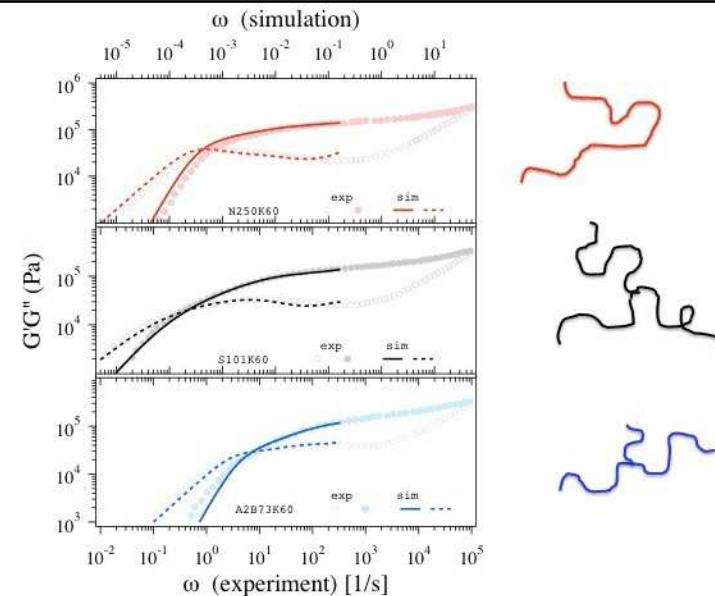


◆HASL版NAPLES

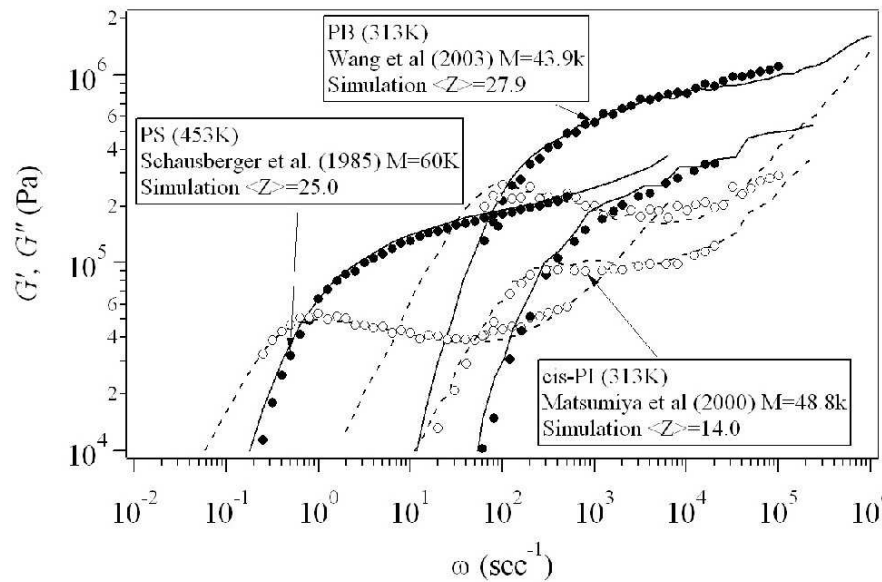
今日、市販CAEシステムの多くは、材料物性データベースを完備しています。システム利用者は、該当する材料物性をデータベースから選択して解析プログラムを運用することが可能です。数値流体解析の分野においても、代表的な材料に対する粘度データやPVTデータ、各種熱物性に関わる情報が豊富に蓄積され、有効に活用されています。しかしながら、粘弾性流体解析に際して必要になる貯蔵損失弾性率などの線形粘弾性や法線応力差に関わる情報、所謂、粘弾性レオロジー特性に対するデータベースの整備は大幅に立ち遅れており、高いコストを負担して、シミュレーションのために実測データを収集しているのが実情です。また、新規材料の開発では、当然ながらデータ・ベースは未整備であり、材料を開発してみないとその成形性を反映したシミュレーションが実施不能ということになります。諸現象のモデル化において、材料物性の妥当なモデリングは必要不可欠で重要な基幹技術の一つと言えます。解析プログラムと材料モデリングツールを車の両輪のように相互に有効活用することで、解析システムの適用性は著しく拡大し、様々な新しい問題にチャレンジできると考えています。HASL社では、分子レオロジーシミュレータNAPLES(京都大学化学研究所増渕雄一准教授開発)と自社流体解析ソフトを強力にリンクし、材料のレオロジー特性を特色付けるメゾスケールの諸現象と流体解析で評価対象とするマクロな現象を一貫して評価可能な解析システムの開発販売を推進しています。

NAPLES (New Algorithm for Polymeric Liquids Entangled and Strained) は、高分子液体のダイナミクスとレオロジーの高速計算に特化したシミュレーターです。京都大学とナポリ大学の共同研究により開発された、高分子のからみあいに着目して高分子の分子運動を計算するPrimitive Chain Networkモデル^{1), 2)}に基づいたソルバーを利用しています。

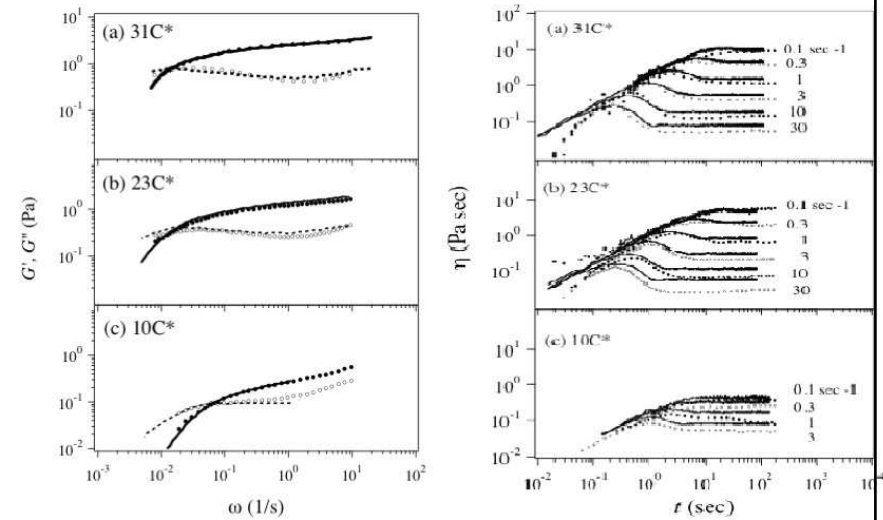


様々な分岐構造をもつ分子の線形粘弾性予測

高分子の形(分子量, 分子量分布, 分岐構造, ブレンド比)と流動変形条件(変形様式, 変形速度)を入力として高分子の分子運動を計算し, 分子運動からレオロジーなどの物性を計算します。応力テンソル各成分の時間変化を取得できるため, 応力(せん断応力・伸長応力・法線応力差), 粘度(せん断粘度・伸長粘度・それぞれの粘度成長曲線・フローカーブ), 弾性率(剛性率・弾性率・緩和剛性率・非線形緩和剛性率・非線形緩和弾性率・ダンピング関数・複素弾性率)などを求めることができます。



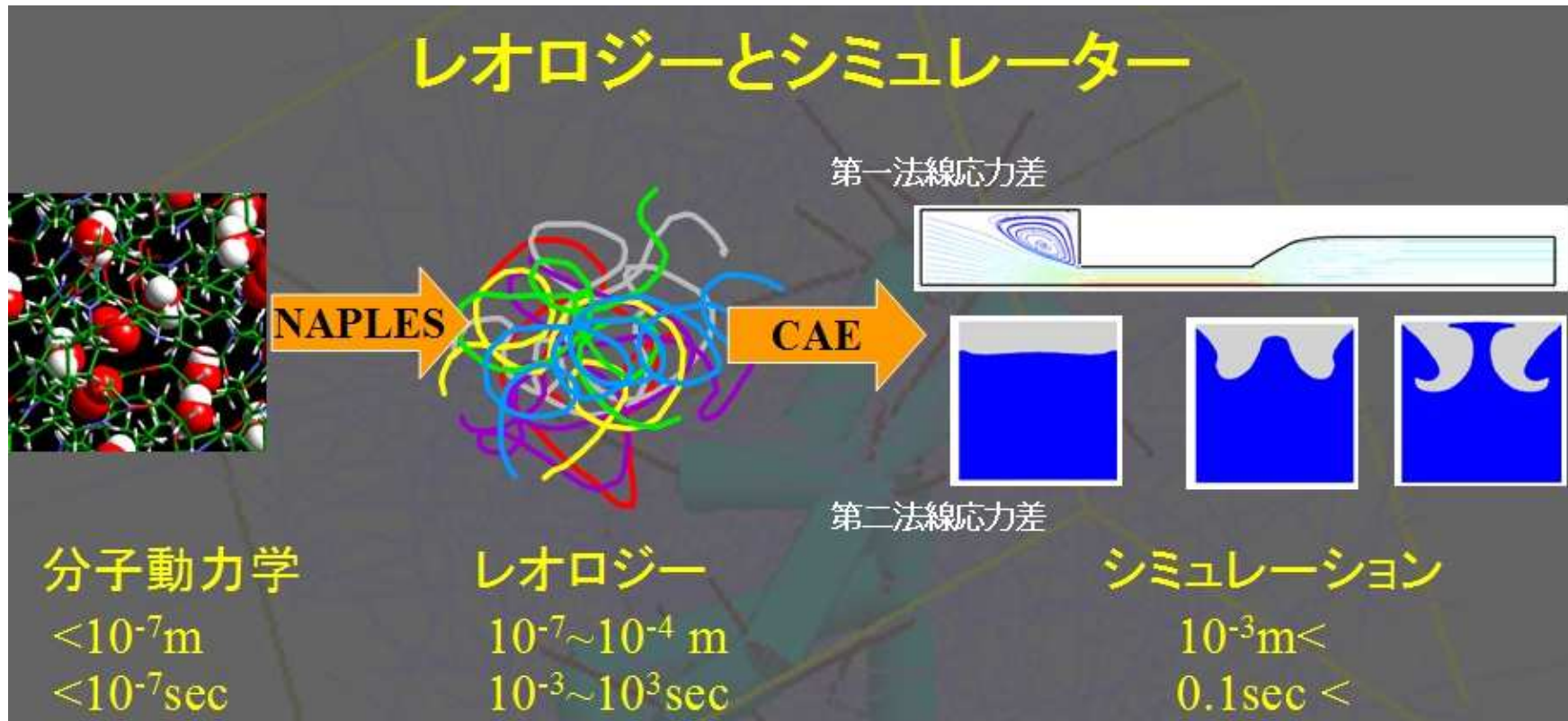
各種高分子の線形粘弾性予測



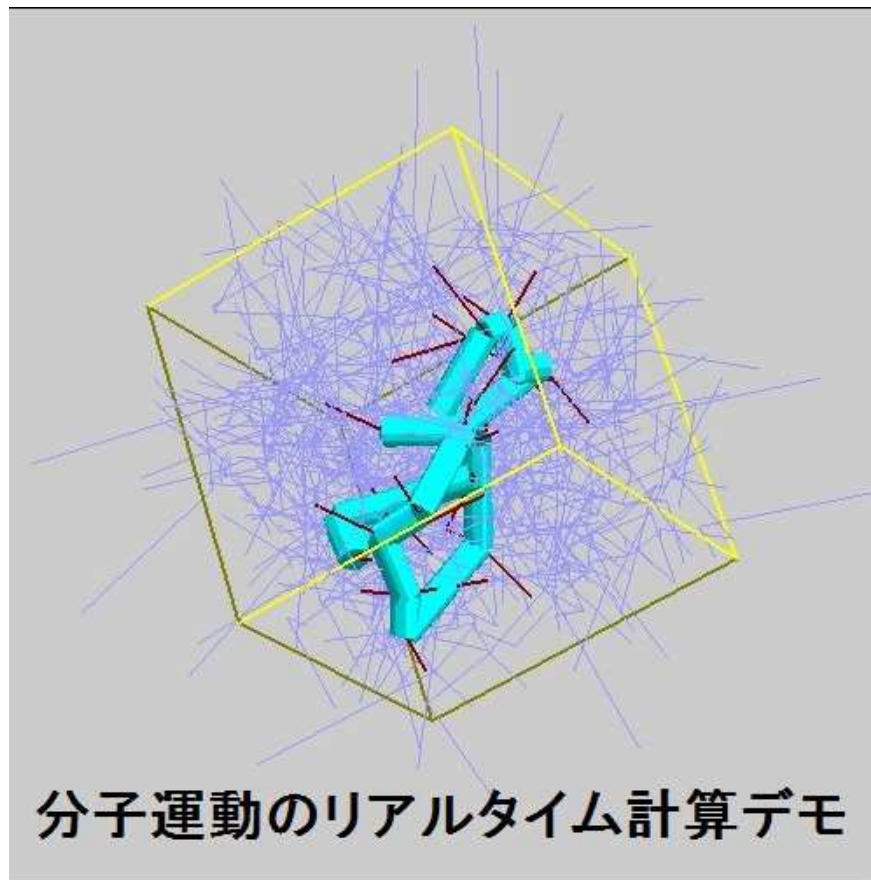
濃厚高分子の線形粘弾性とその粘度成長曲線

NAPLESにより, 高分子の形からレオロジーを計算し, 得られたレオロジーをHASL社の流体ソルバーに入力して流体計算を実施すれば, 分子の形が樹脂の流動挙動に及ぼす影響を直接評価することが可能です。

レオロジーとシミュレーター



NAPLESのコアソルバーはOCTA³⁾でも無料で公開されていますが、HASL版NAPLESは専用インターフェースと分子運動の可視化ツールを備えています。



参考文献

- 1) 増淵雄一, "高分子の高速分子シミュレーション法", アンサンブル(分子シミュレーション研究会誌), 12(1), 2-7(2010),
- 2) 増淵雄一, 成形加工の分子シミュレーション, PLASTICS AGE ENCYCLOPEDIA<進歩編>2008, pp81-92, プラスチックスエージ, 東京(2009)
- 3) <http://octa.jp>