

# 粉体シミュレーションの進歩と粉体プロセス開発への展開

## Progress of Simulation for Particles Behavior and its Application to Powder Processing

加納 純也  
Junya KANO

東北大学多元物質科学研究所  
Institute of Multidisciplinary Research for Advanced Materials, Tohoku University

### Abstract

Beads motion in a stirred mill having slurry was simulated by the Discrete Element Method (DEM), enabling to calculate the impact energy of beads. The impact energy of beads is known to be well correlated with the grinding rate constant, therefore, it was monitored as an effective index of grinding performance in the simulation work. The present work is to investigate effect of the pin configuration, particularly, the number of pins attached on the agitator on the beads motion as well as the impact energy. We have found that the beads motion is dependent on the number of pins, and the impact energy reaches the maximum value at 8 in number of pins under the present condition. In addition, the maximum value under the impact energy is shifted towards large number of pins as the beads filling ratio increases. A new simultaneous simulation of dynamic and breakage behavior of particles has been developed and compared with those of experiment. The simulation results agree well with experimental ones.

### 1. はじめに

我々の生活の身近にある医薬品や食品、化粧品、さらには、粉体と一見縁がなさそうな鉄や電子部品なども粉体プロセスを利用して製造されている。それらの製造過程においては、原料、中間製品あるいは最終製品が粉体の状態にあり、粉碎、造粒、混合、分散などを担う重要な粉体機器・装置が活躍している。これらの粉体機器の設計と操作は、材料の特性に大きな影響を及ぼすため、その装置内での粉体の動きを精緻に制御することが必要とされている。しかしながら、その制御はいまだ、経験に大きく頼っているのが現状である。これは、装置内部の粉体の状態の観察や計測が難しいことが最大の要因である。粉体の状態を詳細に把握することができれば、粉体機器の設計と操作の高効率化あるいは最適化が促進されるものと期待できる。一方、近年の材料機能の高度化、ニーズの多様化に伴

い、粉体機器の設計や操作の決定に対して、速やかに対応可能な数理的な方法の構築が期待されている。これらの要求に応える手段としてコンピュータシミュレーションが考えられる。コンピュータシミュレーションは、装置内部の粉体挙動を詳細な観察や、様々な情報の抽出を可能にし、工学解析において重要なアプローチとなり得る。ここでは、粉体に関するシミュレーションの最近の動向や、実際の操業におけるシミュレーションの活躍を紹介し、今後の粉体シミュレーションの展望を考えてみたい。

### 2. 粉体シミュレーションの最近の動向

粉体シミュレーション法としてもっとも代表的なものは、離散要素法 (Discrete Element Method (DEM)) である。DEM は、1970年代に Cundall ら<sup>1)</sup> によって提案され、当初は土木工学を対象とした数値

解析に使われてきた。開発された当時は二次元計算のみであったことや、コンピュータの性能が充分でなかった時代背景もあり、それほど注目されていなかった。しかしながら、不連続体全般のシミュレーションが可能ことや、コンピュータの性能の進歩に伴う計算可能粒子数の増加によって、近年では土木工学に加えて機械工学、化学工学、原子力工学、薬学など広い範囲で用いられるようになってきている。DEMは、粉体の特徴である速度・応力の不連続性や偏析をよく表現し、運動状態にある粉体のミクロ的、マクロ的な各物理量の詳細な観察を可能にし、いまや粉体現象のモデル的考察には欠かすことのできない重要なツールになりつつある。さらには、未だ確立されていない粉体の動力学理論の構築に対して大きな力になるものと期待されている。

このようにDEMは粉体シミュレーションとして大きな成果を上げているが、一方で、その性質上、計算粒子数に対していまだに制約がある。計算機能力が向上した現在であっても、現実的に計算可能な粒子数（我々が現実的に待てる計算時間で扱える粒子数）は、およそ100万個程度である。これはコーヒースプーン一杯分の砂糖とよく揶揄されるように、産業界で取り扱う粒子数を考えるとあまりに少ない。そのため、DEMの歴史を振り返ってみても、計算の大規模化・高速化に対するアプローチは常に行われてきた。三尾らは、粒子検索部等をはじめとしたアルゴリズムの最適化を行うことによる高速化への取り組み<sup>2)</sup>、CPUやコンパイラ等の計算環境とプログラムの最適化について検討を行っている<sup>3)</sup>。酒井らは、DEM粗視化モデルを提案し、気流搬送システム<sup>4)</sup>や流動層<sup>5)</sup>などの体系に適用することでその妥当性を検証している。

高速化という点では、並列計算も有効である。現在市販されているCPUは、そのほとんどが複数コアを搭載したものとなってきている。このようなハードウェアの能力を十分に活用するために必要なのが、並列計算のためのプログラミングとチューニングである。並列計算の手法も様々あるが、OpenMPは導入のしやすさから、プログラムのチューニングに対して、計算時間の短縮に効果が見込める有効な方法であると考えられる。その他にMPIといった複数のCPU間で情報をやり取りし並列計算を行う方法もある<sup>6,7)</sup>。

粉体シミュレーションの最近の動向としては、固相のみをシミュレーションするのに加え、CFD

(Computational Fluid Dynamics) とカップリングし、固体と気相あるいは固体と液相との混相流への展開がますます盛んになってきている。川口らは、流動層のような高濃度固気二相流に対してDEMとCFDをカップリングしたモデルを構築し、個々の粒子運動の視点に基づく数値シミュレーションを可能にし<sup>8)</sup>、様々な応用研究が行われるようになってきている。木下らは、MPS (Moving Particle Semi-implicit) とカップリングした混相流への取り組みを行い、固相から液相への相変化を考慮した粉体溶融挙動のシミュレーションを可能にした<sup>9)</sup>。

これらの報告に代表されるように、粉体シミュレーションは既存のシミュレーション法の確かな発展と、新しいシミュレーション技術の融合により日進月歩の成長を遂げている。

### 3. 粉体機器・装置開発と設計でのシミュレーションの活用方法

シミュレーションを活用することのメリットは、一般に以下の点が挙げられる。

- (1) 実験では観測できない物理量、状態量を時間的、空間的に任意に得ることができる。
- (2) 実際に装置を作製する必要がなく、異なる装置形状における数値実験を容易に行うことができる。
- (3) 実験室では困難な実験あるいは自然界では起こらない思考実験が可能である。

(1)に関して、典型的な粉体操作の一つである粉碎を例に考えてみる。粉碎機は基本的に鉄で覆われており内部を直接観察することができない。転動ミル等で内部を観察するために一方の蓋をアクリル板に置き換える場合もあるが、粉体層の表層しか見ることができず、全体を把握することは不可能である。図1に転動ミル内の粒子挙動をDEMを用いてシミュレートした結果を示す。シミュレーションを用いることで、粉碎機内部を詳細に観察可能であることがわかる。

また、内部の粒子の速度分布等も任意に抽出することができ、実験だけでは観察することのできない多くの情報を得ることができる。

(2)に関しては、時間的・経済的負担を軽減するのに有効である。例えば、装置の幾何学的形状や寸法等を変えて実験するには、それらの装置が必要で、時間的・経済的に負担が大きい。シミュレーションではそれらを数値的に変更するだけで取り扱うことが可能で

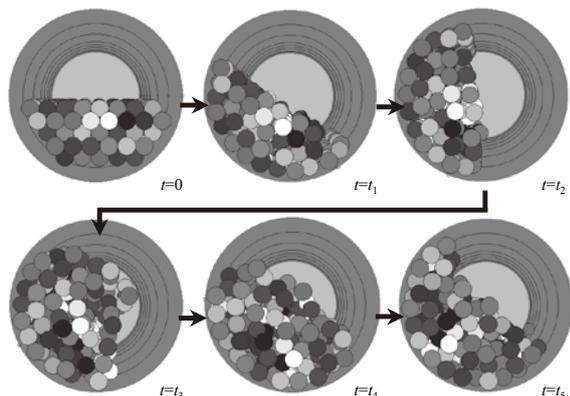


図1 転動ボールミル内のボールの動き

あるので、種々の条件における比較を容易に行うことができる。これにより、装置のスケールアップにも有効であることが報告されている<sup>10)</sup>。

(3)に関しては、実際に試料を準備することが難しい場合に有効である。例えば、粒子径が同じで、摩擦係数のみが異なる粉体の挙動、あるいは摩擦係数が同じで粒子径のみが異なる粉体の挙動を実験的に把握することは極めて難しい。というのは、そのような粉体を準備することが決して容易ではないことによる。シミュレーションでは、それらの値を独立に変えることができるので、摩擦係数のみの影響あるいは粒子径のみの影響の詳細な把握が可能となる。

ここに挙げた事項の具体的な例として、著者らが展開している粉体シミュレーションの例を紹介する。

#### 4. 湿式媒体攪拌ミルのシミュレーション

著者らは、各種ミル内におけるボールの3次元運動のシミュレーション法を提案し、その運動の解析を行っている<sup>11-13)</sup>。特に最近では、ミル内におけるボール運動は粉碎現象を支配するという概念を基本に、ボール運動情報と粉碎過程での碎料の粒子径変化情報を融合し、そこからミル運転やミル構造の最適化法を見出す研究を展開している<sup>14-16)</sup>。すなわち、ミル内ボール運動シミュレーションから得られるボールの衝突エネルギーは粉碎速度定数とよく相関し、この関係は、粉碎試料が同じであれば操作条件にかかわらず一定(普遍的関係)であることを見出した。衝突エネルギー $E_w$ は(1)式で、粉碎速度定数 $K_p$ は(2)式で計算される。

$$E_w = \sum_{j=1}^n \frac{1}{2Wt_s} mv_j^2 \quad (1)$$

$$\frac{D_t - D_l}{D_0 - D_l} = \exp(-K_p t^{0.25}) \quad (2)$$

ここで $n$ は衝突回数、 $m$ はボールの質量、 $t_s$ はシミュレーション時間、 $v_j$ はボールが他のボールまたはミル壁と衝突する時の相対速度を表す。また、 $t$ は粉碎時間、 $D_t$ は粉碎時間 $t$ のときの粒子径、 $D_l$ は粉碎限界時の粒子径、 $D_0$ は粉碎前の粒子径、 $K_p$ は粉碎速度定数である。ミルには粉碎試料も充填されているため、試料の充填量の影響を考える必要がある。そこで、式(1)は試料の充填量 $W$ で規格化した。

これらのことを踏まえ、ここでは媒体攪拌ミルのピンの本数、その長さ、その太さが粉碎性能に及ぼす影響をシミュレーションから推定した結果を例示する<sup>17)</sup>。媒体攪拌ミルの概略を図2に示す。媒体としてはジルコニア製のビーズを使用した。

#### 4.1 攪拌ピン本数が粉碎速度に及ぼす影響

回転軸方向のピン本数を三段で固定し、同一円周上にあるピン本数( $N_p$ )を2~20本の間で変更しシミュレーションを行った。図3にシミュレーションにおけるピン本数を変更した時のピン配置を示す。

図4にロータ回転速度600rpmでのミル断面における媒体の速度分布を示す。ピン本数の少ない領域(2~4本)においてはピンの前面付近で媒体の速度が大きく、ピンの背面に速度の小さい領域が形成される速度分布を持つことがわかる。ピン本数を増やすと、ミルの内側で媒体速度が大きく、ミル外壁に近くなるにつれて媒体速度が小さくなる。さらにピン本数を増やすと、媒体速度が全体的に低下していく。このように、ミル内の媒体の挙動がピン本数により鋭敏に変化することがわかる。

図5にピン本数と衝突エネルギーの関係を示す。なお、ロータ回転速度は図4と同じく600rpmである。

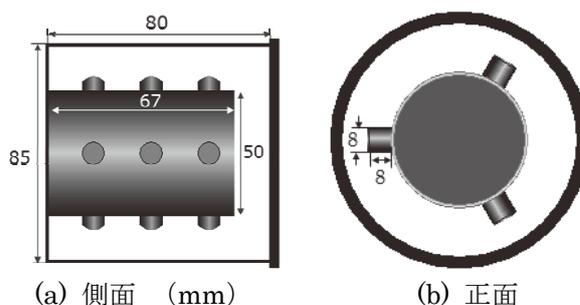


図2 媒体攪拌ミル

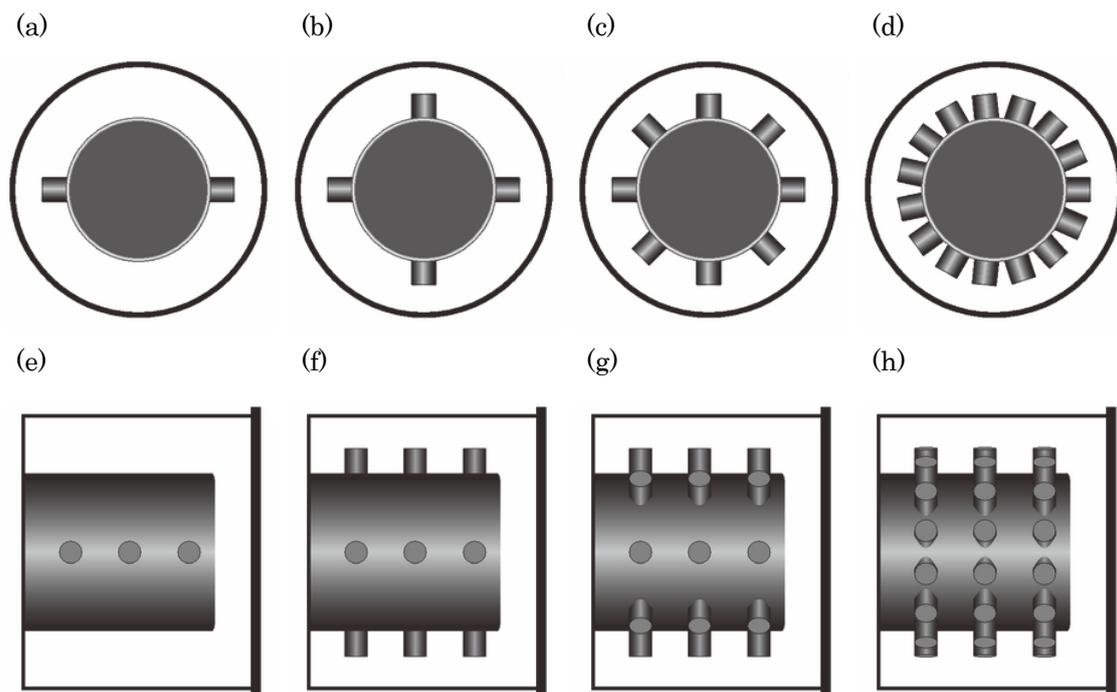


図3 ピンの配置  
 (a-d)：正面；(e-h)：側面  
 (a, e)：2-pin；(b, f)：3-pin；(c, g)：8-pin；(d, h)：15-pin

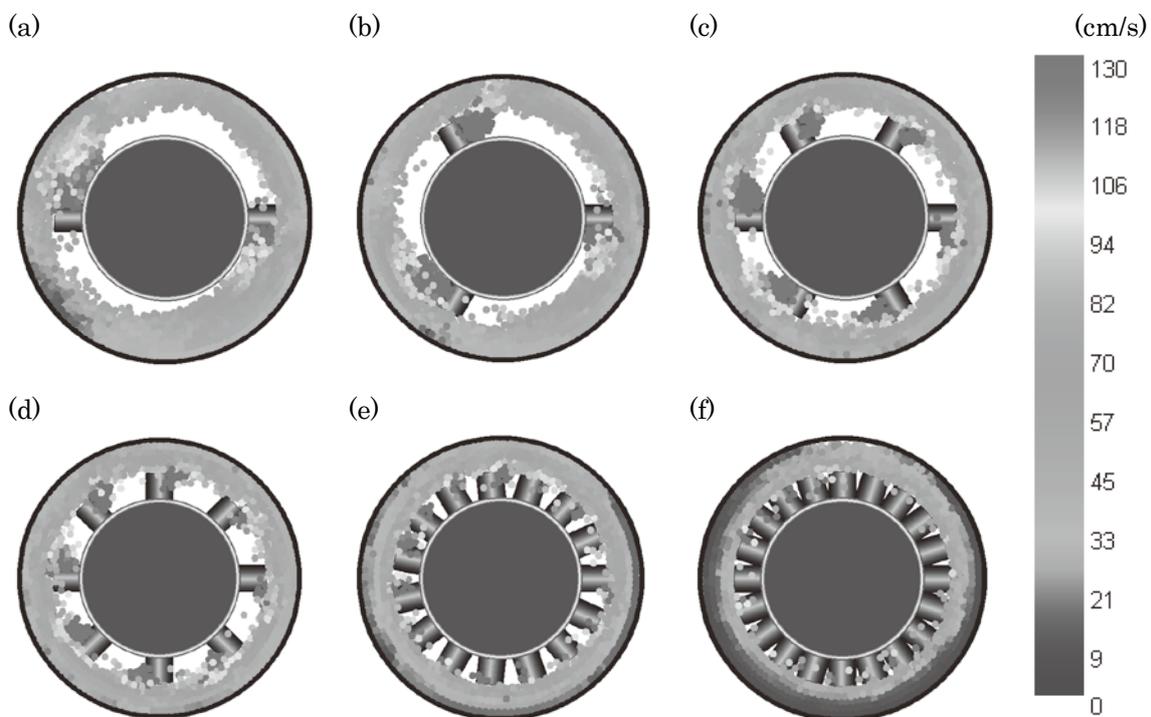


図4 媒体攪拌ミル内のビーズの速度分布  
 (ジルコニアビーズ径 = 2 mm, ビーズ充填率 = 57%, 回転速度 = 600rpm)  
 (a)2-pin, (b)3-pin, (c)6-pin, (d)8-pin, (e)15-pin, (f)20-pin

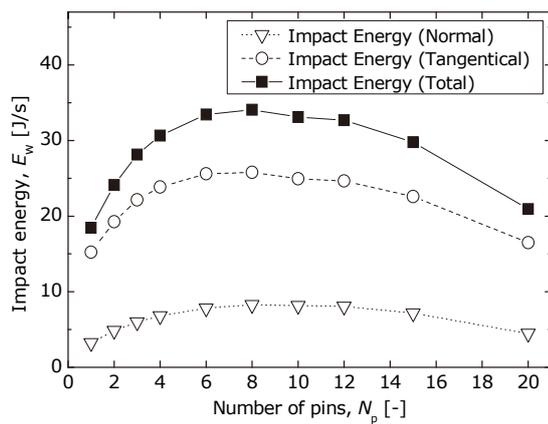


図5 衝突エネルギーとピン数との関係  
(ジルコニアビーズ径 = 2 mm, ビーズ充填率 = 57%, 回転速度 = 600rpm)

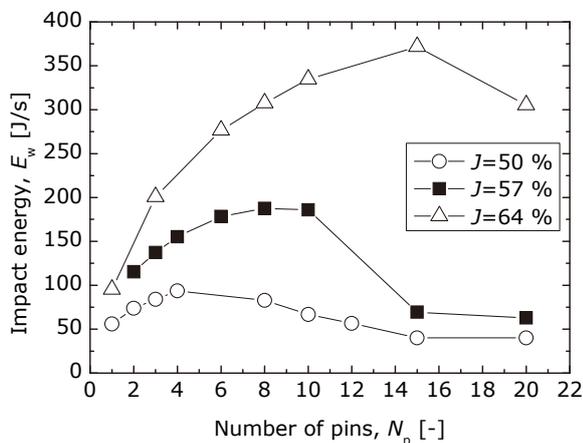


図6 ビーズ充填率をパラメータとしたときの衝突エネルギーとピン本数の関係  
(ジルコニアビーズ径 = 2 mm, 回転数 = 1200rpm)

また、衝突エネルギー中の法線成分、接線成分の内訳もあわせて示した。

ピン本数が8本以下では、ピン本数が増加するにつれて衝突エネルギーが増加する。ピン本数が8本以上になると逆にピン本数が増加するにつれて、衝突エネルギーは減少する。このように同一円周上にあるピン本数が8本のときに衝突エネルギーが最大値をとることがわかる。これは最適なピン本数が存在することを示している。また、いずれのピン配置においても接線方向成分の衝突エネルギーが大半を占めている。これは、砕料が媒体より受ける力の大部分は剪断方向の力であることを示している。衝突エネルギーが最大となるピン本数が8本のとき、媒体は十分大きな速度で運動しており、かつ媒体の速度分布は内側で速く、外壁

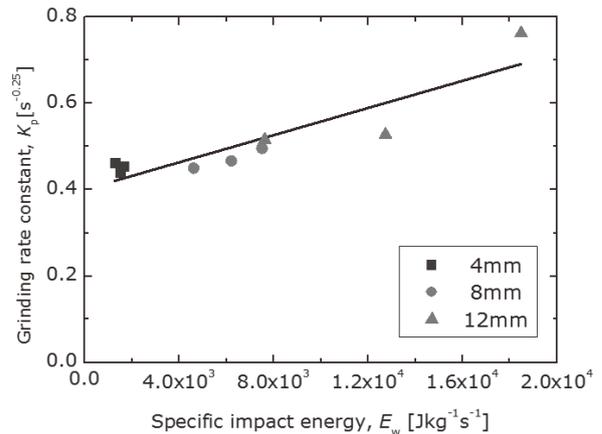


図7 粉砕速度定数と衝突エネルギーの関係  
(回転速度 = 1200rpm, ジルコニアビーズ径 = 2 mm, ビーズ充填率 = 57%, スラリー濃度 = 5%)

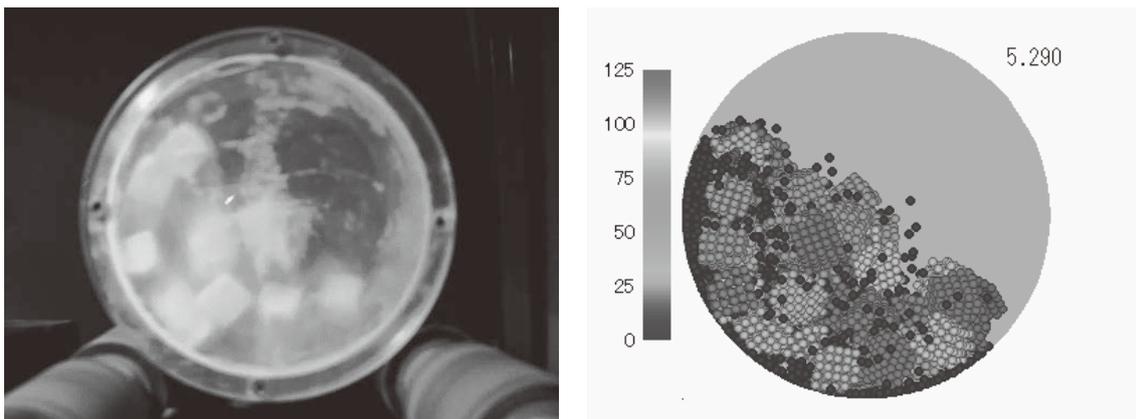
に近くなるほど遅くなる。ピン本数が少ない場合は、媒体の速度は大きいですが、媒体が集団で動くため、剪断方向の力はかかりにくい。ピン本数が多い場合には、ピンから十分な力を受けることができず、媒体の速度は全体的に低下する。これら2つの要因によりピン8本の場合で衝突エネルギーが最大値となったと考えられる。

図6には充填率を変化させた場合のピン本数と衝突エネルギーの関係を示す。

いずれの充填率においてもピン本数が増加すると衝突エネルギーが増加し、あるピン本数において最大値を示し、その後減少する。充填率が増加するにつれて衝突エネルギーが最大値をとるピン本数は多い方にシフトし、常に同じピン本数で最大値を示すのではないことがわかる。

#### 4.2 粉砕実験結果との比較

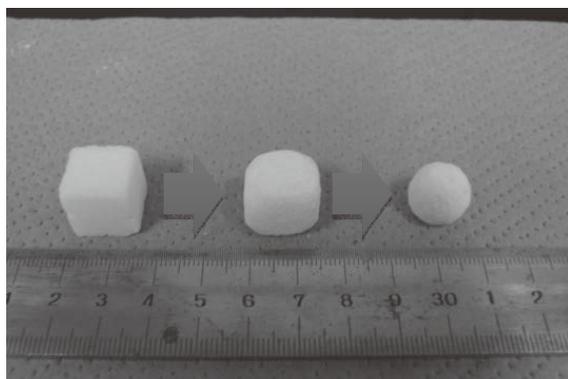
図7にシミュレーションによって得られた衝突エネルギー  $E_w$  と実験によって得られた粉砕速度定数  $K_p$  の関係を示す。このように衝突エネルギーと粉砕速度定数の間には相関関係があることがわかる。この結果からピンの本数と長さを変えた場合、すなわち攪拌機の形状を変化させた場合でも本研究で構築したシミュレーションモデルを用いて粉砕性能を評価することならびに粉砕速度定数を予測することが可能であるといえる。



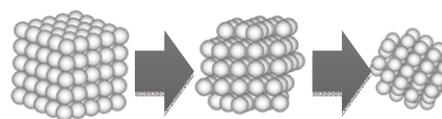
(a) 実験

(b) シミュレーション

図8 角砂糖の運動挙動と粉碎挙動の同時シミュレーションと粉碎実験との比較



(a) 実験



(b) シミュレーション

図9 粉碎過程における粒子形状の変化

## 5. 粉体シミュレーションの今後の展望

DEMシミュレーションによって、粉体の運動はかなり精度良く再現できるようになった。さらなるDEMシミュレーションの発展のためには、粉体の運動のみのシミュレーションではなく、粒子の破壊、粒子の凝集・分散、粒子の複合化やコーティング、粉体成形などの粉体プロセスに直結したシミュレーションを構築し、実際の粉体機器の設計と操作の最適化を可能にすることが重要である。とりわけ、粉碎のシミュレーションにおける今後の展開としては、碎料破壊過程の直接シミュレーションが必要である。これまでは粉碎機内部の運動を代表する媒体の動きに着目していたが、碎料がどのように粉碎され、粒子径や粒子形状がどのように変化していくのかを観察することはできなかった。そこで碎料の粉碎過程を表現可能なモデルを構築し、粉碎プロセスを詳細に解明する取り組みを行っている<sup>18)</sup>。図8は転動ミルにおける角砂糖の自生

粉碎の様子とそれをシミュレートした際の様子である。シミュレーションにはDEMを用いており、球形粒子を連結することで非球形形状を表現し、構成粒子を剥離させることで粉碎を表現している。シミュレーションにおいて粒子の色は碎料の構成粒子数を表しており、粉碎が進み碎料の粒子径が小さくなるにつれ青色に近づく。図8では、上昇比（ミル径に対する碎料のミル底からの持ち上がり高さの比）が実験と合うように摩擦係数を決定しているが、動的安息角などミル内碎料運動挙動は良好に表現できていることがわかる。

また、図9には実験とシミュレーションにおける粉碎途中での碎料形状の変化を示している。それぞれ左から粉碎前、短時間の粉碎後、長時間の粉碎後の碎料形状である。粉碎前の角砂糖は立方体形状であるが、徐々に角が取れ、球に近づくようにその形状を変化させていっていることがわかる。シミュレーションでも

同様の傾向が観察され、このモデルが角砂糖の粉碎プロセスを表現可能であるといえるだろう。

このモデルを発展させていくことで、砕料の粉碎機構の解明や、粉碎機内部のより精緻なシミュレーションが可能になると考えられる。

粉体シミュレーションの歴史はコンピュータの性能の進歩と共にあり、いかに洗練されたプログラムを書くこともハードウェア的な限界はつきまとう。DEMに代表される粒子法では、その欠点を補うための大規模シミュレーション手法開発のための努力が常に行われてきたが、それはこれから先も変わることはないであろう。粉体現象を実スケールで直接シミュレートすることは将来的にも難しく、限られた時間や計算資源の中でいかに現象を表現するモデルを構築するかが重要である。粉体現象をよく理解し、粉体特有の考え方を導入して、新しいシミュレーション法を考案しなければならない。

#### 参考文献

- 1) P.A.Cundall and O.D.L.Strack : "Discrete numerical model for granular assemblies", *Geotechnique*, **29**, 47-65 (1979).
- 2) H. Mio, A. Shimosaka, Y. Shirakawa and J. Hidaka: "Optimum Cell Size for Contact Detection in the Algorithm of Discrete Element Method", *J. Chem. Eng., Japan.*, **38**, 969-975 (2005).
- 3) H. Mio, A. Shimosaka, Y. Shirakawa and J. Hidaka: "Optimum Cell Condition for Contact Detection Having Large Particle Size Ratio in Discrete Element Method", *J. Chem. Eng., Japan.*, **39**, 409-416 (2006).
- 4) M. Sakai, S. Koshizuka : "Large-Scale Discrete Element Modeling in Pneumatic Conveying", *Chemical Engineering Science*, **64**, 533-539 (2009).
- 5) M. Sakai, Y. Yamada, Y. Shigeto, K. Shibata, V.M.Kawasaki, S. Koshizuka : "Large-scale Discrete Element Modeling in a Fluidized Bed", *Int. J. Numer. Meth. Fluids*, **64**, 1319-1335 (2010).
- 6) F. Freissner and P. Eberhard : "Load balanced parallel simulation of particle-fluid DEM-SPH systems with moving boundaries", *Advances in Parallel Computing*, **15**, IOS press (2008).
- 7) H. Mio, R. Higuchi, W. Ishimaru, A. Shimosaka, Y. Shirakawa, and J. Hidaka : "Effect of paddle rotational speed on particle mixing behavior in electrophotographic system by using parallel discrete element method", *Adv., Powder Technol.*, **20**, 406-415 (2009).
- 8) 川口寿裕, 田中敏嗣, 辻裕 : "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*, **58-551B**, 2119-2125(1992).
- 9) 木下秀則, 下坂厚子, 白川善幸, 日高重助 : "MPS法を用いた粉体塗料溶融挙動の解析", *日本機械学会第20回計算力学講演会講演論文集*, 489-490 (2007).
- 10) 三尾浩, 加納純也, 齋藤文良 : "胴長の異なる転動ミル内における媒体運動と粉碎速度の相関", *東北大学多元物質科学研究所彙報*, **59**, 10-16 (2004).
- 11) B. K. Mishra and R. K. Rajamani: "Motion analysis in tumbling mills by the discrete element method", *KONA*, **8**, 92-98 (1990).
- 12) H. Ryu, H. Hashimoto, F. Saito and R. Watanabe: "Numerical Simulation of Ball Motion in a Tumbling Ball Mill" *MMIJ, Japan*, **108**, 549-555 (1992).
- 13) 横山豊和, 田村希志臣, 神保元二 : "振動ミル内のボール運動の数値解析", *化学工学論文集*, **17**, 1026-1033 (1991).
- 14) M. Miyazaki, J. Kano and F. Saito : "Simulation of Operational Power of Co-Axial Double Rotating Cylinders Mill by Particle Element Method", *J. Chem. Eng., Japan*, **32**, 257-261 (1999).
- 15) J. Kano and F. Saito : "Correlation of Ball Impact Energy with Yield of Soluble Vanadium Compound Produced in EP Dust by Dry Mechanochemical Treatment", *J. Chem. Eng., Japan*, **31**, 1014-1015 (1998).
- 16) J. Kano and F. Saito : "Correlation of powder characteristics of talc during Planetary Ball Milling with the impact energy of the balls simulated by the Particle Element Method" *Powder Technology*, **98**, 166-170 (1998).
- 17) R. Soda, J. Kano, F. Saito : "Analysis of Effect of

Pin Configuration on Beads Motion in a Stirred Mill by DEM”, *J. Soc. Powder Technol, Japan*, **46**, 180-186 (2009).

- 18) S. Ishihara, R. Soda, J. Kano, F. Saito, K. Yamane : “DEM Simulation of Autogenous Grinding Process in a Tumbling Mill”, *J. Soc. Powder Technol, Japan*, **48**, 829-833 (2011).

#### Captions

Fig. 1 Motion of balls in a tumbling ball mill

Fig. 2 Schematic diagram of a stirred mill

Fig. 3 Configuration of pins on the agitator in the stirred mill

Fig. 4 Profiles of beads velocity in the stirred mill

Fig. 5 Relationship between impact energy of beads and number of pins

Fig. 6 Relationship between impact energy of beads and number of pins as a parameter of bead filling ratio

Fig. 7 Relationship between grinding rate constant and impact energy

Fig. 8 Simultaneous simulation of dynamic and breakage behaviors of sugar blocks in a rotating drum. (a) Experiment (b) Simulation

Fig. 9 Change in the particle shape during grinding processing