

プラスチックCAEの現状と熱分析への期待

江原賢二, 橋本寿正*

(平成6年2月15日受理)

An Overview of Plastic CAE and Expections for Thermal Analysis

Kenji Ebara and Toshimasa Hashimoto*

(Received February 15, 1994)

Recently, the computer aided engineering (CAE) technology has been developed in the field of polymer processing and plastic molding. In this stage, the thermal properties, such as thermal diffusivity and specific heat, has become more significant. To attain this purpose, the data base will be required more exactly and speedy. The more precise data of thermal properties, which are systematically arranged, lead to the second stage development of CAE technology.

1. はじめに

1970年代のはじめ頃から一部の樹脂メーカーにおいて、プラスチック製品の強度計算や変形予測に構造解析プログラムが使われていたのが、プラスチックCAEの"走り"である。本格的な展開は、1978年、射出成形における樹脂流動をシミュレートする最初の実用プログラム「MOLDFLOW」が上市されることに始まった。CAEという言葉が認知されたのは、1980年、米国SDRC社が製品開発を合理化する有力な"プロセス"としてCAE (Computer Aided Engineering)を明確に定義付けてからである。現在プラスチックCAEは、新しい技術体系として発展途上にあり、コンピュータによる数値解析、形状モデリング、グラフィック技術、成形実験における各種測

定技術、溶融樹脂や相変化に関わるポリマー物性の研究など広範囲な研究成果を取り入れた業界的、学際的技術体系として位置づけられる¹⁾。特に近年のコンピュータの飛躍的發展は、完全なフォローウィンドーであるが、中でも90年代に入ってエンジニアリングワークステーションのコストパフォーマンスは2~3年で1桁アップするほどの状況であり、CAEに関わる、研究者、技術者は、そのことをしっかり認識しておかないと方向を誤ることにもなりかねない。本稿では、プラスチックCAEの現状を概説し、解析精度の向上に関連した樹脂物性に課せられた問題を中心に展望する。

2. 製品開発プロセスにおけるCAEの役割

プラスチックCAEは、これまで樹脂メーカーが樹脂の販路拡張のためのテクニカルサービスとして利用されていた。しかしながら80年代後半から、製品開発のプロセスの中に重要な地位をしめ、本来の設計・予測という役割を果たすようになってきている。また、最近では、材料の開発支援ツールとしての役割が期待されている。従来型の製品開発プロセスは、フィードバックプロセスが長く複雑で、開発予算、期間、品質などの管理・制御が困難であった。CAEを導入した製品開発は、コンピュータシミュレーションを駆使することによりフィードバック

(株)プラメディアリサーチ: 〒151 渋谷区本町1-17-12

* 東京工業大学工学部有機材料工学科: 〒152 目黒区大岡山2-12-1

Plamedia Reseach Corporation Hon-cho 1-17-12, Shibuya-ku, Tokyo 151, Japan

* Department of Organic and Polymeric Materials, Tokyo Institute of Technology, 2-12-1 Ookayama, Meguro-ku, Tokyo 152, Japan

クプロセスを短縮するとともにフィードフォワードを可能にするため、開発全体のプロセスが管理・制御されることになる。

3. プラスチックCAEの現状

プラスチックCAEは、射出成形を対象として金型内の樹脂流動挙動を解析するプログラム(第1世代)からスタートして、現在は第2世代のCAEとしてそり解析を含む総合システムが主流をなす状況となっている。つまり、単なる金型設計支援ツールからできあがる製品の不良の予測まで展開が広がってきた。さらに、3次元流動や人工知能を組み込んだ第3世代のCAEへのアプローチも始まっている。また、射出成形に続いてブロー成形や押出し成形、プレス成形などの分野でもCAEの開発が意欲的に進められている。

計算プログラム(ソルバーと呼ぶ)だけでもCAEと称する向きもあるが、製品開発プロセスの合理化につながるようなCAEは、少なくとも次の5つの構成要素から成り立つものであり、近い将来、さらに重要な要素が一つ加わることになる。以下に射出成形用CAEの構成要素を示す。

3.1 形状モデラー

射出成形品はますます複雑な形状を指向しているようである。CAEを利用する上で最初の障害は形状のモデリングである。基本的には製品を有限要素法のメッシュに分割する必要がある。これまでは、CAEの利用者が図面を読んで入力するか、あるいは見本の寸法を測りながら入力することが多く、手間と時間の掛かる作業であった。現在のテーマの一つは、3次元CADのデータを何とか利用できないかということであるが、プラスチックCAEが必要とする「面+肉厚」のデータへの変換は簡単そうで難しい。さしあたっては面の結合状態、肉厚変化、裏表などのチェック機能を充実させることで対応することになろう。一方、CAE側が3次元流動を解析できるようになればこの問題は解決することになるが、ソルバーの実用性の問題もさることながら、3次元メッシュをどうするかといった新たな問題が浮上してくる。

3.2 プリプロセッサ

メッシュ分割機能は著しく進歩している。2次元メッシュについては短時間で自動分割、最適化などが可能な状況である。これからはケーススタディが増加することを考えるなら、製品部とランナー・ゲートなどの流路との自由な組み合わせや、肉厚変更などの予測が簡単にできるようになることも当然要求される。

3.3 樹脂物性データシステム

現状では解析プログラムが要求する物性をきちんと整

備することは易しいことではない。まずデータベース不備の問題が以前から指摘されているが、多くの場合、使用する樹脂の物性を測定する必要がある。Table 1はCAEに必要な物性値と現在用いられている方法を示す。物性測定には膨大な手数がかかることと、それ以上に添加物や複合化で物性を調製することを意識するなら、少なくとも市販グレードについては材料メーカーで公表することが求められるのではないかと。少なくとも、せん断粘度、比熱、熱伝導率、PVT、ヤング率、ポアソン比、線膨張率については、CAE解析に利用できる形でカタログに納められていなければならない。ソフト側では、現状では各種の測定が同一条件下で行われていないことを考えると、各種フィッティングプログラムを用意する必要がある。ガラス転移温度などでも測定法によって相当違ってくる。特に粘度については、温度依存性やせん断力依存性を考慮した多様な粘度式が使えることが望ましい。一つの粘度式ですべての樹脂、すべての成形条件を表現できるとはとても思えない。PVTについても、実際の成型機で起こっていることと測定条件が相当の隔たりを持っていることも事実である。また、比熱、熱伝導率、ヤング率などについても、温度依存性データが望まれている。

3.4 解析プログラム/ソルバー

複雑な成形現象を一つのプログラムだけでシミュレートすることはまず不可能である。射出成形のCAEでは、少なくとも冷却を伴う樹脂流動解析、金型冷却解析、そり解析の3つのプログラムが必要である。典型的な解析プログラムのフローをFig.1に示す。これは現在使用されている射出成形用CAE解析プログラムの構成で充填段階から冷却、残留応力、繊維配向、そり、製品構造予測まで幅広いソフトが用意されている。精度については、形状、物性など入力データの問題もあるが、ソルバーの精度が最も重要な問題であり、近年成形現象自体の解明や数値解析技術の向上などに伴い、ソルバーの改良も意欲的に進められている。特にそり解析については様々なそり変形要因が考慮されるようになってきており、離型時の成形品の3次元温度分布だけでなく、体積収縮率や離型前クリープ変形によって生じる離型時残留ひずみの影響、流動や熱ひずみによって生じる残留応力の影響、分子配向や繊維配向に伴う異方性物性の影響などが既に数学モデルとして取り込まれるようになってきた。更に、樹脂の結晶化度や結晶サイズの予測が可能になってきており、今後は結晶化のそり変形への影響がモデル化されると思われるが、ここでは詳述しない。また、射出圧縮や射出プレス、2色或いは2層成形、ガスアシスト成形など新しい成形法についても、CAE側の対応スピー

Table 1 射出成形のCAEに必要な物性値と実際使用されている測定手段・測定条件

物性項目	測定方法	測定装置	試料	標準測定条件
比熱	DSC法	示差走査熱量計	フィルム状 φ5mm×200μm 約10mg	室温～320℃ (10℃/min) N ₂ 雰囲気 前処理あり
熱伝導率	熱線法	熱伝導率測定装置	50×30×30mm	室温と熔融状態 2水準
定常せん断流 粘度	細管押出法	キャピラリー粘度計	ペレット	成形温度領域を中心に4水準 12.2～6080(1/sec)
密度	ピコメーター法 浮沈法 密度勾配管法		JISに準拠	JISに準拠
PVT	ピストン法	PVT測定装置	ペレット	室温～成形上限温度 200～1600barの5点 0.2℃/sec
結晶化熱	DSC法	示差走査熱量計	フィルム状 φ5mm×200μm 約10mg	1.25～160℃/min N ₂ 雰囲気 前処理あり
溶融粘弾性	等温等歪周波数 応答測定	ゲイミックスヘテロメータ	ディスク状	成形温度領域中心 水準数任意
縦弾性率 ポアソン比	引張試験法 等温引張測定	材料試験機	射出成形ダンベル	室温 1mm/sec
熱膨張係数	プローブ法	横型膨張計	圧縮成形→切削研磨	室温～T _g , T _m 付近 2℃/min
		熱機械分析装置	圧縮成形	室温～T _g , T _m 付近 2℃/min 圧縮 1g
クリープ特性		クリープテスター	JISに準拠	JISに準拠
加熱変形温度		HDT&VSPT TESTER	JISに準拠	JISに準拠
ピカット軟化温度			JISに準拠	JISに準拠

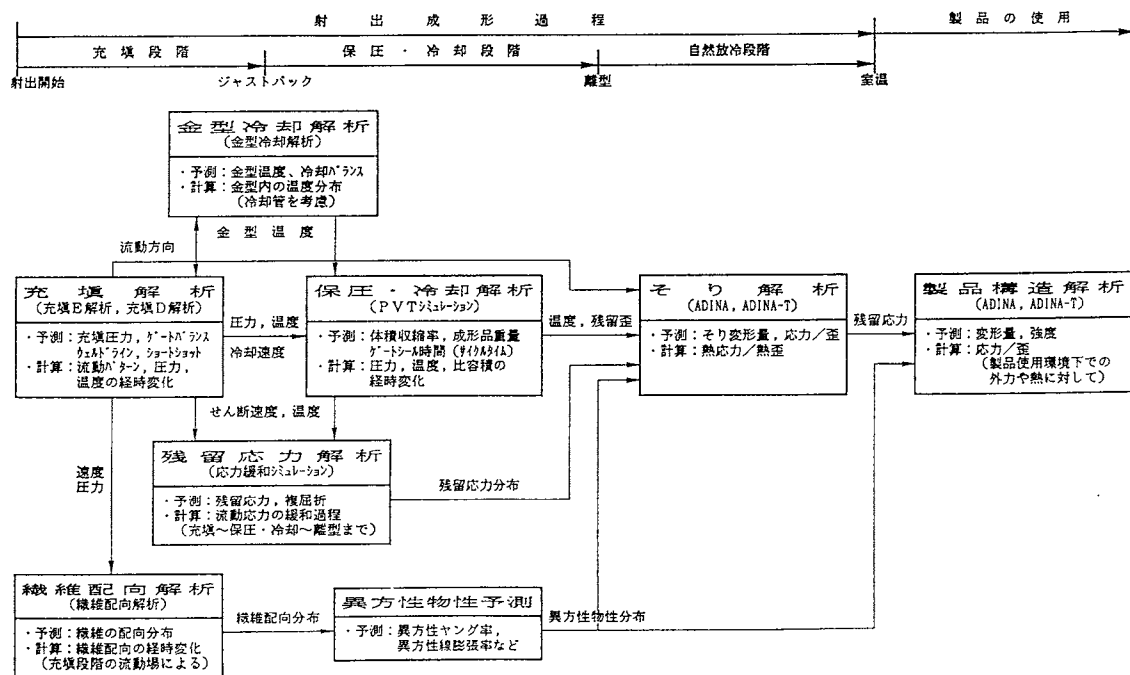


Fig.1 射出成形のCAEにおける解析流れ図

ドが速まっている。筆者らの属する共同体でも以下のテーマを掲げて改良開発を進めている。

3.5 ポストプロセッサ

解析結果を様々な角度から、しかもビジュアルにという要求は当然高まってくる。一方、解析結果のデータファイルは膨大となるためむしろハード側で制約を受ける可能性の方が大きい。表現の仕方は、コンター図、変形図、アニメーション、グラフ図など定型化されており、操作性は第一の問題になるが、汎用か専用かは論議が分かれるところである。

3.6 全体制御システム

さて、将来的に重要度が増す新たな構成要素とは、全体制御システムである。これまでのCAE利用はせいぜい量産に入る最後の確認のため解析しておこうという従属的な使い方が主であった。従って、解析結果のハードコピーが残っていればそれで済むことになる。しかしながら製品開発のプロセスの中にCAEを組み込むことになるとそういう訳にはいなくなる。何故なら製品開発のいろいろな段階でCAEの結果がリファーマーされ、或いは条件を変えて解析する必要がでてくることは容易に想像されよう。この作業は当然異なる部署での利用につながるであろう。作業の管理や解析内容、結果の整理などはシステム側で対処できるのでなければ21世紀に向けたCAEシステムとは言えないであろう。

さらに解析精度を議論する場合は、いくつかの要因を考慮しなければならない。大きくは以下の通りである。

＜入力データの精度＞ 形状データ、成形条件、樹脂物性

＜ソルバーの精度＞ 現象の数学的モデル、数値解析のアルゴリズム

＜検証実験の精度＞ 検証項目、測定方法

最近では、コンピュータの計算スピードが非常に速くなるとともに記憶容量が大きくなっていることなどから、メッシュ数などの制限が大幅に緩和されてきたため、必要に応じて要素を細かく切って解析できるようになった。そのため以前より形状データの精度はアップしていると思われる。

成形条件については、測定精度の問題以前に、解析で使われる初期条件あるいは境界条件としての成形条件と、解析者が入手できる成形条件との間のギャップが大きいことが問題である。最近では成形現場においてもCAEが意識されるようになってきているので、改善の方向へ進みつつあるものと思われる。

さて、入力データの中で最も重要な課題は樹脂物性が解析精度に及ぼす影響である。具体的な影響の度合いについては、最近いくつかの報告があるので詳細は省略す

Table 2 代表的熱物性データの圧損への影響

樹脂	計算された圧損の変動 (%)		
	粘度:10%	熱伝導率:10%	比熱:10%
PS	6	3	1
PP	8	1	0
ABS	6	2	2
(平均)	(7)	(2)	(1)

るが、一例をあげると金型冷却過程における圧損へ及ぼす、粘度、熱伝導率、比熱データの影響をTable 2に示す。この例では粘度の影響がどの樹脂でも大きく現れているが、熱伝導率は測定の際のばらつきが表の10%よりずっと大きい場合が多く、実際のシミュレーションでは注意が必要である。各物性項目についてCAE側から問題を整理しておきたい。

＜せん断速度＞ せん断速度領域の拡大、温度範囲特に低温側への拡大、圧力の影響(圧力依存データ)

＜熱伝導率＞ 測定方法の確立、温度範囲特に熔融状態での測定

＜PVT＞ 測定方法の確立、冷却速度の影響(冷却速度依存データの収集)

＜ヤング率＞ 温度依存データ

上記以外に最近注目を集めている流動応力の緩和過程をシミュレートする残留応力解析では、動粘度のデータを必要としている。また、ブロー成形におけるバリソン形成過程をシミュレートするプログラムの開発が進んでいるが、伸長粘度データが不可欠である。

4. CAE時代の熱分析

前節まで概観してきたようにプラスチックCAEにはたくさんの物性値が必要であるにも関わらず、データベースあるいは測定法の面から十分な対応ができていないことを述べてきた。高分子の熱物性は、データが蓄積されてきたにもかかわらず、いつも飢餓状態にあるのは、物質があまりに多く個別に対応する必要が多すぎるのである。むしろ整理の方法論が試料側に問題がある。同時に、学問的には正確で十分に吟味された物性値が要求されたため測定法が確立していない物性値などではほとんど報告例がないものさえ存在する。しかし、実際の材料設計たとえばCAEなどでは、データは必ず数値として必要であり、抜け落ちは許されない。従って、極論すれば手段も素性も問わないでデータが必要という切実さがあ

る。

これからより進むであろう材料のインテリジェント化は、製品の設計デザイン段階からすでに物性データが要求される時代がくると思われる。樹脂の選別がデザイン段階で可能となるためには、その段階でまがりなりにも樹脂のデータベースが完成していることが不可欠ではある。現実的には必要な物性が直ちに計測できる体制が整っていることが肝要である。こういった目的での測定は、(1) 迅速で、(2) 試料は少量、(3) 幾つかの物性の同時測定で、(4) 測定者依存性の少ない再現性の良い測定、といった厳しい条件を満足したものでなければ対応できない。

高分子材料は、強固な結合である共有結合を分子鎖方向に持ち、弱い結合であるファンデルワールス結合を分子間方向に持つ特異な材料である。特に分子間の結合の弱さは、力学エネルギーを与えられると容易に変形し、分子の配向として在留応力が蓄えられる。これらの変形と熱運動での安定状態への移行は、分子の運動性で考察されるが、その過程は多くの場合速度論で論じられる。したがって、プラスチックの成形加工の様に、速い冷却過程での固化結晶化は、測定する場合でも同様の速度でなければ対応しない。それは、高分子鎖の状態が冷却速度の関数となってしまうことが多いからである。特に最終形状や、バルクの力学的性質にその傾向が著しい。現在の熱分析が1-50℃程度の加熱過程が中心であるが、実際の成形では1000℃冷却すら起こりうる訳で、少なくとももう一桁速い速度での計測が可能にならなければ対応できない。さらに、それは冷却過程を含むものでなければならない。

もう一つの問題は、試料のサイズである。実成形物と熱測定試料のサイズが違った場合、熱分析でいえば、DSCなどの少量のサンプルで得た熱物性が、巨大な高分子の柱の融解の解析にどのように当てはめていくべきか、

単純に試料の厚さを補正すればすむというものではない。伝熱を含む考察が必要な分野であろう。

5. おわりに

さて、今日の意味あいにおいて、熱分析になにが求められているのだろうか。まず第一に、測定条件の選択幅であろう。従来は学問的な整合性から平衡論を意識して、ゆっくりとした温度変化の測定が主流であった。これに對極をなす高分子の成形は、日進月歩しており、より精密にかつ迅速に製造されるようになってきた。このことは、冷却速度で言えば毎分1000℃以上にも及び、かつ高い圧力下や高いせん断応力下でなされるのが普通である。このような系の解析に、毎分10℃、定圧、自由長での測定結果がそのまま適用できるものであろうか。この問題を解決する鍵は、より速い昇降温測定の開発と同時に、キャリブレーションを始めとする解析方法の確立である。

さらに一步進めて交流熱測定が注目される。筆者らは、交流温度波を用いた熱拡散現象を検討しているが^{2),3)}、力学分散や誘電分散を引き合いに出すまでもなく、交流測定は周波数という時間項を含んでいる。たとえば高周波刺激は、高速昇温に対応したエネルギーの授受を可能にすることが期待でき各種の測定で、周波数依存性(速度依存性)と分子運動の関係が明らかにできれば、プラスチックCAEも一段と発展するものと確信している。

文 献

- 1) 江原賢二, 工業材料 1月号 (1992).
- 2) 橋本寿正, 辻 隆行, 熱測定 19 (4), 156 (1992).
- 3) T. Hashimoto and T. Tsuji, *J. Thermal Analysis* 40, 721 (1993).