

連成統合シミュレーション技術の開発と普及支援（第3報）

工業材料科 専門研究員 重光保博

本研究では、「連成解析システム」を導入・活用して地場 CAE(CAE: Computer Aided Engineering) 関連企業の技術支援を行い、あわせて最近注目されている高度な CAE 解析である連成シミュレーション技術開発を行った。長崎県ではその地理的特性を生かした海洋関連工学・風潮力発電インフラ分野の振興が期待され、コンピューターシミュレーションによる構造解析・流体解析 CAE は重要な役割を果たすと考えられる。「連成解析システム」の概要・活用事例・普及活動・技術開発について報告する。

1. 緒言

長崎県では海洋関連工学・再生可能エネルギー工学分野の発展が推進されており、CAE は関連インフラ設計や地理・気象解析へ貢献する先端的技術である。シミュレーション解析を受託ビジネスとする県内 CAE 関連企業は、県内の潜在 CAE マーケットにとどまらず、県外への積極的な展開を実現するため、従来の技術では解析困難な複雑事象を扱うことができる高度なシミュレーション技術を必要としている。

近年、人工知能や IoT 等の技術トレンドと並行してシミュレーション技術のモノづくりへの浸透が進み、シミュレーションは実験の検証にとどまらず、モノづくりを主導する役割を果たしつつある¹⁾。

平成 27 年に導入した CAE 統合ソフトウェア「ANSYS」²⁾は、従来の CAE 解析機能である構造解析・流体解析・電磁界解析機能を包括的に統合した代表的な CAE 解析ソフトウェアである。ANSYS の特徴として、これらの独立事象解析だけでなく、それらが複雑に絡む事象に対する連成解析も実行することができる。本事業では、ANSYS を活用して地場 CAE 関連企

業の技術支援を行い、最近注目されている高度な CAE 解析である連成シミュレーションの先端的技術開発を試みた。

2. 手法・結果・考察

2.1 長崎県工業技術センター「連成解析システム」

本システムは、ANSYS を中核とする統合 CAE シミュレーション装置である。ANSYS は広範な機能を有する CAE モジュール群から構成されており、それらを統一的に使用する GUI 環境「Workbench」を通じて多様な機能をシームレスに使用できる。CAE 解析にとどまらず、物理解析（構造解析、流体解析、電磁界解析）・機構解析（Rigid Body Dynamics）に対して実験計画最適化や設計最適化機能を加味した統合的システムシミュレーションに基づくマルチドメイン解析も可能である。

本システムは、ANSYS ソフトウェアとそれが稼働するハードウェア群（計算サーバー 1 台+クライアントパソコン 3 台）から構成されている。最大で 16-CPU+GPGPU を用いて 1000 万メッシュ程度の大規

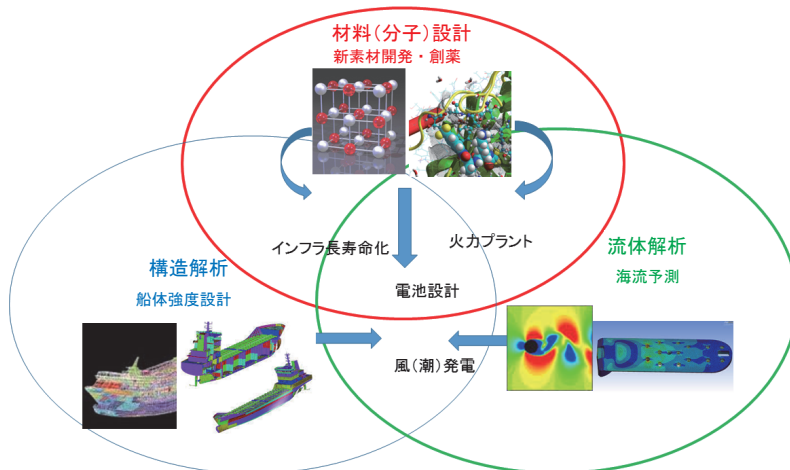


図1 連成解析のイメージ図

模計算を実行可能である。

本システムは、平成 27 年度電源立地地域対策交付金（資源エネルギー庁）の支援を受けて導入した。



図 2 連成解析サーバー（VT server E5-2SG-V3）

2. 2 統合 CAE ソフトウェア「ANSYS」の構造解析・流体解析機能

構造解析ソルバー「ANSYS Mechanical」は、構造解析に関する全般的機能を有している。応力・ひずみ解析に加えて、非線形・塑性領域の解析も可能である。FRP/CFRP といった複合材料に対しては、オプションモジュール「ANSYS Composite Prepost」による解析が可能である。

表1 連成解析システムの構成

ソフトウェア：	ANSYS Release 16.2
モデリング：	DesignModeller/Brademodeller
メッシュャー：	ANSYS Meshing/TurboGrid
ソルバー（構造）：	Mechanical/Profes.NLT
ソルバー（流体）：	CFD/CFD-Flo

ハードウェア：

サーバー	VT server E5-2SG-V3
CPU	Xeon E5-2699 v3 (36 cores)
Main Memory	256 GB
GPGPU	NVIDIA Tesla K 40
OS	RedHat Linux release 6.6
クライアント	Dell Precision T1700

流体解析については、定評がある Fluent モジュールを包含した「ANSYS CFD」を用いた種々の乱流モデル解析が可能である。ターボ機械のような回転複雑形状に特化したモデラ「Blademodeller」、メッシュャー「TurboGrid」による効率的なモデリング・メッシングが可能である。

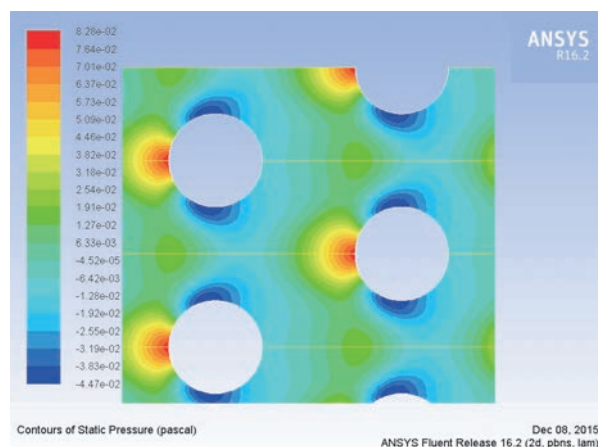


図 3 流体解析例

2. 3 ANSYS の高度な機能：連成解析

マクロ構造体と流体の連成解析は、「ANSYS CFX」を用いて効率的に実行可能である。その際、双方の影響を非回帰的 (1-way) もしくは回帰的 (2-way) に考慮して求解することができる。

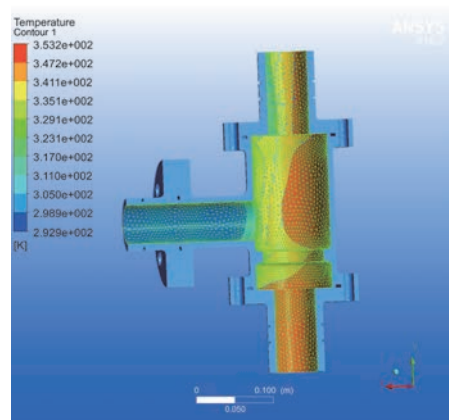


図 4 連成解析の例：1way-FS1 + 2way-FSI

2. 4 活用事例：アスピレーターの流体挙動解析

アスピレーターは、ベンチュリー効果に基づいて流体の流れを利用して減圧部位を作り出す比較的コンパクトな装置で、小規模な化学実験室等や医療用途に用いられる。動物組織の体液交換や医療用途でのポンプ代替品としてのアスピレーター活用を考え、アスピレーターの吸引中枢部分に対して流体解析を行い減圧効

果を予測した (図5)。動物組織のモデルとして液体で満たされたバルーンを仮想的に設定し (図6)、水流変化に対する減圧効果を算出した (図7)。水流変化に対するバルーン構造への影響を考慮した構造-流体解析を実行した。

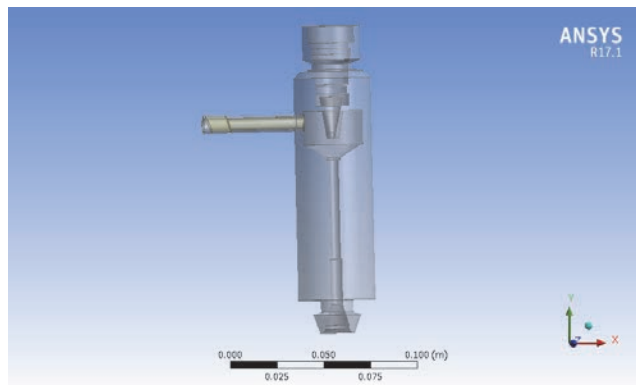


図5 アスピレーターの減圧部

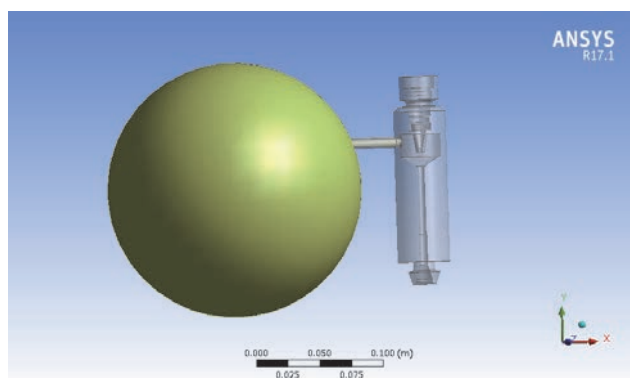


図6 付加したバルーンモデル

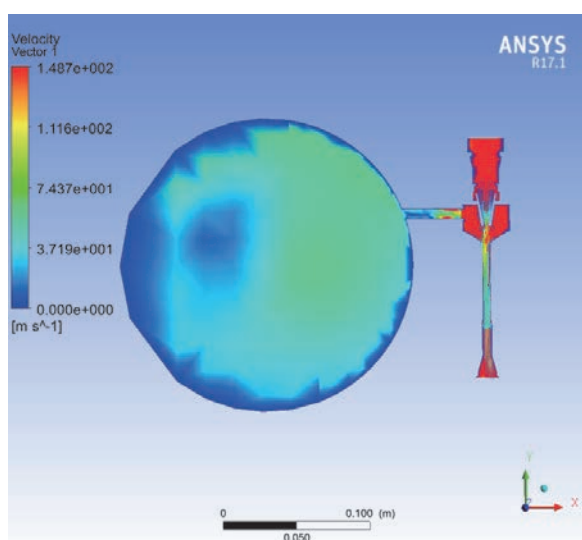


図7 減圧効果の解析

2.5 分子解析との連成に向けて：機能性分離膜のモデル計算

構造-流体連成解析のさらなる発展として、化学シミュレーション技法との統合が望まれる。化学現象のシミュレーションには、ミクロ現象 (化学反応) とマクロ現象 (流体挙動・反応容器との力学的干渉) の両方を考慮する必要がある。分子レベルのミクロ情報と連続体解析のマクロ情報の融合 (マクロとミクロの融合) は、現代シミュレーション技術の大きな課題であるが、計算コストの制約もあり実用的な解析手段は確立していない。構造-流体-化学連成解析に向けた試みとして、分子シミュレーションによるボトムアップマイクロアプローチと、濃度分極モデルに基づく化学工学マクロアプローチを試みた。

(1) ポリアミド膜中の水の拡散係数計算

浸透圧を利用した水処理技術では、淡水側と溶液側を分離して高い選択性で水のみを透過させる機能性膜が必要とされる。ポリセルロースアセテート膜と架橋芳香族ポリアミド膜がよく用いられている。

今回のテスト計算には、ポリアミド膜のモデルとして meta-phenylene diamine (MPD) と trime-solyl chloride (TMC) 重合オリゴマー分子を 20 個束ねたランダム構造モデルを用いた。周期的境界条件は、直交方向 (XY 平面) に 4 周期、水の透過方向 (Z 軸) に 1 周期の (4x4x1) モデルを作成した。初期構造生成と水分子の付加には、分子モデリングソフト「Winmostar」^[3] を用いた (図8)。初期構造緩和にはモンテカルロ計算ソフトウェア「Cassandra」^[4] を用いた (図9)。拡散係数は分子シミュレーションソフトウェア「Lammps」^[5] を使用し、1 ns と 10 ns の NTV アンサンブルシミュレーションのトラジェクトリからそれぞれ算出した (表2)。今回の MD シミュレーション予測値 (0.04/0.014) は実験値とオーダーが一致しており、ポリアミド膜モデルの改良、NaCl イオンの考慮、シミュレーション時間の拡張などのモデル精密化を行うことで実験値との定量的予測が期待される。

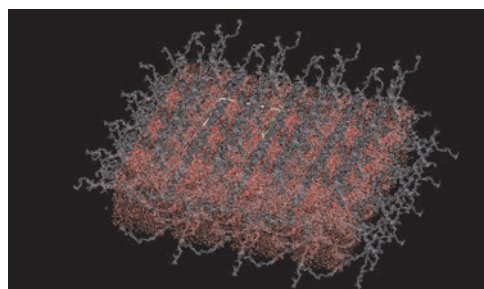


図8 MPD+TMC オリゴマー分子モデルの初期構造

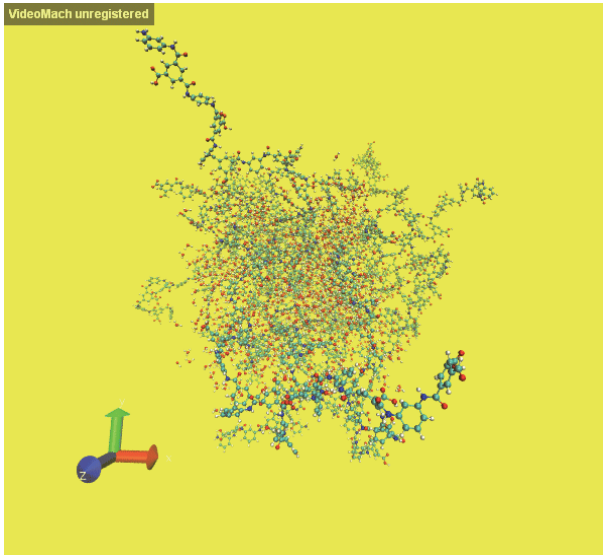


図9 MPD+TMC オリゴマー分子モデルの初期構造

表2 ポリアミド膜モデルの水の拡散係数計算

No.	ensemble	膜構造	NaCl	密度	MD 時間 (ns)	拡散係数 (Å ² /ps)
JMS-1998	NVT	Linear	No		3.5	0.023
JMS-1998	NVT	Cross-linked	No		5.0	0.020
JMS-1998	NVT	Linear	Yes		3.5	0.019
JMS-1998	NVT	Cross-linked	Yes		5.0	0.013
This work	NVT	Linear	No		1.0/10.0	0.040/0.014
Expl.						0.01

(JMS-1998 : M.J.Kotelyanskii et al., J.Membrane Science 139, 1-16, (1998))

(2) 逆浸透装置のプロセスシミュレーション

逆浸透膜を組み込んだ淡水分離モジュールは、平膜を利用したスパイラル型モジュールと中空糸膜を束ねた中空糸型モジュールに大別される。

今回は、谷口らのRO 淡水化シミュレーション論文^[6]を参考にして、スパイラルエレメント型 RO システムの運転シミュレーションプログラムを実装し、初歩的な評価を実施した。原水濃度・原水圧力を入力値とし、RO 膜近傍に濃度分極モデルを使用して透過水濃度・透過水量を求めるマクロシミュレーターである。膜面流速の流れ場解析は考慮していない（流体解析は使用していない）。またRO 膜を介したイオン移動は直接考慮していない（分子動力学法は使用していない）。プログラム実装・シミュレーションには「Mathematica」^[7]を用いた。

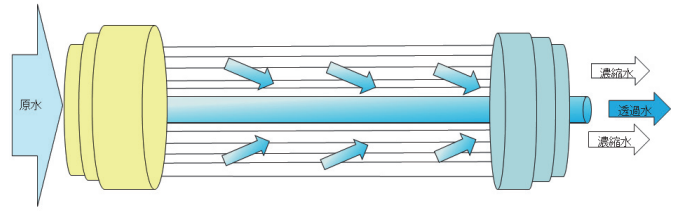


図10 スパイラル型モジュールのイメージ図

表3 プロセスシミュレーションの結果

原水濃度 (NaCl: wt)	原水圧力 (Mpa)	透過濃度 (NaCl: wt)	透過水量 (m ³ /day)
0.01	5.5	0.0006548	4.751136
0.02	5.5	0.0013097	4.75026336
0.03	5.5	0.0019648	4.74939936
0.05	5.5	0.0032755	4.74767136
0.1	5.5	0.0065546	4.74334272
0.03	2	0.00270245	2.1592224
0.03	4	0.00204825	3.8015568
0.03	5	0.00197547	4.4578512
0.03	10	0.00224501	6.4757232
0.03	20	0.00421056	6.8304384

原水圧力の増加に対して、透過濃度と透過水量は上昇する。ただし、原水圧力 5Mpa で透過濃度に極小が見られる。これは、原水圧力が低い領域では RO 膜内外のイオン平衡が律速となり、原水圧力が高い領域ではイオン平衡が破れるためと考えられる（表3）。

2.6 普及支援：研究会の開催

「連成解析システム」の機能は多岐にわたり、その全機能を包括的に把握しつつ、地場企業へスムーズな技術支援を図るため、連成解析システム研究会を合計 10 回実施した（図 11、図 12）。また、分子シミュレーション技術・データマイニング技術研究会を 3 回実施し、シミュレーション技術の先端動向に関する普及啓蒙活動を実施した。今後も、CAE 技術情報の発信とスキルアップを図るため、関連する技術研究会を積極的に企画する予定である。



図 11 連成解析システム講演会



図 12 連成解析システム講演会

3. 結 言

3 年間の本研究では、CAE 技術として確立している構造解析・流体解析について、「連成解析システム」の導入を行い、県内関連企業との共同研究・普及活動を実施した。さらに、次世代 CAE 技術である構造－流体連成、さらに構造－流体－化学連成解析に向けた基礎的モデル解析を行った。

従来の CAE 技術は、マクロ構造体・流体・分子材料が別々の解析ドメインとして独立して解析されてきた。そのため、構造力学・流体力学・化学が複雑にからむ現象、たとえば風潮流発電・化学プラント・触媒・リチウム電池といった事象をシミュレーションすることは困難であった。近年、物理支配方程式が異なる 3 つの事象を連成して解く技術が急速に発展しており、次世代の CAE 技術はマルチフィジックスシミュレーションが主流になると予測される。長崎県においても、

このような技術的潮流を視野に入れた先端機器整備・スキルアップが望まれる。

過去に実施した材料化学シミュレーション研究で得られた知見を活かし^{[8]-[12]}、先端的な CAE 技術へと展開するため、県内学術機関・IT ベンチャー企業等との連携を進めている。講習会・セミナー・共同技術開発等を通じて、連成シミュレーション技術の県内企業への普及を今後も進めてゆく。

謝 辞

アスピレーターの流れ - 構造連成解析に関してモデリングおよび実測データをご提供いただいた株式会社コムテック様、機能分離膜のシミュレーションに関してご協力いただいた協和機電株式会社様に感謝いたします。

参考文献

- [1] (a) 元橋 一之 “インダストリ 4.0 に対して日本企業はどう対応するか?” CIAJ JOURNAL, No.2 pp.4 (2016) (b) 2013 年版ものづくり白書 (経済産業省製造産業局ものづくり政策審議室) (2014).
- [2] ANSYS® Release 16.2 (ANSYS, Inc.).
- [3] 千田 範夫, "分子計算支援システム Winmostar の開発", 出光技報, 49, 1, 106-111 (2006).
- [4] Cassandra ver.1.2, J. Shah and E. J. Maginn, A general and efficient Monte Carlo method for sampling intramolecular degrees of freedom of branched and cyclic molecules, J. Chem. Phys., 135, 134121 (2011).
- [5] Sandia National Laboratory, USA <http://lammps.sandia.gov>.
- [6] 谷口 雅英、木原 正博、山村 弘之、栗原 優、Bull.Soc.Sea Water Sci.Jpn, 56, 247-255 (2002).
- [7] Wolfram Research, Inc., Mathematica, Version 11, Champaign, IL (2018).
- [8] 重光 保博、長崎県工業技術センター研究報告、No.32, 57-61 (2004).
- [9] 重光 保博、長崎県工業技術センター研究報告、No.43, 36-41 (2014).
- [10] Y. Shigemitsu, T. Mutai, H. Houjou and K. Araki, Phys.Chem.Chem.Phys. 16 (28) 14388 (2014).
- [11] Y. Shigemitsu, Int.J.Quant.Chem. 113(4), 574 (2013).
- [12] Y. Shigemitsu and Y. Ohga, J.Sol.Chem. 47(1) 127-139 (2018).