

	やまもと みちのり
氏名	山本 通典
授与学位	博士(学術)
学位記番号	学術(環)博第229号
学位授与年月日	平成28年3月25日
学位授与の根拠法規	学位規則第4条第1項
研究科, 専攻の名称	東北大学大学院環境科学研究科(博士課程)環境科学専攻
学位論文題目	DEMシミュレーションを用いた粉体混合メカニズム解析と混合装置設計に関する研究
指導教員	東北大学教授 加納 純也
論文審査委員	主査 東北大学教授 加納 純也 東北大学教授 葛西 栄輝 東北大学教授 埜上 洋

## 論文内容要旨

本研究で取り扱っている粉体混合は工業プロセスにおいて重要な単位操作であり、混合状態には混合装置の操作条件と粉体原料の特性が大きく影響を及ぼす。これらの要因が混合に及ぼす影響について実験やコンピュータシミュレーションを用いた研究が行われているが、粉体特性が混合に及ぼす影響については未だ十分な知見が得られていない。また、粉体特性によって生じる不均一混合と呼ばれる偏析に対し、どのような対策を施すべきか、その手法の検討さえ行われていないのが現状である。そこで本研究では、混合挙動を精度よく再現可能なDEMシミュレーションを用い粉体特性が混合挙動に及ぼす影響を解析するとともに、偏析の対策として対象としている混合装置に適した粉体特性の選定法と対等としている粉体原料に適した装置設計技術を開発し、その有効性について検証した。

第1章では、粉体混合に関する本研究の背景を述べ、過去の実験、シミュレーションに関する先行研究を調査し、本論文の目的を述べた。

第2章では、回転ドラムを用いた乾式混合において粒子特性である粒子密度、粒子径分布、摩擦係数が粒子混合挙動に及ぼす影響を解析することを目的し、実験とシミュレーションを用いて検討した。実験との比較によるDEMシミュレーションの妥当性を確認した上で、シミュレーションを活用し各粒子特性が混合に及ぼす影響を評価・解析したところ、以下のことが明らかになった。

- 1) 粒子に密度差があると密度が高い粒子が粒子層の中心に集まる偏析が生じた。これは高密度粒子の崩落時における粒子層への貫入と粒子層内部の強制対流が原因であることがシミュレーションか

ら示唆された。

- 2) 粒子径に差がある場合は、小粒子が粒子層中心に集まる偏析が生じた。これは遠心力によるものではなく、崩落時における小粒子の粒子層への貫入と粒子層内部の強制対流によるものであるということがシミュレーションから示唆された。
- 3) 粒子の摩擦係数においては値を変化させても偏析は生じないが、摩擦係数が高くなるほど混合度、混合速度ともに増加することが確認された。これは、粒子の持ち上がり高さが高くなることに伴う崩落時の粒子速度増加と、壁面が粒子に及ぼす影響範囲の増大がシミュレーションから確認され、それにより粒子全体の循環速度も変化したためであると予想される。

第 3 章では、回転ドラムにおける粒子形状が混合に及ぼす影響を解析することを目的とし、実験と DEM シミュレーションを行った。まず、DEM シミュレーションで粒子運動を再現するため、パラメータである反発係数、構成粒子数、摩擦係数の決定方法を考案し妥当性を確認した。その上で、実験と DEM シミュレーションから立方体粒子と球形粒子の混合過程を解析し以下の知見を得た。

- 1) 立方体粒子の構成粒子数は 64、反発係数は落下試験から求めた値を使用し、摩擦係数は実験における持ち上がり高さ一致するように決定することで、回転ドラムにおける立方体粒子の混合挙動を再現できることが分かった。
- 2) 立方体粒子と球形粒子では、回転ドラム内における粒子運動が明らかに異なることが分かった。
- 3) 最終的な混合度の比較では、立方体粒子と球形粒子ともにほぼ同程度になることが分かった。
- 4) 混合速度の比較では、球形粒子に比べ立方体粒子の混合速度が速いことを確認した。これは球形粒子では粒子運動が定常的であるのに対し、立方体粒子はその運動が非定常性を有しており、これが混合を促進させたと考えられる。

第 4 章では、回転ドラムにおける液架橋が粒子混合に及ぼす影響を解析することを目的とし、DEM-MPS 法による解析手法の検討を実施した。開発した DEM-MPS 法により剛体球と液体間の濡れ性、および液体存在下での 2 粒子間の衝突を解析し、実験結果と比較することで妥当性を評価した。その上で、実験と DEM-MPS シミュレーションからグリセリン液体が存在している条件下での粒子混合挙動を解析し以下の知見を得た。

- 1) 液体の表面張力と剛体球と液体間、壁面と液体間の濡れ性を考慮した DEM-MPS シミュレーション

手法を開発した。

- 2) 開発した DEM-MPS シミュレーションによって、回転ドラムにおける液体存在下での粒子挙動を解析し、混合初期では液体が局所的に存在することで液体の影響を受ける粒子と受けない粒子に分離されることがわかった。
- 3) DEM-MPS シミュレーションの結果は実験と同様の傾向が得られており、架橋力が支配的な粒子混合挙動を解析する有効な手法であることが示された。
- 4) 混合挙動を解析するには計算負荷が高く、DEM-MPS シミュレーションの高速化が今後の課題である。

第 5 章では、粉体特性が複合的に混合に影響を及ぼす実プロセス条件を想定し、回転ドラムに適した粉体特性を選定にタグチメソッドを用い検討した。実験では粉体特性を容易に変更できないことから、DEM シミュレーションを活用しタグチメソッドに必要なデータを数値実験から求めた。タグチメソッドで必要となる混合特性には、新たな指標として全粒子の移動距離を用い、初期配置を外乱とした場合の混合特性のバラツキも同時に算出し要因分析した結果、以下の知見を得た。

- 1) 外乱に対するバラツキには粒子の反発係数、粒子径、粒子密度が影響するものの、摩擦係数や投入重量比、ヤング率が及ぼす影響が小さいことが分かった。
- 2) 混合特性には摩擦係数が最も影響し、次いで粒子径、粒子密度、ヤング率の影響度が高くなる。しかし、外乱のバラツキに影響を及ぼす反発係数は混合特性にはほとんど影響を及ぼさず、投入重量比もまたほとんど影響しないことが分かった。
- 3) タグチメソッドによる 1 段階目の設計から求めた最適条件において、2 種類の粒子混合はバラツキ、混合特性ともに改善され、その混合状態もほぼ均一なものが得られた。また、タグチメソッドから予想されるバラツキが悪化する条件での解析も実施した。その結果、バラツキと混合特性ともに悪化し、混合状態も明らかな偏析が観察された。
- 4) タグチメソッドと DEM シミュレーションを組み合わせることで、対象としている混合装置に適した粉体原料を選定可能であることを示した。

第 6 章では、DEM シミュレーションを活用した粉体混合装置設計技術を開発することを目的とし検討を行った。まず、効率的に装置設計が可能となるよう 3DCAD データを読み込む機能を DEM シミュ

レーションに追加し、回転ドラムを対象にその妥当性と、設計の一連の流れを確認した。その上で、当社において試作に使用されているハイスピードミキサーを対象に、有機物と無機物を均一に混合するため DEM シミュレーションを活用して攪拌羽根を設計し以下の知見を得た。

- 1) 有機物と無機物の混合において密度差が偏析の主要因であると予想し、SUS 粒子とアルミナ粒子で現象をモデル化することで、類似した混合状態を再現することができた。
- 2) 混合状態を改善するため、楕形羽根とツイスト羽根を考案し DEM シミュレーションでその効果を確認した。その結果、ツイスト羽根が SUS 粒子とアルミナ粒子の混合において偏析が抑制されることがわかった。
- 3) 粒子軌跡の解析から、ツイスト羽根では容器全体に循環流れが発生していることがわかり、この循環流によって混合状態が均一になることが DEM シミュレーションから示唆された。
- 4) 実際にツイスト羽根を製作し有機物と無機物を混合処理した結果、くさび形羽根で観察された偏析が改善され、混合度の比較においても混合状態が改善されることがわかった。
- 5) DEM シミュレーションを活用した一連の装置設計技術を開発した。

シミュレーションによる粉体混合に関する研究は計算機と商用ソフトウェアの発展とともに劇的に進歩し、これまで解析が難しいとされてきた複雑な装置形状や運動を有する混合解析が可能となり、それにしがって多くの情報が得られるようになってきた。しかし、実プロセスで使用される粉体原料の個数は数兆個単位であり、コンピューターの飛躍的な成長がみられる近年においても現実的な計算時間内で結果を得ることはできない。そのため現象の本質を捉え、今ある計算資源の範囲で現実的な時間内で結果を出すことが求められている。また、実際の製造現場で生じた問題に対応するには、数日程度のシミュレーションでも計算時間が長く、よりスピーディに対応する必要性が出てきていることから、より一層現象を捉えることが可能な理論の構築が必要であると思われる。

## 論文審査結果の要旨及びその担当者

論文提出者氏名	山本 通典
論文題目	DEMシミュレーションを用いた粉体混合メカニズム解析と混合装置設計に関する研究
論文審査担当者	主査 <u>教授 加納 純也</u> <u>教授 葛西 栄輝</u> <u>教授 桒上 洋</u> (多元物質科学研究所)

## 論文審査結果の要旨

本論文では、乾式の粉体混合における混合状態の向上を目的とし、粉体特性が混合に及ぼす影響を明らかにするとともにDEM(Distinct Element Method)を活用した混合装置の設計技術を確立した。混合装置は形状がシンプルな回転ドラムを対象とし、経験的に混合に及ぼす影響が大きいと言われている粒子密度、粒子径、摩擦係数、粒子形状、液架橋力の粉体特性についてDEMシミュレーションを用い混合メカニズムを解析した。粒子密度、粒子径については粒子の軌跡や粒子の動きやすさに着目し偏析のメカニズムを明らかにした。摩擦係数や粒子形状は混合速度に影響する特性であることを粒子の平均速度から示すとともに、粒子形状は摩擦係数に関連する特性であることも合わせて示した。一方、粒子間相互作用力の1つである液架橋力については、解析手法の確立を目的とした基礎検討という位置づけでDEMとMPS(Moving Particle Semi-implicit)の連成解析を用い、液体存在下における2粒子間の衝突挙動を再現することを試みた。本解析ではDEM粒子と液体との濡れ性が考慮された新しいモデルとなっているが、DEM粒子と液体との衝突時における液体圧力の変化速度が実現象に対して遅いという新たな問題点を明らかにした。以上の結果は個々の粉体特性の影響のみを抽出した解析だが、実際の混合プロセスでは複数の特性が同時に作用している。そのため、全ての粉体特性を同時にパラメータとして取り扱う必要があることから、数千という膨大な条件の数値実験を実施しなくてはならない。そこでこれらの解析を効率的に行うため、DEMシミュレーションとラグチメソッドを組み合わせた新たな手法を提案した。また、従来の混合評価で使用されているサンプリングは場所やサイズに大きく影響を受けるため、全粒子を対象としたサンプリングによらない新たな評価指標を考案した。その結果、粉体特性が混合に及ぼす影響の大小関係を明らかにし、ラグチメソッドとDEMシミュレーションを組み合わせることで効率的に混合装置に適した原料を選定できることを示した。以上の検討によって得られた知見を活用し、混合装置の設計技術を確立するため回転ドラムを対象にその技術開発を行った。回転ドラムにおいて生じた粒子密度による偏析を改善すべく、偏析の原因を分析し、対策の考案、DEMシミュレーションによる対策の効果検証、実験検証という一連の設計の流れを確立した。従来は問題解決までに複数回行われていた実機製作と検証実験を、1回の試行で問題解決できることを確認した。この設計技術は回転ドラムとは構造が異なる高速粉体混合装置への適用も可能であることを示した。

よって、本論文は博士(学術)の学位論文として合格と認める。