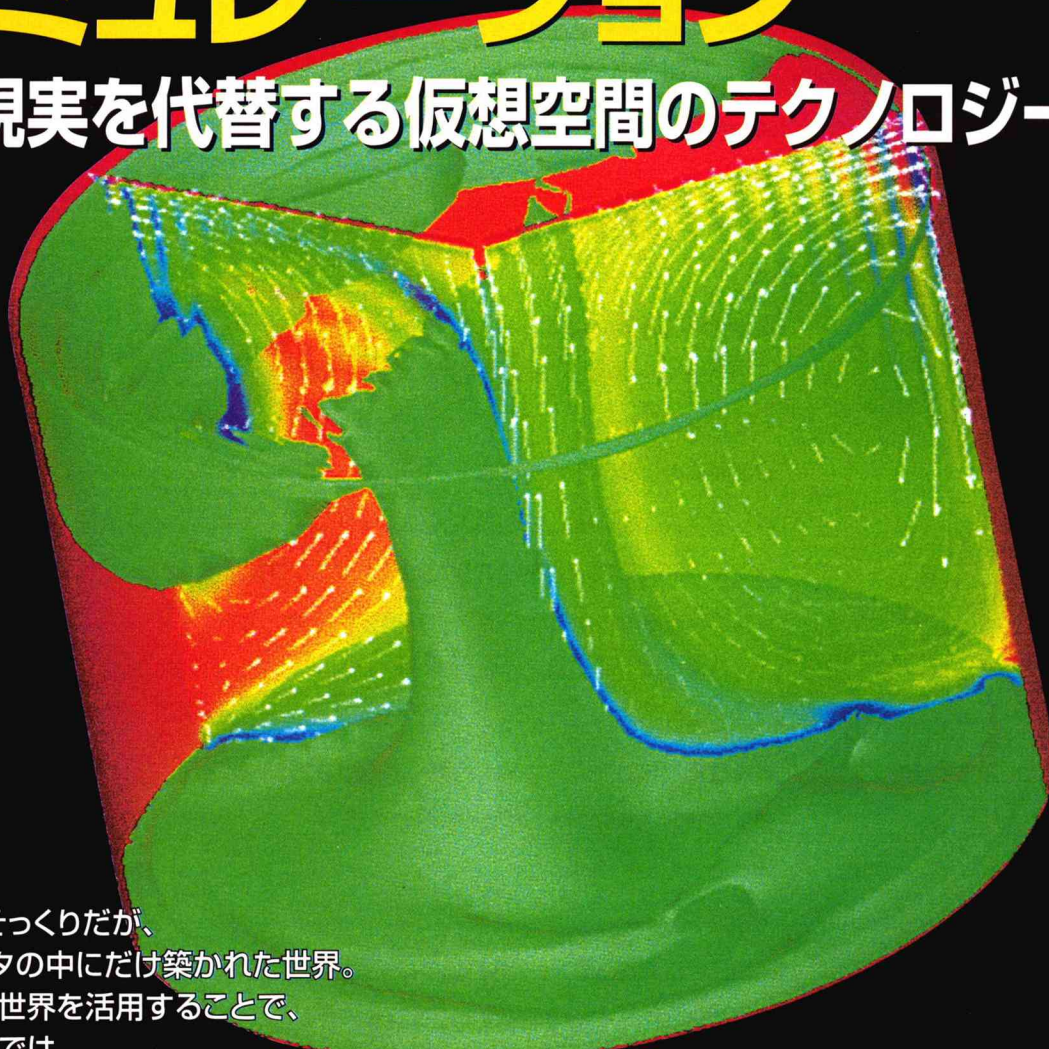


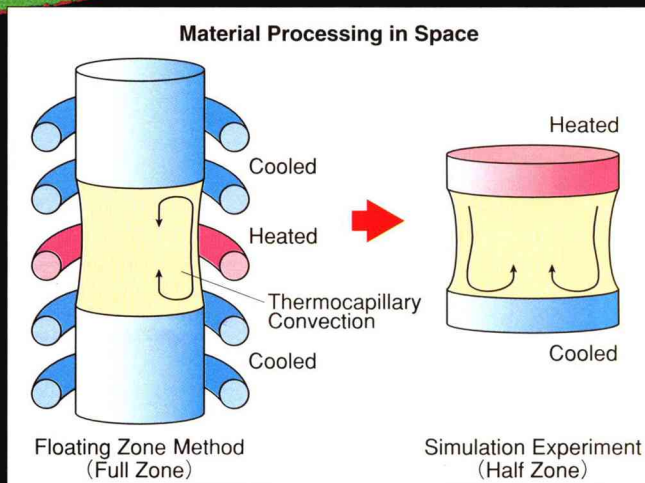
科学・技術に貢献する シミュレーション

——現実を代替する仮想空間のテクノロジー——



「現実」にそっくりだが、
コンピュータの中にだけ築かれた世界。
そんな仮想世界を活用することで、
科学の分野では、
い今まで見えなかったものに光があたり、
産業技術の分野では、
より合理的な製造技術が可能になる。
活用のしかたによっては、
科学・技術の新しい地平を
切り開いていくほどの可能性を秘めているのが
仮想現実—コンピュータ・シミュレーション技術である。
今回はその先進的な応用技術の例を、
いくつかの切り口からとりあげてみる。

写真：宇宙空間で金属を溶解した際に液柱の中で生じるマランゴニ対流の等温面
と流速ベクトルをシミュレートした映像。



シミュレーションが科学に 新たな地平を拓く

理論科学と実験科学に次ぐ第3の方法論—計算科学の驚異

あまりに特殊な環境での実験、あまりに複雑すぎる対象をあつかう実験、あまりにマクロな、あるいはあまりにミクロな……これまでは不可能だと考えられてきた現象をあつかう有力なノウハウとして、コンピュータ上での仮想空間に物理特性を再現して実験を行い、シミュレーション映像を通じて観察を行うという方法論がコンピュータの目覚ましい発達にともなって可能になってきた。こうした「計算科学」といわれる新たな分野での先端の研究例を通じ、シミュレーション技術の可能性を探ってみる。

実現困難な実験環境を仮想空間に構築

最近「バーチャルリアリティ」という言葉を頻繁に耳にするようになった。コンピュータを中心に、大型映像や3D映像、シミュレーターと呼ばれる体感装置など、いくつかのテクノロジーを組み合わせることによって現実には存在しない仮想の世界を体験可能にしようというものである。

ゲームセンターにひしめく航空機、列車、レーシングカーのシミュレーション・ゲームやアミューズメント施設の仮想空間を体験するアトラクション、さらにはコンピュータネットワーク上にある仮想の店舗や銀行など、いまやさまざまな形で「バーチャル」な文化が浸透してきている。

この「バーチャル・リアリティ」の発想や方法論が、実は科学や技術の分野での研究に画期的な手段をもたらそうとしている。これまでの科学の方法論は、「理論科学」と「実験科学」という2つの大きな柱によって成り立ってきた。コンピュータの膨大な計算処理能力は、いまこの2つの方法論を融合あるいは止揚するかのような「計算科学」という手段を科学にもたらそうとしている。

首都圏のある私立大学では、文部省の「私立大学ハイテクリサーチセンター」のひとつに選定されたのを機に、計算科学フロンティア研究センターとして高度なコンピュータ・シミュレーション・システムの設備を充実させ、「計算科学」のノウハウ確立に力を注いでいる。文部省との連携によって進められているこのプロジェクト、正式名称を「高速計算機仮想空間内実験プラットフォームの構築と先端計算科学の開拓」といい、これまでは困難であると考えられていたさまざまな実験環境をコンピュータによる仮想空間の中に構築するためのノウハウ開発をめざしている。それにより、これまでは「人の目」には見えなかったさまざまな現象を観察可能にしようというものだ。いわばシミュレーションによって、実験に代わる観察結果を得

ようという発想で生まれた、コンピュータの中に存在する「バーチャル」な実験室なのである。ちなみに現実には困難だが、仮想空間で可能になる実験とは、どんなものなのだろうか。これについては具体例を見ていくほうが理解が早いだろう。

たとえば無重力空間での溶けた金属（溶湯）の挙動を見たという場合。無重力（現実には微小重力）状態を地上でつくりだすのはとても困難である。重力の働く地上では溶けた金属は熱による比重の違いにより対流を起こすことが分かっているが、重力がほとんど働かない宇宙では、浮力に起因する熱対流は起こらないものの、表面張力によって流れが起こることは避けがたい（マランゴニ対流）。表面張力は温度によって変化するため、温度差が大きい場所ではカオスといえる不規則性の流れが生じる。宇宙では地上とは大きく異なった流れが生じるのである。この動きを数学的に把握するにはあまりに複雑すぎ、実験と観察を経ずに解答を得ることは困難だ。

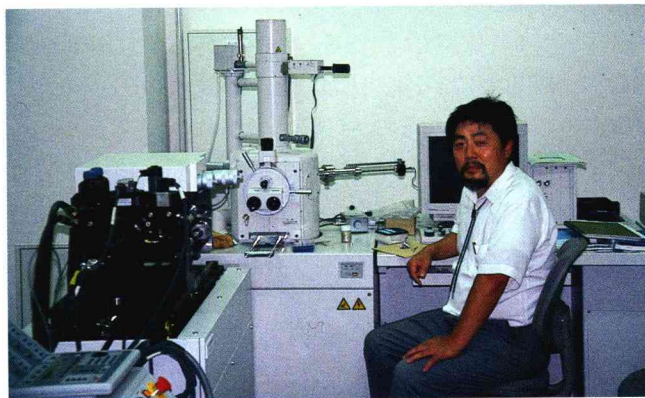
現在、微小重力状態を得るには、落下塔、航空機、実験ロケットなどによる自由落下を利用する方法があるが、それぞれ10秒、20秒、6分というように、ごく限られた短時間の微小重力状態を得るのがせいぜいである。しかもそれにかかるコストはきわめて大きく、時にはリスクも大きい。繰り返しの実験や長期にわたる実験を気軽に行うことはできない。もし微小重力下での仮想空間をコンピュータ上に再現し、そこで納得がいくまで実験が行えれば、現実の実験にはいたらないまでも、得られるものは決して小さくない。

宇宙空間で金属材料を製造することによって、地上では不可能な高機能金属をつくりだすことができるかもしれないという話題は、本誌Vol.1 No.12（IRON & STEEL）でも紹介したが、溶湯の挙動は、地上と宇宙とは大きく異なり、その実態をつかんでおくことが「夢の金属」を実現するうえでも重要になる。

計算科学フロンティア研究センターでの研究例の中には「仮



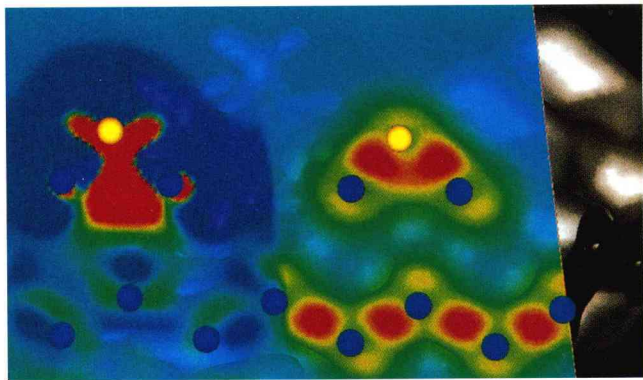
仮想空間表示室の内部。
3D眼鏡によって画像を立
体として観察できる。



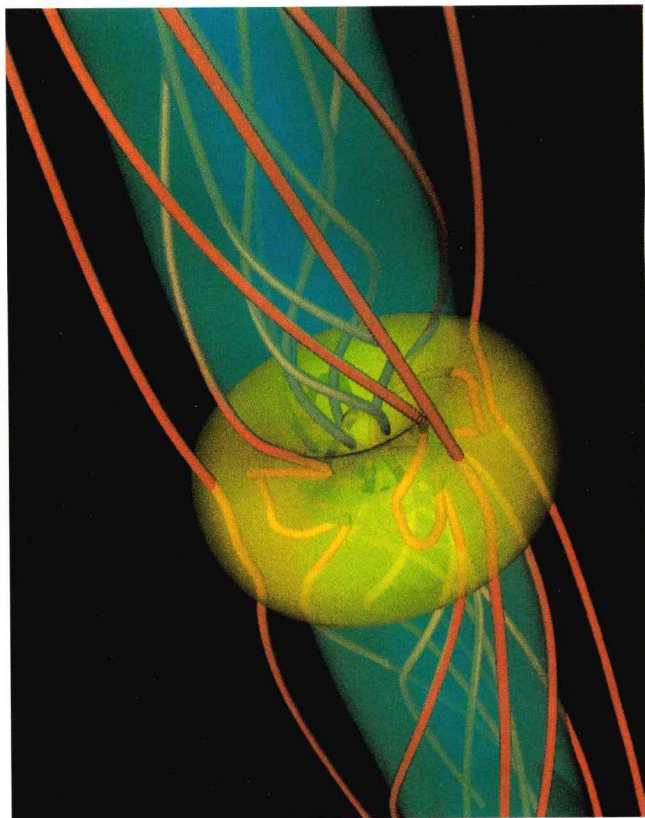
仮想空間表示室と連携して機能する実空間実験室に装備された3次元画像処理機
能つき走査型電子顕微鏡。

「仮想実験室」に宇宙空間と同様の疑似空間をつくりだし、空間に浮かせた状態で溶解した金属液柱中での溶湯の挙動をシミュレーションで視覚化するという仮想実験によって、宇宙空間材料を研究しようというものがある。宇宙空間材料の研究は将来、日本も参加が決定している国際宇宙ステーションでも実験が予定されているが、そこへ行き着くまでのステップとしても、現状のシミュレーションを使った実験は不可欠なものであるという（扉ページのコンピュータ・グラフィックは液柱を半分に切った中での流れ方をシミュレートしたもの）。

計算科学フロンティア科学センター内の仮想空間表示室には、こうした仮想実験によるシミュレーション画像を3次元画像として見ることのできる設備が用意されている。市販のシステムではあるが、二重に映したCG画像を左右異なる液晶シャッター付きの眼鏡で見ることにより左右の視差をつくりだし、平面ではなく立体として観察することができるものである。計算結果をリアルな画像として観察することで、数字を眺めているだけでは気づかないことを、視覚を通じて発見することができるという。



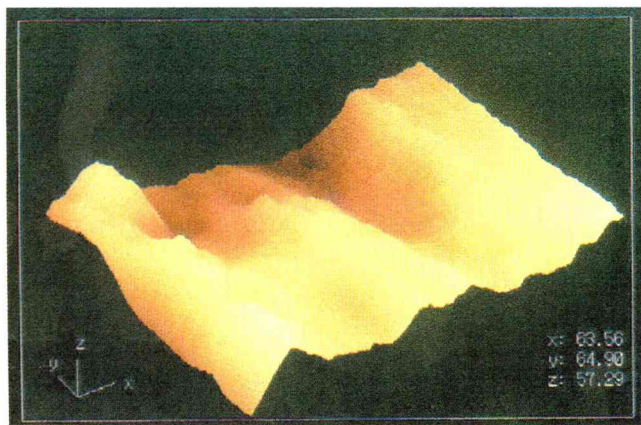
量子力学を基礎にして、コンピュータ上に原子スケール構造をつくりだし、原子核や電子の動きを視覚化。原子スケール物質の構造、電子やイオンの状態、拡散、振動などの様子を目で観察することができるようにした映像で量子系計算科学部門の研究テーマのひとつ。そのほか中性子を出さない核融合や金属・合金の電析機構に影響をおよぼす液体構造解明などの研究が行われている。



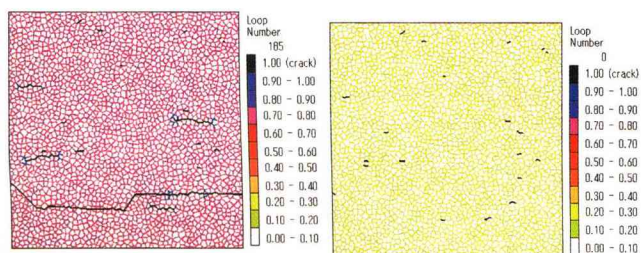
ブラックホールの電磁流体シミュレーション。実験が不可能な巨大な宇宙現象もシミュレーションで検証ができる。他には木星のオーロラ現象などが研究対象としてあがっている。

仮想実験を3次元画像で観察

センターには仮想空間表示室とならんで「実空間実験室」という部屋もある。ここには日本に数台という3次元画像処理機能付きの走査型電子顕微鏡が設置されている。電子線を当てて3次元画像情報を得ることのできる電子顕微鏡だが、この装置は仮想実験室を組み合わせた材料破壊の研究に使用される。たとえば金属材料に力をあたえて金属疲労試験をしながら、破断する瞬間をこの電子顕微鏡でとらえ、そのデータを仮想空



破壊断面の3次元シミュレーション画像。実際にはアニメーションで経時的に破壊の様子を観察できる。

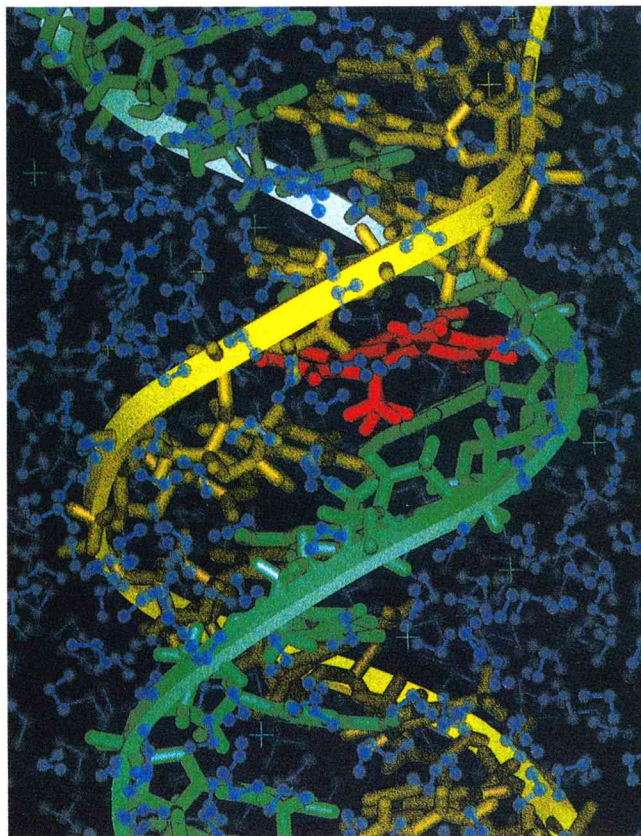


結晶粒界に亀裂が入る疲労過程のシミュレーション。初期には複数の亀裂がばらばらに発生し、そのうちのあるものだけが成長し破壊に至る過程が観察できる。

間実験室で映像化する。材料の破断は、たとえば外部から見て片側から反対側へと亀裂が走ってふたつに割れるように見える場合でも、破断面が片側から反対側へ連続して成長するといった単純な動きでは決してとらえきれない。周囲にはつながった部分を残しながら、中央部分が破断して穴（ボイド）となり、それがいくつかつながり合って破断面が成長するといった複雑な動きである場合が多いのである。こうした破壊の挙動も、3次元アニメーションとして表示すれば、きわめて観察が容易になる。

科学の「影の部分」を解決する計算科学

金属疲労による破壊のメカニズムを明らかにすることは、たとえば原子力発電所の圧力容器や、航空機などの破壊事故を防いだり、あるいは疲労の起こりにくい材料を考えたりするうえで重要な意味をもっている。近年ではコンピュータのチップを留めているハンダが通電の繰り返しによる熱応力で疲労を起こすことが伝えられている。もしわれわれの生命にかかわるような制御システムのハンダが熱疲労でブツリと断線するようなことがあったら……。巨大テクノロジーを使いこなしていく時代の危機管理のためにも、破壊のメカニズムを研究する必要性がそこにある。また複合材料などでは、異粒子が偏って多くなっている部分から破壊が起こることが分かっているが、その力学的なメカニズムを解明するのにも3次元アニメーションは有効だと考えられる。研究が進めば、より高度な構造を持った複合



遺伝子や蛋白質などの複雑な生態分子を分子動力学をもとに再現し、3次元映像としたもの。生命の謎を解明するために有効なアプローチとなる。

材料の誕生も夢ではなくなるかもしれない。

「20世紀は科学の時代」といわれたように、科学の輝かしい成果が次々と実を結んできた。それはいわば光の部分だが、予想もしなかった影の部分もずいぶんと生まれた。この影の部分に対処していくには、とてつもなく複雑でからみあった要素を正確に緻密に解いていかなくてはならない。このセンターに代表されるような高度なシミュレーション技術は、こうした「あまりにも複雑にからみあった問題」を解決するための有効なノウハウといえるだろう。資源渇渴、環境問題、南北問題などといった現代科学の「影」の部分は、まさに機械的な合理主義では解決のつかない、あまりにも複雑にからみあった相関関係を分析しなくてはならない命題である。

仮想空間実験室は、こうした既存の科学のノウハウだけではとらえきれなかった「何か」をつかむことを可能にするものなのだろうか。

「計算科学」は「理論科学」と「実験科学」に次ぐ第3の科学であるといわれる。デカルトとベーコンによって導かれた現代科学の2つの源流が融合しあって、いま新たな地平が拓かれようとしているということなのだろうか。仮想空間実験室に代表されるシミュレーションの技術がこれまで手の届かなかった領域に科学の光を当ててくれることに期待したい。

【取材協力・写真提供：東京理科大学・計算科学フロンティアセンター】

シミュレーション化によってコスト削減

——巨大構造物の仮組みをコンピュータ内で実現

前段では、現実には再現が難しい条件を仮想空間に構築する研究の最前線での例をご紹介したが、シミュレーションの技術は、製造業の現場でも、実作業の代替をすることでコストやリスクを低減するために役立っている。ここでご紹介するような巨大な構造物の仮想模型をコンピュータ中に構築し、実作業の代わりとするシステムは、いわばその代表例といえるだろう。



鋼製橋梁の工場での仮組み省略が可能に

鋼製の橋を建設する場合には、製作工場で部材単位に工作した後、現地でのトラブル防止や、製作寸法精度、部材相互の取り付け状態を確認するため、工場で仮組みを行って、間違いなくできあがっていることを確認しておかねばならない。仮組みをしてみても誤差が大きければ即座に修正作業が行われるというわけだ。

仮組みとはいえ、巨大な橋梁の鋼製部材を組み立てるには、広い仮組み場所と大きなクレーンなどの設備が不可欠であり、人員、時間なども当然必要になる。したがって、もし仮組み作業を省略できれば、コスト削減にはおおいに効果的ということになる。この仮組み省略のための新たなノウハウとして近年、コンピュータ・シミュレーションを用いる方法が採用され始めている。

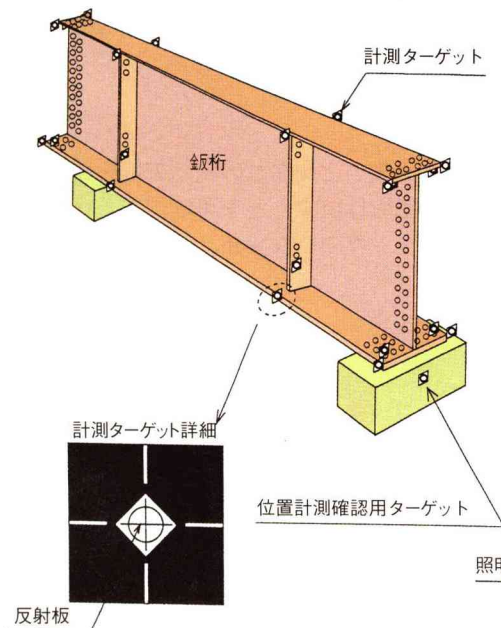
大手橋梁メーカー数社では、3次元計測システムによって橋梁部材を自動計測し、そのデータを用いて組み立て時のシミュレーションを行うことのできるシステムを開発、自社工場内で配備し、一部では外部に対しても販売を開始している。

この種の橋梁仮組みシミュレーションの特徴は、膨大な測定データを整理して、調整が必要な部分の加工指示書とNC

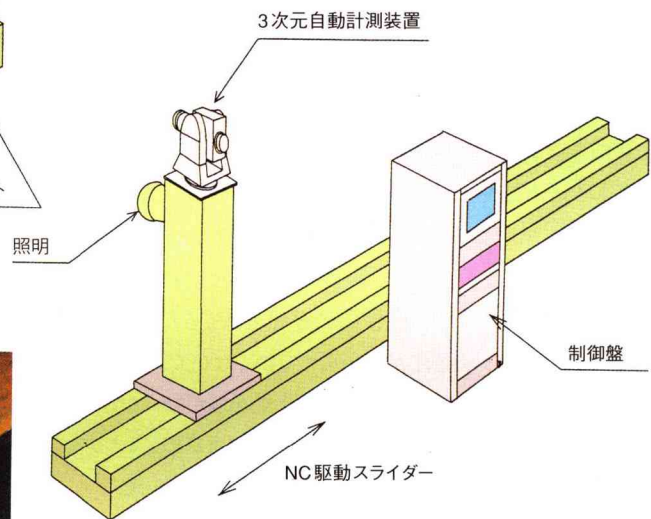
加工データも作成してくれるというもので、結果をワイヤーフレームによる画像表示と数種の成績書として表示してくれる。橋梁メーカーの工場では鋼材メーカーから搬入されてくる鋼材をNCデータによる生産ラインを用いて切断・溶接・加工し、橋梁部材として仕上げるが、そうしてできあがった部材を、図のようなCCDカメラを搭載した3次元計測機を使って計測し、そのデータを用いて仮組みシミュレーションを行っている。

あるメーカーの例では、計測はシステムに対象物のNCデータを読み込ませておけば、あとはコンピュータ上の対話式画面にしたがって操作することで、カメラが駆動テーブルの上を移動して各寸法（高力ボルトによる取り付け穴も含めて）を測定してくれるようになっている。この作業によって対象物が3次元的にどんな広がり（座標）を持っているのかを、システム上に読み込む。部材には計測ターゲットと呼ばれる射的的のようなものが取り付けられる。このターゲットをカメラがキャッチする。従来、こうした部材の測定は人が3脚で立てた測定機を移動させながら目視で行っていたが、この装置では、すべてが自動化されている。

こうした作業を部材ごとに行い、最後にデータを合成して橋全体でしっかりと組み上がることをシミュレートしていくのである。橋全体では測定ポイントはきわめて多くなり、大量のデー



3次元自動計測装置による計測の様子

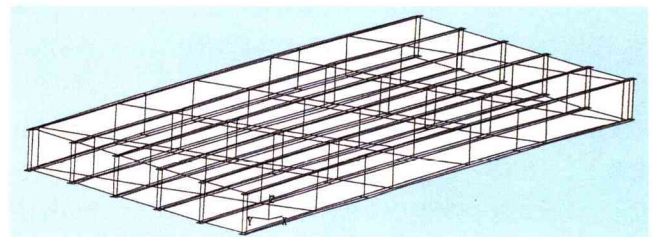


3次元自動計測装置による計測の様子

タが一覧表になって出力されるが、誤差が許容範囲にあるかどうか（適合・不適合）は一覧表によってきわめてスピーディに確認でき、そのデータは現場での作業にも流用される。シミュレーションのやり方は、添接板のボルト孔を一連の製作工程の中で先にあける場合と、シミュレーションの結果にもとづき後であける場合があり、システム上いずれかを選択するようになっている。シミュレーションは、橋軸方向、橋幅方向、全体合成という順番で行われ、各部材の傾きや、あらかじめ与えてあるそりなどが適正に出ているかどうかを診断してくれる。

将来は橋梁以外的大型鋼製構造物にも

シミュレーションでの仮組みが実現することになった背景には、CAD/CAMが普及したことによって、部材の製作過程が



ワイヤーフレーム画像の例

NC（数値制御）化され、精度が向上したということがあるという。設計段階から加工の工程まで大半がコンピュータ制御によって行われるようになったため、加工上の誤差が出にくくなってきているというわけだ。

橋梁メーカーでは、将来は同種のシミュレーションを大型建築物にも適用していくことを考えているという。同様に造船分野への適用も考えられるだろう。鋼製大型構造物の仮組みは、コンピュータ・シミュレーションによって行うことが近い将来には、ごく当たり前になる日が来るのかもしれない。

[取材協力・写真提供：川崎重工業(株)]

ブラック・ボックスだった鋼の凝固過程をシミュレーションによって画像表示

——金属の凝固現象シミュレーション

鋼の鑄造の際の凝固現象では、多数の要素が絡みあって成分の偏析や微小空洞などの内部欠陥を生み出す。この凝固過程をコンピュータでシミュレートし、ケースごとに画像データとして取り出すことを可能にするノウハウが実用化されようとしている。複雑で膨大な数量をいとも簡単に処理するコンピュータのパワーが、金属製造過程のブラック・ボックスに光を当てようとしている。

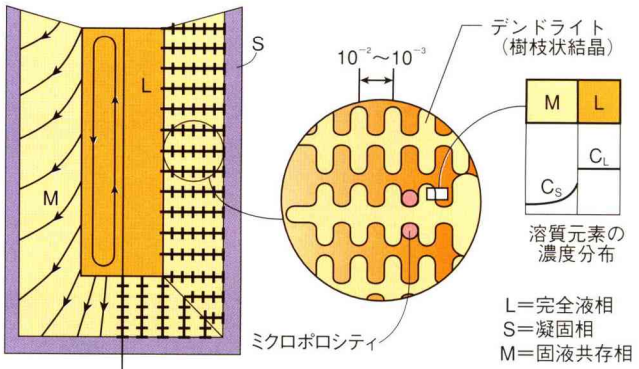
n+6個すべての変数を計算するシミュレーション

鑄造過程で、合金成分が偏って析出するマクロ偏析や、微小空洞（ミクロポロシティ）などの内部欠陥の生成は、連続鑄造や大型鑄造品製造の現場で問題にされてきたが、そのメカニズムは、関連してくる要素が複雑すぎることもあり、ほとんどブラックボックスのまま、簡便的に処理されてきた。

しかし鋼材に高度な機能性が求められていくなかで、合金設計からのズレや欠陥に対するより正確な情報をつかむノウハウはぜひとも必要なものだった。材料科学・工学関連のエンジニアリングシステムの研究開発を行う^{えびす}（株）エビスの戎嘉男社長（工学博士）らは、こうした潜在的ニーズに応えるものとして、コンピュータによって鑄造時の凝固過程をシミュレートできるシステムの開発に取組み商品化に成功した。

凝固過程の解析に関連してくる要素は、注ぎ込みや熱対流による流れ、固化過程で成長するデンドライト（樹枝状結晶）のすき間に生じる凝固収縮による流れ、そこで生じる液相圧力の変化や合金成分の濃縮など、多岐にわたる。これらすべてが変数として相関してくることで、しかも時間の経過にともなって固化が進む段階で刻一刻と状態は変化する。その様子を見るにはn+6個の変数（温度、液相温度、液相流速ベクトル3つ＝xyz方向、液相圧力＋炭素、ケイ素、リン…など溶質の数分の液相中溶質濃度）の連立方程式を解く必要があり、時間の経過ごとの解を短時間で取りだしビジュアル化する必要がある。

エビスのシミュレーション・システムは、凝固過程で相互に作用しあう（連成する）すべての変数を計算し、収束解を求めるもので、さらにその解をホストプロセッサと呼ばれる表示用プログラムによってビジュアル表示することができる。このプログラムを用いれば、流し込み後の任意の時間と場所での凝固や流れの状態、マクロ偏析、微小空洞（ミクロポロシティ）の状態、液相－固液共存相－固相のでき方など、鑄造時の凝固過程に起こってくる現象を、さまざまな角度から視覚的にシ



液相では熱対流によって流れが生じ、固液共存相では凝固収縮による流れが生じる（矢印）。固液共存相ではデンドライト（樹枝状結晶）を形成しつつ凝固収縮が進むが、枝のまたの部分に空隙ができやすくなる（ミクロポロシティ）。このメカニズムにのっとったよりリアルなシミュレーションを行うためには、下表に示すn+6個の方程式を解く必要がある。

物理変数		支配方程式
温度	T	エネルギー保存式
液相中の溶質濃度	CLn	溶質再分布式（溶質保存則）
液相温度	TL	温度と固相率の関係式 （非線形系多元合金モデルによる）
液相の流速ベクトル	VL	運動方程式（Darcyの式を含む）
液相の圧力	P	圧力式
変数の数	n+6個	式数n+6個

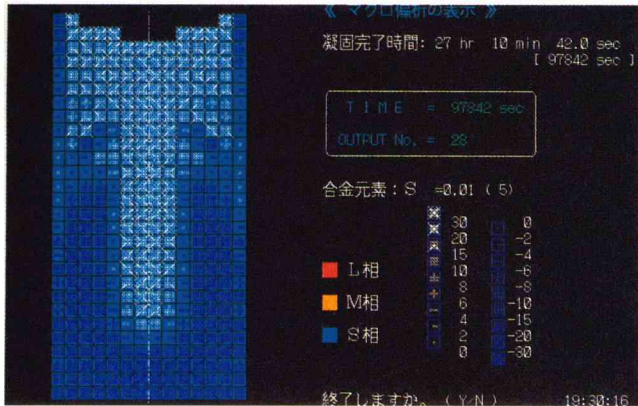
物理変数と支配方程式の関係（nは合金元素数）
鑄造時のシミュレーションはこのn+6個の連立方程式をコンピュータ上で解くことによって得られる。

ミュレートすることができる。

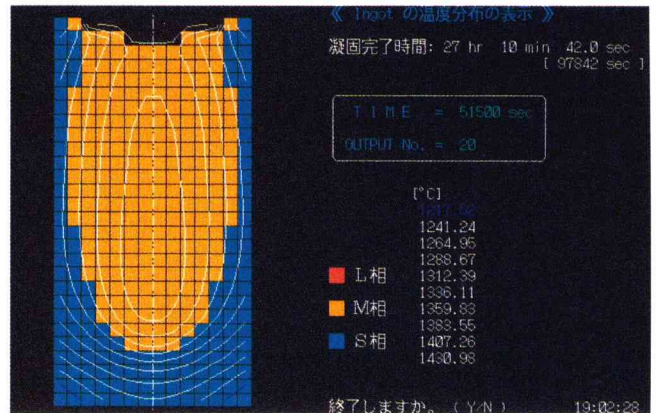
連続鑄造時の内部欠陥防止対策に貢献

たとえば、流し込みの型の形を設定し、そこに特定の成分をもった鋼を流し込んだ場合、各タイムステップごとに、流れ（流し込み・対流・凝固収縮によるもの）、凝固の進行状況、成分ごとの偏析状況……etc.をパソコン画面上で見ることができる。

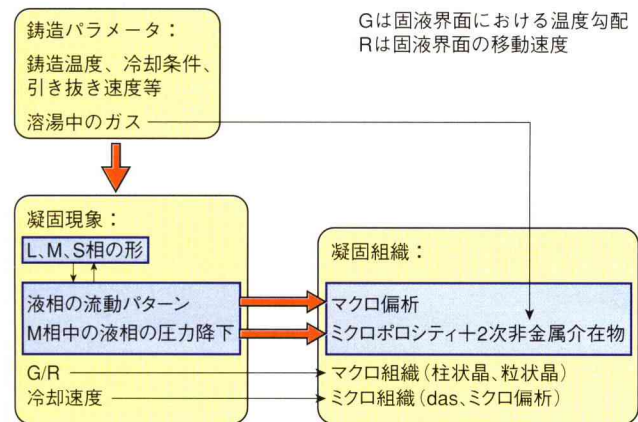
ケースごとに、入力情報を入れてやることで、これまでは温



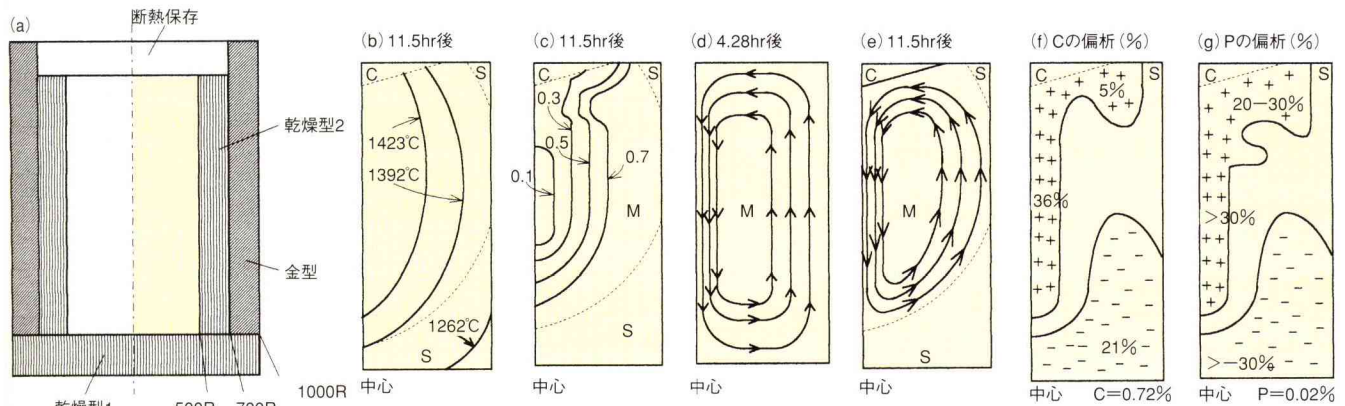
表示画面の一例／インゴットの温度分布



表示画面の一例／合金元素（ここでは硫黄）のマクロ偏析分布



铸造パラメータと凝固組織の関係



大型銅塊（直径1m×高さ3m）の解析例

度や流れなどからごくおおまかに予測するしかなかった凝固過程を即座に画面表示して多角的に解析できるようになった。これまで実験的には見ることのできない凝固現象がシミュレーション情報として得られるようになったことは、マクロ偏析や内部欠陥の解決ノウハウの探求面でも役に立つという。戎氏は、このシミュレーションを用いて、連続铸造時に発生するマイクロポロシティをとまなうV状偏析を解析し、その対策として電磁力を加えて欠陥を追放する方法を開発、国際特許を申請している。プラントに採用されれば、生産性も大幅に向上する

- シミュレーションによって見ることのできる情報
- タイムステップごとの分布図
 - ・液相、固相および固液共存相パターン
 - ・温度
 - ・固相率
 - ・局所凝固時間
 - ・圧力
 - ・流速ベクトル
 - ・マイクロポロシティ体積率
 - ・マイクロポロシティの大きさ
 - ・マクロ偏析
 - 凝固終了後のDAS
 - 要素番号を指定したときの時系列データ
 - ・温度—時間曲線等の時間変化
 - 要素ごとの温度—固相率データ
 - 凝固進行状況のアニメーション等
 - 3次元CGによるグラフィックディスプレイ

という。「医者なら、病名が特定できれば治療法が分かります。むしろ正確な診断すなわち、発病のメカニズムを知ることこそが難しいでしょう。シミュレーションを用いれば、（凝固過程での）中のストーリーが分かります。原因が分かれば対策は立てられるものです」（戎氏）。

シミュレーションの技術は、より高度で機能的な鋼材の製造という場面でも、活躍している。

[株式会社エビス 神奈川県相模原市新磯野5-10-6 Tel 0462-53-5593 (代)]