

# SPH法による粒状多孔質体成形過程における空隙率の推定

Estimating the Porosity in Granular Porous Material Forming Process by SPH Method

呂学龍<sup>1)</sup>, 松井和巳<sup>2)</sup>

Xuelong Lyu and Kazumi Matsui

1)横浜国立大学 環境情報研究院 博(工) (〒240-8501 神奈川県横浜市保土ヶ谷区常盤台79番7番,

E-mail: lu-xuelong-tc@ynu.ac.jp)

2)横浜国立大学 環境情報研究院 准教授 (〒240-8501 神奈川県横浜市保土ヶ谷区常盤台79番7番,

E-mail: kzm@ynu.ac.jp)

In this paper, we used the SPH method to model granules as aggregates of particles. Tortuosity is calculated by random walk method, considering the contact rate after plastic deformation of granules. Estimated the porosity in the granular porous material forming process from the calculated tortuosity. We confirmed the validity in a complex gear model.

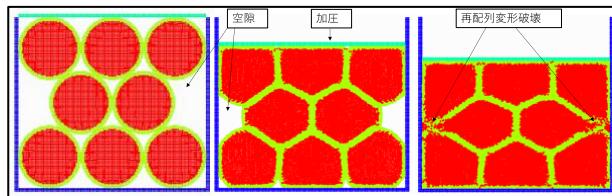
**Key Words :** SPH, Tortuosity, Porosity, Random walk, Plastic deformation, Granule, Porous material

## 1. はじめに

粉体成形加工には、原料となる金属、セラミックス、樹脂などが含まれている。これらの原料を所望する形状に充填し、加圧し密着した物体に転換する。得られる成形体の良し悪しは最終製品の品質に影響する[1]。成形プロセスの科学的解明および学問的体系化が進み、原料の調製や成形特性との関係を追求する研究が活発に行われている[1], [2]。

工業界において、製品形状の複雑化が進み、技術開発や設計の段階で実験への依存を減らし、経費削減のため、数値シミュレーションを技術の中へ取り込むことが盛んに行われている。広範囲の粉粒体の力学的挙動を表現できる数値解析モデルは、離散要素法(Discrete Element Method)を代表する非連続体的力学やMPS法(Moving Particle Simulation Method), SPH法(Smoothed Particle Hydrodynamics)を代表する連続的力学手法があげられる[3], [4], [5], [6]。

筆者らは、SPH法を用いて加圧成形に着目し、顆粒塑性変形を引き起こす降伏圧力から一次粒子の崩壊する圧力の間における成形特性を、複数パーティクル構成する個々顆粒特性と結ぶ検討[Fig.1]を行っている。



(I)初期充填 (II)充填層変形 (III)成形体

Fig.1 顆粒充填層の圧密変形過程(SPHパーティクル)

初期充填状態(I)では顆粒間に大きな空隙が存在する。圧力增加に伴い、個々の顆粒が再配列および弾性変形により、

顆粒間の空隙が減少する(II)。さらに圧力が増加すると、顆粒の塑性変形および破壊が発生し空隙が減少する(III)。つまり、圧密特性(再配列および塑性変形)、顆粒特性(形状、粒子径、密度)は成形挙動に影響する。特に空隙率は成形体密度や焼成時障害に関係する。

また、近年燃料電池は大きく期待され、中でも固体酸化物形燃料電池(Solid Oxide Fuel Cell, 以下 SOFC)の性能向上、耐久性評価において、電極微細構造(混合多孔質で構成されている)から電池性能予測する手法として、空隙率を閏数とする屈曲率、屈曲度ファクター推定モデルが提案されている。しかし、現状ではその精度改善が必要である[7]。

本稿では、SPH(粒子)法を用いて、顆粒をパーティクルの集合体としてモデル化し、顆粒の塑性変形後の接触率を加味したランダムウォークにより、屈曲率を算出し粉体成形プロセスにおける空隙率の推定手法を提案する。

## 2. 粉体顆粒のモデリング

SPH法は連続的力学数値解析手法で、流体、固体解析へ広く応用されている[4], [5], [8], [9]。本研究では、型内に充填した顆粒層の加圧による状態変化をFig.1, Fig.2で示すように顆粒内空隙なく、顆粒の表面にコーティング剤も含め、基本パーティクルによりモデル化する。

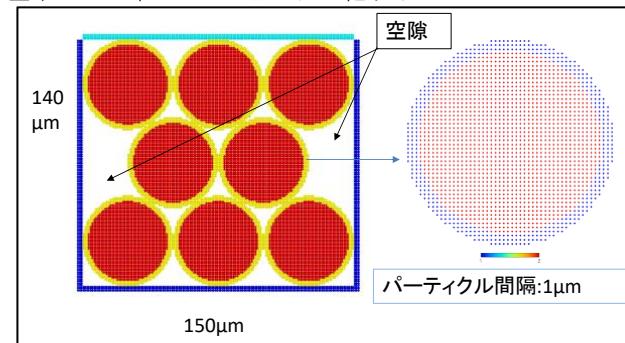


Fig.2 顆粒のSPHパーティクルモデル

Fig.2に示された顆粒は、2次元、単一顆粒でのモデル化

である。3次元ギアモデルに対しても、多成分顆粒として同様な手法で扱うことができる。

### 3. 屈曲率と空隙率

#### (1) 屈曲率の基本と数理特性

幾何学的な概念に基づき、粒状多成分多孔質体の屈曲率 $\tau$ は次式に定義される(Fig.3参照) [10], [11], [12]。

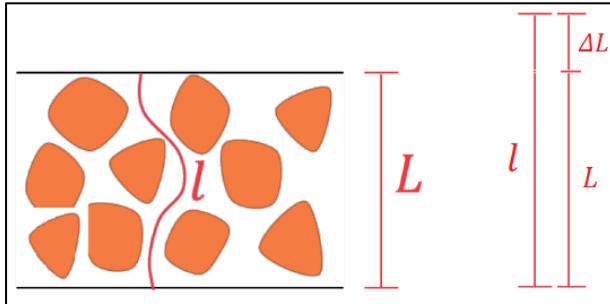


Fig.3 幾何学的屈曲率の定義(顆粒充填断面模式図)

$$\tau = \frac{l}{L} = \frac{\Delta L + L}{L} \quad (1)$$

ここで、Lは粒状多成分多孔質体の層厚、lは隙間構造に基づく実質的な経路の長さ、 $\Delta L$ はその差である。

多孔質体の隙間構造はFig.3で示したように、 $L < l$

となる。Boudreau[13]は空隙率を $\phi$ として、屈曲率 $\tau$ は次式を満たすべきと指摘した。

$$\tau^2 \geq 1 \quad (2)$$

$$\lim_{\phi \rightarrow 1} \tau = 1 \quad (3)$$

#### (2) 空隙率を関数とする屈曲率の推定モデル

空隙率により屈曲率を推定するモデルは多数存在する。本研究と同様球形の顆粒を仮定し導出されているMillington[14]とWeissberg[15]のモデルは以下のように示される。

$$\tau = \sqrt{\phi^{1/3}} \quad (4)$$

$$\tau = \sqrt{1 - 0.5 * \ln(\phi)} \quad (5)$$

また、幾何学形状を決める定数もモデル化したKozeny-Carmanモデル[15]も非常に有名である。

$$k = \frac{d^2 \phi^3}{180(1-\phi)^2} \quad (6)$$

ここで、dは空隙形の形状に寄与するパラメータ、kは浸透性であり屈曲率に相当する。

#### (3) ランダムウォークによる屈曲率の推定モデル

ランダムウォーク法は、電気化学の分野[16]だけではなく、地下水学の分野[17]など、様々な分野で使用されている。粒状多孔質体において、構造体の中心付近に開始点を配

置し顆粒(障害物)を避けながら進んだ平均二乗変位と顆粒(阻害物)の一切ない自由空間でランダムウォークした時に進んだ平均二乗変位の比率から算出する。

### 4. 提案手法

本研究では、Fig.1とFig.3で示したように、多成分粒状構造体の中心付近に開始点を配置し顆粒(障害物)を避けながらランダムウォークし屈曲率を算出する。

また、顆粒構造はプレス工程などの影響から材料の変形後の接触率も加味して計算する。

複数個SPHパーティクル構成する多成分顆粒を内外判定しながら、ランダムウォークし屈曲率を算出する。式4、式5を用いて、空隙率を逆解析により算出する。比較するため、すべてのSPHパーティクルを探索し空隙の体積比も算出する。

### 5. 検証モデルと結果

提案手法の妥当性を検証するため、様々な形状Table.1に示すような形状で、単一パーティクル間隔で充填し、屈曲率 $\tau$ と空隙率 $\phi$ の数理的特性を表す式2と式3について、確認した屈曲率1.021~1.025、空隙率0.010~0.015という結果になった。

3成分顆粒を用いて、ランダム生成、充填後、屈曲率と空隙率も妥当の結果が得られた。

		Porosity	Tortuosity	Millington	Weissberg
	単一パーティクル	0.013	1.021	2.040	1.771
	3成分顆粒	0.490	1.582	1.126	1.164
	単一パーティクル	0.015	1.040	1.638	1.574
	3成分顆粒	0.439	1.565	1.146	1.187
	単一パーティクル	0.010	1.025	2.153	1.816
	3成分顆粒	0.445	1.551	1.144	1.185

Table.1 空隙率と屈曲率の比較表

多成分顆粒をギアの形状にランダムに生成し、一方向加圧し10mmプレス加工を行う。

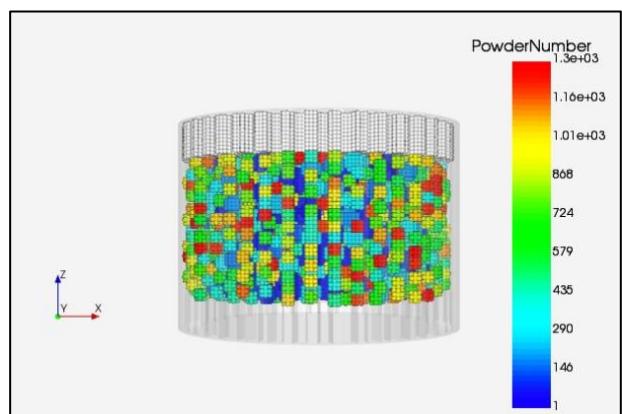


Fig.4 検証モデル(3成分顆粒を型内にランダム生成)  
パーティクル間隔0.5mm、総パーティクル数は282,496

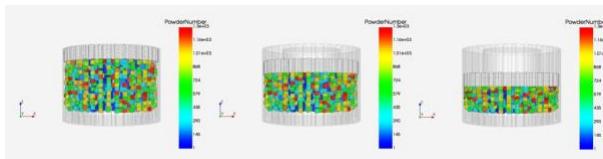


Fig.5 塑性変更後顆粒分布状態

初期の空隙率は0.490,5mm, 10mmプレスされた時は0.407,0.271である。圧縮成形により空隙率が減少されている。

加圧成形体の屈曲率 $\tau$ と空隙率 $\phi$ の関係も妥当な結果となった。

## 6. まとめ

本研究では、SPH(粒子)法を用いて、顆粒をパーティクルの集合体としてモデル化し、顆粒の塑性変形後の接触率を加味したランダムウォークにより、屈曲率を算出し、逆解析により粉体成形プロセスにおける空隙率の推定手法を提案した。多数の形状にて定量的に本手法の妥当性を確認した。また、同間隔パーティクルでモデル化の関係で、形状再現性が欠けているため、精度に影響あると考えている。今後顆粒内空隙モデルの構築、SOFCの導電性、充放電による劣化、顆粒分布との関係を検討していく予定。

## 参考文献

- [1] 磯西和夫,上野友之他:粉体成形-粉体加工による機能と形状の作り込み-,コロナ社,2018.
- [2] 粉体工学会:粉体の生成,日刊工業社,2005.
- [3] 田中敏嗣: 粒子流動のDEM-CFDシミュレーション技術, Journal of the Japan Society for Precision Engineering, Vol.84,No.7,2018.
- [4] 後藤仁志:粒子法 連続体・混相流・粒状体のための計算科学,森北出版株式会社,2020.
- [5] 浅井光輝:明快粒子法 SPH,MPS,DEMの理論と実践, 丸善出版,2022.
- [6] 酒井幹夫他:粉体の数値シミュレーション,丸善出版,2012.
- [7] 三好航太: 多孔質で構成される固体酸化物形燃料電池電極中における気体の核酸現象, エネルギー・資源, Vol.35,No.4,2014.
- [8] 呂学龍:SPH法による衝撃解析,横浜国立大学,博士論文, 2011.
- [9] J.Bonet,T.-S.L.Lok: Varational and momentum preservation aspects of Smooth Particle Hydrodynamics formulations,Comput. Methods Appl. Engrg. 180,77-115,1999.
- [10] Azara,jj.H.,Jawaherian.A.,Pishvaie.M.R.,Nabi-bidhend.M: An approach to defining tortuosity and cementation factor in carbonate reservoir rocks. Journal of Petroleum Science and Engineering. Vol.60, No.2, pp.125-131,2008.
- [11] Koponen.A.,kataja.M.,Timonen. J., Kokusho.T.: Tortuous flow in porous media, Physical Review E,Vol.54,No.1, pp. 406-410,1996.
- [12] Boudreau.B.P.:The diffusive toruosity of fin-grained unlithified sediments,Geochimica et Cosmochimica Acta, Vol.60,No.16,pp.3139-3142,1996.
- [13] Millington.R.J.:Gas diffusion in porous media.Science.Vol.130,pp.100-102,1959.
- [14] Weissberg.H.: Effective diffusion coefficients in porous media , Journal of Applied Physics,Vol.34,pp.2636-2639,1963.
- [15] Lee B. Porter,et al.: The Kozeny-Carman Equation with a Percolation Threshold,GROUND WATER January-February,Vol.51,No.1,pp.92-99,2013.
- [16] G. Inoue and M. Kawase:Numerical and experimental evaluation of relationship between porous electrode structure and effective conductivity of ions and electrons in lithiumion batteries,Journal of Power Sources,pp 476-488,2017.
- [17] 渡辺慶規,中島善人:多孔質媒体の屈曲度の計算のための2次元ランダムワークプログラム,地下水学会誌,43巻 1号,pp.13-22, 2001.