Washino 粘性毛管モデルの数式解説 (`cohesion_model_washino_capillary_viscous.h`)

Open DEM Japan

2025 年 6 月 29 日

系は半径 r_i, r_j の 2 粒子（あるいは粒子と壁）間に形成される液架橋を扱う。粒子間距離を r，粒子表面間最短距離を

$$\delta = \begin{cases} r - (r_i + r_j), & \text{粒子–粒子の場合} \\ r - r_i, & \text{粒子–壁の場合} \end{cases} \tag{1}$$

とする。

架橋液量 V_b は各粒子（または壁要素）に含まれる表面液量 $V_{L,i}, V_{L,j}$ と液架橋分配係数 ϕ より

$$V_b = \phi\,(V_{L,i} + V_{L,j}), \tag{2}$$

で与えられる。

有効半径

$$r_{\text{eff}} = \frac{r_i r_j}{r_i + r_j} \tag{3}$$

を用いると，表面張力 γ，平均接触角 θ のとき，粒子が接触している（$\delta = 0$）場合の毛管力は

$$F_{\text{cap}}^{(0)} = -2\pi r_{\text{eff}}\,\gamma\,\cos\theta \left(1 - \delta\sqrt{\frac{\pi r_{\text{eff}}}{2V_b}}\right), \tag{4}$$

となる（Rabinovich *et al.*, Langmuir, 2005）。

有限距離 $\delta > 0$ での一般化表式は

$$\alpha = \sqrt{\frac{\delta}{r_{\text{eff}}}\left(-1 + \sqrt{1 + \frac{2V_b}{\pi r_{\text{eff}}\delta^2}}\right)}, \tag{5}$$

$$d_{\text{sp}} = \tfrac{1}{2}\delta\left(-1 + \sqrt{1 + \frac{2V_b}{\pi r_{\text{eff}}\delta^2}}\right), \tag{6}$$

$$F_{\text{cap}} = -2\pi r_{\text{eff}}\,\gamma\left(\frac{\cos\theta}{1 + \dfrac{\delta}{2d_{\text{sp}}}} + \sin\alpha\,\sin(\alpha + \theta)\right). \tag{7}$$

橋が存在し得る最大距離 $\delta_{\max}$ は

$$\delta_{\max} = \left(1 + \tfrac{1}{2}\theta\right)\sqrt[3]{V_b} \quad \text{(単位換算係数省略)}. \tag{8}$$

液中粘性率 μ に基づく軸方向（法線方向）ストークス抵抗は

$$F_{\rm vis}^{N} = -6\pi\mu r_{\rm eff}\,\frac{v_N}{\max(\delta_{\min},\ \delta)}, \tag{9}$$

ここで v_N は粒子間相対法線速度，$\delta_{\min}$ は数値安定化用最小隔壁である。

接線（せん断）粘性抵抗は改良 Cox – Brenner 近似

$$F_{\rm vis}^{T} = -6\pi\mu r_{\rm eff}\left[\tfrac{8}{15}\ln\!\left(\frac{\delta_{\rm ref}}{\max(\delta,\delta_{\min})}\right) + 0.9588\right] v_T, \tag{10}$$

で与えられる（Nase *et al.*, 2008）。ここで v_T は相対接線速度，$\delta_{\rm ref}$ はキャリブレーションに用いる基準距離で，本実装では $\delta_{\min}$ を用いている。

毛管力と粘性力を合算した粒子間作用力ベクトルは

$$\boldsymbol{F} = (F_{\rm cap} + F_{\rm vis}^{N})\,\boldsymbol{n} + F_{\rm vis}^{T}\,\boldsymbol{t}, \tag{11}$$

ここで $\boldsymbol{n}$ は粒子連結軸の単位法線ベクトル，$\boldsymbol{t}$ は接線速度方向単位ベクトルである。

せん断抵抗が生み出すトルクは

$$\boldsymbol{\tau} = r_c\,\boldsymbol{n}\times(F_{\rm vis}^{T}\,\boldsymbol{t}), \tag{12}$$

ただし r_c は接触半径であり，粒子中心から作用線までの距離として近似的に半径 r_i（または r_j）を採る。

液架橋の生成条件は

$$\delta < \min\!\big(\delta_{\max},\ \delta_{\rm rupt}\big), \tag{13}$$

破断条件は

$$\delta > \delta_{\rm rupt}, \quad \delta_{\rm rupt} = (\eta - 1)(r_i + r_j), \tag{14}$$

で与えられる。ここで η はユーザ指定の最大分離距離比であり，$1 < \eta \le O(10)$ が典型である。

橋破断時，液量は保存され各粒子（もしくは壁要素）に分配される。体積保存より粒子 i への再付着液量 $V_{L,i}^{\rm new}$ は

$$V_{L,i}^{\rm new} = V_{L,i} + \frac{r_j^3}{r_i^3 + r_j^3}\,\big(V_b - \phi V_{L,i} - \phi V_{L,j}\big), \tag{15}$$

対称的に粒子 j にも分配される。壁が相手の場合は面積比を用いて同様に割り当てる。

以上より，Washino 粘性毛管モデルは

(i) 橋生成判定	(13),
(ii) 毛管力	(4), (7),
(iii) 粘性抵抗	(9), (10),
(iv) 力・トルク合成	(11), (12),
(v) 橋破断と液分配	(14), (15),

の 5 つの構成要素で構築されている。これにより，液含浸粒子系における微小時間 Δt 内の運動方程式

$$m\frac{d\boldsymbol{v}}{dt} = \sum \boldsymbol{F}, \qquad I\frac{d\boldsymbol{\omega}}{dt} = \sum \boldsymbol{\tau}, \tag{16}$$

を安定かつ物理的に実装できる。ここで m, I は質量と慣性モーメント，$\boldsymbol{v}, \boldsymbol{\omega}$ は並進・回転速度である。