離散要素法によるプロセスモデリング*

井 上 外 志 雄**

1. は じ め に

自然科学における研究は多くの場合現象の観察から始まり、観察結果を整理し、意味付けを行い、本質を明らかにすることによって目的を達成する。対象が自然現象であるか人工的な現象であるかによらず、現実の問題が複雑すぎて本質を捉えることが難しい場合、我々はしばしば実験という手段に訴える。実験は現実を単純化した一種のモデル（模型）に置き換えることを意味する。

近年コンピュータの目覚ましい発達に伴って、コンピュータが従来の実験に代わり、モデル化の重要な担い手となってきた。コンピュータによる研究はある場合には実験では不可能な試行を可能にし、ある場合には実験よりもはるかに少ない経費、時間、労力によって実験と同等、あるいはそれ以上の成果を挙げることが可能にする。

コンピュータ上で実現されるモデルによる「試行」はコンピュータシミュレーションまたは単にシミュレーションと呼ばれ、実験あるいは思考実験に代わる方法論として、いまやコンピュータ利用技術の中でも重要な一分野となっている。シミュレーションの役割は自然科学などの領域における従来の実験と変わらないが、実験が現実の小型模型として感覚的に捉え易いのに対して、コンピュータシミュレーションはモデルが言語的、あるいは数学的抽象化過程を経て形成され、直感に訴え難いために、過剰なまでの不信感を持たれることも多いが、事実その過程で思わぬ誤りを冒す危険も決して少なくない。モデルの作成に当たってはそれが現実を正しく写し出すものであるよう充分の注意を払うとともに、モデルの振舞いを様々な角度からよく調べ、誤りの防止に努めることが大切である。

シミュレーションには大きく分けて代数方程式や微分

方程式などの決定論的数式によって記述されるモデルによるものと、確率論的モデルによるものがある。粉碎、浮選などの選鉱プロセスに対するシミュレーションとしてはプロセスの物質収支モデルを数式によって表す決定論的モデルによるもののがもっとも一般的であり、これらのプロセスの本質の解明、成績の改善、自動制御系の開発・設計などに大きな役割を果たしてきた。とりわけ、粉碎速度論におけるモデル化とその応用はボールミルから始まり、最近ではクラッシュャや自生粉碎ミルに至る広い分野に亘り、プロセス技術向上への貢献には目覚ましいものがある。

これらのシミュレーション技術に加えて近年新たなシミュレーション技法として離散要素法（discrete または distinct element method—DEM）が台頭し、強い関心を集めつつある。本稿はこの方法の研究状況を紹介するとともに、著者自身が現在進めつつあるミルのモデルとシミュレーションによる結果について述べることにしたい。

2. 離散要素法とその応用

離散要素法の研究は P. A. Cundall (1971) が最初とされている。この方法は複数の粒子の相互干渉を各接触毎に観察し、それぞれの粒子の運動を数値的に求めるものである。Cundall はコンピュータシミュレーションによって示された DEM モデルにおける粒子の振舞いを光弾性実験の結果に照らし合わせ、両者がよく一致することを確かめたと述べている¹⁾。

Cundall らの一連の研究は岩塊の力学挙動に関するものであったが、この方法は粒子集合体としての粉体および粒子相互の干渉が無視できない粒子分散系に対する新しい研究手段としても、俄に注目を集めるところとなった。我が国における研究も粒子の充填構造、集塵、粉碎、ふるい分け、空気輸送、流動層、貯槽などの各分野にわたっている²⁾⁶⁾。

* 平成 6 年 11 月 10 日 日本会第 93 回例会において発表

** 東京大学名誉教授

平成 6 年 9 月 26 日 受理

離散要素法をきわめて大きな数の細かな粒子からなる粉体の一粒一粒に適用するには現在のコンピュータはなお、規模が小さすぎる。そこで多くの場合、本来3次元である対象を2次元のモデルで表現せざるを得ないのが実情である。モデルの規模は取り扱う粒子数によっておおよその見当をつけることができるが、現在は粒子数で10万のオーダーがおおよその上限といえる。また、コンピュータの能力を補うために、少ない粒子数で全体を表すテクニックもいろいろと工夫されている。

粒子の相互干渉を追跡するとき、一つの衝突現象を複数の時間刻み毎に行うことは計算精度を維持するための最小必要条件である。そのため時間刻みは問題の性質、粒子の大きさにもよるが、数ナノ秒から数十マイクロ秒のオーダーとなり、その計算量と計算時間はメモリ容量と並んで大きな制約条件の一つとなる。この計算時間もまた、取り扱う粒子数の増加とともに急激に増加する。そこで精度を犠牲にすることなくいかに計算量を減少させるかは正しいモデルの設定と並んでDEM計算技術における腕のふるいどころである。

3. 粉砕機の離散要素モデル

横山らは振動ミルについてDEMモデルを開発し、その振舞いを実験ミルのビデオ観察と比較、検討している⁷⁾。また、Mishra, Rajamani らはボールミルのDEMモデルについて一連の研究を行い、興味ある結果を示している¹⁰⁻¹¹⁾。Rajamani らの報告の中にはボールの衝突によるエネルギー消費のスペクトル分布、2次元モデルと3次元モデルとの対比、大型ミルと小型ミルとの比較などに関する重要な知見が含まれている。著者等はこれらの研究成果に刺激され、遠心ミルの振舞いを調べることを第一の目標としてDEMの研究に着手した。

これらの研究に共通していることは個別の粉体材料粒子をDEMにおける観測の対象とするのではなく、粉砕媒体となるボールの運動に着目していることである。これによって、シミュレーションによる観測の精細度は1ランク下がるが、ボールの振舞いがわかるだけでも一歩前進と考え、妥協する訳である。しかし、これによってDEMの計算ははるかに容易となる。

このようなDEMモデルではボールとボールの間に挟まれた粒子の破碎をどのように表現するかが重要なポイントといえる。粉砕に限らず一般にDEMモデルでは粒子の力学的挙動をFig. 1のような粘弾性で表すことが多い。このモデルは粉砕モデルとしても多く使われている。われわれは粒子ベッドを圧縮粉砕した時に観察される力学的関係とボールが粉体材料を挟んで衝突した時に観測される反発係数に着目し、これらのデータに適合するモデルを用いることとした。Fig. 2 に石英、石灰石ならば

に石炭試料のベッドを圧縮粉砕した時の力と移動距離との関係を示す実験データを、これと反発係数とを組み合わせることによって得られる非線形でヒステリシスを持つ加重・除加重関係のモデルをFig. 3 に示す。

ボール、ロッド、ペブルなどを粉砕媒体とし、本体容器の回転運動を利用して運動エネルギーを粉砕媒体に伝える方式の粉砕機としては転動ミル (tumbling mills)、振動ミル、遠心ミル、プラネタリミルがある。これらのミルは自転、公転速度の相違はあるが、ある意味で親戚同士であるともいえる。著者等の研究ではこれらのミルをただ一つのモデルで表し、シミュレーションを行うこととした。そして結果的にはこれらのそれぞれのミルの際立った特徴を観察することができた^{13), 14)}。

第一の観察項目は言うまでもなくボールの運動そのものである。例えばボールミルについては、臨界速度に対する回転速度の比 (N/N_c) の変化ならびにライナの形状によってボールの運動が左右される状況が実態そのままに再現された。

次にミル内のエネルギー消費形態に着目し、ボール相互およびボール・壁面間の衝突、ボール相互およびボール・壁面間の摩擦によって消費されるエネルギーの割合が上記の操作変数によって変化する模様を観察することができた。さらにまた、これらの4種のエネルギー消費のミル内での分布を見ることもできた。このような観測は従来の研究手段では極めて困難であり、DEMによって初めて可能となったデータといえよう¹⁴⁾。

現在使われている多くの振動ミルでは自転速度＝公転速度となっており、振幅が小さい代わりに公転速度が大きく、全体としては遠心係数 (振動の加速度 ω^2 の重力加速度に対する比) が 6-10 程度に設定されている。このような条件でシミュレーションを行ったところ、実際の振動ミルと同様のボールの運動が観察された。

遠心ミルは南アフリカ連邦、ドイツ、オーストラリアなどで開発途上の新型粉砕機である。機内でのボールの

Fig. 1. An example of the rheological models for DEM.

Fig. 2. An experimental data showing the force to displacement relationship in the comminution of a particle bed.

運動は一般にはまだ十分に理解されていないように思われる。このミルは一見、振動ミルの振幅を大きく、公転速度を小さくしただけであり、よく似ているように考えられがちであるが、運転音や高速度カメラなどによる内部の観察結果より、振動ミルとは全く異なったボールの運動を予測していた。そのことを DEM による観察結果からも裏付けることができた。また、同じ、遠心係数でも振動ミルに比較してはるかに大きなエネルギー消費率

を示すことが明らかとなった (Fig. 4)。

プラネタリミルは旧くから実験室用の小型粉砕機として用いられている装置である。上に述べた3種のミルと異なり、少なくとも理論的には自転速度と公転速度に制限がなく、その意味でもっとも自由な設計が可能な点に独特な魅力がある。一方、内部のボールの運動は最近の Zhao・神保の研究にも示されているように、最も複雑である¹⁵⁾。この型のミルに関しても同様にシミュレーション

Fig. 3. An non-linear model of comminution with hysteresis.

ン実験を行い、従来の知見を再現することができた。

これらのシミュレーションを行うに当たり、著者等はプログラムの開発、計算、動画再生のすべてをパーソナルコンピュータの上で行うことができた。計算量を少なくするために、ある接触点における干渉効果が全体に波及する効果は次の時間刻みにおいて反映させることとした。また、実時間に対する時間刻みは $50 \mu s$ を標準とした。なお、ボールの運動を観察するにはこの程度の時間刻みでよいが、エネルギー計算にはさらに刻みを小さくする必要がある模様であり、現在計算のアルゴリズムの改良を含めて検討中である。i80486 DX2/66 MHz の CPU をもつパーソナルコンピュータで、ボールの数 (50-300) にもよるが、実時間 1 sec に対応するデータを計算するのに要した時間は 1-2 時間程度であった。モデルは 2 次元である。

4. む す び

離散要素法の研究が始まった1970年から1980年代の半ばまではスーパーコンピュータの利用が不可欠であった。しかし現在は比較的小規模なモデルに関する限り、ワークステーションやパーソナルコンピュータでも実用に耐える。コンピュータが世の中で使われ始めた1960年代の当初から現在に至る約30年間の間に、コンピュータのメモリ容量と計算速度は1万倍以上に増加した。同様にコンピュータの大きさと値段も劇的に小さくなって

Fig. 4. Trend of energy dissipation in vibration and centrifugal mills maintaining the centrifugal coefficient at 10.

る。この傾向は現在もお進みつつあり、将来は離散要素法においても一層大規模な計算が可能となると予想される。その結果 2 次元モデルから 3 次元モデルに主流が移行するばかりでなく、さらに細く、数の多い粒子を対象とすることができると期待される。それに伴って DEM の対象も各種の比重選別、磁選、浮選など、あらゆる選別操作過程に広がり、これらのプロセスの設計と操業に寄与することとなろう。

ここに紹介した DEM による各種ミルの研究は東京大学工学部地球システム工学科岡屋克則君とともに行ったものであり、またシミュレーションプログラムの作成には大学院生、刈谷直孝君の大きな援助を得た。両君の協力に感謝したい。

参 考 文 献

- 1) P. A. Cundall and O. D. L. Strack: A discrete numerical model for granular assemblies, 47-65, Geotechnique 29, No. 1 (1979)
- 2) 辻 裕: ここまできた粉粒体流動現象シミュレーション, 粉砕, 70-78, No. 37 (1993)
- 3) 島 進: 粉体成形への計算機シミュレーションの応用, 粉砕, 88-94, No. 37 (1993)
- 4) 吉田英人: 集塵における計算機シミュレーションの応用, 粉砕, 79-87, No. 37 (1993)
- 5) 坂口 秀: 粉粒体のホッパーフローとそれに伴うアーチングの DEM シミュレーション, 粉体と工業, 36-42, Vol. 25, No. 12 (1993)
- 6) 田村茂之: 粉体成形・燃結プロセス設計/評価のた

- めの粉粒体モデリング, 粉体と工業, 43-47, Vol. 25, No. 12 (1993)
- 7) 横山豊和ほか: 粉碎におけるシミュレーションの応用, 粉碎, 95-104, No. 37 (1993)
- 8) B. K. Mishra and R. K. Rajamani: Numerical simulation of charge motion in ball mills—Lifter bar effect, Minerals and Metallurgical Processing, 86-90, May 1993
- 9) B. K. Mishra and R. K. Rajamani: Analysis of power draw in tumbling mills, SME Annual Meeting Preprint Number 93-217, Feb. 1993
- 10) R. K. Rajamani, S. Agrawala and B. K. Mishra: Mill scaleup: Ball collision frequency and collision energy density in laboratory and plant-scale mills, 103-107, Proceedings, XVIII International Mineral Processing Congress, 1993
- 11) B. K. Mishra and R. K. Rajamani: The discrete element method for the simulation of ball mills, 598-604, Appl. Math. Modelling, Vol. 16, Nov. 1992
- 12) T. Yokoyama and G. Jimbo: Simulation of ball behavior in a vibration mill in relation with its grinding rate, Report at the 4th Workshop of International Comminution Research Association, Stockholm-Helsinki, May 1994
- 13) T. Inoue and K. Okaya: Discrete element method to simulate several types of mills, Report at the 4th Workshop of International Comminution Research Association, Stockholm-Helsinki, May 1994
- 14) T. Inoue and K. Okaya: Grinding mechanism of centrifugal mills, Preprint, 8th European Symposium in Comminution, Stockholm, May 1994
- 15) Q. Q. Zhao and G. Jimbo: Mechanism of ultrafine grinding in planetary ball mill, Preprint, 7th European Symposium in Comminution, June 12-14 1990