

個別要素法シミュレータLIGGGHTSを用いたボールミルの粉碎性予測技術

住友電気工業(株)
大塚 順

1. 背景

- 個別要素法による粉碎性予測技術

2. 解析手法と解析結果

- LIGGGHTSのカスタマイズ（流体の効果を反映）
- 衝突エネルギーの計算事例

3. 大規模並列計算

- 「京」への移植とベンチマーク結果

4. まとめと今後の課題

背景

<粉末冶金製品の工程フロー>

原料

配合

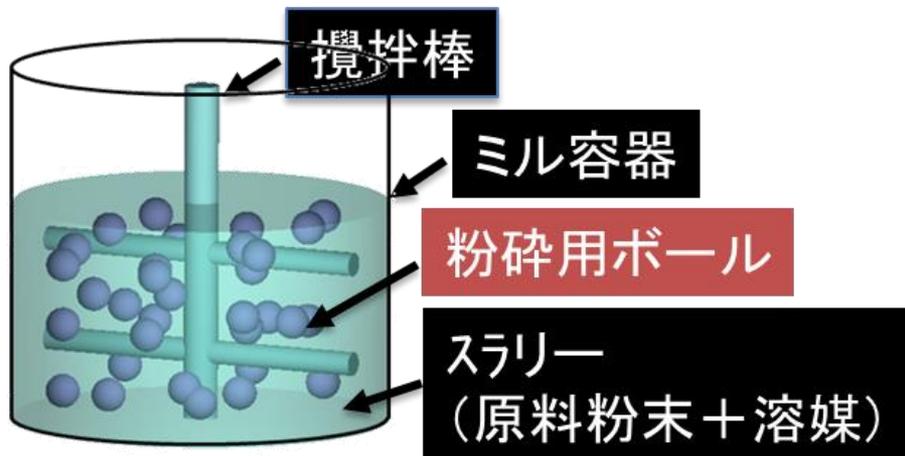
充填

成形

焼結

加工

<<粉砕・混合>>



【課題】

◆プロセス条件の最適化

⇒ 粉砕性を予測するためのCAE技術が必要

粉碎性予測技術

《粉碎性予測の方針》

- 粉碎速度定数(実験)
- 衝突エネルギー(CAE)

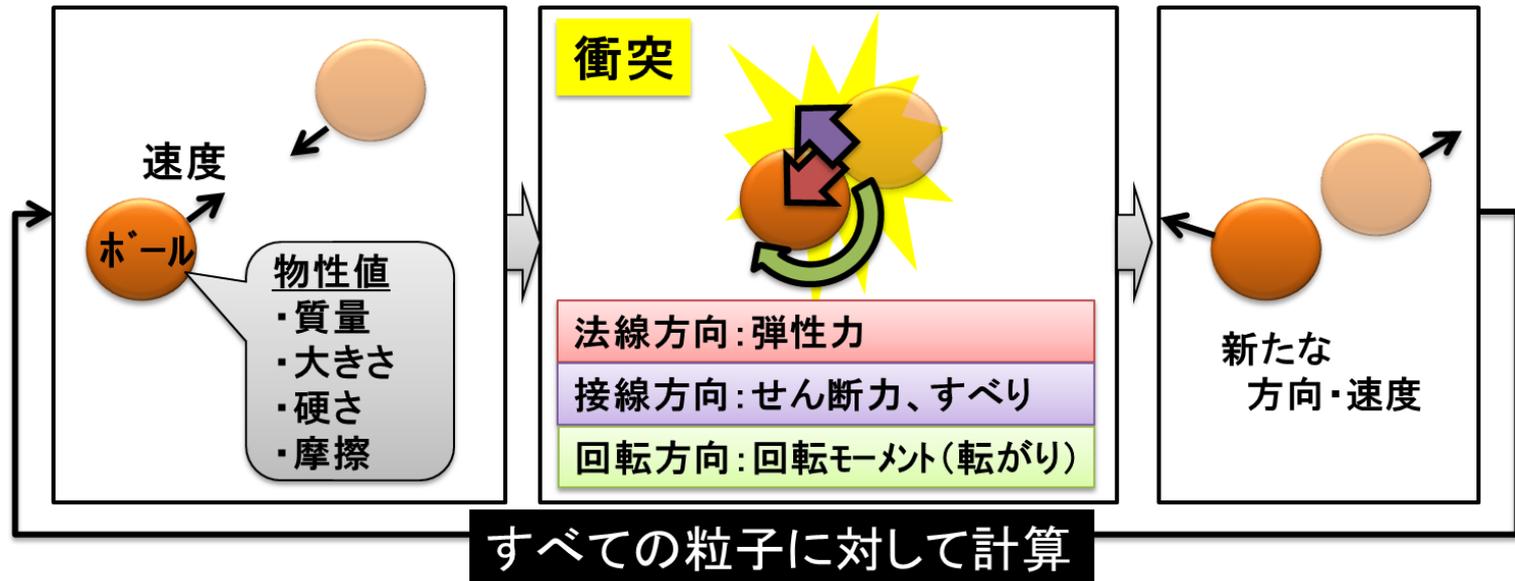
「相関関係」から粉碎性を予測

《衝突エネルギー-Ew》

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

V_j:他のボールまたは壁面と衝突するときの相対速度
W:ボールの総重量

《個別要素法》



粉碎性予測には、ボール挙動を精度良く解析する技術が必要

個別要素法シミュレータLIGGGHTS

LIGGGHTS

=LAMMPS Improved for General Granular and Granular Heat Transfer Simulations(<http://www.liggghts.com/>)

- 流体解析と個別要素法解析を統合するCFDEMプロジェクトの一環として開発され、分子動力学シミュレータLAMMPSをベースとする
- GNU General Public License ⇒ 無償で個別に利用可能

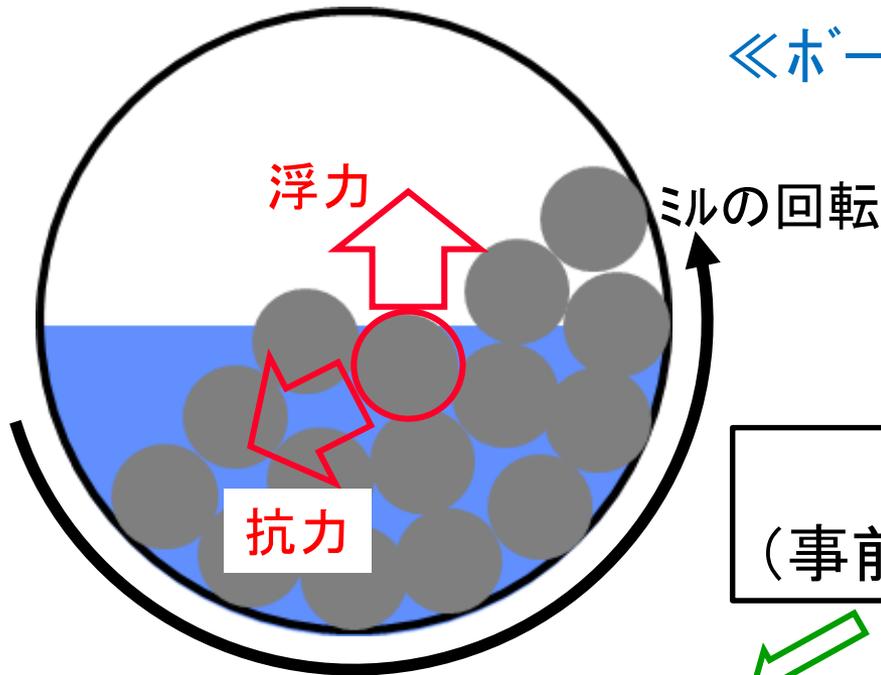
《粉砕性予測技術に求められる機能》

項目	必要性	LIGGGHTS
CAD形状の読み込み	複雑形状の境界条件	OK
ソースのカスタマイズ	溶媒の影響を反映	OK
高速計算	ボール数が膨大	OK

本課題に対してLIGGGHTSが有効なシミュレータと判断

ボール挙動の解析精度向上（流体の影響を考慮）

《ボール挙動に流体の影響取り込む方法》



【抗力】

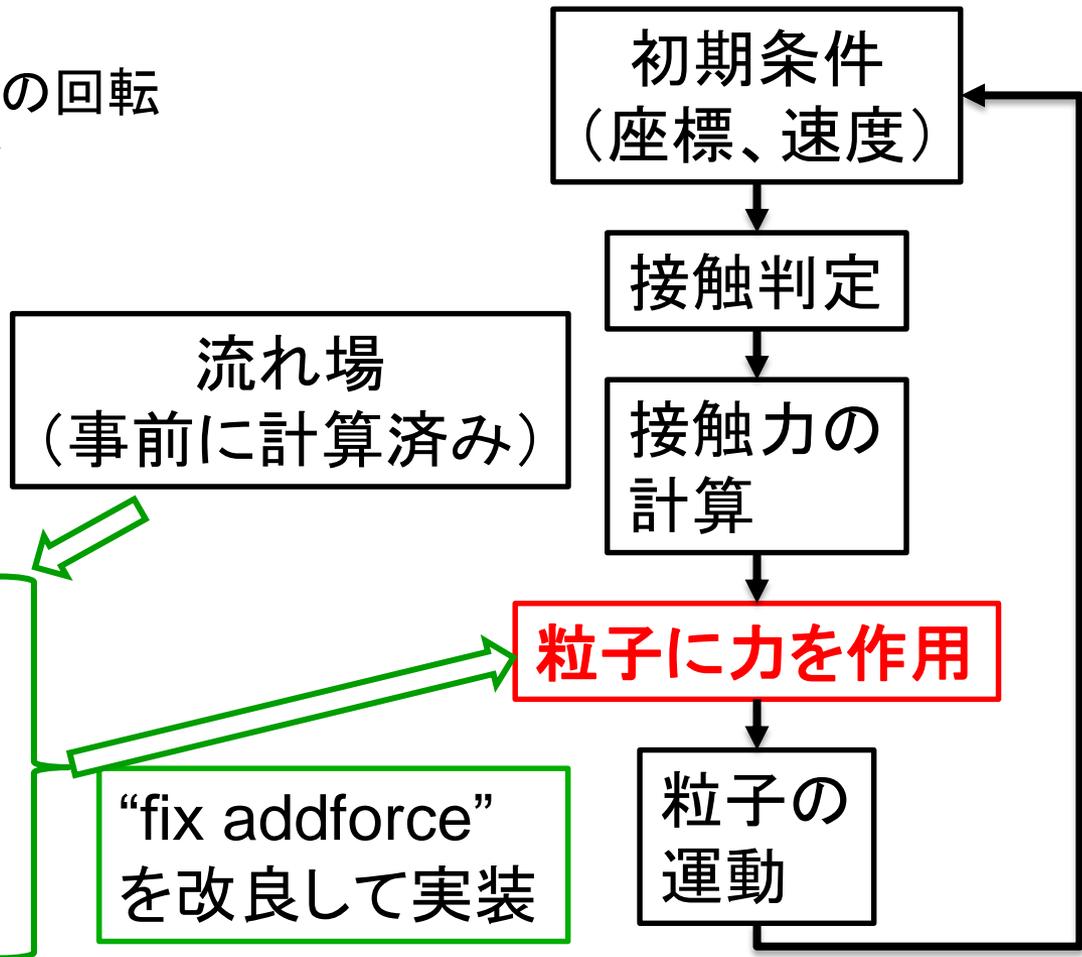
$$F_D = C_d A \rho_s u_r^2 / s$$

$$Re = d_B |u_r| \rho_s / \gamma_s$$

$$C_d = 23.5 / Re + 4.6 / \sqrt{Re} + 0.3$$

【浮力】

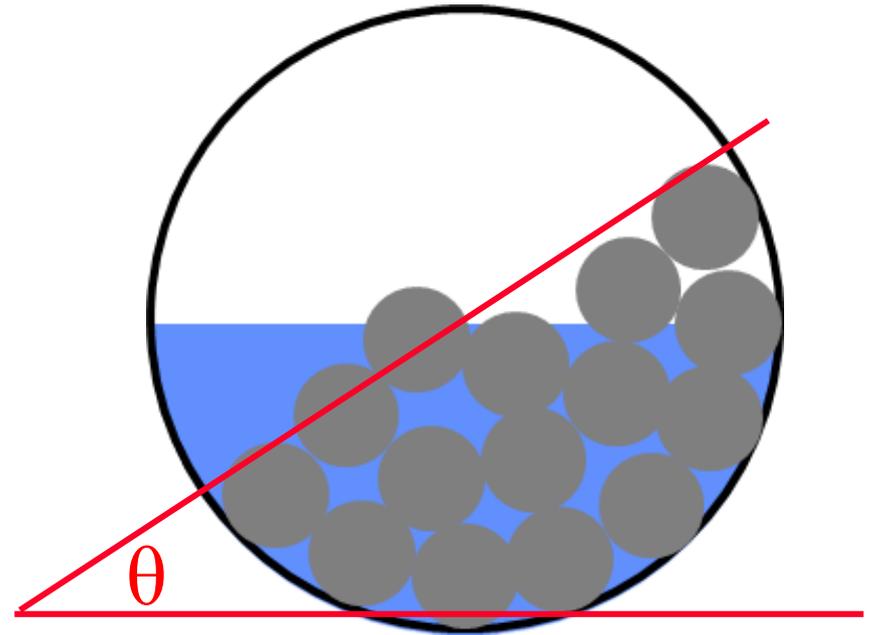
$$F_B = g V_B \rho_s$$



LIGGGHTSのカスタイズにより流体の影響と取り込む手法を開発

計算パラメータ

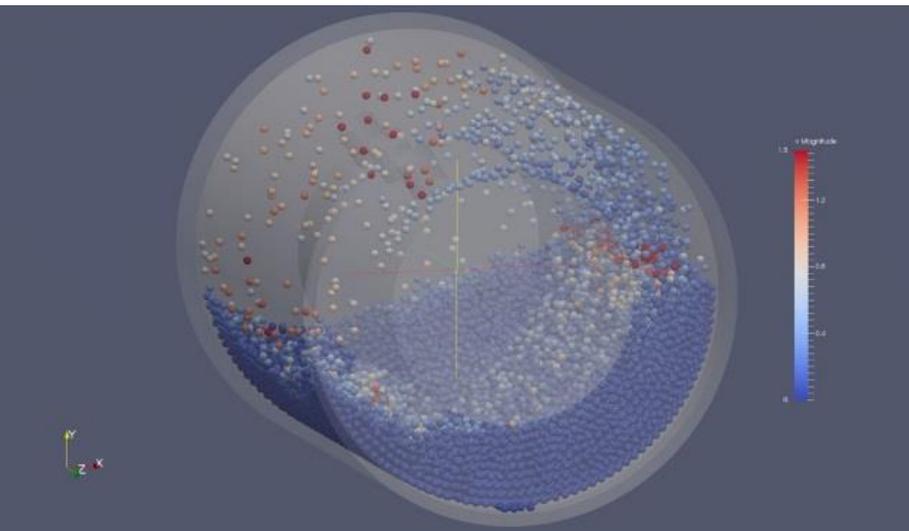
項目	値
ヤング率	測定値
ポアソン比	↑
ボールの密度	↑
接触力	ヘルツの理論
摩擦係数	合わせ込み
スラリー物性	測定値
ミル形状	CAD読み込み
時間ステップ°	1×10^{-5} (s)程度



摩擦係数はボールミルのボール傾斜角度の合わせ込みにより決定

ボール挙動のシミュレーション結果

■ ボールの可視化(paraview)



《アウトプット》

● ボールの位置、速さ
⇒ 観察困難なボール挙動を可視化

● 接触対、接触力
⇒ 衝突エネルギーを算出

■ PDF3Dを利用した3次元PDFの作成

PDF3D*ソリューションソフトウェアは3Dデータをリッチでインタラクティブな3D PDFドキュメントに変換できます。このドキュメントで隠された詳細を明らかにして、回転及びズームインができます。PDF3Dは値を追加し、スリットを提供します。
- VALUE スライドを参照ください

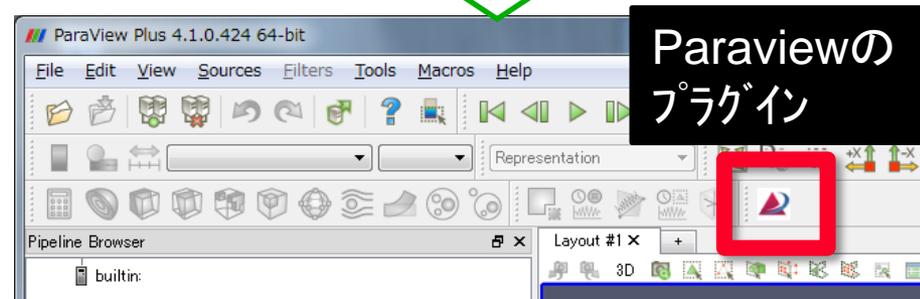
PDF3D Video
3D PDF Document Generation Video Demo

PDF3D ReportGen 3D PDF 作成

ParaView PDF3D プラグイン
バッチ処理の PDF3D XML サーバ

http://www.pdf3d.jp/index_jp.php

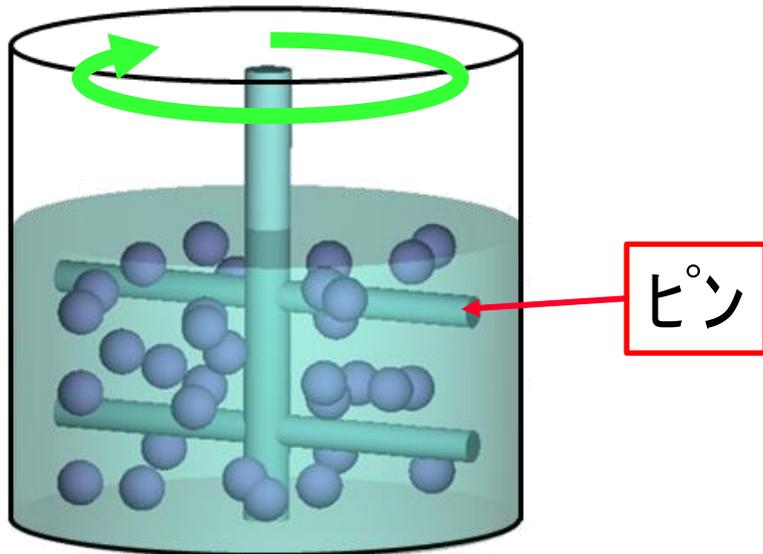
BUY NOW



ボール挙動を解析し、ミル内での動きを可視化に成功

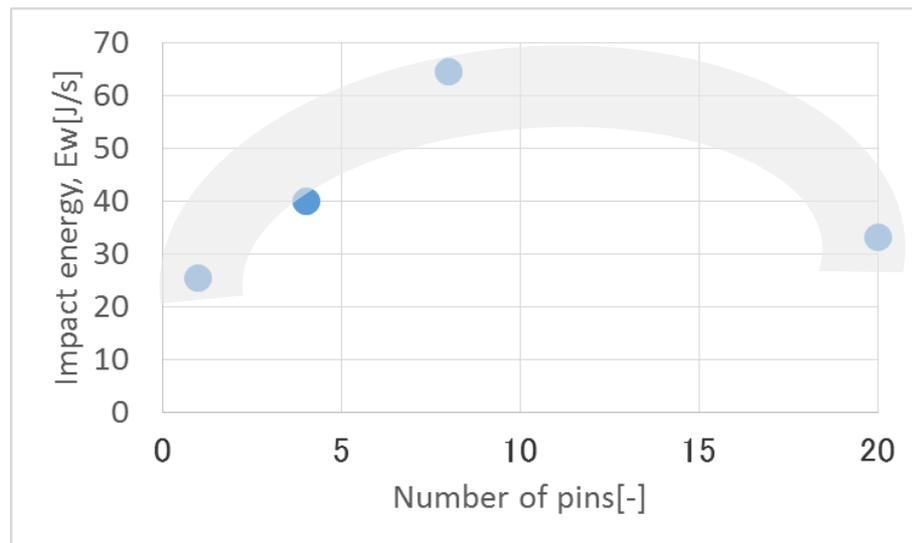
衝突エネルギーの計算事例

衝突エネルギーの計算方法を検証するため、既知の系についてシミュレーションを実施



項目	設定
ピン本数	1, 4, 8, 20
回転数	低回転
ボール径	通常サイズ
ボール重量	通常充填量

<衝突エネルギーとピン本数の関係>



- ピンが8本のとき衝突エネルギーが最大
- この傾向は実験(文献)と合致

攪拌条件変更の衝突エネルギー変化を計算できることを確認

「京」コンピュータへのLIGGGHTSの移植

- ボール径が小さい条件では、ボール数が100万を超える
- 社内PCクラスターではリソース不足 ⇒ **スパコンで大規模並列計算**



《「京」のトライアル・ユース制度の利用》

- 『個別要素法によるボールミルの大規模シミュレーション』が採択

《「京」へのLIGGGHTS移植》

- 元ソースではコンパイルに失敗 ⇒ サポートの支援により解決
[変更した箇所]並列計算関連、C++記述(関数オーバーロード)など

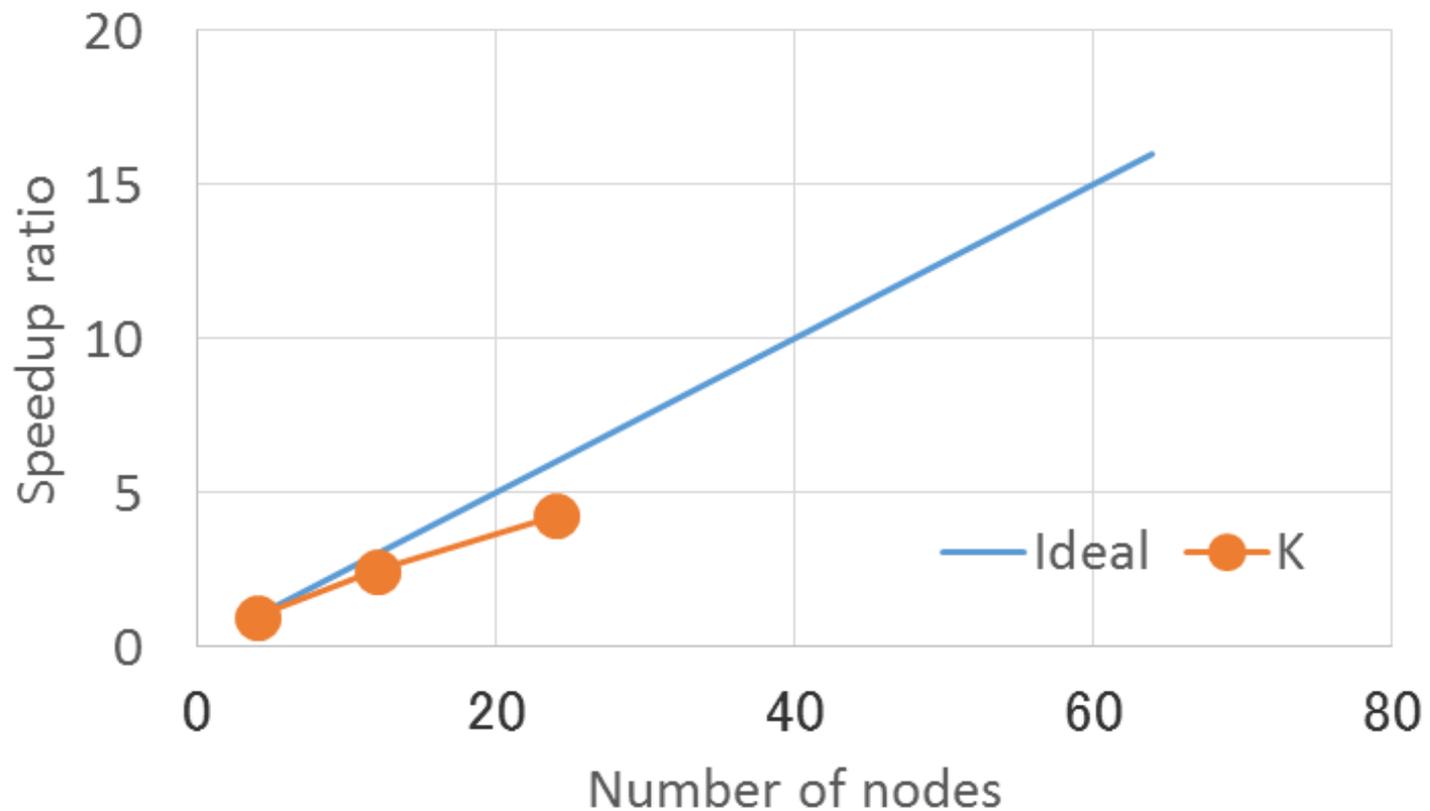
《「京」の単体計算性能》

	CPU / コンパイラ	計算時間(比)
PCクラスター	Xeon-E5-4650@2.7GHz / Intel	1
「京」	SPARC 64 V8ifx / 富士通コンパイラ	2~3

⇒ 単体計算は速くない

「京」への移植に成功(ただし、有効活用には並列数を多くすべき)

「京」コンピュータによる大規模並列計算のベンチマーク結果



- 実効並列化率: 99.7%、並列化効率: 65%
 - 並列化効率が50%となる並列数: 364(=46 node)
- ⇒ 大型計算機利用による大規模並列計算の有効性を確認

課題: 並列化率の向上 (並列化率99.98% → 並列数: 5000)

MPI通信のロードバランス改善が課題

LIGGGHTSを利用して、以下の成果を得た

- ミル内のボール挙動を可視化
- 衝突エネルギー算出により粉碎性予測技術を開発
- 「京」を利用した大規模並列計算のベンチマーク

＜今後の課題＞

- 粉碎プロセスの最適化検討
- ボールと流体との完全な連成解析技術の開発

＜謝辞＞

本研究の一部は「京」トライアル・ユースで得られた成果です

ご清聴ありがとうございました