしている。つまり、このグラフの傾きは分離速度を示す。なお、側壁（特に右側壁）と固体粒子の相互作用の影響を取り除くため、この分離速度の計算では、右側壁近傍に位置する固体粒子は除外するものとした。

$$D_p = \frac{1}{N} \left\{ \sum_{k=1}^N (P_k - \langle P \rangle)^2 \right\}^{\frac{1}{2}} \quad (7.1)$$

ここで、 N ：固体粒子数、 P_k ：固体粒子の位置座標、 $\langle P \rangle$ ：固体粒子の平均位置座標を示す。

各モデルとも傾斜角の増加に伴い、分離速度が向上する結果が得られた。ただし、 30° 以上の傾斜角では僅かな差異しかないことが分かる。また傾斜角 0° および 10° のケースにおいては、ほぼ一定の速度で固液分離が進行している（およそ $t^* = 0.600$ 後、分離完了）。これに対し、傾斜角 20° 以上では、経過時刻 $t^* = 0.100 - 0.300$ において分離速度が著しく増加することが確認できる（およそ $t^* = 0.400$ 後、分離完了）。

さらに、固体粒子のサイズにバラツキを持たせた Model B は Model A と比較して、分離がやや遅延する傾向にある。この原因として、Model B に含まれるサイズの小さい固体粒子が上昇流の影響を受けて（再）浮上することが考えられる。

7.3.2 対流の形成が沈降速度に与える効果

Fig.7.9 は、Model A-1 を用いた場合の傾斜角 0° から 50° までの流速の時間変化を示している。これは流速の x 軸方向成分の正負それぞれの平均値である。流速が正の領域は上昇流、負の領域は下降流を示している。また、各傾斜角に対する流速の値は、傾斜角 0° における流速の最大値で基準化したものである。傾斜角 20° 以上において流速のピークが顕著に現れ、容器内において対流が形成されていることがわかる。また傾斜角 20° 以上では、傾斜角が大きいケースほど早期に流速のピークが発現する傾向が見られた。最大流速は傾斜角 0° の場合の約 1.37 倍（傾斜角 30° ）であった。

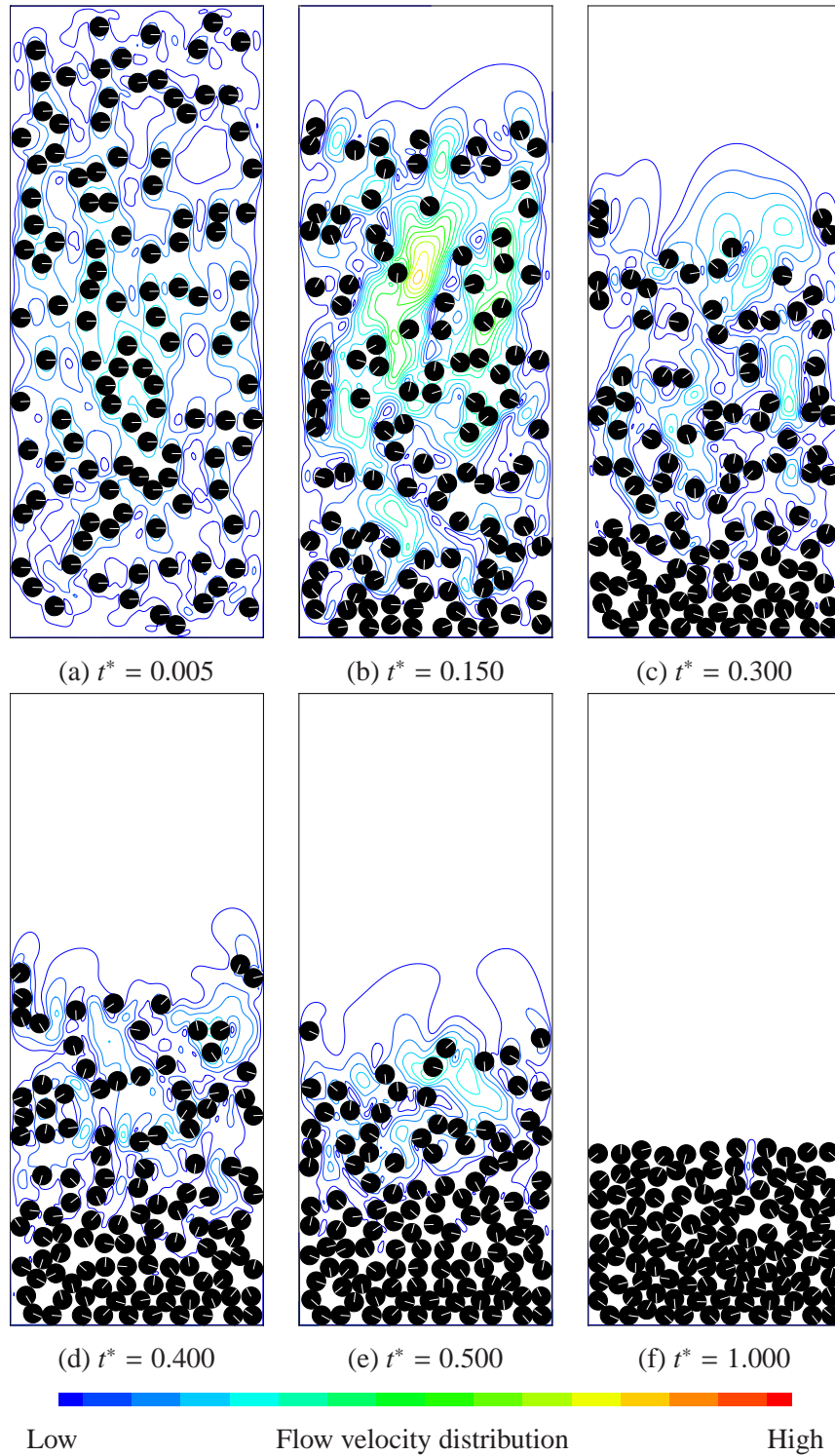


Fig. 7.4: The behavior of hindered settling particles and flow velocity distribution; Model A-1 ($\theta = 0^\circ$)

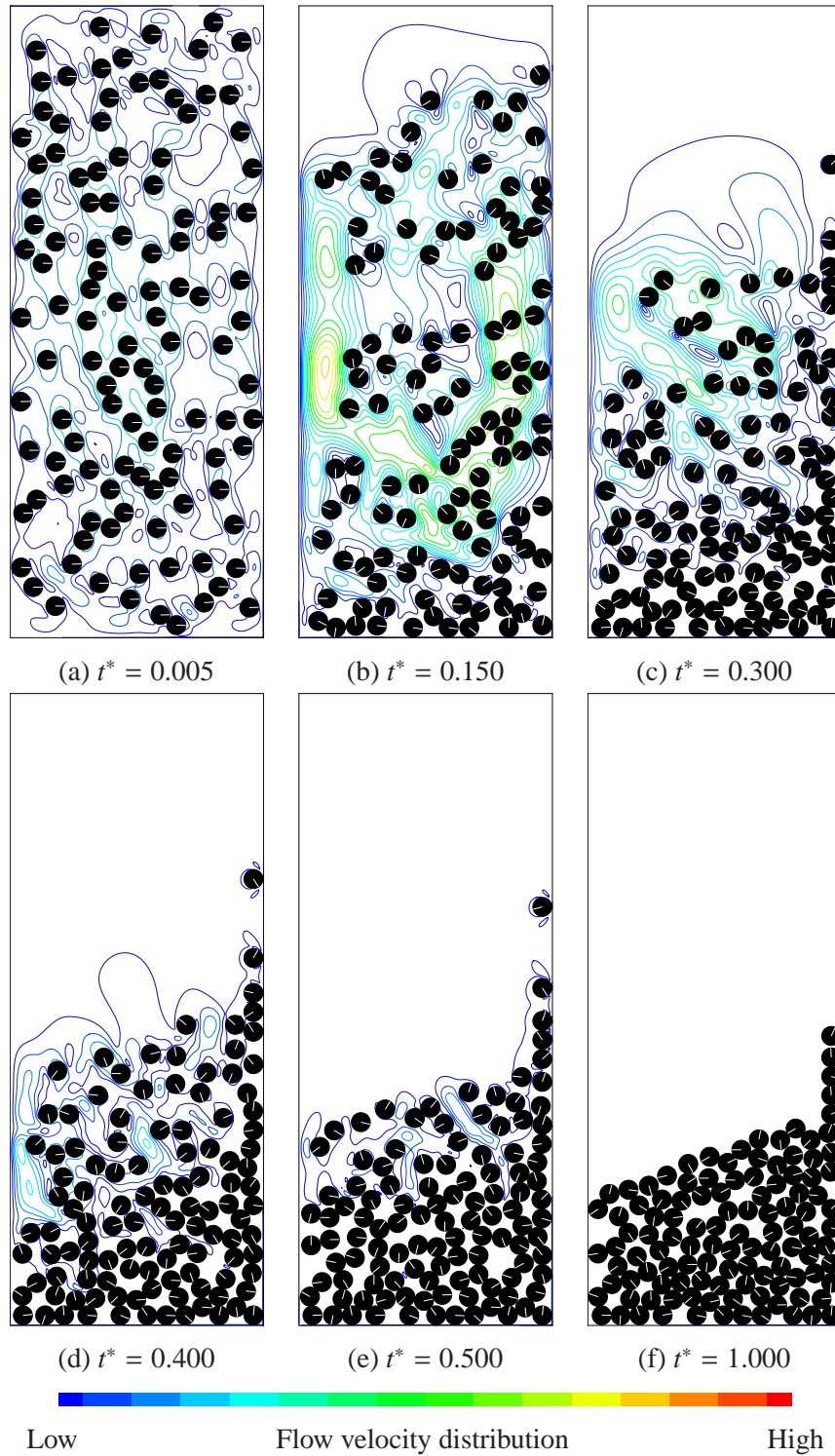


Fig. 7.5: The behavior of hindered settling particles and flow velocity distribution; Model A-1 ($\theta = 20^\circ$)

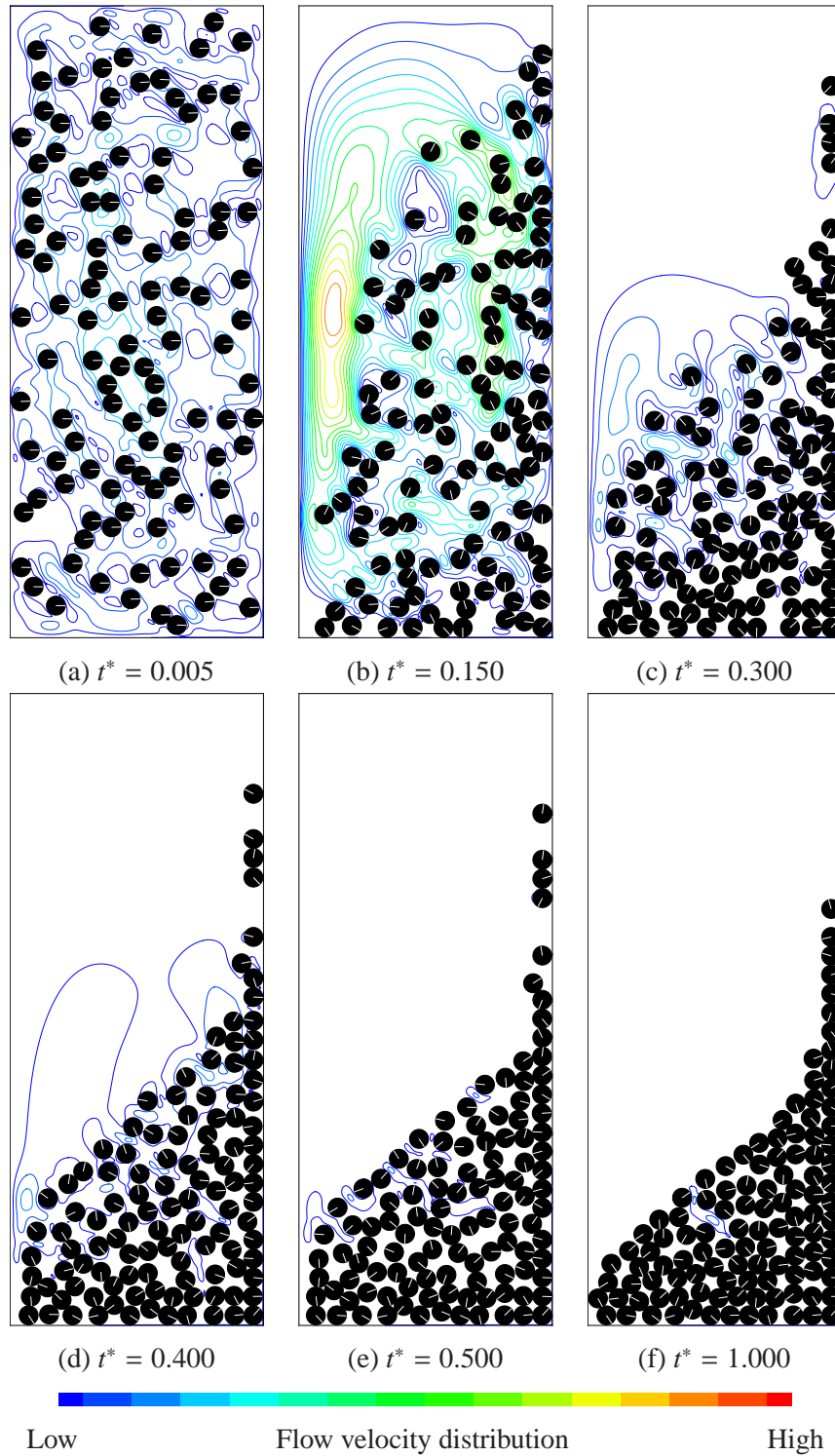
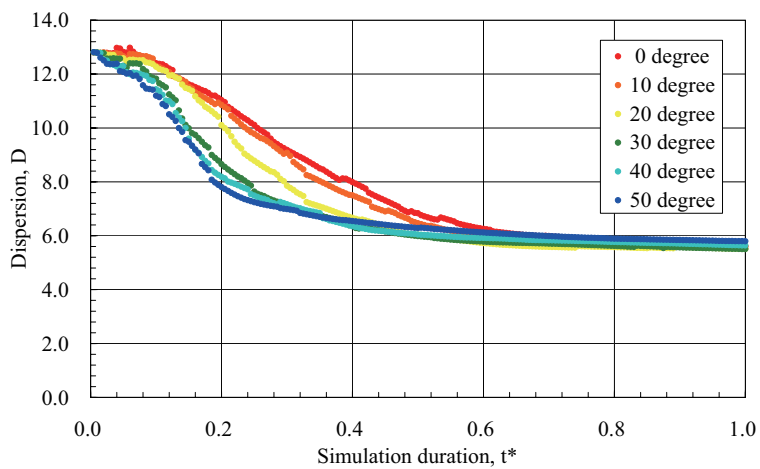
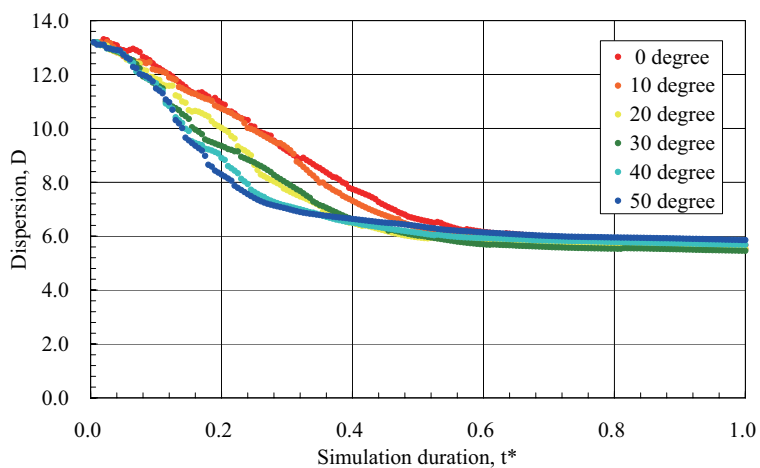


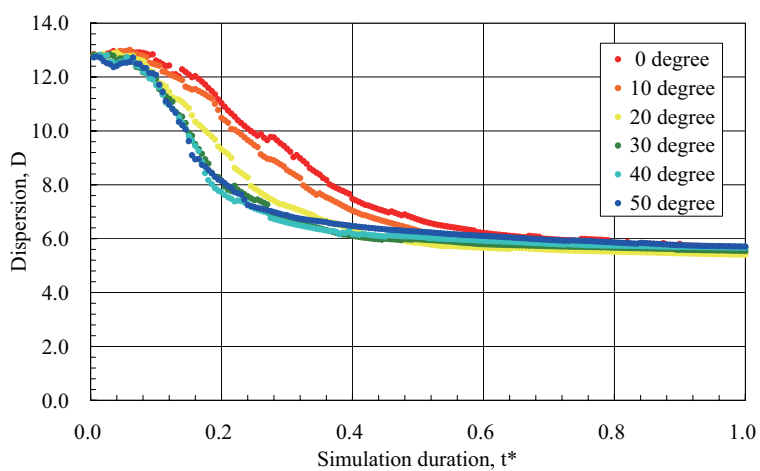
Fig. 7.6: The behavior of hindered settling particles and flow velocity distribution; Model A-1 ($\theta = 40^\circ$)



(a) Model A-1

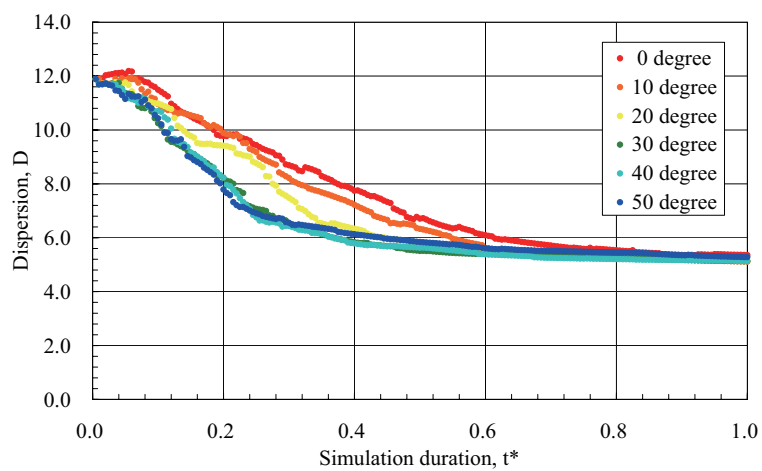


(b) Model A-2

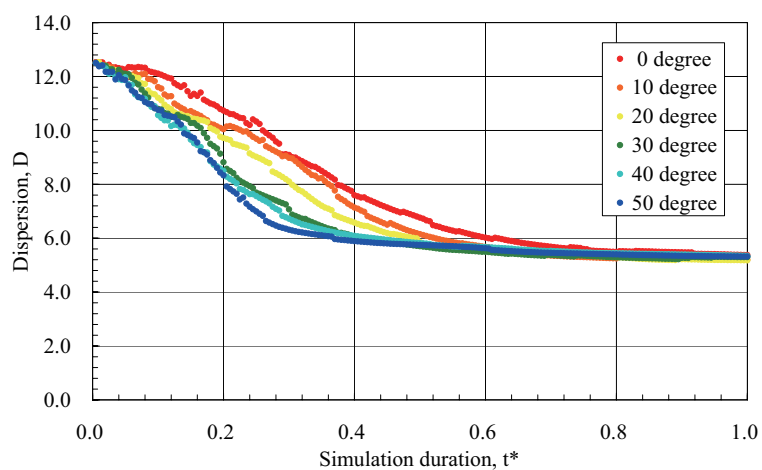


(c) Model A-3

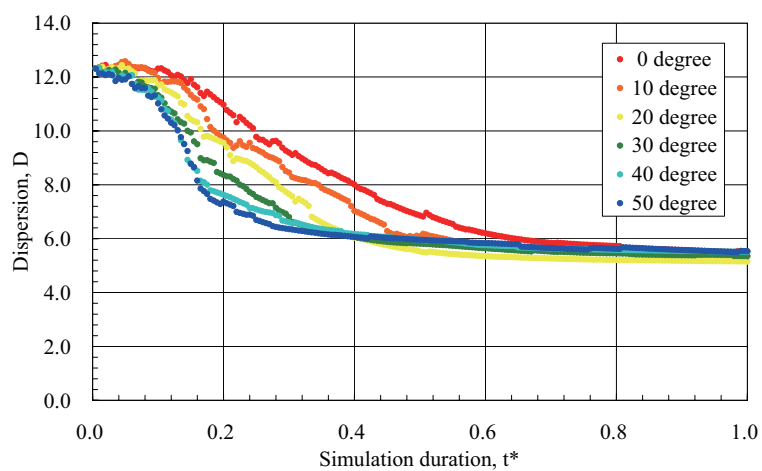
Fig. 7.7: Phase separation rate; Model A-1, A-2 and A-3



(a) Model B-1



(b) Model B-2



(c) Model B-3

Fig. 7.8: Phase separation rate; Model B-1, B-2 and B-3

Fig.7.10 は、対流が沈降する固体粒子群に与える影響について描いたものである。図の上段は、各ケースにおいて流速ピーク発生時刻 t^* における流速ベクトル図である。下段は、沈降が促進された固体粒子群を示している。図中の粒子は固体粒子の初期位置、黒線が沈降の軌跡である。また、赤線の区間は粒子群干渉沈降速度 (Hindered settling velocity) が単一粒子沈降における終端速度 (Terminal velocity of a single settling particle) を上回った区間である。なお、この単一粒子沈降速度は Fig.7.3 に示した計算領域で予め計算した値を用いた。上段と下段の図を対比すると、下降流が卓越している領域において固体粒子の沈降が促進されたことがわかる。ただし、傾斜角 0° の場合でも単一粒子の終端速度を超える速度で沈降する固体粒子が存在する。したがって、Fig.7.10 で出力された固体粒子全てが傾斜沈降の効果のみを受けている訳ではないため注意を要する。 N_p は、単一粒子沈降での終端速度を越える速度で沈降した固体粒子数を指す。

Fig.7.11 は、Fig.7.10 で出力された固体粒子の沈降速度 V_p をプロットしたものである。この沈降速度は、単一粒子沈降における終端速度で基準化されている。各グラフ中の赤線は、終端速度を示している。特に傾斜角 20° 以上で、沈降速度が終端速度の 1.5 倍に達する結果が得られた。また、僅かではあるが、(再)浮上する固体粒子の存在も確認することができた。

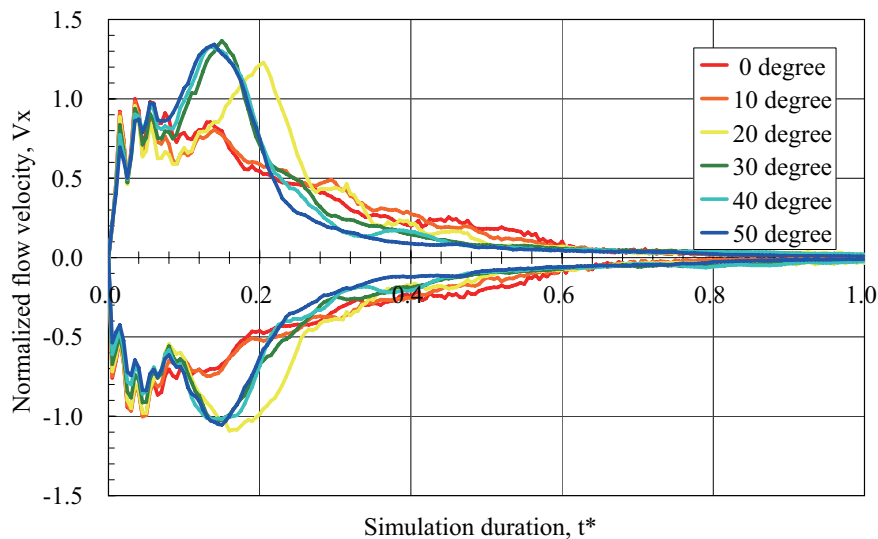


Fig. 7.9: Flow velocity vs. simulation duration; Model A-1

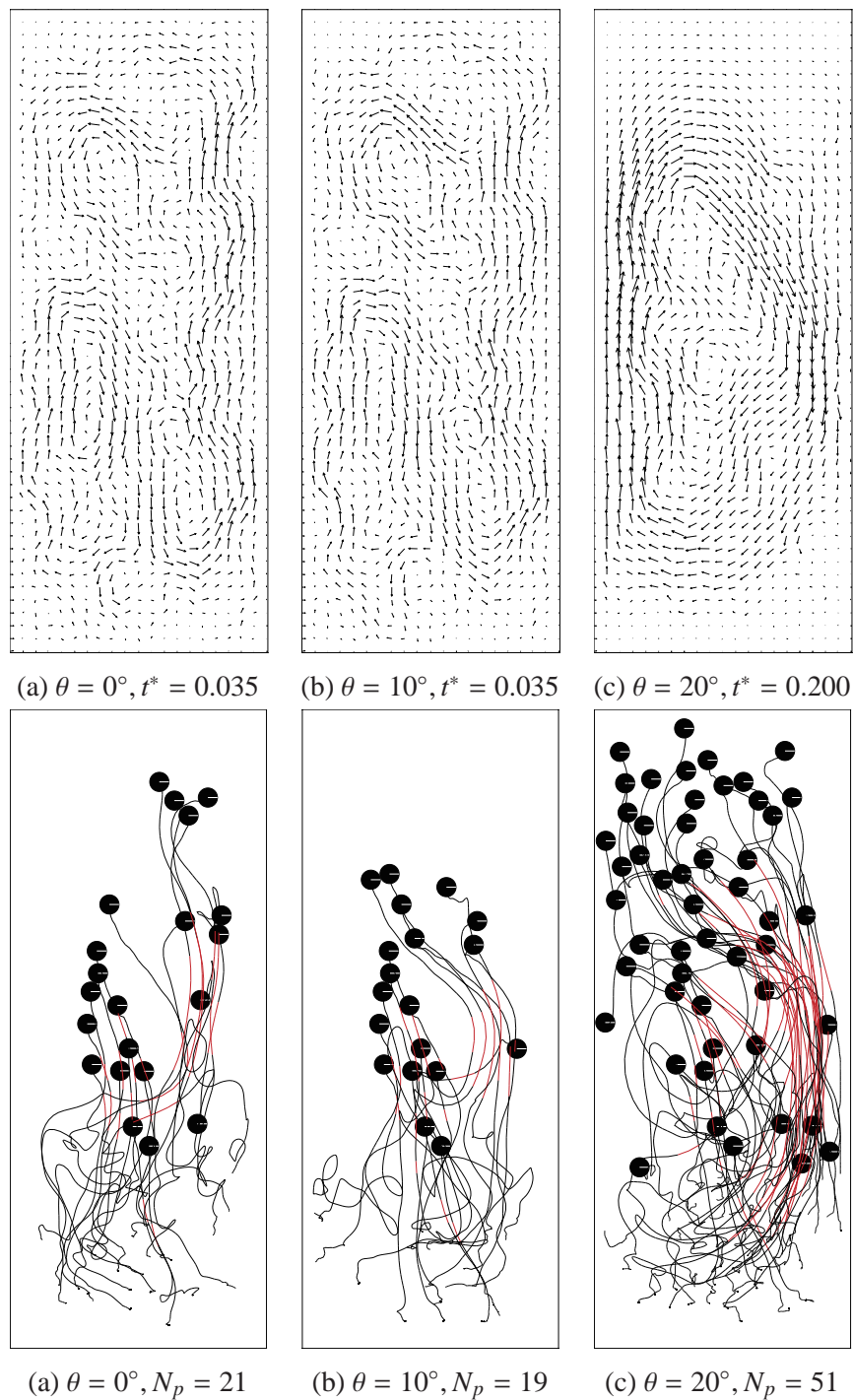


Fig. 7.10: Settling particle trajectories and enhanced settling zone by convective flow; Model A-1 (a)-(c)

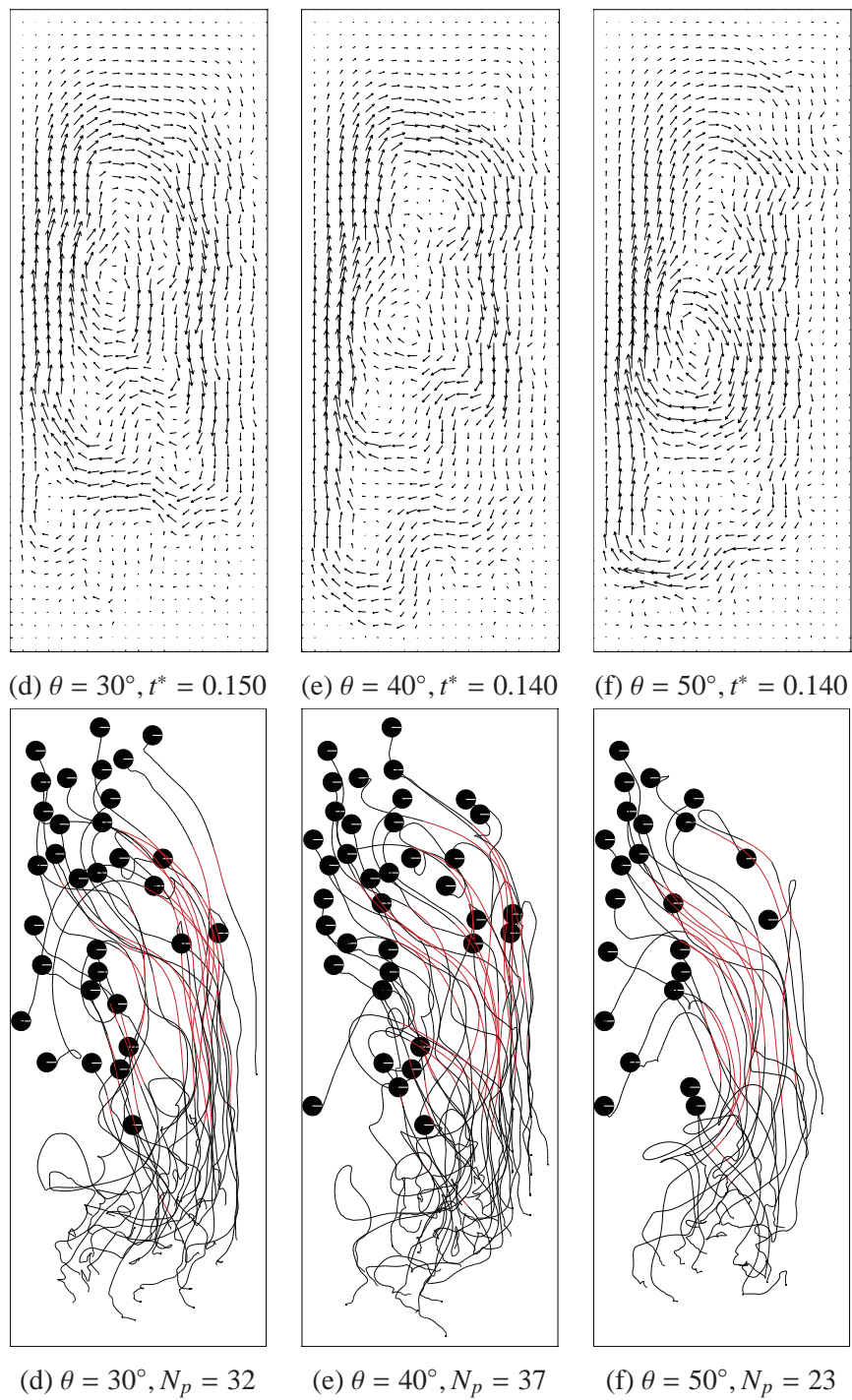


Fig. 7.10: Settling particle trajectories and enhanced settling zone by convective flow; Model A-1 (d)-(f)

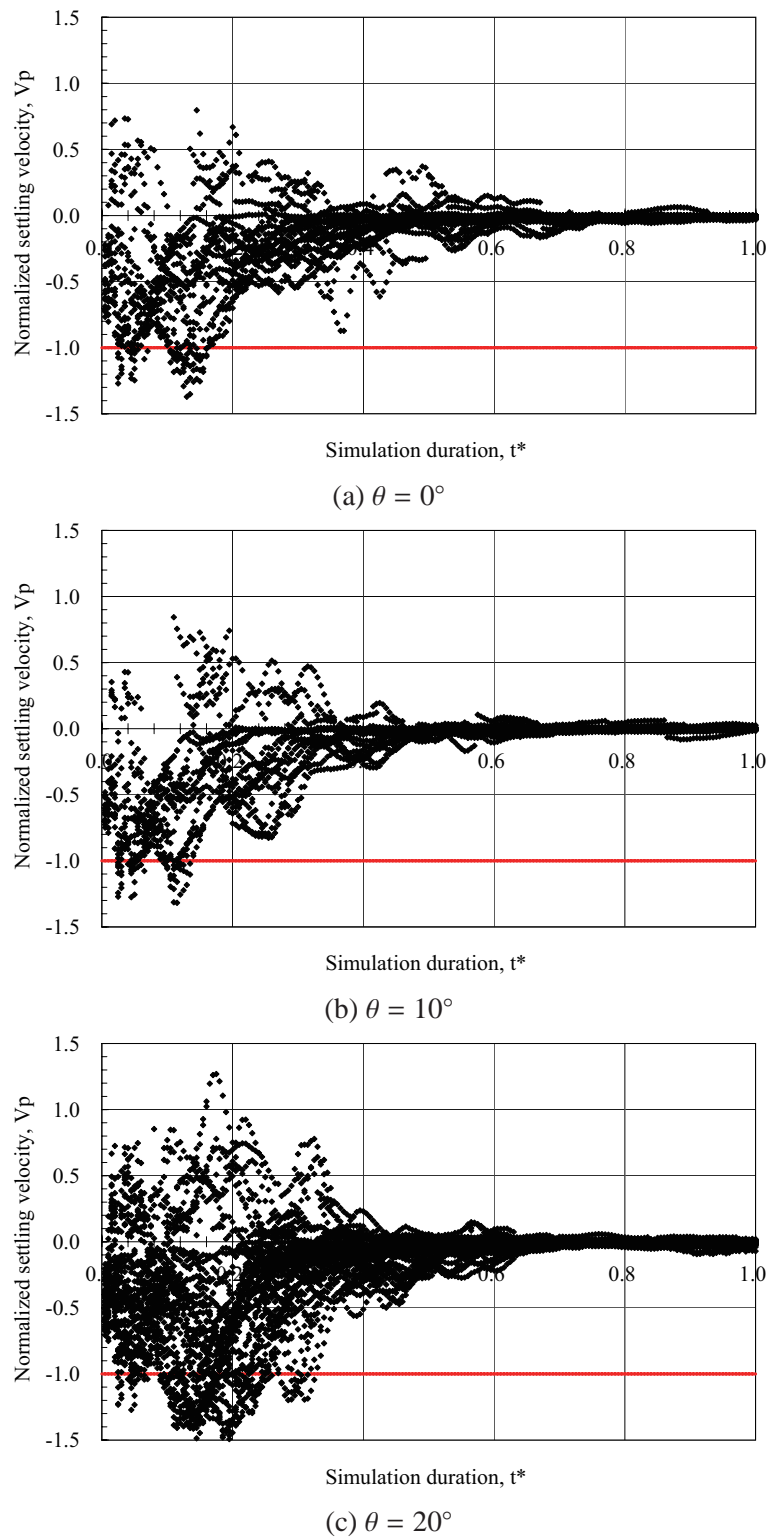


Fig. 7.11: Hindered settling velocity vs. free settling velocity; Model A-1 (a)-(c)

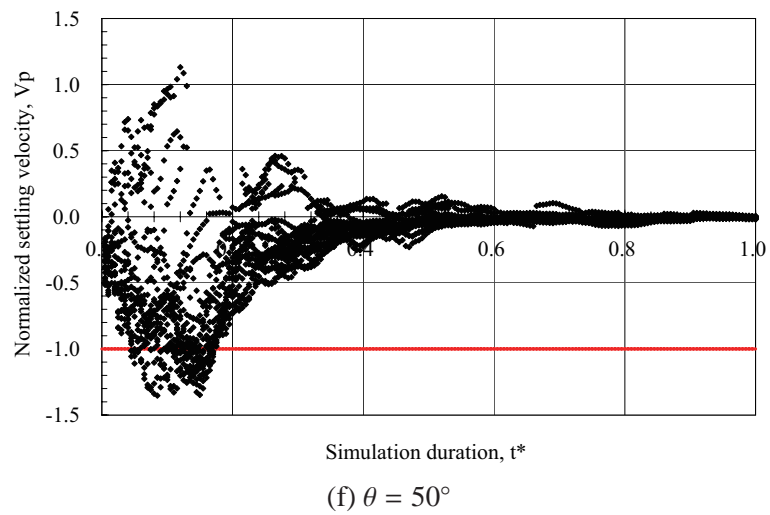
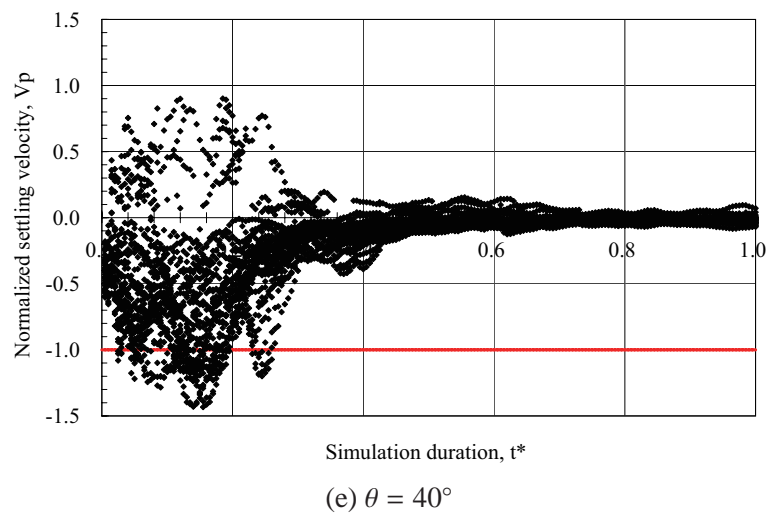
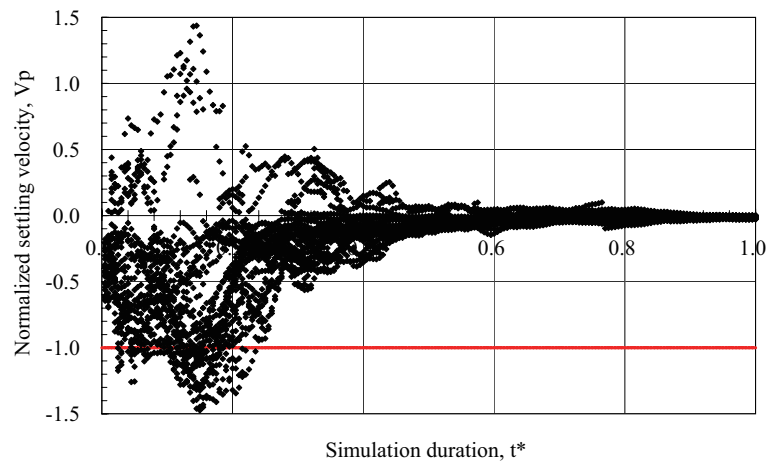


Fig. 7.11: Hindered settling velocity vs. free settling velocity; Model A-1 (d)-(f)

7.4 結言

本章では、スラリーの傾斜容器を用いた固液分離促進現象を再現し、容器傾斜角、粒度分布および対流の形成が沈降速度（分離速度）に与える影響を検討した。以下に得られた知見を列挙する。

1. 粒子ベースの数値シミュレーション手法を用いたことにより、沈降過程における固体粒子群の運動および上昇する流れ（液相）を明確に捉えることができた。
2. 容器傾斜角の増加に伴う分離速度の向上を再現することができた。傾斜角 20° 以上では、 0° および 10° のケースと比較して、分離時間が約 $2/3$ に短縮された。
3. スラリーを構成する固体粒子のサイズにバラツキがある場合は、分離が幾分遅延する傾向が見られる。本計算結果においては、サイズの小さい固体粒子の上昇流による浮上に起因するためであると考えられる。
4. 容器内に形成される対流が固体粒子の沈降速度の向上に寄与していることを示した。このとき、固体粒子群の沈降速度は、単一粒子の終端速度の最大 1.5 倍に達する。

第8章 多孔質体内の粒子輸送による浸透率の低下

8.1 緒言

流体流れに伴う粒子輸送は、様々な工学的領域において重要な現象の1つである。資源工学あるいは土木工学の分野において、多孔質体内での粒子輸送問題として、次のような例とそれに関する既往の研究を挙げる事ができる。

8.1.1 既往の研究

グラウト材注入による岩盤の浸透性改良

グラウチングは、流体の浸透挙動を制御する工法の1つである。ダムなどの土木構造物においては、岩盤中の空隙を充填し、岩盤を固密化することにより、岩盤の浸透性や力学特性を改良することを目的として行われる。また放射性廃棄物の地下処分場においても、貯蔵施設としての高度な遮蔽機能が要求されており、岩盤の浸透性の改良に用いられる。そこで、グラウチング施工の指針となるような数値モデルの確立が望まれている。古賀ほか(2001)は、セメントベースのグラウト材の浸透挙動について研究しており、セメント粒子の輸送過程においては、セメントの浸透に関する理論式を導出している。また地盤間隙へのセメント粒子の充填過程は、ろ過理論を用いて理論式を導出している。さらに、ろ過理論の適用性(古賀ほか, 2002a)、混合した材料の違いによるグラウト材の流動特性の相違(古賀ほか, 2002b)も実験によって確認されている。伊達ほか(2002)は、高濃度のグラウト材料を効果的に注入する動的注入工法を開発し、静的注入工法(注入圧力に脈動を与えない従来の工法)に比べて、より多くのグラウト材を短時間で注入できることを確認している。

アスファルテンの析出による石油生産障害

石油の生産障害にも、多孔質体内における粒子輸送が関わっている。油層圧力低下およびガス攻法適用時に油層内でのアスファルテン析出が生産障害となることが知られている(独立行政法人石油天然ガス・金属鉱物資源機構, 2003)。アスファルテンとは、暗褐色から黒色の固形分で固有の融点を持たず、加熱により炭素質残滓を残して分解し、炭素、水素、酸素および硫黄を含む複雑な極性を持つ大型環状分子である(眞田, 2006)。アスファルテンの析出発生箇所は、地上設備、坑井内(チュービング、ケーシング)および油層内の3つに分類される。特に油層内において析出した場合は、析出による孔隙の閉塞を引き起こしたり、アスファルテンの極性が強いために孔隙表面に吸着することによって貯留層

の濡れ性を変化させたりすることがある(眞田, 2006)。岡津ほか(2006)は、コアフラッド実験により、アスファルテン析出がコアの浸透率の低下に与える影響を調べている。この実験では、初期コア浸透率が $1/3 \sim 1/7$ 減少するという結果が得られている。

メタンハイドレート開発における細粒分移動

山本(2009)は、海底堆積物中に存在するメタンハイドレートの開発における粒子輸送問題を挙げている。メタンハイドレート生産の為に減圧法による地盤内部の有効応力増加が圧密を促進すると、粒子破壊を生じ、地層の浸透率を低下させる。またハイドレート分解で移動できるようになったシルトサイズ以下の細粒分や粒子破壊の破片は水・ガスの流れによって坑井周辺、特にパーフォレーション孔周辺に集まり、さらに集積することで、生産障害を発生させるおそれがある(山本, 2009)。

このように、微粒子の多孔質体内への流入が浸透性に与える影響を検討することは工学的にも非常に重要であると言える。三善と松岡(2004)は、多孔質岩体内の続成過程を想定した孔隙率減少に伴う浸透性評価を数値計算によって行なっている。さらに、Miyoshi *et al.* (2004); 三善ほか(2005, 2006)は多孔質体内を浮遊する微粒子の移動および堆積を考慮した数値計算を実施し、圧力差が多孔質体内の浸透率変化に与える影響についても検討している。また、Boutt *et al.* (2006)は、単一フラクチャー内を流れる微粒子の運動を計算し、フラクチャーの壁近傍の低流速度場でトラップされる微粒子を再現している。

8.1.2 本研究の目的

本章では、多孔質体内における微粒子と流体の挙動を同時に解くことにより、粒子輸送による多孔質体の浸透率低下プロセスの再現を試みる。はじめに、連成計算手法を用いて、チャネル狭窄部における円形粒子の挙動について検討する。次に、格子ボルツマン法を用いて多孔質体内を流れる流体挙動を計算し、この結果を経験式と定量的に比較することにより、本シミュレーションの妥当性について示す。最後に、再び連成計算手法を用いて、多孔質体内に流入する微粒子の濃度が浸透率に与える影響について検討する。また同時に、微粒子が流体流れに伴い移動する過程での多孔質体内の流速分布および圧力分布の変化も評価する(大槻と松岡, in review)。

8.2 チャネル狭窄部における粒子の挙動

ここでは、チャネル狭窄部における円形粒子の挙動を計算した結果について述べる。ここで用いるモデルは、Li *et al.* (2004) および百武ほか(2007)による数値計算での血管狭窄状態モデルを模したものである。本研究では、このモデル内を流体流れに伴って移動する単一円形粒子あるいは一対の円形粒子の挙動を計算する。単一円形粒子のケースでは、チャネル狭窄部を通過する粒子の挙動を詳細に観察することを目的とする。また、一対の円形粒子のケースでは、チャネル狭窄部の閉塞について考察する。なお、円形粒子は剛体とする。

8.2.1 チャネル狭窄部における単一円形粒子の挙動

Fig.8.1 は、シミュレーションモデル(初期状態)を示している。計算領域は、長さ $500\text{mm}(L)$ 、幅 $100\text{mm}(W)$ である。円形粒子の直径は $15\text{mm}(D)$ である。狭窄部におけるパス幅 (*Gap*) は、円形粒子の直径の 1.75 倍に設定されている。したがって、同時に 2 つの粒子が狭窄部を通過することはできない。また、計算領域左端を流入部、右端を流出部とし、圧力勾配を設定することにより流体運動を生じさせる (Zou and He, 1997)。上端および下端は固定壁とし、バウンス・バック (Bounce-back rule) 法を適用している。Table.8.1 は、入力パラメータを示している。円形粒子と流体の密度比は 2.0 である。

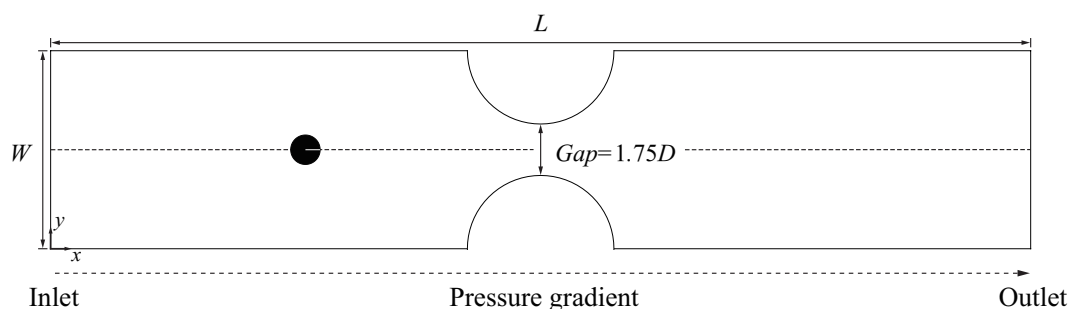


Fig. 8.1: Model for the simulation of a moving circular particle

円形粒子は初期状態では固定されている。流体運動が定常状態に達するのに十分な時間が経過した (10,000step) 後、円形粒子を初速度ゼロで解放する。円形粒子の初期位置は 3 ケースであり、Case1 では中心軸上に配置される (Fig.8.1)。Case2 および Case3 では円形粒子はそれぞれ、中心軸から y 軸に関して正方向に D および $2D$ だけの位置に配置される。

Fig.8.2 は、Case1 から Case3 の各ケースにおける単一円形粒子の軌跡を示したものである。横軸および縦軸方向の長さはそれぞれ、計算領域の長さ L および幅 D で無次元化されている。また Fig.8.3 は、各ケースにおける粒子速度の x 成分 V_x および y 成分 V_y の変化を示している。それぞれの速度成分は、狭窄部ではない管内の中心軸上における平均移動速度の x 成分 V_c で無次元化されている。

Case1 では、 y 軸方向の流体力は常に釣り合うため、円形粒子は x 軸方向のみに移動している。また、チャネル狭窄部における移動速度は、狭窄部ではない管内の平均移動速度の最大 3.1 倍となった。一方、円形粒子を中心軸からずらして配置した Case2 および Case3 でも、Case1 と同様にチャネル狭窄部にて移動速度の増加が確認された。また両ケースとも、チャネル狭窄部を通過した後、円形粒子は再び元の位置 y/D に戻る結果が得られた。これは、Segré-Silberberg 効果と呼ばれる現象であり、本手法もこれを良く再現することができていると考えられる。この効果は、Segré and Silberberg (1961) の実験によって発見されたものであり、管内を流れる粒子が中心軸と壁面との間に存在する平衡位置へと移動する現象である (百武ほか, 2006)。

Table 8.1: Input parameters for the simulation of a moving circular particle

DEM	Discrete time step	5.0×10^{-6}	[sec]
	Solid density	2.0×10^3	[kg/m ³]
	Friction coefficient between particles	0.25	[-]
	Friction coefficient between particle and wall	0.17	[-]
	Spring stiffness (normal)	2.5×10^6	[N/m]
	Spring stiffness (tangential)	1.0×10^6	[N/m]
	Damping coefficient (normal)	1.0	[Nsec/m]
	Damping coefficient (tangential)	0.63	[Nsec/m]
LBM	Discrete time step	1.0×10^{-4}	[sec]
	Fluid density	1.0×10^3	[kg/m ³]
	Number of nodes	501×152	[-]
	Lattice spacing	1.0×10^{-3}	[m]
	Relaxation time	1.0	[-]
	Pressure gradient	6.7×10^{-2}	[Pa/m]
	Simulation duration	1.0×10^1	[sec]

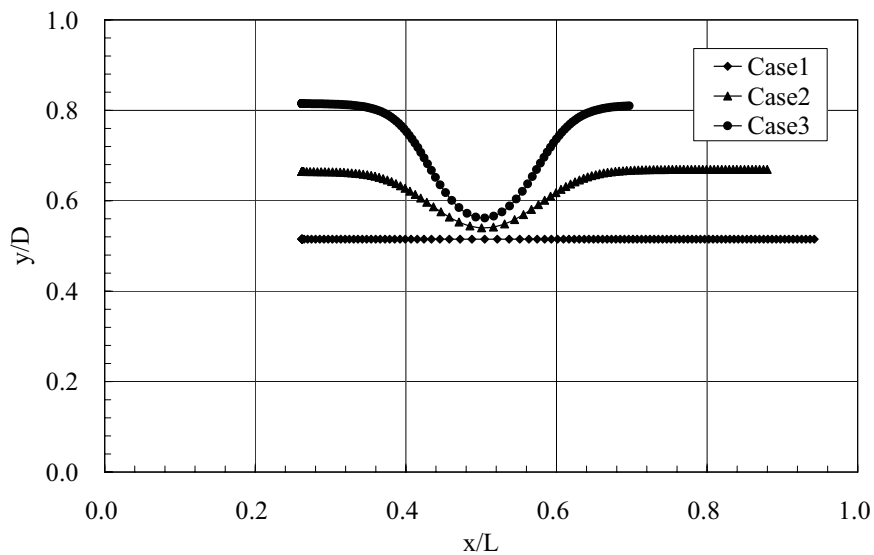


Fig. 8.2: The trajectories of a single circular particle in a channel with the stenosis throat

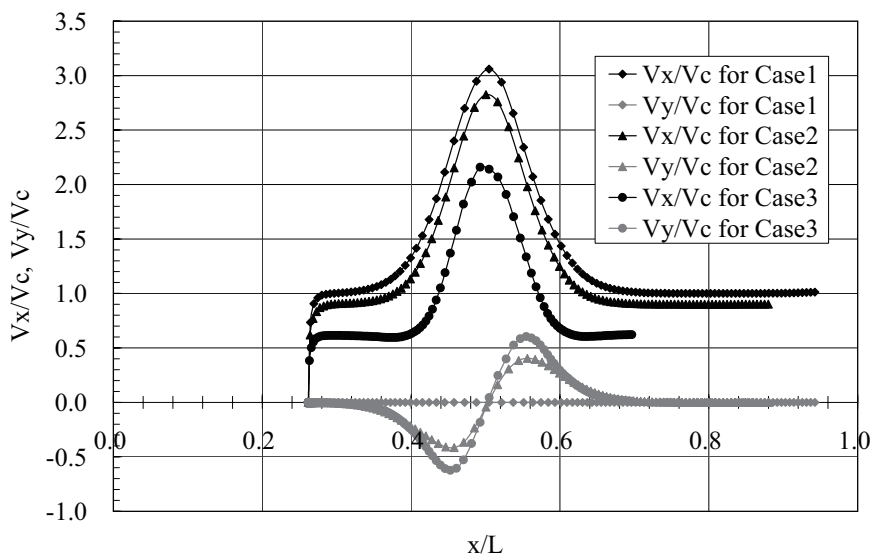


Fig. 8.3: The velocities of the particle with respect to the x-axis position

8.2.2 円形粒子によるチャンネル狭窄部の閉塞

Fig.8.4 は、シミュレーションモデルを示している。計算領域、境界条件および入力パラメータは、前節で用いたモデルと共通である。一対の円形粒子はそれぞれ、中心軸から粒子直径 D だけ離れて配置されている ($h_1 = h_2 = D$)。これを Case4 とする。また、中心軸の上側にある円形粒子の初期位置を $D/30$ だけさらに上方へ配置したものを Case5 とする ($h_1 = D + D/30, h_2 = D$)。流体運動が定常状態になるのに十分な時間が経過した (10,000step) 後、円形粒子は初速度ゼロで解放される。

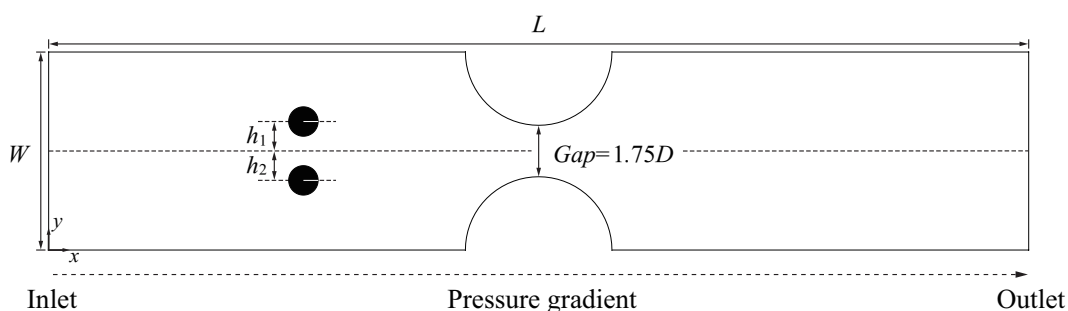


Fig. 8.4: Model for the simulation of a moving circular particle

Fig.8.5 および Fig.8.6 は、Case4 における円形粒子の軌跡、粒子速度の x 成分 V_x および y 成分 V_y の変化を示したものである。同様に Fig.8.7 および Fig.8.8 は、Case5 における円形粒子の軌跡、粒子速度の変化を示している。Case4 では、円形粒子が中心軸に対して完全

に对称に移動し、チャンネル狭窄部を閉塞した。一方、非対称に円形粒子を配置した Case5 では、中心軸に近い下側の円形粒子が先にチャンネル狭窄部へ進入し、やや遅れて上側の円形粒子がこれに従う結果となった。

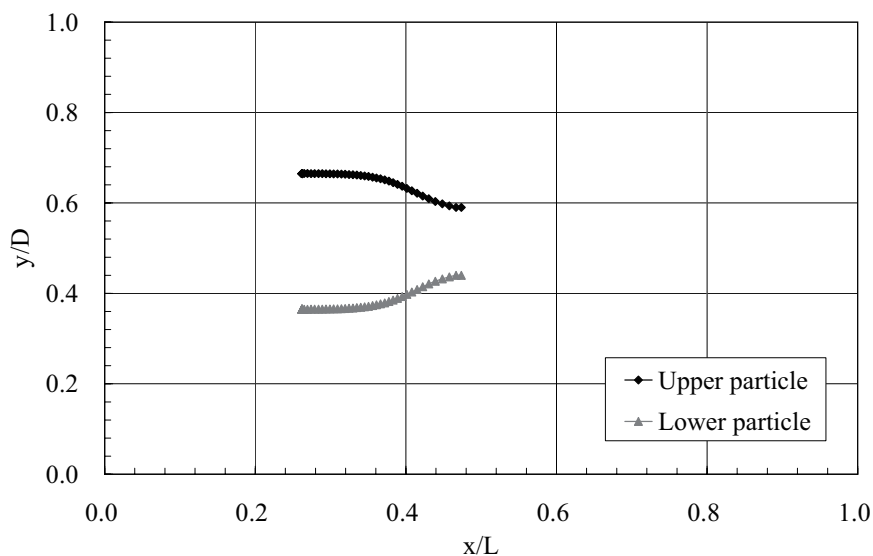


Fig. 8.5: Moving particles trajectories in a channel with the stenosis throat; Case4

8.3 多孔質体内における流体挙動

次に、格子ボルツマン法によって多孔質体内における流体挙動を計算した結果について述べる。ここでは、多孔質体内の流速および圧力分布を再現するとともに、シミュレーション結果を多孔質体内の流れに対する経験式と定量的に比較することにより、その妥当性を検証した。

8.3.1 シミュレーション条件

Fig.8.9 は、シミュレーションモデルを示している。計算領域は、長さ 500mm(L)、幅 100mm(D)である。この計算領域中央部には、多孔質体区間を形成する固定円形粒子 23 個が配置されている。固定円形粒子の直径は、擬似乱数によって 20 ~ 40mm の間で正規分布に基づくように決定されている。多孔質体領域の孔隙率は、67.9% である。ただし、ここでの孔隙率は、多孔質体領域の面積に対する固定円形粒子が占める領域以外の面積の割合を指す。また、計算領域左端を流入部、右端を流出部とし、圧力勾配を設定することにより流体運動を生じさせる。上端および下端は固定壁とし、バウンス・バック (Bounce-back rule) 法を適用している。Table 2 は、入力パラメータを示している。また本研究では、緩和時間係数を Table 3 に示すように 1.00 から 0.52 まで徐々に低下させていき、全 13 ケースの動粘性係数での流体挙動計算を実施した。

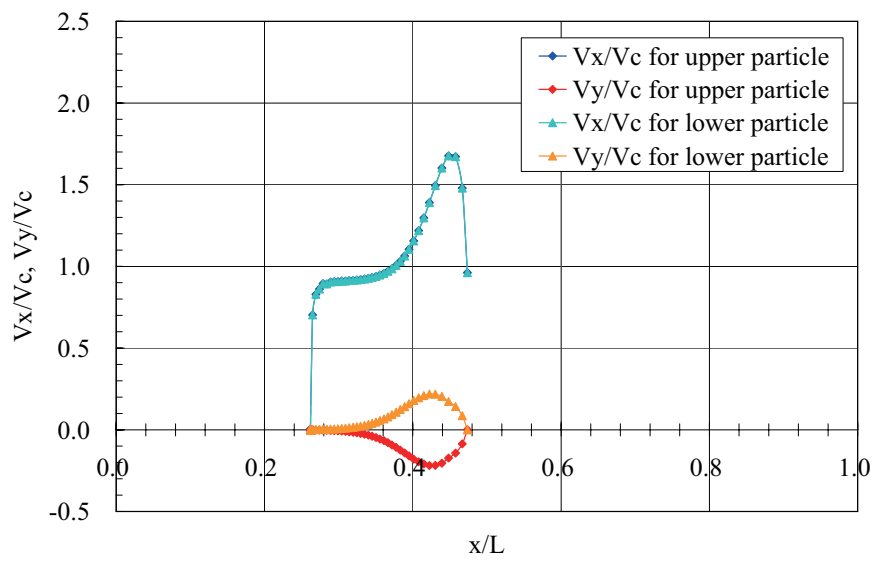
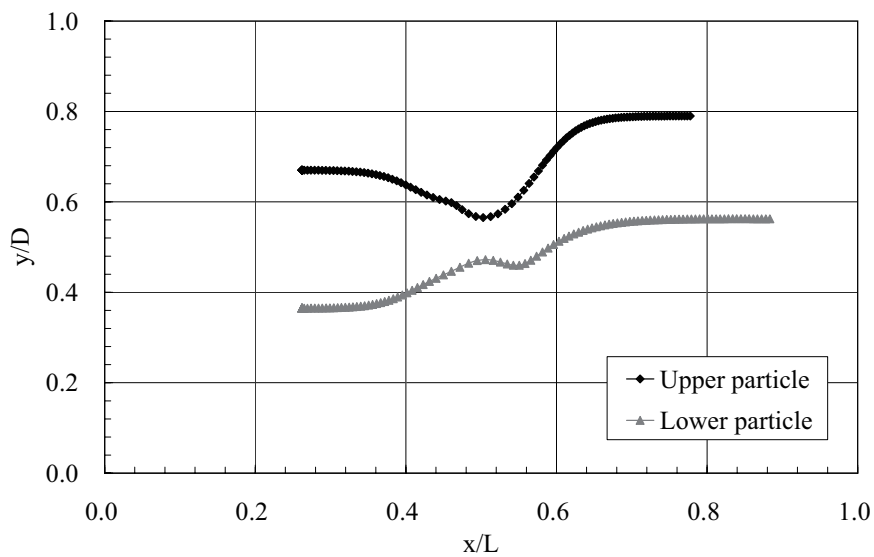
Fig. 8.6: The velocities of the particle with respect to the x -axis position; Case4

Fig. 8.7: Moving particles trajectories in a channel with the stenosis throat; Case5

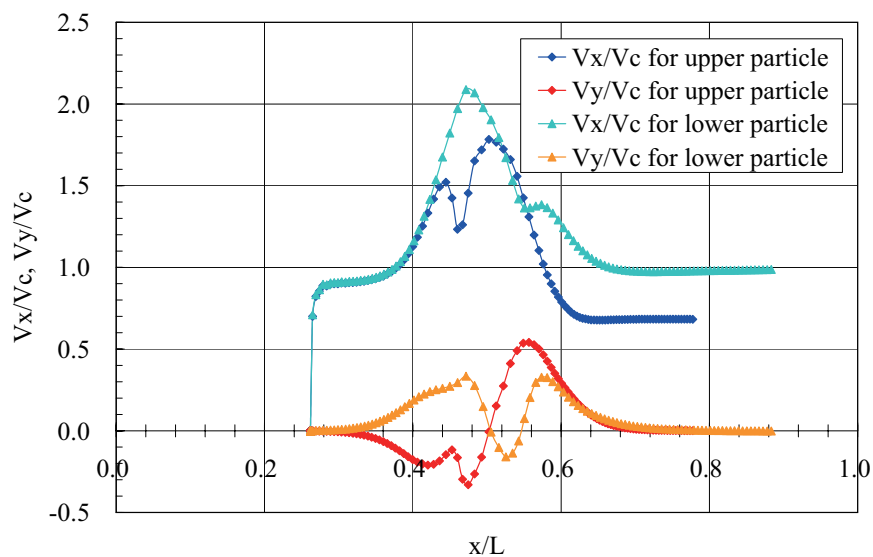
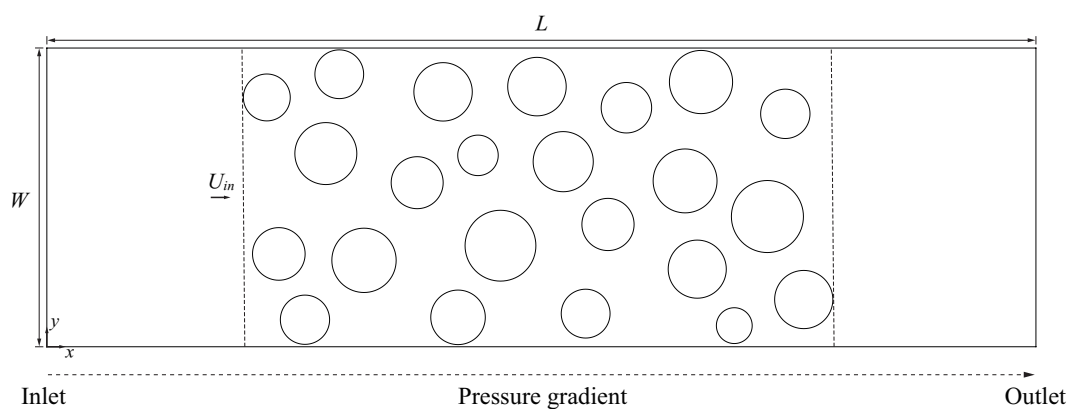
Fig. 8.8: The velocities of the particle with respect to the x -axis position; Case5

Fig. 8.9: Model for the simulation of fluid flow in porous media

Table 8.2: Input parameters for the simulation of fluid flow in porous media

LBM	Discrete time step	1.0×10^{-4}	[sec]
	Fluid density	1.0×10^3	[kg/m ³]
	Number of nodes	501×152	[-]
	Lattice spacing	1.0×10^{-3}	[m]
	Pressure gradient	6.7×10^{-2}	[Pa/m]
	Simulation duration	1.0	[sec]

Table 8.3: Relaxation times and kinematic viscosity coefficients

Relaxation time τ [-]	Kinematic viscosity coefficient ν [m ² /sec]
1.00	1.67×10^{-3}
0.90	1.33×10^{-3}
0.80	1.00×10^{-3}
0.70	6.67×10^{-4}
0.60	3.33×10^{-4}
0.59	3.00×10^{-4}
0.58	2.67×10^{-4}
0.57	2.33×10^{-4}
0.56	2.00×10^{-4}
0.55	1.67×10^{-4}
0.54	1.33×10^{-4}
0.53	1.00×10^{-4}
0.52	6.67×10^{-5}

8.3.2 多孔質体内の流れに対する経験式

多孔質体を通過する流体の流動抵抗（圧力損失）と Reynolds 数の間には、理論的に導出された経験式が提案されている（山本, 2004）。Eq.(8.1) は Reynolds 数が小さい層流の場合 ($Re < 10$) に適用される Blake-Kozeny の式、Eq.(8.2) は Reynolds 数がより大きな場合 ($10 < Re < 1000$) に適用される Ergun の式である。さらに乱流の場合 ($Re > 1000$) には、Eq.(8.3) に示した Burke-Plummer の式が用いられる。

$$f = \frac{150}{Re} \quad (\text{Blake - Kozeny equation, } Re < 10) \quad (8.1)$$

$$f = \frac{150}{Re} + 1.75 \quad (\text{Ergun equation, } 10 < Re < 1000) \quad (8.2)$$

$$f = 1.75 \quad (\text{Burke - Plummer equation, } Re > 1000) \quad (8.3)$$

ここで、 f : 摩擦係数 (Friction factor) で Eq.(8.4) のように表わされ、Reynolds 数は Eq.(8.5) のように定義される。

$$f = \left(-\frac{\partial p}{\partial x} \right) \frac{D_e}{\rho U_{in}^2} \frac{\varepsilon^3}{(1 - \varepsilon)} \quad (8.4)$$

$$Re = \frac{U_{in} D_e}{\nu(1 - \varepsilon)} \quad (8.5)$$

ここで、 $-\partial p/\partial x$: 圧力勾配、 U_{in} : 流入速度、 ρ : 密度、 ε : 孔隙率、 ν : 動粘性係数である。また、 D_e : 等価直径、 R_h : 動水半径であり、それぞれ Eq.(8.6) および Eq.(8.7) のように定義される。

$$D_e = \frac{6R_h}{\varepsilon} (1 - \varepsilon) \quad (8.6)$$

$$R_h = \frac{\text{volume available for flow}}{\text{total wetted surface}} \quad (8.7)$$

ただし、本研究では 2 次元のシミュレーションを実施するため、Eq.(8.7) 中の流体が流れる孔隙の体積の代わりに面積、濡れ面積には固定円形粒子の周囲長さと多孔質体区間の上下端面の長さの和を用いている。

8.3.3 シミュレーション結果

Fig.8.10 および Fig.8.11 はそれぞれ、緩和時間係数 $\tau = 1.0$ のケースにおけるモデル内の流速分布および圧力分布を示したものである。横軸は、計算領域の長さ L で無次元化されている。また縦軸は、流速あるいは圧力の値を表わしている。流速は y 軸断面に関して平均した x 軸方向の流速 U_{np} を流入速度 U_{in} で無次元化した値、圧力は y 軸断面に関しての平均圧力 P を流出部における圧力 P_{out} で無次元化した値である。この結果は多孔質体区間において、流体パスの断面積の減少による流速の増加を再現することができていることを表わしている。また、圧力は多孔質体区間にて、ほぼ直線的に減少していくことがわかる。

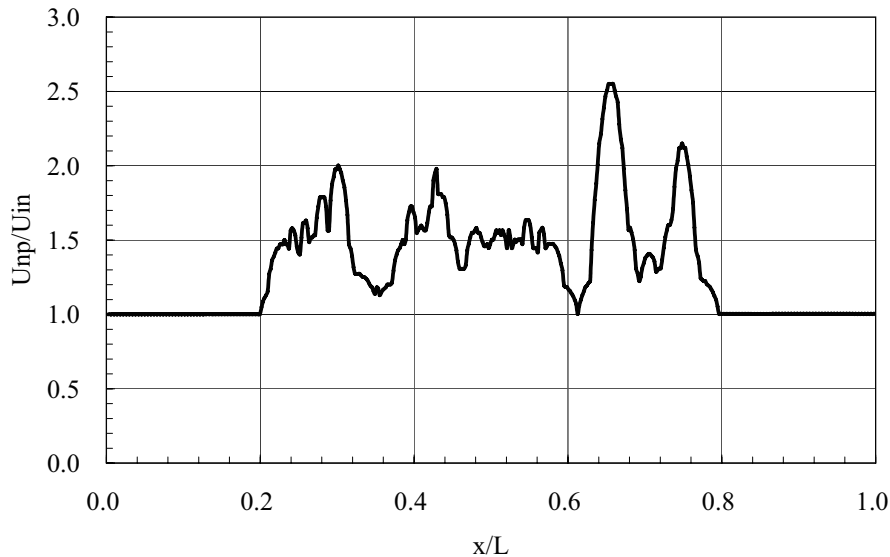
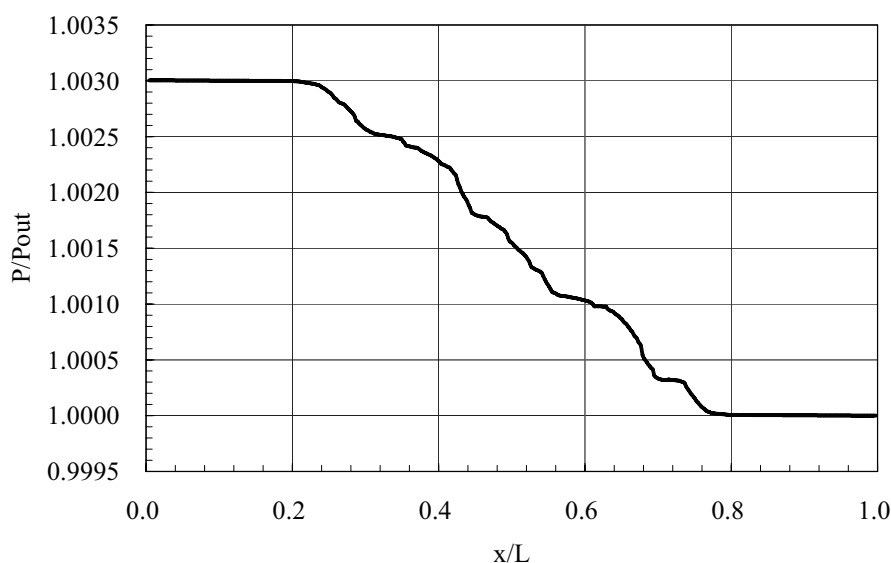


Fig. 8.10: Flow velocity distribution in porous media; $\tau = 1.0$

Fig.8.12 は、全ケースについての摩擦係数と Reynolds 数の関係をプロットし、前節で述べた Eq.(8.1) および Eq.(8.2) と比較したものである。これは、本研究で用いている格子ボルトマン法は標準的なものであり、低い Reynolds 数（一般的に、およそ $Re = 100$ 以下）

Fig. 8.11: Pressure distribution in porous media; $\tau = 1.0$

での層流領域のみに対して適用することができるためである (Feng *et al.*, 2007)。Reynolds 数の増加に伴い、摩擦係数が低下する傾向が得られ、両経験式と定性的に良く一致する結果が得られた。しかしながら定量的に比較すると、シミュレーション結果は経験式とは合致していない。これは、経験式が 3 次元の実験によって導出されたものであり、2 次元シミュレーションでは流路選択の自由度が少ないため (松隈ほか, 1998)、流動抵抗が大きくなったと考えられる。

8.4 多孔質体内を流動する粒子挙動

最後に、格子ボルツマン法と個別要素法を連成した数値計算手法を用いて、多孔質体内を流動する粒子挙動を計算した結果について述べる。ここでは、流体とそれに伴い移動する微粒子が多孔質体の浸透率に与える影響を考察する。

8.4.1 シミュレーション条件

シミュレーションモデルには、前節で用いた多孔質体モデルと同様のものを用いる。境界条件は計算領域左端を流入部、右端を流出部とし、圧力勾配を設定することにより流体運動を生じさせる。また、上端および下端は固定壁とし、バウンス・バック (Bounce-back rule) 法を適用している。ここでは、多孔質体内に流入する微粒子濃度を 3 ケース用意し、これらが浸透率に与える影響を評価する。Case1 は 19 個、Case2 は 38 個、Case3 は 57 個の移動円形粒子が多孔質体区間の左側に配置されている。この粒子の直径は 10mm であり、初期位置座標は擬似一様乱数を用いて決定されている。この粒子群の初期状態での接触は認めていない。また初期状態における移動円形粒子は固定されており、流体運動が定常状態に十分近づいた (10,000step) 後、解放されるものとする。なお、多孔質体を構成

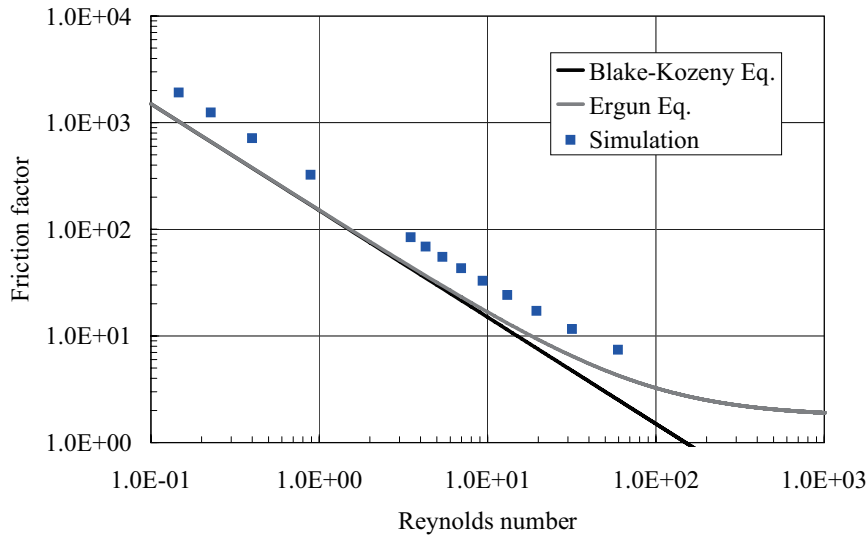


Fig. 8.12: Friction factor vs. Reynolds number

する固定円形粒子の最小離間間隔は、移動円形粒子の直径と同じである。Table.8.4 は、入力パラメータを示している。移動円形粒子と流体の密度比は 2.0 である。

8.4.2 多孔質体内の浸透率

岩石（多孔質体）の浸透率は、岩石中の流体の流れやすさの指標であり、地殻内部（例えば石油貯留層）の物理パラメータの中で、最も重要なものの 1 つである（西澤と金川，2008）。ここでは、多孔質体を通過する流体がダルシー則（Darcy's law）を満たすことを前提に、微粒子が流入する多孔質体の浸透率の経時変化を求める。ダルシー則は、Eq.(8.8) のように表わすことができ、流速が圧力勾配と線形関係にあることを示している。

$$q = -\left(\frac{k}{\mu}\right) \nabla P \quad (8.8)$$

ここで、 q ：流速、 k ：絶対浸透率、 μ ：粘性係数、 ∇P ：圧力勾配である。本研究では、 x 軸方向の絶対浸透率を次に示す Eq.(8.9) から求めた。

$$U_x = -\left(\frac{K_x}{\mu}\right) \frac{\partial p}{\partial x} \quad (8.9)$$

ここで、 U_x ：多孔質体領域の平均流速、 K_x ： x 軸方向の絶対浸透率、 μ ：粘性係数、 $\partial p/\partial x$ ： x 軸方向の圧力勾配である。

8.4.3 微粒子の流入による孔隙閉塞と流体パスの変化

Fig.8.13 から Fig.8.15 に各ケースにおける $t^* = 1.0$ (310,000step) までのシミュレーション結果を示す。ここで、 t^* は計算終了ステップ数で無次元化した時間を意味する。左図は

Table 8.4: Input parameters for the simulation of particle transport with fluid flow in porous media

DEM	Discrete time step	5.0×10^{-6}	[sec]
	Solid density	2.0×10^3	[kg/m ³]
	Friction coefficient between particles	0.25	[-]
	Friction coefficient between particle and wall	0.17	[-]
	Spring stiffness (normal)	2.5×10^6	[N/m]
	Spring stiffness (tangential)	1.0×10^6	[N/m]
	Damping coefficient (normal)	1.0	[Nsec/m]
	Damping coefficient (tangential)	0.63	[Nsec/m]
LBM	Discrete time step	1.0×10^{-4}	[sec]
	Fluid density	1.0×10^3	[kg/m ³]
	Number of nodes	501×152	[-]
	Lattice spacing	1.0×10^{-3}	[m]
	Relaxation time	0.6	[-]
	Pressure gradient	6.7×10^{-2}	[Pa/m]
	Simulation duration	3.1×10^1	[sec]

流速分布、右図は流線網を表わしている。多孔質体内を流れる流体挙動の変化と、これに伴い孔隙中を移動する微粒子の運動を観察することができる。微粒子濃度が高くなるに従い、孔隙中に複数個の移動円形粒子が集積する傾向がある。この円形粒子により、多孔質体の流体パスが閉塞されている。流線網が示すように、初期状態にて比較的モデル全体を流れていた流体は、流体パスの閉塞により、流動抵抗の小さいパスを選択的に流動していることがわかる。

Fig.8.16 は、Case2 における流速分布の値である。y 軸断面に関して平均した x 軸方向の流速分布を示しており、前節で述べた（微粒子を流入させない）多孔質体モデルにおける流速 U_{np} で無次元化されている。横軸は無次元化したモデル長さであり、 $x/L = 0.2 \sim 0.8$ が多孔質体区間である。移動円形粒子を解放する $t^* = 0.032$ (10,000step) までは、多孔質体区間の流速はおよそ 3.2 である。円形粒子が移動を開始すると流動抵抗は低下するため、モデル全体における流速はおよそ 4.1 まで上昇する。これは、圧力差一定の条件で計算しているためである。その後、時間経過と共に移動円形粒子が孔隙中にて集積し始めると、流速はモデル全域で減少する結果となった。なお、 $t^* = 0.196$ (60,000step) における流速低下が顕著なポイント ($x/L = 0.28$) では、Fig.8.14(b) の領域 A で生じた微粒子 5 個による一時的な孔隙閉塞に起因しているものと考えられる。

Fig.8.17 は、Case2 における圧力分布の値である。圧力の値は、y 軸断面に関しての平均圧力 P を流出部における圧力 P_{out} で無次元化したものである。多孔質体モデルのみのケースと比較して、微粒子の流入によるいびつな圧力低下が孔隙内で生じていることが観察できる。

Fig.8.18 および Fig.8.19 はそれぞれ、Case3 における流速分布および圧力分布である。Case2 と比べ Case3 は微粒子による孔隙閉塞が著しいため、流速分布および圧力分布が激しく時間変化していることがわかる。また $t^* = 0.516$ (160,000step) 以降では、 $x/L = 0.4$ 近傍における変化が卓越している。これは多くの流体パスが閉塞されたことにより、Fig.8.15(d) の領域 B が唯一のパスとなるためである。

8.4.4 微粒子濃度が多孔質体の浸透率に与える影響

Fig.8.20 は、各ケースにおける多孔質体区間の浸透率の時間変化を示している。浸透率は $t^* = 0.032$ (10,000step) 経過時の浸透率 K_0 で無次元化した値を用いることにした。したがって、この図は移動を開始した円形粒子群が多孔質体区間を通過することによる浸透率の変化を表わすものである。低濃度の微粒子を流入させた Case1 では、10% 程度の浸透率の低下が見られる。しかし、孔隙閉塞は発生しないため、すぐに浸透率が回復する傾向にある。これに対し、高濃度の微粒子を流入した Case2 および Case3 ではそれぞれ、およそ 20% および 50% の浸透率の低下が生じる結果となった。両ケースとも、移動している全ての微粒子が多孔質体区間から流出した後も孔隙閉塞は継続するものと推測でき、浸透率の回復は望めないと考えられる。

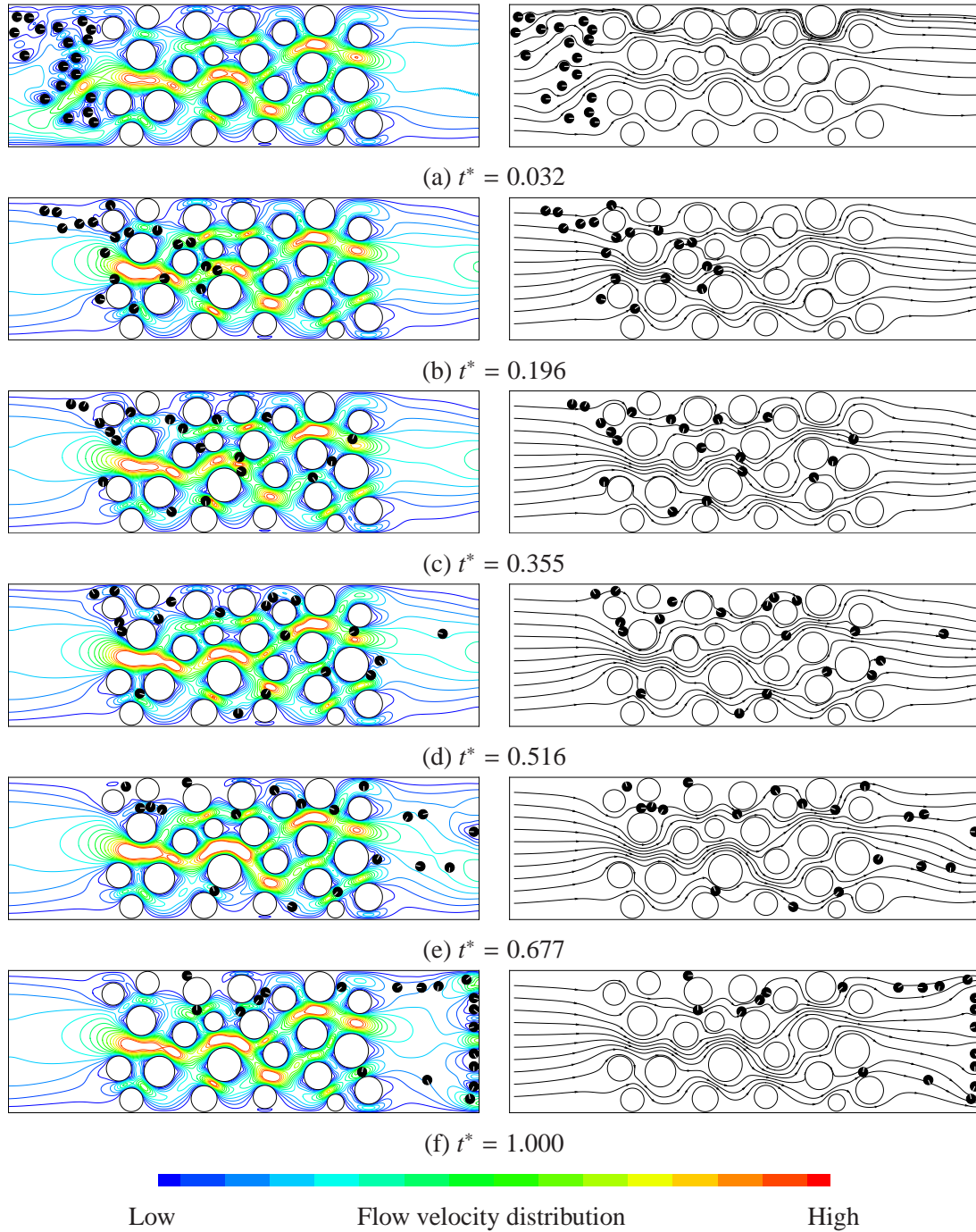


Fig. 8.13: Migration behavior of micro particles in porous media; Case 1

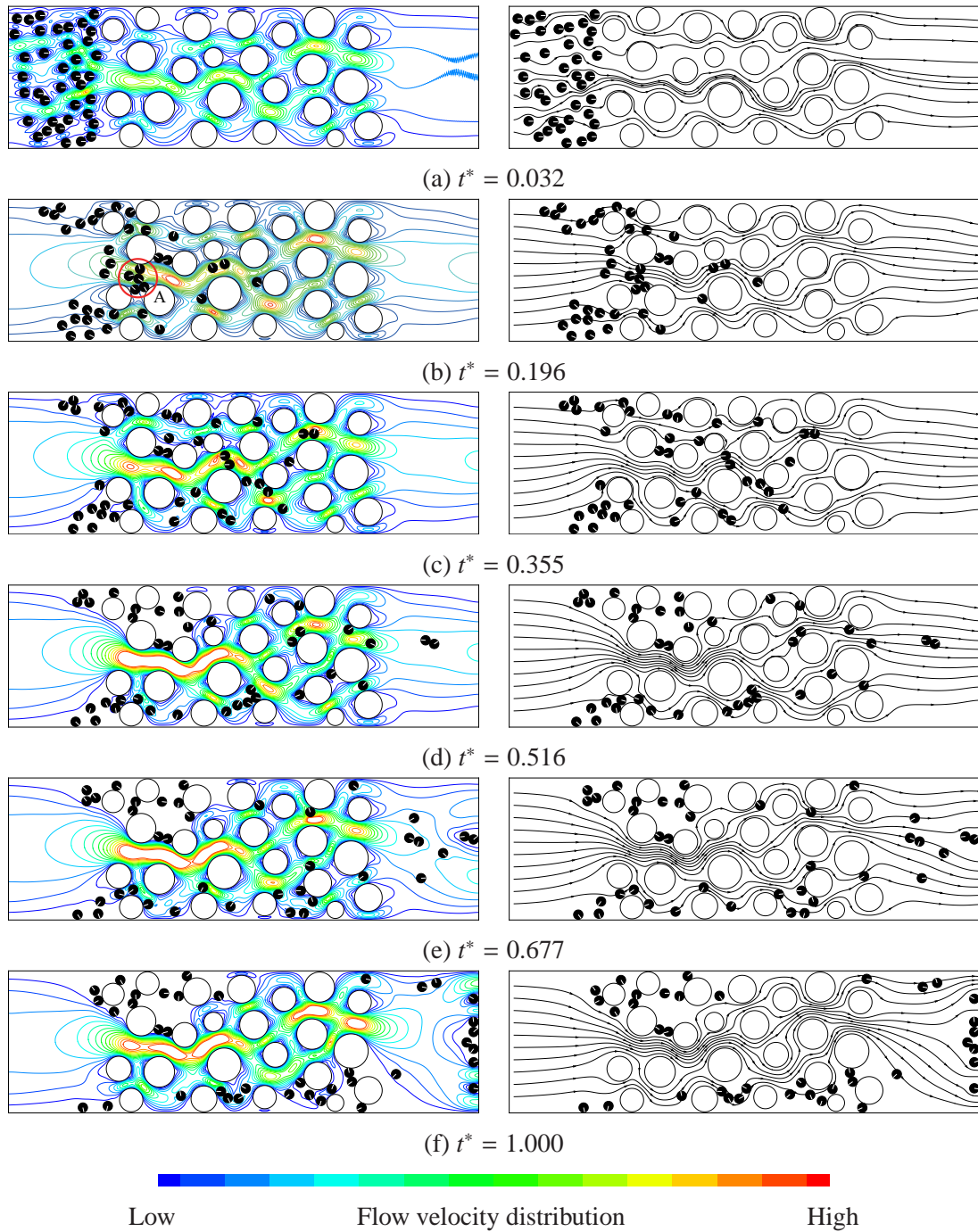


Fig. 8.14: Migration behavior of micro particles in porous media; Case2

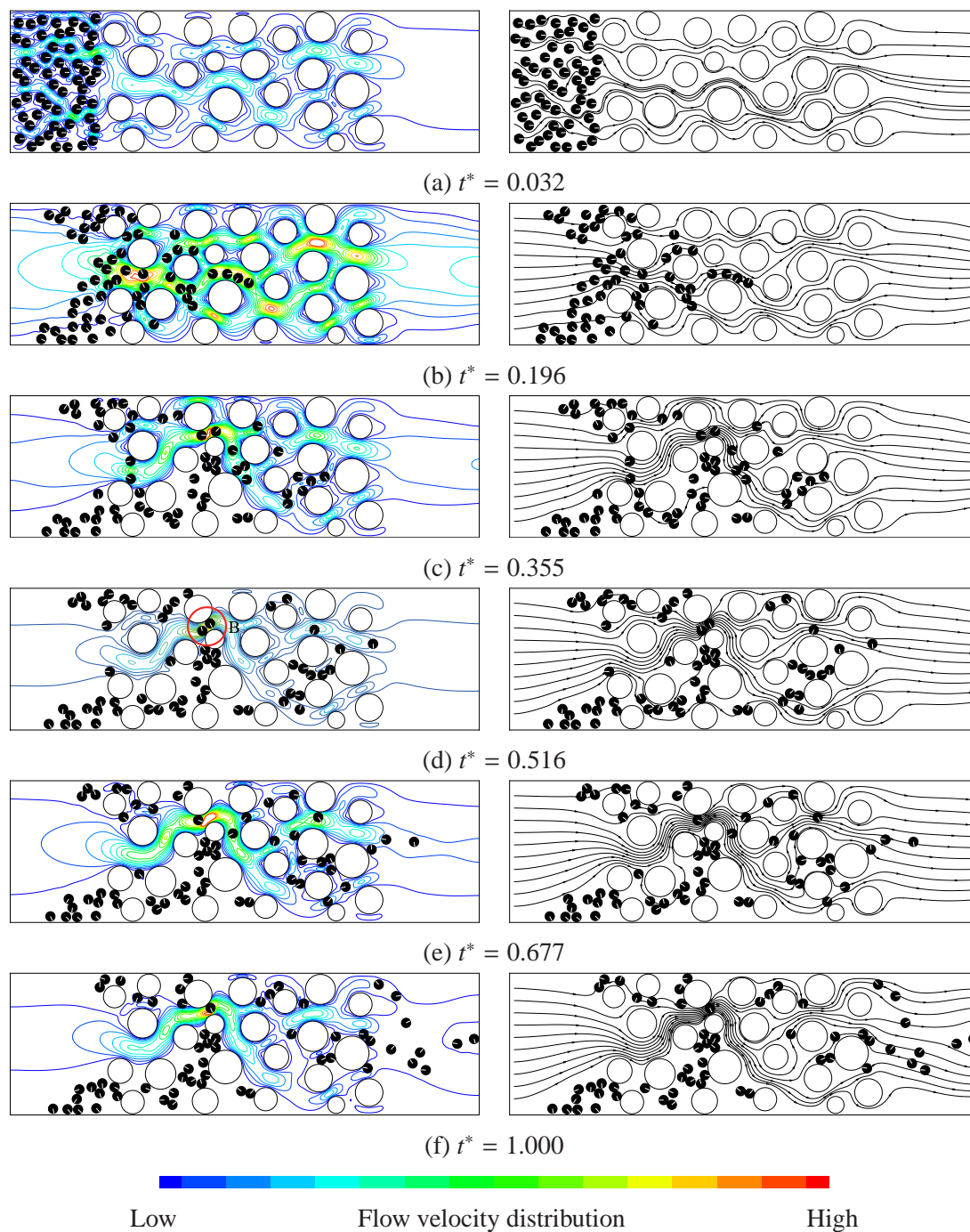


Fig. 8.15: Migration behavior of micro particles in porous media; Case3

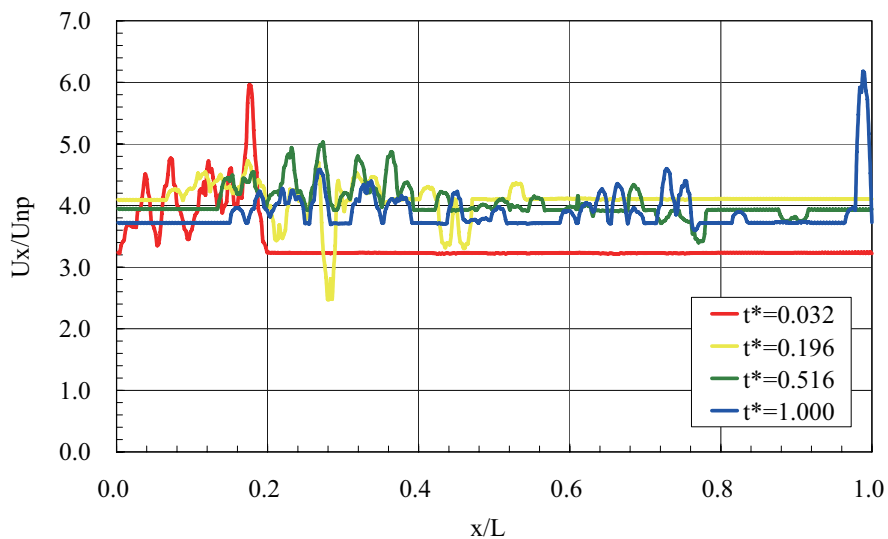


Fig. 8.16: Flow velocity distribution in porous media; Case2

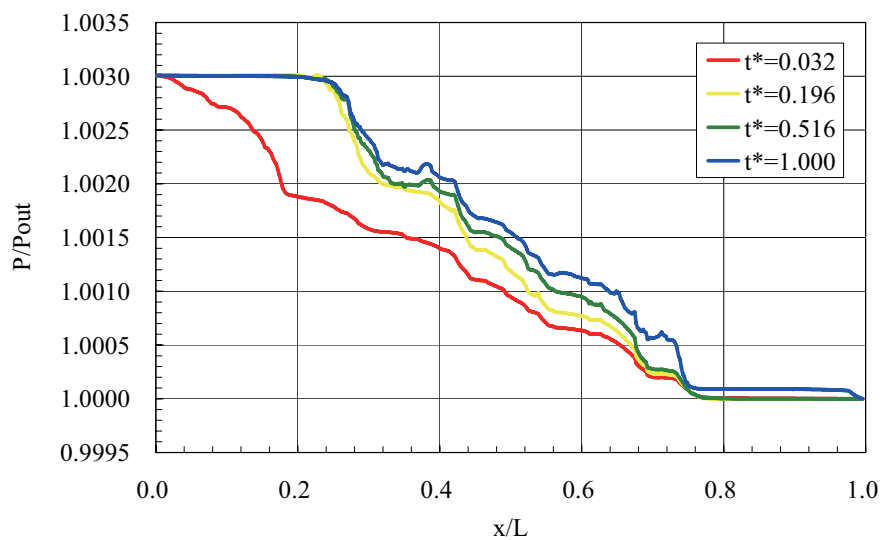


Fig. 8.17: Pressure distribution in porous media; Case2

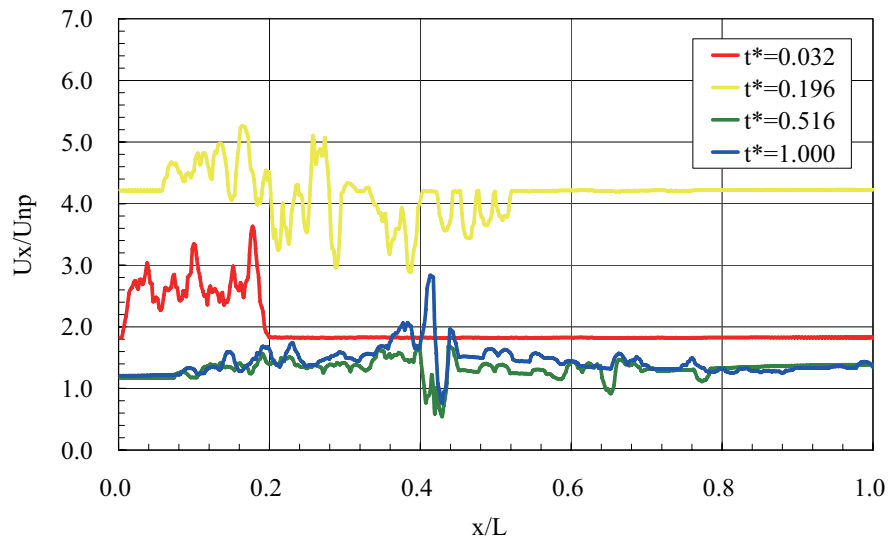


Fig. 8.18: Flow velocity distribution in porous media; Case3

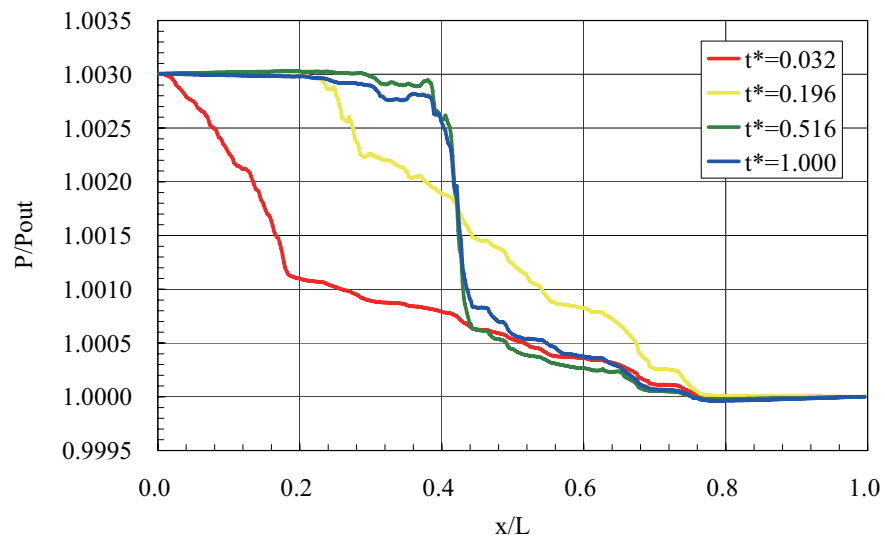


Fig. 8.19: Pressure distribution in porous media; Case3

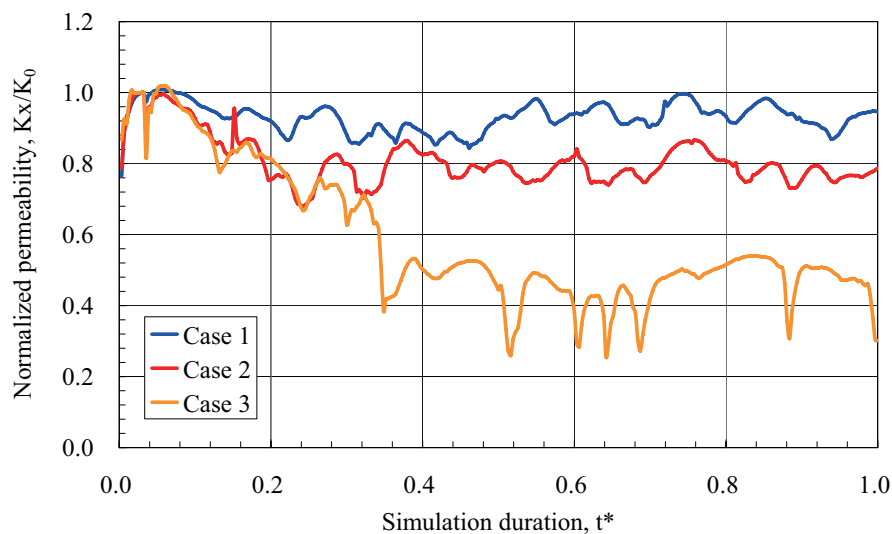


Fig. 8.20: Permeability in porous media

8.5 結言

本章では、多孔質体を流れる微粒子群が浸透率低下に与える影響について考察した。はじめに、格子ボルツマン法と個別要素法を連成した数値計算手法を用いて、チャンネル狭窄部における円形粒子の挙動について検討した。次に、格子ボルツマン法を用いて多孔質体内を流れる流体挙動を計算し、この結果を経験式と定量的に比較することにより、本シミュレーションの妥当性について検討した。最後に、連成計算手法を用いて、多孔質体内に流入する微粒子の濃度が浸透率低下に与える影響を評価した。またこれと同時に、微粒子群が多孔質体内を移動するときの多孔質体内の流速分布および圧力分布の変動についても述べた。以下に得られた知見を列挙する。

1. チャンネル狭窄部近傍の円形粒子の挙動を計算し、Segré-Silberberg 効果および狭窄部の閉塞を再現できることを確認した。
2. 2次元で多孔質体内の流体挙動を計算した結果は、Blake-Kozeny の式および Ergun の式と定性的な一致が見られた。定量的な一致に至らなかったのは、2次元計算が3次元計算と比較して、流路選択の自由度が低く、その結果流動抵抗が大きくなるからであると考えられる。
3. 多孔質体内を通過する微粒子群の挙動を再現し、孔隙閉塞に伴う流体パスの選択的变化を捉えることができた。また、多孔質体内の流速分布および圧力分布の時間変化をシミュレートすることができた。
4. 多孔質体内へ流入する微粒子の濃度が低い場合、若干の浸透率の低下が生じる。しかし、孔隙閉塞には至らず、微粒子が通過した後は、浸透率は回復に向かう傾向にある。

5. 微粒子の濃度が増加するに従い、孔隙閉塞が生じやすくなる。このため、多孔質体の浸透率が著しく低下し、浸透率の回復は望めない可能性もある。本研究におけるモデルでは、最大 50% 程度の浸透率低下を再現することができた。

今回の数値計算は、具体的な現象に特化したものではなく、多孔質体内での粒子輸送問題に関する単純なモデルあるいは境界条件を用いたシミュレーション結果である。特に、本研究で用いたモデルはその境界条件に関する計算手法上の簡略化のため、計算領域の上下端を固定壁とし、滑りなし条件を適用している。このため、固定壁近傍の流体および移動粒子の運動は滑りなし条件の影響が支配的であり、上下方向に連続した多孔質体内での現象を完全に模擬しているとは言い難い。このため、計算はやや複雑になるが、滑り条件あるいは周期境界条件の適用が望ましい。

その他今後の課題としては、次のようなことが挙げられる。8.1 で述べたような具体的な現象に対する適用を目指し、実スケールかつ重力下におけるシミュレーションを実施する。また、流体中における粒子の沈降あるいは衝突挙動などの実験と比較することにより、入力パラメータの決定手法を確立する必要があると思われる。また、多相流体中での粒子運動の計算、濡れ性および毛細管力のモデリング、剛体粒子のみではなく変形可能な粒子運動の計算も今後進めていく予定である。

第9章 サンドアーチの崩壊が出砂に与える影響

9.1 緒言

出砂 (Sand production) とは、地下流体資源の採収に伴い、貯留層を構成する砂粒子が流体に伴って移動し、坑井内に流出する現象である。出砂は、チュービング・パイプ内を閉塞させて生産量の低下を招くこと、あるいは坑内および地上機器に大きな損傷を与えることがあり、これは出砂障害 (Sand trouble) と呼ばれている (独立行政法人 石油天然ガス・金属鉱物資源機構, 1986)。

長年に渡り、出砂は石油業界が抱える非常に困難な課題の1つである。業界各社は、坑井内からの砂の除去あるいは機器の修復に毎年数百万ドルも費やしている。また、生産レートの制限により、さらに数百万ドルもの損失を出すこともある (Saebi *et al.*, 2009)。出砂障害の発生が報告されている地域を挙げると、アメリカのガルフ・コースト (Gulf Coast)、トリニダード、北海、ベネズエラ、ブラジル、マレーシア、インドネシア、中国、オーストラリア、西アフリカと世界的な問題であることがわかる。

また、通常の貯留岩よりも軟弱な地層に胚胎するメタンハイドレートや重質油などの非在来型資源を生産する際には、軟弱な地層や生産に伴う地層強度の低下に起因する出砂障害も確認されている (独立行政法人 石油天然ガス・金属鉱物資源機構, 2009)。

9.1.1 発生メカニズムと対策

出砂は、次のようなケースで発生することが多いとされている (独立行政法人 石油天然ガス・金属鉱物資源機構, 1986)。

1. 貯留層が未固結砂岩で構成されており、砂岩粒子の結合が極めて弱い場合
2. 過大なドロー・ダウン (Drawdown)¹ の下で採取される場合
3. 水の産出によって砂岩粒子間を結合する物質 (セメンチング物質) が溶解された場合

一般的に、出砂障害と呼ばれる現象は、出砂量が全体の生産量の0.1%以上 (もしくは、10lbs/1,000bbl of oil) になった場合に発生すると言われている (独立行政法人 石油天然ガス・金属鉱物資源機構, 2009)。この値は各地域の貯留層性状に依存し、経験的な要素が強

¹ドロー・ダウンとは、油層圧力 (密閉坑底圧) と産油状態における流動坑底圧との圧力差を指し、一般に次の2種類の表現の仕方がある。

(1) (ドロー・ダウン・プレッシャー) = (密閉坑底圧) - (流動坑底圧)

(2) (ドロー・ダウン %) = (ドロー・ダウン・プレッシャー) ÷ (密閉坑底圧) × 100

く影響するが、出砂許容量は生産流体の粘性が低く、生産量の多いガス井または軽質油ほど低くなる傾向にある。こうした出砂障害が発生するメカニズムは概ね、次の5つの経時的現象（Fig.9.1）によって説明することができる。

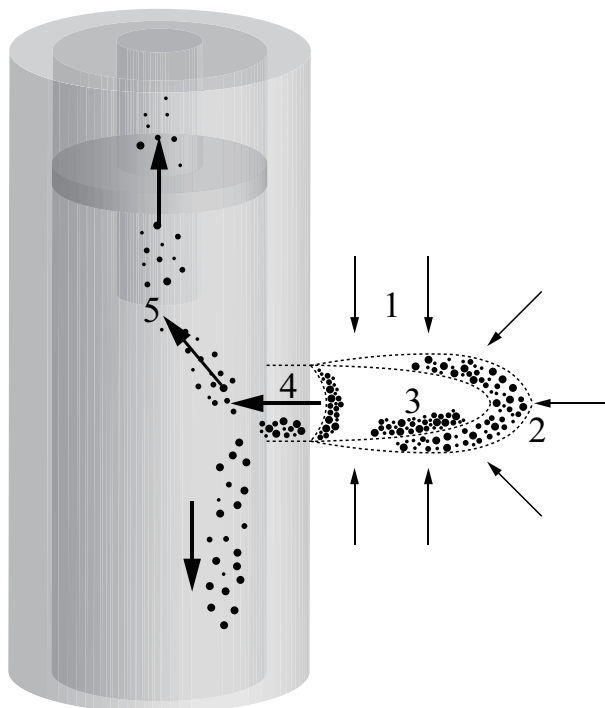


Fig. 9.1: Conceptual diagram for sand production mechanism

1. 岩石強度が地圧に対して低く、パーフォレーション周辺での破壊現象の発生
2. 流量増加や過度の歪みによる砂粒子のパーフォレーション孔内への流入
3. パーフォレーション水平部に滞留した砂粒子の流出
4. 高流量や侵食によるケーシング穿孔部でのサンドアーチの破壊
5. ラットホールに落下した砂粒子、または水平坑井において重力によって底部に滞留した砂粒子の生産流体による押し流し

上記の5つの現象が地下で経時的に発生すると、地上設備の出砂障害として認識される。たとえ地下のパーフォレーション周辺で岩石が破壊しても、生産量が不十分であれば、破壊した砂粒子の流動現象が発生しないため出砂障害を引き起こさない場合もある。こうした事が、出砂量予測を行なう上で、問題を複雑化する要因のひとつとなっている。

出砂障害を防止する目的で実施される出砂対策は、サンド・コントロール（Sand control）と呼ばれる。生産量を制限して砂の産出を抑えることも1つの出砂対策（旧石油公団・石油開発技術センター，1983）であるが、より根本的な対策法としては、グラベル・パック

(Gravel pack) 法²、プラスチック固結 (Plastic consolidation) 法³および両者を組み合わせた方法⁴とがある。その一方で、サンド・マネジメント (Sand management) (Andrew, 2004; Hussain and Gruening, 2008) は出砂をある程度許容するコンセプトである。どのような場合でも、詳細な出砂のメカニズムの解明および出砂量のより正確な予測が求められていると考えられる。

9.1.2 既往の研究

Wang and Wan (2004) は、安定化有限要素解析を用いて、不安定なキャビティ内で生じる砂の流動化現象を検討している。このモデルは、固相、液相および流動化した砂の3つの相それぞれについて、物質量保存を課した混合体理論 (Continuum mixture theory) を基礎に開発されている。

また Papamichos *et al.* (2001) は、外部応力と流量を考慮した出砂量予測理論モデルの開発と実験を実施している。このモデルは、多孔質体の力学モデルに、流体流れによるエロージョン挙動を連成させたものであり、出砂を生じさせる臨界外部応力を予測できるとしている。また、出砂量を外部応力や流量に関する2次多項式で表わしてもいる。さらに Papamichos *et al.* (2008) は、砂岩コアを Class A -Brittle (脆性), Class B -Ductile (延性), Class C -Compactive (圧縮性) の3種類に分類し、それぞれの場合において、パーフォレーション孔を模擬したキャビティの破壊形態を観察している。また、この破壊形態が出砂量に与える影響を次のように示している。(1) Class A では、出砂量は拘束圧の増加に敏感に反応する。(2) Class B では、初期出砂の後、出砂率は低下する。(3) Class C では、拘束圧の増加に伴い、出砂量がゆっくりと増加する。

9.1.3 本研究の目的

9.1.1 で示したように出砂現象には、5つの経時的現象が複雑に関わり合っている。そこで、本研究では、ケーシング穿孔部でのサンドアーチの破壊をターゲットにしている。したがって本章では、パーフォレーション孔内に滞留した砂粒子群と流体の挙動を同時に解くことにより、ケーシング穿孔部近傍におけるサンドアーチの形成と崩壊を再現することを試みる (大槻と松岡, 2008a,b,c; Ohtsuki and Matsuoka, 2008a,b)。また、貯留層内のドロウ・ダウンが出砂量に与える影響について考察を行なうことを目的としている (大槻と松岡, 2009a)。

²スクリーン・パイプ (チュービングの下端がスリット状になった採取管) とケーシング・パイプの環状部 (ケーシング・パイプ外の採取層部を含む場合もある) に、出砂の性状に合わせて粒径を選定したグラベル (小砂利) を充填し、この外側に流出砂の架橋を形成して砂の坑内への侵入を防ぐ方法で、現在最も広く適用されている方法であり、本邦でも実施例がある。

³特殊なプラスチック溶液を採取層に圧入し、坑壁周辺の砂岩粒子を固結させる方法で、作業は簡単であるが、採取層条件など適用範囲に制限がある。

⁴プラスチック溶液で被覆されたグラベルを坑内に充てんする方法で、他の方法より効果が大きい反面、費用も最も高い。

9.2 パーフォレーション孔内のモデリング

パーフォレーション孔内からケーシング穿孔部にかけて集積した砂粒子群を円形粒子で模擬する。流体内で粒子の初期配列を決定すること、すなわち固液連成計算によって粒子をパッキングすることは、計算コストが高いと考えられる。そこで本研究では、(1)個別要素法のみでパッキング、(2)固液連成計算で、粒子間隙の流体運動が定常状態に達するまでの予備計算、(3)ケーシング穿孔部近傍の粒子運動の計算(本計算と呼ぶことにする)を順に実施することにした。

Fig.9.2は、パッキングのシミュレーションモデル(初期状態)を示している。計算領域は、長さ800mm(L)、幅400mm(W)である。円形粒子は703個であり、初期位置は千鳥配置とした。円形粒子の直径は疑似乱数によって、9.8~20.8mm(平均直径は14.9mm)の範囲内で決定されている。計算領域左側に設置された移動壁により、粒子は密に充填される(Fig.9.3)。最終的な粒子充填率は、80.856%である。Table.9.1は、入力パラメータを示している。

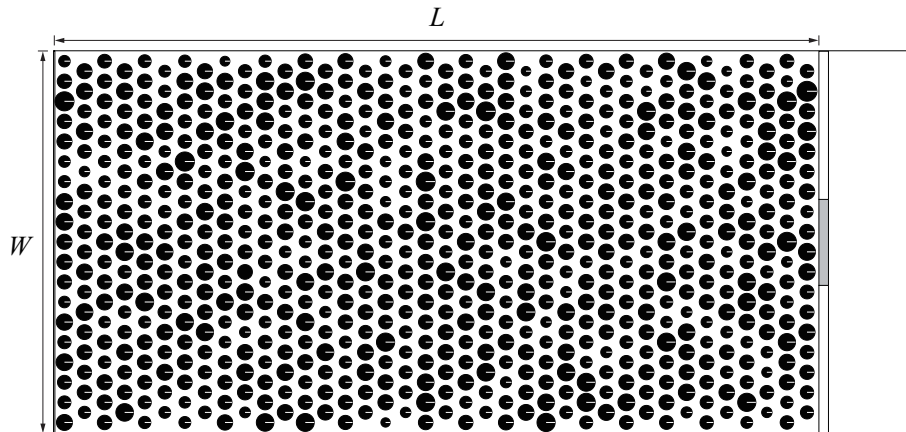


Fig. 9.2: Model for the simulation of packing particles

Fig.9.4は、予備計算および本計算で用いるモデルを示している。計算領域は、長さ800mm(L)、幅400mm(W)、また貯留層側が占める領域長さ P は、400mmである。ここでは、ケーシング孔 C_a は、90mmとした。また、3.4.2で示した圧力境界条件(Zou and He, 1997)を用いて、計算領域左端の流入部から右端の流出部にかけて圧力勾配を設定することにより流体運動を生じさせる。Table.9.2およびTable.9.3は、入力パラメータを示している。本研究では、圧力勾配を3ケース用意し、異なる条件におけるサンドアーチの形成および出砂量を観察することにした。

ただし、予備計算では、Fig.9.2で描かれているケーシング穿孔部に相当する固定壁(灰色の壁)は流体を通過させるが、円形粒子は通過しないものとする。また、予備計算も各ケースの圧力勾配で計算した。

Table 9.1: Input parameters for the simulation of particles packed by a moving left wall

DEM	Discrete time step	5.0×10^{-6}	[sec]
	Solid density	2.5×10^3	[kg/m ³]
	Friction coefficient between particles	0.25	[-]
	Friction coefficient between particle and wall	0.17	[-]
	Spring stiffness (normal)	2.5×10^6	[N/m]
	Spring stiffness (tangential)	1.0×10^6	[N/m]
	Damping coefficient (normal)	1.0	[Nsec/m]
	Damping coefficient (tangential)	0.63	[Nsec/m]
	Simulation duration	2.1×10^3	[sec]

Table 9.2: Input parameters for the simulation of particle transport around perforation tunnel #1

DEM	Discrete time step	5.0×10^{-6}	[sec]
	Solid density	2.5×10^3	[kg/m ³]
	Friction coefficient between particles	0.25	[-]
	Friction coefficient between particle and wall	0.17	[-]
	Spring stiffness (normal)	2.5×10^6	[N/m]
	Spring stiffness (tangential)	1.0×10^6	[N/m]
	Damping coefficient (normal)	1.0	[Nsec/m]
	Damping coefficient (tangential)	0.63	[Nsec/m]
LBM	Discrete time step	1.0×10^{-4}	[sec]
	Fluid density	1.0×10^3	[kg/m ³]
	Number of nodes	802×402	[-]
	Lattice spacing	1.0×10^{-3}	[m]
	Relaxation time	1.0	[-]
	Simulation duration	1.0×10^1	[sec]

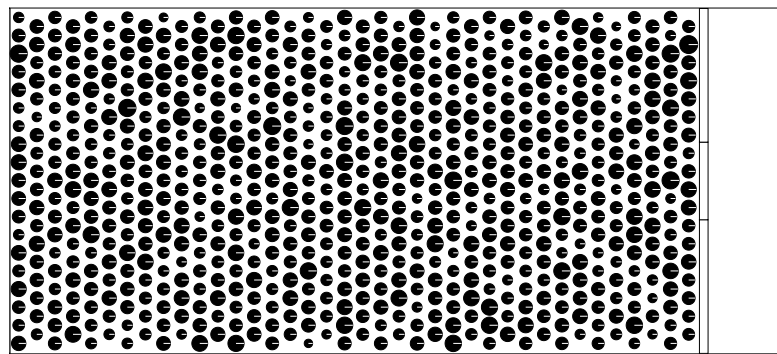
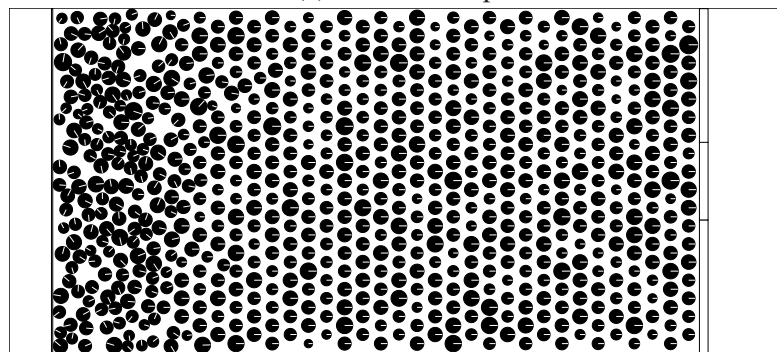
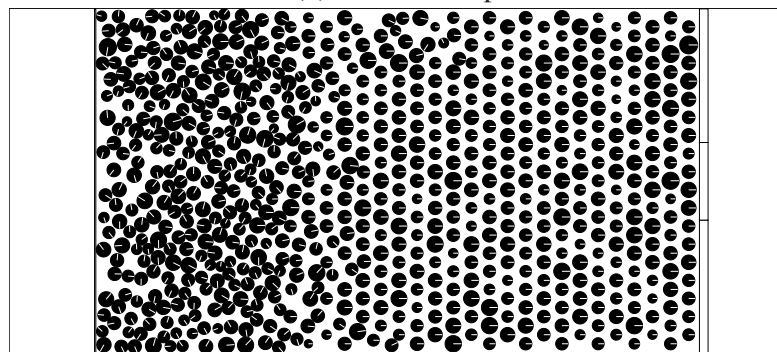
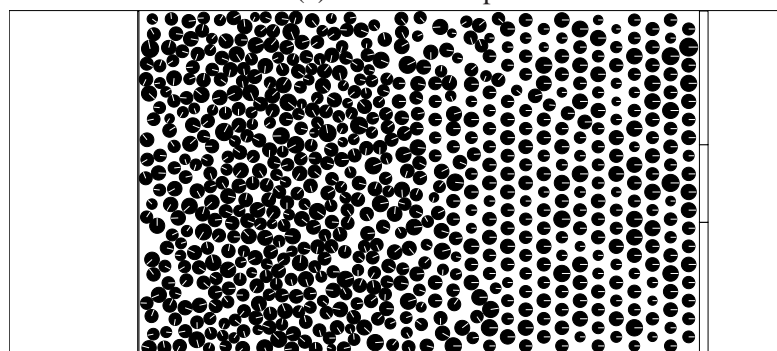
(a) 5.0×10^5 step(b) 5.0×10^7 step(c) 1.0×10^8 step(d) 1.5×10^8 step

Fig. 9.3: Process of particles packed by a moving left wall; (a)-(d)

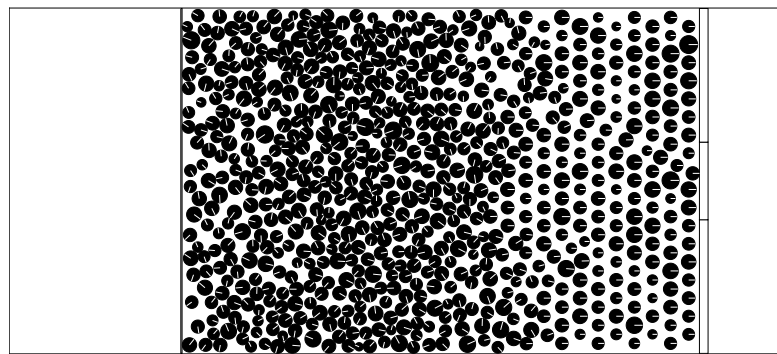
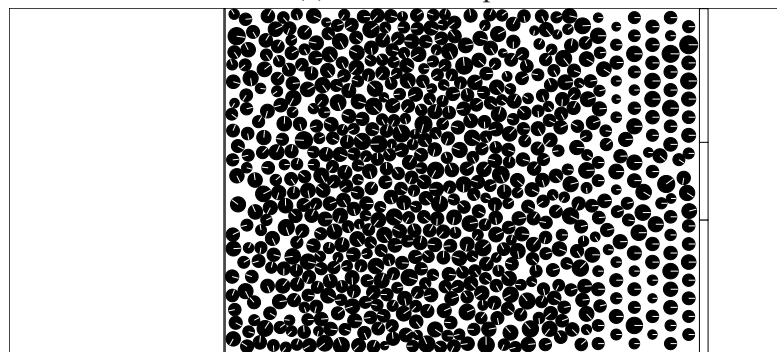
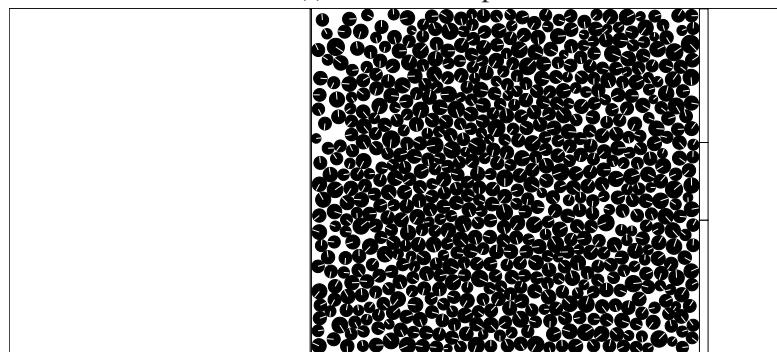
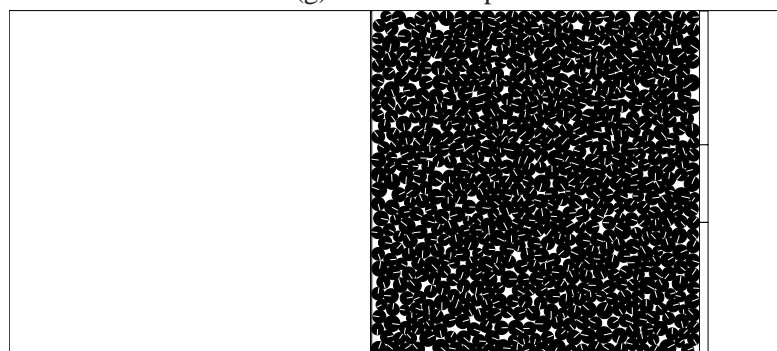
(e) 2.0×10^8 step(f) 2.5×10^8 step(g) 3.5×10^8 step(h) 4.2×10^8 step

Fig. 9.3: Process of particles packed by a moving left wall; (e)-(h)

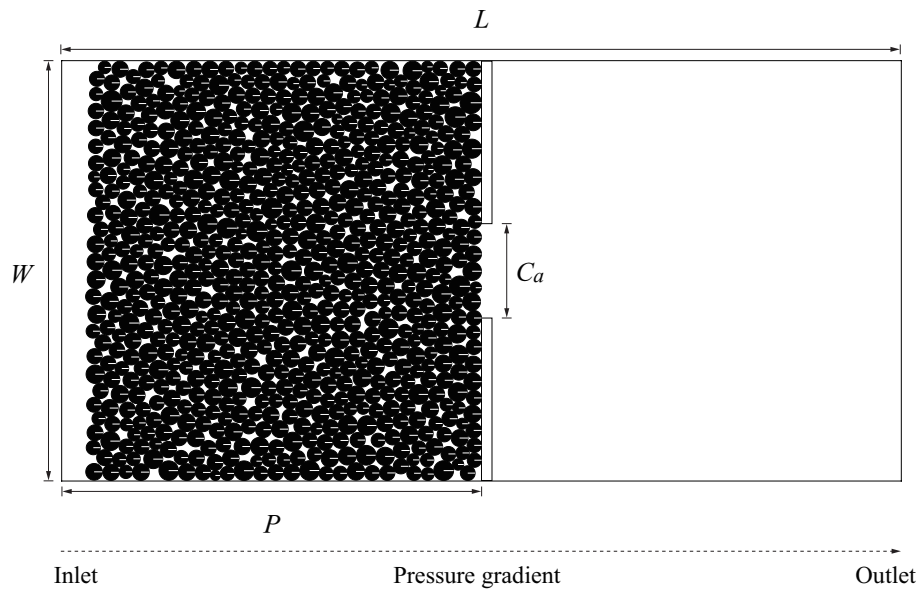


Fig. 9.4: Model for the simulation of sand production

Table 9.3: Input parameters for the simulation of particle transport around perforation tunnel #2

	Pressure gradient [Pa/m]
Case1	3.33×10^{-2}
Case2	1.67×10^{-1}
Case3	3.33×10^{-1}

9.3 シミュレーション結果

9.3.1 ケーシング穿孔部近傍における砂粒子群の挙動

Fig.9.5 から Fig.9.7 はそれぞれ、Case1 から Case3 の各圧力勾配でのシミュレーション結果を示している。各ケースとも、 $t^* = 1.0$ (100,000step) までの結果である。ここで、 t^* は計算終了ステップ数で無次元化した時間を意味する。特に、圧力勾配が大きいCase2 および Case3 において、ケーシング穿孔部からより多くの粒子の流出を確認することができる。同時に、流体は粒子間隙を選択的に流れており、ケーシング穿孔部では粒子の流出挙動に伴い、流速が卓越したポイントが著しく上下方向に変化していることがわかる。したがって、ケーシング穿孔部近傍の領域にて、流体運動により粒子配列が大きく攪乱されていることが推測される。

9.3.2 圧力勾配とサンドアーチの形成および崩壊

Fig.9.8 は、各ケースにおけるケーシング穿孔部から流出した粒子数の時間変化を示したものである。つまり、これは圧力勾配が出砂量に与える効果を表わしている。圧力勾配の小さいCase1 では、ケーシング穿孔部近傍に存在するわずかな粒子が流出しただけであり、大規模な出砂現象には至っていない。これに対して、圧力勾配の大きいCase2 および Case3 では、大規模な出砂現象に発展している。これは、生産量を制限することで、出砂量を抑制することができる現場における経験的操作を数値計算上で定性的に再現できたことになる。

Fig.9.9 は、Case3 のケーシング穿孔部近傍の拡大図である。左図は応力鎖構造、右図は流線網を示している。応力鎖構造は、粒子間の骨格構造を表わすものであり、個々の粒子間に作用している応力の大きさに応じて、粒子間を結合するラインの太さを変えて表示した。粒子サイズにはバラツキがあり、またランダムに配置されていることによって、流体パスの劇的な変化が生じていることが流線網の変化から読み取ることができる。偏った流体パスが形成されると、応力鎖構造が示すように、サンドアーチ（アーチ構造）が不安定となり、ケーシング穿孔部近傍にて応力鎖の消滅が確認できる。その後、新しい経路のサンドアーチが形成されるが、圧力勾配が大きいケースでは、流体運動によるより大規模な攪乱が生じるため、粒子の流出は抑制されないものとする。

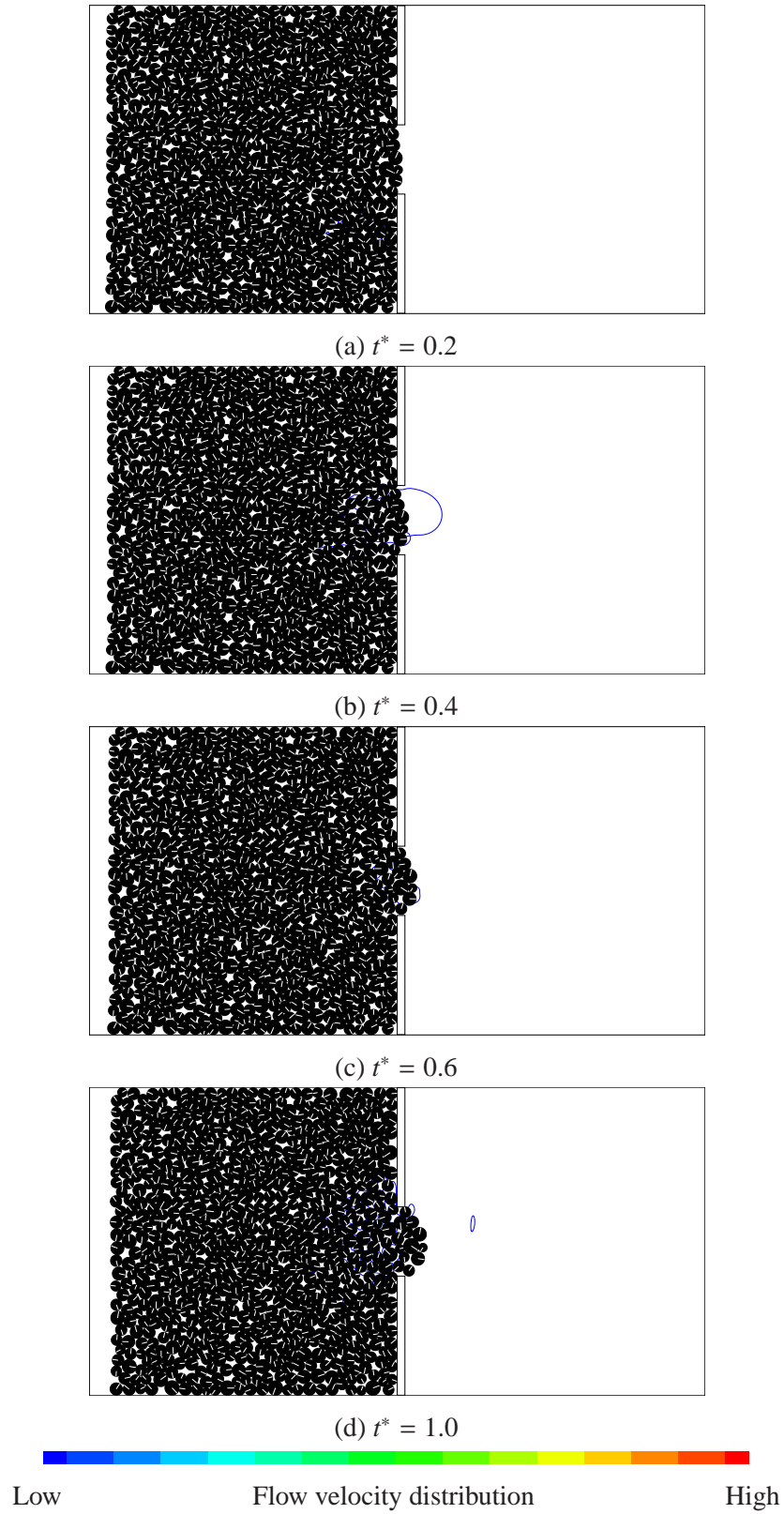
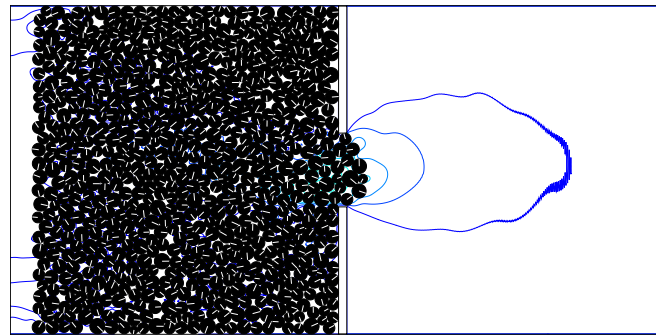
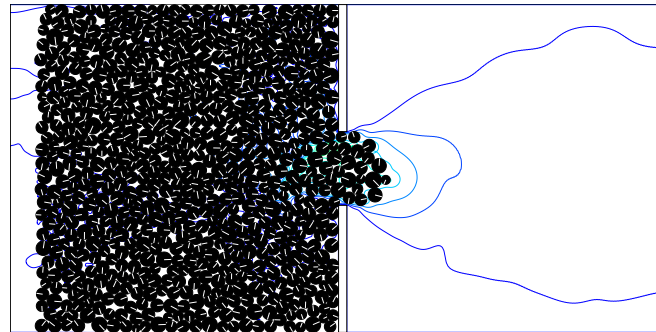


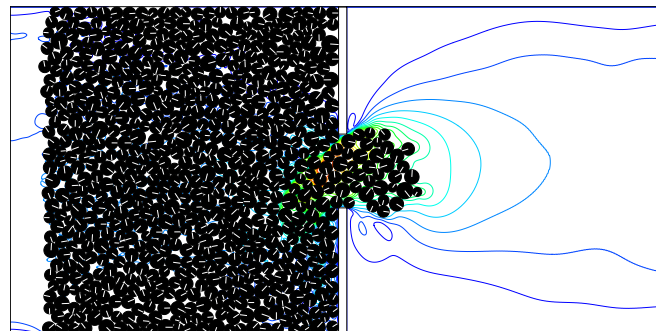
Fig. 9.5: Migration behavior of solid particles with fluid flow near a cavity; Case1



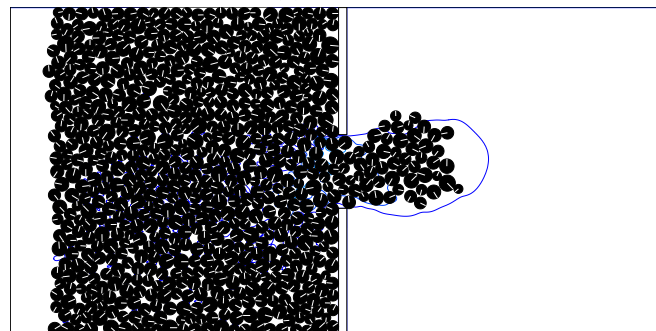
(a) $t^* = 0.2$



(b) $t^* = 0.4$



(c) $t^* = 0.6$



(d) $t^* = 1.0$

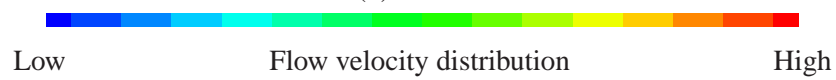


Fig. 9.6: Migration behavior of solid particles with fluid flow near a cavity; Case2

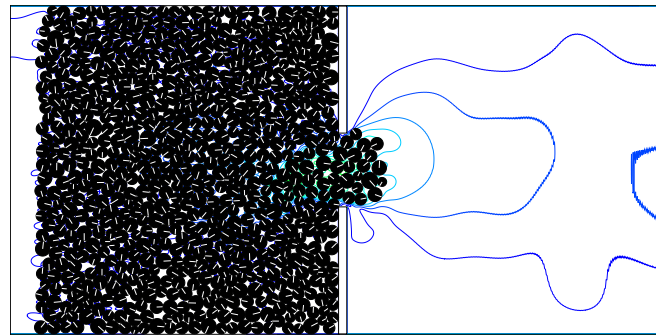
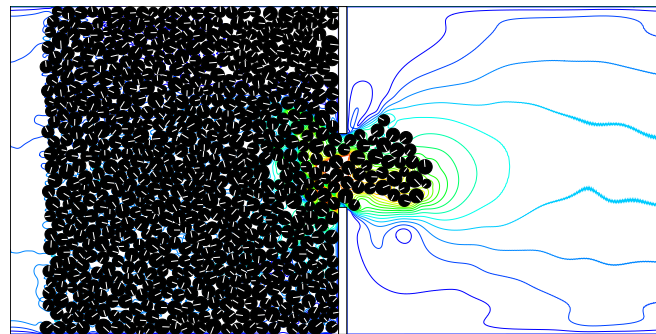
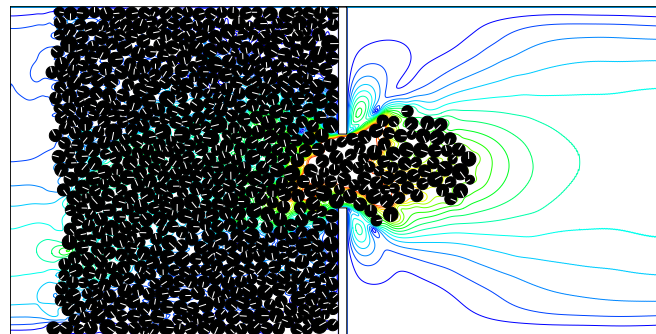
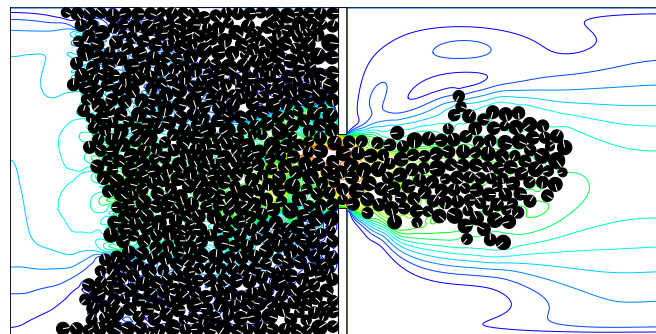
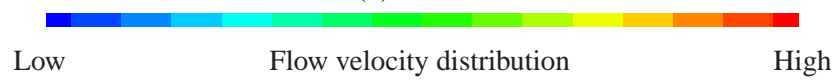
(a) $t^* = 0.2$ (b) $t^* = 0.4$ (c) $t^* = 0.6$ (d) $t^* = 1.0$ 

Fig. 9.7: Migration behavior of solid particles with fluid flow near a cavity; Case3

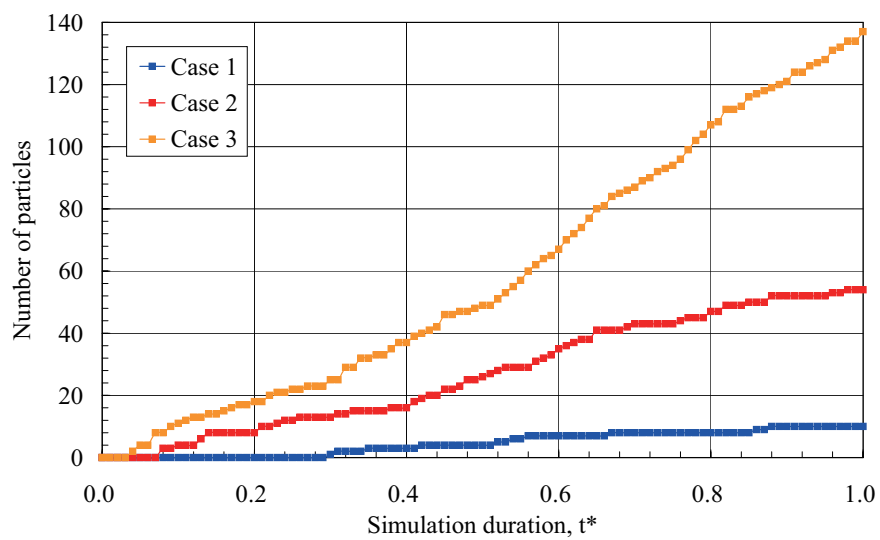


Fig. 9.8: The number of particles flowing out from perforation tunnel vs. simulation duration

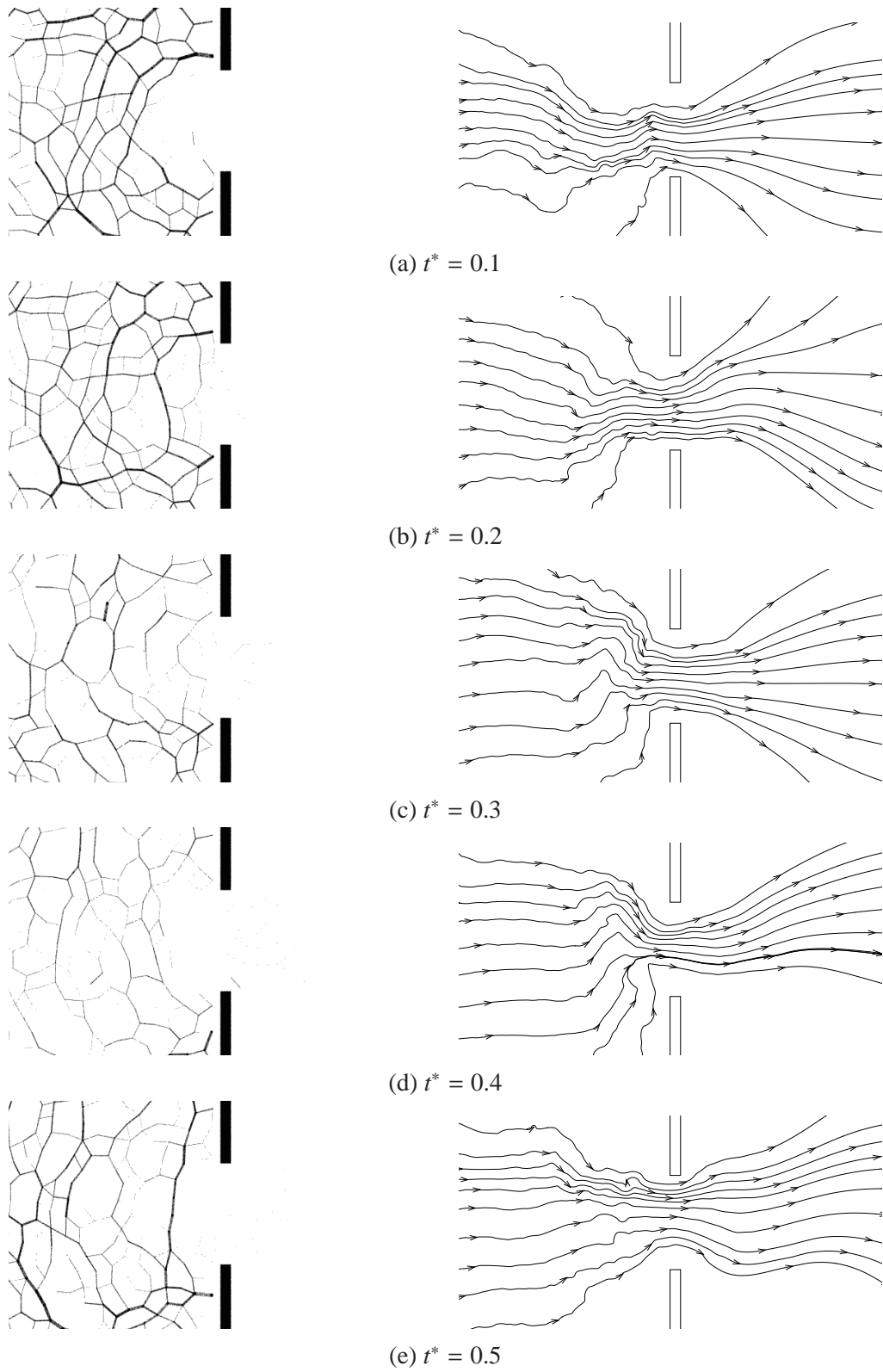


Fig. 9.9: Sand bridge and streamline near a cavity; Case3 (a)-(e)

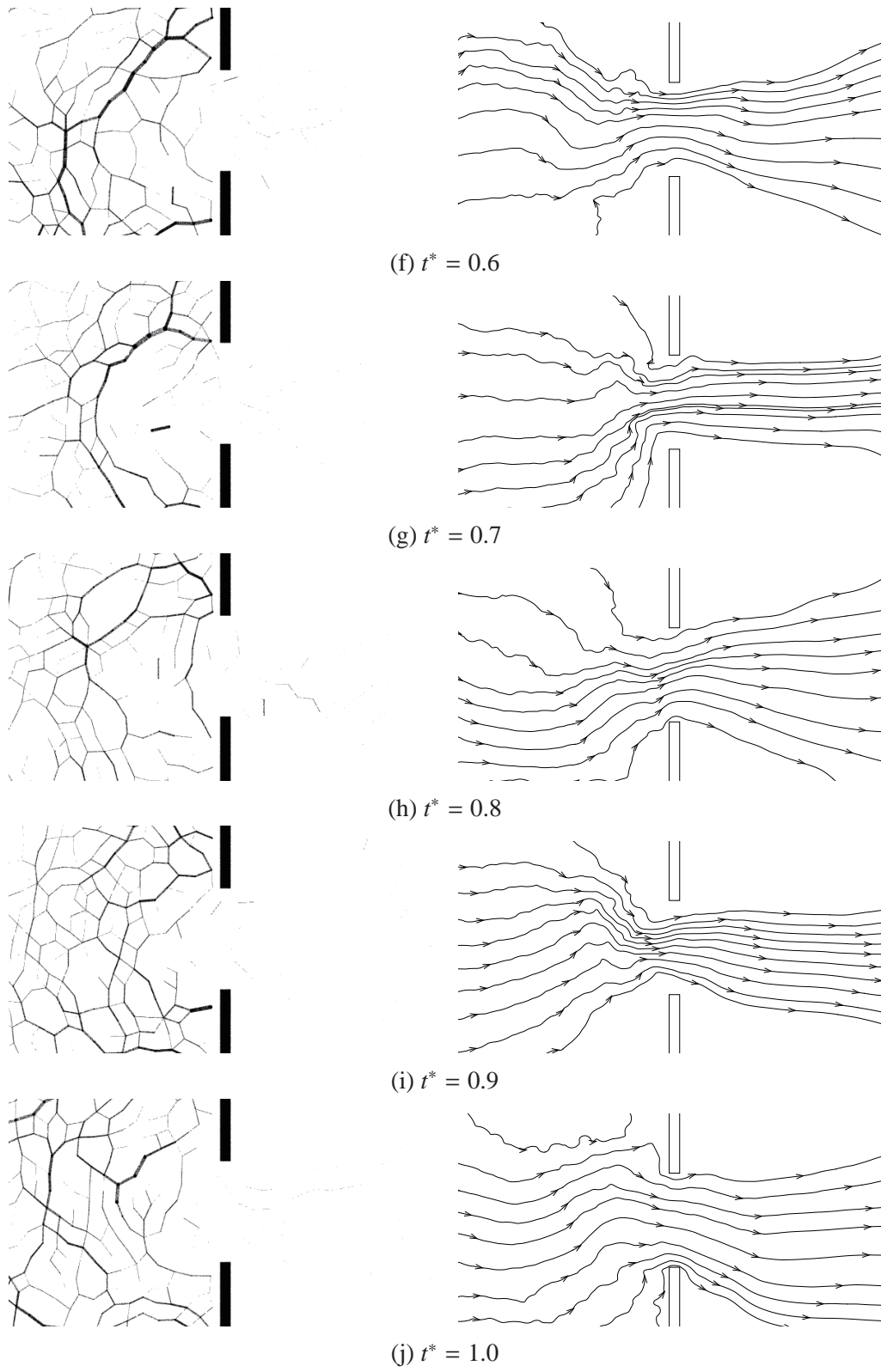


Fig. 9.9: Sand bridge and streamline near a cavity; Case3 (f)-(j)

9.4 結言

本章では、パーフォレーション孔内に滞留した砂粒子群とその間隙を流動する流体運動を同時に解くことにより、ケーシング穿孔部近傍におけるサンドアーチの形成および崩壊をマイクロメカニクスのレベルで再現することを試みた。圧力勾配の増加に伴い、ケーシング穿孔部近傍にて粒子配列の攪乱が激しくなる傾向が見られ、サンドアーチの不安定性を助長していると考えられる。

今後の課題としては、地圧の導入および高密度充填状態における粒子間の流体挙動の取り扱いを挙げることができる。さらに、今回の数値計算で用いたモデルは円形粒子で構成されており、流体運動に抵抗する要素としては、粒子間の接触点で生じる摩擦力のみに過ぎない。したがって、複雑な粒子形状を複数個の結合粒子で表現するハイパー粒子による計算がより望ましいと言える。

第10章 結論と今後の課題

本研究は、直接数値計算法 (Direct numerical simulation; DNS) の範疇で、格子ボルツマン法と個別要素法をカップリングしたハイブリッドシミュレータを自主開発し、円形粒子の沈降挙動 (第6章)、スラリーの固液分離促進 (第7章)、粒子輸送による多孔質体の浸透率低下 (第8章)、出砂障害 (第9章) など資源工学分野で見られる現象に応用したものである。

第6章では、連成計算手法の妥当性の検証と円形粒子の沈降挙動の計算を行ない、以下の結論を得た。(1) 固体粒子周りの流れ場を直接数値計算法のコンセプトで解く場合、円形粒子の直径に対する格子数 ζ は、非常に重要なパラメータであると考えられる。そこで、円環状クエット流れの計算結果を Navier-Stokes 方程式の理論値と比較し、おおよそ $\zeta = 9$ 以上で理論値との誤差が数 % 以内となることがわかった。(2) Reynolds 数の大きさに対応する単一円形粒子の沈降モードの再現を試みた。また、既往の計算結果と比較し、その妥当性を確認した。(3) 2つの円形粒子間における DKT (Drafting, Kissing, and Tumbling) 現象を再現した。また、2つの円形粒子の直径比 R が 1.15 以上になると、第2回目以降の DKT cycle は生じないことがわかった。

第7章では、傾斜容器内におけるスラリーの固液分離促進現象を再現し、容器傾斜角および対流の形成が沈降速度 (分離速度) に与える影響を検討した。これにより、以下の結論を得た。(1) 粒子ベースの数値計算手法を採用したことにより、沈降過程における固体粒子群の運動および上昇する流れ (液相) を明確に捉えることができた。(2) 容器傾斜角の増加に伴う分離速度の向上を再現することができた。傾斜角 20° 以上では、 0° および 10° のケースと比較して、分離時間が約 $2/3$ に短縮されることがわかった。(3) 固体粒子群の沈降速度は、単一粒子の終端速度の最大 1.5 倍に達することを示し、容器内に形成される対流が固体粒子の沈降速度の向上に寄与していることを明らかにした。

第8章では、流体流動に伴う粒子輸送が多孔質体の浸透率低下に与える影響の検討を行った。微粒子が多孔質体内の孔隙を閉塞するプロセスを再現し、また同時に多孔質体内の流速分布および圧力分布を評価した。これにより、以下の結論を得た。(1) 多孔質体内へ流入する微粒子の濃度が低い場合、若干の浸透率の低下が生じる。しかし、孔隙閉塞には至らず、微粒子が通過した後は、浸透率は回復に向かう傾向にある。(2) 微粒子の濃度が増加するに従い、孔隙閉塞が生じやすくなる。このため、多孔質体の浸透率が著しく低下し、浸透率の回復は望めない。本研究のモデルでは、最大 50% 程度の浸透率低下を再現することができた。

第9章では、出砂障害を計算対象とし、パーフォレーション孔内に集積した砂粒子がケーシング穿孔部から流出するプロセスについて検討した。その結果、ケーシング穿孔部にて形成されるサンドアーチを再現することができ、またサンドブリッジの崩壊が出砂量の増加に繋がることを示した。

本研究で用いたハイブリッドシミュレータは、高解像度で固体粒子周りの流れ場を捉え、また高精度で流体中の固体粒子運動を再現できる特長を有している。したがって、この手法はマイクロメカニクスの観点から固液二相問題を考察する上で、非常に有効な計算ツールであると言える。現在、格子ボルツマン法は、多相流体モデルおよび自由界面の表現などへ拡張する研究が盛んに行なわれている。したがって、多相流体と固体粒子の運動を同時に計算するシミュレータへの拡張も可能であると考えられ、より複雑な現象への応用が進むことを期する。

付録A Chapman-Enskog 展開

本付録 A では、格子ボルツマン法において、基礎方程式から Navier-Stokes 方程式を導出するための出発点となる式を、Chapman-Enskog 展開を用いて導出する。

以後の導出過程の基本となる諸式をまとめておくと、以下のようになる。

$$\rho(\mathbf{r}, t) = \sum_{\alpha} f_{\alpha}(\mathbf{r}, t) \quad (\text{A.1})$$

$$\rho(\mathbf{r}, t) \mathbf{u}(\mathbf{r}, t) = \sum_{\alpha} \mathbf{c}_{\alpha} f_{\alpha}(\mathbf{r}, t) \quad (\text{A.2})$$

$$\prod_{ij} = \sum_{\alpha} c_{\alpha i} c_{\alpha j} f_{\alpha}(\mathbf{r}, t) \quad (\text{A.3})$$

$$f_{\alpha}(\mathbf{r} + \mathbf{c}_{\alpha} \Delta t, t + \Delta t) = f_{\alpha}(\mathbf{r}, t) + \Omega_{\alpha}(\mathbf{r}, t) \quad (\text{A.4})$$

$$\Omega_{\alpha}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\tau} \{ f_{\alpha}^{(0)}(\mathbf{r}, t) - f_{\alpha}(\mathbf{r}, t) \} \quad (\text{A.5})$$

Eq.(A.4) の左辺を Taylor 級数展開すると、Eq.(A.4) は次のようになる。

$$\begin{aligned} \Delta t \frac{\partial f_{\alpha}}{\partial t} + \frac{(\Delta t)^2}{2} \frac{\partial^2 f_{\alpha}}{\partial t^2} + \Delta t (\mathbf{c}_{\alpha} \cdot \nabla) f_{\alpha} + \frac{(\Delta t)^2}{2} (\mathbf{c}_{\alpha} \cdot \nabla) (\mathbf{c}_{\alpha} \cdot \nabla) f_{\alpha} + (\Delta t)^2 (\mathbf{c}_{\alpha} \cdot \nabla) \frac{\partial f_{\alpha}}{\partial t} \\ = \frac{1}{\tau} (f_{\alpha}^{(0)} - f_{\alpha}) \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

ある微小量 ε を用いて、分布関数を次のように展開する。

$$f_{\alpha} = f_{\alpha}^{(0)} + \varepsilon f_{\alpha}^{(1)} + \varepsilon^2 f_{\alpha}^{(2)} + \dots \quad (\text{A.7})$$

Eq.(A.7) を Eq.(A.1) と Eq.(A.2) に代入すると、次の関係式が得られる。

$$\sum_{\alpha} f_{\alpha}^{(0)} = \rho, \quad \sum_{\alpha} \mathbf{c}_{\alpha} f_{\alpha}^{(0)} = \rho \mathbf{u} \quad (\text{A.8})$$

$$\sum_{\alpha} f_{\alpha}^{(n)} = 0, \quad \sum_{\alpha} \mathbf{c}_{\alpha} f_{\alpha}^{(n)} = 0 \quad \text{for } n = 1, 2, \dots \quad (\text{A.9})$$

次に、Chapman-Enskog 展開について考える。流体現象を特徴付ける特性時間は、流体の速度に基づく特性時間 T_1 と、流体の粘性に基づく散逸を特徴付ける特性時間 T_2 があり、一般に、 $T_2 \gg T_1$ の関係がある。したがって、 $\Delta t/T_1 = O(\varepsilon)$ のように微小量 Δt と ε を取ると、 $\Delta t/T_2 = O(\varepsilon^2)$ となる。一方、距離の代表長さを L_1 とすれば、一般に $\Delta x/L_1 = O(\varepsilon)$

となるように Δx を取る。以上を考慮し、時間微分を特性時間 T_1 に対する時間微分と、特性時間 T_2 に対する時間微分の寄与の和として考える。すなわち、

$$\frac{\partial}{\partial t} = \varepsilon \frac{\partial}{\partial t_1} + \varepsilon^2 \frac{\partial}{\partial t_2} \quad (\text{A.10})$$

同様に、 $\mathbf{r} = (r_x, r_y)$ に対して、

$$\frac{\partial}{\partial r_i} = \varepsilon \frac{\partial}{\partial r_{1i}} \quad (i = x, y) \quad (\text{A.11})$$

以上のように、変数 (t, \mathbf{r}) から、変数 (t_1, t_2, r_1) に変換して論じることを意味している。通常のオーダー比較の場合、微分した値がどの程度のオーダーになるかを比較する。例えば、 $\partial g_1 / \partial t = O(\varepsilon)$ や $\partial g_2 / \partial t = O(\varepsilon^2)$ のように評価して、各項の大きさを比較することで微小項を省略し、簡略化する操作を行なう。一方、ここで取り扱っている Chapman-Enskog 展開の場合には、 $\partial g_1 / \partial t$ や $\partial g_2 / \partial t$ が同程度の大きさになり、その大きさはその係数の ε や ε^2 で比較しようとするものである。

Eq.(A.5) の衝突項は次の特徴を有する。

$$\sum_{\alpha} \Omega_{\alpha} = 0, \quad \sum_{\alpha} c_{\alpha} \Omega_{\alpha} = 0 \quad (\text{A.12})$$

Eq.(A.6)、Eq.(A.10)、Eq.(A.11) より、

$$\begin{aligned} & \Delta t \left\{ \varepsilon \frac{\partial f_{\alpha}}{\partial t_1} + \varepsilon^2 \frac{\partial f_{\alpha}}{\partial t_2} \right\} + (\Delta t)^2 \frac{\varepsilon^2}{2} \frac{\partial^2 f_{\alpha}}{\partial t_1^2} + \Delta t \varepsilon (c_{\alpha} \cdot \nabla_1) f_{\alpha} \\ & + (\Delta t)^2 \frac{\varepsilon^2}{2} (c_{\alpha} \cdot \nabla_1) (c_{\alpha} \cdot \nabla_1) f_{\alpha} + (\Delta t)^2 \varepsilon^2 (c_{\alpha} \cdot \nabla_1) \frac{\partial f_{\alpha}}{\partial t_1} + O(\varepsilon^3) = \Omega_{\alpha} \end{aligned} \quad (\text{A.13})$$

この式の両辺に c_{α} を掛けると、

$$\begin{aligned} & \Delta t \left\{ \varepsilon c_{\alpha} \frac{\partial f_{\alpha}}{\partial t_1} + \varepsilon^2 c_{\alpha} \frac{\partial f_{\alpha}}{\partial t_2} \right\} + (\Delta t)^2 \frac{\varepsilon^2}{2} c_{\alpha} \frac{\partial^2 f_{\alpha}}{\partial t_1^2} + \Delta t \varepsilon c_{\alpha} (c_{\alpha} \cdot \nabla_1) f_{\alpha} \\ & + (\Delta t)^2 \frac{\varepsilon^2}{2} c_{\alpha} (c_{\alpha} \cdot \nabla_1) (c_{\alpha} \cdot \nabla_1) f_{\alpha} + (\Delta t)^2 \varepsilon^2 c_{\alpha} (c_{\alpha} \cdot \nabla_1) \frac{\partial f_{\alpha}}{\partial t_1} + O(\varepsilon^3) = c_{\alpha} \Omega_{\alpha} \end{aligned} \quad (\text{A.14})$$

Eq.(A.7) を Eq.(A.13) に代入し、両辺を α に関して和を取って整理し、 ε のオーダーの項をゼロと置くことで、次の式が得られる。

$$\sum_{\alpha} \left\{ \Delta t \frac{\partial f_{\alpha}^{(0)}}{\partial t_1} + \Delta t (c_{\alpha} \cdot \nabla_1) f_{\alpha}^{(0)} \right\} = 0 \quad (\text{A.15})$$

同様に、Eq.(A.14) より、

$$\sum_{\alpha} \left\{ \Delta t \frac{\partial}{\partial t_1} (c_{\alpha i} f_{\alpha}^{(0)}) + \Delta t \sum_j c_{\alpha i} c_{\alpha j} \frac{\partial}{\partial r_{1j}} f_{\alpha}^{(0)} \right\} = 0 \quad (\text{A.16})$$

Eq.(A.3)、Eq.(A.8) を用いると、Eq.(A.15)、Eq.(A.16) は次のようになる。

$$\frac{\partial}{\partial t_1} \rho + \nabla_1 \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (\text{A.17})$$

$$\frac{\partial}{\partial t_1}(\rho u_i) + \sum_j \frac{\partial}{\partial r_{1j}}(\Pi_{ij}^{(0)}) = 0 \quad (\text{A.18})$$

ただし、 $\Pi_{ij}^{(0)} = \sum_{\alpha} c_{\alpha i} c_{\alpha j} f_{\alpha}^{(0)}$ である。

Eq.(A.15) を導出したときの元の式において、 ε^2 のオーダーの項をゼロとすることにより、次の式が得られる。

$$\frac{\partial \rho}{\partial t_2} + \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial^2 \rho}{\partial t_1^2} + \frac{\Delta t}{2} \sum_i \sum_j \frac{\partial}{\partial r_{1i}} \frac{\partial}{\partial r_{1j}} \Pi_{ij}^{(0)} + \Delta t \sum_i \frac{\partial}{\partial t_1} \frac{\partial}{\partial r_{1i}}(\rho u_i) = 0 \quad (\text{A.19})$$

同様に、Eq.(A.16) を導出したときの式の ε^2 のオーダーの項より、

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t_2}(\rho u_i) + \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial^2}{\partial t_1^2}(\rho u_i) + \sum_j \frac{\partial}{\partial r_{1j}} \Pi_{ij}^{(1)} + \frac{\Delta t}{2} \sum_j \sum_k \frac{\partial}{\partial r_{1j}} \frac{\partial}{\partial r_{1k}} S_{ijk}^{(0)} \\ + \Delta t \sum_j \frac{\partial}{\partial t_1} \frac{\partial}{\partial r_{1j}} \Pi_{ij}^{(0)} = 0 \end{aligned} \quad (\text{A.20})$$

ここに、 $\Pi_{ij}^{(1)} = \sum_{\alpha} c_{\alpha i} c_{\alpha j} f_{\alpha}^{(1)}$, $S_{ijk}^{(0)} = \sum_{\alpha} c_{\alpha i} c_{\alpha j} c_{\alpha k} f_{\alpha}^{(0)}$ である。

次に、Eq.(A.19)、Eq.(A.20) の変形を行なう。Eq.(A.17) を考慮すると、

$$\frac{\partial^2 \rho}{\partial t_1^2} = \frac{\partial}{\partial t_1} \{-\nabla_1 \cdot (\rho \mathbf{u})\} = -\frac{\partial}{\partial t_1} \left\{ \sum_i \frac{\partial}{\partial r_{1i}}(\rho u_i) \right\} \quad (\text{A.21})$$

この式を用いて、Eq.(A.19) を変形すると、最終的に次のようになる。

$$\frac{\partial \rho}{\partial t_2} + \frac{\Delta t}{2} \sum_i \frac{\partial}{\partial r_{1i}} \left\{ \frac{\partial}{\partial t_1}(\rho u_i) + \sum_j \frac{\partial}{\partial r_{1j}} \Pi_{ij}^{(0)} \right\} = 0 \quad (\text{A.22})$$

Eq.(A.18) の関係式を用いると、結局、次の式が得られる。

$$\frac{\partial \rho}{\partial t_2} = 0 \quad (\text{A.23})$$

Eq.(A.18) を t_1 で偏微分すると、

$$\frac{\partial^2}{\partial t_1^2}(\rho u_i) = \frac{\partial}{\partial t_1} \left\{ -\sum_j \frac{\partial}{\partial r_{1j}} \Pi_{ij}^{(0)} \right\} = -\sum_j \frac{\partial}{\partial t_1} \frac{\partial}{\partial r_{1j}} \Pi_{ij}^{(0)} \quad (\text{A.24})$$

この式を Eq.(A.20) に代入整理すると、次式を得る。

$$\frac{\partial}{\partial t_2}(\rho u_i) + \sum_j \frac{\partial}{\partial r_{1j}} \left[\Pi_{ij}^{(1)} + \frac{\Delta t}{2} \left\{ \frac{\partial}{\partial t_1} \Pi_{ij}^{(0)} + \sum_k \frac{\partial}{\partial r_{1j}} S_{ijk}^{(0)} \right\} \right] = 0 \quad (\text{A.25})$$

Eq.(A.17) と Eq.(A.23) の両辺にそれぞれ ε 、 ε^2 を掛け、辺々加え合わせ、Eq.(A.10) を考慮すると、次の質量保存則が得られる。

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (\text{A.26})$$

同様の操作を、Eq.(A.18) と Eq.(A.25) に行なうと、運動量保存則が次のように得られる。

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho u_i) + \sum_j \frac{\partial}{\partial r_j} \Pi_{ij} + \sum_j \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial}{\partial r_j} \left\{ \varepsilon \frac{\partial}{\partial t_1} \Pi_{ij}^{(0)} + \sum_k \frac{\partial}{\partial r_k} S_{ijk}^{(0)} \right\} = 0 \quad (\text{A.27})$$

ここに、 $\Pi_{ij} \approx \Pi_{ij}^{(0)} + \varepsilon \Pi_{ij}^{(1)}$ としている。

Eq.(A.6) において、Eq.(A.10) と Eq.(A.11) で表された変数変換を施すと、

$$\begin{aligned} & \Delta t \left\{ \varepsilon \frac{\partial f_\alpha}{\partial t_1} + \varepsilon^2 \frac{\partial f_\alpha}{\partial t_2} \right\} + \frac{(\Delta t)^2}{2} \varepsilon^2 \frac{\partial^2 f_\alpha}{\partial t_1^2} + \Delta t \varepsilon (\mathbf{c}_\alpha \cdot \nabla_1) f_\alpha \\ & + \frac{(\Delta t)^2}{2} \varepsilon^2 (\mathbf{c}_\alpha \cdot \nabla_1) (\mathbf{c}_\alpha \cdot \nabla_1) f_\alpha + (\Delta t)^2 \varepsilon^2 (\mathbf{c}_\alpha \cdot \nabla_1) \frac{\partial f_\alpha}{\partial t_1} = \frac{1}{\tau} (f_\alpha^{(0)} - f_\alpha) \end{aligned} \quad (\text{A.28})$$

この式に Eq.(A.7) を代入し、 ε のオーダーの項を取り出して、それをゼロと置くことにより、次式を得る。

$$-\frac{1}{\tau \Delta t} f_\alpha^{(1)} = \frac{\partial f_\alpha^{(0)}}{\partial t_1} + \sum_i \frac{\partial}{\partial r_{1i}} (c_{ai} f_\alpha^{(0)}) \quad (\text{A.29})$$

ここで、 $f_\alpha^{(0)}$ が巨視的の量である ρ と ρu_i の関数と見ることができるので、Eq.(A.17) と Eq.(A.18) を考慮して、

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_\alpha^{(0)}}{\partial t_1} &= \frac{\partial f_\alpha^{(0)}}{\partial \rho} \frac{\partial \rho}{\partial t_1} + \sum_i \frac{\partial f_\alpha^{(0)}}{\partial (\rho u_i)} \frac{\partial (\rho u_i)}{\partial t_1} = -\frac{\partial f_\alpha^{(0)}}{\partial \rho} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_1} \cdot (\rho \mathbf{u}) \\ &\quad - \sum_i \sum_j \frac{\partial f_\alpha^{(0)}}{\partial (\rho u_i)} \frac{\partial}{\partial r_{1j}} \Pi_{ij}^{(0)} \end{aligned} \quad (\text{A.30})$$

この式を Eq.(A.29) に代入して、求める式が次のように得られる。

$$-\frac{1}{\tau \Delta t} f_\alpha^{(1)} = -\frac{\partial f_\alpha^{(0)}}{\partial \rho} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_1} \cdot (\rho \mathbf{u}) - \sum_i \sum_j \frac{\partial f_\alpha^{(0)}}{\partial (\rho u_i)} \frac{\partial}{\partial r_{1j}} \Pi_{ij}^{(0)} + \sum_i \frac{\partial}{\partial r_{1i}} (c_{ai} f_\alpha^{(0)}) \quad (\text{A.31})$$

以上、Eq.(A.27) と Eq.(A.31) が 3.3.2 で用いられる、導出の出発点となる基礎式である。

参考文献

- Acrivos, A., and Herbolzheimer, E., 1979, Enhanced sedimentation in settling tanks with inclined walls, *Journal of Fluid Mechanics*, Vol. 92, pp.435-457.
- Aidun, C. K., and Lu, Y., 1995, Lattice Boltzmann simulation of solid particles suspended in fluid, *Journal of Statistical Physics*, Vol. 81(1/2), pp.49-61.
- Aidun, C. K., Lu, Y., and Ding, E.-Jiang., 1998, Direct analysis of particulate suspensions with inertia using the discrete Boltzmann equation, *Journal of Fluid Mechanics*, Vol. 373, pp.287-311.
- 赤羽秀文, 中山司, 2005, Ghost Fluid Method と有限要素法の併用による流体-固体連成解析, 第 54 回理論応用力学講演会, 第 54 回理論応用力学講演会講演論文集, Vol. 54, 2B09.
- 秋林智, 山口伸次, 片山大樹, 1992, 流体生産に伴う出砂と抑制に関する基礎的研究, 石油技術協会誌, Vol. 57(1), pp.11-18.
- Amsden, A. A., 1966, The particle-in-cell method for the calculation of the dynamics of compressible fluids, *Los Alamos Scientific Laboratory report*, LA-3466.
- Andrew, A., ORourke, T., Shirmboh, D., Alexander, J., Anderson, G., Kaneko, T., Venkitaraman, A., López-de-Cárdenas, J., Nishi, M., Numasawa, M., Yoshida, K., Roy, A., Wilson, A., and Twynam, A., 2004, Practical approaches to sand management, *Oilfield Review*, Vol. 16(1), pp.10-27.
- 荒木健, 越村俊一, 2009, 格子ボルツマン法による自由表面流れの解析, 土木学会論文集 B2 (海岸工学), Vol. 65(1), pp.56-60.
- Borhan, A., and Acrivos, A., 1988, The sedimentation of nondilute suspensions in inclined settlers, *Physics of Fluids*, Vol. 31(12), pp.3488-3501.
- Boutt, D. F., Grasselli, G., Fredrich, J., Cook, B. K., and Williams, J. R., 2006, Trapping zones: The effect of fracture roughness on the directional anisotropy of fluid flow and colloid transport in a single fracture, *Geophysical Research Letters*, Vol. 33(21), L21402.
- Boycott, A. E., 1920, Sedimentation of blood corpuscles, *Nature*, Vol. 104, pp.532-538.
- Brady, J. F., and Bossis, G., 1988, Stokesian dynamics, *Annual Review of Fluid Mechanics*, Vol. 20, pp.111-157.

- Cao, N., Chen, S., Jin, S., and Martínez, D., 1997, Physical symmetry and lattice symmetry in the lattice Boltzmann method, *Physical Review E*, Vol. 55(1), R21-R24.
- Chang, C., and Powell, R. L., 1993, Dynamic simulation of bimodal suspensions of hydrodynamically interacting spherical particles, *Journal of Fluid Mechanics*, Vol. 253, pp.1-25.
- Chen, S., Martinez, D. O., and Mei, R., 1996, On boundary conditions in lattice Boltzmann methods, *Physics of Fluids*, Vol. 8(9), pp.2527-2536.
- Chikazawa, Y., Koshizuka, S., and Oka, Y., 2001, A particle method for elastic and visco-plastic structures and fluid-structure interactions, *Computational Mechanics*, Vol. 27(2), pp.97-106.
- Cook, B., Noble, D., Preece, D., and Williams, J., 2000, Direct simulation of particle-laden fluids, *Pacific Rocks 2000*, Girard, Liebman, Breeds, and Doe, eds., Balkema Press, Rotterdam, pp.279-286.
- Cook, B., 2001, A numerical framework for the direct simulation of solid-fluid systems, PhD thesis, MIT.
- Cook, B. K., Noble, D. R., and Williams, J. R., 2004, A direct simulation method for particle-fluid systems, *Engineering Computations; International journal for computer-aided engineering and software*, Vol. 21(2-3), pp.151-168.
- Cundall, P. A., and Strack, O. D. L., 1979, A discrete numerical model for granular assemblies, *Géotechnique*, Vol. 29(1), pp.47-65.
- Daly, B. J., Harlow, F. H., Welch, J. E., Wilson, E. N., and Sanmann, E. E., 1965, Numerical Fluid Dynamics Using the Particle-and-Force Method, Part 1: The Method and its Applications, Part 2: Some Basic Properties of Particle Dynamics, *Los Alamos Scientific Laboratory report*, LA-3144.
- 伊達健介, 山本拓治, 条川政則, 大場康信, 青木謙治, 2002, 低透水性岩盤における動的注入工法の適用効果, 第 11 回岩の力学国内シンポジウム講演論文集, G01.
- Davis, R. H., and Acrivos, A., 1985, Sedimentation of Noncolloidal Particles at Low Reynolds Numbers, *Annual Review of Fluid Mechanics*, Vol. 17, pp.91-118.
- 独立行政法人 石油天然ガス・金属鉱物資源機構, 1986, 石油・天然ガス用語辞典.
- 独立行政法人 石油天然ガス・金属鉱物資源機構 石油天然ガス探鉱・開発技術本部, 2003, 技術センター年報, コア掃攻実験とアスファルテン析出挙動, pp.22-24.
- 独立行政法人 石油天然ガス・金属鉱物資源機構 R&D 推進部 石油工学研究課, 2009, 出砂予測.
- Duran, J. (著), 中西秀, 奥村剛 (共訳), 2002, 粉粒体の物理学, -砂と粉と粒子の世界への誘い-, 株式会社 吉岡書店.

- Espinosa-Paredes, G., Salazar-Mendoza, R., and Cazarez-Candia, O., 2007, Averaging model for cuttings transport in horizontal wellbores, *Journal of Petroleum Science and Engineering*, Vol. 55(3-4), pp.301-316.
- Espinosa-Paredes, G., and Salazar-Mendoza, R., 2008, A derivation of the averaging model for cuttings transport: Multi-region model, *Petroleum Science and Technology*, Vol. 26(14), pp.1694-1705.
- Fedkiw, R. P., Aslam, T., Merriman, B., and Osher, S., 1999, A Non-Oscillatory Eulerian Approach to Interfaces in Multimaterial Flows (the Ghost Fluid Method), *Journal of Computational Physics*, Vol. 152(2), pp. 457-492.
- Fedkiw, R. P., 2002, Coupling an Eulerian fluid calculation to a Lagrangian solid calculation with the ghost fluid method, *Journal of Computational Physics*, Vol. 175(1), pp. 200-224.
- Feng, J., Hu, H. H., and Joseph, D. D., 1994, Direct simulation of initial value problems for the motion of solid bodies in a Newtonian fluid. Part 1. Sedimentation, *Journal of Fluid Mechanics*, Vol. 261, pp.95-134.
- Feng, J., Hu, H. H., and Joseph, D. D., 1994, Direct simulation of initial value problems for the motion of solid bodies in a Newtonian fluid. Part 2. Couette and Poiseuille flows, *Journal of Fluid Mechanics*, Vol. 277, pp.271-301.
- Feng, Z. G., and Michaelides, E. E., 2004, The immersed boundary-lattice Boltzmann method for solving fluid-particles interaction problems, *Journal of Computational Physics*, Vol. 195(2), pp.602-628.
- Feng, Y. T., Han, K., and Owen, D. R. J., 2007, Coupled lattice Boltzmann method and discrete element modelling of particle transport in turbulent fluid flows: Computational issues, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Vol. 72(9), pp.1111-1134.
- Fortes, A. F., Joseph, D. D., and Lundgren, T. S., 1987, Nonlinear mechanics of fluidization of beds of spherical particles, *Journal of Fluid Mechanics*, Vol. 177, pp.467-483.
- Frisch, U., Hasslacher, B., and Pomeau, Y., 1986, Lattice-gas automata for the Navier-Stokes equation, *Physical Review Letters*, Vol. 56(14), pp.1505-1508.
- 藤崎一裕, 2004, 傾斜沈降管による沈殿池の処理効率の増大化, 化学工学論文集, Vol. 30(5), pp.568-573.
- 粉体工学会編, 1998, 粉体シミュレーション入門 -コンピュータで粉体技術を創造する-, 産業図書株式会社.
- Ginzburg, I., and d'Humières, D., 2003, Multireflection boundary conditions for lattice Boltzmann models, *Physical Review E*, Vol. 68, 066614-1-30.

- Glowinski, R., Pan, T.-W., Hesla, T. I., and Joseph, D. D., 1999, A distributed Lagrange multiplier/fictitious domain method for particulate flows, *International Journal of Multiphase Flow*, Vol. 25(5), pp.755-794.
- 後藤仁志, Fredsoe, J., 1999, Lagrange 型固液二相流モデルによる海洋投棄微細土砂の拡散過程の数値解析, *海岸工学論文集*, Vol. 46, pp.986-990.
- 後藤仁志, 酒井哲郎, 林稔, 2000, 大規模斜面崩壊による水面波の発生過程のグリッドレス解析, *海岸工学論文集*, Vol. 47, pp.56-60.
- 後藤仁志, 酒井哲郎, 林稔, 2001, 粒子法による流木群の堰止め過程の Lagrange 解析, *水工学論文集*, Vol. 48, pp.919-924.
- 後藤仁志, 酒井哲郎, 林稔, 安藤怜, 2001, 構造物下面への接岸浮遊物の潜込過程の Lagrange 型シミュレーション, *海岸工学論文集*, Vol. 48, pp.816-820.
- 後藤仁志, 林稔, 酒井哲郎, 2001, 固液二相流型 MPS 法による波・底泥相互干渉の数値解析, *海岸工学論文集*, Vol. 48, pp.1-5.
- 後藤仁志, 酒井哲郎, 林稔, 織田晃治, 五十里洋行, 2002, 遡上津波の戻り流れによる護岸法先洗掘のグリッドレス解析, *海岸工学論文集*, Vol. 49, pp.46-50.
- 後藤仁志, 酒井哲郎, 林稔, 八木哲生, 2002, MPS 法による甌穴形成過程の数値解析, *水工学論文集*, Vol. 46, pp.767-772.
- 後藤仁志, 林稔, 安藤怜, 酒井哲郎, 2002, 暗渠排水路の氾濫過程の Lagrange 解析, *水工学論文集*, Vol. 46, pp.845-850.
- 後藤仁志, 林稔, 織田晃治, 酒井哲郎, 2002, 越流水による河川堤防侵食過程のグリッドレス解析, *水工学論文集*, Vol. 46, pp.439-444.
- 後藤仁志, 林稔, 酒井哲郎, 2002, 固液二相流型粒子法による大規模土砂崩壊に伴う水面波の発生過程の数値解析, *土木学会論文集*, Vol. 719(II-61), pp.31-45.
- 後藤仁志, 林稔, 安藤怜, 酒井哲郎, 2003, 固液混相流解析のための DEM-MPS 法の構築, *水工学論文集*, Vol. 47, pp.547-552.
- 後藤仁志, 2004, 数値流砂水理学 -粒子法による混相流と粒状体の計算力学-, 森北出版.
- 後藤仁志, 鷲見崇, 酒井哲郎, 2006, 個別要素法への陰解法の導入による数値移動床の改良, *土木学会論文集 B*, Vol. 62(2), pp.201-209.
- Gray, M., Xu, Z., and Masliyah, J., 2009, Physics in the oil sands of Alberta, *Physics Today*, Vol. 62(3), pp.31-35.
- Hakuno, M., and Tarumi, Y., 1988, A granular assembly simulation for the seismic liquefaction of sand, *土木学会論文集*, Vol. 398(I-10), pp.129-138.

- Hakuno, M., and Uchida, Y., 1991, Application of the distinct element method to the numerical analysis of debris flows, *土木学会論文集*, Vol. 432(I-16), pp.31-41.
- 伯野元彦, 1997, 破壊のシミュレーション -拡張個別要素法で破壊を追う-, 森北出版株式会社.
- Han, K., Feng, Y. T., and Owen, D. R. J., 2007, Coupled lattice Boltzmann and discrete element modelling of fluid-particle interaction problems, *Computers and Structures*, Vol. 85(11-14), pp.1080-1088.
- 原田英治, 後藤仁志, 喜田和幸, 2007, DEM を用いた固液混相流モデルによる粒子沈降・堆積過程の数値シミュレーション, 第 21 回数値流体力学シンポジウム, A8-1.
- 原田隆宏, 田中正幸, 越塚誠一, 河口洋一郎, 2007, グラフィックスハードウェアを用いた個別要素法の高速度化, *日本計算工学会論文集*, Vol. 2007, 20070011.
- Hardy, J., Pomoeau, Y., and de Pazzis, O., 1973, Time evolution of a two-dimensional model system. I. Invariant states and time correlation functions, *Journal of Mathematical Physics*. Vol. 14(12), pp.1746-1759.
- Harlow, F. H., and Welch, J. E., 1965, Numerical Calculation of Time-Dependent Viscous Incompressible Flow of Fluid with Free Surface, *Physics of Fluids*, Vol. 8(12), pp.2182-2189.
- 早川尚男, 2003, 岩波講座 物理の世界 物理と数理 4 散逸粒子系の力学, 株式会社 岩波書店.
- 林秀光, 2009, 格子ボルツマン法の基礎理論, *計算工学*, Vol. 14(3), pp.2103-2106.
- He, X., and Lou, L.-S., 1997, Theory of the lattice Boltzmann method: From the Boltzmann equation to the lattice Boltzmann equation, *Physical Review E*, Vol. 56(6), pp.6811-6817.
- Hill, W. D., Rothfus, R. R., and Li, K., 1977, Boundary-enhanced sedimentation due to settling convection, *International Journal of Multiphase Flow*, Vol. 3(6), pp.561-583.
- 日置潤, 梶島岳夫, 2002, 格子ボルツマン法の高精度壁面境界条件, *日本機械学会論文集 (B 編)*, Vol. 68(670), pp.1677-1683.
- 平野博人, 佐藤森, 小幡英二, 2009, 垂直および傾斜固体流束曲線を用いた傾斜シクナーの処理量増加についての解析, *化学工学論文集*, Vol. 35(1), pp.75-80.
- 平野博之, 2004, 流れの数値計算と可視化 -Tecplot で見る流体力学-, 丸善株式会社.
- Hu, H. H., Joseph, D. D., and Crochet, M. J., 1992, Direct simulation of fluid particle motions, *Theoretical and Computational Fluid Dynamics*, Vol. 3(5), pp.285-306.
- Hu, H. H., 1995, Motion of a circular cylinder in a viscous liquid between parallel plates, *Theoretical and Computational Fluid Dynamics*, Vol. 7(6), pp.441-455.
- Hu, H. H., 1996, Direct simulation of flows of solid-liquid mixtures, *International Journal of Multiphase Flow*, Vol. 22(2), pp.335-352.

- Hussain, S., and Gruening, T., 2008, Sand management challenges in the South China Sea, International Petroleum Technology Conference, 12522-MS.
- 百武徹, 松本健志, 柳瀬眞一郎, 2006, 格子ボルツマン法による平行平板間を流れる円形粒子の数値解析, 日本機械学会論文集 (B 編), Vol. 72(718), pp.1434-1441.
- 百武徹, 毛利聡, 柳瀬眞一郎, 2007, 人工赤血球投与に伴う微小血管狭さく流れの数値解析, 第 56 回理論応用力学講演会, 第 56 回理論応用力学講演会講演論文集, Vol. 56, 3H12.
- 五十里洋行, 後藤仁志, 吉年英文, 2009, 斜面崩壊誘発型津波の数値解析のための流体-弾塑性体ハイブリッド粒子法の開発, 土木学会論文集 B2 (海岸工学), Vol. 65(1), pp.46-50.
- Imamura, T., 2003, Incompressible Flow Simulation using Generalized Interpolation-based Lattice Boltzmann Method, Doctor thesis of Tokyo University.
- Inamuro, T., Yoshino, M., and Ogino, F., 1995, A non-slip boundary condition for lattice Boltzmann simulations, *Physics of Fluids*, Vol. 7(12), pp.2928-2930.
- Inamuro, T., Maeba, K., and Ogino, F., 2000, Flow between parallel walls containing the lines of neutrally buoyant circular cylinders, *International Journal of Multiphase Flow*, Vol. 26(12), pp.1981-2004.
- Johnson, A. A., and Tezduyar, T. E., 1996, Simulation of multiple spheres falling in a liquid-filled tube, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 134(3-4), pp.351-373.
- Johnson, A. A., and Tezduyar, T. E., 1997, 3D simulation of fluid-particle interactions with the number of particles reaching 100, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 145(3-4), pp.301-321.
- Joseph, D. D., Fortes, A., Lundgren, T. S., and Singh, P., 1987, Nonlinear mechanics of fluidization of beds of spheres, cylinders and disks in water, *Advances in Multiphase Flow and Related Problems*, (G. Papanicolau, ed.), pp.101-122, SIAM.
- Kapoor, B., and Acrivos, A., 1995, Sedimentation and sediment flow in settling tanks with inclined walls, *Journal of Fluid Mechanics*, Vol. 290, pp.39-66.
- 川口寿裕, 田中敏嗣, 辻裕, 1992, 離散要素法による流動層の数値シミュレーション (噴流層の場合), 日本機械学会論文集 (B 編), Vol. 58(551), pp.2119-2125.
- Kawaguchi, T., Tanaka, T., and Tsuji, Y., 1998, Numerical simulation of two-dimensional fluidized beds using the discrete element method (comparison between the two- and three-dimensional models), *Powder Technology*, Vol. 96(2), pp.129-138.
- Kawaguchi, T., Sakamoto, M., Tanaka, T., and Tsuji, Y., 2000, Quasi-three-dimensional numerical simulation of spouted beds in cylinder, *Powder Technology*, Vol. 109(1), pp.3-12.

- Kinosita, K., 1949, Sedimentation in tilted vessels (1), *Journal of Colloid Science*, Vol. 4(5), pp.525-536.
- 木山秀郎, 藤村尚, 1983, カンドルの離散要素法に用いた岩質粒状体の重力流動の解析, 土木学会論文報告集, Vol. 333, 137-146.
- 木山英郎, 西村強, 藤村尚, 1994, 間隙水連成型個別要素法の基本と拡張, 土木学会論文集, Vol. 499(III-28), pp.31-39.
- 小林敏雄, 2003, 数値流体力学ハンドブック, 丸善株式会社.
- 古賀誠, 島田英樹, 松井紀久男, 2001, 均質地盤に対するグラウト材の一次元注入解析-グラウチングにおけるグラウト材の浸透挙動に関する研究(第1報)-, 資源と素材, Vol. 117, pp.209-214.
- 古賀誠, 島田英樹, 松井紀久男, 2002, グラウト材の模擬地盤への注入実験とろ過理論を導入した注入解析の適用性-グラウチングにおけるグラウト材の浸透挙動に関する研究(第2報)-, 資源と素材, Vol. 118, pp.29-35.
- 古賀誠, 島田英樹, 松井紀久男, 2002, グラウト材の塑性粘度とろ過理論を導入した注入解析の現場への適用性-グラウチングにおけるグラウト材の浸透挙動に関する研究(第3報)-, 資源と素材, Vol. 118, pp.385-391.
- Koshizuka, S., and Oka, Y., 1996, Moving-particle semi-implicit method for fragmentation of incompressible fluid, *Nuclear Science and Engineering*, Vol. 123(3), pp.421-434.
- Koshizuka, S., Nobe, A., and Oka, Y., 1998, Numerical analysis of breaking waves using the moving particle semi-implicit method, *International Journal of Numerical Methods in Fluids*, Vol. 26(7), pp.751-769.
- 越塚誠一, 2005, 粒子法(計算力学レクチャーシリーズ), 丸善株式会社.
- Kundu, P. K., 1990, *Fluid Mechanics*, Academic press, San Diego, pp.285-286.
- 黒田望, 牛島省, 2009, 3次元流体中における柔軟物体の数値解析, 第58回理論応用力学講演会, 第58回理論応用力学講演会講演論文集, Vol. 58, 2B14.
- 旧石油公団・石油開発技術センター編, 1983, 石油鉱業の技術講座 基礎講座資料集, 株式会社石油経済ジャーナル社.
- Ladd, A., 1994, Numerical simulations of fluid particulate suspensions via a discretized Boltzmann-equation. 1. Theoretical foundation, *Journal of Fluid Mechanics*, Vol. 271, pp.285-309.
- Ladd, A., 1994, Numerical simulations of fluid particulate suspensions via a discretized Boltzmann-equation. 2. Numerical results, *Journal of Fluid Mechanics*, Vol. 271, pp.311-339.
- Ladd, A., and Verberg, R., 2001, Lattice-Boltzmann simulations of particle-fluid suspensions. *Journal of Statistical Physics*, Vol. 104(5/6), pp.1191-1251.

- Lallemand, P., and Luo, L.-S., 2000, Theory of the lattice Boltzmann method: Dispersion, dissipation, isotropy, Galilean invariance, and stability, *Physical Review E*, Vol. 61(6), pp.6546-6562.
- Leonard, A., 1980, Vortex methods for flow simulation, *Journal of Computational Physics*, Vol. 37(3), pp.289-335.
- Li, H., Fang, H., Lin, Z., Xu, S., and Chen, S., 2004, Lattice Boltzmann simulation on particle suspensions in a two-dimensional symmetric stenotic artery, *Physical Review E*, Vol. 69(3), 031919-1-9.
- Libersky, L. D., Petschek, A. G., Carney, T. C., Hipp, J. R., and Allahdadi, F. A., 1993, High strain Lagrangian hydrodynamics: A three-dimensional SPH code for dynamic material response, *Journal of Computational Physics*, Vol. 109(1), pp.67-75.
- Lucy, L. B., 1977, A numerical approach to the testing of the fission hypothesis, *Astronomical Journal*, Vol. 82(12), pp.1013-1024.
- Madge, D. N., Rorero, J., and Strand, W. L., 2005, Process reagents for the enhanced removal of solids and water from oil sand froth, *Minerals engineering*, Vol. 18(2), pp.159-169.
- Maier, R. S., Bernard, R. S., and Grunau, D. W., 1996, Boundary conditions for the lattice Boltzmann method, *Physics of Fluids*, Vol. 8(7), pp.1788-1801.
- 松隈洋介, 高橋亮一, 阿部豊, 安達公道, 1998, セルラオートマトン法をもちいた複雑な境界を持つ流路内の流れの計算, 日本機械学会論文集 (B 編), Vol. 64(622), pp.1617-1622.
- 松島亘志, 2010, DEM Distinct Element Method, 地盤工学会誌, Vol. 58(1), pp.116-117.
- McCaffery, S. J., Elliott, L., and Ingham, D. B., 1998, One-dimensional enhanced sedimentation in inclined fracture channels, *Mathematical Engineering in Industry*, Vol. 6(4), pp.261-290.
- McCaffery, S. J., Elliott, L., and Ingham, D. B., 1998, Two-dimensional enhanced sedimentation in inclined fracture channels, *Mathematical Engineering in Industry*, Vol. 7(1), pp.97-125.
- McNamara, G. R., and Zanetti, G., 1988, Use of the Boltzmann equation to simulate lattice-gas automata, *Physical Review Letters*, Vol. 61(20), pp.2332-2335.
- McNamara, G. R., Garcia, A. L., and Alder, B. J., 1995, Stabilization of thermal lattice Boltzmann models, *Journal of Statistical Physics*, Vol. 81(1/2), pp.395-408.
- 三善孝之, 松岡俊文, 2004, 3次元格子ボルツマン法の並列計算による多孔質岩石内の流体流動解析, 物理探査, Vol. 57(6), pp.697-708.
- Miyoshi, T., Matsuoka, T., and Yamada, Y., 2004, Microscopic behavior of the solid particles in fluid flow through porous rock using LBM and DEM coupling, Proceedings of the ISRM International Symposium 3rd ARMS, In Ohnishi, Y. & Aoki, K. (Eds.), *Contribution of Rock Mechanics to the New Century*, Millpress, Rotterdam, the Netherlands. Vol. 1, pp.159-164.

- 三善孝之, 松岡俊文, 山田泰広, 2005, LBM と DEM の連成的解法による多孔質岩石中の流体流動に伴う微粒子挙動解析, 第 34 回岩盤力学に関するシンポジウム講演論文集, pp.81-88.
- 三善孝之, 山田泰広, 松岡俊文, 2006, 粒子-流体連成モデルによる多孔質岩石内の浸透率評価, 物理探査学会第 114 回学術講演論文集, 57, pp.199-202.
- 三善孝之, 2009, 格子ボルツマン法と個別要素法を用いた固液混相流解析システムの地球工学分野への応用, 博士論文, 京都大学大学院工学研究科.
- 水谷恒一郎, 山本悟, 2008, 簡単な IB 法による三次元任意形状物体周り流れの数値計算, 日本機械学会論文集 (B 編), Vol. 74(742), pp.1347-1353.
- Monaghan, J. J., 1988, A introduction to SPH, *Computer Physics Communications*, Vol. 48(1), pp.89-96.
- 森口周二, 青木尊之, 2007, 境界埋め込み法を用いた地盤の液状化解析手法の開発, 第 20 回計算力学講演会講演論文集, pp.171-172.
- 長縄成実, 2006, カッピングストランスポートシミュレータの開発, 石油技術協会誌, Vol. 71(5), pp.436-444.
- 長縄成実, 及川敦司, 飯尾勝城, 増田昌敬, 大備勝洋, 2006, 傾斜坑井掘削時の掘屑運搬挙動に関する実験的研究, 石油技術協会誌, Vol. 71(6), pp. 609-617.
- 長縄成実, 植松浩, 高橋弘, 増田昌敬, 大備勝洋, 2007, 2 層モデルによる傾斜坑井の掘屑運搬挙動のモデル化, 石油技術協会誌, Vol. 72(3), pp.269-278.
- Nakamura, H., and Kuroda, K., 1937, La cause de l'acceleration de la vitesse de sedimentation des suspensions dans les recipients inclines, *Keijo Journal of Medicine*, Vol. 8, pp.256-296.
- 西澤修, 金川久一 (翻訳), Guéguen, Y., and Palciauskas, V. (原著), 2008, 岩石物性入門, シュプリンガー・ジャパン株式会社.
- 日本機械学会編, 蔦原道久, 渡利實, 棚橋隆彦, 矢部孝 (著), 2007, 機械工学最前線 2 CFD 最前線, 共立出版株式会社.
- 日本混相流学会編, 2004, 混相流ハンドブック, 朝倉書店.
- 西浦泰介, 下坂厚子, 白川善幸, 日高重助, 2006, 離散要素法と直接数値計算法を用いる粒子群干渉沈降挙動のハイブリッドシミュレーション, 化学工学論文集, Vol. 32(4), pp.331-340.
- Niu, X. D., Shu, C., Chew, Y. T., and Peng, Y., 2006, A momentum exchange-based immersed boundary-lattice Boltzmann method for simulating incompressible viscous flows, *Physics Letters A*, Vol. 354(3), pp.173-182.
- 日本材料学会編, 2002, ロックメカニクス, 技報堂出版株式会社.
- Noble, D., and Torczynski, J., 1998, A lattice Boltzmann method for partially saturated computational cells, *International Journal of Modern Physics C*, Vol. 9(8), pp.1189-1201.

- 沼澤正明, 満田信一, 2005, サンドコントロール, 石油技術協会誌, Vol. 70(6), pp.533-536.
- Ohtsuki, S., and Matsuoka, T., 2008, Numerical simulation of fluid-solid mechanics in rock engineering using LBM and DEM, The 8th International Workshop on the Application of Geophysics to Rock Engineering, Proceedings of The 8th International Workshop on the Application of Geophysics to Rock Engineering, 11, pp.71-75.
- Ohtsuki, S., and Matsuoka, T., 2008, The behavior of sand grains around the perforation channel by coupled LBM and DEM, 42nd U.S. Rock Mechanics Symposium & 2nd U.S.-Canada Rock Mechanics Symposium, Proceedings CD, 08-098.
- Ohtsuki, S., and Matsuoka, T., 2009, Numerical simulation of solid particle behaviors in fluid flow by using a numerical method coupling technique, *International Journal of Japanese Committee for Rock Mechanics*, Vol. 4(2), Special Issue on Geophysics, pp.61-67.
- Ohtsuki, S., 2009, Simulation study of sand grain settling in the slurry of oil sands and water, 2009 SPE Asia Pacific Oil & Gas Conference and Exhibition, SPE Asia Pacific Regional Student Paper Contest, Postgraduate division.
- 大槻敏, 松岡俊文, 2008, LBM と DEM によるパーフォレーション・トンネル周辺の砂粒子の挙動, 日本材料学会第 57 期学術講演会, 第 57 期学術講演会講演論文集, 110, pp.19-20.
- 大槻敏, 松岡俊文, 2008, LBM と DEM の連成解析によるパーフォレーション・トンネル周辺の砂粒子の挙動, 第 57 回理論応用力学講演会, 第 57 回理論応用力学講演会講演論文集, Vol. 57, 1E09.
- 大槻敏, 松岡俊文, 2008, 格子ボルツマン法と個別要素法の連成解析による貯留層内における砂粒子の挙動, 土木学会全国大会第 63 回年次学術講演会, 講演概要集 (CD-ROM), CS08-19, pp.359-360.
- 大槻敏, 松岡俊文, 2009, 固液混相流シミュレーションによる坑井近傍における砂粒子の挙動, 土木学会全国大会第 64 回年次学術講演会, 講演概要集 (CD-ROM), III-144, pp.287-288.
- 大槻敏, 松岡俊文, 2009, 固液二相連成シミュレーションによる傾斜沈降メカニズムの検討, 混相流, Vol. 23(4), pp.420-435.
- 大槻敏, 松岡俊文, in review, 格子ボルツマン法と個別要素法を用いた多孔質体内の粒子輸送が浸透率に与える影響の検討, *Journal of MMIJ*.
- 岡二三生, 木元小百合, 肥後陽介, 後藤優典, 森中雄一, 2008, 固液二相系弾性多孔質体の MPM-FDM 連成変形解析, 第 57 回理論応用力学講演会, 第 57 回理論応用力学講演会講演論文集, Vol. 57, 1H03.
- 岡津弘明, 高林克百, SIM, Steve, K., FISHER, Douglas, 2006, アスファルテンに起因する油層障害について: アスファルテン粒子の大きさとコアの浸透率に与える影響, 平成 18 年度石油技術協会春季講演会要旨集, 101, pp.143.

- 岡澤重信, 中尾賢司, 2007, オイラー型解法による固体-流体連成解析, 第 56 回理論応用力学講演会, 第 56 回理論応用力学講演会講演論文集, Vol. 56, 1G04.
- O'Neill, M., and Chorlton, F., 1989, *Viscous and Compressible Fluid Dynamics*, Ellis Horwood, Chichester.
- Ozbayoglu, M. E., Miska, S. Z., Reed, T., and Takach, N., 2005, Using foam in horizontal well drilling: A cuttings transport modeling approach, *Journal of Petroleum Science and Engineering*, Vol. 46(4), pp.267-282.
- Papamichos, E., Vardoulakis, I., Tronvoll, J., and Skjarstein, A., 2001, Volumetric sand production model and experiment, *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics*, Vol. 25(8), pp.789-808.
- Papamichos, E., Stenebråten, J., Cerasi, P., Lavrov, A., Vardoulakis, I., Fuh G.-F., Brignoli, M., Goncalves, CJ de Castro, and Havmøller, O., 2008, Rock type and hole failure pattern effects on sand production, 42nd U.S. Rock Mechanics Symposium & 2nd U.S.-Canada Rock Mechanics Symposium, Proceedings CD, 08-217.
- Patankar, N. A., Singh, P., Joseph, D. D., Glowinski, R., and Pan, T.-W., 2000, A new formulation of the distributed Lagrange multiplier/ fictitious domain method for particulate flows, *International Journal of Multiphase Flow*, Vol. 26, pp.1509-1524.
- Ponder, E., 1925, On sedimentation and rouleaux formation - I, *Quarterly Journal of Experimental Physiology*, Vol. 15, pp.235-252.
- Qi, D., 1999, Lattice-Boltzmann simulations of particles in non-zero-Reynolds-number flows, *Journal of Fluid Mechanics*, Vol. 385, pp.41-62.
- Qian, Y. H., d'Humières, D., and Lallemand, P., 1992, Lattice BGK Models for Navier-Stokes Equation, *Europhysics Letters*, Vol. 17(6), pp.479-484.
- Ritz, J. B., and Caltagirone, J. P., 1999, A numerical continuous model for the hydrodynamics of fluid particle systems, *International Journal of Numerical Methods in Fluids*, Vol. 30(8), pp.1067-1090.
- Saebi, S., Jain, S., Tibbles, R., Munro, J., Suppiah, R., and Safiin, N., 2009, Effective Perforating and Gravel Placement: Key to Low Skin, Sand-Free Production in Gravel Packs, Asia Pacific Oil and Gas Conference & Exhibition, SPE 123495.
- 酒井幹夫, 茂渡悠介, 山田祥徳, 越塚誠一, 2009, 個別要素法シミュレーションの大規模化に関する研究, 第 58 回理論応用力学講演会, 第 58 回理論応用力学講演会講演論文集, Vol. 58, 1H03.
- 眞田陽, 2006, アスファルテン障害対策, 石油技術協会誌, Vol. 71(6), pp.574-581.
- 佐藤明, 2009, 分子シミュレーション アドバンス実線編 -分子動力学, モンテカルロ法, 格子ボルツマン法-, 株式会社 ブイツーソリューション.

- Segré, G., and Silberberg, A., 1961, Radial particle displacements in Poiseuille flow of suspensions, *Nature*, Vol. 189, pp.209-210.
- 関口林彦, 森田信男, 2008, 出砂障害を伴う油ガス田仕上げ法選択のための経済解析, 石油技術協会誌, Vol. 73(3), pp.232-243.
- Shao, X. M., Liu, Y., and Yu, Z. S., 2005, Interactions between two sedimenting particles with different sizes, *Applied Mathematics and Mechanics - English Edition*, Vol. 26(3), pp.407-414.
- 清水義彦, 若井明彦, 長田健吾, 2003, 個別要素法と流れの数値解析を組み合わせた高濃度平衡流砂場の数値実験, 水工学論文集, Vol. 47, pp.559-564.
- 清水賀之, 落合博貴, 岡田康彦, 2009, 間隙水圧を考慮した粒子-流体連成モデルを用いた個別要素法による土石流シミュレーション, 土木学会論文集 C, Vol. 65(3), pp.633-643.
- Snider, D. M., O'Rourke, P. J., and Andrews, M. J., 1998, Sediment flow in inclined vessels calculated using a multiphase particle-in-cell model for dense particle flows, *International Journal of Multiphase flow*, Vol. 24(8), pp.1359-1382.
- Sofonea, V., and Sekerka, R. F., 2003, Viscosity of finite difference lattice Boltzmann models, *Journal of Computational Physics*, Vol. 184(2), pp.422-434.
- Stordos, P. A., 1993, Initial and boundary conditions for the lattice Boltzmann method, *Physical Review E*, Vol. 48(6), pp.4823-4842.
- Strack, O. E., and Cook, B. K., 2007, Three-dimensional immersed boundary conditions for moving solids in the lattice-Boltzmann method, *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, Vol. 55(2), pp.103-125.
- Succi, S., d'Humières, D., Qian, Y., and Orszag, S. A., 1993, On the small-scale dynamical behavior of lattice BGK and lattice Boltzmann schemes, *Journal of Scientific Computing*, Vol. 8(3), pp.219-230.
- 武田雅史, 甲斐寿, 2007, 一般座標系格子ボルツマン法の並列化に関する検討, 日本計算工学会論文集, Vol. 2007, 20070024.
- 瀧口智志, 梶島岳夫, 三宅裕, 1998, 固体粒子と乱流の相互作用の数値計算法, 日本機械学会論文集 (B 編), Vol. 64(625), pp.2804-2810.
- 田中彰一, 1983, 環状部における泥水の挙動と掘屑の運搬能力について, 石油技術協会誌, Vol. 48(4), pp.291-299.
- 田中敏嗣, 門野啓一郎, 辻裕, 1990, 鉛直管内固気二相流の数値シミュレーション: 粒子間衝突の影響について, 日本機械学会論文集 (B 編), Vol. 56(531), pp.3210-3216.
- 田中敏嗣, 石田俊哉, 辻裕, 1991, 水平管内粒状体プラグ流の直接数値シミュレーション (付着力がない場合), 日本機械学会論文集 (B 編), Vol. 57(534), pp.456-463.

- Tanaka, T., Yonemura, S., Kiribayashi, K., and Tsuji, Y., 1996, Cluster formation and particle-induced instability in gas-solid flows predicted by the DSMC method, *JSME international journal, Series B, fluids and thermal engineering*, Vol. 39(2), pp.239-245.
- 田中敏嗣, 2008, 粒子・流体混相流における離散粒子シミュレーションの現状と課題, 第 57 回理論応用力学講演会, 第 57 回理論応用力学講演会講演論文集, Vol. 57, PD1-1.
- Tarumi, Y., and Hakuno, M., 1988, A granular assembly simulation for the dynamic liquefaction of sand, *Natural disaster science*, Vol. 10(1), pp.45-59.
- Thürey, N., Pohl, T., Rude, U., Öchsner, M., and Körner, C., 2006, Optimization and stabilization of LBM free surface flow simulations using adaptive parameterization, *Computers & Fluids*, Vol. 35(8-9), pp.934-939.
- 薦原道久, 高田尚樹, 片岡武, 1999, 格子気体法・格子ボルツマン法 -新しい数値流体力学の手法-, 株式会社 コロナ社.
- 薦原道久, 栗田誠, 岩上武善, 2002, 差分格子ボルツマン法における新しいモデル, 日本機械学会論文集 (B 編), Vol. 68(665), pp.15-21.
- 薦原道久, 栗田誠, 片岡武, 2003, 差分格子ボルツマン法による音波の直接計算, 日本機械学会論文集 (B 編), Vol. 69(680), pp.841-847.
- 卯野義矩, 中山司, 2005, Fictitious Domain/Fractional-Step Method を用いた運動物体まわりの有限要素法解析, 第 54 回理論応用力学講演会, 第 54 回理論応用力学講演会講演論文集, Vol. 54, 3G01.
- 牛島省, 竹村雅樹, 山田修三, 禰津家久, 2003, 非圧縮性流体解析に基づく粒子-流体混合系の計算法 (MICS) の提案, 土木学会論文集, Vol. 740(II-64), pp.121-130.
- 牛島省, 福谷彰, 牧野統師, 2008, 3次元自由水面流中の接触を伴う任意形状物体運動に対する数値解法, 土木学会論文集 B, Vol. 62(2), pp.128-138.
- Wang, J., and Wan, R. G., 2004, Computation of sand fluidization phenomena using stabilized finite elements, *Finite Elements in Analysis and Design*, Vol. 40(12), pp.1681-1699.
- Xu, Z., and Michaelides, E., 2005, A numerical simulation of the Boycott effect, *Chemical Engineering Communications*, Vol. 192(4), pp.532-549.
- Yamamoto, Y., Potthoff, M., Tanaka, T., Kajishima, T., and Tsuji, Y., 2001, Large-eddy simulation of turbulent gas-particle flow in a vertical channel: effect of considering inter-particle collisions, *Journal of Fluid Mechanics*, Vol. 442, pp.303-334.
- 山本和弘, 2004, 多孔体内部の流れと燃焼反応の数値計算, 流体力学会誌ながれ, Vol. 23, pp.295-302.
- 山本晃司, 2009, 東部南海トラフの MH 開発における力学的課題, 第 44 回地盤工学研究発表会, 976, pp.1951-1952.

柳裕一郎, 伊藤広貴, 酒井幹夫, 越塚誠一, 2008, 粒子法の産業応用に向けた研究 (固液混相流解析), 第一回システム創成学学術講演会, C-1(2), pp.82-85.

吉田博, 榎谷浩, 今井和昭, 1988, 個別要素法による敷砂上への落石の衝撃特性に関する解析, 土木学会論文集, Vol. 392(I-9), pp.297-306.

Zou, Q., and He, X., 1997, On pressure and velocity boundary conditions for the lattice Boltzmann BGK model, *Physics of Fluids*, Vol. 9(6), pp.1591-1598.

謝辞

本学位論文の執筆にあたり、学位審査をして頂いた京都大学大学院 工学研究科 社会基盤工学専攻 教授の松岡俊文先生、同 教授の石田毅先生、同 都市社会工学専攻 教授の天津宏康先生に厚く御礼申し上げます。

本研究の遂行にあたり、終始熱心な御指導と御鞭撻を賜り、また素晴らしい研究環境を与えて頂いた京都大学大学院 工学研究科 社会基盤工学専攻 地殻工学講座 地質工学分野 教授の松岡俊文先生には、謹んで感謝の意を表します。

京都大学大学院 工学研究科 社会基盤工学専攻 地殻工学講座 地質工学分野 准教授の山田泰広先生、構造工学講座 国際環境基盤マネジメント分野 准教授の薛自求先生、地殻工学講座 地質工学分野 助教の辻健先生には、大変有益な多くのアドバイスと激励を頂きましたことに謹んで感謝致します。

研究に関する非常に有意義な議論と的確なアドバイスをして頂いた三善孝之氏 (Ph.D.) には、心より感謝致します。

研究に関する有意義な議論を交わし、また多くの刺激を与えて頂いた地質工学分野の先輩および後輩の皆様には、充実した研究室生活の時間を共有させて頂いたこと心より感謝致します。

最後に、博士課程に進学する機会を与えて下さり、今日まであらゆる場面で私を温かく見守り続けてくれた両親に深く感謝致します。

2010年3月
大槻 敏

Ph.D. Thesis

Applications of Solid-Liquid Two-Phase System to Resource Engineering
by Using Hybrid LB-DEM Simulation

Satoshi Ohtsuki

Laboratory of Engineering Geology,
Department of Civil and Earth Resources Engineering,
Kyoto University

Kyoto University, Room C1-1-118
Kyotodaigaku-Katsura, Nishikyo-ku, Kyoto, 615-8540, Japan

s_ohtsuki@earth.kumst.kyoto-u.ac.jp

Version: February 25, 2010
