

[Chem. Pharm. Bull., 27, 3061 (1979)]

**Simulation of Agglomeration [Random Coalescence Model]**

HISAKAZU SUNADA\*, AKINOBU OTSUKA\*, YOSHIAKI KAWASHIMA,  
HIDEO TAKENAKA

**造粒のコンピュータシミュレーション (ランダム凝集モデル)**

砂田久一\*, 大塚昭信\*, 川島嘉明, 竹中英雄

粉体の造粒プロセスの改善には、粒子の凝集現象の適切な把握が必要である。粒子の凝集機構は複雑で、実験的なアプローチを行うには、パラメータが多すぎる。そこで、種々のモデルを考案して電子計算機によって、粒子を凝集させて、パラメータを整理する方法を考案した。

本研究では粉体の造粒過程を二次元合一モデルによりコンピュータシミュレーションした。最初単位粒子として、1から100まで番号をつけた等しい直径を有する100個の円板を用意し、次に2個の円板を無作為に選び衝突させた。2個の円板が合一するか否かはコンピュータで発生させた乱数が凝集確率(P)より大きいか否かによって判定した。ここで、凝集確率(P)を(1)式で定義した。

$$P = \frac{2}{D_s^{n+1}} \dots \dots \dots (1)$$

ここでは  $D_s$  は衝突粒子の内、粒子径が小さい方の粒子の直径で  $n$  は定数である。本式の意味する所は造粒過程が、衝突粒子の小さい方の粒子の凝集力によって決まり、かつ粒子径が小さい程、造粒速度が速い事を示している。合一して得た粒子の番号は、衝突粒子の内のいずれかの番号と一致させて残りの粒子はそのまま系内に残すことにした。この方法によって系内の粒子の総数は常に100個に保たれる。このようにして得たフロックの平均粒子径 ( $D_t$ ) は平衡 ( $D_{eo}$ ) に達するまで、造粒時間と共に増大する。本モデルによる粒子の生長過程は一次速度式で表わされることが判明した。Fig に  $n$  を種々変化させた場合の造粒速度過程を示す。

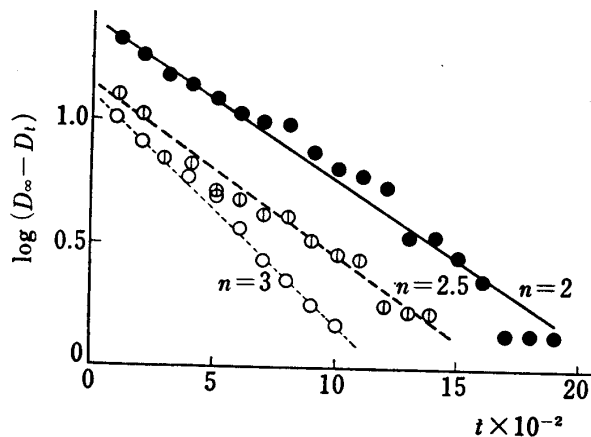


Fig. Applicability of a First-order Rate Equation

$$P = 2/(D_s^{n+1})$$

\* 名城大学薬学部