CAE

安 田 健^{*1}・田 上 秀 一^{*2}

1. はじめに

CAEに関する研究総覧を執筆するにあたり、改めてCAEについて考えてみた。例えば、現在の測定装置には操作制御やデータ処理の目的でコンピュータに接続されている。CAEは、コンピュータに支援されるものであるため、測定装置自体がCAEを行っているようにも判断でき、CAEとは身近なものだと考えることもできる。また、CAEの特徴の一つは、実際に見えない部分や実験で不可能な条件下でのシミュレーションができることである。したがって、CAEを行う上で大事なことは、想像力を豊かにすることとともに、周辺知識を豊富に持つことであると考えている。少なくとも、得られた結果の妥当性を判断するための知識は必要である。

一方では、CAEに関する技術は計算機の性能向上に伴い年々進歩しており、毎年数多くのCAEに関する研究報告がなされている。本稿では、成形加工関連の文献より昨年発表されたCAEに関する論文の中から、筆者らの興味ある流動解析に関する内容の研究事例を中心として、CAE研究の現状や新しい取り組みについて報告する。多少筆者らの偏った論文の引用や記述になることをご了承願いたい。

2. CAEの現状 —流動解析を中心に—

成形加工の分野でCAEが積極的に利用されている分野に射出成形がある。射出成形プロセスにおける流動解析は他の成形方法に比べて実操業プロセスに多用されており、市販のソフトウェアも数多く発売され、完成されているというイメージを持っているが、現在でもなお研究事例が報告されている。例えば、Silvaら¹⁾はソフトウェア「Rem 3D」を用いて射出成形サイクルの計算に適用した。樹脂の温度依存性(WLF式の適用)、流体の非ニュートン性(Crossモデルの適用)、樹脂の密度変化はTait則²⁾を用いている。圧力分布や充てん過程などについて計算結果と実験結果は良好に一致している。射出成形に似た溶融樹脂の金型内樹脂充てん過程のシミュレーション研究例としては、他にMitaniとHamada³⁾によるエポキシ樹脂の一体成形に

図1 ガスアシスト射出成形プロセスのシミュレーションで用いられる境界条件および仮想濃度 ψ と気液界面形状との関係^{4),5)}

おける金型内樹脂充てん過程の三次元非等温流動解析事例がある。これは、コントロール・ボリューム法をベースとした有限要素法を用い、気液界面位置はVOF (Volume of Fluid) 法を適用している。VOF法は、自由表面の変化に応じたメッシュ変形を必要としないため、射出成形や一体成形のプロセスで見られる溶融樹脂の充てん過程を捉えるには有用な計算手法である。また、Polynkinら^{4),5)}はガスアシスト射出成形について、三次元シミュレーションを試みている。この問題は、気体(ガス)と液体(プラスチック溶融体)の多層流動問題であるので、メッシュ変形を含む流動問題では表現は困難である。そこで、プラスチック溶融体の仮想濃度 ψ ($\psi = 1$ で溶融体、 $\psi = 0$ でガス)の移流問題を解くことで、解析領域中の仮想濃度を算出し、解析領域内に存在する流体を決定して、解析領域内の密度と気液界面位置($\psi = 0.5$)を算出する。図1は、解析領域における境界条件と仮想濃度との関係を示した図である。このシミュレーションにより、ガスアシスト射出成形の充てん過程やプロセス終了後における成形品の肉厚分布などの予測を可能にしている。図2は、最終成形品の計算結果と実験結果の比較例である。進入させたガスによる成形品中の空間の形状がよく捉えられていることがわかる。樹脂流動の充てん過程はいずれの研究例でも実験結果と一致する結果が得られており、「流す」、「形にする」、「固める」という成形加工のプロセスのうち、「流す」の工程だけであれば、ある程度良好な解析結果が得られる状況になってきたと判断できる。

このように射出成形プロセスは、試験流体に弾性を持たない純粘性非ニュートン流体とした場合でも実験結果と一致する良好な結果が得られる。これは、流路が壁面で囲まれたせん断流動が支配的な系あるいは、低粘度で弾性効果が小さい系に対して、純粘性非ニュートン流体を仮定した

^{*1} Yasuda, Takeshi
(独) 東京都立産業技術研究センター研究開発部
東京都北区西が丘 3-13-10 (〒115-8586)

^{*2} Tanoue, Shuichi
福井大学大学院工学研究科材料開発工学専攻
福井市文京 3-9-1 (〒910-8507)
2006. 5. 15 受理

図2 ガスアシスト射出成形における最終成形品の実験結果と計算結果の比較例¹⁾。左図が実験結果、右図が計算結果

解析でも有効であることを示している。ただし、ご存じのようにプラスチック溶融体は粘弾性流体である。上記に当てはまらないような伸長流動が混在した系、例えば、自由表面を持つ系や渦流れなどは、粘弾性特性が重要になり、それを定性的にでも正確に捉えるためには、粘弾性を考慮した流動計算が必要となってくる。計算時間や手間のかかった割には実験結果と合わない、などの理由から実操業で導入されているケースは少ないが、コアな研究者にとっては興味深い研究課題であり、昨年も成形加工プロセスに関する粘弾性流動計算の研究事例が発表されている。例えば、Kim ら⁶⁾はフィルムキャスティング工程の二次元（正確には2.5次元といったほうがよいだろう）の非定常粘弾性流動解析を行い、ネックイン、エッジビードというおなじみのフィルム形状に加え、ドローレゾナンスの様子を捉えている。Zevallos ら⁷⁾は、ロールコーティング工程で見られる不安定流動を検討するため、ロールコーティング直後における高分子流体の粘弾性流動解析を行った。用いている試験流体がOldroyd-BモデルとFENE-Pモデルであるため、流動現象に対する弾性の寄与を検討することが主眼におかれていると考えられる。自由表面上における法線応力が弾性の寄与の増大に伴い大きくなること、などを明らかにしている。また、近年、Pom-PomモデルやCCRモデル、XPPモデルなど粘弾性流動計算に応用できそうな構成方程式がいくつか提案されており、それらを用いたシミュレーション研究例も報告されている^{8),9)}が、急縮小流れのような基本的な流動問題を研究のターゲットとしており、実際の成形加工プロセスで利用できるのかどうかは、今後の研究展開を待ちたいところである。

一方で、流れ場や温度場だけの把握ではなく、プラス α の結果を得ることも要求されており、その一例が固化や結晶化のシミュレーションである。以前から射出成形や溶融紡糸プロセスでは研究例が報告され、昨年もいくつか研究事例が発表された。Lee ら¹⁰⁾は、溶融紡糸プロセスについて応力誘起結晶化を含む非定常粘弾性流動シミュレーションを行っている。構成方程式にはPTTモデルを用い、有限差分法による解析を実施している。溶融紡糸プロセスは、結晶化により不安定性が増すことを明らかにしている。BarotとRao¹¹⁾は、フィルムキャスティング工程における結晶化を表現する計算モデルを提案している。この研究では、有限要素法や有限差分法で場を求めるという研究ではなく、薄いフィルムであることや伸長変形のみを考慮するなどの様々な過程を施し、計算モデルを構築してシミュレーションを実施する研究である。近年の計算機自体の性能強化により、支配方程式を強引に解く話が主流になってきているように感じていたが、まだ様々な仮定の下で支配方程式を簡略化して、現象の本質を抽出した解析を行なおうとする研究も続けられている。これらは、計算負荷低減に付与する可能性があるが、汎用性の点からどうしても特定のプロセスに適用が限られる。また、TannerとQi¹²⁾は、既存の結晶化を表す計算モデルについて吟味している。このような論文は、計算モデル構築時における結晶化モデルの選択指針が得られるため、ある意味で有益な論文であるといえる。

3. 新規分野への開拓

CAEといえば射出成形で広範に利用されていることは周知の通りであるが、射出成形のみではなく新規な分野への適用も試みられている。最近行われている試みのひとつとして発泡成形への適用がある。SeoとYoun¹³⁾は、化学反応、発泡、金型充てんを含むポリウレタンフォームの反応射出成形プロセスを表現できる理論モデルを構築し、有限体積法による三次元シミュレーションを実施している。この理論モデルにはもちろん発泡に伴う密度変化や温度変化なども考慮されている。図3は、三次元キャビティ充てん過程におけるフローフロントの計算結果と実験結果との比較である。図面の左側が計算結果、右側が実験結果である。経過時間が同じである場合、計算結果が実験結果よりフローフロントの位置がゲートより遠い。実験ではポリウレタンフォームはホモジナイザーが混ざっており、そのため発泡は混合物が金型へ移動する前からわずかに進行したため、実験における混合物の粘度が計算で用いた流体の粘度より高くなったことを理由に挙げている。河野ら^{14),15)}は、密度モデル、粘度モデル、発熱モデル、発泡密度モデルなど解析に必要な物理量に関する計算モデルについて実験結果と理論を用いてそれぞれ構築し、「FLOW 3D」を使用して、ポリウレタン樹脂の発泡樹脂流動解析を実施している。

以上の研究事例は、どちらかといえば発泡現象をマクロ的視点で捉えたものである。工学的には有利な捉え方であるが、発泡現象を正しく把握するには、材料中の気泡成長を正確に把握することなど、もう少し小さな視点から発泡成形を捉えることも大事である。OtsukiとKana¹⁶⁾は、発泡成形で見られる材料内における気泡成長について、粘弾性流動解析を利用した詳細な検討を行っている。孤立した

図3 ポリウレタン反応射出成形の充てんプロセスにおけるフローフロントの計算結果と実験結果との比較¹³⁾。図面の左側が計算結果、図面の右側が実験結果

球形の気泡を仮定し、気泡の周りにはプラスチック溶融体領域が存在すると仮定している。計算結果から、ポリマーの strain-hardening 性は気泡成長速度には強く影響を及ぼさないことなどが明らかになり、気泡成長には、初期において材料の弾性が寄与するものの、気泡核の密度、周囲の圧力、発泡剤の初期溶解濃度、拡散係数が樹脂の粘弾性特性よりも重要なファクターであることを明らかにしている。また、大槻ら¹⁷⁾は、発泡成形における気泡の延伸破泡について、PTT モデルによる粘弾性流動解析をベースにした検討を行っている。図4に計算結果例を示す。図中の時間は延伸開始からの経過時間であり、延伸は2秒で完了する。PP-A は、延伸完了時には流体領域が切断しており、その後は弾性回復により切断点間の距離が大きくなっている。一方、PP-F は延伸完了時にも切れていない。論文中では図4に示すような解析を粘弾性モデルの物質定数を変えてシミュレーションを実施しており、大変形時のひずみ硬化性が破泡の抑制に効果的であることなどを明らかにしている。また、この分野では、分子動力学法の利用も行われている。Pavel と Shank¹⁸⁾は、PET と芳香族ポリエステルブレンド物中への酸素と二酸化炭素の拡散に関する検討に対し、分子動力学法を利用している。ここでは、材料の分子シミュレーションソフトウェア「Cerius」を用いて計算されており、溶融樹脂中への酸素や二酸化炭素の拡散係数はポリエステルブレンド物の自由体積の増加とともに指数関数的に増加することなどを明らかにしている。分子動力学法は近年良く使用されている CAE 技術のひとつであるが、主に基礎研究で使われているケースがほとんどであり、工学的な応用面で適用されているところまではまだ至っていないのが現状である。しかし、分子レベルの拡散、反応、結晶化などの機構に関係した分子種ごとの基本現象を理解し、モデル化する場合などに役立つものとしてプラスチック成形加工にも今後利用されてくるだろう。

さて、「マイクロ・ナノ成形」という言葉を耳にした読者も多いことだろう。年次大会や秋季大会において、毎回特別セッションが企画され、活発な議論が展開されている。

図4 発泡成形における気泡間の樹脂の変形および気泡の合一の計算結果例¹⁷⁾。延伸は2秒で完了。プラスチック溶融体の温度は190℃

文字通り小さい領域の話であり、実験による吟味もなかなか困難であることを考えると、マイクロ・ナノ成形の分野に研究・開発に CAE が大きく寄与できると考えてよい。最近、この分野をターゲットとした CAE の研究も見られるようになってきた。Phelan Jr ら¹⁹⁾は、マイクロチャンネル内の圧力流れについて、「FIDAP」、 「FlexPDE」の二種類のソフトウェアを用いて解析した。マイクロ流路内の流体は線形流れであると近似できることから、流体は非圧縮性ニュートン流体とし、よどみ点が発生するような流体モデルを想定して、形状の変化に対するよどみ点付近の流れの様子を検討した。いろいろな検討がなされているが、複雑な流路を流れるニュートン流体のシミュレーションと基本的には同じ話であると判断できる。このような解析がマイクロ・ナノ成形におけるプロセス設計へ果たして役に立つのかどうかは、今後の評価を待ちたいところである。Hallmark ら²⁰⁾はマイクロキャピラリーフィルムの成形プロセスについて、純粘性非ニュートン流体である Carreau-Yasuda モデルを試験流体として、「POLYFLOW」による流動シミュレーションを実施している。図5は、17穴のマイクロキャピラリーフィルムキャストの計算結果の一例である。断面図については、光学顕微鏡写真も示している。実験結果と一致した良好なシミュレーションが実現できている。見えない部分を明らかにするという CAE の特徴を考えると、マイクロ・ナノ成形分野への CAE の適用事例は今後増えてくることが予想される。

4. 最適化問題

射出成形などの各種成形加工プロセスにおいて、短時間に操作条件等の諸条件の最適化を行うことは、CAE に求められている要求のひとつである。成形加工プロセスで見られる樹脂流動や伝熱などの諸現象が曲がりなりにも捉えることができるようになった現在では、最適化が CAE の重要な研究課題のひとつになっており、昨年も射出成形プロセスを中心に研究成果が発表された。Zhai ら²¹⁾は、二つのゲートを有する射出成形プロセスについて、射出圧力に対応する流路内の圧力勾配の絶対値が最小になるようなゲート位置を見つけ出す Pressure Gradient Search Scheme と呼ばれるアルゴリズム提案した。それをソフト

図5 マイクロキャピラリーフィルムキャストのシミュレーション例²⁰⁾。ドロー比は9, メルトドロー長さは10 mm。(a) 計算結果の全体像(フィルムの1/4部分を表示している), (b) フィルム断面の光学顕微鏡写真, (c) フィルム断面の計算結果

ウェア「Moldflow」に組み込み、射出圧力が最小になるように二つのゲート位置の最適化を実施した。遺伝的アルゴリズムによる従来の最適化アルゴリズムとの比較を行ったところ、最適化が完了するまでのシミュレーション回数が約90%軽減されたとのことである。Kwakら²²⁾は、射出成形により作られるレンズの表面分布を改善する目的で、ソフトウェア「3D Timon」によるシミュレーションとニューラルネットワークアルゴリズムを組み合わせ、熔融温度や金型温度などの射出成形プロセスの最適化を行う手法を提案した。Ilincaら²³⁾は、Continuous Sensitivity Equation Methodと呼ばれる支配方程式の感度を評価する手法を、射出成形プロセスシミュレーションにおける感度の評価に適用し、例として様々な射出成形条件に関する圧力低下の感度について示している。成形条件を変化させる際の指標を得ることができるため、プロセスの最適化に有用であるとしている。

CAEによる最適化に関する研究は射出成形分野だけでなく、押出成形の分野でも研究がなされている。例えば、SunとGupta²⁴⁾は、流動解析ソフトウェア「PELDOM」とBFGSアルゴリズムを用いた押出フラットダイの最適設計を試みている。「最適化」は、実操業に大きく寄与するため、現在のCAE研究における重要なキーワードになっているように感じている。

5. 最後 に

コンピュータを使うために必須の基本ソフトウェアであるWindows[®]が発売されて10数年が経過した。その間、コンピュータは、あれば便利だろうという機器から日常の業務や研究に必要不可欠なアイテムになった。これは、コンピュータの性能向上よりも、ソフトウェアの機能向上によりコンピュータを容易に操作できるようになったことが大きな要因であろう。この話は、CAEソフトウェアにも当てはまると考える。現存するCAEソフトウェアには、例えば「スイッチを押せば簡単に樹脂流動解析が行えます」といったユーザーフレンドリーな気軽さがまだない。CAEソフトウェアが、「あれば便利」から「なくてはならない」

という存在になるには、実験値と一致する結果を素早く得られる技術を確認することはもちろんのこと、GUI部分の強化など、見た目にわかりやすくかつ扱いやすくすることも課題のひとつではないだろうか。CAE技術の進歩も含めて、今後の展開に期待したい。

参 考 文 献

- 1) Silva, L., Gruau, C., Aggasant, J.-F., Coupe, T. and Mauffrey, J. : *Intern. Polym. Processing*, **20**, 265 (2005)
- 2) Chiang, H. H., Hieber, C. A. and Wang, K. K. : *Polym. Eng. Sci.*, **31**, 140 (1991)
- 3) Mitani, T. and Hamada, H. : *Polym. Eng. Sci.*, **45**, 364 (2005)
- 4) Polynkin, A., Pittman, J. F. T. and Sienz, J. : *Intern. Polym. Processing*, **20**, 191 (2005)
- 5) Polynkin, A., Pittman, J. F. T. and Sienz, J. : *Intern. Polym. Processing*, **20**, 191 (2005)
- 6) Kim, J. M., Lee, J. S., Shin, D. M., Jung, H. W. and Hyun, J. C. : *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, **132**, 53 (2005)
- 7) Zavallos, G. A., Carvalho, M. S. and Pasquali, M. : *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, **130**, 96 (2005)
- 8) Sunarso, A., Yamamoto, T. and Mori, R. : *Nihon Reoroji Gakkaishi*, **33**, 135 (2005)
- 9) Sirakov, I., Haouche, A. A. and Guillet, J. : *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, **126**, 163 (2005)
- 10) Lee, J. S., Shin, D. M., Jung, H. W. and Hyun, J. C. : *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, **130**, 110 (2005)
- 11) Barot, G. and Rao, I. J. : *Int. J. Non-Linear Mech.*, **40**, 939 (2005)
- 12) Tanner, R. I. and Qi, F. : *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, **127**, 131 (2005)
- 13) Seo, D. and Youn, J. R. : *Polymer*, **46**, 6482 (2005)
- 14) 河野努, 佐伯準一, 上野恵尉, 荒木邦成, 井関崇, 松岡信一 : 成形加工, **17**, 196 (2005)
- 15) 河野努, 佐伯準一, 荒木邦成, 井関崇, 松岡信一 : 成形加工, **17**, 407 (2005)
- 16) Otsuki, Y. and Kanai, T. : *Polym. Eng. Sci.*, **45**, 1277 (2005)
- 17) 大槻安彦, 梅田尚, 津乗良一, 篠原正之 : *Nihon Reoroji Gakkaishi*, **33**, 9 (2005)
- 18) Pavel, D. and Shanks, R. : *Polymer*, **46**, 6135 (2005)
- 19) Phelan Jr, F. R., Hudson, S. D. and Handler, M. D. : *Rheol. Acta*, **45**, 59 (2005)
- 20) Hallmark, B., Gadala-Maria, F., Mackley, M. R. : *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, **128**, 83 (2005)
- 21) Zhai, M., Lam, Y. C. and Au, C. K. : *Intern. Polym. Processing*, **20**, 14 (2005)
- 22) Kwak, T. S., Suzuki, T., Bae, W. B., Uehara, Y. and Ohmori, H. : *J. Mater. Process. Technol.*, **170**, 24 (2005)
- 23) Ilinca, F., Héty, J.-F. and Pelletier, D. : *Intern. Polym. Processing*, **20**, 86 (2005)
- 24) Sun, Y. and Gupta, M. : *Intern. Polym. Processing*, **20**, 380 (2005)