DEM シミュレーションを用いた回転ドラムにおける 粒子形状が混合に及ぼす影響評価

Evaluation of Particle Shape Effect for Mixing Behaviour in a Rotating Drum by DEM Simulation

山本 通典^{a*, b}, 石原 真吾^b, 加納 純也^c

Michinori Yamamoto, Shingo Ishihara, Junya Kano

Received 9 March 2015; Accepted 16 April 2015

The effect of particle shape on mixing phenomena in a rotating drum was analyzed by experiment and Distinct Element Method (DEM). Spherical and cube-shaped particles were employed and cube-shaped particle was approximated by a set of spherical particles in the DEM. The methods to decide the number of spherical particles that compose a cube-shaped particle, restitution coefficient and frictional coefficient in the DEM was investigated. The particle flow observed from the DEM agreed with experimental result, and the validity of these techniques and parameters used in the DEM was confirmed. In order to analyze the mixing mechanism of spherical and cube-shaped particles, mixing behavior in the rotating drum was observed and evaluated. The mixing degree of spherical and cube-shaped particles was comparatively similar. On the other hand, mixing rate of cube-shaped particles faster than spherical particles. This result indicates that mixing rate was increased by unsteady-state flow observed in cube-shaped particles.

Keywords: DEM, Particle shape, Rotating drum, Powder mixing, Particle's characteristics

1. 緒 言

工業プロセスでは対象とする製品に合わせ様々な種類の粒子が使用されているが、その種類によって粒子形状も多様である。例えば、ガラス繊維のような繊維状もし

くは棒状の原料や、カーボンのように1次粒子が凝集した原料、さらには粉砕によって処理された原料のように複雑な凹凸形状を持つ粒子などが取り扱われている。これら粒子を取り扱うプロセスは大きく湿式と乾式に分類され、さらに混合や分散、乾燥といった工程に分けられる。その中でも乾式の粉体混合は製品性能を左右する重要なプロセスであることからシミュレーションを用いた多くの研究が進められている¹⁻⁴⁾。

Lemieux ら⁵⁾はVブレンダーとピンブレンダーについて粒子充填量や粒子の初期配置、回転速度が混合に及ぼす影響を実験とDEMシミュレーションを用いて調べている。また、Cleary ら⁶⁾はDEMシミュレーションにより回転ドラムやパンミキサー、ブレードミキサーなど様々な混合機について混合特性を比較した結果について報告している。しかしながら、これらの検討は全て粒子を球形として取り扱っており、粒子形状が混合に及ぼす影響については検討されていない。一方、DEMシミュレーションにおける非球形粒子の取り扱い方法について

a 住友ベークライト株式会社 コーポレートエンジニアリングセンター 設備企画設計部
(〒426-0041 静岡県藤枝市高柳2100番地)
Corporate Engineering Center, SUMITOMO BAKELITE CO., LTD.

(2100 Takayanagi, Fujieda, Shizuoka 426-0041, Japan)

b 東北大学大学院 環境科学研究科
(〒980-8577 宮城県仙台市青葉区片平二丁目1-1)
Graduate School of Environmental Studies, Tohoku University
(1-1 Katahira, 2-chome, Aoba-ku, Sendai, Miyagi 980-8577, Japan)

c 東北大学 多元物質科学研究所
(〒980-8577 宮城県仙台市青葉区片平二丁目1-1)
Institute of Multidisciplinary Research for Advanced Materials, Tohoku University
(1-1 Katahira, 2-chome, Aoba-ku, Sendai, Miyagi 980-8577, Japan)

* 責任著者連絡先 myama@sumibe.co.jp

は検討が進められており、Wachs ら⁷⁾ は非球形粒子をポリゴンで取り扱う手法を開発し、回転ドラムにおける様々な粒子形状の運動を再現することを試みている。また、田中ら⁸⁾ は球形粒子を配列させ複雑形状を表現し、計算負荷が低い解析手法について報告している。

以上のように、DEM シミュレーションを用いた乾式の粉体混合については粒子形状が混合に及ぼす影響を調べた報告は少ない⁹⁾。また、DEM シミュレーションにおける非球形粒子の取り扱い方法について研究が進められているものの、摩擦係数や反発係数といった DEM シミュレーションに使用されるパラメータの決定方法が明確に示されておらず、実現象との十分な比較検証に至っていないのが現状である。

そこで本研究では、回転ドラムを用いた乾式混合について実験と DEM シミュレーションを用いた球形粒子と立方体粒子の混合過程の比較から、粒子形状が混合に及ぼす影響を明らかにする。そのために、まずは DEM シミュレーションで非球形粒子運動を再現するため、田中らが報告している剛体計算手法を用い、非球形粒子を構成する球形粒子数の数、反発係数、摩擦係数の決定方法を提案する。実験における粒子運動との比較から、その妥当性を検証した後、粒子形状が混合に及ぼす影響について考察する。

2. 非球形粒子の DEM シミュレーション

2.1 非球形粒子の表現方法

DEM における非球形粒子の表現方法はいくつか提案されているが、現状では Fig. 1 に示す 3 つの手法が広く使用されている。(a) は粒子を等間隔に配列させ形状を表現する方法で、粒子数が少なく計算負荷が低い半面、表面に凹凸ができる。一方、(b) は粒子を配列させる際に粒子間の貫入を許容するため、表面は(a)に比べ滑らかに表現できるが粒子数が増加し計算負荷が高くなる。(c) は形状を正確に表現するためポリゴンが使用さ

Fig. 1 Schematic diagram of non-spherical particle model

- (a) Multi-sphere particles model
- (b) Multi-sphere particles model with allowing penetration
- (c) Polygon model

れているが、相互作用の計算や近傍粒子の探索などが球形粒子を対象とした DEM に比べアルゴリズムが複雑になる。本検討では DEM で使用されているアルゴリズムが活用でき、計算負荷が低い(a)のモデルを採用した。

2.2 非球形粒子運動の計算方法

非球形粒子の運動は田中ら⁸⁾ が提案した剛体計算手法を使用した。剛体計算手法では複数の球形粒子の集合体を 1 つの剛体とみなし、その並進運動と回転運動を計算する。非球形粒子を構成する球形粒子は非球形粒子間の衝突判定と接触力の計算に用いられる。非球形粒子に働く力 $\mathbf{F}_r$ は球形粒子に作用する接触力 $\mathbf{f}_r$ から以下のように求められる。

$$\mathbf{F}_r = \sum_{n_r} \mathbf{f}_r \quad (1)$$

ここで、 n_r は非球形粒子を構成する球形粒子の数を表わしている。非球形粒子の質量 M_r と並進速度 $\mathbf{v}_r$ から非球形粒子の運動量 $\mathbf{P}$ は以下の式で表わされる。

$$\mathbf{P} = M_r \mathbf{v}_r \quad (2)$$

非球形粒子の運動量 $\mathbf{P}$ と非球形粒子に作用する力 $\mathbf{F}_r$ には以下の関係が成り立つ。

$$\frac{d\mathbf{P}}{dt} = \mathbf{F}_r \quad (3)$$

非球形粒子の並進速度 $\mathbf{v}_r$ は Eqs. (2), (3) から求めることができる。

非球形粒子に作用する力 $\mathbf{F}_r$ によって回転運動が生じることで角運動量 $\mathbf{L}$ も変化し、以下の式で表わされる。

$$\frac{d\mathbf{L}}{dt} = \mathbf{f}_r \times \mathbf{r}_g \quad (4)$$

ここで $\mathbf{r}_g$ は非球形粒子とそれを構成している球形粒子の相対位置ベクトルを表わしている。角速度 $\boldsymbol{\omega}$ は角運動量 $\mathbf{L}$ を用いると、

$$\boldsymbol{\omega} = \mathbf{I}_r^{-1} \mathbf{L} \quad (5)$$

と表わされる。ここで、 $\mathbf{I}_r$ は非球形粒子の慣性テンソル、 $\mathbf{I}_r^{-1}$ は慣性テンソルの逆行列を示している。非球形粒子の回転にはクォータニオン $\mathbf{q}$ が用いられ、角速度 $\boldsymbol{\omega}$ からクォータニオンの変化量 $d\mathbf{q}$ が以下の式で表わされる。

$$d\mathbf{q} = \left[\cos \frac{\theta}{2}, \mathbf{a} \sin \frac{\theta}{2} \right] \quad (6)$$

ここで、 $\mathbf{a}$ は回転軸、 θ は回転角であり、それぞれ以下

Fig. 2 Particle shape and color used in the experiment

の式から計算される。

$$a = \frac{\omega}{|\omega|} \quad (7)$$

$$\theta = |\omega| dt \quad (8)$$

以上より、Eqs (6), (7), (8) から非球形粒子の回転量が求められる。

2. 3 構成粒子間の相互作用

非球形粒子同士が接触すると、非球形粒子を構成する球形粒子に働く弾性反発力や摩擦力などの接触力が計算される¹⁰⁾。法線方向の接触力はバネとダッシュポットだけから計算されるが、接線方向にかかる接触力の計算は粒子間に作用する摩擦力を表わすために摩擦スライダーが挿入されている。

3. パラメータの決定方法

3. 1 反発係数

本検討では Fig. 2 に示すようなポリプロピレン製の立方体粒子と球形粒子を使用した。立方体粒子は1辺の長さが3.0 mm、球形粒子は直径3.0 mmで、混合過程を解析するため球形粒子は緑色と白色、立方体粒子は黒色と白色に着色している。反発係数の計測方法については、上條ら¹¹⁾が落石運動をシミュレーションで解析するため、非球形の岩塊の反発係数を落下試験から求め、その平均値を使用している。そこで本検討でも立方体粒子は50回、球形粒子は10回の落下試験を実施し、求めた反発係数の平均値をDEMで用いることとした。反発係数 e は落下高さ h_1 とリバウンド高さ h_2 から以下の式より算出した。

$$e = \frac{\sqrt{h_2}}{\sqrt{h_1}} \quad (9)$$

実験の結果、立方体粒子の反発係数の平均値は0.25、球形粒子では0.70となり形状によって値が大きく異なった。また、立方体粒子では標準偏差が0.077、球形粒子では0.011となり、立方体粒子の落下試験のバラツキは球形粒子に比べ大きい。これは立方体粒子の落下試験で

Fig. 3 Schematic diagram of cube-shaped particle in the DEM simulation
The number of particles is (a) 8 and (b) 125.

は、粒子の姿勢がリバウンド高さに影響を及ぼすためだと考えられる。

3. 2 構成粒子数

Fig. 3 に構成粒子数を変えた時の立方体粒子の外観を示す。構成粒子数が多いほど表面形状は滑らかに表現されているが、粒子径の小さい球形粒子を多く配列しているため、シミュレーションの計算負荷は高くなる。一方、構成粒子数が少ないと表面の凹凸が顕著になるため、実際に比べ体積が減少する。

そこで、DEMシミュレーションにおいて Fig. 4 に示すような直径18 mm、高さ102.5 mmの円筒容器内に立方体粒子を容器上面からランダムに5個ずつ投入し、395個になったところで円筒容器を上下に1回振って立方体粒子の配置構造を生成した。この方法によって、容器底面からの高さが一定になる最低限の構成粒子数を探索した。ここで、球形粒子で立方体粒子を可視化すると個々の立方体粒子の判別が難しくなるため、可視化の際にポリゴンに変換し立方体粒子を表現している。容器底

Fig. 4 The definition of height of particle bed in the cylindrical container

Table 1 Parameters used in the simulation for deciding the number of constitution particles

Parameter		Value
Young's modulus	[GPa]	0.12
Poisson's ratio	[—]	0.3
Mass per cube-shaped particle	[g]	0.025
Restitution coefficient	[—]	0.25
Frictional coefficient (Particle-Particle)/(Particle-Wall)	[—]	0.0/0.0

Fig. 5 Height of particle bed in the cylindrical container as a function of the number of spherical particle composing a cube-shaped particle

面からの高さは、Fig. 4 における最上面の粒子を選択し、その最大値と最小値を計測した。なお、本検討では試行回数を1回としている。**Table 1** には、シミュレーションに使用したパラメータを示す。

Fig. 5 に構成粒子数と容器底面からの高さの関係を示す。ここで図のエラーバーは選択された最上面粒子の高さの最大値と最小値を示している。構成粒子数の増加に伴い高さは増加傾向にあるが、構成粒子数が125個以上になると高さはおよそ一定になっていることがわかる。しかし、構成粒子数が64個での最大値は構成粒子数125個以上の最大値と最小値の範囲内に収まっている。以上のことから、本検討では計算負荷も考慮して構成粒子数を64個とし立方体粒子運動の再現を試みた。

3. 3 摩擦係数

摩擦係数は **Fig. 6** に示す回転ドラム内の粒子の広がり $X_{\max}$ と持ち上がり高さ $Y_{\max}$ について、DEM の結果が実験と一致するような値を探索した。**Fig. 7** には実験に使用した回転ドラムの外観および容器の寸法を示す。容器の材質はステンレス製であるが、蓋は内部の様子を観察するためにアクリル製とした。立方体粒子、球形粒子ともに投入量は 10.08 g、回転速度 30 rpm とし 3.0 s 間の $X_{\max}$ と $Y_{\max}$ を計測した。計測には画像処理ソフト

Fig. 6 The definition of $X_{\max}$ and $Y_{\max}$

Fig. 7 Rotating drum used in the experiment
(a) Snap-shot of the rotating drum
(b) Dimensions of container

ImageJ を使用している。DEM に使用したパラメータを **Table 2** に示す。ここで、ヤング率は低い値ほど時間刻みを大きくできることから、予備検討であらかじめ粒子運動に影響しないヤング率の最低値を求め、その値を使用している。

Table 3 に球形粒子と立方体粒子における実験と DEM の $X_{\max}$ と $Y_{\max}$ の時間平均の値を示す。球形粒子は DEM における摩擦係数0.3の結果が実験に最も近い値を

Table 2 Parameters used in the simulation for deciding frictional coefficient

Parameter		Value
Young's modulus	[GPa]	0.12
Poisson's ratio	[—]	0.3
Mass per cube-shaped particle	[g]	0.025
Mass per spherical particle	[g]	0.013
Restitution coefficient of cube-shaped particle	[—]	0.25
Restitution coefficient of spherical particle	[—]	0.70

Table 3 Comparison between the experiment and the DEM simulation on $X_{\max}$ and $Y_{\max}$

Particle shape		Frictional coefficient [—]	Time average of $X_{\max}$ [cm]	Time average of $Y_{\max}$ [cm]
Sphere	Experiment	—	5.73	4.78
	DEM	0.2	5.81	4.61
		0.3	5.76	4.77
		0.4	5.75	4.85
Cube	Experiment	—	5.53	5.19
	DEM	0.4	5.15	5.34
		0.5	5.20	5.48
		0.6	5.28	5.60

示していることがわかる。立方体粒子では、DEM における摩擦係数0.5の結果が実験における $X_{\max}$ と $Y_{\max}$ に対して近い値を示していることがわかる。

以上の結果、球形粒子の摩擦係数は0.3、立方体粒子の摩擦係数は0.5とした。

3. 4 妥当性の評価

Fig. 8 と **Fig. 9** に球形粒子および立方体粒子における実験と DEM シミュレーションの 3.0 s 間の $X_{\max}$ と $Y_{\max}$

の比較を示す。球形粒子では実験と DEM における $X_{\max}$, $Y_{\max}$ が時間によらずほぼ一定となっていることがわかる。また、1.5 s と 3.0 s における静止画の比較においても球形粒子の運動が良好に一致していることがわかる。また、立方体粒子では $X_{\max}$ と $Y_{\max}$ が一定にならず時間によって変化しており、1.5 s と 3.0 s の静止画においてもその様子が観察され、実験と DEM の結果が良好に一致していることがわかる。以上の結果、DEM シミュレー

Fig. 8 $X_{\max}$ and $Y_{\max}$ of spherical particles as a function of time

Fig. 9 $X_{\max}$ and $Y_{\max}$ of cube-shaped particles as a function of time

シヨンは球形粒子と立方体粒子の運動を良好に再現していることから、反発係数、構成粒子数、摩擦係数の決定方法について、その妥当性が確認された。

ここで球形粒子に比べ立方体粒子運動が非定常性を有する原因を考察すると、立方体粒子は容器壁面で規則的に配列し、ある程度の高さまで持ち上がった後にその状態を保持できず崩落する。この持ち上がり高さは立方体粒子の配列構造によって異なるため、 $Y_{\max}$ は一定にならない。さらにこの配列した立方体粒子の不規則な崩落により $X_{\max}$ も一定とならず、以上の現象が立方体粒子運動の非定常性を引き起こしていると考えられる。

4. 粒子形状が混合に及ぼす影響

4. 1 実験と DEM の条件

Fig. 10 と **Fig. 11** に球形粒子と立方体粒子の初期配置を示す。実験、DEM とともに容器を 2 分割するように 2 色の粒子をそれぞれ 5.04 g 配置した。回転速度は 30 rpm、混合時間は 14 s とした。**Table 4** に DEM に使用したパラメータを示す。

4. 2 混合の評価方法

実験と DEM における混合状態は、**Fig. 12** に示すように回転ドラム内の粒子が存在している領域を均等に 4 分割し、各領域における明度の平均値を求め、以下の式で定義される混合度 M を用いて混合状態を評価した。

(a) Experiment

(b) DEM simulation

Fig. 10 Snap-shots of initial state of spherical particles

(a) Experiment

(b) DEM simulation

Fig. 11 Snap-shots of initial state of cube-shaped particles

Table 4 Parameters used in the simulation for particle mixing

Parameter		Value
Young's modulus	[GPa]	0.12
Poisson's ratio	[—]	0.3
Mass per cube-shaped particle	[g]	0.025
Mass per spherical particle	[g]	0.013
Restitution coefficient Sphere/Cube	[—]	0.70/0.25
Frictional coefficient Sphere/Cube	[—]	0.3/0.5

Fig. 12 Spots used for calculating mixing degree

$$M = 1 - \frac{\sigma}{\sigma_0} \quad (10)$$

$$\sigma = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (C_i - C')^2}{n}} \quad (11)$$

ここで、 σ は標準偏差、 n は領域の分割数、 C_i ($i=1\sim4$) は各領域における明度の平均値、 C' は均一混合時の明度値、 σ_0 は混合開始時の σ を示している。

4. 3 混合状態の比較

Fig. 13 に実験と DEM シミュレーションにおける球形粒子での混合の進行過程を示す。実験における混合の進行過程をみると、5.0 s では初期配列時の構造の影響を受け白色と緑色粒子の塊が存在するが、10 s にはその塊は小さくなり、14 s ではおおよそランダムな構造が形成されていることがわかる。DEM においても同様の傾向が観察されることから、混合の進行過程がおおよそ一致しているといえる。**Fig. 14** は実験と DEM シミュレーションにおける立方体粒子での混合の進行過程を示している。実験、DEM とともに、5 s での混合状態は初期配置の影響を受け黒色と白色の塊が観察されるが、10 s にはほぼランダムな混合状態に到達していることがわかる。

Fig. 13 Mixing behavior of spherical particles

Fig. 14 Mixing behavior of cube-shaped particles

Fig. 15 Comparison of experimental and DEM simulation results of mixing degree

Fig. 15 に球形粒子と立方体粒子の実験と DEM シミュレーションにおける混合度の時間変化を示す。球形粒子、立方体粒子ともに実験と DEM の混合度の時間変

化は良好に一致していることがわかる。また、混合度の最終到達度をみると、球形粒子と立方体粒子ともに約 0.8 となり 1.0 に到達していない。これは、粒子径や材質

が同一である粒子混合では、最終的な混合状態はランダムな構造となり理想混合状態には到達できないことが Fan ら¹²⁾ によって報告されており、今回の結果はそれと同様の傾向が得られていると考えられる。

Fig. 15 における灰色線の勾配が示す混合速度を比較すると、立方体粒子と球形粒子では明らかに差が生じていることがわかる。混合度0.8までの到達時間は球形粒子が約 11 s に対し、立方体粒子では約 6.5 s となり、立方体粒子の混合速度が球形粒子に比べて速くなっている。Fig. 8 から球形粒子の運動は安定し、定常性を有していることがわかる。一方、立方体粒子の運動は Fig. 9 でも見られるように粒子の持ち上がり高さや広がり方が断続的に変化するなど球形粒子に比べ非定常性を有している。流体における液／液系の混合攪拌において、混合の促進には非定常流れが有効であることから¹³⁾、立方体粒子運動の非定常性が混合速度を高めたと考えられる。

5. 結 論

本研究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、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することで以下の知見を得た。

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とも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。

今後は球形粒子と立方体粒子の混合を解析し、異形粒子間の混合メカニズムについて検討を進める予定である。

References

- 1) Terashita, K., S. Natsuyama, T. Nishimura and H. Kojima : "DEM Analysis of Agitating Granulation Process and Operation", *J. of the Japan Society of Powder and Powder Metallurgy*, **47**(12), 1300-1305 (2000)
- 2) Porion, P., N. Sommer, A.-M. Faugere and P. Evesque : "Dynamics of segregation and mixing of granular materials in a 3D-blender by NMR imaging investigation", *Powder Technol.*, **141**, 55-68 (2004)
- 3) Brenda, R., J. G. Khinast and B. J. Glasser : "Polydisperse granular flows in a bladed mixer : Experiments and simulations of cohesionless spheres", *Chemical Engineering Science*, **66**, 1811-1824 (2011)
- 4) Jiang, Maoqiang., Y. Zhao, G. Liu and J. Zheng : "Enhancing mixing of particles by baffles in a rotating drum mixer", *Particuology*, **9**, 270-278 (2011)
- 5) Lemieux, M., F. Bertrand, J. Chaouki and P. Gosselin : "Comparative study of the mixing of free-flowing particles in a V-blender and a bin-blender", *Chemical Engineering Science*, **62**, 1783-1802 (2007)
- 6) Cleary, P. W. and M. D. Sinnott : "Assessing mixing characteristics of particle-mixing and granulation devices", *Particuology*, **6**, 419-444 (2008)
- 7) Wachs, A., L. Girolami., G. Vinay and G. Ferrer : "Grains3D, a flexible DEM approach for particles of arbitrary convex shape - Part I : Numerical model and validations", *Powder Technol.*, **224**, 374-389 (2012)
- 8) Tanaka, M., M. Sakai and S. Koshizuka : "Particle-based Rigid Body Simulation and Coupling with Fluid Simulation", *Transactions of JSCEs*, Paper No. 20070007
- 9) Höhner, D., S. Wirtz and V. Scherer : "A study on the influence of particle shape and shape approximation on particle mechanics in a rotating drum using the discrete element method", *Powder Technol.*, **253**, 256-265 (2014)
- 10) Soc. Powder Technol., Japan : "Funtai simulation nyumon", pp. 29-33, Sangyo Tosho (1998)
- 11) Kamijo, A., S. Onda and H. Masuya : "Fundamental experiment on restitution coefficient and frictional coefficient of rock fall", *J. of JSCE*, **47A**, 1605-1612 (2001)
- 12) Fan, L. T., S. J. Chen and C. A. Watson : "ANNUAL REVIEW Solids Mixing", *Industrial & Engineering Chemistry*, **62** (7), 53-69 (1970)
- 13) Yoshihito, K., Y. Tada, M. Ban, Y. Nagatsu and K. Yanagimoto : "Application of Asymmetric Impellers to Mixing at Unsteady Speed within a Single Revolution", *Kagaku Kougaku Ronbunshu*, **33**, 16-19 (2007)