

特集「粉体シミュレーション特集」を企画して

特集担当編集委員 渡辺 香、加納 純也

近年、多くの産業で数値シミュレーションが取り扱われており、数値シミュレーションに基づく設計開発が行われている。数値シミュレーションといっても、古くは有限要素法に基づく構造解析や、差分法や有限体積法を使った流体解析などが数値シミュレーションの主流であったが、近年では粉体の動きに注目した離散要素法に基づく粉体シミュレーションなども扱われるようになってきている。従来から仮想実験として数値シミュレーションは活用されてきたが、粉体に関しては実験による評価が多く、数値シミュレーションによる評価を行うことが難しかった。近年、粉体挙動に関する物理モデルの開発や、粉体シミュレーションによる評価方法の確立などにより、粉体シミュレーションも多くの産業で活用され始めている。本企画において、最新の粉体シミュレーション技術や実際の粉体プロセスに粉体シミュレーションを適用した事例をお届けする。

「粗視化モデルを組み込んだDEMシミュレーションの湿潤粒子造粒プロセスへの適用」と題して、早稲田大学持続的環境エネルギー社会共創研究機構の三崎亜衣氏、東京大学大学院の高谷雄太郎氏、早稲田大学理工学術院、東京大学大学院の所千晴氏に執筆いただいた。

転動造粒機の1つであるパン型ペレタイザにおける粉体挙動を、粗視化を取り入れたJKRモデルと液架橋力モデルを組み合わせたシミュレーションを通じて、実際のプロセスへの適用方法を紹介いただいた。接触時はJKRモデル、表面間の力には液架橋力モデルという2つの付着力を考慮することで、造粒プロセスの解析を行うというアプローチで検証に取り組まれている。このモデル化によるアプローチでは、実験結果とシミュレーション結果において良好な一致を示しており、運転初期から定常状態に至るまで、実験とシミュレーションで一致する結果が示されている。今回ご紹介いただいた粗視化を考慮した解析は計算高速化が見込めるものの、湿潤粒子の凝集プロセスを定量的に再現できるとは限らないため、更なる結果の考察やモデルの拡張が必要であると考察している。実験結果に基づいてシミュレーションのモデル化における再現性の確認に取り組まれており、実際の工業プロセスに応用するための貴重な知見を示していただいた。

「微粉炭燃焼における数値シミュレーション」と題して、(一)電力中央研究所の丹野賢二氏に執筆いただいた。

19世紀末に実用化された石炭火力発電は、2021年時点においても日本の発電電力量の31%を担っており、現在においても主要な電源として利用されている。しかし、石炭火力発電は温室効果ガスの排出原単位が他の化石燃料と比べると高いことから、2050年の温室効果ガス実質ゼロを目指すための対応が急務となっている。また、石炭火力発電で培われてきた高温反応場に対応するための技術はケミカルリサイクルプロセスでも有望になることから、微粉炭燃焼に関する研究開発への注目度は高い。石炭火力発電技術の基盤となる微粉炭燃焼に焦点を当て、シミュレーションモデルを用いた最新の研究動向を紹介いただいた。微粉炭燃焼の数値シミュレーションでは、微粉炭燃焼に特有の現象だけではなく、乱流、粒子輸送、輻射伝熱など、混相高温反応乱流場において重要な現象もモデル化する必要がある。微粉炭燃焼のみを取り出しても、熱分解、気相反応、チャー燃焼の過程でさまざまなモデルが提唱されており、各モデル化における特徴を具体例で示しながら整理していただいた。微粉炭燃焼分野で培われた知見はカーボンフリー燃料の製造やマテリアルリサイクル分野において活用でき、人類が直面するエネルギーや資源循環などにおける課題解決に活用されることを期待したい。

「粉体シミュレーションの産業応用」と題して、(株)構造計画研究所の山口賢司氏に執筆いただいた。

現在のものづくりでは、シミュレーションの役割が高まっており、理論、実験と並んでシミュレーション技術も欠かせない技術となっている。シミュレーションを活用したものづくりの生産性向上はさまざまな業界で行われており、近年では化学、製薬、食品などのプロセス産業分野においても広く普及してきているとのこと。流体解析や構造解析といった技術を取り入れている企業は増え、近年では、粉体シミュレーションも取り入れる企業が増えてきている。同社が開発している粉体・流体シミュレーションソフトウェア「iGRAF(アイグラフ)」の産業応用事例を紹介いただいた。「iGRAF」では、固気液三相流を扱うことができるため、空気の影響を考慮した解析やスラリー製造のような液体中に固体を分散させる系においても解析が可能とのことである。また、任意形状のモデリング方法には符号付距離関数のモデル化や埋込境界法というユニークな方法を採用していることから、従来であれば複雑な設定が必要な解析を容易に実施することができるよう

なシステムを開発している。「iGRAF」では、本稿で紹介いただいた機能に加え、伝熱計算機能や湿潤粉体を取り扱える機能を拡張しているため、更なる産業応用が期待される。

「高炉の装入プロセスにおける粉体シミュレーション活用に向けた検討事例」と題して、**日本製鉄(株)の三尾浩氏**に執筆いただいた。

高炉は、鉄鉱石を還元して銑鉄を作り出すための交流型反応装置であり、基本的な操作は、原料を層状に装入することと、炉下部から熱風を吹き込むこととのものである。炉内のガスの流れを適切な状態に維持することは、安定で効率的な操業に必要であり、ガスの流れが不均一になると、未還元の鉱石層が炉下部に達し操業トラブルを引き起こす可能性がある。つまり、原料の充填状態を適切に制御することができれば、ガスの流れが安定な状態を維持することになる。そのために、炉内の原料の充填状態を均一にするために複数の設備的な工夫が検討されており、検討方法の一つとしてシミュレーションを活用した検討が行われている。記事では同社が保有する1/3スケールの試験装置を用いた実験と粉体シミュレーションの比較検証を行ってきた内容について詳細に記載いただいた。DEMを用いた粉体シミュレーションでは、高炉の挿入分布は実験と良く一致しており、高炉挿入分布の予測は実現が可能になっている。微小な粒子を除いた状態においては実験とシミュレーションにおいて良好な一致を示しており、今後の技術発展に伴い微小な粒子を含む実プロセスの体系に近い状態でのシミュレーションの技術開発に期待したい。

「粉体シミュレーションを活用した製造プロセス改善事例」と題して、**(株)ダイセルの糸見明穂氏**に執筆いただいた。

市場の変化に対応するために、実験や試作によって製品開発を進めているが、市場対応のスピードと安全性を確保するためには多面的なアプローチが必要になる。同社は大規模プラントから微細な電子デバイスまで多岐にわたり事業を展開しており、いずれの領域においても最適な設備・プロセスが求められる。製品開発のスピードを加速する施策の一つとして、同社は、多岐にわたる事業領域でCAEを用いた開発の加速を進めている。さらに、同社の製品には、火薬などの実験での取り扱いが難しい製品も多いため、シミュレーションにより実験を代替し、生産性を高めている。本稿では「秤量工程」「混合工程」「輸送工程」といった3つの工程について粉体シミュレーションによって実際のプロセスを改善した事例を紹介いただいた。いずれの事例も実プロセスを可視化することで生産性の改善に寄与しており、同社においても粉体シミュレーションを活用する場面が増えることが期待されている。一方で、粉体シミュレーションでは実粒子をそのまま扱うことができないことから、実際の製品開発に要求される微視的な物理現象に対しては今後の検討課題とされている。同社ではAIや画像解析に基づくサロゲートモデルの活用なども取り入れており、実際のプロセスデータを反映した粉体シミュレーションの技術開発に期待したい。

「DEMシミュレーションによるポットブレンダーの混合機構の解明と最適設計」と題して、**国研産業技術総合研究所地質調査総合センターの綱澤有輝氏**に執筆いただいた。

混合機内での粉体の挙動は運転条件や原料の物性に大きく左右され、混合プロセスの最適化は未だ経験に依存する状態にある。複数ある混合機の中でも、特に軸方向の混合能力を向上させるために開発されたポットブレンダーが注目されている。ポットブレンダーは、回転や揺動運動を組み合わせることで複雑な混合機構を実現しているが、混合メカニズムは十分に解明されていない。そこで、混合メカニズムの解明に離散要素法による粉体シミュレーションで、ポットブレンダーの混合機構の解明や混合性能の評価に取り組まれており、これにより混合プロセスの理解と最適化が進められることが期待される。ポットブレンダーは回転運動と揺動運動を組み合わせる混合機である。ポットブレンダーの混合過程について粉体粒子を色分けして表現することで、回転運動に対して対流混合が進む過程が示されている。揺動運動による速度勾配の評価からせん断混合が進む過程も示されており、ポットブレンダーにおいては、対流混合とせん断混合の二つの混合メカニズムにより混合が進むことが示されている。今回ご紹介いただいた事例はラボスケールでの課題にフォーカスしたものであるとのことであるが、粉体シミュレーションから得られる知見を、実験によって得られる経験則と組み合わせることで、混合プロセスの解明につながるものである。実験では得られない知見を得ることができる粉体シミュレーションのさらなる活用を期待したい。

以上、粉体シミュレーションにおける最新の技術開発の動向や適用事例を取り上げさせていただいた。共通点としては、いずれの事例においても、実験と粉体シミュレーションで同様の条件では、粉体シミュレーションも実験結果を十分に再現することが可能であることが示されており、粉体シミュレーションの技術開発が飛躍的に成長していることが感じられた。更なる精度向上には、微粉の取り扱いや、マイクロな領域における粉体挙動のモデル化が必要であり、今後の研究開発の動向に注目したい。