

令和 6 年 6 月 1 日現在

機関番号：12601

研究種目：挑戦的研究（萌芽）

研究期間：2021～2023

課題番号：21K19760

研究課題名（和文）不連続体力学シミュレーションの新展開：粉体系の粗視化モデル

研究課題名（英文）New frontiers in discontinuum mechanics model: coarse-grained DEM for powder systems

研究代表者

酒井 幹夫（Sakai, Mikio）

東京大学・大学院工学系研究科（工学部）・教授

研究者番号：00391342

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 4,800,000円

研究成果の概要（和文）：現在のDEM粗視化モデルでは、応用範囲が限定されていた。すなわち、固気液三相流のような極めて複雑な体系に応用することができなかった。また、既存のDEM粗視化モデルには、転がり抵抗や非弾性衝突に関するモデル化がなされていなかった。そこで、本研究では、既存のDEM粗視化モデルの応用範囲を複雑な産業体系に広げるとともに、転がり抵抗および非弾性衝突に関するDEM粗視化モデルを開発する。食品プラントの粉体混合、流動層などの体系においてVerification & Validation (V&V)を行い、粉体のマクロ現象の再現性を追求するとともに、モデルの普遍性を追求する。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本研究では、既存のDEM粗視化モデルの応用範囲を複雑な産業体系に広げた。気液界面を精緻に模擬するモデル化を施し、固相については粗視化を行い、大規模固気液三相流の数値シミュレーションを実現した。さらに、転がり抵抗および非弾性衝突に関するDEM粗視化モデルを開発した。本研究の成果は、単なる不連続体のモデリングにとどまらず、幅広い工学分野の製品開発において役立てられると考えられる。従って、本研究は、不連続体の力学という学問分野を大きく前進させるばかりでなく、粉体の挙動を科学的・工学的に理解する研究対象の範囲を大幅に拡大させることもできた結論づけられる。

研究成果の概要（英文）：The current coarse-grained DEM has a limited range of applications and cannot be used for extremely complex systems such as gas-solid-liquid three-phase flows. Additionally, the existing coarse-grained DEMs do not account for rolling resistance or inelastic collisions. Therefore, this study aims to extend the application of the coarse-grained DEM to complex industrial systems. Furthermore, rolling resistance and inelastic collisions are incorporated into the coarse-grained DEM. Verification and Validation (V&V) are conducted in powder mixing and fluidized beds to ensure the reproducibility of macro phenomena in powders and the universality of the model.

研究分野：計算科学

キーワード：粗視化 DEM 離散要素法 固気液三相流 気液二相流 転がり抵抗 非弾性衝突

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属します。

## 1. 研究開始当初の背景

不連続体である粉体の力学は、流体のような連続体の力学とは異なり、確立されていない。そのため、粉体の数値シミュレーションには、流体のようなナビエ・ストークス方程式といった支配方程式は用いられず、個々の固体粒子に作用する力に基づいてラグランジュ的に記述する **Discrete Element Method (DEM)** が世界標準として使用されている。DEM はラグランジュ法ゆえに、個々の固体粒子の挙動を模擬する必要がある。DEM は、最新の計算機 (1 台) であっても、粉砂糖スプーン数杯分程度の小規模体系の計算しか実行することができなかつた。従って、粉体の挙動を科学的・工学的に理解するために数値シミュレーションを実行できる体系は限られていた。

粉体の大規模体系の数値シミュレーションを実行するために、研究代表者は **DEM 粗視化モデル** と呼ばれる **DEM** のスケーリング則モデルを世界に先駆けて開発した。**DEM 粗視化モデル** は、オリジナル粒子群を大きなモデル粒子で代表して計算するものであり、オリジナル粒子群とモデル粒子の間で全エネルギーが一致するようにモデル化がなされる。**DEM 粗視化モデル** により複雑な粉体のマクロ挙動 (プラグ・気泡の挙動、圧力損失など) を再現することに成功している。研究代表者の開発した **DEM 粗視化モデル** の有効性は国際的に認められており、オープンソフトウェアや商用ソフトウェアに搭載されている。

しかしながら、現在の **DEM 粗視化モデル** は、応用範囲が限定されている。すなわち、固気液三相流のような極めて複雑な体系に応用することができない。また、既存の **DEM 粗視化モデル** には、転がり抵抗や非弾性衝突に関するモデル化がなされていない。そこで、本研究では、既存の **DEM 粗視化モデル** の応用範囲を複雑な産業体系に広げるとともに、転がり抵抗および非弾性衝突に関する **DEM 粗視化モデル** を開発する。粉体混合、流動層などの体系において **Verification & Validation (V&V)** を行い、粉体のマクロ現象の再現性を追求するとともに、モデルの普遍性を追求する。

## 2. 研究の目的

本研究では、既存の **DEM 粗視化モデル** の応用範囲を複雑な産業体系 (固気液三相流など) に広げる。さらに、転がり抵抗および非弾性衝突に関する **DEM 粗視化モデル** を開発する。本研究テーマは、研究の重要性が認められているにもかかわらず、極めて広い専門知識が求められるため研究がなされてこなかつた (前人未踏の挑戦的課題)。既存の **DEM 粗視化モデル** と同様に、本研究で開発する **DEM 粗視化モデル** についてもオリジナル粒子群とモデル粒子の間で全エネルギーが一致するようにモデル化する。粉体混合、流動層などの体系において、本研究で開発した **DEM 粗視化モデル** が妥当であることを **V&V** により示す。このようにして、本研究で開発する **DEM 粗視化モデル** が、理論的かつ実験的に妥当であり、普遍性を持つことも示す。本研究で開発した **DEM 粗視化モデル** が世界標準になることを目指す。

## 3. 研究の方法

まず、既存の **DEM 粗視化モデル** の応用範囲を複雑な産業体系に広げた研究の一例について述べる。気相-固相-液相の三相流体系は、化学工学、エネルギー工学をはじめ様々な分野において研究がなされている。このような固気液三相流を模擬するために、研究代表者のグループでは、**DEM** と **Volume of Fluid (VOF)** を組み合わせた **DEM-VOF 法** を独自開発した。**DEM-VOF 法** では、局所体積平均に基づく支配方程式を使用している。**DEM-VOF 法** は、ボールミル体系、ダムブレイク体系などにおいて妥当性確認が行われている。他方、**DEM-VOF 法** を産業のような大規模体系に応用する際、致命的な問題がふたつある。ひとつ目の問題は、**DEM-VOF 法** に局所体積平均が採用されているため、**VOF** である数値流体力学の数値シミュレーションの格子サイズを柔軟に設定できないことである (すなわち、局所体積平均により数値流体力学の格子サイズを粒子径よりも大きく設定する必要があるため、気液界面を模擬するための計算格子の解像度不足になる可能性がある)。もうひとつの問題は、大規模体系では計算粒子数が極めて多くなるため、計算コストが大きくなることである (場合によってはメモリ不足により計算を実行することができない)。すなわち、産業の大規模体系の固気液三相流を模擬するには、気液界面に関する計算格子の解像度不足および計算粒子数不足に関する問題を同時に解決しなければならない。これらの問題を解決するために、本研究では、**DEM-VOF 法** に高解像度化格子モデル (**refined grid model**) と **DEM 粗視化モデル (coarse-grained DEM)** を導入した新しい数値計算手法を提案する。高解像度化格子モデルと **DEM 粗視化モデル** を同時に導入した **DEM-VOF 法** の妥当性確認を行うために数値実験を行っている。高解像度化格子モデルと **DEM-VOF 法** を組合せた数値解析モデルが妥当であることを示したのち、固気液三相流動層の数値シミュレーションを実行して、高解像度化格子モデルと **DEM 粗視化モデル** を導入した **DEM-VOF 法** が妥当であることを示している。固気液三相流動層において、計算領域の底部から気泡を発生させて、沈降した固体粒子を循環させる数値実験を行っている。気泡の上昇に伴って、固体粒子もそれに追従して上昇することを確認している。**DEM 粗視化モデル** により、オリジナル粒子体系の固体粒子の空間分布、平

均速度、全エネルギーなどのマクロ挙動を再現できることを示している。さらに、高解像度化格子モデルと DEM 粗視化モデルを導入した DEM-VOF 法により、固気液三相流の数値シミュレーションの計算時間を大幅に短縮できることも示している。

また、本研究では、転がり抵抗および非弾性衝突に関する DEM 粗視化モデルを開発している。DEM の転がり抵抗モデルは、既存研究においていくつか開発されているが、安定解が得られる転がり抵抗モデルは極めて少ない。本研究では、安定解の得られる DEM の転がり抵抗モデルをベースに DEM 粗視化モデルを開発している。転がり抵抗モデルの DEM 粗視化モデルの妥当性確認をラボスケール体系（回転円筒容器）において行っている。転がり抵抗モデルの DEM 粗視化モデルにより、オリジナル体系のマクロ挙動（固体粒子の空間分布やエネルギーなど）を模擬できることを示している。また、非弾性衝突に関する DEM 粗視化モデルを開発している。既存の非弾性衝突に関する DEM 粗視化モデル（他のグループが提案）では、粗視化率の最大値が反発係数の設定値の影響を受けることが理論的な課題となっている。本研究で開発された非弾性衝突に関する DEM 粗視化モデルでは、粗視化率の最大値が反発係数の設定値の影響を受けないように理論を構築している。本研究で開発された非弾性衝突の DEM 粗視化モデルの妥当性確認をラボスケール体系において行っている。本 DEM 粗視化モデルにより、オリジナル体系のマクロ挙動（固体粒子の空間分布やエネルギーなど）を模擬できることを示している。

#### 4. 研究成果

本研究では、既存の DEM 粗視化モデルの応用範囲を複雑な産業体系に広げた。流体である連続相において気液界面を精緻に模擬するモデル化を施すことに対して、固相（固体粒子）については粗視化というマクロ挙動のモデル化を行った。連続相と固相に相反する発想を融合することにより、大規模固気液三相流の数値シミュレーションを実現した。妥当性確認に関する数値実験を行い、本計算手法が妥当であることを示した。なお、申請者のグループが開発した DEM-VOF 法は、被引用数が極めて多く、論文の数値実験がベンチマーク問題として使用されていることから実質的に世界標準になっており、さらには商用ソフトウェアにも採用されている。本研究で開発した、高解像度化格子モデルと DEM 粗視化モデルを導入した DEM-VOF 法も商用ソフトウェアに採用されることから、研究成果の社会実装が行われ、産業界で広く使用される可能性がある。このことから、本研究で取り組んだ成果の波及効果が高いと言える。

さらに、転がり抵抗および非弾性衝突に関する DEM 粗視化モデルを開発した。このような DEM 粗視化モデルの開発には、数値シミュレーション技術ばかりでなく高度な数学・物理学の知識も必要であった。転がり抵抗および非弾性衝突に関する DEM 粗視化モデルについて、近々、論文を投稿する予定である。

本研究の成果は、単なる不連続体のモデリングにとどまらず、幅広い工学分野の製品開発において、現象解明、設計最適化、製品の歩留まりの向上に役立てられると考えられる。従って、本研究は、不連続体の力学という学問分野を大きく前進させるばかりでなく、粉体の挙動を科学的・工学的に理解する研究対象の範囲を大幅に拡大させることもできたと結論づけられる。

## 5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計6件（うち査読付論文 6件/うち国際共著 0件/うちオープンアクセス 3件）

1. 著者名 Li Shuo、Duan Guangtao、Sakai Mikio	4. 巻 413
2. 論文標題 On POD-based modal analysis in simulations of granular flows	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Powder Technology	6. 最初と最後の頁 118058 ~ 118058
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1016/j.powtec.2022.118058	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Li Shuo、Duan Guangtao、Sakai Mikio	4. 巻 33
2. 論文標題 Development of a reduced-order model for large-scale Eulerian-Lagrangian simulations	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Advanced Powder Technology	6. 最初と最後の頁 103632 ~ 103632
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1016/j.appt.2022.103632	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 -

1. 著者名 Shi Qi、Sakai Mikio	4. 巻 33
2. 論文標題 Recent progress on the discrete element method simulations for powder transport systems: A review	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Advanced Powder Technology	6. 最初と最後の頁 103664 ~ 103664
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1016/j.appt.2022.103664	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 SAKAI Mikio	4. 巻 69
2. 論文標題 Development of Fundamental Technologies on Computational Granular Dynamics towards Construction of a Digital Twin for Powder Compaction Process	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Journal of the Japan Society of Powder and Powder Metallurgy	6. 最初と最後の頁 490 ~ 495
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.2497/jjspm.69.490	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 -

1. 著者名 Li Shuo, Duan Guangtao, Sakai Mikio	4. 巻 33
2. 論文標題 POD-based identification approach for powder mixing mechanism in Eulerian?Lagrangian simulations	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Advanced Powder Technology	6. 最初と最後の頁 103364 ~ 103364
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.appt.2021.11.016	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている(また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 森勇稀、酒井幹夫	4. 巻 56
2. 論文標題 セラミックス粉体成形加工プロセスのサイバーフィジカルシステム構築に向けた粉体シミュレーション技術	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 セラミックス	6. 最初と最後の頁 694-699
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

[学会発表] 計15件(うち招待講演 9件/うち国際学会 7件)

1. 発表者名 Mikio SAKAI
2. 発表標題 Advanced discrete element method towards a digital twin based powder system
3. 学会等名 15th World Congress on Computational Mechanics (WCCM-XV) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Mikio SAKAI
2. 発表標題 State-of-the-art modeling towards realization of CPS based pharmaceutical manufacturing processes
3. 学会等名 International Powder & Nanotechnology Forum 2022 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Mikio SAKAI
2. 発表標題 State-of-the-art modeling of computational granular dynamics for a simulation-based digital twin
3. 学会等名 9th World Congress on Particle Technology (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 酒井幹夫
2. 発表標題 不連続体を対象としたマルチフィジックスシミュレーションとその産業応用
3. 学会等名 日本原子力学会 2023年春の年会 炉物理部会セッション (招待講演)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 酒井幹夫
2. 発表標題 粉体プロセスにおけるシミュレーションベースデジタルツイン構築に向けた基礎研究
3. 学会等名 国際粉体工業展東京 2022・最新情報フォーラム (招待講演)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 酒井幹夫
2. 発表標題 粉体成形プロセスのシミュレーションベースデジタルツインに関する基礎研究
3. 学会等名 日本セラミックス協会 エンジニアリングセラミックス部会 第53回エンジニアリングセラミックスセミナー (招待講演)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Mikio SAKAI
2. 発表標題 On computational granular dynamics based digital twin: core technologies in the DEM
3. 学会等名 International Conference on the Characterization and Control of Interfaces for High Quality Advanced Materials 2022 (ICCCI2022) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Rui Li, Daisuke Yamada, Mikio Sakai
2. 発表標題 Validation Study on a Coarse Grained DEM-CFD for a Three Phase Flow System
3. 学会等名 International Conference on the Characterization and Control of Interfaces for High Quality Advanced Materials 2022 (ICCCI2022) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Rui Li, Mikio Sakai
2. 発表標題 Numerical Investigation on the Self-Leveling Behavior of a Core Debris Bed
3. 学会等名 日本原子力学会 2023年春の年会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Rui Li, Daisuke Yamada, Mikio Sakai
2. 発表標題 Validation Study on FELMI for a Gas-Liquid-Solid Flow
3. 学会等名 日本原子力学会 2022年秋の大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 李碩、段広涛、酒井幹夫
2. 発表標題 Validation study on a coarse-grained DEM for the flow regime in a spouted bed based on the POD analysis
3. 学会等名 粉体工学会第56回夏期シンポジウム
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 石琪、酒井幹夫
2. 発表標題 DEM-CFD simulation on effect of air flow on powder mixing in a container blender
3. 学会等名 粉体工学会第56回夏期シンポジウム
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 柘野善治、酒井幹夫、江口潤
2. 発表標題 コンテナブレンダーの粉体混合における密度偏析の抑制効果
3. 学会等名 粉体工学会第56回夏期シンポジウム
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Mikio Sakai
2. 発表標題 Innovative discrete element modeling for cyber-physical powder systems
3. 学会等名 International Workshop on Computational Mechanics of Granular Materials (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年



1. 発表者名 Mikio Sakai
2. 発表標題 Advanced discrete element modeling for digital twin
3. 学会等名 The 3rd International Symposium on Computational Particle Technology (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関