

粉末冶金への粉体シミュレーションの適用

Application of Powder Simulation to Powder Metallurgy

大塚 順*
Jun Otsuka

齋藤 達哉
Tatsuya Saito

三島 英彦
Hidehiko Mishima

粉末冶金製品に求められる高い寸法精度への要求に応えるべく、製造プロセスの設計支援として粉体シミュレーション技術の開発に取り組んできた。粉体シミュレーションは、粉体を構成している個々の粒子の運動を計算することにより、粉体の挙動をマクロに解釈するためのものである。本報告では原料粉末の粉碎工程、金属粉末の給粉工程に対して適用した事例を紹介する。粉碎効率はボールミルに投入されるボール同士の衝突エネルギーから予測できるが、衝突エネルギーを精度良く予測するには個々のボールについて複雑な衝突過程を伴う運動を正確に再現する必要があるため、スーパーコンピュータを利用することで膨大な数が投入されるボールの運動を解析できるようにした。今回、粉碎性の改善を目指して、粉碎条件を変更したときの衝突エネルギーの変化を予測する解析技術を開発した。また、給粉工程の課題である金型内の充填ばらつきが発生するメカニズムの解明を目指して、給粉過程の粉末挙動を可視化する解析技術も開発した。

In order to meet the demand for high dimensional accuracy in powder metallurgy products, we have been developing powder simulation techniques to support the design of the production process. Powder simulations provide a macroscopic interpretation of powder behavior by calculating the motion of individual particles that constitute the powder. In this paper, the powder simulation is applied to the milling process of raw powder and the powder feeding process of metal powder. Although the milling efficiency can be predicted from the collision energy of the balls in a ball mill, it is necessary to reproduce the motion of each ball with complicated collision process to predict the collision energy accurately. In this study, we have developed an analysis technique to predict the change of the collision energy when the milling conditions are changed, in order to improve the performance of the milling process. We have also developed an analytical technique to visualize the powder behavior in the powder feeding process to clarify the mechanism of the filling variation in the die.

キーワード：粉末冶金、ボールミル、給粉、個別要素法、スーパーコンピュータ

1. 緒言

粉末冶金は、金属粉末を金型に入れて圧縮して固めた後、高温で焼結して製品を製造する技術であり、加工工程を大幅に削減し寸法精度の高い製品を大量生産できることから素材産業の重要技術になっている。粉末冶金の材料設計においては特に金属粉末の粒径分布を揃えておく必要があり、例えば超硬切削工具の高強度・高靱性を実現するための課題にもなっている。それゆえ、原料粉末を粉碎する工程において粒径を制御することが重要となる。また、材料設計の通りに金属粉末が得られたとしても、安定した製造工程を確立できなければ機能発現や信頼性確保ができないため、金属粉末を金型に充填するプロセスや金型設計、プレス条件なども重要である。しかしながら、実験により製造条件を最適化するには試行錯誤に多くの費用と長い時間を要してしまう。そこで、これらの打開策としてシミュレーションの活用を進めている。本稿ではシミュレーションを原料粉末の粉碎工程および金属粉末の給粉工程に対して適用した事例を報告する。

粉体挙動をシミュレートする手法として個別要素法 (DEM: Discrete Element Method)⁽¹⁾ が有望視されてい

る。これは粉体を構成する1つ1つの粒子の運動を運動方程式に基づいて追跡する手法であり、粉体の挙動を忠実に表現することができる⁽²⁾。この計算手法のアルゴリズムを図1に示す。すべての粒子に対して、作用する力からニュートンの運動方程式に基づいて運動を予測する。粒子同士が衝突したときに働く反発力の計算を簡単にするため、粒子は真球に近似して計算することが多い。個別要素法はシンプルなモデルであるが、広範なアプリケーションに適用で



図1 個別要素法 (DEM) を用いた粉体粒子の挙動シミュレーションのアルゴリズム⁽¹⁾

きる可能性を有しており、著者らは粉末冶金の各工程に対してDEMの適用可能性を検討しており、供給工程⁽³⁾、粉碎工程^{(4),(5)}、混合工程、給粉工程などのシミュレートを試みてきた。

DEMを実プロセスに適用するときの主な課題は、粒子数の膨大さに由来する計算コストの大きさである。例えば給粉工程の粉体挙動を解析するとき実際の粒径でシミュレートしようとする、粒子数が莫大になるため最新スペックのコンピュータを利用しても現実的な時間で計算を完了できない。この打開策として、粒子サイズを実際よりも拡大する、いわゆる粗視化モデルがよく使われている⁽⁶⁾。例えば、粉体を構成するすべての粒子に対する体積の総和を変化させずに粒径を2倍にすると粒子数は1/8倍に削減できるという考え方にに基づき計算コストを抑えようとする方法である。しかし、給粉シミュレーションにおいては粉体挙動が粉箱や金型の影響を受ける壁効果のため⁽⁷⁾、粉箱や金型との寸法比を大きく変えると粉体挙動を正確に表現できなくなる。そのため、実際の粉箱や金型をシミュレートするには膨大な数の粒子を計算することは避けられない。そこで、著者らはオープンソースソフトウェアのLIGGGHTS (LAMMPS IMPROVED FOR GENERAL GRANULAR AND GRANULAR HEAT TRANSFER SIMULATIONS)^{(8)~(10)}を活用した。LIGGGHTSは、複数のCPUを使用して計算する粒子を分担させる、いわゆる並列計算が可能であり、CPUの数に応じ膨大な数の粒子を計算できる。

なお、本論文の文章および図表は、著作権者である公益社団法人精密工学会の許可のもとに、精密工学会誌84巻7号607頁から610頁に掲載されている「オープンソースソフトウェアを用いた粉末冶金への個別要素法の応用について」⁽¹¹⁾から転載した。

2. 事例①：粉碎シミュレーション

2-1 粉碎性の予測方法

超硬合金は炭化物粉末及び金属粉末が主原料であり、湿式ボールミルを用いて粉碎される。ボールミルは、容器内にスラリー（粉末と液体の混合物）とボールを入れて回転し、ボール同士の衝突による機械的な力で粉碎する仕組みである。粉碎後に所定の粒径分布を得るには、粉碎条件を最適化する必要がある、検討するパラメータにはボールの条件（サイズ、投入量、硬さ）やミルの回転数、粉碎時間などがある。ここでは、ボールのサイズとミルの回転数を変更したときの粉碎性への影響を解析した事例を紹介する。

図2にボールミルを示しているが、見やすさのためにスラリーの流入・流出に関する構造などは省略した。ボールミルの容器にはボールと粉碎物が入られるが、ボール同士の衝突数がボールと容器壁面との衝突数に比べて圧倒的に多いため、粉碎性の予測はボール同士の衝突エネルギーから評価できる^{(12),(13)}。この衝突エネルギー E_w は次式で計

算できる。

$$E_w = \frac{1}{W} \sum_{j=1}^n \frac{1}{2} m v_j^2 \dots\dots\dots (1)$$

ここで、 W は粉碎物の重量、 n は衝突回数、 m はボールの質量、 v_j は他のボールまたは壁面と衝突するときの相対速度である。粉碎物が存在することでボールの運動は抵抗を受けるが、粉碎物を計算に直接含めることは計算時間の観点から困難である。そこで、粉碎物を直接計算に含める代わりに、粉碎物によるボールの動きにくさを近似的に摩擦で与える手法を考案した。実際のボール数でシミュレートするには社内で保有する解析サーバのスペックを超えてしまうため、大阪大学サイバーメディアセンターの大規模計算機システムを利用した。

粉碎性の予測は粉碎効率の実測結果と衝突エネルギーの解析結果を照合することで行う。初めに、すでに実測済みの粉碎条件に対して衝突エネルギーを解析して、相関関係を把握しておく。そして、粉碎性を予測したい粉碎条件に対して衝突エネルギーを解析し、上記の相関関係に基づき内挿補間あるいは外挿補間することで、粉碎効率を予測することができる^{(12),(13)}。

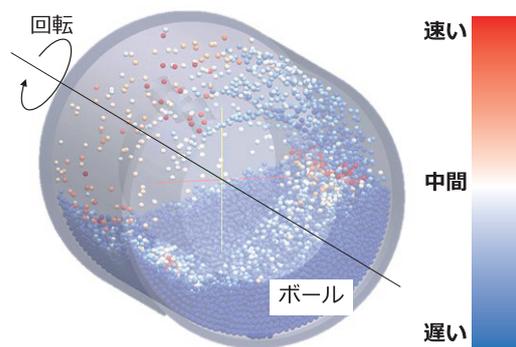


図2 ボールミルのシミュレーション。ボールは速さに応じて色付けしている。⁽¹¹⁾

2-2 粉碎解析の実行環境

LIGGGHTS (version 2.2.4) のオリジナルのソースコードをスーパーコンピュータで計算したところ、一般的なアプリケーションに関する実行性能に比べて低いパフォーマンスだった。そこで、大幅な変更を伴わない範囲でソースコードを変更してパフォーマンスの改善を図った。まず、プロファイル機能を用いて関数ごとの実行時間を計測し、実行時間が長いボトルネックを特定した。次に、ボトルネックを解消するべく、問題となる関数に対してスーパーコンピュータが演算しやすい形に計算処理を書き換えた。例えば、複数の計算処理を含む繰り返しループを分割し、個別

にループを構成して簡単化した。この結果、3.4倍のスピードアップを実現し⁽⁵⁾、所望のボールの数を扱う大規模モデルの計算を実現した。

2-3 流体抵抗のモデル化

湿式ボールミルにおける粒子の運動はスラリーから流体抵抗を受けて運動エネルギーが低下する。この相互作用を精度よく表現するため、スラリーの流れを数値流体解析で計算してDEMシミュレーションと連成させる方法が報告されている⁽¹⁴⁾。しかし、ミル内には多数のボールやスラリーの流入・流出といった内部構造が存在するため、実際の装置構造を対象とした流体解析は計算負荷が大きく実現できない。そこで、スラリーの流れの影響を近似的に表現して計算に反映する手法を採用した。これは、スラリーの流れ場を流体解析で求めて、スラリーからボールが受ける浮力 F_B 及び流体抗力 F_D を外力として考慮する手法である⁽¹²⁾。浮力 F_B および流体抗力 F_D は次式で表す。

$$F_B = gV_B\rho_s \quad \dots\dots\dots (2)$$

$$F_D = C_d A \rho_s \frac{u_r^2}{2} \quad \dots\dots\dots (3)$$

ここで、 V_B はボール体積、 C_d は抵抗係数、 A は投影面積、 ρ_s はスラリー密度、 u_r は流体とボールの相対速度である。ここで式(3)の流体抗力は、正確な流速分布に基づき力を与える必要があるが、LIGGGHTSは一定の力しか与えられない仕様であった。このままではミル内の場所により異なる流速分布を表現できない。そこで、ソースコードを変更することで流速分布を取り込めるようにして、式(2)、(3)で表される外力の計算処理を実装した。

2-4 粉砕解析の結果

ここでは、まず、ボールミルのシミュレーションによって評価が可能となった、ミル内でのボール同士の衝突エネルギーの分布について述べる。次に、ミルの条件違いによる影響調査に適用した事例を紹介する。ミルの回転速度とボールサイズを変更したときの影響として衝突頻度を評価した結果までを紹介し、粉砕性の予想に関しては割愛する。

ミルを長手方向と径方向に対して適当に5つの領域に分割し、各領域に存在するボールに対して衝突エネルギーを解析した結果を図3に示す。まず、ミル形状が衝突エネルギーの分布に対してどの程度影響するかを把握するため、流体抵抗を考慮しない場合をみると、各領域で衝突エネルギーに差異が生じていた。これはミル中でボールが動きやすい領域とそうではない領域が存在することを示している。次に流体抵抗を考慮した場合をみると、衝突エネルギーが低下する結果となった。また、ミル内の各領域で流体抵抗による衝突エネルギーの減少量が異なることが明らかとなった。

次にミルの回転速度とボールサイズを変更したときの衝突頻度を解析したので図4に示す。その結果、回転数が大きいときは衝突回数がボールサイズに比例したのに対し、

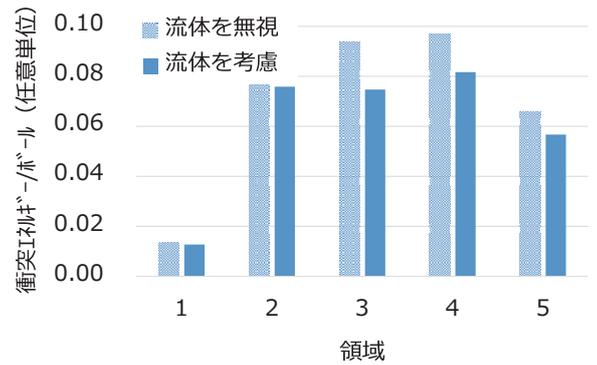


図3 ボールの衝突エネルギー⁽¹¹⁾

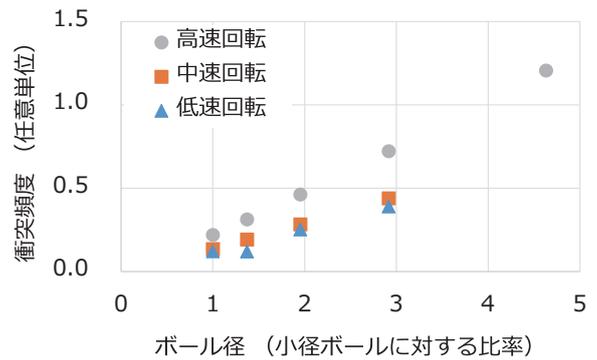


図4 衝突回数と回転数の関係⁽¹¹⁾

回転数が小さいときは衝突回数に対するボールサイズの関係は単純な比例関係から外れた。これはボールが小さいときはミルの内部構造に入り込み、ボールの運動が複雑になるためと推測される。

解析により求めた衝突エネルギーと実測により求めた粉砕効率の相関関係を調べると、Gudinらによる報告⁽¹⁵⁾で示された湿式ミルの関係とよく似た傾向となり、著者らの複雑なミル構造においても湿式ミルの特徴を反映した粉砕性の予測が可能となった。今後、粉砕条件の最適化に活用する。

3. 事例②：給粉シミュレーション

3-1 給粉の可視化方法

給粉工程では、金型上を粉箱が前後に動き、金属粉末が重力落下によりキャビティ（金型の凹部）内に充填される。寸法精度の向上には、成形体（金属粉末を金型に入れて圧縮成形したもの）の密度を均一化することが重要であり、充填性は金型の形状やプレス条件、潤滑剤と並ぶ重要な因子である。充填性を向上するには、キャビティに充填される粉末重量のばらつきを小さく抑えることが課題である。しかし、ばらつきの要因には粉箱のモーションなどの給粉

用語集

※1 LIGGGHTS

個別要素法のオープンソースソフトウェア。GNU General Public Licenseに基づき配布されている。

※2 ParaView

オープンソースのデータ可視化ソフトウェア。

- ・LIGGGHTSはDCS Computing GmbH社の米国及びその他の国における商標または登録商標です。
- ・ParaViewはKitware社の米国及びその他の国における商標または登録商標です。
- ・LinuxはLinus Torvaldsの米国及びその他の国における商標または登録商標です。
- ・SX-ACEは日本電気(株)の登録商標です。

参考文献

- (1) P. A. Cundall, O. D. L. Strack, A discrete numerical model for granular assemblies, *Géotechnique*, **29** (1979) 47
- (2) 粉体工学会 編、「粉体シミュレーション入門—コンピュータで粉体技術を創造する」、(1998) 産業図書
- (3) 大塚順、個別要素法による粉体シミュレーションへのOpenMP並列の適用、2012年ハイパフォーマンスコンピューティングと計算科学シンポジウム発表資料
- (4) 大塚順、個別要素法シミュレータLIGGGHTSを用いたボールミルの粉砕性予測技術、オープンCAEシンポジウム2014発表資料
- (5) 大塚順、粉体—流体連成解析によるボールミルの大規模シミュレーション、HPCIシステム利用課題 利用報告書、hp140085 (2015)
- (6) M. Sakai *et al*, Verification and validation of a coarse grain model of the DEM in a bubbling fluidized bed, *Chemical Engineering Journal*, **244**, 15 (2014) 33
- (7) W. A. Gray, *The Packing of Solid Particles*, Chapman and Hall (1968) 71
- (8) C. Kloss, C. Goniva, A. Hager, S. Amberger, and S. Pirker, Models, algorithms and validation for opensource DEM and CFD-DEM, *Progress in Computational Fluid Dynamics*, **12**, Nos. 2/3, (2012) 140-152
- (9) 首藤史、オープンソースCFD・DEMを用いた球形および非球形粒子挙動シミュレーション、日本設計工学会研究発表講演会講演論文集、2016、秋季、175
- (10) 山中秀作、吉田周平、山田貴博、個別要素法による粉末の金型充填シミュレーション、計算工学講演会論文集 Proceedings of the Conference on Computational Engineering and Science 19, 3p, 2014-06
- (11) 大塚順、齋藤達哉、オープンソースソフトウェアを用いた粉末冶金への個別要素法の応用について、精密工学会誌、**84** (2018) 607
- (12) 曾田力央、加納純也、齋藤文良、DEMによる媒体攪拌ミル攪拌ロータのピン形状が媒体運動に及ぼす影響の解析、*J. Soc. Powder Technol. Japan*, **46** (2009) 180
- (13) 木村真喜男、鳴海雅之、児林智成、離散要素法シミュレーションによるボールミルの設計手法、*住友化学* (2007) 31
- (14) Y. Tsuji, T. Kawaguchi, T. Tanaka, Discrete particle simulation of two-dimensional fluidized bed, *Powder Technol.*, **77** (1993) 79
- (15) D. Gudin, J. Kano, F. Saito, Correlation between the Grinding Rate Constant and the Impact Energy of Beads during Wet Bead Milling, *J. Chem. Eng Jpn.*, **40** (2007) 980
- (16) A. Henderson: *ParaView Guide A Parallel Visualization Application*. Kitware Inc., (2007)

執筆者

大塚 順* : 解析技術研究センター 主査



齋藤 達哉 : アドバンスドマテリアル研究所
工学博士



三島 英彦 : 解析技術研究センター グループ長



*主執筆者