回転円筒容器内の粒状体流れの動力学

山 根 賢 治*

Kenji YAMANE

1. 研究の目的

内服固形製剤（カプセル剤、錠剤および顆粒剤など）の製造プロセスを設計するにあたり、克服すべき一つの大きなテーマはスケールアップ技術の確立である。すなわち、実験室レベルで開発された製剤技術を工場規模において大量生産可能なものになさなければならない。ここで重要なことは、粉粒体の基本的な動力学をしっかりと把握することである。小規模スケールで決定された条件をもとにして実製造スケールの予測を行っても、その予測がはずれてしまうことがある。この理由として、粉粒体が気体や液体の流れと違って一般的な構成方程式をもたず、連続体としての取り扱いが困難なために粉粒体の挙動が十分把握しきれていないことが考えられる。

ところが、連続体モデルと相対して粉粒体の全粒子について一粒一粒の運動を追いかける離散要素法（DEM）が、計算機の発達とともに、このような粉粒体の挙動の予測を可能にした。本研究においてこのDEMを利用して、粉粒体の流れとして最も基本的な系である回転円筒容器内の流れに的を絞って、研究を行った。また、工業的にも回転円筒容器はさまざまな操作に広く応用されており、実用的見地からも興味をもたれるところである。DEMを用いると今までなかなか得ることができなかった、粒子流に関する情報が容易に得られるため、DEMによる解析は粉体挙動に及ぼす種々の因子の影響を検討する場合にとくに有効である。

1998年1月21日受付

* 大鵬薬品工業株式会社品質管理部

〒771-0194 徳島市川内町平石夷野224-2 TEL. 0886-65-6054

〈著者紹介〉

平成3年3月徳島大学大学院工学研究科前期博士課程応用化学専攻修了、平成3年4月大鵬薬品工業株式会社品質管理部生産技術1課入社、現在に至る

平成6年4月大阪大学工学部に内地留学、平成8年4月から同年10月まで米国 Sandia National Laboratories に Visiting Scientist として滞在、工学博士

専門：粉体工学、粒状体力学、製剤学

2. 研究遂行上感じたこと

このDEMモデルを利用することによっていろいろな計算結果が得られる。その結果から非常にリアルな粒子の流れがみてとれる。ある段階の計算結果に満足すると、さらに一つ上の段階（より実現像に近いもの）が要求される。例えば、従来の計算モデルはほとんど完全な球形モデルであるが、非球形の影響はどれくらいのものか、あるいは静電気や水分の影響を考慮できないものか、このような要求がどんどんエスカレートしてくる。その中で、本研究においては非球形の影響について検討を行った。非球形モデルの初歩的な取り組みとして、完全な2球を結合させその中心間距離を変化させることにより粒子の特性を表現した。中心間距離の変化は、短軸と長軸の比（アスペクト比）として計算モデルに新たな物理量を示すパラメータとして追加される。このようにDEMにおいてはパラメータを追加する場合でも、パラメータの物理的な意味が明確である。このこともDEMモデルの研究に没頭した理由の一つである。

こうなると、次はこの計算結果の正確さが問われてくる。しかし、数値計算と厳密に比較できる精度のよい実験がなかなか行えない。粒子層内部において精密な粒子精度が測定できないものか。このような願望を抱いていた、ちょうどその時、New Mexico Resonance の Dr. E. Fukushima らにより開発された核磁気共鳴によるMRIを応用した技術による固体の流れを測定する方法を知った。MRIは、従来から静止状態の固体イメージを得る技術としては確率されていた。人体の脳の断層図などが一般によく知られている例である。しかしそれだけでなく Dr. E. Fukushima らにより動的な現象に対しても固体のイメージを追いかけることが可能となった。早速 New Mexico Resonance（当時 The Lovelace Institutes）のグループとの共同で回転円筒容器内の粒状体の流れる速度や速度変動までも求める研究を開始した。この実験

Fig. 1 Velocity vector profile from simulation with (a) $As=1.0$, (b) $As=0.83$, and (c) MRI experiment at rotation speed of 30 rpm

と数値計算を組み合わせることにより、従来できなかった計算結果の厳密な評価をできたことに喜びを感じた。

3. 研究の主な成果

3.1 動的安息角

回転円筒容器内の粒子流れについて、最も簡単に定量的な考察ができる測定値は動的安息角であろう。これは、円筒容器の回転によって粒子層の自由表面が水平となす角のことである。動的安息角は容器の回転速度が大きくなるに従い大きくなる。DEM による計算の結果からもこの傾向がはっきりとみられた。しかし、すべての容器回転速度において計算結果が実際の実験結果よりも低い値であった。いくら摩擦係数を変化させても計算モデルとして球形粒子を使用している以上限界点があり、ある値より大きな安息角を表すことができない。そこでこの不一致の原因として非球形の影響を考慮した。アスペクト比を変えることにより完全な球形から歪ませていく（完全な球の場合はアスペクト比 $As=1.0$ となる）、するとより球形から歪むに従って安息角が大きくなり、実験結果の動的安息角を表現できることがわかった。

3.2 粒状体流れ

DEM による計算と MRI によるイメージデータから得られた結果から、粒子群が流れる領域をはっきり示すことができた。**Fig. 1** に粒子群の速度分布を実験と計算から求め比較した速度ベクトル図を示す。さらに円筒の中心を通り粒子層の自由表面に垂直なライン上での粒子の速度分布に注目すると粒子の挙動の変化がよくわかる。粒子が流体のように振る舞う領域と剛体のごとく動く領域が明確に区別される。粒子が剛体のごとくふるまう領域では粒子速度は容器壁からの距離に対して一次的に変化するが、粒子が流体のように振る舞う部分では速度分布は二次的な曲線を描く。球

Fig. 2 (a) initial condition, (b) mixture condition, (c) radial segregation

形モデル ($As=1.0$) も非球形モデル ($As=0.83$) も、MRI 実験から得られた結果に良好な一致がみられた。粒子流の最高速度や粒子が流れる層の厚みなどを詳細に比較した結果、球形モデルも実験値によく一致していたが、非球形モデルのほうがさらに良好な一致が得られた。

3.3 偏析現象

粒子が粒径差をもつ場合には、大粒子と小粒子がはっきり分離する不可思議な現象が起こる。これは、粉粒体の混合においては非常にやっかいな問題である。この偏析の様子も計算によって明確に表現することができた。容器を回転させて数秒で粒径の小さい粒子が大きな粒子の中に巻き込まれるようになる。そして外側に大粒子、内側に小粒子と明確に粒子が分離する。**Fig. 2** に回転速度 18rpm における 4mm 粒子と 2mm 粒子の偏析の様子を示す。

4. 今後の展開

粒状体の流れを研究するにあたり、DEM が有効な手段であることがわかった。特に回転円筒容器内の粒状体の流れについては、細部にわたり検討を行いそれをMRIによって検証した。その結果、定量的においてもDEMの有効性が確認された。粒状体の動力学についてはまだまだ研究が始まったばかりである。最近、国内外を問わず多くの物理学者が、粒状体の流れに興味をもちだしているのを感じる。今後ますますそ

の機構が明らかにされるだろう。大阪大学辻研究室においてその一端となる研究ができたことは非常に幸運であった。この研究がこれからの粉体工学の発展に寄与することができれば幸いである。なお、ここで紹介した原論文のタイトルは、“Dynamics of granular flows in a rotating cylinder”である。

最後に終始指導を賜りました大阪大学 辻 裕教授およびこのような研究の環境を与えてくださった大鵬薬品工業(株)生産センター品質管理部のみなさまに感謝いたします。(学位取得は1997年9月、大阪大学)