

2022 年度（第 18 回）研究助成報告

研究題名	「理想粉体」の DEM シミュレーションに基づいた粉体圧縮過程の基礎モデルの構築
研究期間	2022 年 4 月 1 日～2023 年 3 月 31 日
研究機関・所属 研究者名	岡山大学学術研究院 環境生命自然科学学域 三野 泰志

1. 研究成果の概要

<p>粉体圧縮成形プロセスにおける粉体挙動の基本原則を理解することを目的として、離散要素法（Discrete Element Method, DEM）を用いた粉体圧縮シミュレーションを行った。粉体として振舞う最小の特性を持つ粒子の集まりとして「理想粉体」を定義し、この概念的な対象を取り扱うための手段として DEM を用いた。本検討では、現象の再現性を高めるための複雑な接触・相互作用モデルの導入は敢えて行わず、粉体らしさを表現できる最もシンプルなモデルを採用した。</p> <p>シミュレーションの結果より、（Ⅰ）初期の充填構造のばらつきが局所的に緩和される領域、（Ⅱ）粒子が大きな変形を伴わずに空隙を埋めるように移動することで充填が進行する領域、（Ⅲ）一部の粒子が変形を始めることでさらに充填が進行する領域（遷移域）、（Ⅳ）最終的に粒子の変形が層全体にわたって生じることで圧縮が進行する領域の 4 領域からなる粉体の圧縮挙動を明らかにした。</p>
--

2. 助成期間内での研究成果の概要

<p>1. はじめに</p> <p>粉体の圧縮成形は粉末冶金やセラミックス、医薬品などの工業プロセスにおいて重要な単位操作である。粉体工学分野において圧縮成形に関する研究は古くから盛んに行われ、圧縮荷重と充填率の関係式（圧縮式）が数多く提案されてきた（例えば、川北の式や Athy の式など）。しかし、圧縮式のほとんどは経験的あるいは半経験的に求められたものであり、物理的な意味や粉体物性との直接的な関係については不明な点も多い。そのため、実際に扱う粉体の挙動を既存の圧縮式を用いて予測することは未だに難しく、圧縮成形プロセスの設計は経験と試行錯誤に頼るところが大きい。このような課題を克服するためには、圧縮時の粉体の動きを十分に理解する必要がある。</p> <p>これまでに行われてきた実験や数値シミュレーションでは、粉体特有の様々な因子の影響を正確に考慮に入れようとした結果として圧縮過程における粉体運動の本質が見えづらくなることがあった。そこで本研究では、粉体として振舞う最小の特性を持つ粒子の集まりと</p>

して「理想粉体」を定義し、その圧縮過程を DEM を用いて解析することで基本原理を明らかにすることを目的とした。

2. シミュレーション方法

「理想粉体」という概念的な対象を取り扱うための手段として DEM を用いた。DEM を用いた研究では実際の現象の再現性を高めるために複雑な接触・相互作用モデルが導入されることも多いが、本研究では敢えてシンプルなモデルを採用した。粒子同士の接触は、弾性力と粘性減衰力をそれぞれバネとダッシュポットで模擬する Voigt モデルによって記述した。接触力の計算は法線方向とせん断方向に分けて行い、せん断方向についてはクーロン摩擦を表現するために摩擦スライダーを設置した。本検討では簡単のために線形バネを採用し、法線方向のバネ定数 K_n に対して、せん断方向のバネ定数を $K_t = (2/7) K_n$ 、粘性減衰係数をそれぞれ $\eta_n = 2(m_p K_n)^{0.5}$ 、 $\eta_t = 2(m_p K_t)^{0.5}$ (m_p : 粒子の質量) とした。さらに、物理化学的相互作用力として van der Waals 力を考慮に入れた。

本研究では球形粒子の二次元平面上の運動を対象とした (擬二次元モデル)。これにより、計算の高速化に加えて、運動の自由度を落とすことによる解析の単純化を期待した。計算領域を Fig. 1 のように設定し、左右の境界には周期境界条件を課した。粒子を互いに接触しないようにランダムに配置して重力充填を行った後 (Fig. 1a), 上壁の移動速度を一定にして圧縮を行った。平均粒子径は $1\mu\text{m}$ (粒子径分布 $\pm 10\%$) に設定し、圧縮速度は 0.01 m/s で一定として検討を行った。

3. 結果

本研究で行った圧縮シミュレーションにより得られた計算結果の一例として、粒子径 $1\mu\text{m}$ 、摩擦係数 0.5、Hamaker 定数 $1 \times 10^{-20}\text{ J}$ の条件における圧縮過程のスナップショットを Fig. 1 に示す。図のように、上壁の下降にともなって粒子が再配列を繰り返しながら圧縮されていく様子が分かる。ここでは最終的に充填率 (粒子投影面積の占有率) が 0.9 程度に達するまで圧縮を行った。充填率に対する圧縮に必要な力の変化を Fig. 2 に示す。ただし、ここでは Rumpf の式を用いて算出した一接触点あたりの圧縮力 H を示す。Fig. 2 より、圧縮

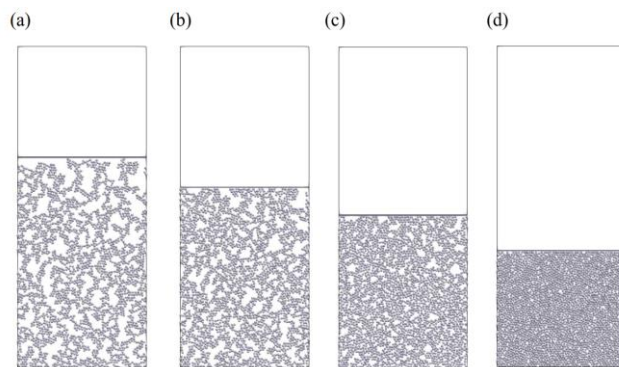


Fig. 1 シミュレーション結果の一例 (粒子径 $1\mu\text{m}$)

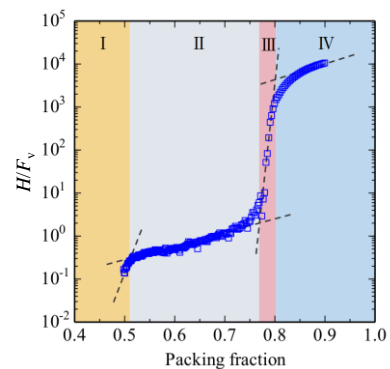


Fig. 2 圧縮力と充填率の関係

力の変化挙動は大きく4つの領域 (I) ~ (IV) に分けられることが確認できた。

重力充填の条件を変化させて作製した初期構造に対して圧縮シミュレーションを行った。その結果、領域 (I) は重力充填時の構造のばらつきを反映したものであり、局所的に充填時の構造が崩れる現象に対応していることが明らかとなった。比較のために圧縮実験を行ったところ、実際のプロセスでは圧縮前に行われるタッピング操作によって充填が進むためにこの領域は確認されないことが分かった。

粒子間付着力が圧縮挙動に及ぼす影響を調べるために、Hamaker 定数を $A = 10^{-21}$, 10^{-20} , 10^{-19} J と変化させたときの一接触点あたりの圧縮力 H の変化を Fig. 3a に示す。領域 (II) では Hamaker 定数、すなわち付着力に応じて圧縮力のオーダーが変化するのに対して、領域 (IV) では付着力に関わらず圧縮に必要な力が同程度になることが分かった。この結果は領域 (II) と (IV) で圧縮の進行メカニズムが全く異なることを示しており、領域 (III) はその遷移領域と見ることができる。圧縮力 H を各条件における最大の付着力 F_{vdW} に対する比 (H/F_{vdW}) としてプロットし直したところ (Fig. 3b), 領域 (II) では全ての条件で値が重なることが分かった。この結果より、領域 (II) では van der Waals 力によって付着した粒子同士の位置が変化しながら圧縮が進行しているものと考えられる。

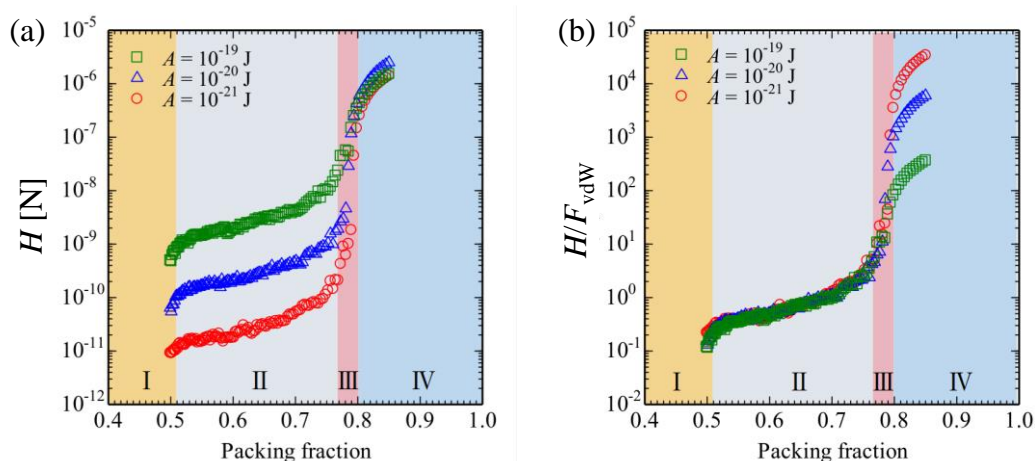


Fig. 3 異なる付着力条件における充填率に対する

(a) 一接触点あたりの圧縮力 H の変化, (b) H/F_{vdW} の変化

領域 (IV) における支配因子を調べるために、粒子の硬さ (DEM におけるバネ定数) を変化させたときの一接触点あたりの圧縮力 H の変化を Fig. 4a (次頁) に示す。領域 (II) では全ての条件で圧縮力の大きさが同程度であることから、この領域では付着力が支配的であることが確認できる。一方、領域 (IV) ではバネ定数に応じて圧縮力のオーダーが変化している。そこで、圧縮力 H をバネ定数 K_n で除してプロットし直したところ (Fig. 4b), 領域 (IV) において全ての条件で H/K_n の値がほぼ重なることが分かった。この結果より、領域 (IV) では主に粒子の変形によって充填率が增大していると考えられる。

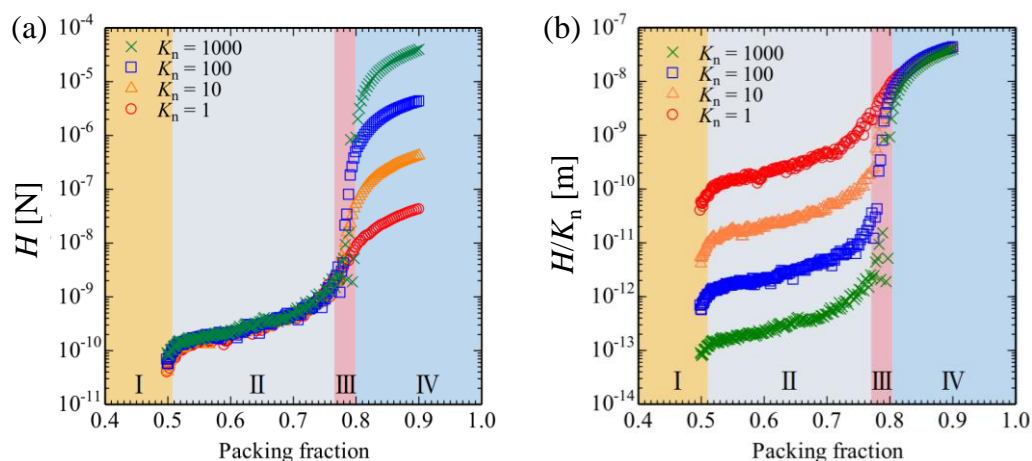


Fig. 4 異なる粒子硬さの条件における充填率に対する
(a) 一接触点あたりの圧縮力 H の変化, (b) H/K_n の変化

4. まとめと今後の展望

理想粉体の DEM シミュレーションにより、粉体の圧縮過程における支配的な因子を明らかにした。圧縮初期において初期の充填構造のばらつきが局所的に緩和された後（領域 (I)）、粒子が大きな変形を伴わずに空隙を埋めるように移動することで圧縮が進行する（領域 (II)）。このとき、粒子同士に働く付着力に対抗して粒子を移動させる力が必要となるため、圧縮力は付着力とともに増大する。その後、一部の粒子が変形を始めることでさらに充填が進行し（領域 (III)）、最終的には層全体にわたって粒子が変形することにより圧縮が進行する（領域 (IV)）。今後は、本研究で明らかとなった支配因子と粒子の運動形態との関係を記述する数理モデルの構築を目指す。

3. 研究発表

学術論文

- 三野泰志, 田中葉月, 中曽浩一, 後藤邦彰, 格子ボルツマン法と離散要素法の連成モデルを用いた粒子懸濁液のせん断流れシミュレーション, 粉体工学会誌 60 (2023) 607–612.

学会発表

- 三野泰志, 中曽浩一, 後藤邦彰, 毛管相互作用による粒子分散液の流動性変化に関する数値シミュレーション, 日本食品工学会第 23 回年次大会, (2022 年 9 月 5–6 日, 岡山)
- 田中葉月, 三野泰志, 中曽浩一, 後藤邦彰, 高濃度粒子懸濁液の流体シミュレーションモデルの開発, 化学工学会中国四国支部合同コロキウム 2022, (2022 年 9 月 9 日, 岡山)
- 田中葉月, 三野泰志, 中曽浩一, 後藤邦彰, 粒子懸濁液の流動性に与える粒子間相互作用力の影響, 粉体工学会 2022 年度秋期研究発表会, (2022 年 12 月 6–7 日, 東京)