粒子系モデルによる銅の 3 次元圧縮解析

島 進, 小寺 秀俊, 氏江 勇貴

京都大学大学院工学研究科機械工学教室, 〒606-01 京都市左京区吉田本町.

3-D Simulation of Compaction Behavior of Copper Powder Based on Particular Modeling

Susumu Shima, Hidetoshi Kotera and Yuuki Ujie

Division of Mech. Eng., Kyoto University, Sakyo-ku, Kyoto 606-01.

Received December 8, 1994

Simulation of compaction of copper powder is carried out in three-dimensions based on a particulate modeling. Besides elastic deformation of particles, a model of plastic deformation is introduced based on micro-compression of spherical particles; since the pressure required to achieve certain density by simulation without taking account of plastic deformation of particles is much higher than the experimentally derived one, it is concluded that it is necessary to introduce its effect. Simulations of closed-die compaction, isostatic compaction and three-dimensional compaction, where powder is capable of being compacted with arbitrary strain ratios, are performed for powders of copper particles. It is thus shown that relationship between pressures and density ratio and also constitutive behavior during compaction obtained by the simulation agree qualitatively well with experimental results. Quantitatively, however, the pressure for a particular density ratio is about a half of the experimentally derived one. The reasons are discussed and technical issues for overcoming the problems are suggested.

1 緒言

粉体を構成する個々の粒子の運動を追跡する手法(個別要素法, 粒子動力学法)を用いた数値実験により, 粉体のキャラクタリゼーション¹⁾, 粉体層に振動を加えたときの挙動^{2,3)}, あるいは充填と圧縮成形過程^{4,5)}, さらに射出成形における粒子の挙動などについて調べる研究⁶⁾が盛んになっている. 著者ら^{1,4)}は粒子間の相互作用と

して, 1) 静電氣的な力による引力, 2) 弾性変形による反発力(ヘルツの式による), 3) 重力, 4) 粒子が相互衝突する際の作用する粘弾性的な力, 5) 粘性媒体(空気その他)による抵抗, 6) 粒子相互間の相対すべりによるの摩擦力, 7) 粒子の塑性変形の影響, などを考慮して自然充填の際の密度あるいは安息角さらには成形挙動などを2次元モデルを用いたシミュ

レーションによって調べてきた¹⁴⁾。しかし、2次元モデルによる解析では、充填密度が実際の場合よりも過大に計算され、実験結果と定量的に比較できない等の問題がある。

本論文では、これまでの解析手法を3次元に拡張し、それを用いて銅粉末の成形時における密度と圧力に関する解析を行い、その有効性を考察する。

2 解析手法

2.1 計算のプロセスと解析の概要

解析手法の基本的な考え方は、通常の個別要素法⁷⁾と同じであるので簡単に説明する。すなわち、ある瞬間において、粒子の相対位置と相対速度から粒子に働く力を求め、個々の粒子に対して以下に示す並進の運動方程式 (1) と回転の運動方程式 (2) によって加速度を計算し、微小時間 Δt 後の粒子の速度、さらに変位を逐次追跡することにより粒子全体の挙動を解析する。

$$m_i \frac{d^2 \mathbf{r}_i}{dt^2} = \mathbf{F}_i \quad (1)$$

$$I_i \frac{d^2 \theta}{dt^2} = M_i \quad (2)$$

ここで、(1) 式において $\mathbf{r}$ は粒子の位置ベクトル、 m は粒子の質量、 $\mathbf{F}$ は粒子に働く力ベクトルを表し、 $\mathbf{F} = \mathbf{N} + \mathbf{F}_c + \mathbf{F}_d$ である。この力 $\mathbf{F}$ については次節で粒子間に働く相互作用として説明する (Fig.1 (a) 参照)。(2) 式における θ は粒子の回転角、 I は粒子の慣性モーメント、 M は粒子に働くモーメントの和を表す。それぞれの変数についた添字 i は粒子 i に対応する。

計算における時間増分 Δt に関しては、ばね定数 K と粘性係数 c (ダッシュポットの係数) を有する一自由度の振動系モデルにおいて運動方程式を差分近似する際、解の収束性と安定性を得るための条件として Cundall により推奨された式がある⁷⁾。しかし、これを基にした時間増分を用いると粒子が他の粒子や壁と接触する際、くい込み量が大きくなり、計算中に粒子がセルから飛び出してしまうなどの不都合が生ずる。そのため本論文では、完全弾性体を仮定し

た粒子1個の自由落下及び圧縮解析を行い、 Δt および c を決定した。すなわち、前者においては、自然落下した粒子が、ほぼ落下前の位置に戻り、また後者においては圧縮中に異常振動を起こし粒子が壁を突き抜けることのないような条件を求めた。本論文で用いる直径約 1 (mm) の銅粒子 (後述の Table1 参照) の場合、 $\Delta t = 1.0 \times 10^{-6}$ (s)、および $c = 2.0 \times 10^{-4}$ (Ns/m) とした。

2.2 粒子間および粒子と壁の相互作用

粒子間には粒子相互の付着力、静電気的な力、分子間力などさまざまな相互作用が考えられるが、解析では以下に示す4種の相互作用が働くと考えた (Fig.1 (a) 参照)。

Fig.1 (a) Interaction of particles.

Fig.1 (b) Contact of particles.

1) ヘルツの弾性反発力,

2個の粒子が計算の上で Fig.1 (b) のように互いに食い込んだ場合、その間には次式で示すヘルツの弾性反発力 (N_c) が働くものとする。

$$N_e = 0.733E \sqrt{\frac{R_i R_j}{R_i + R_j}} (D_{ij} - r_{ij})^{\frac{3}{2}} \quad (3)$$

ここで R_i, R_j は粒子 ij の半径, E はヤング率, $D_{ij} (=R_i + R_j)$ は2粒子の半径の和, r_{ij} は粒子の中心間距離を表す.

2) 塑性変形による影響

さらに解析では, 粒子の変形量 δ が, ある δ_p を越えると塑性変形が起これと考える. 塑性変形時に働く力としては, Shima らによる鋼球の解析⁴⁾ に類似のモデルを使用した. すなわち銅粒子1個(半径 R (m)) を圧縮したときの圧縮力 (N_p) と変位量との関係を調べた Saleh らのマイクロ圧縮試験結果⁹⁾ に基づいた (4) 式を使用する.

$$N_p = \frac{\pi}{2} R \delta k_f \quad (4)$$

ただし, δ (m) は粒子の変形量を表す. また, k_f は実験結果から求めた定数である. このような1粒子のマイクロ圧縮試験に基づいたモデルを使用するのは, 粒子1つを圧縮した場合を剛塑性有限要素法で解析した結果, 変形量が比較的小さな状態では接触点での塑性変形はその近傍以外にはあまり影響を与えていないという結果⁴⁾ に基づいている.

塑性変形が起これるための変形量 δ_p は

$$N_e = N_p \quad (5)$$

の条件から

$$\delta_p = \left(\frac{\pi k_f}{1.466E} \right)^2 R \quad (6)$$

のように求められる.

ところで, 粒径の異なる粒子が塑性変形する問題は, 粒子径が均一な場合と異なり, 各々の粒子の変形量が異なるなど非常に複雑であり, 正確なモデル化は困難であるため, ここでは次のような仮定をして解析を行っている.

まず, 各々の粒子の変形量は $\delta = (D_{ij} - R_{ij})/2$ で与えられるものとし, 粒子 i, j のどちらかが (5) 式を満たし, 塑性変形が生じた時, 双方とも塑性変形が始まると考える. そして, (4) 式で得た双方の粒子に働く力の平均を求め, 法線方向に働くものとする.

尚, 以上のような粒子相互の接触による粒子形状の変化は, このモデルでは取り扱っていない.

い.

3) クーロン摩擦,

接触する粒子の接触点において, その接線方向に作用する力としてクーロン摩擦力 $F_c = \mu N$ が働くものとする. 動摩擦係数 μ としては実験的に求めた銅粒子 (2mm) と銅板との間の摩擦係数 0.162 を使用した. 成形が進行して, 粒子間の圧力が高くなると μ はこの値とは異なる値になると思われるが, ここでは $\mu = 0.162$ で一定とした.

尚, 簡単のため粒子と壁との間の摩擦はないものとした.

4) 粘性抵抗

時間刻みの不連続性を緩和するために粒子間に粒子同士の相対速度に比例する粘性抵抗 $F_v = -cV$ を導入した. V は粒子間の相対速度を表す.

3 解析結果と考察

前節に述べた手法を用い, 本研究では次のような解析を行う. 直方体セル中に乱数により 0.65-1.45 (mm) の粒度分布をもった粒子群を発生させた後に, 重力を加え粒子群をセル内で自由落下させる. 粒子が安定した後に x, y, z 方向のセル壁をひずみ速度一定の条件のもとで移動させ粒子群を圧縮する. ここで「ひずみ」とは, 直方体セルを一つの物体要素とみなし, セル壁を移動させたときのセルの見かけの変形量に対応するものである. ただし, x, y, z 軸は直交するセル壁の法線方向にとるものとする.

3.1 解析条件

Table 1 Constants for simulation.

Density	8.96(g/cm ³)
Young's modulus E	113 (GPa)
Parameter in Eq.(4) k_f	0.722 (Pa)
Viscosity factor c	2.0×10^{-4} (N s/m)
Friction coefficient μ	0.162
Number of particles n	100,300
Particle size	0.65-1.45 (mm)

Table 1 に解析に用いた諸物性値, 諸係数を示す.

本論文では, 粒子材料として延性金属である銅を取り扱っているが, まず, ヘルツの弾性反発力のみを考慮した場合の解析を行う. 実際の銅粉末の圧縮成形では粒子は必ず塑性変形している. 従って, 次に2節で述べた塑性変形モデルを導入した解析を行い, 実験結果及び塑性変形モデルを使用しない場合と比較する.

$5 \times 5 \times 30$ (mm) のセルの中に, 乱数により発生させた300個(弾性変形の場合100個)の粒子群は, 重力を付加した後0.2 (s) で落下を終えほぼ安定した状態になる. その後, セル壁を動かし圧縮を開始する. z 方向のみ一定のひずみ速度1で圧縮する密閉型圧縮 (closed-die compaction) と, x, y, z 方向すべて同じひずみ速度1で圧縮する静水圧圧縮 (isostatic pressing) に関して, その際の銅粒子の充填密度とセル壁に作用する圧力に関する解析を行った.

3.2 塑性変形を考慮しない解析結果

塑性変形を考慮しない弾性変形のみを考えた場合の密閉型成形のシミュレーションの結果をFig.2に示す.

Fig.2 Relationship between pressures and density ratio in closed-die compaction of copper without plastic deformation ($n=100$).

成形圧力 (z 方向圧力) は, Salehらによる銅粉末 (初期密度58%のアトマイズ粉) の密閉型圧縮試験⁹⁾ では, 密度比が65%の時, 60 (MPa) 程度である. 解析では同じ密度比で600 (MPa) となり実験結果とくらべるとはるかに大きな値となる. このことから, 実際の解析を行うた

めには塑性変形モデルの導入が必要であるといえる.

尚, 塑性変形が起こらないと仮定した場合の解析結果は粒子に塑性変形が生じないセラミック粉の圧縮に類似の現象を表していると考えられる. この点に関しては, 本論文ではこれ以上言及しない.

3.3 塑性変形を考慮した解析結果

3.3.1 密閉型圧縮と静水圧圧縮

塑性変形モデルを導入した場合の密閉型圧縮の解析結果をFig.3, 静水圧圧縮の解析結果をFig.4に示す. 尚, Fig.3には銅粉の密閉型圧縮

Fig.3 Relationship between pressures and density ratio in closed-die compaction of copper with plastic deformation ($n=300$).

Fig.4 Relationship between pressures and density ratio in isostatic compaction of copper with plastic deformation ($n=300$).

試験⁹⁾のデータの1つを合わせてプロットしてある。

密閉型圧縮では実験、シミュレーションとも x, y 方向の圧力はほぼ等しく、また、 z 方向の圧力は x, y 方向のその2倍程度になっている。静水圧圧縮では x, y, z の3方向の圧縮力はほぼ等しい。これらは解析結果が定性的には実際の現象に合うことを示している。しかし、銅粉の密閉型圧縮の実験結果と比べると圧力の大きさは約半分くらいの小さな値となる。(Fig.3 参照)そして、解析結果と実験値との差は充填密度が高くなるにつれ大きくなっている。

3.3.2 3次元圧縮

x, y, z 方向のひずみ速度比をさまざまに変えて行う成形手法が島らにより開発され、3次元圧縮の名の下に、いくつかの粉末成形実験が行われてきた^{9,10)}。その結果、応力は圧粉時の密度比をパラメーターとして、主応力空間上で一つの曲面を形成する。この曲面は降伏曲面と呼ばれ、2つの主応力が等しくなる面、例えば $\sigma_2 = \sigma_3$ の面上に投影した場合、一般に楕円曲線の一部を構成する。

シミュレーションによる3次元圧縮の結果を Fig.5 に示す。Fig.5 は、ひずみ速度比を $\varepsilon_z : \varepsilon_x (= \varepsilon_y) = 1 : 0$ から $1 : 1$ までの間で変化させた場合の圧力を $\sigma_2 = \sigma_3$ の面上プロットしたものである。各密度比に対して結果はほぼ1つの曲線上にあることが分かる。

このように、解析結果は実験結果、すなわちに述べた降伏の挙動と定性的に合うことを示している。定量的には、一定の密度比を得るのに必要な圧力は、例えば密閉型圧縮の場合 (Fig.3 参照) のように実験値の半分程度になる。これは以下の理由によるものと考えられる。解析では2粒子の相互位置関係から弾性反発力および塑性変形時の力を算出する場合、粒子は接触点の周辺の変形による影響は考慮していない。すなわち他の粒子が同時に接触しても、2粒子間に作用する力は変化しないとしている。また、粒子は球形を保ったまま変形しないとしているなどである。今後、より正確な解析を行うために周りの粒子の影響も考慮したモデルを考える必要がある。

Fig.5 Relationship between σ_1 and $\sigma_2 = \sigma_3$ for various density ratios in 3-dimensional compaction of copper powder with plastic deformation ($n=300$).

なお、本論文における計算は、シリコングラフィックス社製の Indigo R 4000 で行い、計算時間は密閉型圧縮 (800000 step) の場合が約 8 時間であった。

4 結言

銅の粒子系のモデルにより、粉体成形時の粒子の充填密度と圧力に関する3次元解析を行った。粒子の塑性変形を考慮しない場合には、成形の圧力が実際よりはるかに高い値となることから、銅のような延性金属粒子の解析には塑性変形モデルを導入する必要があることが分かった。塑性変形モデルを導入した場合の解析結果は次の通りである。

- 1) 密閉型圧縮では z 方向の圧力が x, y 方向の圧力の2倍程度になる。
- 2) 静水圧圧縮では x, y, z 方向の圧力がほぼ等しくなる。
- 3) 3次元圧縮では解析結果が1つの降伏曲面上にのる。これらは定性的には、実際の現象に類似の結果である。
- 4) しかし定量的には、実際の圧縮に比べると、圧力は各充填密度に対して小さな値となる。

今回の解析では、銅粒子1個を1軸方向に圧縮した実験結果に基づき、粒子間の相対変位量

のみによって反発力を与える簡単な塑性変形のモデルを考えたため, このような結果になったと考えられる. 今後の課題としては, 1) 上述の点を考え, 塑性変形のモデルを実際に近づけること, 2) 粒子間の摩擦係数の正確な把握とそのモデル化などがあり, それらの点を考慮した改良を加えることによりより高精度の解析が実現できるであろう.

本研究は平成6年度文部省科学研究費補助金一般研究(B)(04452113)で行われたものである.

文献

- 1) Jian, L. and Shima, S. : Int. J. Num. Meth. Eng., **37**, (1994), 763-775.
- 2) 相澤龍彦, 木原諒二: 平3 塑加春講論文集. (1991), 655.
- 3) 田村茂之, 木原諒二, 相澤龍彦: 平4 塑加春講論文集. (1992), 705.
- 4) Shima, S., Jian, L. and Asada, K. : Adv. Powder Met. and Particulate Mat. 1992, Metal Powder Industries Federation, Princeton, NJ, Vol.2, (1992), 85-98.
- 5) Tamura, S., Aizawa, T. and Kihara, K. : Adv. Powder Met. and Particulate Mat. 1992 Metal Powder Industries Federation, Princeton, NJ, Vol.2, (1992), 29-42.
- 6) Aizawa, T., Iwai, T. and Kihara, J. : Powder Injection Molding Symposium 1992, (1992), 419
- 7) Cundall, P.A. and Strack, O.D.L. : Geotechnique, **29**, (1979), 47-65.
- 8) M.A.E. Saleh and S. Shima : Proc. Int. Conf. Mech. Eng. Adv. Tech. Ind. Prod., (Assiut, 1994.)
- 9) Shima, S. and Mimura, K : Int. J. Mech. Sci., **28**, (1986), 53
- 10) 島進, 中西利介: 材料, **37**, (1988), 70-76