異種粒子充てん系の加熱膨張解析のための パソコンによる2次元シミュレーション

中 村 雅 彦* 山 片 卓 正** 都 賀 谷 紀 宏***

Two Dimensional Simulation by Personal Computer for Analysis of Thermal Expansion of Different Particles Packed Bed

by

Masahiko NAKAMURA*, Takamasa YAMAGATA** and Toshihiro TOGAYA***

There is an urgent need to establish a mold for dental precision casting of pure titanium which has an excellent biocompatibility. The present authors have already developed a useful mold composed of refractory ceramic particles as a material for the aggregate and metal particles as a material for controlling expansion due to oxidation during heating. In order to design a mold having much more excellent dimensional precision and favorable other characteristics for quality control of the casting, it is necessary to analyze fundamentally the relationship between the amount of expansion of mold and other factors, such as the void fraction, content of expansive particles, radius ratio of metal and aggregate particles, and binding strength between particles. The present investigation was undertaken to develop two kinds of personal computer programs for simulation of (i) a packing of different sized circles under a gravitational falling condition and (ii) an expansion due to specific expanding circles in such a packed bed as (i). For the simulation (ii) process, the two dimensional finite element method was used. Since there is a good correlation between the results from the present trial simulation and the experimental data, it will be possible in the future to analyze the expansion mechanism of the mold in detail, by applying these developed programs.

Key words : Computer simulation, Dental mold, Particle packing, Expansion mechanism, Pure titanium, Casting

1 緒 言

金属の精密鑄造法の一種としてロストワックス法が各種産業界に普及している。精密鑄造においては室温において、出発模型と同寸法の鑄造物を得るためには溶融金属の凝固収縮および室温まで冷却した時の熱収縮の総収縮量に相当する寸法だけ、鑄造時の鑄型温度に保持された鑄型内での脱ロウ空間を正確に膨張させておく必要がある。著者らは生体親和性が優れる純チタンを歯科補綴物として普及させるために、純チタン金属独自の歯科鑄造システムの確立を目指した一連の研究を推進してきた^{1)~4)}。純チタンは高温での酸素や窒素に対する親和性がきわめて高い。したがって、多形態で単品の鑄造を強いられる小規模な歯科領域で、口腔内での使用に適した精密鑄造物を得るには、鑄造時の雰囲気や鑄型材の熱力学的安定性などの点で従来からの既存の歯科鑄造システムでは鑄造が不可能であり、

新しい歯科鑄造技術の確立が急務であった。特に、鑄造物の寸法調節については、従来から石膏系やリン酸塩系などの鑄型材では硬化時の鑄型の膨張量を、シリカ系では加熱時の石英の $\alpha \rightarrow \beta$ 相転移時の膨張量をそれぞれ利用して鑄造物の上述の凝固および冷却熱収縮量を補償する方法が用いられている。しかし、これらの既存の歯科用鑄型の素材は純チタンの鑄型材としては熱力学的な不安定性のために使用できない。

著者らは既に熱力学的な安定性と歯科埋没の操作性に優れ、実用的経済性も兼ね備えた新しい鑄型材の開発に成功している^{5), 6)}。この開発鑄型材は、室温から鑄造時の鑄型材温度までの温度範囲内で酸化チタンよりも化合物の生成自由エネルギーが小さい耐火性の骨材粒子粉末（例えば、マグネシア⁷⁾、ジルコニア⁸⁾、ジルコン⁹⁾など）と酸化時に膨張したチタニアよりも熱力学的に安定な酸化物に変化する金属粒子粉末（例えば、ジル

† 原稿受理 平成2年2月6日 Received Feb. 6, 1990

* 正 会 員 京都工芸繊維大学 京都市左京区松ヶ崎御所海道町, Kyoto Institute of Technology, Goshokaido-cho, Matsugasaki, Sakyo-ku, Kyoto

** 三田工業(株) 大阪市中央区玉造, Mita Industrial Co., Ltd., Tamatsukuri, Chuo-ku, Osaka

*** 京都市立大学医学部研究センター 京都市左京区聖護院川原町, Research Center for Medical Polymers and Biomaterials, Kyoto University, Kawahara-cho, Shogoin, Sakyo-ku, Kyoto

Fig. 1. Schematic drawing of characteristic dimensional changes during heating and cooling of a newly developed dental mold for casting of pure titanium metal.

コニウム)との混合粉末で構成される。また、室温での硬化速度の調節剤(例えば、炭酸水素ナトリウム)¹⁰⁾を少量含んでいる。本鑄型の加熱冷却時の寸法変化挙動を参考に Fig. 1 に示す。

鑄型の加熱膨張量は、① 骨材粒子と添加金属粒子の各粒子径比、② 全粒子の充てん率、③ 金属粒子粉末の配合率、④ 金属粒子の酸化膨張量、⑤ 全粒子間の結合力などの諸因子によって大きく変化する。また、鑄造の操作性を支配する鑄型の乾燥時および脱ロウ前後の鑄型の機械的強度、鑄造物内部の鑄造欠陥(鑄巣)の発生率に密接に関連する鑄型の通気率などの因子も、上述の①~⑤項目に大きく左右される。

高精度で高品質な歯科補綴用鑄造物を得るには、上述の加熱膨張量の支配因子間の定量的な相互関係を明らかにする必要があるが、その取り組み方として計算機を利用したシミュレーション解析が有用な手段の一つと考えられる。

上述の研究の趣旨に沿って、取り組みの手始めとして本論文ではパソコン規模での2次元系の粒子充てんおよび充てん系の膨張のそれぞれの過程に対するシミュレーションのための各プログラムの開発と各プログラムを用いて得られる計算結果の妥当性の検討を目的とした。

2 実 験

2.1 粒子充てんのためのプログラムの作製

コンピュータによる充てんのシミュレーションの方法は過去に幾つか発表されている^{11)~15)}。本研究のように膨張操作を前提とした場合、充てん方法の違いによる充てん構造の差が膨張挙動に影響を及ぼすことが考えられるが、今回は比較的計算処理時間が短くプログラムも作製しやすいと思われる重力落下によるランダム充てん法を採用した。¹³⁾すなわち、2次元系として Fig. 2

Fig. 2. Principle of a packing of two different sized circles under gravitational falling and rolling around a periphery of a previously settled circle down to the most stable state.

に示すように、酸化膨張する金属粒子と膨張しない骨材粒子の2種の半径が異なる円形粒子を準備し、底が水平な面内に上から下へ落下させ、底の第1層目には最初の接触位置に固定されるものとした。

実際の鑄型材料内での粒子充てん構造は粒子間付着力によって支配され、付着力が大きければかさ高い粗な構造になり、逆に小さければ密な構造になる。この粒子付着力をシミュレーションに入取れることにより、粒子充てん系の空げき率を調節できる可能性があると思われ、以下のような手順で重力落下によるランダム充てんを行なった。すなわち、粒子が落下して最初に接した粒子に付着した点で付着するか否かを決定する一定の確率値、“付着確率(0~100%)”、を充てんを始める前にあらかじめ設定しておき一個の粒子を落下させるごとに0から100までの疑似乱数を発生させる。もしもその値が付着確率の設定値よりも小さければ最初に接した粒子との付着位置で固定し、逆にその値が付着確率よりも大きければ円形粒子の円周を回転して更に粒子接点数(粒子配位数)の大きい位置まで移動するようにした。例えば、付着確率を20%と設定した場合、20%の確率で最初に接した粒子に付着することになる。Fig. 2中の両垂直壁周辺での粒子充てんは壁への接触により充てん構造に差異が生じ、粒子充てん系内を満たす粒子個数が少なくなるほど壁の影響は大きくなってしまふ。そこでFig. 2の両垂直壁からはみ出る粒子は両垂直壁の外側に中央部と同じ粒子充てん層が虚像で配列するとして壁の存在を無視して充てん操作を進めた。粒子充てん領域は縦横比が4:1の縦長の長方形とした。この粒子充てん領域の縦横比は、本実験とは別に実施している実際にガラスおよび金属銅の各球形粒子のモデル充てん試料の寸法の縦横比¹⁶⁾に対応した値を用いて決定したものである。

また、全粒子の充てん個数は以後の膨張シミュレ

Fig. 3. Flow chart for the two dimensional computer simulation of particles (circles) packing.

シヨンの計算時間の制約を考慮して 150~350 個程度とした。充てん個数が 150~350 個程度と幅があるのは充てん領域の縦横の長さを一定としたために充てんする粒子径の大小により充てん領域を埋める個数に差が生じるためである。充てんのための計算用フローシートを Fig. 3 に示す。

2・2 粒子充てん系の膨張のためのプログラムの作製

2・1 節で作製した充てん系で互いに接触する粒子中心間をフックの法則に従うバネ（直線要素）で結んだ骨組み構造を作り、次の仮定のもとに金属粒子による線膨張量に等しい変位を各部のバネの変位として与えた時の骨組み構造全体の変位を有限要素法により計算した。

仮定(1): 接触粒子間に結合力があり、一定の範囲内で引張りやせん断力に抗して結合を維持する。

仮定(2): 膨張粒子の膨張過程中に粒子間に結合力以上の力が加わると結合が切れる。

Fig. 4. Flow chart for the two dimensional computer simulation of expansion on a packed bed of particles (circles) by the finite element method.

仮定(3): 膨張過程中で生じる新たな粒子接触に対して、新たな粒子間結合を設定し解析に組み込んでいく。

仮定(4): 粒子の膨張過程において骨組み構造の各結合の切断の限界値は、粒子間距離が粒子半径の 0.8% となった時とし、部材パラメータであるバネのヤング率の大きさを結合力の強さとする。（ヤング率が小さいと弱い力でも伸び量が大きく結合は切れやすく、逆に大きいヤング率の粒子結合では、バネは伸びにくく切断限界に達しにくく強固な結合に対応する）

仮定(5): 骨組みの各部に加わる力は、直線要素の軸方

Table I. Samples for computer simulation of a particles (circles) packing and a two dimensional expansion.

Sample number of packed bed	Aggregate particle (Non expanding)		Metal particle (Expanding)	
	Particle radius (μm)	Percentage in number of particles (%)*	Particle radius (μm)	Percentage in number of particles (%)*
No. 1	137.0	70.9	59.0	29.1
No. 2	96.5	87.5	59.0	12.5
No. 3	81.0	92.2	59.0	7.8

* The percentages in number of particles listed in Table were determined to keep the constant void fraction of particles packed bed.

向の応力のみではなく、せん断力に対する釣合いを考えるために、軸方向に平行および垂直方向の応力式と骨組みの節点（粒子の中心点）の周りのモーメント（部材パラメータとして断面2次モーメント）を計算の対象とする。（断面2次モーメントの値は節点で結合する直線要素間の変角の容易さを表し、断面2次モーメントの値の増大と共に変角しにくくなることと対応する。）

上述の方法を用いると各粒子間の応力が直線の伸び量として求められ、膨張粒子の膨張後の全粒子間の再骨組化を行うことができる点が有利である。

膨張過程のシミュレーションのための計算用フローシートを Fig. 4 に示す。充てんおよび膨張シミュレーションを試みた各粒子に関する入力条件は、ガラス球と金属銅球を用いた実際の膨張実験モデル試片の作製条件を参考にして Table I に示す値を用いた。膨張シミュレーションは計算の時間および精度の両者を考慮して、金属銅粒子は酸化により粒子径が20%線膨張するので、20%を8回に分けて1回の計算時の膨張率を2.5%として行なった。

3 結果と考察

3・1 粒子充てんプログラムの検討

希望する空けき率を持った粒子充てん系が充てん時の粒子相互の付着確率の調節により得られれば鑄型の

Fig. 5. Relationship between the particle adhesional probability and the two dimensional void fraction of particles for three kinds of packed bed.

通気性、膨張率などの特性の設計に対して極めて有用である。特に、鑄造体の鑄巣の発生を左右する鑄型の通気性は空けき率に支配されるので、寸法精度の向上に加えて高品質な鑄造体を得るためにも鑄型の空けき率の設計は重要である。

本研究で開発した粒子充てん用のプログラムを用いて Table I に示す粒子径比の異なる3種の系に対して、

Fig. 6. Example showing the effect of particle adhesional probability during packing on the configuration of particles in a packed bed of sample No. 1.

Fig. 7. Comparison of particle configurations resulting from the present computer simulation on three different packed bed samples before and after expansion. Two dimensional void fraction of each packed bed before expansion was kept at almost constant of 38%.

充てん時の粒子の付着確率と得られた充てん系の空げき率（2次元平面内の粒子の面積割合として表す）との関係を Fig. 5 に示す。実際の実験ではできる限り球形で粒子径の揃った骨材および金属粒子を準備する目的で入手可能な市販粉体をフルイ分けすることにより Table I に示す粒子径の試料を準備した。

実際の歯科理工分野で用いられる鋳型材の空げき率はおおむね 20~35 vol% 程度であり、本研究の2次元平面内での粒子の面積占有率で表すと Fig. 5 の縦軸の目盛り範囲にはほぼ相当する。Fig. 5 から明らかなように、粒子径比の違いにかかわらず付着確率と空げき率の間には相関性の高い直線関係があることがわかる。Table I に示されるような骨材粒子および膨張粒子の粒子径比が約 3~1 程度の範囲の系においては、粒子径比の影響を受けずに計算時に設定した付着確率によって得られる充てん系の空げき率が $\pm 4.0\%$ 程度の幅で制御できることがわかる。付着確率を変えて作製した充てん系内の粒子充てん状態を参考例として Fig. 6 に示す。

3・2 粒子充てん系の膨張プログラムの検討

Table I に示す 3 種の系で膨張前の空げき率が互いにはほぼ等しい充てん系の膨張前後の粒子充てん状態の変化を比較して Fig. 7 に示す。Fig. 7 において、膨張前に骨組み構造が連続していた部分が膨張後に切断し

たり、粒子の結合角度が広がって系の膨張へ寄与していることが見られる。骨組み構造の中で互いに隣接する切断部分を連ねてできる方向性のある空間はキレツの伝ば状態を示している。すなわち、系全体の見かけの膨張は膨張粒子を中心とする周囲の骨材粒子の同心

Fig. 8. Effect of the two dimensional void fraction in the starting packed bed on the final linear expansion for three different packed bed samples.

Fig. 9. Effect of the mean coordination number around expanding particles on the final linear expansion of packed bed.

円的な膨張ではなく、系内でキレツが部分的に発生することによりもたらされることがわかる。

粒子径比の異なる各系の初期充てん時の空げき率が線膨張率 (Fig. 7 の系の縦方向の寸法変化率で表示する) に及ぼす影響を Fig. 8 に比較して示す。いずれの系も初期充てん時の空げき率が大きいほど系の線膨張率は減少する傾向がみられる。この傾向は Fig. 9 に示すように、膨張粒子のみに関する平均配位数が減少するに従って線膨張率が減少する傾向を考え合わせると理解できる。すなわち、空げき率が大きくなると膨張粒子に接する粒子個数が減少し膨張量の周囲粒子への伝達効果が低下するためと考えられる。Fig. 8 に示す傾向は実際に著者らが鋳型の開発を通して得た経験的な事実と良く対応している。また、Fig. 8 に示すように、空げき率が同じでも粒子径比が大きいほど線膨張率が大きくなることがわかる。Fig. 7 中の膨張後の粒子充てん状態の比較からわかるように、粒子径比が大きい系ほど結合の切れる箇所数やキレツの長さが大きくなる傾向が認められる。このようなクラックの入りやすさの違いは本シミュレーションでは膨張粒子の個数割合に関係しているように考えられる。

4 結 言

著者らが先に開発した純チタンの歯科用精密鑄造鋳型、すなわち、耐火骨材粒子粉末と加熱酸化時に膨張する金属粒子粉末との混合粉末粒子充てん系の加熱膨張メカニズムを明らかにし、更に希望する特性を有する鋳型を設計するための方法を確立させる目的で、膨張粒子 (金属粒子) と非膨張粒子 (耐火骨材粒子) の混合系の2次元での粒子充てんと膨張の両シミュレーションのプログラムを作製した。

本プログラムを用いることにより粒子の充てんに対しては、付着確率を変えることにより所定の空げき率を持つ2次元粒子充てん系を設計できることがわかった。

粒子充てん系の膨張に対しては、本プログラムは初期充てん系の空げき率の増大と共に膨張率は減少シクラックの入りやすさを決定する因子、今回の実験では膨張粒子の平均配位数や配合個数割合によって系の見かけの膨張が起こるといった実際の鋳型材の開発時に著者らが経験した充てん率と加熱膨張率との関係に対応した解析結果が得られ、今後更に詳細な膨張機構の解析に対して有用な手段となることがわかった。

(平成元年10月19日 第27回粉体に関する討論会にて講演)

参 考 文 献

- 1) 中村雅彦, 都賀谷紀宏, 鈴木政司, 井田一夫, 歯科材料・器械, 5, [特集号7], 162 (1986).
- 2) 中村雅彦, 原田龍太郎, 都賀谷紀宏, 桑村康彦, 一木吉之助, 大森三生, 歯科材料・器械, 6, [特集号10], 92 (1986).
- 3) 中村雅彦, 昭和62年度文部省科学研究費補助金 (試験研究(1)) 研究成果報告書 (課題番号61870078) (1988).
- 4) 三浦維四, 井田一夫編, “チタンの歯科利用” (1988) クインテッセンス出版
- 5) 中村雅彦, 君野和也, 奥田 進, 都賀谷紀宏, 鈴木政司, 井田一夫, 日本歯科理工学会誌, 2, 783 (1983).
- 6) 中村雅彦, 上村達也, 奥田 進, 都賀谷紀宏, 鈴木政司, 井田一夫, 歯科材料・器械, 3, [特集号B], 55 (1984).
- 7) 都賀谷紀宏, 川村隆行, 井田一夫, 藪上雅彦, 有馬立人, 歯科材料・器械, 1, 424 (1982).
- 8) M. Nakamura, T. Togaya and K. Ida, Adv. in Ceram., 24, Sci. and Tech. of Zirconia III, 945 (1988).
- 9) 中村雅彦, 都賀谷紀宏, 後藤秀明, 鈴木政司, 井田一夫, 歯科材料・器械, 6, [特集号9], 141 (1987).
- 10) 都賀谷紀宏, 川村隆行, 井田一夫, 藪上雅彦, 有馬立人, 歯科材料・器械, 2, 777 (1983).
- 11) 砂田久一, 岡本光美, 山本伸行, 大塚昭信, 材料, 21, 508 (1972).
- 12) M. Suzuki and T. Oshima, Powder Tech., 36, 181 (1983).
- 13) 伊藤孝至, 鰐部吉基, 坂尾 弘, 日本金属学会誌, 50, 423 (1986).
- 14) J. Rodoriguez, C. H. Allibert and J. M. Chaix, Powder Tech., 47, 25 (1986).
- 15) R. C. Burk and P. S. Apte, Am. Ceram. Soc. Bull., 66, 1389 (1987).
- 16) 中村雅彦, 秋田 憲, 山片卓正, 木村隆俊, 塩見治久, 第26回粉体工学会夏期シンポジウム講演要旨集, p. 23 (1990).
- 17) 戸川隼人, “マイコンによる有限要素解析” (1972) 培風館
- 18) 日本鋼構造協会編, “コンピュータによる構造工学講座 II -2- B” (1972) 培風館