東京大学工学部システム創成学科

システムデザイン＆マネジメントコース

卒業論文

二軸回転粉体混合器の数値シミュレーション

Numerical simulation of solid mixing in a dual axis blender

2018年1月31日提出

指導教員　酒井幹夫　准教授

学籍番号　03-160927

川 上　隼 平

# 目次

[1 序論 1](#_Toc504147794)

[1.1 研究の背景 1](#_Toc504147795)

[1.2 研究の目的 2](#_Toc504147796)

[2 解析モデル 3](#_Toc504147797)

[2.1 離散要素法(Discrete Elements Method : DEM)[4] 3](#_Toc504147798)

[2.1.1 支配方程式 3](#_Toc504147799)

[2.1.2 接触力の計算手法 3](#_Toc504147800)

[2.1.3 安定解析条件 5](#_Toc504147801)

[2.1.4 粒子探索手法 5](#_Toc504147802)

[2.2 符号付距離関数(Signed Distance Function : SDF)[5] 5](#_Toc504147803)

[3 混合の評価手法 8](#_Toc504147804)

[3.1 混合度の評価指標 8](#_Toc504147805)

[3.1.1 Average height method[21] 8](#_Toc504147806)

[3.1.2 Nearest neighbour method[22] 8](#_Toc504147807)

[3.1.3 Neighbour distance method[21] 9](#_Toc504147808)

[3.1.4 Lacey method (Lacey’s Mixing Index)[6] 9](#_Toc504147809)

[3.1.5 Mixing entropy method[23] 11](#_Toc504147810)

[3.1.6 Coordination number method[24] 12](#_Toc504147811)

[3.1.7 Particle scale index method[24] 12](#_Toc504147812)

[3.1.8 Siira method[25] 13](#_Toc504147813)

[3.1.9 本研究への適用 14](#_Toc504147814)

[3.2 混合作用の評価手法 14](#_Toc504147815)

[3.2.1 Granular Temperature[26] 14](#_Toc504147816)

[3.2.2 本研究への適用 15](#_Toc504147817)

[4 解析条件 17](#_Toc504147818)

[4.1 DEM粒子の初期配置 17](#_Toc504147819)

[4.2 Verification Cases 17](#_Toc504147820)

[4.2.1 Case 1: 容器長さ依存性 17](#_Toc504147821)

[4.2.2 Case 2: 粒子密度依存性 18](#_Toc504147822)

[4.2.3 Case 3: 粒子密度差依存性 18](#_Toc504147823)

[4.2.4 Case 4: 密度差がある状態での長さ依存性 18](#_Toc504147824)

[4.2.5 Case 5: 密度比への依存性 19](#_Toc504147825)

[5 結果考察 20](#_Toc504147826)

[5.1 Case 1 20](#_Toc504147827)

[5.2 Case 2 21](#_Toc504147828)

[5.3 Case 3 21](#_Toc504147829)

[5.4 Case 4 22](#_Toc504147830)

[5.5 Case 5 23](#_Toc504147831)

[6 結論 24](#_Toc504147832)

[7 参考文献 71](#_Toc504147833)

[8 謝辞 74](#_Toc504147834)

# 図目次

[Figure 1: Voigt Model 37](#_Toc504147616)

[Figure 2: Bounding Box (2D) 38](#_Toc504147617)

[Figure 3: Bounding Box (3D) – Blue Sphere is out of the Box 39](#_Toc504147618)

[Figure 4: Volume Fraction of Particle 40](#_Toc504147619)

[Figure 5: Generating Initial Condition 41](#_Toc504147620)

[Figure 6: An Example of Cases 42](#_Toc504147621)

[Figure 7: Length and Diameter 43](#_Toc504147622)

[Figure 8: Range of Pitch and Axis of Roll and Pitch 44](#_Toc504147623)

[Figure 9: Location of the each Particles 45](#_Toc504147624)

[Figure 10: Mixing in Case 1 46](#_Toc504147625)

[Figure 11: Lacey’s Mixing Index for Case 1 47](#_Toc504147626)

[Figure 12: Granular Temperature for Case 1 48](#_Toc504147627)

[Figure 13: Granular Temperature for Case 1 at 3.75 s and 4.25 s 49](#_Toc504147628)

[Figure 14: Cycle of Granular Temperature for Case 1 50](#_Toc504147629)

[Figure 15: Histogram of Granular Temperature for Case 1-2 and Case 1-3 (4.0 s to 5.0 s) 51](#_Toc504147630)

[Figure 16: Histogram of Granular Temperature for Case 1-2 and Case 1-3 (5.0 s to 6.0 s) 52](#_Toc504147631)

[Figure 17: Cross Sections at 2.0, 4.0, 6.0, 8.0 and 12.0 s (Case 1) 53](#_Toc504147632)

[Figure 18: Mixing in Case 2 54](#_Toc504147633)

[Figure 19: Lacey’s Mixing Index for Case 2 55](#_Toc504147634)

[Figure 20: Granular Temperature for Case 2 56](#_Toc504147635)

[Figure 21: Granular Temperature for Case 2 at 3.75 s and 4.25 s 57](#_Toc504147636)

[Figure 22: Mixing in Case 3 58](#_Toc504147637)

[Figure 23: Lacey’s Mixing Index for Case 3 59](#_Toc504147638)

[Figure 24: Granular Temperature for Case 3 60](#_Toc504147639)

[Figure 25: Granular Temperature for Case 3 at 3.75 s and 4.25 s 61](#_Toc504147640)

[Figure 26: Cross Sections at 2.0, 4.0, 6.0, 8.0 and 12.0 s (Case 3) 62](#_Toc504147641)

[Figure 27: Mixing in Case 4 63](#_Toc504147642)

[Figure 28: Lacey’s Mixing Index for Case 4 64](#_Toc504147643)

[Figure 29: Granular Temperature for Case 4 65](#_Toc504147644)

[Figure 30: Granular Temperature for Case 4 at 3.75 s and 4.25 s 66](#_Toc504147645)

[Figure 31: Cross Sections at 2.0, 4.0, 6.0, 8.0 and 12.0 s (Case 4) 67](#_Toc504147646)

[Figure 32: Mixing in Case 5 68](#_Toc504147647)

[Figure 33: Lacey’s Mixing Index for Case 5 69](#_Toc504147648)

[Figure 34: Granular Temperature for Case 5 70](#_Toc504147649)

[Figure 35: Granular Temperature for Case 5 at 3.75 s and 4.25 s 71](#_Toc504147650)

# 表目次

[Table 1: Comparison of Mixing index 26](#_Toc504147605)

[Table 2: Calculation Conditions for Case 1 27](#_Toc504147606)

[Table 3: Physical Properties for Case 1 28](#_Toc504147607)

[Table 4: Calculation Conditions for Case 2 29](#_Toc504147608)

[Table 5: Physical Properties for Case 2 30](#_Toc504147609)

[Table 6: Calculation Conditions for Case 3 31](#_Toc504147610)

[Table 7: Physical Properties for Case 3 32](#_Toc504147611)

[Table 8: Calculation Conditions for Case 4 33](#_Toc504147612)

[Table 9: Physical Properties for Case 4 34](#_Toc504147613)

[Table 10: Calculation Conditions for Case 5 35](#_Toc504147614)

[Table 11: Physical Properties for Case 5 36](#_Toc504147615)

# 序論

## 研究の背景

　混合とは、複数の粉体や液体を攪拌し均一にする工程のことである。これは食品・製薬・工業など広い分野で利用される重要なプロセスであり、これまでにさまざまな研究が行われてきた[1][2]。混合分野の発展は産業界における重要課題であり、特により速くより均一に混ぜる方法は多く研究されており[3]、確立が望まれている。

　混合の進行度合いを評価することは最適化のために必須であるが、実験的アプローチからは混合物の挙動の時間変化を追うことはきわめて困難であり、数値シミュレーションにより挙動を明らかにした上ではじめて混合の進展を評価できるようになる。粉体の混合においては離散要素法[4](Discrete Elements Method、以下DEMと記す)を用いる研究が一般的となっている。DEMは粒子を剛体とみなし、重なりを許容することで接触力を計算し粒子の挙動を模擬する手法である。

また、DEMでのシミュレーションにおいて複雑な壁面形状や動作を計算するため、符号付距離関数[5](Signed Distance Function、以下SDFと記す)で壁面を表現する手法も開発されている。壁面をメッシュで表現する従来の手法より容易に複雑形状などが表現できることに加え、移動や回転といった壁面の運動を扱うことも可能であるため、SDFとの組み合わせでDEMの応用範囲がさらに広がった。

　混合度の評価手法としては、DEMにより明らかになった粉体の挙動を元に、Laceyが考案したLacey’s Mixing Index[6]が混合度の評価指標として広く研究に用いられている。この指標は、計算量が少なく手軽であることや、単一粒径[7]だけでなく、異粒径[8]や非球形粒子を含む系[9]にも用いることができる応用性の高さに加え、混合状態から分離が発生する分離過程の評価[10][11]に適用できる汎用性の高さもあり普及している。そもそも分離過程は、混合過程と表裏の関係にあり、分離作用が働く状況では混合が進みにくかったり、混合が困難である場合もある。一般に、種類の異なる粒子の集合に振動や回転を与えると混合物内部で分離作用が働くことが知られている[12]。この現象は、回転するドラムで混合を行ったとき、密度差がなく粒径差がある場合には、より小さい粒子がドラムの中心付近に偏析し、粒子径がそろっていて密度差がある場合にはドラムの中心付近に密度の高い粒子が偏析する形で発生する[13]。また、ドラム型の容器で複数の粒子を回転混合した際に、回転軸方向にも粒子の偏析が発生し、粒子の種類ごとの縞状の分離が発生することも知られている[14]。軸方向分離は、前述の半径方向分離と比較して分離の進展速度が遅いことも明らかになっている。

　混合のメカニズムを解明するための手法としてGranular Temperature[15]が考案された。Granular Temperatureでは、数値解析によって、実験では不可能な各粒子の時刻ごとの速度ベクトルを計算できることを利用し、その分散を計算することでセル内の粒子がどれだけ拡散方向の作用を持っているか示す指標である。このように、混合物の状態の解析はDEMの登場によって大幅な進歩を遂げた。

　先行研究においても、ツインスクリューニーダー[16]やリボンミキサー[17]など、さまざまな体系においてDEMとLacey’s Mixing Indexを用いて粒子の混合状態や混合効率について解析が行われてきた。有名な混合機の例としてはドラムミキサーが挙げられる。あるYang[8]らは、粒子が粒径分布を持っている場合についてDEMで計算し、分離の進行について研究した。また、Ma[9]らは、粒子が球形でなく長球形や扁球形である場合における混合・分離について研究を行った。さらに、Gytis[18]らは、従来のドラムミキサーにさらに上下動を加えた混合機における混合効率について研究を行った。この研究では、容器の動作や粒子のパラメータを変更してシミュレーションを行い、実験との比較が行われた。しかし、容器形状を変更した場合の混合への影響や、粒子が単分散でない場合に関する研究は行われていない。

## 研究の目的

本研究では、ドラムミキサーの一つである二軸回転ポットブレンダーを用いた粒子の混合の挙動について数値シミュレーションを行う。また、挙動を解析することで各時刻での混合度を計算し、混合度の推移や、最大となる時刻を求める。

また、二軸回転ポットブレンダーにて実際に混合を行う際には、粒子条件が固定となっている状況が考えうる。そのため、ある粒子条件に対して容器の形状を最適化していく研究は、特に容器長が可変であるこの混合機においては非常に有用である。したがって、粒子条件・容器条件をさまざまに変更し、粒子条件に対する最適な容器形状を求めることを本研究の目的とする。また、煩雑化を避けるため、容器の動作条件等は固定して場合分けを行う。

# 解析モデル

## 離散要素法(Discrete Elements Method : DEM)[4]

　DEMとは、粒子の集合体などの解析に用いられる、離散的物体の挙動を模擬するLagrange的手法であり、粉体の解析において広く用いられる手法である。

### 支配方程式

　DEMでは、二粒子間に働く力を並進方向と回転方向に分割して運動方程式を立式する。この際、粒子は剛体として扱うが、粒子同士の重なりを許容することで、そのオーバーラップ距離と速度および角速度から粒子間および粒子-壁面間に働く力を表現する。並進方向と回転方向の運動方程式はそれぞれ、

|  |  |
| --- | --- |
|  |  |
|  |  |

と表される。ここで、は質量、は速度、は接触力、は重力、は慣性モーメント、は角速度、はトルクである。

### 接触力の計算手法

　前述した接触力は弾性力、摩擦力および粘性減衰が考えられる。これらをばね、フリクションスライダーおよびダッシュポットによって表現する、Figure 1に示したこのモデルはVoigtモデルと呼ばれるモデルである。

Voigtモデルにおいて、接触力は法線方向成分と接線方向成分に分けられ、それぞれについてばね、ダッシュポットを考えて力を計算する。

固体粒子との接触力を考えると、法線方向成分については、

|  |  |
| --- | --- |
|  |  |

と表される。ただし、はばね定数、は粘性減衰係数である。また、上添字は法線方向成分であることを示し、これ以降上添字およびによって変数の法線および接線方向成分を表現する。とについては後述する。

　粘性減衰はダッシュポットによってモデル化され、固体粒子間の接触・衝突によりエネルギー減衰する現象を模擬したものである。粘性減衰係数は、衝突の反復によるエネルギーの減衰を考えると、反発係数を用いて、

|  |  |
| --- | --- |
|  |  |

と表すことができる。本体系において、衝突は同じ質量の粒子だけでなく、異なる質量の粒子間でも発生するため、式(4)の質量を換算質量に変更することで対応できる。換算質量と、それにより定義されるは、以下のように表現される。

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  | |  |
|  |  | |

式(3)中のおよびは、と間の相対変位および相対速度の法線方向成分であり、接触面の法線ベクトルを

|  |  |
| --- | --- |
|  |  |

とすれば、それぞれ以下のように表される。

|  |  |
| --- | --- |
|  |  |
|  |  |

また、接触力の接線方向成分については、

|  |  |
| --- | --- |
|  |  |

と表される。は摩擦係数であり、およびはそれぞれ固体粒子との変位および相対速度の接線方向成分である。

　は、固体粒子との接触開始時刻を、接触終了時刻をとすると、

|  |  |
| --- | --- |
|  |  |

と表される。実際の計算は離散的に実行されるため、各stepでの相対速度の接線方向成分に時間刻みを掛け合わせたものを積算する形で処理する。これを式で表記すると、

|  |  |
| --- | --- |
|  |  |

のようになる。は接線ベクトルで、以下のように表される。

|  |  |
| --- | --- |
|  |  |

また、は次のように計算される。

|  |  |
| --- | --- |
|  |  |

接触力の計算後、トルクの計算を行う。固体粒子のトルクは固体粒子から接触点までの位置ベクトルと固体粒子の接触力の接線方向成分の外積であり、

|  |  |
| --- | --- |
|  |  |

と表される。

### 安定解析条件

　数値解析を行う際、の値を適切に設定しないと安定的な解析結果が得られない。DEMにおいても、解を安定させる時間刻みを設定する必要がある。

　CundallとStrackは、運動方程式における差分解の収束性と安定性を得るために、

|  |  |
| --- | --- |
|  |  |

という条件で、を決定した。

また、実際の数値計算において、ばね-質点系の自由振動の振動周期

|  |  |
| --- | --- |
|  |  |

に基づいてを決定することはしばしば取られる手法である。ここで、は安定解析を行うのに適切な数値で、5から20程度の値を目安に設定される。本研究では、と設定して適切な時間刻みを求める。

### 粒子探索手法

　DEMで接触力を計算する前提条件として、どの粒子の組が接触状態にあるかを判定するステップが必要となる。全パターンを判定すると、粒子数に対して通りの計算が必要となってしまうが、これらの中には、接触しないことが計算無しで明らかである組が含まれている。そのため、全パターン分の計算は粒子数が多いほど無駄な計算の割合が増え、非効率的な手法となってしまう。そこで、粒子の大まかな位置から接触が起こり得る組だけ取り出して計算を行う、空間分割という手法が広く使われている。粒子径(複数あれば最大のもの)を一辺とする正方形ないし立方体で計算領域を分割すれば、ある粒子と接触する可能性のある粒子は、三次元においてセルをと表しとしたとき、

|  |  |
| --- | --- |
|  |  |

と表される。すなわち、二次元ではFigure 2のように9個のセル、三次元ではFigure 3のように27個のセルに所属する全粒子のみを対象に距離計算を行えば十分となる。

## 符号付距離関数(Signed Distance Function : SDF)[5]

　本研究において、任意形状かつ回転や揺動などの複雑な動きを表現することができる符号付距離関数(SDF)を境界条件として使用した。この関数は、位置に対して次の式

|  |  |
| --- | --- |
|  |  |

で表される、スカラー値を返す関数である。ここで、境界内部の領域をとすると、は、

|  |  |
| --- | --- |
|  |  |

と定義される関数であり、は、境界をとすれば、

|  |  |
| --- | --- |
|  |  |

で表される、最も近い境界への距離を返す関数である。

　ここで、粒子が壁面からその半径分以上離れていれば接触することはないため、は粒子の最大半径より十分大きくなる点では計算する必要がない。これにより、粒子の衝突判定にかかる計算コストは非常に低く抑えられる。また、本研究では容器の変形を考慮しないため、回転などの動きに応じてSDFを適切に処理することで再利用でき、効率よく計算を実行できる。

　DEMにおいてこのSDFを利用する際、壁面の法線ベクトルを計算する必要がある。壁面付近の領域において、法線方向のの変化は線形とみなせるため、壁面におけるの傾きを考えると、

|  |  |
| --- | --- |
|  |  |

すると、壁面の法線ベクトルは、上のを用いて、

|  |  |
| --- | --- |
|  |  |

と表現される。しかし、実際の計算においてはは連続ではなく、壁面付近も含め離散的な点に対して与えられる値となる。すると、式(22)は成立しない場合が起こりうるため、実行環境においては

|  |  |
| --- | --- |
|  |  |

と定義される。これを用いると、DEMにおける粒子・壁面間の接触力の法線方向成分はを書き換えることで表現され、

|  |  |
| --- | --- |
|  |  |
|  |  |

となる。

　ここで、接触力のうち弾性力についてエネルギー的に算出すると、弾性力のポテンシャルエネルギーは、

|  |  |
| --- | --- |
|  |  |

のように表される。力はポテンシャルエネルギーの勾配となるため、粒子が壁面から受ける弾性力は

|  |  |
| --- | --- |
|  |  |

となる。前述のように、式(22)は成立しない場合があるため、式(26)の弾性力項と式(28)は矛盾している。非散逸系を考えれば、式(28)が正当であるため、式(26)を更新する必要がある。以上より、DEMにSDFを適用する際には、

|  |  |
| --- | --- |
|  |  |

のようにして接触力を定義することで、離散化されてもエネルギー的に矛盾しない。

# 混合の評価手法

## 混合度の評価指標

　混合物がよく混合されているかどうかを定量的に比較するには、混合物の状態を数値化し、混合度として表現する必要がある。この指標として、これまでにさまざまな手法が考案されてきている[19]。以下、色分けをして二種類の粒子の混合を考える手法の場合、白色および黒色を用い、どちらかの色について考えれば十分な場合、白色を基準に考えることにする。また、二色の粒子数は等しいものとする。

### Average height method[20]

　この手法は、名前のとおりある方向について全粒子と、白色粒子それぞれの座標の平均を比較するものである。すなわち、次式で求められる

|  |  |
| --- | --- |
|  |  |

は、0.5または1.5のとき完全に分離した状態、1.0のときよく混合された状態を表す。これを指標として変形すると次のように表される。

|  |  |
| --- | --- |
|  |  |

　この指標は、計算が単純でわかりやすい反面、z軸以外の方向に分離している状態などを判別できない大きな欠点がある。

### Nearest neighbour method[21]

　この手法は、各粒子について最も近い順に個の粒子を選び、その中での色の割合を計算することで混合度の指標とする。同じ色が多ければ混合が進んでいないと判断できる。ちょうど半々となる状態がよく混合された状態と定義すれば、

|  |  |
| --- | --- |
|  |  |

とすると、ちょうど半々のときに1となるような指標となる。ここで、は個の粒子の中で、注目している粒子と異なる色の粒子の個数である。

　この指標は、混合度合いそのものともいえる定義であることが大きなメリットであるが、適切なの選び方が混合方法によって異なる欠点、および各粒子の重要性(重み付け)が変わってしまう欠点がある。すなわち、混合物中心付近の粒子は外側の粒子に比べて個の粒子に選ばれる回数が多く、結果的に中心付近の粒子がより高い重み付けで評価されていることになってしまう問題が発生する。

### Neighbour distance method[20]

　この手法では、初期状態において最短距離にある二粒子同士をペアとして、各ペアの距離を計算して他のランダムに選んだ粒子との距離と比較し、混合度を計算する指標である。初期状態から得られた粒子のペア間の距離を、ランダムに選んだ粒子と粒子との距離をとすると、混合度は

|  |  |
| --- | --- |
|  |  |

と表される。はペアの個数、は粒子直径である。

　この指標は、計算が簡単である長所があるが、ランダムさに起因する再現性の低さ、および初期配置が完全分離状態であることが必須であることによる用途の狭さが短所である。特に後者は、先行研究においてもよく見られる、よく混合された状態からの分離を観察する目的に使えないことが致命的である。

### Lacey method (Lacey’s Mixing Index)[6]

　Lacey’s Mixing Indexは、2種類の粒子の混合度合いを評価するために広く使われている指標で、計算領域をセルに分割して算出する。粒子が十分存在するセルの数を、セルでの白色粒子の存在比および計算領域全体での白色粒子の存在比と定義して、各セルにおける白色粒子の存在比の分散は次の式で表される。

|  |  |
| --- | --- |
|  |  |

が最大となるのは、セルごとの存在比のばらつきが最大のときで、2種類の粒子が分離しているときである。このときのの最大値を考えると、各セルに存在する粒子が全て黒または全て白となる状態を考えればよい。は簡単のために整数と仮定すると、

|  |  |
| --- | --- |
|  |  |

一方、が最小となるのは、セルごと存在比のばらつきが最小のときであるが、これが0となる確率は限りなく0に近い。実際の混合環境下においては各セルの存在比はある程度ばらつくため、十分混合された状態を表現するには他の手法を用いる。十分混合された粒子の集合を仮定すると、その中の1粒子を選んだ際に、それが白色である確率はである。これを全粒子に対して適用すれば、「十分混合された状態」とは、「各粒子の色が全体の存在比に従う確率で決定される状態」と言い換えることができ、これは十分発生しうる状態となる。このときのの最小値を考える。個の粒子が入っているセルにおいて、存在比はのいずれかの値をとる。、とすると、仮定により、

|  |  |
| --- | --- |
|  |  |

と表される。の期待値は全体の存在比と一致するため、

|  |  |
| --- | --- |
|  |  |

となる。すると、の分散の期待値は、

|  |  |
| --- | --- |
|  |  |

と表される。右辺第一項を計算すると、

|  |  |
| --- | --- |
|  |  |

式(38)と式(39)より、

|  |  |
| --- | --- |
|  |  |

となる。よって、が十分大きいとき、の最小値はに近づいていくため、

|  |  |
| --- | --- |
|  |  |

とできる。このとき、混合状況によっては複数の候補が考えられるが、が小さくなるように値を設定するため、をセルに格納できる最大の粒子数として計算を行う。

これらの値を用いてLacey’s Mixing Indexが求められ、以下のように表される。

|  |  |
| --- | --- |
|  |  |

これはすなわち、白色粒子の存在比の分散を正規化した値であるため、0に近いほど混合が進んでいない分離した状態であり、1に近いほどよく混合されている状態であることを示す指標となる。

　この指標は、計算量が少なく、ここまでに登場した短所は克服しているが、セルの分割数によって値が左右される(一般に、分割数を大きくするとLacey’s Mixing Indexは高くなる)ことが欠点である。しかし、混合・分離分野の先行研究において利用数が多く、それらとの比較がしやすいという環境的な利点が存在する。

### Mixing entropy method[22]

　この指標は、統計力学・熱力学においてよく用いられる乱雑さを表す指標であるエントロピーを用いて混合度を考える。まず、Lacey’s Mixing Indexと同じく計算領域をセルに分割し、各セルでのエントロピーを考える。エントロピーの定義については、今回は粒子の配置の確率のみを考えればよいので、情報論のエントロピーとして計算する。すると、セルのエントロピーは、

|  |  |
| --- | --- |
|  |  |

と表される。ここで、およびは、セルの粒子数に占める白色粒子および黒色粒子の存在比である。これを各セルについて、粒子数を元にした重み付き平均を計算すれば、

|  |  |
| --- | --- |
|  |  |

と表される。は全粒子数を表し、はセルに含まれる粒子数を表す。ここでがとりうる値の最大値をとすれば、となるため、求める指標の値はこれを用いて正規化を行い、

|  |  |
| --- | --- |
|  |  |

となる。

　この指標は、セルへの依存性などLacey’s Mixing Indexと同様の長所・短所を持っている。相違点としては、こちらはセルごとの混合度の比較ができる点、Lacey’s Mixing Indexは分布としての評価が可能である点などが挙げられる。すなわち、視点がミクロかマクロか、の点で差別化される。

### Coordination number method[23]

　この指標は、3.1.2項で述べたNearest neighbour methodと同様の方針である。Nearest neighbour methodでは距離が近い順に個の粒子を選びその割合を計算していたが、本手法ではターゲット粒子との表面距離が、ターゲット粒子とその相手粒子のうち小さいほうの直径の10%以下である粒子を全て選ぶ。すなわち、単一粒子径の系では、ターゲット粒子の中心を中心とする、粒子径の1.1倍が半径となる球に中心が含まれる粒子全てを選ぶことになる。この数を、そこに含まれ、ターゲット粒子と色が異なる粒子の数をとして、以下のように表される。

|  |  |
| --- | --- |
|  |  |

　この指標はNearest neighbour methodと同様の長所短所を持つが、への依存性がなくなっている。しかし、単一粒子径でない系においては計算が複雑になってしまうリスクが高い。

### Particle scale index method[23]

　この手法は、3.1.4項で述べたLacey’s Mixing Indexと、直前で述べたCoordination number methodの考え方を組み合わせたものになる。すなわち、セル内の存在比をある粒子付近の存在比へと変更し、セルベースから粒子ベースへと方針を変えた形となる。これを式で表現すると、ある粒子の周辺の存在比を、3.1.6項と同じく定義された個の粒子とターゲット粒子自身、およびその中の白色粒子の数を用いて

|  |  |
| --- | --- |
|  |  |

として、の分散を正規化すればよく、

|  |  |
| --- | --- |
|  |  |

このの最大値、最小値については、粒子の集合がセルではなく粒子基準で選ばれているだけなので、3.1.4項でのLacey’s Mixing Indexと同じ議論が可能である。全粒子数に占める白色粒子の存在比をとして、

|  |  |
| --- | --- |
|  |  |
|  |  | |

と計算される。ここで、はの最大値とすればよい。これらを用いて、

|  |  |
| --- | --- |
|  |  |

と表される。

　この手法の長所はCoordination number methodに準ずるが、分散として評価することでよりマクロな視点となっている。さらに、計算量が増加する反面、Lacey’s Mixing Indexの短所であったセル依存性を克服している。

### Siira method[24]

　この手法では、全ての二粒子の組を考え、初期位置が近いペアほど重みが大きくなり、初期位置から遠くなったペアほど評価が高くなるようにパラメータを設定する。この考え方に基づき、ある二粒子の組の評価値を

|  |  |
| --- | --- |
|  |  |

と表現する。ただし、およびは初期位置および現在位置での二粒子間の距離であり、はなる無次元のパラメータ、はの次元を持つパラメータであり、適切に設定される必要がある。Siiriaらによれば、は程度の値、は二粒子間距離が取りうる最大値を用いて、が満たされていればよい結果が得られるとしている。これらは実験的に求められた値であるが、は条件を満たせばほとんどの値で同じ結果が得られることがわかっている。粒子数をとすると、求める指標は、このを全ての二粒子の組について平均して、

|  |  |
| --- | --- |
|  |  |

と表される。

この指標は、粒子径や粒子ごとの重み付けなどの問題が存在しないため普遍的に使用できる長所があるが、初期状態が分離状態の前提であるため分離する体系では利用できない点、計算量が他の手法と違いと膨大な点、またおよびの正当性が理論的に保証されない点が短所となっている。

### 本研究への適用

　以上にあげたように混合度の評価指標にはさまざまなものがある。それらの長所短所をTable 1にまとめた。これを踏まえると、本研究においては同じ粒子径での実験の比較を目的とするため、Lacey’s Mixing Indexの短所であるセル依存性は、全ケースでのセルサイズを同じにすることで回避され、また本研究の分野での利用数が多いことからも適切であるため、Lacey’s Mixing Indexを利用する。

　この際、粒子数が少ないセルの影響を排除するため、充填率が10%に満たないセルは計算から除外する。

## 混合作用の評価手法

　Laceyによれば、混合は主に3つの作用からなっており、それぞれ拡散的混合、移流的混合、せん断的混合とした[25]。

　拡散的混合とは、新しく露出した混合物表面に混合物を被せていく混合のことである。円筒容器を回転させて内容物の混合を行うドラムミキサーでは、主に拡散的混合が発生して混合が進む。

　移流的混合とは、隣接する粒子の集団が混合物中を場所を変え移動していく混合のことである。容器中でスパイラル型の刃が回転し混合を行うトラフミキサー(リボンミキサー)では、主に移流的混合を用いて材料を混合している。

せん断的混合とは、混合物中を滑るように移動する板による混合のことである。筒の中でアルキメディアン・スクリュー(アルキメデスの螺旋)が回転することで混合・輸送を行うスクリューフィーダーでは、せん断的混合が主に発生している。

本研究で用いる二軸回転ポットブレンダーはドラムミキサーと同様の体系であるため、拡散的混合によって粒子を混合すると考えられる。そこで、拡散の混合効果を評価する手法が必要となる。

### Granular Temperature[26]

　Granular Temperatureとは、混合における各粒子の動きの乱雑さを表す指標であり、混合における拡散効果の影響を示している。この指標も、計算領域をセルに分割して計算され、粒子の存在する各セルに対して値が定義される。各セルに存在する粒子の速度ベクトルについて、各軸方向で分散を算出する。

|  |  |
| --- | --- |
|  |  |

各軸方向成分の分散の平均を計算すると、セルでのGranular Temperature は、

|  |  |
| --- | --- |
|  |  |

と表せる。また、本研究において、各Time stepにおけるGranular Temperatureを定量的に評価するために、値の定義されたセルにおける各セルのGranular Temperatureの平均を、有効セル数をとして、

|  |  |
| --- | --- |
|  |  |

と定義する。これは各Time stepに対して一つ定義されるものである。

### 本研究への適用

　本研究では、容器が上下に揺動するため容器に対するセルの位置が変化してしまい、容器の部位ごとのGranular Temperatureの観測が困難になってしまう。そのため、容器が水平になるように粒子の位置・速度の回転変換を行う。円柱容器の回転軸の方向ベクトルをとすると、容器の傾きは

|  |  |
| --- | --- |
|  |  |

と表されるため、軸を中心としてだけ回転させればよい。よって、変換行列は、

|  |  |
| --- | --- |
|  |  |

のように表され、各粒子の位置ベクトルおよび速度ベクトルは、それぞれ以下のように表される。

|  |  |
| --- | --- |
|  |  |
|  |  |

上で計算されたを使い粒子の所属するセルを計算し、を用いてGranular Temperatureを計算することで、容器の上下動を無視したセルによる分割を行い、混合の拡散効果を追うことが可能となる。

　さらに、本研究においては、セルに含まれる粒子を1個としてカウントするのではなく、各粒子のセルに所属する体積分率によって重みづけを行い、セルに所属する体積が大きいほど指標に与える影響が大きくなるようにした。すなわち、式(54)におけるを、セルに含まれる粒子の総体積となるようにすればよく、

|  |  |
| --- | --- |
|  |  |

と表される。ここで、は番目の粒子が目的のセルに占める体積分率であり、0から1の値をとる。は本来、球とセル(立方体ないし直方体)の共通部分の体積を求めることによって得られるが、これを直接計算すると複雑になる場合が多いため、近似を用いて体積分率を決定する。

粒子をセルと同様の向きでそろった立方体とみなせば、セルに含まれる各辺の長さによって体積分率が求まる。Figure 4に示した模式図をz軸方向についても拡張して考えることで粒子を分割する。各軸方向の辺の長さの割合をFigure 4に倣いと定義すれば、それぞれの値は、次のように表現できる。

|  |  |
| --- | --- |
|  |  |

ここで、は軸方向のセルの辺の長さを表し、はセル内での粒子の相対座標の座標を表す。すなわち、セル分割領域の最小座標としたときに、粒子座標に対して、は

|  |  |
| --- | --- |
|  |  |

のように与えられる。

以上により求められるを三軸について乗算することで、体積分率が求まる。

# 解析条件

## DEM粒子の初期配置

　DEMで計算を始める際の粒子の配置は、隙間なく充填されていて、安定した状態であり、かつある程度乱雑さを持つような配置であることが望ましい。このための手法なども開発されてきたが、本研究では、比較的容易に初期配置を生成するために、規則的に並べた粒子を容器に重力のみの影響下で自由落下させる手法をとる。この方法は、実験環境などにおいて粒子を充填する方法と同様であるため、先の基準を満たしている。また、この手法では、生成された初期配置の上面が水平にならない問題が発生する。本研究では、容器形状を変えて計算を行うため、容器の形状によらず充填状態をそろえる必要がある。そこで、計算に使う粒子数より若干多い粒子を自由落下させ、余剰分の粒子を上側から順に取り除くことで、平らな上面を持つ配置を生成する。この配置を生成した後、計算で使用する容器に重力影響下で設置し放置することで、粒子配置の安定化を行う。(これを共洗いと呼ぶ)。Figure 5は、落下前の配置(入力)、落下後、余剰粒子除去、共洗い・安定化(出力)の、初期配置生成の各過程を示す。

## Verification Cases

　本研究では、以下に示す5つのCaseについて数値解析を行い、混合に及ぼす影響を調べた。各Caseとも、あるパラメータの影響を見るために、目的変数についての対照実験となるように他パラメータを設定する。本研究で使用する容器の外観は、Figure 6に示す。また、容器条件におけるパラメータを、Figure 7およびFigure 8に示す。Lengthは容器長、Diameterは容器直径(内径)、Rollは回転速度(円柱の軸を回転軸とする)、Pitchは揺動周波数(容器端から50 mm外側の点を中心とし、上下15°の範囲を単振動のように往復する)をそれぞれ表す。

### Case 1: 容器長さ依存性

　Case 1では、粒子がすべて同一である場合において、容器長を比較する解析を行う。粒子条件はTable 1に示すとおりである。反発係数は0.9、摩擦係数は0.3、弾性係数は1,000 N/mであり、粒子密度は1,250 kg/m3で統一し、粒子径は1 mm、粒子数は700,000と設定した。

　容器の形状情報はTable 2に示す。容器の長さをCase 1-1では100 mm、Case 1-2では150 mm 、Case 1-3では200 mmとした。容器直径は100 mm、回転速度は60 rpm、揺動速度は0.5 Hzとして3ケース全てで統一した。Time stepは、式(17)に、を適切に代入すればよく、

|  |  |
| --- | --- |
|  |  |

となるため、を8 µsと設定した。Iterationは1,200,000 stepで、計算時間が12 sとなるように設定した。

### Case 2: 粒子密度依存性

　Case 2では、容器の条件を固定し、粒子の密度の影響を比較する計算を行った。Table 3に示すように粒子の条件を設定した。粒子密度はCase 2-1では1,250 kg/m3、Case 2-2では2,500 kg/m3 、Case 2-3では5,000 kg/m3とした。粒子密度に関する条件以外は、Case 1-2と同じものを用いた。ただし、粒子密度が変わることで、Time stepを決定する式(17)の、すなわち粒子質量が変化するため、各ケースについて、適切にTime stepを計算し設定する必要があった。粒子密度2,500 kg/m3では、であるため時間刻み10 µsとし、粒子密度5,000 kg/m3のときは、となるため、時間刻み16 µsとした。時間刻みの変更に伴い、計算時間が12 sでそろうようにIterationも変更した。Case 2-1では1,500,000 step、Case 2-3では750,000 stepとした。

　また、容器情報をTable 4に示す。Case 1-2で使用した容器と同じ条件に設定した。

また、容器形状についてはTable 6に示すとおり。長さを150 mmで統一しており、その他の条件はCase 1と同様である。粒子の配置は、1250 kg/m3の粒子が回転の開始直後に上側に動くような初期配置を生成している。

### Case 3: 粒子密度差依存性

　Case 3では、粒子の密度が一様でない条件にて解析を行う。粒子の条件をTable 5に示す。反発係数、摩擦係数および弾性係数は、Case 1と同様の値とした。また、粒子径および粒子数もCase 1と同様である。粒子密度は、粒子数の半分ずつが異なる値をとるよう設定する。Figure 9に示す図の手前側の白色の粒子がより高密度であるような配置とする。密度がより小さい金色粒子については1250 kg/m3で統一する。時間刻みについては、2種類の粒子によって算出される値が異なるが、小さいほうの値にあわせる必要がある。よって、Case 1で求めた、粒子密度1250 kg/m3の場合の時間刻みと同じ値を用いればよい。

　また、容器形状についてはTable 6に示すとおり。長さを150 mmで統一しており、その他の条件はCase 1と同様である。粒子の配置は、1250 kg/m3の粒子が回転の開始直後に上側に動くような初期配置を生成している。

### Case 4: 密度差がある状態での長さ依存性

　本ケースでは、2種類の密度差のある粒子の混合において、容器の長さを変化させて解析を行う。粒子の条件はTable 7のように設定する。混合する2粒子の密度は、1,250 kg/m3と2,500 kg/m3で統一し、それ以外の粒子条件は2粒子とも同じである。使用する容器の条件はTable 8のようになっている。長さ以外は3ケースで同じ値に設定している。容器長は、Case 1で比較した100 mm、150 mmおよび200 mmの3つを比較する。

### Case 5: 密度比への依存性

　最後のケースとして、2種類の、密度比が等しい密度の組を比較することで本体系の混合効率に、密度比がどのように影響しているのか解析する。粒子条件をTable 9に示す。1,250 kg/m3と2,500 kg/m3の組と、2,500 kg/m3と5,000 kg/m3の組を用意し、それぞれについて、Table 10のように、容器長を100 mmと150 mmで変化させて比較する。このとき、初期配置においても、密度比に対応するように2粒子を配置する。

# 結果考察

## Case 1

　計算結果のスナップショットをFigure 10に示す。すると、Case 1-1は明らかに混合の進展が遅いが、Case 1-2、Case 1-3については外見からは優劣の判別が難しいことが示された。そこで、各Time StepにおけるLacey’s Mixing Indexを計算することで、混合度を評価した。各ケースの混合度の推移をFigure 11に示す。12 s経過時点での各ケースのLacey’s Mixing Index は、Case 1-1で0.740、Case 1-2で0.966、Case 1-3で0.951となっており、グラフを確認してもLacey’s Mixing Indexの高い順に常にCase 1-2、Case 1-3、Case 1-1となっていたため、二軸回転ポットブレンダーにおける混合効率は容器長に依存性があること、および混合効率を最大化する容器長は100 mmから200 mmの間に存在することが示唆された。

　混合容器が長くなることによって対流による混合効果が大きくなるため、仮に本体系で対流的混合効果が支配的だとすれば、容器長が長いほど混合効率が上昇する。しかし、結果はそれに反するため、拡散による混合効果がこの区間で大きくなることで混合効率が極大となっていることが示され、拡散的混合効果が支配的であることが示唆された。

　次に、各ケースにおけるGranular Temperatureの推移およびその極大・極小時刻のスナップショットを、Figure 12およびFigure 13に示す。これを見ると、Case 1-3はCase 1-2より高いGranular Temperatureを示す時刻もあるが、グラフの振動が安定した部分の平均を比較すると、Case 1-2で、Case 1-3でとなっており、Case 1-3がわずかに勝る結果となった。また、Figure 14のようにグラフに1 sごとにグリッドを設けると、1 s周期で振幅の大きい振動と2 s周期で振幅がゆるやかな振動が発生していることが示唆された。そこで、Case 1-2とCase 1-3の2 s分のGranular Temperatureの変化に着目し、Time Stepごとにヒストグラムでまとめた結果をFigure 15およびFigure 16に示す。ここに示した11枚のヒストグラムは、それぞれ時刻4.0 sから6.0 sのもので、いずれも本比較において典型的なヒストグラム形状をしている。Granular Temperatureが0から0.001程度までの分布では、Case 1-3がすべての時刻において大きい値を取っているが、およそ0.0015から0.0025の範囲では、4.4 sから4.8 s、および5.4 sから5.8 sの2つの区間においてCase 1-2が大きくなっており、それ以外の区間においても、Case 1-3とほぼ同程度で、甲乙がつけられるほどの有意な差は認められない。これをFigure 12の時間推移と照らし合わせると、Case 1-2の方がGranular Temperatureが高くなっているのは0.0015から0.0025の範囲で差がついている4.5 s付近および5.5 s付近であることが示唆された。また、Case 1-3がCase 1-2を超えているのはその時刻付近だけであるため、混合効率を高める要因として、Granular Temperatureの平均よりも、高い値を持つセルの数が多いことがより影響力を持つと予想される。さらに、2 s周期の振動は非常にゆるやかなため、

　また、各Caseにおける断面の比較図をFigure 17に示す。この断面は、容器が水平な時に、容器の軸の垂直二等分面で切断したものである。これを見ると、Case 1-1が混合の進展が遅いことがわかるほか、Case 1-2の4.0 s経過時点での断面において、他Caseよりも渦の巻数が多いことがわかる。そもそも渦の巻数が多ければ混合度が高くなる上に、混合が発生する、二種類の粒子の境界の表面積の増加も同時に見込まれるため、渦の巻数の多さも混合効率に一定の作用を示すことが予想された。

　Case 1-1については、他の2ケースよりも混合効率が低いことは明らかであるものの、計算時間内に収束に至っていない。計算時間内の傾向を鑑みれば、収束値は1に近くなることが予想されるため、混合の進展は遅い一方で、時間をかければ十分混合が可能であることが予想された。

## Case 2

　計算結果を可視化した結果をFigure 18に示す。すると、外部から観測する限りでは、見た目での差異はほとんど生じていないことが示唆された。次に、Lacey’s Mixing Indexの時間推移をFigure 19に示す。12 s経過時点でのLacey’s Mixing IndexはCase 2-1では0.966、Case 2-2では0.965、Case 2-3でも0.965と、ほとんど差は現れなかった。またグラフから分かるように、3ケースの推移はよく一致しており、混合度における差はないことが読み取れた。

また、各ケースにおけるGranular Temperatureの推移および極大・極小時刻のスナップショットを、Figure 20およびFigure 21に示す。これについても同様に、3ケースに違いはほとんど見られなかった。以上の結果から、本体系では粒子密度は混合効率に影響しないことが示された。

## Case 3

　Figure 22は、シミュレーション結果を可視化した結果である。この図から、Case 3-2およびCase 3-3では、Case 3-1に比べて表面に金色の粒子が多く分布しているようすが観察された。すなわち、密度差がある場合、より低密度の粒子は外側に偏ることが示唆された。各ケースにおけるLacey’s Mixing Indexを計算すると、Figure 23のようになった。12 s経過時のLacey’s Mixing Indexは、Case 3-1で0.966、Case 3-2で0.569、Case 3-3では0.225となった。グラフにおいても、Lacey’s Mixing Indexが高いほうから常にCase 3-1、Case 3-2、Case 3-3の順になっており、密度差が大きくなるにつれ混合度が低くなる結果となった。特にCase 3-2においては、5.0 s付近を境にLacey’s Mixing Indexが下がる現象が発生しており、内部で分離が起こっていると予想される。また、3ケース全てにおいて混合度の推移はほとんど収束しており、Case 3-2、Case 3-3においては、これ以降も混合を続けたとしても、よく混合された状態に達しないことが予想された。

　Case 3それぞれのGranular Temperatureの推移および極大・極小時刻のスナップショットを、Figure 24およびFigure 25に示す。グラフにおいて各ケースが示す波形は酷似しており、それらが上下に分布しているため、各ケースのGranular Temperatureは高い順に常にCase 3-1、Case 3-2、Case 3-3となっていることが示唆された。また、極小時刻のCase 3-3は、他ケースでは高いGranular Temperatureを示した右下の部分がとても低い値となっており、ケース内での混合が進みやすい箇所が密度差によって変化していることが示された。

さらに、Figure 26に2 sから12 s経過後のCase 3の3ケース全ての断面のスナップショットを示す。この断面はCase 1と同じく、容器が水平な時に容器の中心軸の垂直二等分面で切断したものである。これを見ると、密度差がある系では、より重い2,500 kg/m3や5,000 kg/m3の粒子が中心に寄るように偏析が発生している。さらに、Case 3-2よりCase 3-3のほうがより強く分離しており、密度差が大きいほど分離作用はより強力になり、また進行もより早いことが示唆された。ここで、Case 3-2にて渦が確認されるのは4.0 sまでであることから、渦の発散とともに分離作用が現れ始めていることが示された。加えて、Case 3-3では、他ケースで見られた渦が発生しておらず、混合作用が働きにくい状態となっていたことが示された。このことから、1章で述べた半径方向分離と同様の現象が本体系でも発生していることが確認された。また、渦の有無は混合物が定常状態にあるかどうかを視覚的に判断する目安となることが示唆された。

## Case 4

　Figure 27に各ケースのシミュレーション結果を示す。各ケースのLacey’s Mixing Indexは、Figure 28に示すようになった。12 s経過時点でのLacey’s Mixing IndexはCase 4-1で0.476、Case 4-2で0.569、Case 4-3で0.455と、Case 4-2、Case 4-1、Case 4-3の順となった。推移を観察すると、混合開始後の各ケースの順位はCase 1での容器長の順位と同じく、150 mm(Case 4-2)、200 mm(Case 4-3)、100 mm(Case 4-1)の順に混合効率が高くなっている。しかし、10.5秒頃に200 mmと100 mmの混合度が逆転していることから、密度比の変化によって、Case 3でも観察された分離作用が混合効率の順位を逆転させる可能性があることが示された。

　各ケースのGranular Temperatureを計算すると、時間推移はFigure 29、極大・極小時刻のスナップショットはFigure 30に示すようになった。ここで、Case 4-1において、明らかな振幅の減衰が見られた。他Caseでの推移から、振幅は容器長が長くなるにつれて大きくなる傾向が見られたが、減衰後の振幅は、100 mmのケースで観測されたものと同等であった。これはすなわち、振動の安定化がほかのCaseより遅いことを示唆している。さらに、Case 3-3においても他のケースより安定化が遅れる現象が発生していたことから、混合効率が低く、密度差があるCaseにおいては、Granular Temperatureの振動の安定化が遅くなることが示唆された。Granular Temperatureの値の大小と振動が安定するまでの時間に負の相関があることが示された。

2 sから12 s経過時のCase 4-1からCase 4-3の断面を比較したものをFigure 31に示す。ここでの切断面も、Case 1、Case 3と同じ取り方である。これによれば、Case 4-2とCase 4-3では早い段階から渦が発散し、定常状態に達しているが、Case 4-1は12秒経過時でもまだ渦が確認可能で、分離が進行する前の状態にあることが示唆された。

## Case 5

　Case 5-1からCase 5-3の条件で計算を実行した。計算結果を可視化したスナップショットをFigure 32に示す。すると、容器長が同じケース同士は、外見がよく似ていることが示唆された。各ケースのLacey’s Mixing Indexの時間変化を、Figure 33に示す。このグラフでは、Case 5-1とCase 5-3、Case 5-2とCase 5-4がそれぞれよく一致している。前者の組はどちらも容器長が100 mmで、後者の組はともに容器長が150 mmであるため、粒子密度の構成が異なることは混合効率に影響を及ぼさないことが示唆された。さらにCase 2の結果も加味すると、本体系においては粒子密度そのものではなく、粒子密度の比が混合効率に影響を与えるパラメータとなっていることが示された。

　Case 5全てでGranular Temperatureを算出すると、その時間推移および極大・極小時刻のようすはFigure 34およびFigure 35のようになった。すると、Lacey’s Mixing Index と同様に、Case 5-1とCase 5-3、Case 5-2とCase 5-4の組で一致が見られた。これも上記の結論を裏付けるものである。

# 結論

本研究では、回転と揺動を組み合わせた混合機における粉体の挙動を解析することで、粉体の混合効率が最適となる条件を調査した。

混合する粒子が一種類のみの場合、容器の長さについてはある値で混合効率が最高となるような長さが存在し、本研究の条件下ではおよそ150 mmであることが示された。また、粒子の密度については、変化させても混合効率には影響がないことが示唆された。

混合する粒子が二種類あり、密度差がある場合での容器形状については、150 mm付近に最適値が存在することが示されたとともに、密度差がない状態とは変わって、100 mmの容器では分離しにくく、混合時間によっては200 mmの容器より混合効率がよくなる可能性が示唆された。また、混合粒子の密度について、二粒子の密度差ではなく密度比が混合効率を決めるパラメータとなっていることが示され、密度比が大きいほど混合が進みにくくなることが示唆された。

　以上より、この混合機では粒子密度の比が大きくない粒子の混合でよりよく混合が進むことが示され、また粒子条件が固定されている場合には、150 mmの容器を用いて二粒子を混合することが混合効率を向上させる条件であることが示唆された。

今後の展望としては、今回比較を行わなかった回転速度、揺動速度などのパラメータについても比較して計算し、混合効率が高い状態となる条件を調査していきたい。また、今回の混合機ではよく混合できなかった、密度比が大きい二粒子の混合についてもよりよい混合手法を明らかにしていきたい。

Table 1: Comparison of Mixing index

|  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- |
|  | Simplicity | Cell dependency | Applicability | Accuracy | Scale |
| Average height method | A | A | C | C | Macro |
| Nearest neighbour method | A | A | C | B | micro |
| Neighbour distance method | A | A | C | C | Macro |
| Lacey method | A | C | A+ | A | Macro |
| Mixing entropy method | A | C | A | A | micro |
| Coordination number method | B | A | C | B | micro |
| Particle scale index method | C | A | A | A | Macro |
| Siira method | C- | A | A | B | micro |

#### Table 2: Calculation Conditions for Case 1

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
|  | unit | Case 1-1 | Case 1-2 | Case 1-3 |
| Length | mm | 100 | 150 | 200 |
| Diameter | mm | 100 | | |
| Roll | rpm | 60 | | |
| Pitch | Hz | 0.5 | | |
| Particle Diameter | mm | 1.0 | | |
| Number of Particles | - | 700,000 | | |
| Time Step | µs | 8.0 | | |
| Iterations | - | 1,500,000 | | |

#### 

#### Table 3: Physical Properties for Case 1

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
|  | unit | Case 1-1 | Case 1-2 | Case 1-3 |
| Restitution Coefficient | - | 0.9 | | |
| Friction Coefficient | - | 0.3 | | |
| Spring Coefficient | N/m | 1,000 | | |
| Particle Density | kg/m3 | 1,250 | | |

#### Table 4: Calculation Conditions for Case 2

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
|  | unit | Case 2-1 | Case 2-2 | Case 2-3 |
| Length | mm | 150 | | |
| Diameter | mm | 100 | | |
| Roll | rpm | 60 | | |
| Pitch | Hz | 0.5 | | |
| Particle Diameter | mm | 1.0 | | |
| Number of Particles | - | 700,000 | | |
| Time Step | µs | 8.0 | 10 | 16 |
| Iterations | - | 1,500,000 | 1,200,000 | 750,000 |

#### Table 5: Physical Properties for Case 2

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
|  | unit | Case 2-1 | Case 2-2 | Case 2-3 |
| Restitution Coefficient | - | 0.9 | | |
| Friction Coefficient | - | 0.3 | | |
| Spring Coefficient | N/m | 1,000 | | |
| Particle Density | kg/m3 | 1,250 | 2,500 | 5,000 |

#### Table 6: Calculation Conditions for Case 3

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
|  | unit | Case 3-1 | Case 3-2 | Case 3-3 |
| Length | mm | 150 | | |
| Diameter | mm | 100 | | |
| Roll | rpm | 60 | | |
| Pitch | Hz | 0.5 | | |
| Particle Diameter | mm | 1.0 | | |
| Number of Particles | - | 700,000 | | |
| Time Step | µs | 8.0 | | |
| Iterations | - | 1,500,000 | | |

#### Table 7: Physical Properties for Case 3

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
|  | unit | Case 3-1 | Case 3-2 | Case 3-3 |
| Restitution Coefficient | - | 0.9 | | |
| Friction Coefficient | - | 0.3 | | |
| Spring Coefficient | N/m | 1,000 | | |
| Lower Density | kg/m3 | 1,250 | | |
| Higher Density | kg/m3 | 1,250 | 2,500 | 5,000 |

#### Table 8: Calculation Conditions for Case 4

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
|  | unit | Case 4-1 | Case 4-2 | Case 4-3 |
| Length | mm | 100 | 150 | 200 |
| Diameter | mm | 100 | | |
| Roll | rpm | 60 | | |
| Pitch | Hz | 0.5 | | |
| Particle Diameter | mm | 1.0 | | |
| Number of Particles | - | 700,000 | | |
| Time Step | µs | 8.0 | | |
| Iterations | - | 1,500,000 | | |

#### Table 9: Physical Properties for Case 4

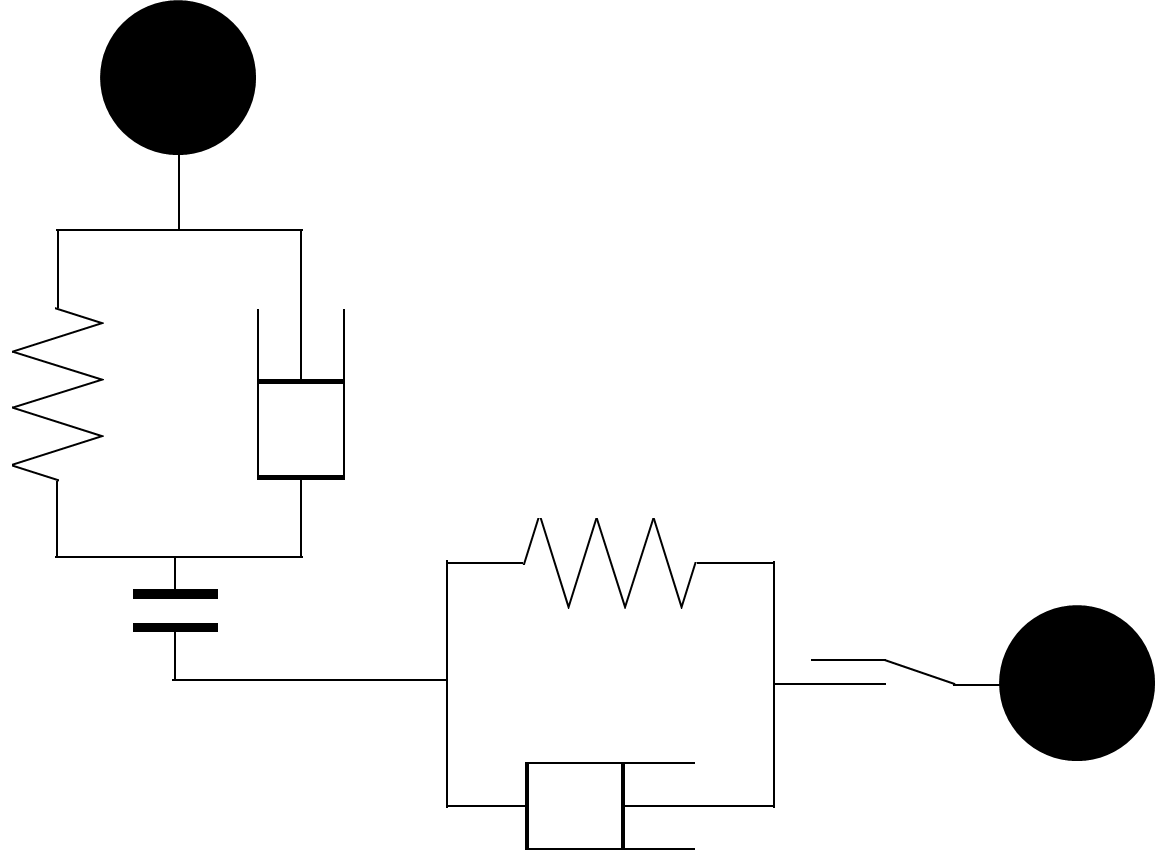
|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
|  | unit | Case 4-1 | Case 4-2 | Case 4-3 |
| Restitution Coefficient | - | 0.9 | | |
| Friction Coefficient | - | 0.3 | | |
| Spring Coefficient | N/m | 1,000 | | |
| Lower Density | kg/m3 | 1,250 | | |
| Higher Density | kg/m3 | 2,500 | | |

#### Table 10: Calculation Conditions for Case 5

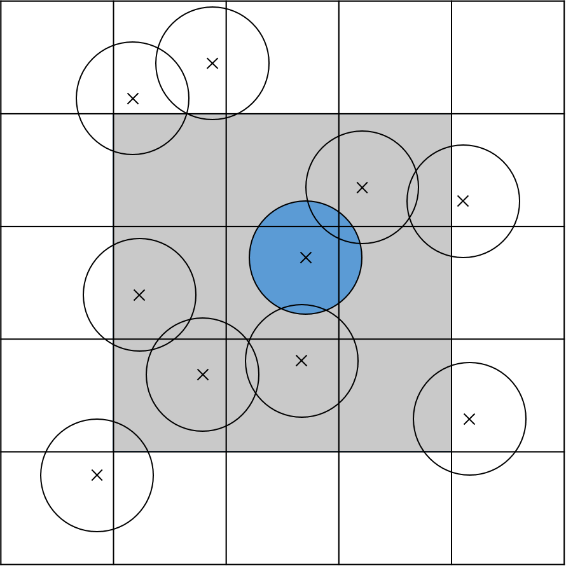
|  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- |
|  | unit | Case 5-1 | Case 5-2 | Case 5-3 | Case 5-4 |
| Length | mm | 100 | 150 | 100 | 150 |
| Diameter | mm | 100 | | | |
| Roll | rpm | 60 | | | |
| Pitch | Hz | 0.5 | | | |
| Particle Diameter | mm | 1.0 | | | |
| Number of Particles | - | 700,000 | | | |
| Time Step | µs | 8.0 | | 10 | |
| Iterations | - | 1,500,000 | | 1,200,000 | |

#### Table 11: Physical Properties for Case 5

|  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- |
|  | unit | Case 5-1 | Case 5-2 | Case 5-3 | Case 5-4 |
| Restitution Coefficient | - | 0.9 | | | |
| Friction Coefficient | - | 0.3 | | | |
| Spring Coefficient | N/m | 1,000 | | | |
| Lower Density | kg/m3 | 1,250 | | 2,500 | |
| Higher Density | kg/m3 | 2,500 | | 5,000 | |



#### Figure 1: Voigt Model



#### Figure 2: Bounding Box (2D)

#### 

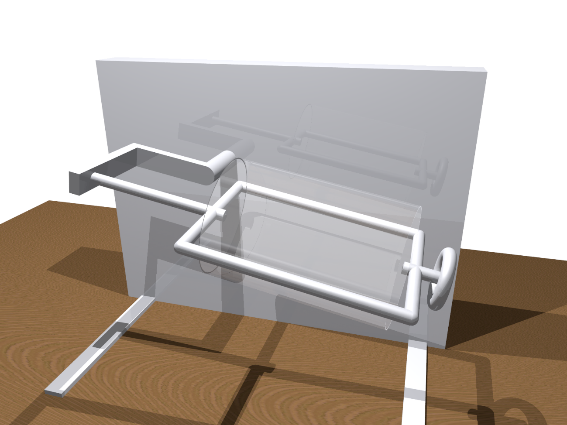
#### Figure 3: Bounding Box (3D) – Blue Sphere is out of the Box

#### 

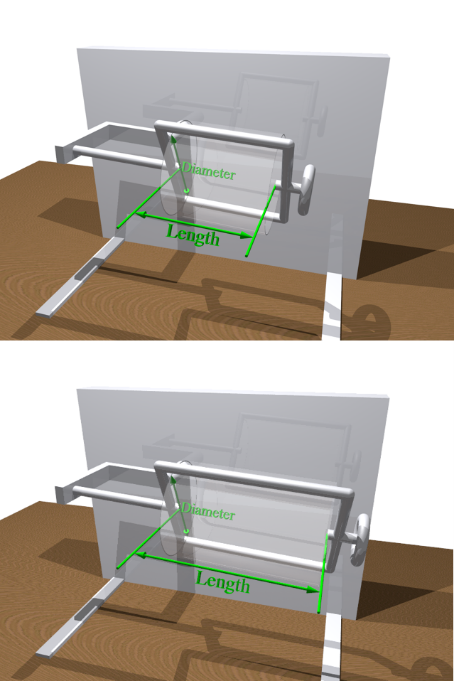
#### Figure 4: Volume Fraction of Particle

#### 

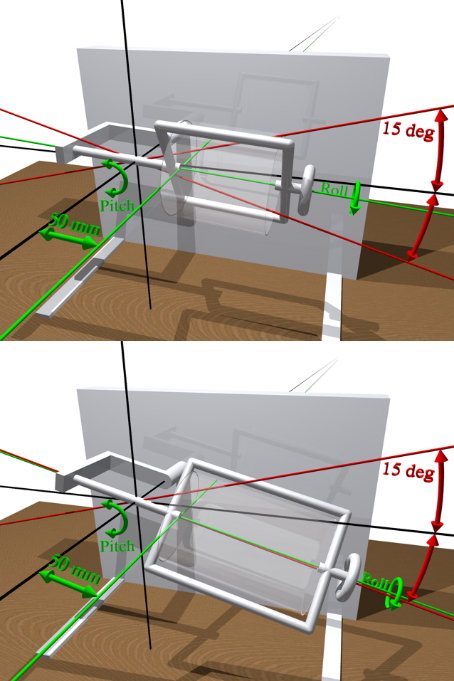
#### Figure 5: Generating Initial Condition



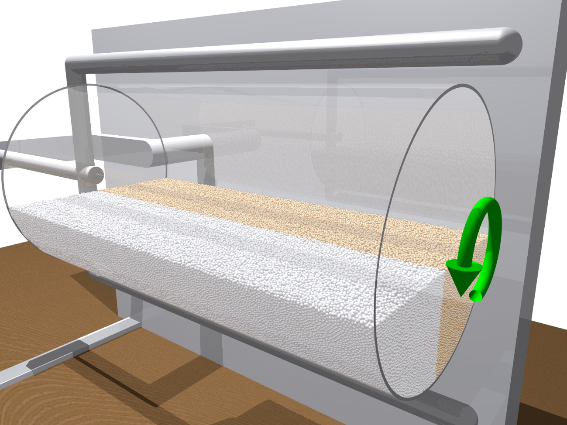
#### Figure 6: An Example of Cases



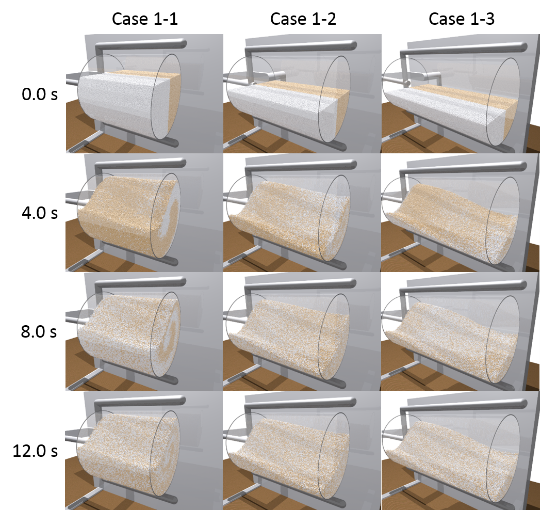
#### Figure 7: Length and Diameter



#### Figure 8: Range of Pitch and Axis of Roll and Pitch



#### Figure 9: Location of the each Particles



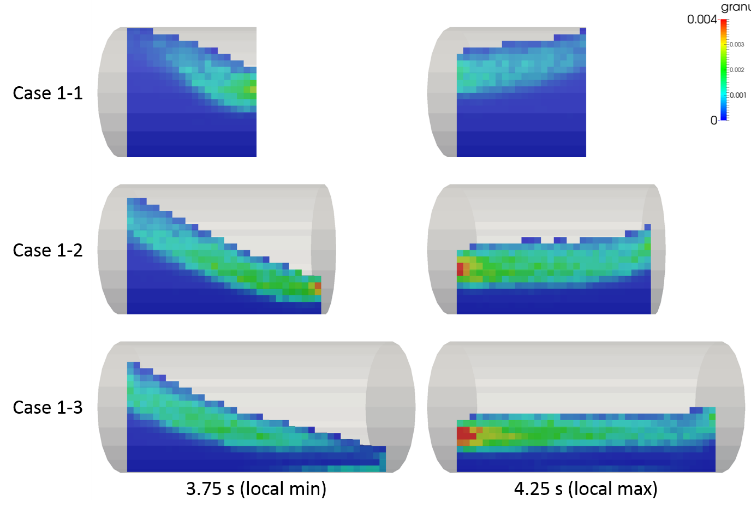
#### Figure 10: Mixing in Case 1



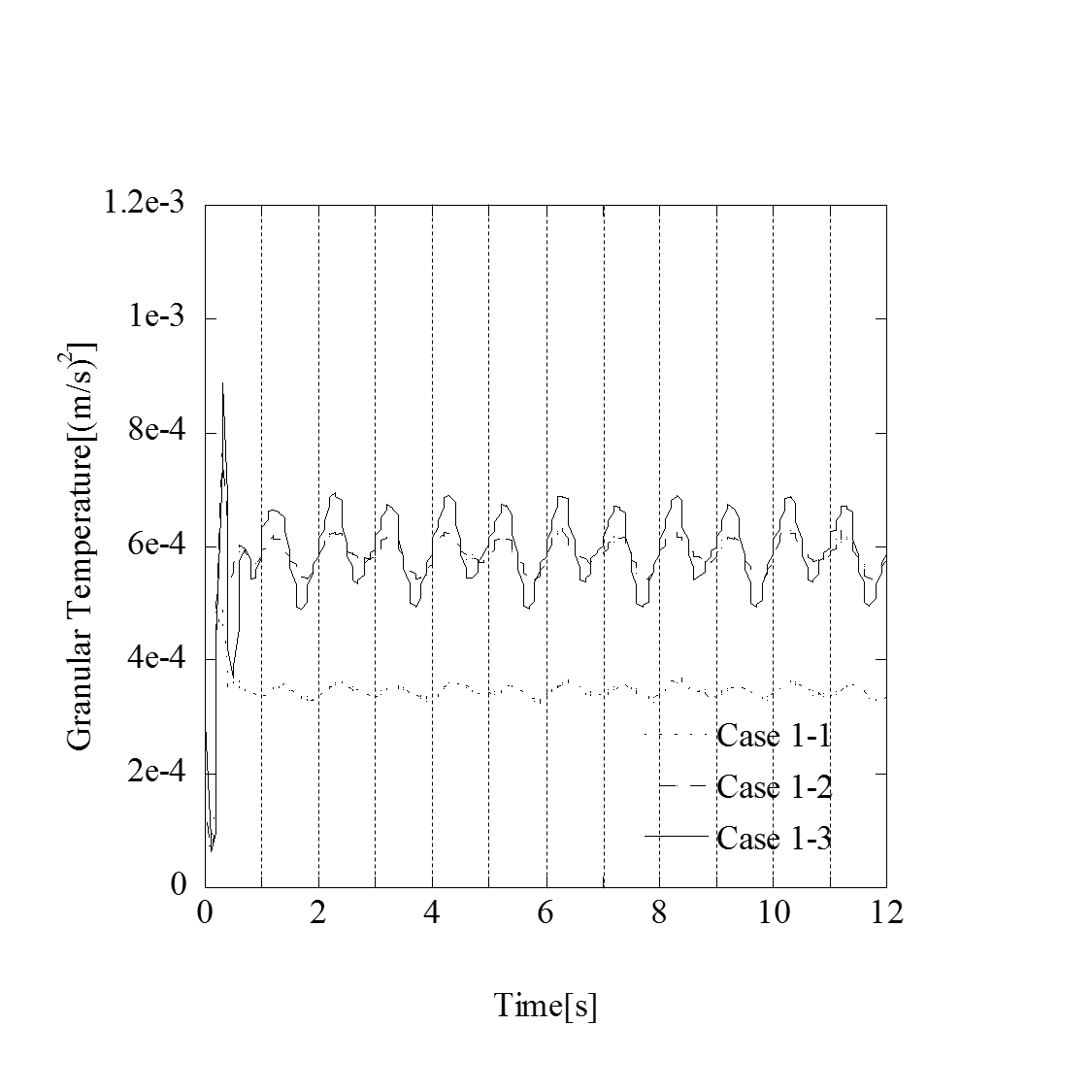
#### Figure 11: Lacey’s Mixing Index for Case 1



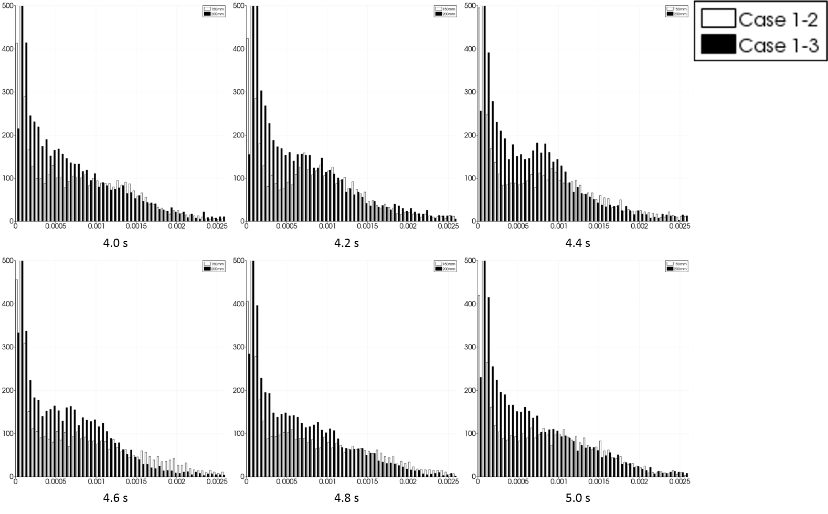
Figure 12: Granular Temperature for Case 1



#### Figure 13: Granular Temperature for Case 1 at 3.75 s and 4.25 s



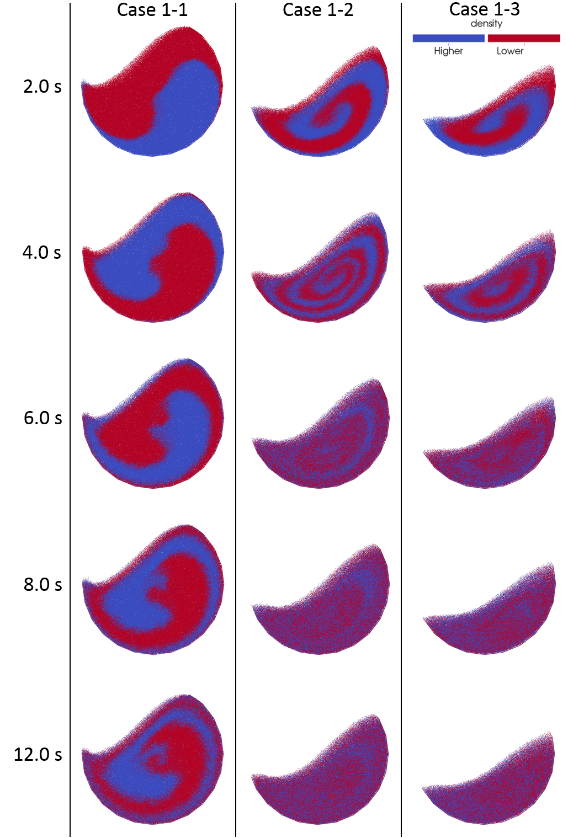
#### Figure 14: Cycle of Granular Temperature for Case 1



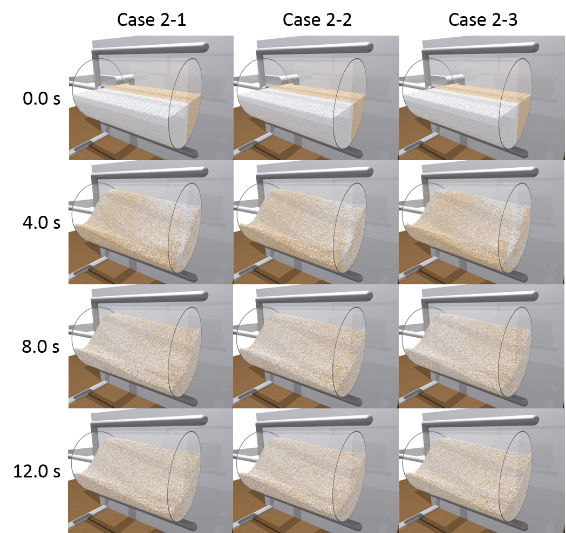
#### Figure 15: Histogram of Granular Temperature for Case 1-2 and Case 1-3 (4.0 s to 5.0 s)

#### 

#### Figure 16: Histogram of Granular Temperature for Case 1-2 and Case 1-3 (5.0 s to 6.0 s)



#### Figure 17: Cross Sections at 2.0, 4.0, 6.0, 8.0 and 12.0 s (Case 1)



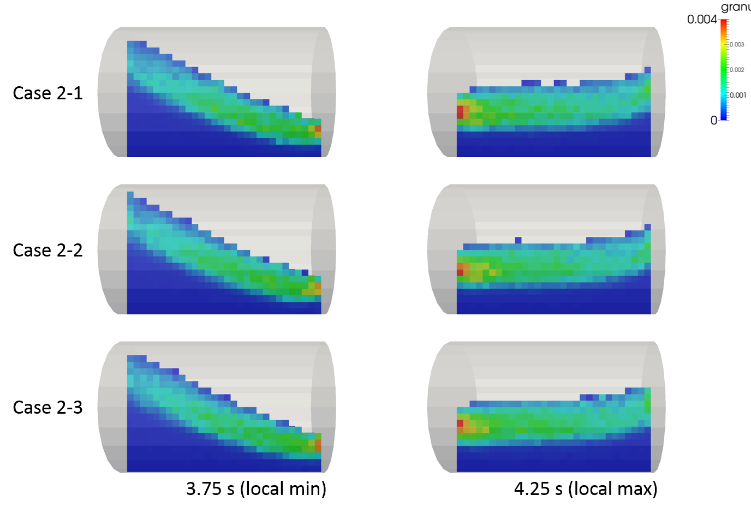
#### Figure 18: Mixing in Case 2

![](data:None;base64,)

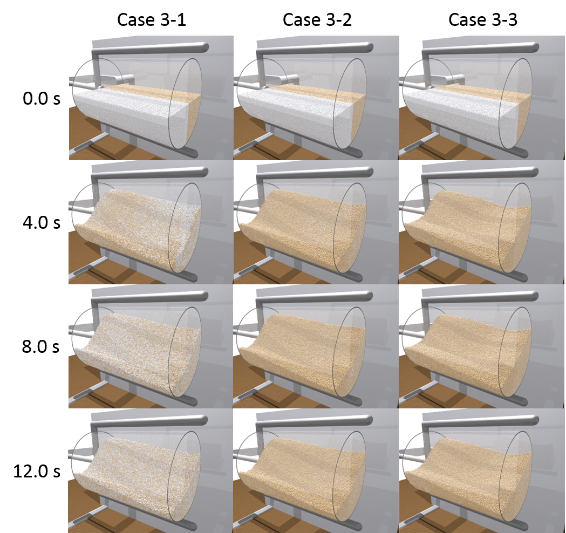
#### Figure 19: Lacey’s Mixing Index for Case 2

![](data:None;base64,)

Figure 20: Granular Temperature for Case 2



#### Figure 21: Granular Temperature for Case 2 at 3.75 s and 4.25 s



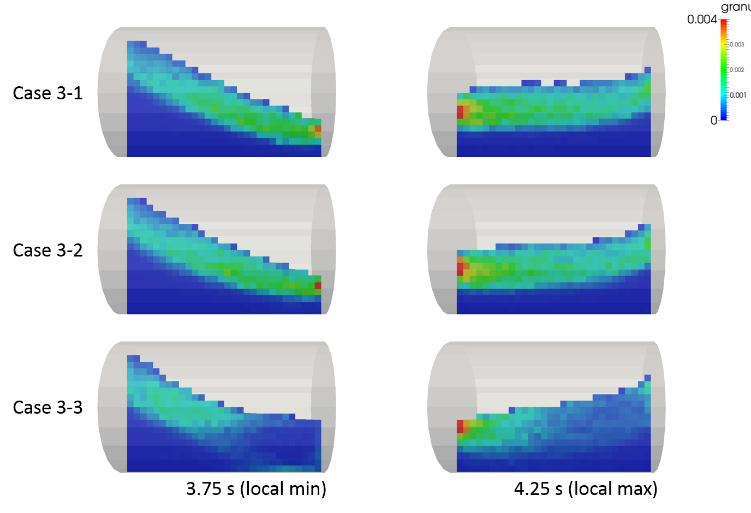
#### Figure 22: Mixing in Case 3

![](data:None;base64,)

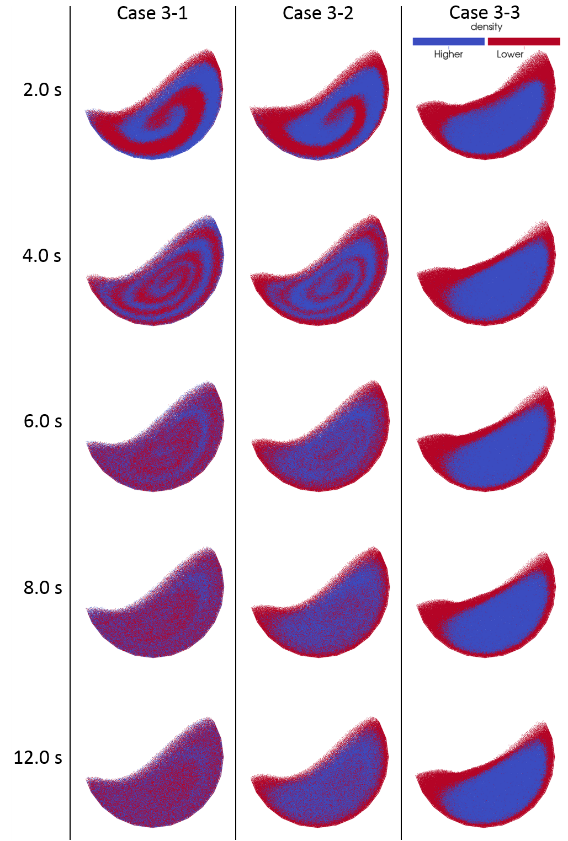
#### Figure 23: Lacey’s Mixing Index for Case 3



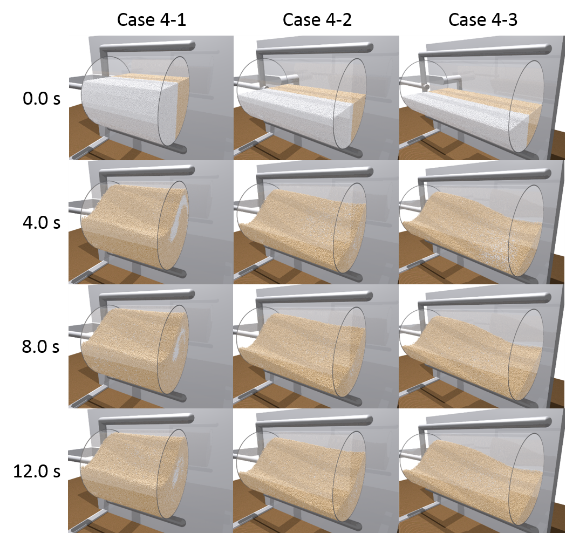
Figure 24: Granular Temperature for Case 3



#### Figure 25: Granular Temperature for Case 3 at 3.75 s and 4.25 s



#### Figure 26: Cross Sections at 2.0, 4.0, 6.0, 8.0 and 12.0 s (Case 3)



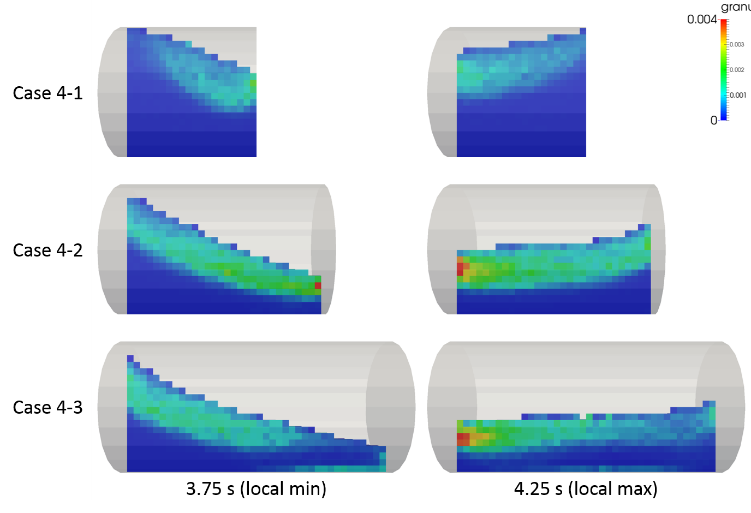
#### Figure 27: Mixing in Case 4

![](data:None;base64,)

#### Figure 28: Lacey’s Mixing Index for Case 4

![](data:None;base64,)

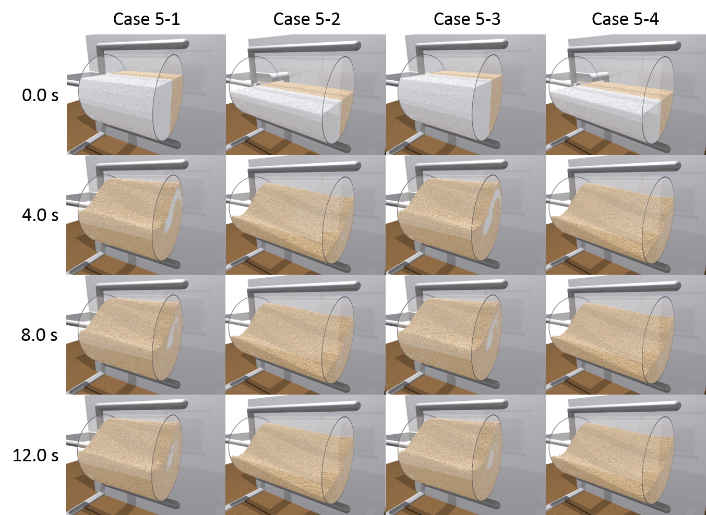
Figure 29: Granular Temperature for Case 4



#### Figure 30: Granular Temperature for Case 4 at 3.75 s and 4.25 s



#### Figure 31: Cross Sections at 2.0, 4.0, 6.0, 8.0 and 12.0 s (Case 4)



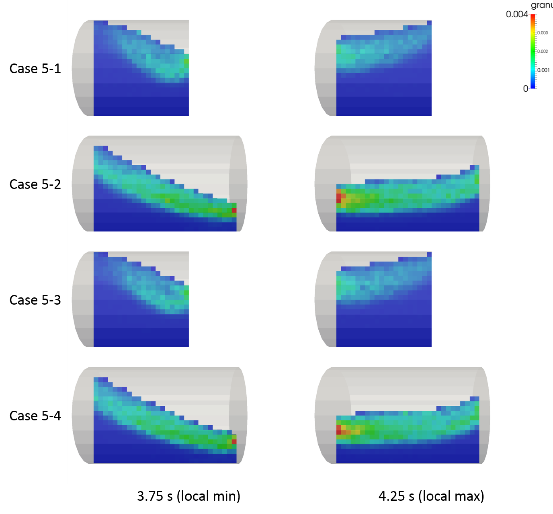
#### Figure 32: Mixing in Case 5

![](data:None;base64,)

#### Figure 33: Lacey’s Mixing Index for Case 5

#### 

Figure 34: Granular Temperature for Case 5



#### Figure 35: Granular Temperature for Case 5 at 3.75 s and 4.25 s

# 参考文献

[1] J. J. Fitzpatrick, J. O’Connor, M. Cudmore, and D. Dos Santos, “Caking behaviour of food powder binary mixes containing sticky and non-sticky powders,” *J. Food Eng.*, vol. 204, pp. 73–79, 2017.

[2] M. Mansour *et al.*, “Numerical study of liquid-liquid mixing in helical pipes,” *Chem. Eng. Sci.*, vol. 172, pp. 250–261, 2017.

[3] G. Basinskas and M. Sakai, “Numerical study of the mixing efficiency of a ribbon mixer using the discrete element method,” *Powder Technol.*, vol. 287, pp. 380–394, 2016.

[4] P. A. Cundall and O. D. L. Strack, “A discrete numerical model for granular assemblies,” *Géotechnique*, vol. 29, no. 1, pp. 47–65, Mar. 1979.

[5] Y. Shigeto and M. Sakai, “Arbitrary-shaped wall boundary modeling based on signed distance functions for granular flow simulations,” *Chem. Eng. J.*, vol. 231, pp. 464–476, 2013.

[6] P. M. C. Lacey, “The mixing of solid particles,” *Chem. Eng. Res. Des.*, vol. 75, pp. S49–S55, 1943.

[7] M. Alian, F. Ein-Mozaffari, S. R. Upreti, and J. Wu, “Using discrete element method to analyze the mixing of the solid particles in a slant cone mixer,” *Chem. Eng. Res. Des.*, vol. 93, pp. 318–329, 2015.

[8] S. Yang, Y. Sun, L. Zhang, and J. W. Chew, “Segregation dynamics of a binary-size mixture in a three-dimensional rotating drum,” *Chem. Eng. Sci.*, vol. 172, pp. 652–666, 2017.

[9] H. Ma and Y. Zhao, “Modelling of the flow of ellipsoidal particles in a horizontal rotating drum based on DEM simulation,” *Chem. Eng. Sci.*, vol. 172, pp. 636–651, 2017.

[10] E. W. C. Lim, “Density segregation of dry and wet granular mixtures in vibrated beds,” *Adv. Powder Technol.*, vol. 27, no. 6, pp. 2478–2488, 2016.

[11] E. Cano-Pleite, F. Hernández-Jiménez, A. Acosta-Iborra, T. Tsuji, and C. R. Müller, “Segregation of equal-sized particles of different densities in a vertically vibrated fluidized bed,” *Powder Technol.*, vol. 316, pp. 101–110, 2017.

[12] A. Džiugys, B. Peters, R. Navakas, and E. Misiulis, “Density segregation on a moving grate,” *Powder Technol.*, vol. 305, pp. 323–332, 2017.

[13] H. Chen, X. Q. Zhao, Y. G. Xiao, Y. L. Liu, and Y. Liu, “Radial mixing and segregation of granular bed bi-dispersed both in particle size and density within horizontal rotating drum,” *Trans. Nonferrous Met. Soc. China (English Ed.*, vol. 26, no. 2, pp. 527–535, 2016.

[14] OYAMA and Y., “Horizontal Rotating Cylinder,” *Bull. Inst. Phys. Chem. Res. (Tokyo), Rep.*, vol. 18, pp. 600–610, 1939.

[15] G. D. Cody, D. J. Goldfarb, G. V. Storch, and A. N. Norris, “Particle granular temperature in gas fluidized beds,” *Powder Technol.*, vol. 87, no. 3, pp. 211–232, Jun. 1996.

[16] M. Sakai, Y. Shigeto, G. Basinskas, A. Hosokawa, and M. Fuji, “Discrete element simulation for the evaluation of solid mixing in an industrial blender,” *Chem. Eng. J.*, vol. 279, pp. 821–839, 2015.

[17] F. J. Muzzio, M. Llusa, C. L. Goodridge, N. H. Duong, and E. Shen, “Evaluating the mixing performance of a ribbon blender,” *Powder Technol.*, vol. 186, no. 3, pp. 247–254, 2008.

[18] G. Basinskas and M. Sakai, “Numerical study of the mixing efficiency of a batch mixer using the discrete element method,” *Powder Technol.*, vol. 301, pp. 815–829, 2016.

[19] Y. Wen, M. Liu, B. Liu, and Y. Shao, “Comparative study on the characterization method of particle mixing index using DEM method,” *Procedia Eng.*, vol. 102, pp. 1630–1642, 2015.

[20] W. Godlieb, N. Deen, and J. Kuipers, “Characterizing solids mixing in DEM simulations,” *6th Int. Conf. Multiph. Flow*, 2007.

[21] W. Godlieb, S. Gorter, N. G. Deen, and J. A. M. Kuipers, “Dem and Tfm Simulations of Solids Mixing in a Gas-Solid Fluidized Bed,” *Seventh Int. Conf. CFD Miner. Process Ind.*, no. December, pp. 1–7, 2009.

[22] M. M. H. D. Arntz, W. K. den Otter, W. J. Briels, P. J. T. Bussmann, H. H. Beeftink, and R. M. Boom, “Granular mixing and segregation in a horizontal rotating drum: A simulation study on the impact of rotational speed and fill level,” *AIChE J.*, vol. 54, no. 12, pp. 3133–3146, Dec. 2008.

[23] G. R. Chandratilleke, A. B. Yu, J. Bridgwater, and K. Shinohara, “A particle-scale index in the quantification of mixing of particles,” *AIChE J.*, vol. 58, no. 4, pp. 1099–1118, Apr. 2012.

[24] S. Siiriä and J. Yliruusi, “Determining a value for mixing: Mixing degree,” *Powder Technol.*, vol. 196, no. 3, pp. 309–317, 2009.

[25] P. M. C. Lacey, “Developments in the theory of particle mixing,” *J. Appl. Chem.*, vol. 4, no. 5, pp. 257–268, 1953.

[26] S. Wang *et al.*, “Predictions of granular temperatures of particles in a flat bottomed spout bed,” *Powder Technol.*, vol. 322, pp. 147–158, 2017.

# 謝辞

本研究を行うにあたり、数多くの方のご協力を賜りました。この章にて感謝を述べさせていただきます。

まず、指導教官を担当してくださった、東京大学大学院工学系研究科レジリエンス工学研究センターの酒井幹夫准教授には大変お世話になりました。2017年春の領域プロジェクトから始まり、研究方針から日常生活にいたるまで幅広いアドバイスをくださいました。さらに、セミナーなどの参加を勧めてくださったり、学会発表を勧めてくださったり、私がこれから修士課程に進んでいくうえで糧となるような経験・ご指導を賜ることができました。誠にありがとうございました。

また、酒井研究室の先輩方にも大変お世話になりました。特に博士1年の高畑さんには、論文の細かい書き方などから丁寧に教わることができ、卒業論文を書くにあたって未熟な私が必要なスキルを身に着けられるようご助力くださいました。大変感謝しております。他の先輩方におかれましても、発表練習にお付き合いくださったり、セミナーにご一緒させてくださったりと多方面にわたりご協力くださいました。ありがとうございました。

最後になりますが、私がこうして大学生活を無事に終えることができるのは、家族をはじめとして私を理解し応援してくださったたくさんの方々のおかげであります。この環境が私に与えられていることが非常に幸運なことで、よき家族、よき先生方、よき友人達に恵まれたことを本当にありがたく思います。みなさまへの感謝を心に刻み、修士課程、そしてその先の人生を歩んでいきたいと思います。

2018年1月

川上 隼平