

三菱化成（株）総合研究所に於ける計算機科学の展開

三菱化成（株）総合研究所

影山博徳

1. 序

三菱化成（株）は1969年以来、研究開発促進のため、総研内にコンピューターを設置し、

(1) 研究開発の効率化——一般技術、事務計算

(2) 高度解析、設計への応用——高度技術計算

(3) データ、情報の集積——データ・ベース構築、利用の目的で活用してきた。1986年高度解析、設計への活用を強化するため、富士通製スーパー・コンピューターVP-50を導入し引き続き使用している。

現在の総研に於けるネット・ワークを図-1に示すが、VP-50を導入した当初に比べ、月間の計算機使用率が上限に来たため、イーサネットを所内にはりめぐらしEWS (Engineering Work Station)を分散配置すると共にイーサネット幹線及び、EWSの下にパソコン端末を約100台接続し、又VP-50に直接、端末を約90台接続して開放型分散システムを構築し、上記目的の推進を計っている。

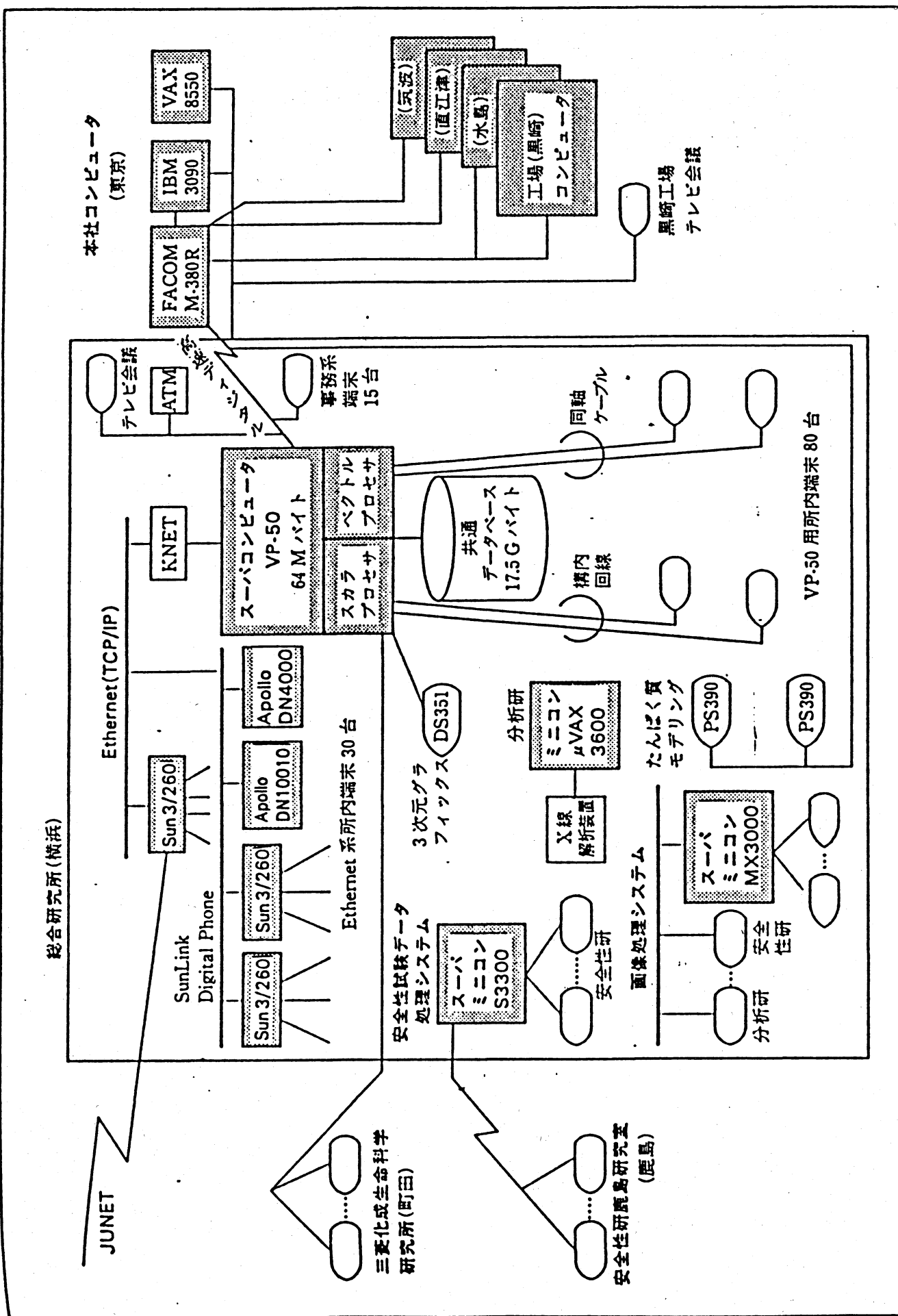


図1 三変化成総合研究所コンピュータ・ネットワーク

今回は、総研内に於ける計算機の高度利用（高度解析、設計への応用）の例について紹介する。

計算機による高度解析、応用を大別すると、次ページのごとくなる。

この中、分子設計、材料設計を支援するため、分子軌道法計算（MO）、分子動力学計算（MD）、分子力場計算（MM）を行なっている。

又、生産支援、商品設計を支援するため、所謂CAE（Computer Aided Engineering）として、構造解析、一般流体解析、高分子加工シミュレーション、電気・電磁場解析、熱伝導解析を行なっている。

その他、プラント・プロセス設計の為、プロセス・シミュレーターを用いている。

以下、個別に事例を紹介する。

2. 分子科学計算

分子科学計算の検討対象としては下記のテーマがある。

- (1) 触媒反応、ラジカル反応の解明
- (2) 色素分子の吸収波長の予測
- (3) 医農薬の構造活性相関

(分子構造と薬効との相関性を統計的に解析する事)

今回は、総研内に於ける計算機の高度利用（高度解析、設計への応用）の例について紹介する。

計算機による高度解析、応用を大別すると、次ページのごとくなる。

この中、分子設計、材料設計を支援するため、分子軌道法計算（MO）、分子動力学計算（MD）、分子力場計算（MM）を行なっている。

又、生産支援、商品設計を支援するため、所謂CAE（Computer Aided Engineering）として、構造解析、一般流体解析、高分子加工シミュレーション、電気・電磁場解析、熱伝導解析を行なっている。

その他、プラント・プロセス設計の為、プロセス・シミュレーターを用いている。

以下、個別に事例を紹介する。

2. 分子科学計算

分子科学計算の検討対象としては下記のテーマがある。

- (1) 触媒反応、ラジカル反応の解明
- (2) 色素分子の吸収波長の予測
- (3) 医農薬の構造活性相関

(分子構造と薬効との相関性を統計的に解析する事)

目的

手段

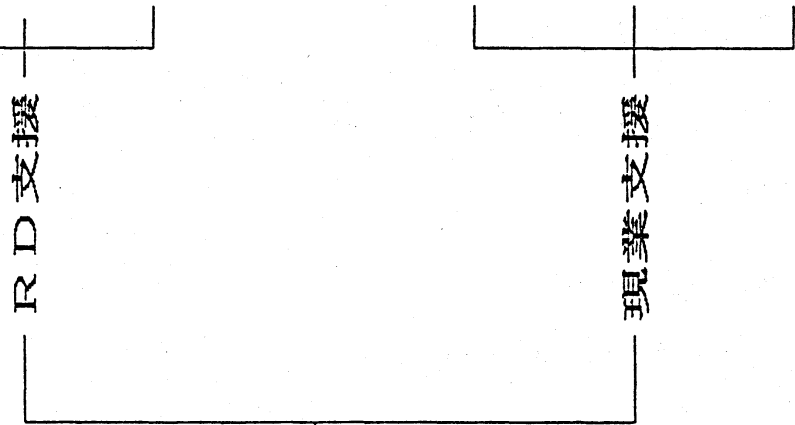
分子軌道法計算
分子動力學計算
分子場解析
構造解析
応用人工知能
データベース構築
利用, 構築
高分子加工シミュレーション技術

材料設計
分子設計
医農薬設計支援

流体流動解析
高分子加工シミュレーション技術
熱, 伝導解析
電気, 電磁場解析
構造解析
応用人工知能
プロセス, シミュレーション

生産支援
商品設計
プロセス設計

計算機応用技術の利用目的



(4) 酵素と薬物とのドッキング・スタディ

(5) 高分子の運動性の評価

(6) 多成分高分子の形状分布

これらのテーマを検討する手段としては、(1) から

(3) については、対象とする分子が小さい時、非経験的分子軌道法計算を用い(ソフト名:分子の構造解析には、GAUS82,HONDO7,吸収波長の予測には、JMOL3-MICA3)、分子が大きい時は、半経験的分子軌道計算(ソフト名:分子の構造解析には、MOPAC,吸収波長の予測には、INDO/S-CI)を用いている。(4) - (6)のテーマについては、分子力場計算(ソフト名:MM2)、分子動力学計算(ソフトは自作)を用いている。

3. CAE

3-1 流体解析

現在、数多くの汎用流体解析ソフトが市販され、入出力も簡易化されて、計算機になじみの無い、或いは、流体解析の基礎理論を知らない人にも、簡便に解析することが可能になってきている。当社では、約10年前から、本格的に流体解析に取り組み、自作ソフトにより、検討を行なってきたが、1982年英国のCHAM社より燃焼炉解析プログラムCORA3をソース・コードつきで

導入し、その後、1987年スーパー・コンピューターの導入を前提に、数値流体力学の新手法を取り入れたNAGAREのベクトル版ソースコードを計算流体力学研究所より導入した。このNAGAREは、非定常の3次元流体解析が可能で乱流の3次元非定常性の解析には極めて有力であるが、計算時間がかかる事、および入出力が簡便では無いこと、検討テーマが増加してきたこと等の理由で、市販の汎用流体解析ソフトを、試験的に借用し、利用価値が高いと判断したものについては、借用から、購入へと切り替えてきている。(次ページ参照)

各ソフトは、計算結果と実測データを比較検証し、合理的な範囲内で一致することを確かめた上で、形状、境界条件等を変更して、ケース・スタディを行ない、設計・運転等の指針に用いている。

具体的なテーマとして、目的別に分類すると、

(1) 既存装置の改善・改良

直接、又は、間接的にとらえられた装置内部の現象を解析により再現、又は、推定し、問題点を抽出し、改善策を具体化する。

(例)

攪拌槽内の液液混合—収率向上

汎用流体解析ソフト

ソフト名	ホスト計算機	ソースコードの有無	特徴
NAGARE	VP-50	有	直接シミュレーション 非定常解析, BFC, 燃焼反応組み込み
CORA3	VP-50	有	$k-\epsilon$ 乱流モデルのみ 入出力を簡易化 攪拌槽の取扱が可能
SPRINT	VP-50	有	$k-\epsilon$, ASM, RSM 各乱流モデルの選択が可能
FLUENT	VAX8550	無	$k-\epsilon$, ASMが取扱い可 入出力が簡便, 攪拌槽の取り 扱い可能(?), 機能が狭い
PHOENICS	VAX8550	無	$k-\epsilon$, ASMが取扱い可 機能が幅広い, 入出力がやや 煩雑, 攪拌槽の取扱が可能
FIDAP	VAX8550	無	FEMの流体ソフト $k-\epsilon$ 乱流モデルのみ 形状任意性がある
自作ソフト多数	VP-50	有	$k-\epsilon$ のみ 上記ソフトの購入以前に作成

熱交換器内の流速分布—固形物の付着防止

触媒充填反応器入り口の温度分布—劣化防止

(2) スケール・アップ

ベンチ・プラントのデータと解析結果とを整合し、スケール・アップした時の装置を最適化する。

(例)

懸濁重合槽内の剪断応力分布—粒径の均一化

反応炉内の温度、流速分布—品質の安定化

(3) 装置の設計

新しく装置を設計する際、設計のポイントが定量的又は、定性的に把握されている場合、その条件を満足する装置・構造を解析で求める。

(例)

ガス分散装置の流速分布—均一分散

反応ガスの混合度分布—短時間での均一混合

(4) 装置挙動・品質の予測

装置の運転条件を変更するため、事前に解析を行ない、装置の挙動、製品の品質等を予測する。

(例)

ボイラー内の温度・流速分布—NO_x,SO_xの減少

流体解析を実施する際に、注意すべき事として、

(1) 現実の複雑な形状、複雑な境界条件、反応を、實際上、計算するため、形状、境界条件、反応速度式等を単純化する必要がある。この単純化のため、および計算精度の問題から、計算結果と実測値が一对一で対比する事が出来ない場合が多い。

この事から、計算結果を必ずしも定量的に評価せず、定性的に、方向付け程度に使用する事が多い。

(2) ソース・コードが開示されていないソフトでは、内部でいかなる計算がされているのか不明で、計算結果と実測値が異なった時の対処方法が、解からない場合がほとんどである。又ソフト自体に用意されているモデル以外のモデルを組み込もうとしても、ユーザー・サブルーチンを広く許容しているソフトは無く解析対象が制限される。

この事から、当社では、出来るかぎりソース・コードを入手することが出来るソフトを選んで、購入し、解析技術者のレベル向上を計り、ソース・コードの変更、モデルの組み込みにより解析対象の幅を拡張している。

実際に当社では、CORA3に攪拌槽モデルを組み込み攪拌槽の解析を実施し、又、NAGAREを反応を

含む熱連成に拡張し、ボイラー内の燃焼反応をふくむ流体解析を実施している。(図-2)

一方、汎用流体解析ソフトは解析対象を限定し、一般ユーザーへ開放している。

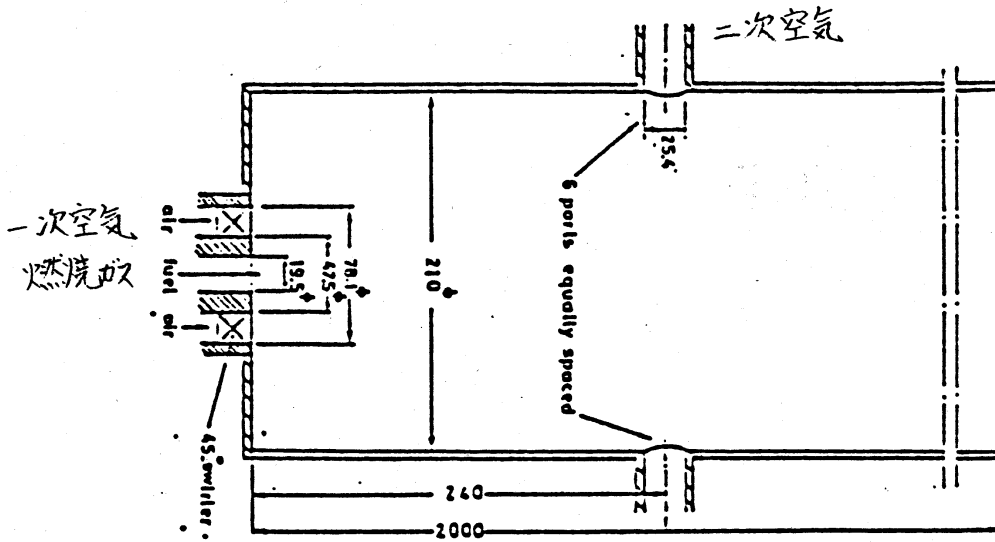
3-2 ポリマー加工シミュレーション

プラスチックの製造に於て、原料(モノマー)から、最終製品(二次製品)に成るまでの過程を次ページに示す。当社の様な材料メーカーが成形加工メーカーに、材料を売る場合、材料と成形加工方法とをセットにして売り込むことにより、増販・拡販につながる事が多い。この様な技術サービスの一環として、計算機を用いるポリマー加工シミュレーションが世界的に発達してきている。

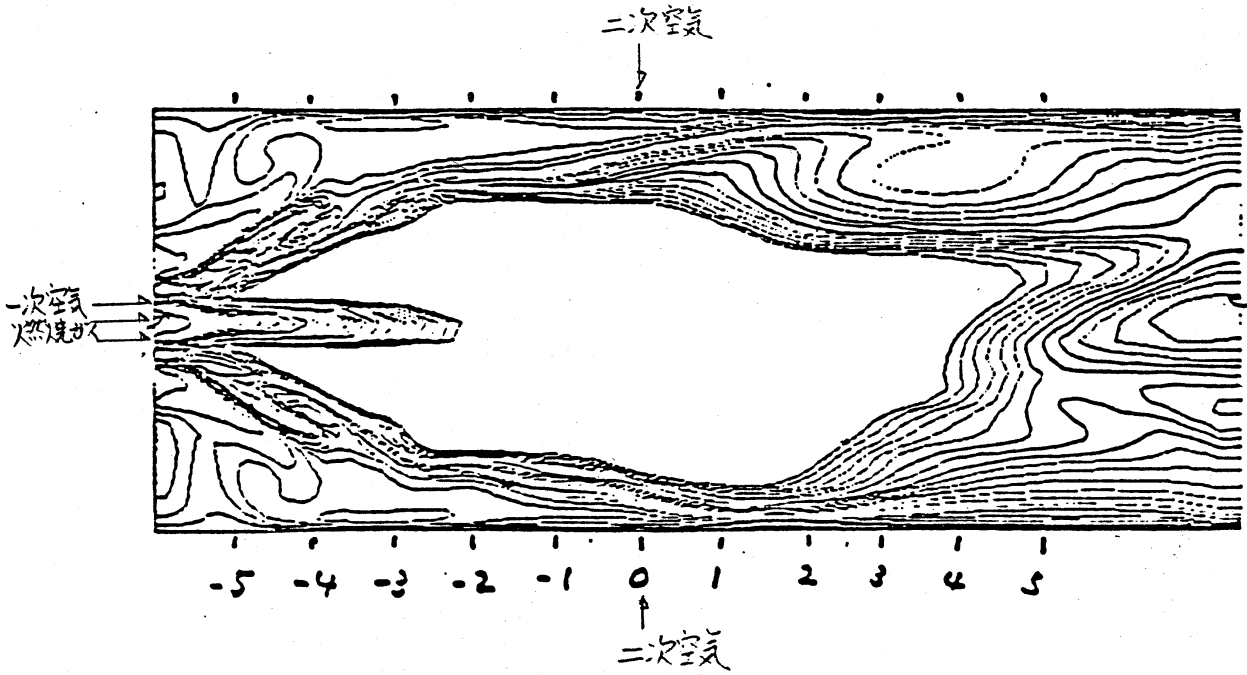
成形工程に於て

- (1) 材料に補強材(ガラス繊維等)を混練し、チップにする工程(混練工程)
- (2) チップから実際に形を作り出す工程
(成形工程-射出, 押出, 移送(RTM)、スタンプ、インフレ、反応(RIM)等の方法)

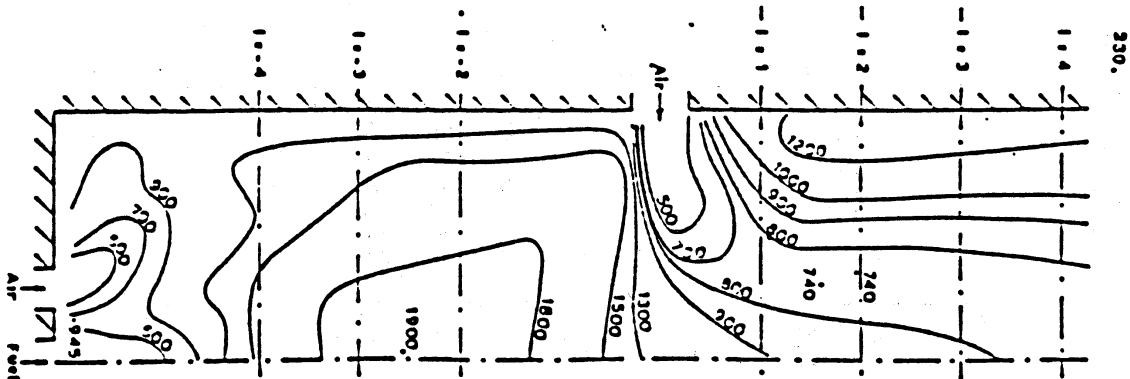
がある。



シミュレーションのディメンション

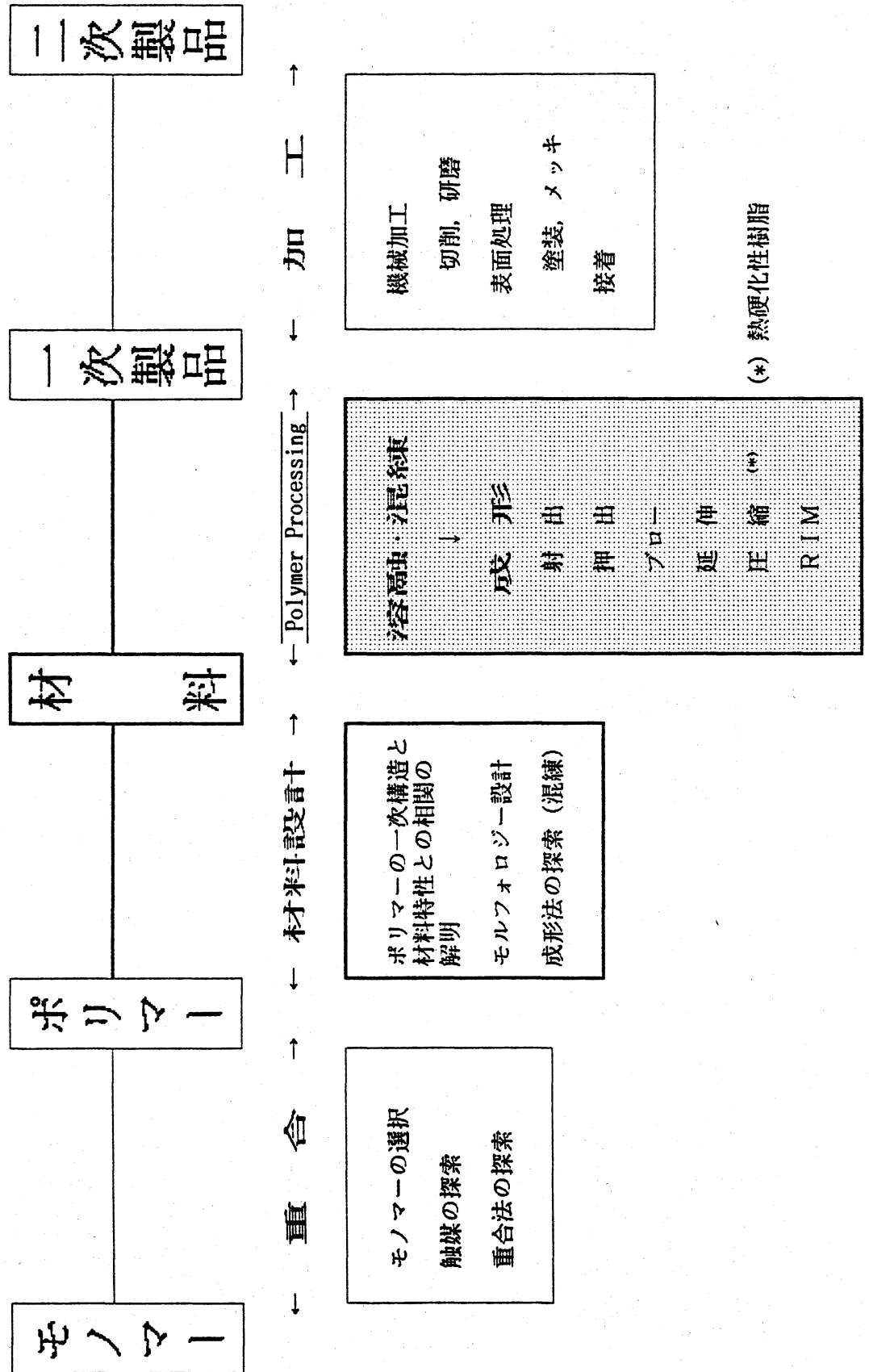


ダイレクトシミュレーションの結果



k-εモデルによる結果

プラスチックの成形加工における要素技術の位置づけ



ここでは、主として(2)の工程の計算機シミュレーションの当社でのとりくみを紹介する。

(A) 射出成形シミュレーション

当社では、1985年米国コーネル大のコンソーシアムに加入し、以来充填解析プログラム (FLOW3D)、保圧解析プログラム (PACK3D)を導入、改良し、更に進んで冷却解析プログラム (COOL3D)、を開発し、構造解析と併用しつつ、ポリマーの拡販・増販のための技術サービスを行なっている。一連の解析フローを次ページに示す。

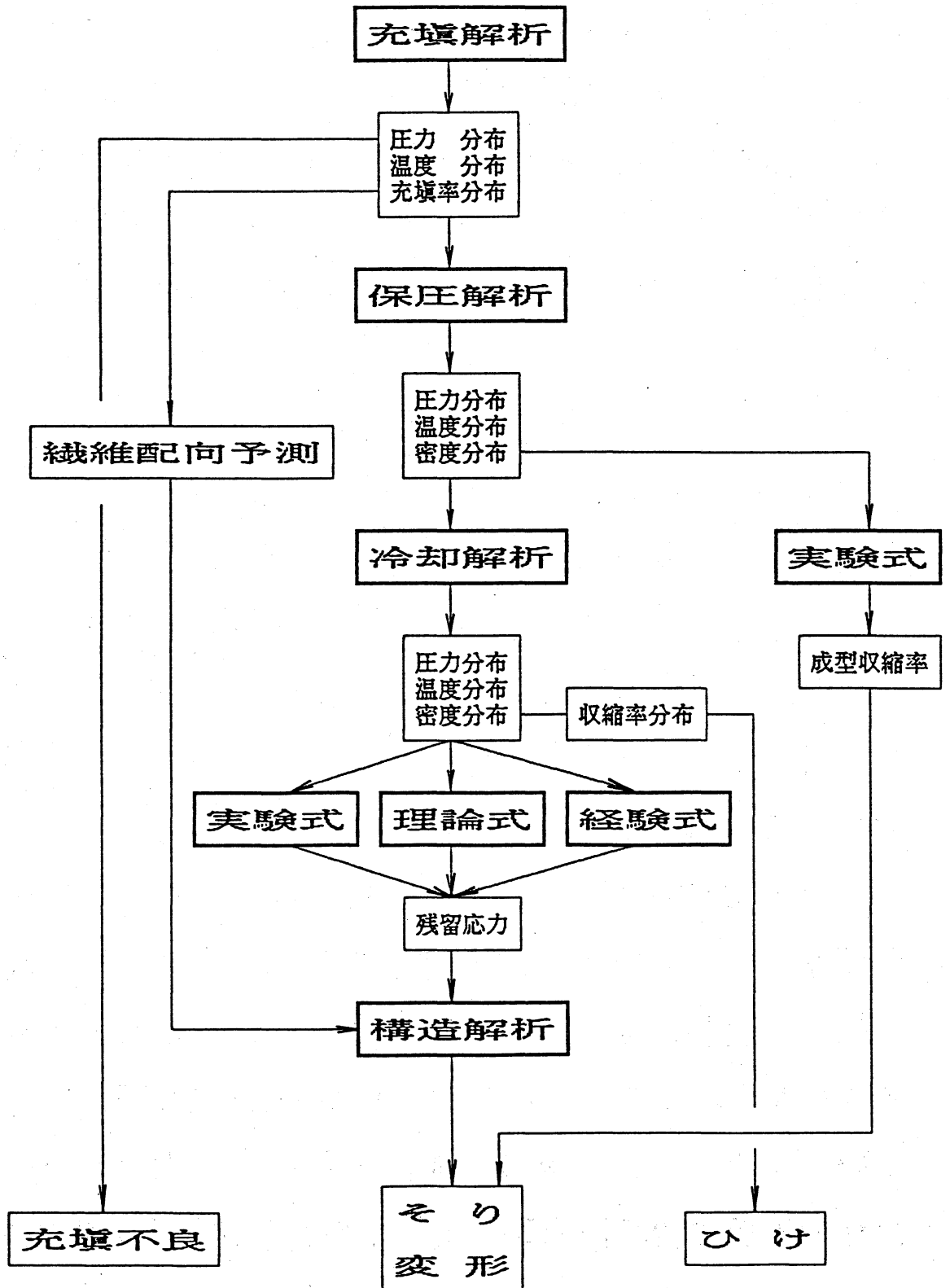
(B) 押出成形シミュレーション

射出成形のような薄肉の金型内の溶融ポリマーの流れでは、溶融ポリマーの本来持っている粘弾性を問題にする必要がない場合が多い。しかし押出成形のダイ内の流体解析では、この粘弾性が重要な因子となる。

粘弾性流体解析が可能なプログラムは世界的にみて、3-4ヶあるが、この中から、当社では、ソース・コードが開示され、解析機能が充実しており、且つ、解析機能を拡大・発展させる予定のあるプログラムとして1988年ベルギーのルーバン大よりPolyFlowを導入した。

このプログラムは、有限要素法を用い、一般ニュートン流体の解析の他、微分型、積分型の粘弾性構成方程式を

射出成型のシミュレーション



用いての流体解析が可能で、且つ、2層流を解析する事が出来る。

当社では、このソフトを用い、入出力の簡易化等の改造をおこなうと共に、EWSおよびVP-50上で、押出ダイ中の流れの均一化、紡糸の設計口金の設計等に役立っている。

4. その他の計算機シミュレーション技術

4-1 熱伝導解析

熱伝導解析に於ては、輻射の取り扱いが一番問題となる。この輻射を厳密に取り扱う事が出来るRADFLOWを三菱総研より導入し、検討に用いている。又、一般的な熱伝導解析は市販の汎用有限要素法プログラムに組み込まれているが、解析機能が広範囲で複雑であることから、入出力を簡易化した1-3次元・定常・非定常熱伝導解析プログラムを自作し一般ユーザーへ提供している。

4-2 構造解析

数多くの汎用構造解析ソフトが市販されているが、当社では、MARC,ADINAに入出力簡易化ソフトPATRANを組み合わせて、構造解析を一般ユーザーがEWS及び、VP-50上で行なっている。

4-3 電気・電磁場解析

高機能化商品の開発推進にともなって、高周波加熱等の電磁場解析が要求される様になってきた。具体的には陽極酸化膜の均一化等のための電流密度解析、CVD (Chemical Vapor Deposition) 炉内の電磁場解析等にソフトを自作して対応している。

5. 計算機シミュレーションの問題点

ハード・ウェア自体は今後急激に発展が見込まれる。この事により、解析対象が立体的により複雑な解析対象へと進展させる事ができると考えられる。しかしながら、実際にあるより複雑な内容を持つ解析対象へと計算機シミュレーションを拡げるにはモデル構築等の基礎的な研究が待たれる。具体的に我々が解析したいと考えているが、現在の實力では不可能な解析対象を以下に羅列する。

(1) 流体解析

現実に流体解析で取り扱う事が出来るのは気体或いは、液体のみの单相流及び、気-液が同一運動する2相流までである。

しかしながら、当社は総合化学会社であるため

(a) 複雑な反応を含む熱連成系

(b) 旋回乱流等の乱流の厳密な取り扱い

(c) 固体粒子、液滴、気泡などを多量に含む混相流を解析対象として要求される事が多い。

(2) 熱・電気・電磁場解析

高周波加熱等の電磁場で、熱輻射、熱伝導、熱対流を同時あるいは、簡便に連結させて計算することができるソフトの出現が待たれる。

(3) ポリマー解析シミュレーション

- ・ 2軸混練シミュレーション
- ・ 3次元粘弾性流体解析
- ・ 3次元ブロー成形シミュレーション
- ・ 反応を取り入れた成形加工 (RIM,RTM) シミュレーション