

令和 6 年 6 月 2 日現在

機関番号：12601

研究種目：国際共同研究加速基金（国際共同研究強化）

研究期間：2018～2023

課題番号：17KK0110

研究課題名（和文）高精度金型設計のための粉体成形シミュレーション技術の実証

研究課題名（英文）Demonstration of Computational Granular Dynamics Simulation Technology for High-Precision Mold Design

研究代表者

酒井 幹夫（Sakai, Mikio）

東京大学・大学院工学系研究科（工学部）・教授

研究者番号：00391342

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 11,700,000円

渡航期間： 6ヶ月

研究成果の概要（和文）：粉体シミュレーションの産業応用は、国際的に注目されている研究テーマであり、計算工学や化学工学に係わる多数の国際会議においてセッションが企画されている。本研究では粉末金型充填に注目する。今日の粉体成形技術は、職人の経験に支えられており、技術継承が困難となることが指摘されている。この問題を解決するために、コンピュータシミュレーションの粉体成形技術への応用が期待されている。そこで、試作品を製作しなくても高精度な金型設計が可能となる革新的なシミュレータを開発する。申請者らの独自技術を組み合わせた新しい数値解析モデルを新たに開発するとともに、その妥当性を確認する。

研究成果の学術的意義や社会的意義

今日の粉体成形技術は、職人の経験に支えられており、技術継承が困難となることが指摘されている。この問題を解決するために、コンピュータシミュレーションの粉体成形技術への応用が期待されている。そこで、本研究では、申請者が独自開発した計算モデルを組み合わせて、試作品を製作しなくても高精度な金型設計が可能となる革新的なシミュレータを開発する。

研究成果の概要（英文）：The industrial application of granular flow simulation is a research topic that has attracted international attention, and hence lots of sessions have been organized at numerous international conferences on computational and chemical engineering. In this study, we focus on powder die filling. It has been noted that current powder die-filling technology relies heavily on the expertise of engineers, making it difficult to transfer this knowledge. To resolve this issue, computer simulation is expected to be applied to the powder die-filling. In this study, we develop an innovative simulator that enables high-precision mold design without the need to fabricate prototypes. A new numerical analysis model combining the applicant's original technologies is planned to be developed and to perform validation tests.

研究分野：計算科学

キーワード：離散要素法 Discrete Element Method DEM 粉体シミュレーション 粒子法 DEM-CFD 数値流体力学
工業製品

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属します。

1. 研究開始当初の背景

粉体シミュレーションの産業応用は、国際的に注目されている研究テーマであり、計算工学や化学工学に係わる多数の国際会議においてセッションが企画されている。本研究では、粉体の金型充填に注目している。今日の粉末金型充填（特に、金型設計）は、職人の経験に支えられており、技術継承が困難となることが指摘されている。この問題を解決するために、コンピュータシミュレーションの応用が期待されている。そこで、本研究では、試作品を製作しなくても高精度な金型設計が可能となる革新的なシミュレータを開発する。Discrete Element Method (DEM)とComputational Fluid Dynamics (CFD)を連成した固体-流体連成シミュレーション手法に、研究代表者のグループで独自開発した計算モデル（Signed Distance Function (SDF)、Immersed Boundary Method (IBM)、Coarse-grained DEM、など）を組み合わせたシミュレータを新規に開発するとともに、その妥当性確認を行う。

先に述べたように、これまで職人が行ってきた経験に基づく金型設計の技術継承が困難なため、産業界では、実際の粉末金型充填機において、機器の形状・動作および実際の粒子物性を反映して、粉末金型充填の現象の理解や運転条件の最適化に使用できるような革新的なコンピュータシミュレーション技術の開発が求められている。このような革新的なコンピュータシミュレーション技術に関する研究を行うために、英国・University of Surrey の Chuan-Yu Wu 教授、英国・Imperial College London の Jiansheng Xiang 博士、中国・浙江大学の Kun Luo 教授および豪州・Monash University の Zongyan Zhou 上級講師と連携する。このように基課題の研究を発展することにより、DEM-CFD 法により粉末金型充填の現象を精度良く模擬できるようなコンピュータシミュレーション技術の実現を目指す。

2. 研究の目的

産業の粉末金型充填の数値シミュレーションに向けて、大規模体系を実行するための DEM 粗視化モデルおよび非球形粒子のモデル化に関する研究を行う。英国・University of Surrey の Chuan-Yu Wu 教授のグループに滞在して、粉末金型充填の妥当性確認の体系・実験装置の検討のために連携する。英国・Imperial College London の Jiansheng Xiang 博士の所属する Applied Modelling and Computation Group に滞在して、非球形粒子モデルについて議論する。中国・浙江大学の Kun Luo 教授のグループに滞在して、IBM および DEM の粗視化の詳細なモデリングについて議論する。豪州・Monash University の Zongyan Zhou 上級講師の所属する SIMPAS (Simulation and Modelling of Particulate Systems) グループに滞在して、非球形粒子モデルについて議論する。

3. 研究の方法

(1) 固体-流体連成シミュレーション

産業の粉末金型充填では、対象となる固体粒子の粒子径が小さかったり（例えば、 $100\ \mu\text{m}$ 程度）、低密度（例えば、 $1500\ \text{kg/m}^3$ ）であったりするため、固体粒子は金型内部の気流の影響を受けることが知られている。また、粉末充填時に粉箱が移動するため、粉末金型充填の数値シミュレーションでは、移動壁を考慮した固体-流体連成シミュレーションを実行する必要がある。

(2) DEM 粗視化モデル

DEM 粗視化モデルは、DEM のスケーリング則モデルであり、オリジナル体系の固体粒子群を大きなモデル粒子で代表して計算するものである。DEM 粗視化モデルでは、オリジナル粒子群と粗視化粒子の間で全エネルギーが一致するようにモデル化がなされている。

(3) DEM の非球形粒子モデリング

DEM の非球形粒子モデリングとして、楕円体粒子モデル、粒子結合モデルおよび多面体モデルがある。粒子結合モデルおよび多面体モデルは、粒子形状を柔軟に模擬することができるが、計算コストが大きくなってしまう。楕円体粒子モデルは粒子形状を関数で与えるため、粒子結合モデルおよび多面体モデルに比べて計算コストが低く、物理モデルの拡張性が高い。

4. 研究成果

粗視化モデルを導入した DEM-CFD 法の粉末金型充填シミュレーションおよび楕円体粒子モデルを用いた DEM シミュレーションの研究成果について述べる。

まず、粗視化モデルを導入した DEM-CFD 法の粉末金型充填シミュレーションについて述べる。粉末金型充填では、移動する粉箱（壁面境界）から落下する固体粒子の挙動が気体の流れに影響されるため、移動壁境界を考慮した固体-流体間相互作用を模擬する必要がある。DEM-CFD シミュレーションは、固体-流体連成シミュレーションに広く利用されており、その妥当性は極めて多くの研究によって証明されている。一方、既存の DEM-CFD 法では、粉箱のような移動する壁面境界が存在する場合、固体粒子と流体を同時に模擬することは極めて困難である（移動する壁面境界を模擬するには、計算格子の再生成などが必要になるため）。さらに、既存の DEM-

CFD 法では、1 台の PC で莫大な計算粒子数を模擬することができない。そのため、DEM-CFD 法を産業の粉末金型充填に応用するには、移動する壁面境界のモデリングと莫大な数の計算粒子のモデリングを同時に行う必要がある。研究代表者のグループでは、任意形状の壁境界モデル (SDF と IBM を採用) と DEM のスケーリング則モデルの DEM 粗視化モデルを統合した DEM-CFD 法を開発している。本研究では、SDF/IBM および DEM 粗視化モデルを導入した DEM-CFD 法の粉末金型充填への適用性を検討している。具体的には、DEM 粗視化モデル (粗視化率を 2 および 3 に設定) によりオリジナル粒子体系の粉末金型充填を模擬できることを示す。DEM 粗視化モデルにより、実際よりも大きなモデル粒子を使用してもオリジナル粒子体系のマクロ挙動 (固体粒子の空間配置 (時間変化)、粉箱の中でスプラッシュ、金型への粉体の充填量および金型内部の圧力分布) を模擬できることを確認している。このようにして、SDF および IBM を用いた壁境界モデルおよび DEM 粗視化モデルは、産業の粉末金型充填の数値シミュレーションにおいて有効であることが示されている。

次に、楕円体粒子モデルを用いた DEM シミュレーションの妥当性確認について述べる。近年、DEM シミュレーションを用いて粉体の混合評価や粉体混合のメカニズム解明がなされている。DEM を用いた粉体混合では、計算粒子の形状は球体でモデル化がなされ、円筒容器のような極めてシンプルな形状の混合機に応用されている。一方、産業で取り扱う粒子の形状は、当然ながら、球体とは限らない。さらに、産業で用いられる混合機の構造はかなり複雑と言える。このため、DEM を用いて産業で使用される混合機の粉体混合評価をしようとする、粒子形状のモデリングと混合機の複雑な構造のモデリングを行う必要がある。本研究では、産業の混合機において非球形粒子の粉体混合を模擬するための計算モデルを提案する。本研究では、DEM において非球形粒子を楕円体の方程式でモデル化し、産業用の混合機を SDF でモデル化する (以下、楕円体粒子 DEM/SDF と記す)。本研究では、SDF を用いた壁面境界モデルの楕円体粒子 DEM への適用性と楕円体粒子 DEM/SDF における線形バネの適用性を検討するための妥当性確認 (既存実験との比較) を行っている。回転円筒容器内の長球粒子と扁球粒子の粒子流れを楕円体粒子 DEM/SDF により実行している。シミュレーションにおいて、楕円体粒子 DEM/SDF のバネ定数 (線形バネ) をパラメータとし、線形バネの値を $1.0 \times 10^3 \text{ N/m}$ から $1.0 \times 10^6 \text{ N/m}$ に変化させている。楕円体粒子 DEM/SDF のシミュレーション結果は実験結果とよく一致していることを確認している他、バネ定数を上記の範囲で変化させても楕円体粒子のマクロ挙動にほとんど影響がないことも確認している。このようにして、楕円体粒子 DEM/SDF が SDF を壁境界として使用できること、および楕円体粒子 DEM/SDF に線形バネを使用できることを示している。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計12件（うち査読付論文 12件／うち国際共著 2件／うちオープンアクセス 7件）

1. 著者名 SAKAI Mikio	4. 巻 69
2. 論文標題 Development of Fundamental Technologies on Computational Granular Dynamics towards Construction of a Digital Twin for Powder Compaction Process	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Journal of the Japan Society of Powder and Powder Metallurgy	6. 最初と最後の頁 490 ~ 495
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2497/jjspm.69.490	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -
1. 著者名 Shi Qi, Sakai Mikio	4. 巻 35
2. 論文標題 Numerical study on the effect of airflow on powder mixing in a container blender	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Physics of Fluids	6. 最初と最後の頁 013329 ~ 013329
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/5.0133547	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -
1. 著者名 Li Shuo, Duan Guangtao, Sakai Mikio	4. 巻 33
2. 論文標題 POD-based identification approach for powder mixing mechanism in Eulerian-Lagrangian simulations	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Advanced Powder Technology	6. 最初と最後の頁 103364 ~ 103364
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.appt.2021.11.016	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -
1. 著者名 Mori Yuki, Sakai Mikio	4. 巻 429
2. 論文標題 Advanced DEM simulation on powder mixing for ellipsoidal particles in an industrial mixer	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Chemical Engineering Journal	6. 最初と最後の頁 132415
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.cej.2021.132415	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Tsugeno Yoshiharu, Sakai Mikio, Yamazaki Sumi, Nishinomiya Takeshi	4. 巻 32
2. 論文標題 DEM simulation for optimal design of powder mixing in a ribbon mixer	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Advanced Powder Technology	6. 最初と最後の頁 1735 ~ 1749
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.appt.2021.03.026	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 森勇稀、酒井幹夫	4. 巻 56
2. 論文標題 セラミックス粉体成形加工プロセスのサイバーフィジカルシステム構築に向けた粉体シミュレーション技術	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 セラミックス	6. 最初と最後の頁 694-699
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Mori Yuki, Takabatake Kazuya, Tsugeno Yoshiharu, Sakai Mikio	4. 巻 372
2. 論文標題 On artificial density treatment for the pressure Poisson equation in the DEM-CFD simulations	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Powder Technology	6. 最初と最後の頁 48 ~ 58
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.powtec.2020.05.116	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Mori Yuki, Sakai Mikio	4. 巻 406
2. 論文標題 Development of a robust Eulerian-Lagrangian model for the simulation of an industrial solid-fluid system	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Chemical Engineering Journal	6. 最初と最後の頁 126841
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.cej.2020.126841	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Widartiningsih Putri Mustika, Mori Yuki, Takabatake Kazuya, Wu Chuan-Yu, Yokoi Kensuke, Yamaguchi Akira, Sakai Mikio	4. 巻 in press
2. 論文標題 Coarse graining DEM simulations of a powder die-filling system	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Powder Technology	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.powtec.2020.05.063	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Takabatake Kazuya, Sakai Mikio	4. 巻 in press
2. 論文標題 Flexible discretization technique for DEM-CFD simulations including thin walls	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Advanced Powder Technology	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.appt.2020.02.017	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Sakai Mikio, Mori Yuki, Sun Xiaosong, Takabatake Kazuya	4. 巻 37
2. 論文標題 Recent Progress on Mesh-free Particle Methods for Simulations of Multi-phase Flows: A Review	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 KONA Powder and Particle Journal	6. 最初と最後の頁 132 ~ 144
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.14356/kona.2020017	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている(また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Yuki Mori, Chuan-Yu Wu, Mikio Sakai	4. 巻 343
2. 論文標題 Validation study on a scaling law model of the DEM in industrial gas-solid flows	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Powder Technology	6. 最初と最後の頁 101-112
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.powtec.2018.11.015	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

〔学会発表〕 計23件（うち招待講演 17件 / うち国際学会 12件）

1. 発表者名 Mikio SAKAI
2. 発表標題 State-of-the-art DEM modeling towards realization of CPS based pharmaceutical manufacturing processes
3. 学会等名 International Powder and Nanotechnology Forum 2022（招待講演）（国際学会）
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 酒井幹夫
2. 発表標題 不連続体を対象としたマルチフィジックスシミュレーションとその産業応用
3. 学会等名 日本原子力学会 2023年春の年会 炉物理部会セッション（招待講演）
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Mikio SAKAI
2. 発表標題 State-of-the-art modeling of computational granular dynamics for a simulation-based digital twin
3. 学会等名 9th World Congress on Particle Technology（招待講演）（国際学会）
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Mikio SAKAI
2. 発表標題 Core technologies for realization of the DEM based cyber-physical system
3. 学会等名 International Multiphase Flow Technology Forum（招待講演）（国際学会）
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Mikio SAKAI
2. 発表標題 On computational granular dynamics based digital twin: core technologies in the DEM
3. 学会等名 International Conference on the Characterization and Control of Interfaces for High Quality Advanced Materials 2022 (ICCCI2022)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Mikio Sakai
2. 発表標題 Future modeling and simulation for CPS based powder system
3. 学会等名 8th Asian Particle Technology Symposium APT2021 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 森勇稀, 高畑和弥, 柘野善治, 酒井幹夫
2. 発表標題 DEM-CFD法におけるdensity scaling法の有効性検証
3. 学会等名 化学工学会 第51回秋季大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 森勇稀, 酒井幹夫
2. 発表標題 FELMIによる固気混相流シミュレーションとその妥当性検証
3. 学会等名 第26回流動化・粒子プロセッシングシンポジウム
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 酒井幹夫
2. 発表標題 最先端粉体シミュレーション技術：理論および産業応用
3. 学会等名 国際粉体工業展東京2020（招待講演）
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 柘野善治、高畑和弥、酒井幹夫
2. 発表標題 DEM-CFDシミュレーションによるロータリー粉末金型充填の最適化設計
3. 学会等名 日本混相流学会混相流シンポジウム2020
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 柘野善治、高畑和弥、酒井幹夫
2. 発表標題 DEM-CFDシミュレーションのロータリー式打錠機への応用
3. 学会等名 化学工学会 第51回秋季大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 M. Sakai
2. 発表標題 On signed distance function based wall boundary model in the DEM simulation
3. 学会等名 PGBSIA 2020（招待講演）（国際学会）
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 M. Sakai
2. 発表標題 State-of-the-art modeling for DEM simulations toward virtual manufacturing
3. 学会等名 APCOM2019 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 M. Sakai
2. 発表標題 Recent progress on industrial DEM simulations: challenges and opportunities
3. 学会等名 International Powder and Nanotechnology Forum 2019, INCHEM TOKYO 2019 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 酒井幹夫
2. 発表標題 粉体シミュレーション技術とその未来展望
3. 学会等名 粉体工業展大阪2019 (招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 酒井幹夫
2. 発表標題 粉体・混相流の数値シミュレーションにおける革新的要素技術の開発
3. 学会等名 粉体工学会秋期研究発表会 (招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 酒井幹夫
2. 発表標題 最先端粉体シミュレーション技術の医薬品製造工程への応用
3. 学会等名 製剤機械技術学会第29回大会 (招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 M. Sakai
2. 発表標題 Innovative granular flow modeling for industrial systems
3. 学会等名 18th Asian Pacific Confederation of Chemical Engineering (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 M. Sakai
2. 発表標題 Development and applications of the discrete element method for food and pharmaceutical industries
3. 学会等名 The 2nd International Conference and Exhibition on Powder Technology Indonesia (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 M. Sakai
2. 発表標題 Development and application of innovative discrete element modelling for industrial systems
3. 学会等名 7th UK-China International Particle Technology Forum (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 M. Sakai
2. 発表標題 DEM simulations for pharmaceutical engineering
3. 学会等名 8th International Conference on Discrete Element Methods (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 M. Sakai
2. 発表標題 Development and Application of Flexible Eulelian-Lagrangian Method for Industrial Gas-Solid Flow Systems
3. 学会等名 Fluidization XVI (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 高畑和弥, 酒井幹夫
2. 発表標題 薄板を有する固気混相流体系のモデリングと妥当性検証
3. 学会等名 粉体工学会 2019年度春期研究発表会
4. 発表年 2019年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
---------------------------	-----------------------	----

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8 . 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関			
英国	インペリアル・カレッジ・ロンドン			
英国	サリー大学			
英国	インペリアル・カレッジ・ロンドン			
英国	サリー大学			
豪州	モナッシュ大学			
中国	浙江大学			
英国	インペリアル・カレッジ・ロンドン			
英国	サリー大学			