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*

Application of Discrete Element Method to Powder Metallurgy with Open Source Software

大塚 順** 齋藤達哉***
Jun OTSUKA and Tatsuya SAITO

Key words DEM, powder metallurgy, feeding, ball mill, supercomputer

1. 緒 言

粉末冶金は、金属粉末を金型に充填してプレス機で圧縮して固めた後に焼結して製品を製造する技術であり、高精度かつ大量生産に向いており素形材産業の重要技術である。しかし、環境変化が粉体挙動に複雑かつ顕著に影響するため、製造条件と製品品質との間で因果関係を明瞭化することが難しい。近年、精度要求はますます厳しくなっており、製造条件の確立に要する試作回数が増大しているため、開発リードタイムを短縮するための打開策としてシミュレーション技術が切望されている。代表的な粉体シミュレーション法として個別要素法 (DEM: Discrete Element Method)¹⁾ が知られている。粉体を構成する一つ一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、粉体挙動の特徴を忠実に表現することができる²⁾。図1に計算アルゴリズムのイメージを示す。粒子間接触力は、バネとダッシュポットによりシンプルに表現されており、汎用性の高さが特長である。著者らは粉末冶金の各工程へのDEMの適用可能性を評価するべく、これまでに供給工程³⁾、粉砕工程⁴⁾⁵⁾、混合工程、給粉工程などのシミュレーションを試みてきた。

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。

実プロセスに適用するときの課題は計算モデル規模、適切なモデルの構築である。例えば給粉工程の粉体挙動を解析するのに実際の粒子をDEMシミュレーションしようとすると、粒子数が莫大になるため最新のスーパーコンピュータを利用したとしても現実的な時間で計算を完了できない。粉末の体積を一定にした状態で粒径を2倍にすると、粒子数は1/8倍に削減できるため、計算コストを低減する方法として粗視化モデルがよく使われている⁶⁾。しかし、粉末冶金にDEMシミュレーションを応用するとき、例えば給粉シミュレーションにおいては、金型形状の複雑さから給粉挙動が壁効果⁷⁾の影響を受けるため、粗視化モデルの適用には限界があり、大規模計算の実施が必要不可欠となる。また、DEMシミュレーションでは粒子を球体として扱うため、対象とする問題によっては実現象の再現が難しいことがよく知られている。給粉シミュレーションを例にとると、粒子の流れに関しては摩擦係数を調整することである程度再現できるようだが、嵩密度^{かさ}に関しては異形状性が直接影響するため通常のDEMでは再現できない。この打開策として一つの異形状粒子を複数の微小粒子の複合体として表現するクランプモデルが提案されており⁸⁾、現状の最有力手法と見なされているようである。著者らがDEMシミュレータとして利用しているオープンソースソフトウェアLIGGGHTS (LAMMPS IMPROVED FOR GENERAL GRANULAR AND GRANULAR HEAT TRANSFER SIMULATIONS)⁹⁾は、これらの課題に対処できる機能が初期実装されている。LIGGGHTSの事例は最近いくつか報告されている¹⁰⁾¹¹⁾。首藤らは非球形粒子の計算事例を報告している¹⁰⁾。

本稿では、ボールミルの粉砕工程と給粉工程を計算対象として実施した、LIGGGHTSをスーパーコンピュータへ移植した事例および流体の影響を取り込むための粉体モデルのカスタマイズ、オープンソースの可視化ソフトウェアと組み合わせた解析システムの構築について紹介する。

*原稿受付 平成30年4月19日

**住友電気工業(株) (神奈川県横浜市栄区田谷町1)

***住友電気工業(株) (兵庫県伊丹市昆陽北1-1-1)

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。ミルのピンは透明表示している。

2. ボールミルの粉碎シミュレーション

2.1 粉碎性の予測

超硬合金は炭化物粉末および金属粉末が主原料であり、湿式ボールミルを用いて混合・粉碎して所定の分散、粒度にする。図2に簡易形状のボールミルを示す。ボールミルの容器にはボールと砕料が入られるが、粉碎性の予測はボールどうしの衝突エネルギーを評価すればよい¹²⁾¹³⁾。衝突エネルギー E_w は次式で計算できる。

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

ここで、 W は砕料重量、 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。砕料を計算に直接含めることは困難なため、ボール運動に対する摩擦効果として取り込み、安息角を再現するよう適切に摩擦係数を選択することでボール運動を精度良く再現することができると報告されている¹²⁾。実際のミル形状およびボール径をシミュレートするにはボール数が膨大となり、社内で保有する解析サーバでは計算できなかったため大学のスーパーコンピュータを利用した。また、スラリー中のボールの運動は流体抵抗により運動量が小さくなることを表現するため LIGGGHTS のカスタマイズも行った。

2.2 スーパーコンピュータへの移植

LIGGGHTS (version 2.24) のオリジナルのソースコードでは実効性能（実際の演算速度）が不十分だったため、大幅な変更を伴わない範囲でソースコードを変更してチューニングを実施した結果、3.4 倍のスピードアップを実現した⁵⁾。256 ノードを使用した MPI 並列計算により大規模モデルを計算できるようになり、小径ボールの解析を実現した。

2.3 LIGGGHTS のカスタマイズ

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は、流体の影響を精度良く表現することが可能だが¹⁴⁾、湿式ミルは内部構造が複雑であり計算負荷が大きくなるため、実機のシミュレーションで

図3 ボールの衝突エネルギー

は実施が困難である。そこで、ボールの動きによる流れ場への影響は無視してスラリーの流れ場を静的に与え、スラリーからボールが受ける浮力 F_B および流体抵抗 F_D を外力としてモデル化する方法を¹²⁾採用した。浮力 F_B および流体抗力 F_D は次式で表すことができる。

$$F_B = g V_B \rho_s \quad (2)$$

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

ここで、 V_B はビーズ体積、 C_d は抵抗係数、 A は投影断面積、 ρ_s はスラリー密度、 u_r は流体とビーズの相対速度である。流体抗力 F_D は流体とボールの相対速度に依存することが分かる。LIGGGHTS には粒子に働く外力を追加するためのコマンド “fix addforce” が実装されているが、もともとは一定値しか与えられない仕様であるため、このコマンドのソースコードを変更して流体抗力も表現できるようにした。

2.4 ボール運動の解析結果

図3に衝突エネルギーの解析結果を示す。ミルを適当な五つの領域に分割して各領域に存在するボールに対して衝突エネルギーを評価した。当初の予想どおり、スラリーを考慮することで衝突エネルギーが低下した。スラリーを考慮しない場合でも各領域で衝突エネルギーに差異があるが、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との違いが見えている。スラリーの存在による衝突エネルギーの減少量が各領域で異なっており、簡易モデルの結果では7~20%の範囲をもつことを示した。図4にミルの回転数を変更したときの衝突回数の変化を示す。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。一方、回転数が小さいときはボールサイズが小さくなると、衝突回数が比例関係から外れて減少する条件があった。これは、ボールが小さいときはミルの攪拌ピンへの衝突が複雑になり、ボールの運動が単純な傾向から外れるためと推測される。

ミル内のボール運動を実験的に把握することは困難なため、シミュレーションからプロセス改善のヒントとなる知見を得ることは重要である。粉碎性の予測能力を向上させるためには、砕料がミル中でどのような滞留状態にあるか

図4 衝突回数と回転数の関係

も考慮する必要があると考えている。

3. 給粉シミュレーション

3.1 動向

給粉工程で粉末が成型用金型のキャビティに充填されるが、焼結後の部品の品質を安定させるにはキャビティに対する粉末充填のばらつきを小さく抑えることが課題である。粉末は粒径分布をもつため通常、細粒が粉箱の下部に集まり偏析しており、キャビティへの充填もその偏析状態が反映されてしまう。加えて、粉箱内の粉末が減ってくると偏析状態が変化してしまい、ばらつきの原因となっている。すでに粉末充填方法は多くの先行技術が報告されているが、汎用的に適用できる方法はおそらく発見されていない。著者らは粉箱およびキャビティ内の粉末状態を可視化することで、粉末充填方法の高度化にヒントが得られると考えており、給粉シミュレーションの開発を進めてきた。給粉シミュレーションは国内外で盛んに研究されており、すでに多くの事例が報告されている¹⁵⁾。GuoはDEMシミュレーションと流体計算の連成解析によりキャビティ内で粉末が空気を押し出す、いわゆる空気置換現象をシミュレートしている¹⁵⁾。著者らは、実プロセスの条件出しを念頭に置き、製造拠点でもシミュレーションを活用できる仕組みの構築を目指しており、LIGGGHTSを利用したシミュレーションシステムの開発と解析の事例を報告する。

3.2 LIGGGHTSを利用した給粉解析システム

LIGGGHTSの入力ファイルは、すべてテキスト形式で書かれる。Pythonなどのプログラミング言語を用いれば、テキスト中に書かれているパラメータ値を書き換えてLIGGGHTSを実行できるため、条件違いの計算は自動実行することができる。さらに、可視化にオープンソースの可視化ソフトウェアParaview¹⁶⁾を利用すれば、充填状況を示す画像データも作成できる。解析処理も自動化処理に加えれば、給粉シミュレーションの一連の作業を半自動的に処理するが可能となる。これら処理の関係を図5に示した。既存のツールや習得が容易なプログラミング言語を活用することで、開発工数を抑えて給粉シミュレーションの仕組みを構築することに成功した。

図5 給粉シミュレーションのフロー

3.3 粉末挙動の解析結果

図6はキャビティに充填された粉末が粉箱のどの場所に位置していたかを示している。充填前の粉箱内の粒子に対して高さ方向の初期座標に応じて色付けした。粉箱の隅に存在した粒子がキャビティに充填されることが明らかになり、給粉を繰り返せば粉箱内の偏析が拡大していき、粉末充填に変動をもたらす要因になると予想される。本稿では詳細データを省略するが、キャビティ内の粒径分布を実測と比較すると、粗粒はおおよそ傾向が合っているが、細粒はずれが生じており、空気置換の影響が出ていると推測される知見も得られている。給粉シミュレーションの精度向上には、DEMシミュレーションと流体計算の連成解析が必要と考えている。

4. 結 言

本稿では、ボールミルおよび給粉工程を計算対象としてオープンソースソフトウェアLIGGGHTSの適用事例を紹介した。並列計算機能が実装されているため、スーパーコンピュータに移植することで膨大な粒子数を含むモデルも計算できるようになった。ソースコードを改良することで、所望の粉体モデルを追加実装することやPythonを使って可視化ソフトと連携させることができ、拡張性に優れることも示した。今後、DEMシミュレーションを仮想実験ツールとして上手に使う方法を検討していきたい。将来的には、シミュレーション結果をデータベース化し、ディープラーニングやAIの技術を活用して、最適なプロセス条件を提案できるシステムの構築も目指したい。

図6 給粉シミュレーション結果。粒子の色付けは充填前の高さを表す。

5. 謝 辞

本研究成果の一部は、大阪大学サイバーメディアセンターのスーパーコンピュータシステム SX-ACE を利用して得られたものである。

参 考 文 献

- 1) P.A. Cundall and 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，産業図書，(1998)。
- 3) 大塚順：個別要素法による粉粒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. Lillie and P. Wriggers: Three-dimensional modeling of discrete particles by superellipsoids, *Proc. Appl. Math. Mech.*, **6** (2006) 101.
- 9) 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.
- 10) 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，秋季，(2016) 175.
- 11) 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)。
- 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，兄林智成：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 and T. Tanaka: Discrete particle simulation of two-dimensional fluidized bed, *Powder Technol.*, **77** (1993) 79.
- 15) Y. Guo: A COUPLED DEM/CFD ANALYSIS OF DIE FILLING PROCESS, The University of Birmingham, 2010, Ph. D. thesis.
- 16) A. Henderson: *ParaView Guide, A Parallel Visualization Application*. Kitware Inc., (2007)。

大塚 順

2007 年大阪大学大学院工学研究科 精密科学・応用物理学専攻精密科学コース修了。修士。現在，住友電気工業(株)解析技術研究センターに所属。計算力学 (CAE) 技術者国際上級アナリスト。

齋藤達哉

2014 年東北大学大学院工学研究科 知能デバイス材料学専攻情報デバイス材料学講座修了。博士。現在，住友電気工業(株)アドバンスドマテリアル研究所に所属。粉末冶金の特徴を活かした磁性材料の開発に従事。