

TECHNORIDGE

2018 319



本号でのシミュレーションスケール図

特集

シミュレーション技術を駆使した
ものづくりを目指して

TECHNORIDGE

2018 319

目次

| | |
|---------------------------|---|
| 就任のご挨拶／巻頭言 | 2 |
| 化合物の反応性、物性のシミュレーション | 3 |
| 分子シミュレーションによる材料解析の事例 | 4 |
| 流体シミュレーションを利用した流体継手の開発 | 6 |
| トポロジー最適化シミュレーションを活用した構造設計 | 7 |
| 機器紹介 | 8 |

就任のご挨拶



所長 四元 弘毅

平成30年10月1日付けで所長を拝命しました四元弘毅です。前職では、国立研究開発法人産業技術総合研究所に勤務しておりました。

和歌山県工業技術センターは平成28年に創立百周年を迎えたのを機に、これまでの「技術立県」への取り組みをさらに強化すべく、「オープンラボ構想」を立ち上げました。

新商品の開発やイノベーションには、しばしば、独創的なアイデアや先進的な技術開発が必要ですが、昨今は、それを生み出すために与えられる時間的余裕が極めて短くなって来ております。また、技術の細分化・複雑化が進み、その進展が著しく早いことから、もはや一企業単独でイノベーションを成し遂げるのは難しいとの考えから、「オープンイノベーション」が提唱

されるようになりました。企業や大学や公的研究機関が、それぞれの得意な技術を持ち寄って、一緒にイノベーションを達成しようというものです。

工業技術センターのオープンラボは、このオープンイノベーションの一翼を担うものです。当センターと協力関係にある大学や公的研究機関とも連携しながら、県内企業の皆様の技術開発をお手伝いさせていただきたいと考えております。これまでの技術相談や受託試験に加え、共同研究の場として、このオープンラボをご活用いただければ幸いです。

当センターは、これからも皆様のお役に立てるよう努力を重ねてまいります。今後とも、ご指導ご鞭撻賜りますよう、よろしくお願い申し上げます。

近年、コンピュータを利用したシミュレーションは様々な分野で利用されており、当センターにおいても様々な技術を導入しています。

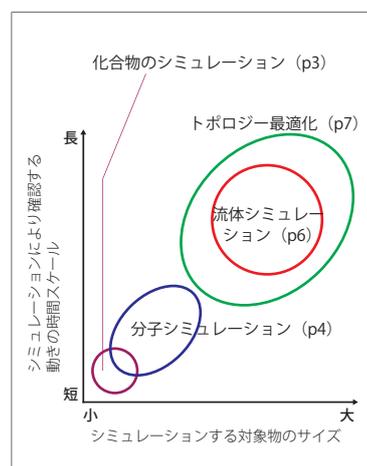
例えば、ケミカルスマートものづくりラボには、目に見えない分子レベルから目に見える集合体レベルでのシミュレーションまでを可能とする計算化学システムを導入しています(TECHNORIDGE318号参照)。

また、3Dスマートものづくりラボでは3DプリンターやCAE(Computer Aided Engineering)技術を導入し、デジタルデータを活用した効率的なものづくりへの転換を支援しています。

本号では、それぞれのラボで行っている各種シミュレーション技術の内容をご紹介します。本号をご覧いただき、効率的な製品開発に向けてこれらの技術を積極的にご利用いただくためのきっかけになれば幸いです。

編集担当

西山 靖浩



化合物の反応性、物性のシミュレーション

化学産業部 森 一

はじめに

計算機によるシミュレーションは、各種材料開発におけるトライアンドエラーを低減し、開発スピードを向上させるための有効な手法の一つとなっています。各種シミュレーションは、理論に基づいて立てられた計算式を解くことにより実行されていますが、その計算には一般的に莫大な時間を要します。しかし近年、計算機能力の向上に伴って、高精度な計算を比較的容易に行えるようになり、シミュレーションを活用した材料開発が広く普及してきています。

化成品類の研究開発に着目すると、未知化合物の設計、合成とその機能評価が繰り返し行われています。合成には対象化合物の「反応性」の予測が、機能設計には基本的「物性」の予測が必須ですが、多くはこれまでの経験等に基づき、トライアンドエラーが行われているのが実情です。これら化学物質の分野でも計算機によるシミュレーションは有効で、化合物の諸物性を予測できることから、経験に頼ってきた研究開発のスキームを、より効率的に実施できるツールとして活用が進められています。

本稿では工業技術センターに導入された量子化学計算ソフト「SPARTAN」(TECHNORIDGE 313号参照)を用いたシミュレーションの具体例について紹介します。

化合物の反応性の予測

化学反応の多くは「電子」が関与して起こることから、化合物の電子状態や電荷を知ることで、反応性に関する多くの情報を得ることができます。図1はナフタレンの構造とHOMO (Highest Occupied Molecular Orbital) 軌道の電子密度の分布の様子を示しています。赤色の濃い部分が電子密度の高い部分で、電子が不足している求電子試薬との反応はこの位置で起こりやすいことを示唆しています。実際にナフタレンのニトロ化反応などは、上記の位置で選択的に起こることが知られています。

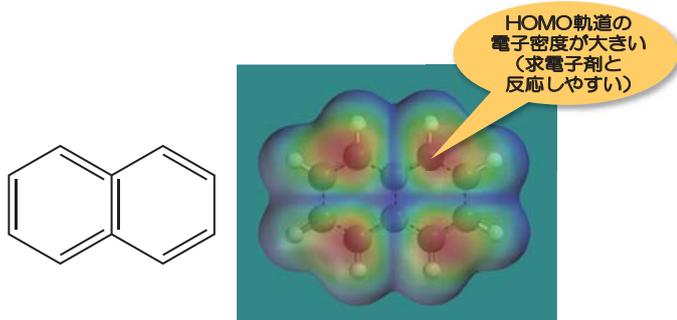


図1 ナフタレン HOMO 軌道の電子密度

化合物の物性の予測

化合物の光の吸収に関する性質は、色素開発などでは最も重要な評価項目です。量子化学計算を使うと、吸収スペクトルの予測を比較的容易に行うことができます。図2は各種桂皮酸誘導体の吸収スペクトルで、上が実測データ、下が計算で得られる振動子強度と吸収波長の数値からスペクトルを作成¹⁾した結果です。化合物の構造の違いによるスペクトル変化を概ね再現できていることが分かります。

一方で、最大吸収波長の位置や強度に関して実測データと計算結果では若干のずれもあります。一般的に量子化学計算では、絶対零度、真空状態の化合物を計算しますが、実際の化合物では温度や周りの媒体などがスペクトルに影響を及ぼしており、このことがずれを生む一つの要因です。現在、実在の化合物に近い状態を再現する計算手法は日々開発されてきています。対象分子や周りの環境に応じた計算手法を適切に選択することで、実データにより近い結果が得られる日もそう遠くないと期待されます。

おわりに

量子化学計算は計算機、計算ソフトの目覚ましい進歩により、専門家だけでなく誰でも簡単に行える時代となっています。ただ、適切な計算結果を得るためには、計算手法などの選択にある程度の知識や経験が必要です。工業技術センターでは初心者の方でも職員がサポートしながらご利用頂けるメニュー(研修生)などもご用意しておりますので、ぜひご活用ください。

[参考文献]

1) 近畿化学協会コンピューター化学部会公開セミナー資料 No. 69 p. 90

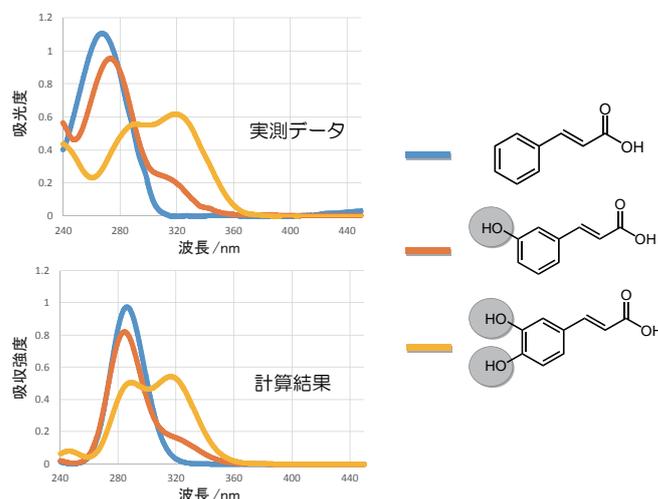


図2 桂皮酸誘導体の吸収スペクトル

分子シミュレーションによる材料解析の事例

生活・環境産業部 山下 宗哲

はじめに

原子レベルで運動方程式を解く力学的手法や、統計力学を利用して統計的手法により分子系の運動を解析する手法を、分子シミュレーションと呼びます¹⁾。前頁で紹介した量子化学計算では、原子の中の電子状態や電荷の計算により、分子の静電ポテンシャルや構造最適化をしています。本稿で紹介する J-OCTA (TECHNORIDGE 313 号参照) を用いた分子シミュレーションでは、構造最適化をした複数の分子を対象としています。この分子シミュレーションの一つとして分子動力学法があります。分子動力学法は、複数の原子や分子をばねでつながっている集合体として、原子や分子等の粒子の一つずつに運動方程式を付与し、各時間における粒子の位置や速度などを算出します。この時、温度・エネルギー・体積・圧力を変動・固定させます。例えば、温度を固定して体積が安定するまで分子動力学計算を行うことで、その温度における一定数の原子で占める体積(密度)を求めることができます。あるいは、複数の分子の中で一つの分子に着目し、分子動力学計算を行うことにより、一つの分子の単位時間での移動距離を求めることで、分子の自己拡散係数を求めることができます。このように、分子シミュレーションでは、原子や分子の経時情報により様々な特性値を求めることができます。

ガラス転移温度の計算

密度は、前段の計算例の中で比較的容易に計算できる特性の一つです。密度の計算結果をさらに解析することで、材料の耐熱性の基準の一つとして重要なガラス転移温度(Tg)を計算することができます。ガラス転移温度は、理化学辞典にはガラス転移点として、「ガラス転移点よりも高温では網目状構造をなす鎖状高分子の各部分の熱運動が激しく、ゴム状弾性を示すが、

ガラス転移点以下では熱運動が自由体積の減少によって抑制されて硬くなる。」²⁾と記載されています。また、「ガラス転移点の付近では、比体積、熱膨張係数、比熱などは温度変化に対してかなり顕著な折れ曲がりを示す。」²⁾とも記載されています。比体積の逆数である密度の計算を各温度について行い、温度と比体積のグラフを作成することで、急激に比体積が変化する温度を Tg として計算することができます。

図 1 にビスフェノール F 型エポキシ樹脂のモノマー 50 個を用いて作製した架橋構造体を示します。このような構造体に対して、各温度にて分子動力学計算を行うことで図 1 中の立方体セルの大きさが変動します。各温度での比体積を示した結果(図 2)より、グラフの傾きが変化している 403K を Tg と求めることができます。

図 3 に、ビスフェノール F 型エポキシ樹脂(2 官能)と類似の構造の 3 官能と 5 官能のエポキシ樹脂の Tg 計算結果を示します。2 官能に比べて 3 官能にすれば Tg は上昇します。一方で、3 官能と 5 官能では Tg にほとんど差が出ていません。つまり、2 官能よりも多官能のエポキシ樹脂を用いれば Tg が高くなるものの、官能基

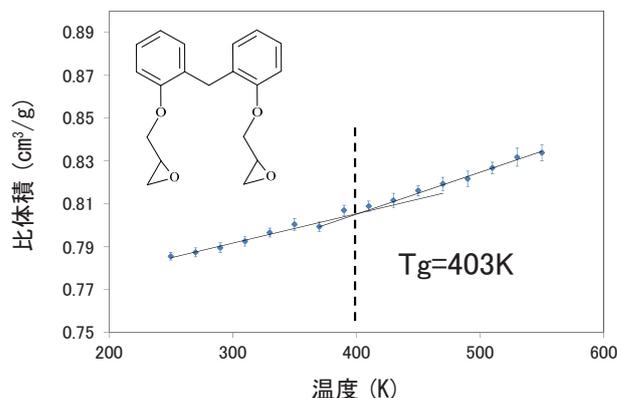


図 2 Tg 計算結果

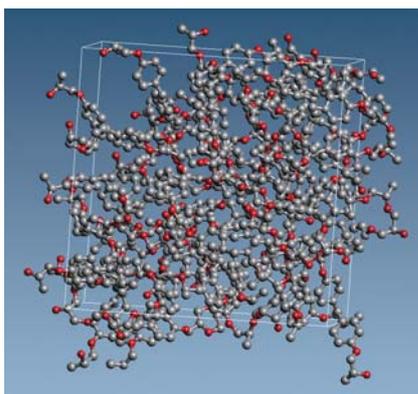


図 1 Tg 計算に用いた架橋構造体

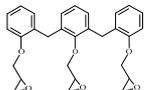
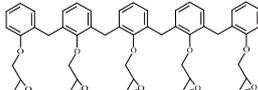
| モノマー構造 | Tg |
|--|------|
| 2官能  | 403K |
| 3官能  | 421K |
| 5官能  | 420K |

図 3 各種エポキシ樹脂の Tg 計算結果

数だけを多くしても T_g の上昇には限界があることが示唆されます。このように、熱硬化性樹脂の初期構造の違いにより、硬化後の T_g の傾向を予測することができます。

一軸伸長における高分子中の低分子の挙動

分子動力学法では、単位セルに対して引張・圧縮・せん断などの変形をさせながら計算を行うこともできます。例えば、一方向への引張の変形をさせながら分子動力学計算を行うことで、原子スケールでの引張試験を再現することができます。原子一つ一つに対して分子動力学計算を行う場合、原子の数が増えるとともに、計算の時間も増えます。計算をより大きなスケールで行うために、分子シミュレーションでは、複数の原子を一つの粒子と見なし（粗視化）計算することがよくあります。

図 4 に、柔軟な高分子の集合体に剛直な低分子を添加剤として混合させたモデルを示します。このモデルでは高分子・低分子を粗視化しています。一軸伸長の分子動力学計算を行うことで、高分子が一方向に並びながらくびれが発生し、一部分が伸びていく様子が再現できます。一方で、添加剤は、くびれが発生している部分にはあまり存在せず、伸びが発生していない部分に残っている様子がわかります。これは、高分子の変形において、添加剤が集まっている部分の伸びが抑制されていると考えられます。このように、高分子材

料を一方向に変形させた場合の添加剤の動きを可視化し、メカニズムの考察や説明に用いることができます。

おわりに

分子シミュレーションでは、 T_g 計算のような材料の物性値の予測や、分子の局在化の可視化が可能です。本稿での紹介例は、比較的計算結果と実測値が合いやすい例や材料変形挙動で一般的に言われている例です。対象のモデルとスケールが実際の現象と矛盾しないようにシミュレーションを行うことで、製品開発の一環として利用が可能になります。新製品開発などに際し、ぜひ、本ソフトをご活用ください。

〔参考文献〕

- 1) 長岡正隆, “すぐできる 分子シミュレーション ビギナーズマニュアル”, 第4刷, p2, 講談社, 2014.
- 2) 長倉三郎 他, “理化学辞典”, 第5版, p267, 岩波書店, 1998.

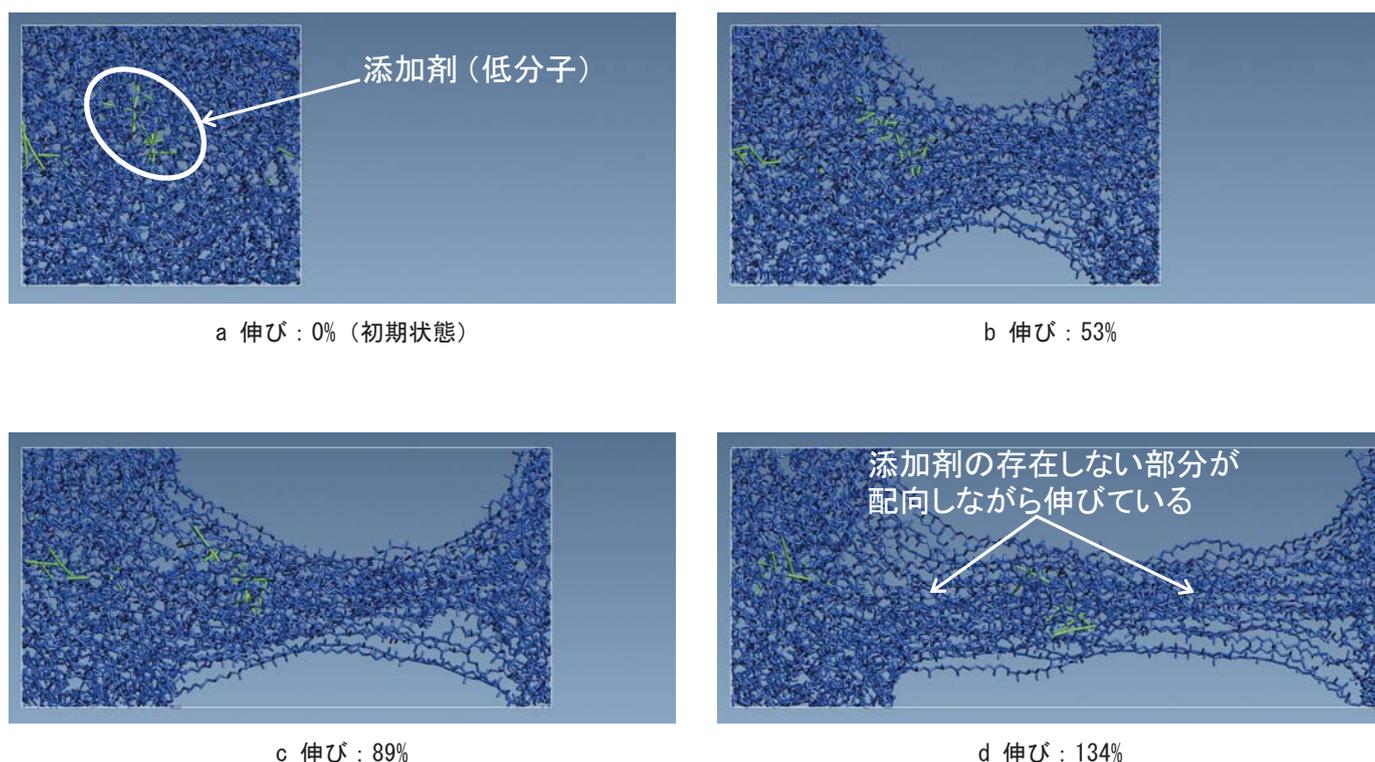


図 4 一軸伸長計算のスナップショット

流体シミュレーションを利用した流体継手の開発

機械産業部 小石 英之

はじめに

ものづくりの現場では、設計開発中の試作品や市場不具合品の改善のために、設計や製造工程の変更はつきものです。この変更に係るコストについて考えてみると、設計が進むにつれてこのコストは増大していきます。また、製品出荷後の不具合対応となると現物の回収等により、更にコストが激増する事態となってしまいます。これに対し、設計や製造工程を検討する初期段階ではコストは小さく抑えられます。こういった背景から、競争力ある製品の玉成のためには、できるだけコストが小さく済むうちに製品の信頼性や付加価値を高める取組が重要となってきます。これを実現する効果的な手段の一つが 3D-CAD (Computer-Aided Design) と CAE を利用した、コンピュータ上で仮想的に行う試作と試験です。当センターでは、主に応力、伝熱や流体シミュレーションが実施可能で、それぞれ強度、温度分布、気体や液体の流れの検証ができます。

流体シミュレーション

流体シミュレーションは、物体内外の気体や液体の流れを流体の基礎方程式である、質量、運動量、エネルギー 3 つの保存則をコンピュータで計算することにより可視化します。例えば、電子機器の開発では、各部品に熱がこもらない様な構造が求められ、配管やタンクの設定構築では淀むところなく、できるだけスムーズに流せる性能が求められます。流体シミュレーションを利用することで、部品形状や構造の配置を変更すると気体や液体の流れがどう変化するかを明らかにでき、現物の試作試験を行うことなく具体的な部品の形状や配置案の検討が可能となります。イメージするのが難しい流れの動きが目に見える形で表せることで、直観的ではなく合理的な根拠を踏まえた改良を進めることができます。さらに、開発だけでなく営業活動でも、

高い性能や製品の狙いを表現できる手段として有用な道具となります。

流体継手の開発での利用事例

利用事例として、図 1 に流体継手のシミュレーション事例を示します。本モデルはケースとシャフトの間に粘性流体を満たし、片方を回転させると、流体の粘性によりトルク（ねじる力）がもう一方に伝達される機構です。ケースとシャフトの速度差によって流体がせん断され、粘性によるせん断の抵抗によりトルクが伝達します。この機構は自動車であればエンジンのクランクシャフトのねじり振動を抑えるダンパーや、4WD の駆動伝達機構に使われています。流体シミュレーションを使用し、シャフトとケースの間の流速分布を計算でき、どの部分で力が伝達されているかを確認されます。例えば、シャフト A の流速分布結果からは、均一な流速分布であるため、どの部分でもほぼ一様に流体はせん断され、力が伝達されているということが分かります。さらに、シャフトの形状を B や C に変えると速度分布はどう変化するか、また、伝達トルクはどれほど向上するか、ということが現物試験することなくコンピュータ上で予測できます。

おわりに

流体シミュレーションはものづくりのツールとして、スピード、コスト、品質向上などの多くのメリットを生み出します。

当センターは、これらの機器とこれまで取り組んできたノウハウを用いて皆様のものづくりをサポートしていきたいと考えます。製品開発や出荷後の不具合原因究明等でお困りのことがございましたら、ぜひご相談ください。ご利用をお待ちしております。

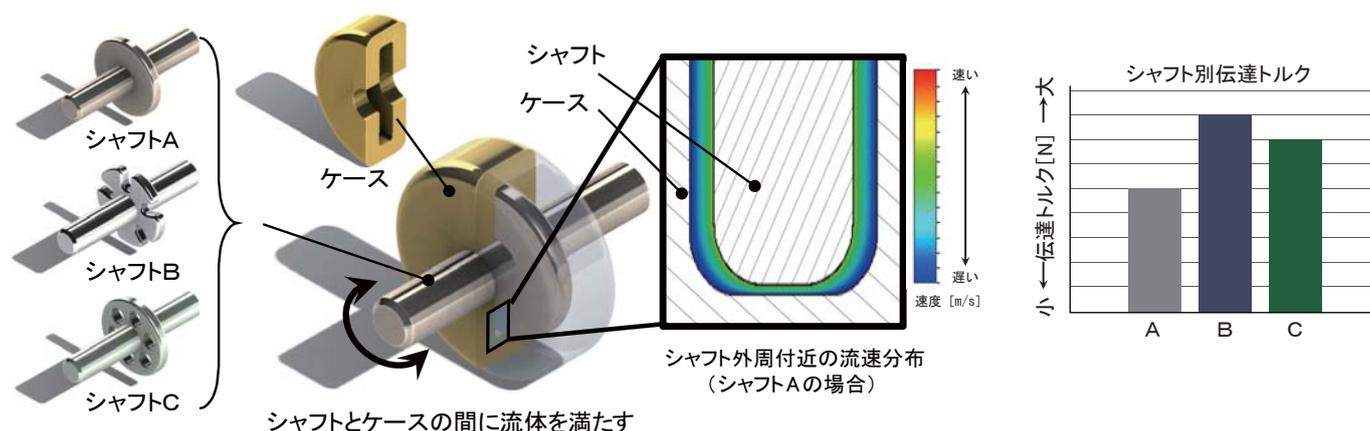


図 1 流体継手のシミュレーション

トポロジー最適化シミュレーションを活用した構造設計

機械産業部 上森 大誠

はじめに

近年、工業製品や建築物の設計現場では、コンピュータを使った自動設計手法「コンピューショナル・デザイン」の活用が進んでいます。コンピューショナル・デザインの中核技術にトポロジー最適化シミュレーション（以下「トポロジー最適化」と記載）と呼ばれる最適化技術があり、斬新なアーチ形の屋根が目をつけた故ザハ・ハディド氏が設計した新国立競技場の1次案（残念ながら予算オーバーによる計画見直しで廃案になってしまいましたが・・・）も、トポロジー最適化を駆使して設計されています。本稿では、トポロジー最適化について、解析事例を交えながら概要等についてご紹介します。

トポロジー最適化とは

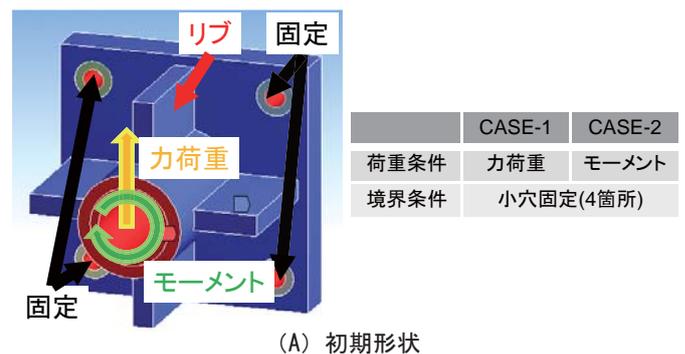
現在、工業製品の構造設計には、①寸法最適化、②形状最適化、③トポロジー最適化の3つの最適化技術が利用されています（図1参照）。このうち、トポロジー最適化とは、「製品の使用状況で想定される構造的な制約、荷重・拘束条件の下で、設定した最適化領域（材料分布可能な領域）において、最も効率のよい材料の分布を見つける最適化技術」のことを言います。トポロジー最適化では、図1に示すように、最適化領域に対して自由自在に穴をあけたり埋めたりすることができるため、他の2つの最適化技術よりも形を変えていく際の自由度が高くなり、最も優れた構造を見つけ出す可能性が高くなります。

トポロジー最適化の解析事例

トポロジー最適化の解析事例として、ブラケットの解析例を紹介します（図2参照）。解析では、荷重条件の違いが最適化形状に与える影響を検証するため、図2(A)に示すとおり、〈CASE-1〉では鉛直上向きの荷重、〈CASE-2〉では時計周りの向きのモーメントを先端に負荷しました。一方、境界条件に関しては両者共通と

し、4箇所の小穴を固定しました。加えて、図2(A)の青色の領域を最適化領域として、部材の最小厚さ2mm、質量を保持する割合は20%（=80%の軽量化）という制約条件下で、変形量を最小化する形状を解析した結果、最終的に図2(B)の結果が得られました。これより、荷重条件の違いにより、最適化の結果形状が大きく異なっていることが分かります。特に、リブの個数に大きな特徴があり、初期形状では上下左右に4個あったものが、〈CASE-1〉では上下の2個に削減され、〈CASE-2〉では完全に無くなっています。すなわち、変形量の最小化という最適化問題に対し、〈CASE-1〉の荷重条件では左右のリブによる補強の効果はない、〈CASE-2〉の荷重条件ではリブによる補強の効果はないと言えます。

トポロジー最適化では、初期形状での応力分布をCAEで検証し、応力が発生していない部分の材料は不要とみなし除去していくことで形を変えていきます。一例として、〈CASE-1〉の初期形状での応力分布を図3に示します。これにより、左右のリブは青色の一樣分布であるのに対し、上下のリブは黄色がかかった非一樣分布であるのが分かります。図において、黄色は大きな応力、青色はほとんど応力が発生していないことを意味しているため、応力が発生していない青色の部分を除き、左右のリブは消失し、上下のリブのみが残ることになります。



(A) 初期形状

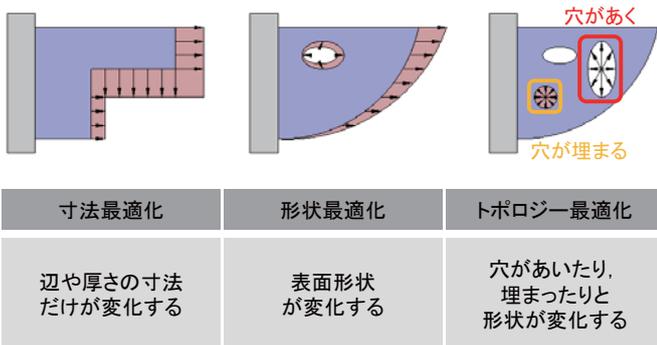
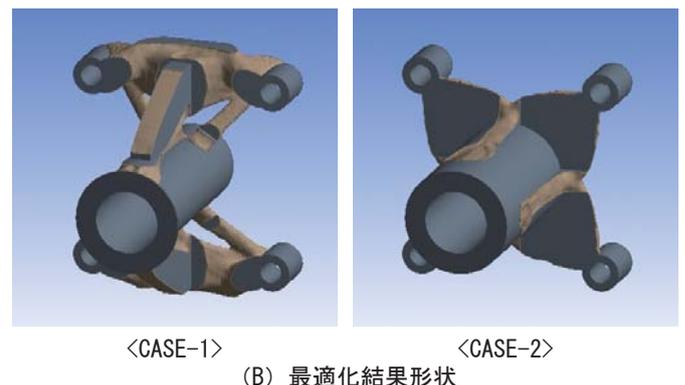


図1 構造設計で利用される3つの最適化技術



(B) 最適化結果形状

図2 ブラケットのトポロジー最適化

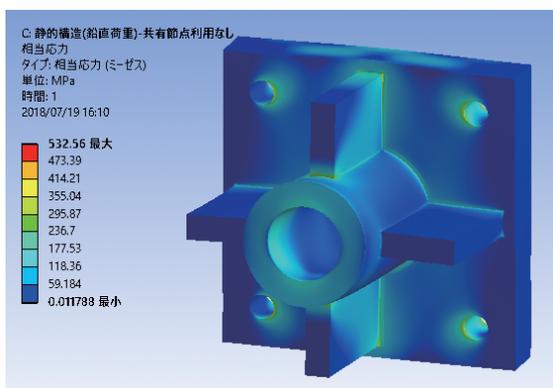
トポロジー最適化シミュレーションを活用した構造設計

トポロジー最適化と3Dプリンタの融合

工業製品の構造設計において、トポロジー最適化の活用が活発になってきた背景には、3Dプリンタの普及があります。先程のトポロジー最適化の事例を見ていただければ分かるかと思いますが、最適化で得られた形状は非常に複雑であるため、切削加工や成形といった既存の加工技術では製作することが困難です。しかし、断面形状を積層して全体の形を作り上げる3Dプリンタであれば、設計データと同じ形に作り上げることができます。特に、トポロジー最適化によって得られた最適化形状は、3Dプリンタで必要となるSTL形式のデータで出力することができるため、容易にその形状を製作することができます(図4参照)。

おわりに

本稿で紹介したトポロジー最適化は、形を変えていく際の自由度が高いため、構造をどのように決めてもよい設計初期の段階で大まかな形状を決定するのに適しています。一方、設計が進み、ある程度設計案が決まった段階では、大きく形を変えるのは困難であるため、形を変える上での自由度が少ない寸法最適化や形状最適化を用いたほうが、最適化による軽量化や性能向上を図れる可能性が高くなります。当センターでは、昨年度新規導入した『最適設計支援システム』により、寸法最適化や形状最適化を行うことも可能ですので、最適化技術に興味を持たれた方は、ぜひ、当センターまでご連絡ください。



<CASE-1>

図3 初期形状における応力分布



<CASE-1>



<CASE-2>

図4 3Dプリンタによる造形

機器紹介

事業名：平成30年度機械工業振興補助事業（公益財団法人JKA）
機器名：全有機体炭素計

KEIRIN 

●この設備の使用は？

○製品名（メーカー）

全有機体炭素計 TOC-LCPH（株式会社島津製作所）

○仕様

燃焼触媒酸化方式 TOC 計

・TOC 測定範囲：1mg/L～3,000mg/L（非分散赤外吸収方式）

・TN 測定範囲：1mg/L～3,000mg/L（化学発光方式）

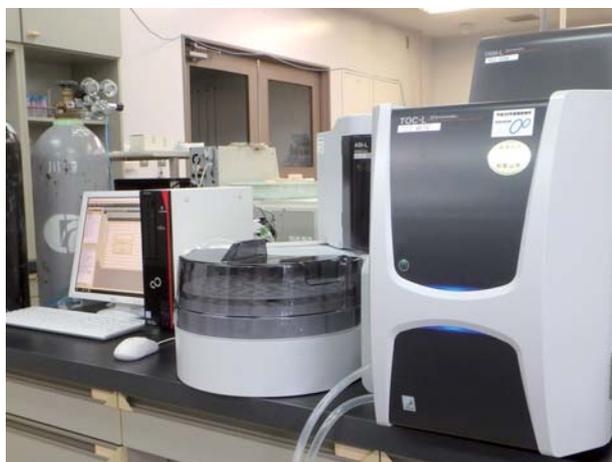
●この設備の特徴・用途は？

○特徴

水中に含まれる有機物を有機体炭素量（TOC）として測定する装置です。全窒素（TN）の同時測定や、全炭素（TC）、無機体炭素（IC）の測定も可能です。また、3.5%の塩分や懸濁物を含む試料の測定も可能ですので、ご相談ください。

○用途

- ・水質管理（例）工業用水、排水、下水処理排水等
- ・プロセス管理（例）製造ラインにおける各種行程管理、排水処理工程管理等
- ・研究（例）汚泥減容化、埋め立て地浸出水処理、微生物培養等



技術情報誌
編集・発行
和歌山県工業技術センター
テクノリッジ
和歌山市小倉60番地

発行日
2018年10月31日
TEL
073-4477-2880

印刷
御坊市
隆文社印刷所
TEL
073-822-0115