

# DEMシミュレーションによる 充填率と見掛け配位数の関係式の検討

岡山大学大学院 自然科学研究科 化学生命工学専攻 吉田幹生, 坂元玄太

**目的** 粉体層の配位数は、層強度、熱伝導などの諸現象を考えるうえで重要なパラメータであり、一般に接触点の数と定義される。しかし、湿潤粒子間の液架橋による層強度の増加や、焼結時のネック形成など、粒子同士が完全に接触していなくても相互作用する場合がある。よって、対象とする現象毎に影響を及ぼし合う粒子間距離を設定し、その見掛け配位数の導出が必要だと考えられる。均一径球形粒子ランダム充填層中の充填率と平均配位数の関係式については数多くの提案がされているが、見掛け配位数の概念を含んだものはほとんどない。そこで、本研究では離散要素法 (DEM) シミュレーションを用いてその導出を試みた。

## 内容・結果

2012年度は、昨年度までの結果を元に主に下記の3点について取り組んだ。

### (1) 計算速度向上のためのプログラム改善

→プログラムの改善により、計算速度を約10%向上させることができた。

### (2) 均一径粉体層の充填率と見掛け配位数の関係式の高精度化

→昨年度に導出した関係式について、データを追加し、関係式の精度を向上させた。

### (3) 粒径分布を考慮した関係式の導出

→実際の粉体を意識し、粒径分布を持つ系での検討を開始した。

利用した計算機 PCクラスタ; CPU時間 約3500時間; 並列化 なし