

研究開発におけるシミュレーションとCG

鈴木栄子 渡辺好夫 海老 豊
(株)リコー 中央研究所

企業の研究開発も近年は数値シミュレーションが重要になってきており、CGも計算の物理的意味を把握するのに欠かせないツールとして認識されるようになってきた。リコーにおいても、機械・電気・材料分野へとシミュレーションの応用が広がるにつれ、CGは広く活用されてきている。ここでは、企業のCGの活用例として、OA機器内部の流動解析の結果、および、インクジェットプリンタの液滴生成過程の解析の結果、そして、材料分野からCuの熱振動の分子動力学の結果を紹介する。

Simulation and CG in Research and Development

Suzuki Eiko Yoshio Watanabe Ebi Yutaka
Research and Development Center, Ricoh Co. Ltd.
Kohoku-ku, Yokohama 223, Japan

As the importance of numerical simulation increases as a research and development tool in manufacturers, CG has been recognized as a vital tool in order to gain full insight into the physical meaning of the computational result. In RICOH, many numerical simulations have been carried out in mechanical, electrical, and material analysis, and CG has been used widely with them. In this paper, the analysis of the fluid-dynamics in an office machine, the process of liquid-drop development in an ink-jet printer, and the computation of the thermal vibration of copper based on molecular dynamics are presented, in terms of CG application.

1 はじめに

現在、製図・機械系・電気系のCADシステムは、多くの企業において、研究開発の基礎的ツールとなりつつある。今後は、これらCADシステムを中核として、主に生産との一体化を目指したCIM(Computer Integrated Manufacturing)と、より原理的な設計手法としてのCAE(Computer Aided Engineering)とに展開されようとしている。これらを支えるために、様々なコンピュータ資源が必要となるが、それらの有機的運用の中核にコンピュータグラフィクス(CG)は位置付けられる。以下では、後者のCAE的アプローチに焦点を当て、企業の科学技術計算とCGとのかかわりについて述べたい。

リコーにおけるシミュレーションの利用も、まずレンズ設計等の幾何光学から始まり、現在は構造・熱・流体・電気・電子・材料分野へと広がってきている。また、その内容も、2次元から3次元へ、静的解析から動的解析へ、線形問題から非線形問題へと深まってきている。これらシミュレーションの適用分野・質・量の増大と共に、その計算結果を把握する上でCGの重要性も強く認識されるようになってきた。以下では、OA機器内部の流動解析の結果および、インクジェットプリンタの液滴生成解析の例、そして最後に、材料分野から分子動力学の結果について示し、企業の研究開発に果たすCGの役割について述べたい。

2 OA機器内部の流動・熱・拡散解析

近年、OA機器の小型化・高機能化に対する要求は極めて高く、それにつれ、発熱体と電装部品との熱的干渉や、トナー等の物質の輸送の高精度な解析の必要性も高まっている。これらの熱や物質の挙動を支配するのは流れであり、この理解なしでは効果的な設計をすることは難しい。機器内の流れの解析においても、基本式である物質の連続の式とNavier-Stokesの式を解けば良いのであるが、問題が非線形であることに加え、OA機器の内部は極めて複雑な幾何学的構造をもち、また、流れを励起するプロセスや境界条件も様々な種類

があるという問題を有している。従って、設計者のツールとして流れ解析のシステムを構築するためには、これらOA機器の特徴を踏まえたプリ・ポストシステムが重要となってくる。

図1は、筆者等の開発した、一般化座標系上の差分法による2次元非圧縮流動・熱・拡散解析システムの概要である。図のFCADおよびGRIDはプリプロセサ、FLOWCはメインソルバー、FLOWPはポストプロセサである。まず、FCADにより、設計図面等から、計算領域の幾何形状および境界条件を入力する。境界条件としては、上述のようにOA機器の特徴を考慮して、通常の流速指定の流入境界以外に、環境に開放された定圧境界やローラによる回転壁等も表現できるようになっている。

これらの境界条件をもとに、GRIDでは一般化座標用の計算格子を生成する。これは有限要素法用のグリッドジェネレータとは異なり、熱拡散方程式に類似の偏微分方程式を解く手法を用いている[1]。この生成手法の特徴は、滑らかに変化する格子を一時に発生できる点にある。一方、格子形成の偏微分方程式の係数設定等にノウハウが必要という欠点も有している。図2は、FCADおよびGRIDによる、OA機器内部の幾何形状・境界条件および計算格子である。ケーシングの上部より、1.5m/secの流速で流入した空気は、3ヵ所の大気圧に設定された定圧

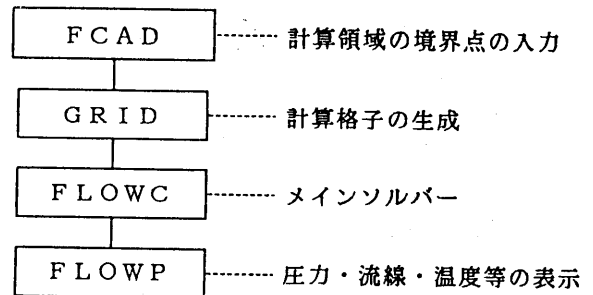


図1 非圧縮流動・熱・拡散解析システムの概要

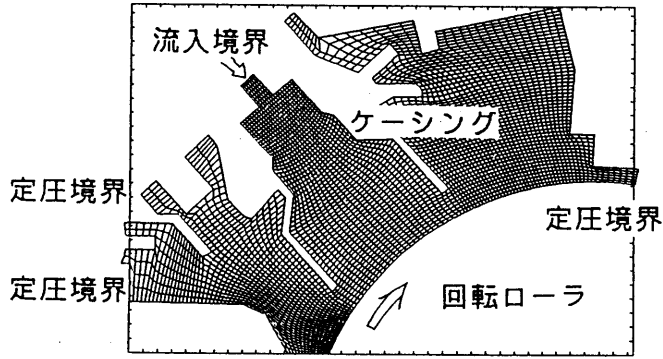
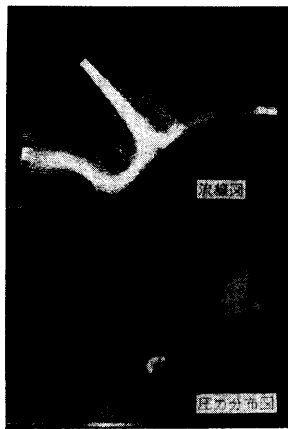


図2 ○A機器内部の幾何形状・境界条件および用いた計算格子



流入開始後0.06 sec後
ローラ回転速度 流入速度
12.6 cm/sec 150 cm/sec

図3 流入開始後60 msecにおける圧力(上図)と流線図(下図)



定常状態(3.0 sec)
ローラ回転速度 流入速度
12.6 cm/sec 150 cm/sec

図4 定常状態(流入開始後3 sec)における圧力(上図)と流線図(下図)

境界より流出する。また、この時、下部のローラは12.6 cm/secで回転している。

メインソルバーFLOWCでは、GRIDで生成した格子上で、ゆがみの効果を考慮した差分式を用いて、従来の差分法の欠点である幾何形状の表現能力の不足を克服している[2]。ポストプロセッサFLOWPはその計算結果をもとに、流線や流速ベクトル、圧力分布図・温度分布図等を表示する。図3・図4は、図2の計算格子を用いて計算した結果の流線図と圧力分布図である。図3は、流入開始後60 msecの流れ場の様子、図

4はほぼ定常状態とみなしうる3 secの様子である。流入開始直後では、空気は直線状のジェットとして流入するが、次第に左側壁面に押しつけられるようになり、ケーシング内部には大きな渦が生成することが判る。

図2からも明らかのように、実際の機器内部の幾何条件は極めて複雑で、なんらかのCADシステムは不可欠である。筆者等の開発したプリ・ポストシステムは、市販の有限要素法用のそれと比べると極めて小規模なものではあるが、○A機器の内部流の解析には有効なツールである。このよ

うに、要素法以外の手法によるシミュレーションでは、プリ・ポストを自作せざるを得ない場合が多く、この自作のための優れた支援ツールも、高度な汎用システムと同様、今後のCAE建設のための基礎的ソフトウェアと考えられる。

また、今後は、3次元の流動・熱解析システムが設計のツールとして必要となろうが、その時、CADシステムは一層重要となる。3次元形状の入力とともに、効率的自動格子生成手法、任意断面の物理量の高速な表示等、要素法での経験を取り入れつつ、差分の特性を考慮したCADシステムの構築が望まれている。

3 インクジェットプリンタ液滴生成解析

インクジェットプリンタは、その基本的考え方は、インクを入力信号に応じて紙面に吐出させるという、ある意味では極めて単純な方式であるが、それだけに従来の印字方式にはない大きな可能性を秘めている。これに関わる技術の中で、微小インク滴の形成過程は印字品質を決定する最も重要なプロセスである。図5には、その一例として、圧電素子でキャピテイ内のインクに圧力を加え、微小なノズルからインクを吐出させる方式の概念図を示した。インク吐出時、その粘性係数や表面張力のパラメータおよび圧電素子へ印加する電圧のパターン等によって、主液滴に加えてサテライトと呼ばれる副次的な液滴が生ずることがあり、これが、紙面に付着すると、印字品質を大幅に劣

化させることとなる。

筆者等は、表面張力の作用する自由表面を持つ流れを追跡できるMAC法を改良した手法を開発し[3]、この過程の解析を行った。図6～8には粘性係数の異なる2ケースについて、時間的変化をみたものである。図の上部には圧電素子に与えられた電圧パルスと図の各時点の時刻が示されている。両者ケースとも、電圧を印加し終えた後も、液柱は伸びつづけ、やや丸い頭部と長い尾部からなる構造になり、やがて、ノズルから切断される。ある時点までの両者の相違は小さいが、その後、頭部と尾部とのバランスにより、粘性係数の大きい場合は、尾部は頭部に吸収されて一つの液滴となる。一方、粘性係数の小さい場合は、サテライトを生じることが判る。

新規な技術の解析を行なう場合は、まずなによりも、その現象を支配する物理を正しく把握することが重要であり、この液滴生成解析においては、吐出されたインクの時間的変化を捕らえる必要がある。そのために、筆者等は、グラフィクスの擬似的アニメーション機能を用いて、様々なケースを同時にかつ時間的に変化させながら表示して、サテライトの発生までの条件を検討できるようにした。また、これにより、解析した本人だけではなく、多くの者が解析の結果をただちに把握できるようになり、技術トランスファの上でも大変有効であった。

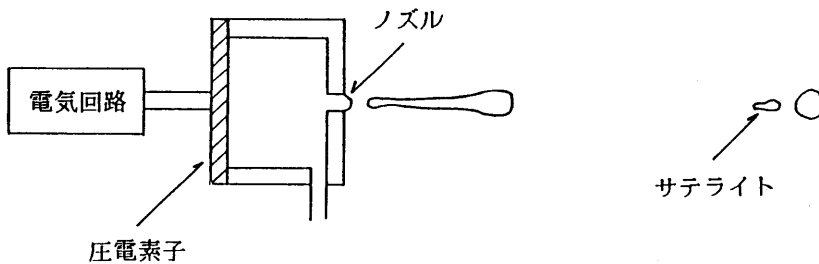


図5 インクジェットプリンタのインク滴吐出の概念図

図6 相対時刻 $t = 10$ における
 インク滴生成挙動
 上図： 粘性係数の大きな場合
 (粘性係数 $\nu = 2.5$)
 下図： 基準ケース
 (無次元化した粘性係数 $\nu = 2.0$)

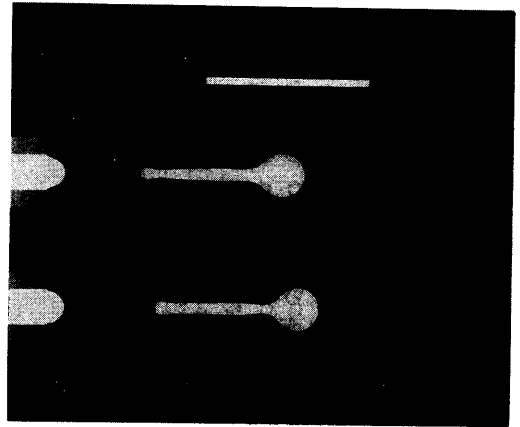


図7 相対時刻 $t = 15$ における
 インク滴生成挙動
 上図： 粘性係数の大きな場合
 (粘性係数 $\nu = 2.5$)
 下図： 基準ケース
 (無次元化した粘性係数 $\nu = 2.0$)

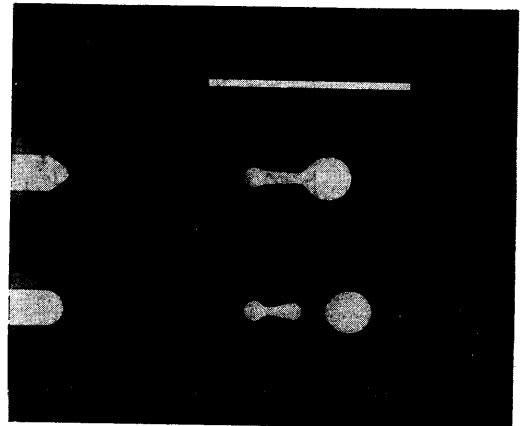
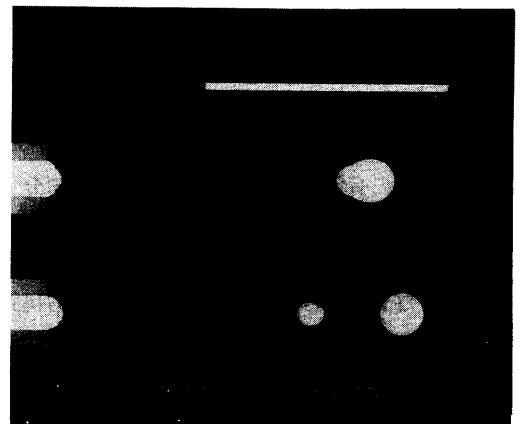


図8 相対時刻 $t = 18$ における
 インク滴生成挙動
 上図： 粘性係数の大きな場合
 (粘性係数 $\nu = 2.5$)
 下図： 基準ケース
 (無次元化した粘性係数 $\nu = 2.0$)



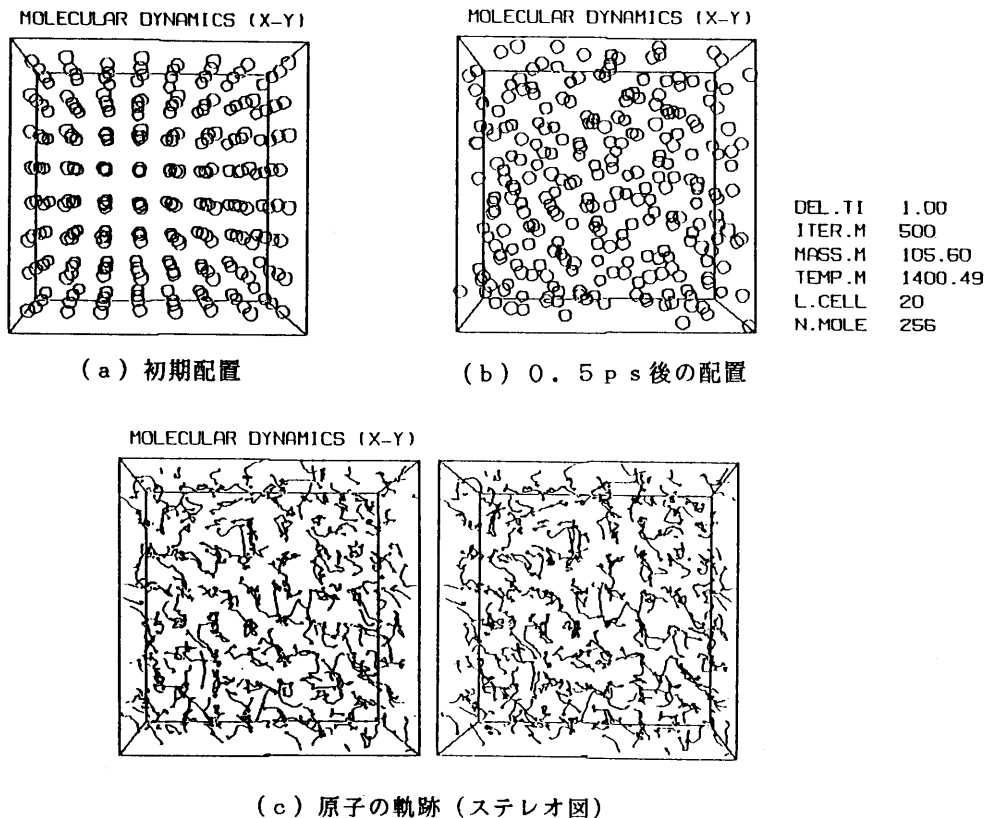


図9 Cu原子の熱振動

4 分子動力学

独自の新技术の開発には材料からの開発が不可欠である。材料開発は、従来試行錯誤的な実験に頼っていたが、効率よく行うためには、理論的手法に基いて数値計算により新材料を開発するシステムが望まれる。材料設計を目指すシミュレーション法として有望視されているものの一つに分子動力学法がある。分子動力学法は、原子や分子などの粒子の古典的な集団を対象にし、粒子間の相互作用が既知であるとして、各粒子の運動方程式を積分し、時間発展を求め、多粒子系の運動状態をシミュレートする方法である。微小時間毎の各粒子の位置の情報が得られるので、構造解析は勿論のこと、拡散係数や粘性率などの動的な挙動の解析や、原子の振動の様子から分光学的性質も求

めることができる。その際に粒子の位置の数値的な情報から解析するのみでなく、実際の試料を顕微鏡観察するのと同様な観察も重要である。観察することにより理解が深まるばかりでなく、今まで気付かなかった現象の発見に役立つ。そこで、3次元空間での粒子の運動の軌跡や、ある時刻での位置を直感的に理解できるようにステレオ表示を行った。

図9に一定温度1400Kにおいて、Cuの原子がfcc構造の結晶状態にある規則的な配置から、融解して液体状態のランダムな配置になるまでの様子を示した。(a)は、初期の結晶状態にある原子の配置図であり、(b)は、ある時間経過し、液体状態になったあとの原子の配置図である。

(c)には、(a)の状態から(b)の状態にな

るまでの熱振動の軌跡をステレオ図として示した。(c)を2枚のレンズをつかったステレオスコープを通してみるにより、容易に立体感を得ることができる。(a), (b)についてもここでは片目で見た図しか表示していないが、両目で見た図を表示することにより、立体的な観察をすることができる。

現段階ではまだ計算の方が充分ではないため、直感的理解に役立つに留まっているが、計算が進むにつれて、今後はより興味深い現象の発見に寄与することと期待している。また、そのためには、動画にすることも考えている。

5 むすび

企業の研究開発も、従来の実験的経験的アプローチ主体から、近年は数値計算等を用いた理論的背景に立つ方向へと移りつつある。CGは、まず第一に、計算を行った研究者・技術者自身が計算結果から物理的シナリオを構成し、研究開発のアイデアを育てるツールとして、そして、第二に、計算の結果と意味とを他の者に伝える道具として、シミュレーションシステムの重要な要素となりつつある。

とりわけ、後者の技術のトランスファにおいて果たす役割は、企業では大変に大きい。多くの場合、企業では計算結果の意味を、その分野の専門家でない人へ短時間に伝えねばならない。この時、実験・試作による研究が、その成果を「物」として見せられるのに対し、計算はその解析結果から「物」を想起してもらわねばならない。前述した

例でいえば、OA機器内部の流れを解析するのは流体を専門とするものであっても、その解析結果をもとに設計にあたるのは、必ずしも流体を熟知しているものではない。その時、設計者にとって解析結果の意味を直感的に理解させてくれるCGは、いわば数値計算の結果の品質保証といえよう。

今後のシミュレーションシステムは、既に定性的に判っていることを定量的に求めるというレベルから、「3次元・動的・非線形」という言葉に示されるように、現象の物理を把握するための発見的ツールへと発展していくであろう。それに応じ、現象を直感する、例えば前節の分子動力学の計算の例では、原子の中に入り込んで考える、そのような体験をさせる道具としてのCGの役割はますます重要となりつつある。近年、多くの企業が、スーパーコンピュータを導入し、研究・開発の効率化を図りつつあるが、それと同時に、3次元リアルタイムアニメーションなどが容易に実現できる「スーパーグラフィックシステム」への期待も大変に大きいといえよう。

文献

- [1] J.F.Thompson, F.C.Thames, and C.W.Mastin. J.Comput.Phys., 15(1974)299.
- [2] 渡辺好夫. 第20回流体力学講演会, 2A6 (1988)218.
- [3] 河村哲也, 高見顕郎, 海老豊. ながれ, 1 (1982)285.