

# シミュレーション技術への期待 ゲームチェンジャーとしてのシミュレーション

青山 剛史

独立行政法人 宇宙航空研究開発機構

## 1. 成長する航空機産業について

先日、ソニーが1万人規模のリストラを決めたとのニュースが流れた。それを聞いて、あのソニーがここまで傾いてしまったかとの感慨とともに、この手のニュースに慣れっこになってしまっているわが国の状況に暗澹たる思いを新たにしている。今後、エレクトロニクスのみならず、自動車もEV化の中で新興国の追い上げに苦戦が予想されている。そうした中で、これからの日本を支える基幹産業の1つの候補として、航空機産業への期待が高まっている。日本航空機開発協会(JADC)の予測[1]によれば、今後20年間で世界の航空旅客輸送量は約2.7倍に、また運航機材数は約2.1倍になる。航空業界は、この厳しいご時世に年率5%の成長が見込める数少ない優良株で、わが国が国家規模で投資するに値する産業である。

## 2. MRJを契機とするわが国航空機産業の浮揚

現在、三菱航空機は、YS-11以来の国産旅客機となるMRJを開発中である。わが国は、戦後7年間に亘ってGHQから課された航空関連の活動に対する禁止令の解除後、YS-11の開発に航空の復活を賭けた。しかし、その夢は半ばで挫折した。従って、今回のMRJ開発は航空業界にとって背水の陣であると言っても過言ではない。そして、みごとMRJが世界の空を飛んだ暁には、いよいよ航空機産業の基幹産業化を目指して、リージョナルジェットに分類される小型機MRJをベースにこれを大型化し、わが国が航空機開発における主要インテグレーターとなることを実現すべきである。

## 3. ゲームチェンジャーとなる技術

後発であるわが国が、先を走る航空機開発の

先進国に追いつき追い越すためには、航空機的设计そのものを決定的に変えてしまう革新技術、即ちゲームチェンジャーとなる技術を獲得すべきだと考える。現在、複合材技術がその候補になりつつある。従来アルミで作られていた航空機が複合材で作られるようになると製造方法が根本的に変わるため、あのボーイングですら787の開発で大幅な遅れを出してしまった。その複合材技術において、わが国の数社で世界の圧倒的シェアを占めているので、この有利な立場を生かして、素材を提供するだけでなくそれを航空機に適用する技術で優位なポジションを獲得し、これからの航空機開発において世界の首根っこを押さえることが肝要である。

## 4. シミュレーション技術への期待

複合材技術に続いてゲームチェンジャーとなり得る候補がシミュレーション技術ではないだろうか。シミュレーションがその言葉の意味する通り、現実を忠実に模擬できるようになれば、航空機設計のあらゆる場面において、試作や実験の手間を省くことができ、設計期間の大幅な短縮が可能となる。

最近、MRJの納入が1年遅れるとのニュースが流れたが、その主な原因の1つが、航空機の安全性を保証する「型式証明」の取得における遅延であると言われている。わが国は、この分野における経験が極めて少ないことから、先行国に大きく後れを取っている。そこで、もし認証試験に置き換えられるほど予測精度の高いシミュレーションが可能な世界が実現すれば、航空機開発は一変するであろう。電話通信網のインフラが整備されていないモンゴルで、それを必要としない携帯電話が急速に普及したがごとく、航空機設計や型式証明の経験で大きく遅

れているわが国が、短期間でトップランナーの一員に加わるために、ゲームチェンジャーとしてのシミュレーション技術に期待したい。

それを実現するには、国を挙げてシミュレーション技術の開発に投資することが必要である。JAXA では、最先端のシミュレーション技術開発を推進するとともに、それを人材育成にも活用して、次世代を支える若者の育成にも力を入れているが、このような動きが All-Japan の規模に拡大し、わが国においてシミュレーション大国を目指す機運が高まることを願ってやまない。

### 参考文献

- [1] JADC, 平成 22 年度「民間輸送機に関する調査研究」

## アドバンスソフトへの期待

赤間 誠

公益財団法人 鉄道総合技術研究所 車両構造技術研究部 主任研究員

### 1. はじめに

シミュレーションとは、一般にはコンピュータを用いて、現実の世界で起こりうる状況を模擬することである。シミュレーションは、全産業分野において意思決定の支援として利用できる手法であり、複雑なシステムの異なる条件下における挙動を予測する、設計や解析の強力な道具であるといえる。直接経験することができない問題を検討したり、実際の状況を再現することが危険である場合に利用することが可能である。また実験を行うことなしに新しい状況を検討することもでき、非常に費用効率の高い手法である。

具体的には、シミュレーションによって以下のことが実施できると考える。

実際の現象やシステムの動作の、より良い理解を得ること

運用に先立ち、問題を同定すること

変更による本質的な影響を予測すること

資源を投入すべき領域を特定すること

費用効率の高い設計を行うこと

### 2. 適用例

シミュレーションは、多様な産業分野に、広範に適用されている。私が過去に実施したシミュレーションの一例を要約すると、以下のようになるであろう[1]。

“ 構造物や設備は複雑なシステムであり、さまざまな原因で破壊する。破壊は、このような複雑なシステムのサブシステムまたは部品の破壊によって起こる。高リスクの破壊領域の予測、及び予備的な資源の適切な準備は、円滑なシステムの運営に向けて重要となる。解析は、サブシステムまたは部品を、全体的なシステムの破壊モードに結び付けることによって行った。シ

ミュレーションは、既知の部品の破壊を基礎に、シナリオ即ち予想される展開を模擬して実施した。これによって、システム内の高リスクの破壊モードを特定することができた。( 図 1 および図 2 )”

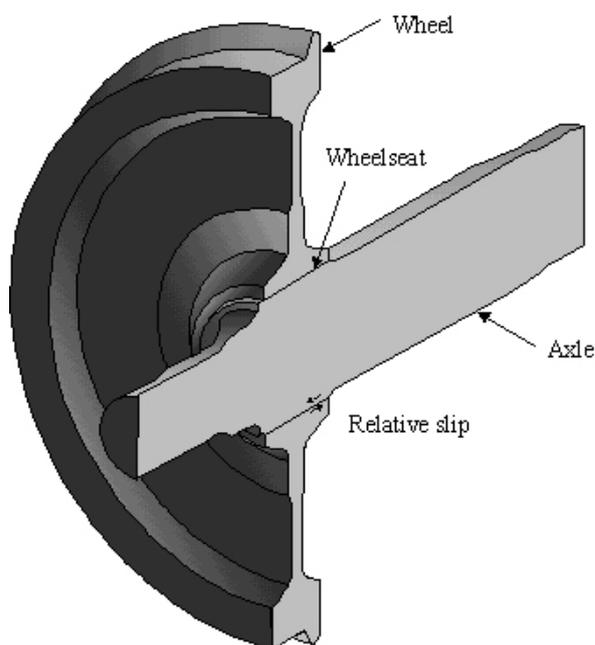


図 1 新幹線電車の輪軸

### 3. シミュレーションの段階

さてシミュレーションの基本的な段階は、次の通りである。

1. 問題の定義
2. 種々の事象についてのデータの収集
3. コンピュータモデルの構築
4. 繰返し演算による実行
5. 結果の洞察と検証
6. 結果に基づいた意思決定

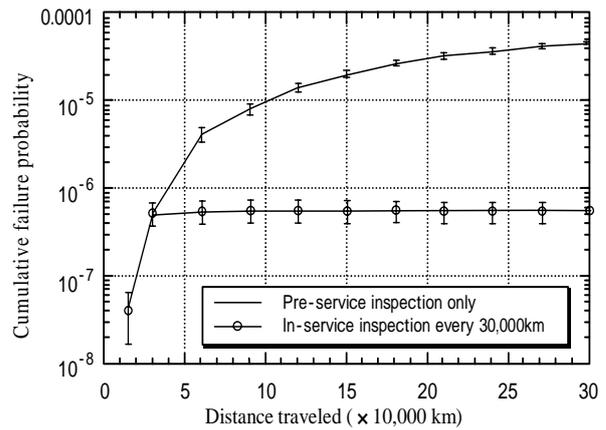
このうち最も重要な段階は、現実に対応するコンピュータモデルを構築することである。こ

これは、実際の現象やシステムが、入力や出力及びそれらの相互作用によって、どのように動作するかを論理的に記述するということである。基本的なモデルから開始して、システムの理解が改善するにつれて、徐々に洗練させることができる。より複雑な問題については、コンピュータを用いて、その過程で起こる事象を発生させ、実際の現象やシステムの動作を模擬することができる。成否の鍵は、構築したモデルがどれほど厳密に現実を表現しているかである。

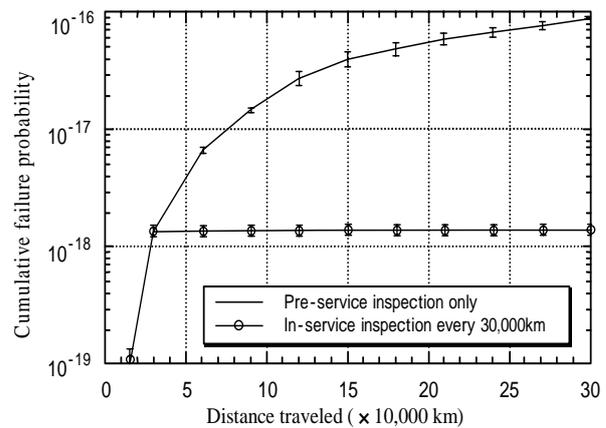
このコンピュータモデルの構築に関して、長年にわたり、アドバンスソフトには多大な尽力をいただいていた。主に私が構築した論理的モデルのコンピュータプログラミングであるが、技術者一人一人の資質が高いため、論理的記述についてもアドバイスをしていただいたことがたびたびあり、大変感謝しております。

#### 4. アドバンスソフトに期待すること

アドバンスソフト株式会社は、2002年4月に、文部科学省のプロジェクト「戦略的基盤ソフトウェア開発」に関連し、ソフトウェア開発・保守を担う企業として設立された。現在では、所属する技術者・開発者のほとんどが、多方面に亘る研究領域の博士号取得者という、我が国有数のシンクタンクに発展している。今後とも大規模な科学技術計算用のソフトウェアの開発や、困難な解析業務に積極的に取り組んでいただきたい。市販のソフトウェアパッケージのほとんどが欧米の製品である現在、それらに負けないような製品を開発してほしい。アドバンスソフトが開発した流体解析ソフトウェアについては、既に欧米の製品を凌駕する性能であると聞かすが、構造解析についても高性能の汎用ソフトウェアを安価で提供していただきたい。日本が科学技術用ソフトウェアの開発能力を失わないように、シミュレーションの中核を担う企業として、またソフトウェアの開発を希望する優れた人材が存分に腕を振るえる企業として、さらなる発展を強く祈念する次第である。



(a) Gear side



(b) Counter-gear side

図2 走行距離に対する車軸の破壊確率

#### 5. おわりに

シミュレーションは、実際の現象やシステムを理解し、モデル化することに助力する重要で有用な技術である。これは、より論理的で科学的な原則に基づく意思決定を行う上で、貴重な柱となる。その中核を担う頭脳集団であるアドバンスソフトへの期待は大きい。

#### 参考文献

- [1] 赤間 誠, 石塚 弘道, “確率論的破壊力学を用いた新幹線車軸の健全性評価,” 日本機械学会論文集 A 編, Vol. 60, (1994), pp.46-51.

## シミュレーション技術への期待

伊藤 聡

独立行政法人 理化学研究所 計算科学研究機構 コーディネータ

日本の産業構造の空洞化が指摘されて久しい。かつて世界を制していたわが国の電機産業はその主役を台湾、韓国といったアジア諸国や米国に譲り渡した。主役の一人である米国も製造そのものからは撤退しているが、いち早く設計という製品開発の上流段階にリソースをシフトする方策をとっている。このため、大規模シミュレーション技術の導入は、国家安全保障の観点があるにせよ、極めて積極的であった。米国では複数の部門で重層的に研究開発が行われてきたが、このきっかけがわが国の地球シミュレータの登場による“Computonic shock”であったことは良く知られている。そのときのアメリカの論調に、ハードウェアで優位に立った日本はこれを生かしてソフトウェアでも優位に立ち、基礎研究のみならず産業界への波及を狙うことであろう、というものがあつた。これはその後の米国の政策に一致する。米国では国立研究所のリソースをいち早く産官学に開放して、最先端HPC技術の普及促進をはかるとともに、経済界では産業競争力懇談会(COC)がシミュレーション技術の重要性を指摘し、ロビー活動を展開してきた。

一方、わが国では、米国を驚かせた地球シミュレータが、当初の目的であつた全地球規模での温暖化シミュレーションを行い、その後、2007年にノーベル平和賞を受賞したIPCCの受賞講演でもこの地球シミュレータの貢献に言及している。また、産業界も比較的早い時期から地球シミュレータを利用してきた。自動車業界が従来よりも格段に大きい規模の格子を使って衝突解析を行った結果、実車を用いた衝突実験結果と定量的に一致する結果が得られたことは開発現場に大きなインパクトを与えた。さらに当時盛んに研究されていたわが国発の新物質“カーボンナノチューブ”に関する産学研究会

が立ち上がり、地球シミュレータによる大規模解析を推進した。地球シミュレータは巨大な並列ベクトル計算機であつたため、使いこなすのが難しかったが、これに対応するため、技術支援員をつける制度なども進み、最近では多くの企業が有償で各社それぞれの課題解決に利用するまでになっている。しかし、国内産業の空洞化は進む一方である。

産業界の空洞化という意味では米国は日本以上に相当以前から空洞化が進んでいる。むしろ彼らはグローバル化と称して、これを推進してきた感もある。製品やサービス、システムの企画・設計開発の上流段階は自分たちで行うが、その実装や製造を第三国に任せる方向である。わが国は産業の上流から下流まですべてを一貫して抱えることのできる先進国のひとつであつたため、大きな影響を受けているが、これはある意味ではチャンスでもある。地球シミュレータや東工大のTSUBAMEシステムのような大規模システムを使うことによって、必要な時に必要な分だけ使えるオンデマンド型シミュレーション環境の持つ高い利便性と経済性に産業界は気が付いた。その上、わが国の高速通信環境は世界最高レベルであり、かつ安価である。光LANが日本のように各家庭に普及している国はほかにはない。さらに今年度から開始される公的計算資源群の一元的サービス提供制度である革新的ハイパフォーマンスコンピューティングインフラ(HPCI)は産業界も利用可能であり、京をはじめとした世界最高水準の計算資源を日本の企業は利用することができる。手元のPCからペタフロップス級の計算資源を利用できる環境が整いつつある。これはまだアメリカも手の届かない、競争相手のいない領域である。あとはこれをどう生かし切るか？

シミュレーション技術は産業競争力強化に資

することは間違いないが、そのものには産業上の価値はない。ひとえにその活用方法にかかっている。名刀は誰にでも使いこなせるわけでもないし、逆に手を切ることにもなりかねない。幸い、わが国にはすでに大規模シミュレーションの経験を有する方々もいらっしゃる。経験者がリードして、産官学が一体となって、この大競争時代を勝ち抜くことを期待したいし、筆者もその一人としてスクラムに参加したいと思っている。

## シミュレーション技術への期待

犬島 喬

東海大学 電気電子工学科 教授

シミュレーション技術への期待と題するテーマを頂いたので、私の拙い経験を紹介することで、これからのシミュレーションに期待するメッセージといたします。

私が強誘電体の研究を始めたのは博士課程に進学した1975年で、所属が半導体の研究室であったので、半導体であり、かつ強誘電体でもあるV-VI-VII族を研究することにした。代表的なSBSIは大変良く研究されており、その結果を頼りにIをBrに置き換えたSbSBrの研究に的を絞った。大体の結晶構造(斜方晶系、単位胞に4分子)は分かっていたが、物性的特性はほとんど分かっていなかった。強誘電的相転移温度は高名なソ連の研究者から91K付近とも39Kとも報告されていたが、論文にはよく分からない曲線が1本引かれている程度で、実際はよく分からない状況であった。SbSBrの結晶成長の報告は少なく、しかも0.1mmの大きさを超える結晶作成の報告はなかった。後で分かったことであるが、安定に成長する温度範囲が極端に狭く、核生成が困難なためであった。夢中で実験を重ねていたら、電気炉が壊れて、その中にSbSBrのきらきら輝く直径5mmを超える結晶が5~6本ニョキニョキと成長していたのを覚えている。その後いくら試みてもこの大きさを超える結晶はできなかった。この大型の結晶をSbSBrと思い定めて、その相転移温度を正確に決定することから研究を始めた。

まず、強誘電的相転移温度を22.8Kと決定し、禁止帯幅を2.5eV、相転移に伴い、光学的遷移に複屈折の逆行が観測されることを報告した。さらにラマン散乱を用いた格子振動解析を行い、常誘電相で11本、強誘電相で23本の光学振動と、相転移に伴うソフトモードを見いだした。この見つけた値が正しいかどうかを検証するため、結晶構造を単純化して、単位胞に2分子が

あるとし、残りの2分子との間は弱いファンデアワールス力とする、格子振動計算を行った。このような簡素化を行っても力学定数が5個あり、行列の対角化には大変な時間が必要であった。しかも得られた結果と実験結果の間には誤差が多く、とても実験結果を再現する結果ではなかった。その後9Kまで冷却可能な4軸X線構造解析装置を新たに開発し、SbSBrの相転移に伴う結晶構造の変化を、格子定数、原子位置、温度因子を温度の関数として測定した。

結晶作成は個人的な技量に依存することが多く、私が得た物性値が作成した結晶性に依存する可能性も充分考えられた。しかし残念なことに、この強誘電性半導体SbSBrの特性は私の研究報告しかなく、私が報告した値の信憑性を確認する術がなかった。

数年前「戦略的基盤ソフトウェア開発プログラム」プロジェクトの存在を知り、そのプロジェクトから第一原理計算ソフトPHASEが公開され、私のような実験物理を仕事としているものにも使えそうな予感がした。そこで私の研究室に在籍の博士課程大学院生の太田氏にこのソフトを用いてSbSBrの第一原理計算をお願いした。計算手法は、CIAOを用いて作成された擬ポテンシャルのデータベースの中のS, Sb, Brのウルトラソフト擬ポテンシャルを用い、単位胞に4分子12原子、格子定数と原子位置を固定し、交換相関項はGGA-PBEでバンド構造とフォノン周波数を常誘電相、強誘電相において求めた。

フォノン周波数の計算では当然のことながら常温相で33本、強誘電相で33本の光学振動数をモードに分離して計算できた。その計算結果は素晴らしく、私が報告した振動数と数%の誤差内に収まった。さらに、この計算では振動モードに分類された原子の振動の様子が動画で見

ることができ、実験する者にとっては手に取るように格子振動を理解することができるようになっていた。まさしく別世界での理解であった。

バンド構造も当然計算ができた。温度の低下に伴う禁止帯幅の増加はもちろん、SbSBrの光学遷移が、間接遷移であること、さらに相転移に伴い、伝導帯の底が運動量空間のS点から-Y点に変わることを示していた。この結果は、私が報告していた、相転移に伴う複屈折の逆行を説明するもので、改めて第一原理計算の素晴らしさに驚かされた。もう他の研究者の実証実験報告を待つことなく、計算機が証明してくれる時代になっているのである。[1]

実験を主たる研究手段としている研究者は、興味深い実験結果を得たとき、まず再現実験を行うが、同じような結果が得られることは稀である。これは用いた試料の純度や作成方法、不純物の有無等、色々な要因が関係するため、実験結果は従って、ある程度の幅を持つ。極端な場合はその結果がまるで得られないことも多々ある。私がここ数年関わっているナイトライド半導体 InN の超伝導がその一例である。しかし研究は競争でもある。私も思いをめぐらし、興味深い実験結果が本来の結果であると信じて、論文を書いてきた。実験結果を信じなくては、研究は進まない。この興味深い実験結果は発表当時、さしたる評価を受けなかった。論理的説明ができなかったからである。が、その後の第一原理計算の進捗のおかげで、現在は私にとって大変有利な状況になってきている。これは実験からはどのような電子が超伝導に関与しているか、まるで分からなかったが、第一原理計算では InN の結晶構造を安定に保つには d 電子が必須であることを示す能力があり、この超伝導現象に寄与している電子として d 電子を特定できたことで、論理的説明が可能となってきているからである。[2]

実験を専門としていると、時に電子に色を付けて電子同士がどのように相互作用をしているか目で見てみたいと切に思うときがある。今後シミュレーション技術が進展し、色が付いた電

子の運動を追いかけることで、論理的に説明できない現象も、シミュレーションによって理解できる時代が来るのでは、と期待している。

## 参考文献

- [1] Y. Ota, T. Abe and T. Inushima, *Ferroelectrics* 414, 113 (2011).
- [2] T. Inushima, D. K. Maude, H. Lu, W. J. Schaff, T. Iizuka, S. Kimura, A. Yamamoto and K. Fukui, *J. Phys. Soc. Jpn* 81, 044704 (2012).

## インフルエンザウイルスゲノム配列の変化方向の予測

学振特別研究員 岩崎 裕貴\* 教授 和田 健之介\* 准教授 阿部 貴志\*\* 教授 池村 淑道\*

長浜バイオ大学 コンピュータバイオサイエンス学科\*

新潟大学 工学部情報工学科\*\*

### 1. ゲノムの大量データと自己組織化マップ

大規模計算はシミュレーションを中心課題とする傾向にあるが、バイオ分野においては実データが超大量化し、大規模計算が必須になって来た。ゲノム塩基配列の解読技術の革命的な進歩により、大量なゲノム配列が入手可能になっている。情報が大量化すればするほど、適確なモデルであれば、モデルの正当性を正確に検証可能になる。一方で、新規発見を発表する際に、大量データの一部を解析したのでは、「自分に都合の良いデータを選び出して、都合の良い物語を作り上げたのでは」との印象を与える。限定された範囲については全データを解析するとの立場はあるが、局所的な視点になり過ぎると、時代遅れの研究に見える。大量データに関して、特定の側面からであれ、全体像を把握できる技術、特に強力な可視化機能を備えた、新知識発見を支援する技術は、バイオ分野の新時代に相応しい研究と言える。

この視点に立ち、地球シミュレータを含む高性能計算機を用いて、連続塩基頻度に着目したBLSOM法（一括学習型自己組織化マップ）により、既知の全ゲノム配列を対象に、各生物種を特徴付ける genome signature（ゲノムサイン）を把握する研究を進めてきた。興味深いことに、生物系統の情報を一切与えなくても、4連や5連続塩基頻度パターンの類似度のみで、大半の1-kb程度の断片配列が生物系統別に分離（自己組織化）する。自然環境に存在する大量な難培養性微生物集団のメタゲノム研究において、生物系統推定の強力な方法を提供しており[1-2]、世界的に普及を始めている。

米国が国策としてNSFを中心に実施している「Cyber-enabled Discovery and Innovation (CDI)」プログラムの一環として2009年に開催されたNSF Workshopの主催者側のReportで、

「Biomedical/Ecological Research」の研究例として、われわれが地球シミュレータで行ったBLSOM解析の例を紹介している。主催者側が、NSF Workshop出席者ではないわれわれの研究例を紹介したことは、世界的に見ても時宜を得た新技術開発であることを示している。

### 2. インフルエンザウイルスゲノム配列の解析

今回は、実データ解析と進化シミュレーションとを統合化できる可能性の高い解析例、特に、過去データに基づくモデル化シミュレーションで得られた未来予測を、予測後の1年程度での得られる実データで検証可能な例を紹介する。具体的には、2009年4月からブタを起源として流行を開始した新型株を含む、全インフルエンザウイルスゲノム配列について、2~4連続塩基頻度のBLSOM解析を行った例である[3]。

#### 2.1. 新型株の流行初期の時点までに配列決定された全インフルエンザウイルス株の解析

図1のBLSOMでは、計算機に4連続塩基頻度のみを与えているのに、由来する宿主（ヒト、トリ、ブタ等）に基づきクラスター化（自己組織化）していた。ウイルスの増殖が、多数の宿主因子に依存していることを反映して、宿主別に異なった4連続塩基組成を持つと考えられる。興味深いことに、2009年4月からブタを起源として流行を開始した新型株（濃緑；矢印）は、従来からのヒト季節性流行株（薄緑）から離れて、トリ（赤）・ブタ（青）由来株の領域と近い距離にあった。ここでは示していないが、2連や3連続塩基頻度でも同様な結果を得ている[3]。

BLSOMは、この宿主に依存した自己組織化に寄与する4連続塩基を特定できる、強力な可視化機能を備えている。図1B-Dでは、3種類の4連続塩基の例について、高頻度領域をピンクで、

低頻度領域を緑で示した。新型株（矢印）が、ヒト季節性株よりもトリに近い性質を持っている事も示されている。

## 2.2. 新型株に見られる方法性のある変化

図2では、現時点で得られている全インフルエンザゲノム配列について、3連（図2A）と4連（図2B）塩基頻度を解析している。ブタ由来新型株（濃緑）の配列が急増して、独自の大きな領域を中央下部に形成している。これらのBLSOM上で2009年4月と12月に分離された新型株は、其々をAprilとDecemberの図中ではピンクで示した。両方の連続塩基頻度のBLSOMで、4月に分離された新型株の主要部分は、トリ株領域（赤）に近いのに対して、12月の分離株の多くはトリ株領域から離れて、主要部分はヒト季節性株（薄緑）に近づく傾向を示していた。図1B-Dで紹介したBLSOMの強力な可視化能を用いると、この方向性を生む主要因はGやCを多く含む連続塩基数を減らし、AやUを多く含む連続塩基数を増やしている傾向が見られたが、これ以外のより複雑な傾向も見えている[3]。

BLSOMで示されたこれらの傾向を基に、限定された側面からではあるが、変化方向の予測シミュレーションが可能になっている。興味深い事に、インフルエンザウイルスの配列変化が速く起こるため、予測結果と実データとの比較が、数カ月後には可能になる。インフルエンザの解析は、シミュレーションと実データの大規模解析を統合化した研究を可能にする、興味深い分野と言える。詳細は原著論文を参照されたい[3]。BLSOMプログラムは、UNTROD (y\_wada@nagahama-i-bio.ac.jp)が作成した。

## 参考文献

- [1] Abe, T., Kanaya, S., Kinouchi, M., et al. 2003, Informatics for unveiling hidden genome signatures. *Genome Res.*, 13, 693-702.
- [2] Abe, T., Sugawara, H., Kinouchi, M.,

Kanaya, S., and Ikemura, T. 2005, Novel phylogenetic studies of genomic sequence fragments derived from uncultured microbe mixtures in environmental and clinical samples. *DNA Res.*, 12, 281-290.

- [3] Yuki Iwasaki, Takashi Abe, Kennosuke Wada, Masae Itoh, and Toshimichi Ikemura, Prediction of directional changes of influenza A virus genome sequences with emphasis on pandemic H1N1/09 as a model case. *DNA Research*, 18, 125-136, 2011.

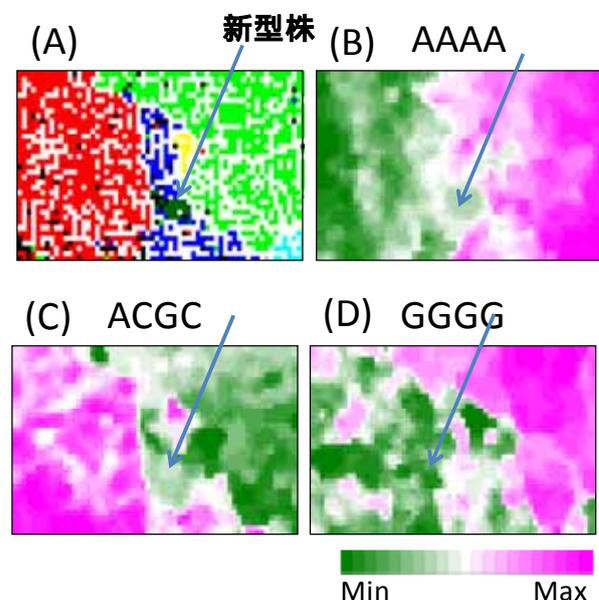


図1

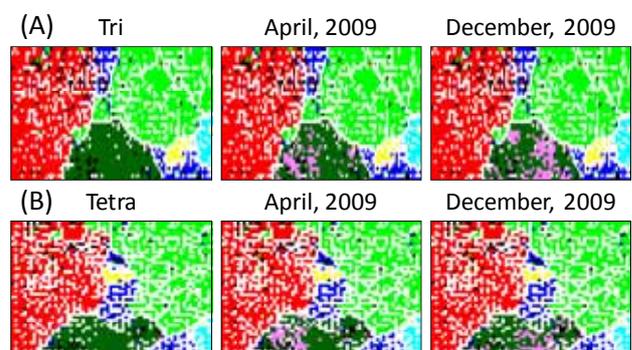


図2

技術情報誌アドバンスシミュレーションは、アドバンスソフト株式会社 ホームページのシミュレーション図書館から、【カラー版】がダウンロードできます。（ダウンロードしていただくには、アドバンス/シミュレーションフォーラム会員登録が必要です。）

## ポリマー電池技術からみたアドバンスソフトへの期待

上町 裕史

株式会社 ポリチオン 代表取締役

### 1. はじめに

株式会社 ポリチオンは、有機硫黄ポリマーの正極材料技術を基盤としたポリマーリチウム電池ビジネスを構築し、社会に貢献出来る新事業創成を目指している。弊社のポリマーを正極に活用すれば、従来正極に比べてリチウム電池の蓄電能力が数倍に向上し、従来と同じ蓄電能力ならば、1/2～1/5の軽量化を期待できる。

本稿では、最初にリチウム電池と弊社技術の概要を記す。次いで開発経過とシミュレーション技術との関わりを説明し、最後にアドバンスソフトへの期待を述べる。

### 2. 弊社技術概要

リチウムイオン電池の市場は拡大発展を続け、電気自動車電源への展開が期待されている。現在、リチウムイオン電池に用いられている正極活物質の蓄電量は、負極活物質である炭素の蓄電量より少ないため、正極活物質の高容量化が重要な課題となっている。硫黄系材料は蓄電量が多く、次世代材料として最も期待されている。

われわれは、硫黄系材料の中でも、安定性(安全性)電気伝導性において高いポテンシャルを有する新規有機硫黄ポリマーの開発を進め、その実用化を目指している。開発中の有機硫黄ポリマーは、ポリマー内のSS結合と共役系の酸化還元反応を充放電反応に利用するというコンセプトに基づいている。[1][2][3]

新規含硫黄ポリマーやモデルモノマーを正極に用いリチウム電池を試作したところ、放電容量が約260～500mAh/gを示し、繰り返し電池反応が可能であることを確認している。

### 3. シミュレーション技術との関わり

弊社は Advance/PHASE と Advance/CIAO のユーザーである。もともと材料設計や物性解

釈には、Gaussian や Spartan 等の分子軌道法計算ソフトを利用していた。これらの分子軌道法計算ソフトに加えて PHASE、CIAO を導入したのは、有機硫黄ポリマーのバンド構造理解や分光実験解析を目的としたからである。

実実験においてポリマー構造確定が不十分であり、第一原理バンド計算が十分に活用できてはいない中、幾つかの興味深い物性が得られている。例えば、機硫黄ポリマーの導電性発現(約10<sup>-3</sup>S/cm)を確認している。XPS 実験では、SS へテロ環構造の硫黄部位で酸化還元反応に伴う価数変化が生じている事が確認できている。モデルモノマー(新規硫黄ポリマーの単位構造)のX線結晶解析では、SS へテロ環がほぼ平面構造であり、隣り合った環同士が同一平面で揃うような構造であることがわかってきた。これらの実実験結果をふまえ、バンド計算を行い、実実験解析に取り組んでいる。

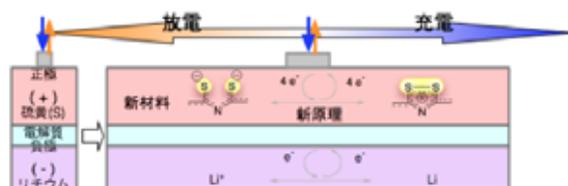


図1 新規硫黄ポリマーの電池反応機構

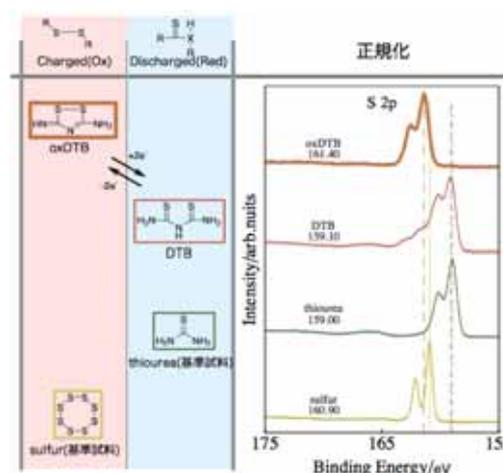


図2 モデルモノマーのXPS 実験例

#### 4. アドバンスソフトへの期待

化学屋にとって分子軌道法計算ソフトはなじみ深いものとなってきた。Gaussian、Spartan等の有償ソフトはそれなりの対価を支払えば容易に入手可能で、運用情報も一昔前に比べれば豊富である。Gamess等の無償ソフトの選択肢もある。もちろん Advance/BioStationも候補の1つとなっている。

一方、第一原理バンド計算ソフトは敷居が高い上に価格も高い、おまけに海外製ソフトがほとんどで、ソフト導入時やその後の運用を考えると、敷居はさらに高くなる。それらと比較するとアドバンスソフトの Advance/PHASEは、純国産でコストパフォーマンスに優れている。今後も開発を継続し競合他社に優る機能を付加してもらいたい。

最後に、ユーザーではないもののアドバンスソフトの取組みに期待している事例を記す。それは、材料設計統合システムと2次電池CADシステムである。弊社自体が新規分子(のユニット)創成・新規ポリマー創成・新規電池創成を行っているので、アトム・ナノ・バルク(さらにはデバイス)の多層構造を統合する材料設計システムには非常に興味がある。将来的にできればPHASEとのシムレスな統合も期待している。一方、電池材料開発を行っている弊社としては、PHASEによる材料データベースが利用可能との2次電池CADシステムにも非常に興味がある。新規材料としてポリマー材料(の電子構造・化学構造・バルクモフォロジー等)を反映させた電池シミュレーションが出来うるのなら非常におもしろいソフトとなるのではと期待している。さらに電池反応シミュレータにとどまらず、CVやEIS等の電気化学測定法やその物理化学の理解まで包括するアプリケーションへの発展を期待している。

#### 参考文献

- [1] Uemachi, H., Iwasa, Y., Mitani, T.  
Chemistry Letters 2000, 29, 946.  
[2] Uemachi, H., Iwasa, Y., Mitani, T.

Electrochimica Acta 2001, 46, 2305.

- [3] 上町裕史, 劉喜雲, 糸野哲哉, 藤原明比古,  
第51回電池討論会要旨集, 2011, 3A02.

技術情報誌アドバンスシミュレーションは、アドバンスソフト株式会社 ホームページのシミュレーション図書館から、【カラー版】がダウンロードできます。(ダウンロードしていただくには、アドバンス/シミュレーションフォーラム会員登録が必要です。)

# シミュレーション技術への期待

大島 伸行

北海道大学

## 1. はじめに

近年、地球環境問題への関心が高まっており、とりわけCO<sub>2</sub>排出の問題は、その重大な結果の1つとされる地球温暖化問題に限定されるものではなく、人間の社会活動=エネルギー消費が、生物界の炭素循環システムに擾乱を与える規模に達したことを示す指標とも考えられる。よって、21世紀の大きなトレンドとしては、エネルギー消費の増加を抑えつつ、石油に代表される炭素循環システムによらない技術へのパラダイムシフトが求められる。同様に高度医療・遺伝子技術やグローバルネットワークなどに関する問題にもまた、社会に大きなインパクトを与えるパラダイムシフトが予感される。

社会ニーズにこたえることが工学の本質と考えるとき、「京」コンピューティングや次世代「EXA」におけるシミュレーションの将来もその方向にあらう。以下に、最近の工学シミュレーションの研究動向と社会ニーズに照らした将来への期待をいくつか挙げてみたい。

## 2. 乱流・音・流体振動

エンジン効率や車両抵抗などの例を挙げるまでもなく、エネルギーの効率利用の観点から「乱流の制御」は常に重要な課題であった。厳しい社会ニーズの淘汰のもとでエネルギー技術に対してはさらに臨界に近い制御を求めるとき、安全性や環境保全とのトレードオフを生じる。例えば、原子炉の混相流設計、希薄燃焼の制御、車両空力などの諸問題に共通する問題として、乱流の非定常な挙動の予測が上げられよう。これに対してラージ・エディ・シミュレーションの実用化研究が盛んに行われている[1]。

一例として「京」コンピューティング「ものづくり」分野にも取り上げられている乗用車空力安定性の非定常シミュレーション[2,3]では、

従来設計における風洞試験や走行試験では実測困難な車両安全性や快適性に関わる現象 - 流体音・流体振動など - の予測解析に成果を挙げつつある。これを流体シミュレーションの技術としてみると、これまで並列して議論されることが多かった「非圧縮性流れ」と「圧縮性流れ」のいずれでもない成果を求めている。このほかにも反応や相変化を伴う問題などでは既に基盤的研究も進みつつあり、両者理論・技術の積極的な交流にブレークスルーが期待される。

## 3. 界面と粒子

実際の社会ニーズにこたえようとするとき、解くべき現象は必ずしも単純ではない。問題解決に際して、これを単に個々の要素技術に専門化するだけでなく、複雑系として全体システムを捕らえることも必要とされる。そこで、流体シミュレーションにおいてはマルチスケールの考え方が盛んに議論されており、それを代表するものが界面と粒子のモデルといえる。

これらを扱うシミュレーション技術として、界面に対してはレベルセット法[4]に基づく方法が、粒子に対しては質点近似に基づくラグランジェ的方法[5]が共通のアプローチとして工学的にも広く応用されており、これらはいずれも界面や粒子に対してマクロ観点からの定式を与えている。

一方、界面や粒子として認識されるものは、複数の流体の不均一な混合を生じる何らかのメカニズムを内在しており、それによって、均一な物質には見られなかった新たな物理を生じている。ここで、界面や粒子が形成されるメカニズムの具体的な内容を知るには、基礎となる物質・物性の第一原理に基づきミクロ観点に立ちいった議論が必須となる。あるものは連続体近似(ナビエ・ストークス)の範疇で扱われ、あ

るいは分子・原子の理論に遡る必要もある。

例えば、気液界面は一般に連続体近似の限界に近いナノオーダーの厚みをもつとされ、その形成には分子動力学シミュレーションが理論的かつ有用な知見をもたらしている。また、界面の形成に関しての統計力学的な定式には界面自由エネルギーの評価に基づく phase field 法が固体結晶界面など界面物理一般に広く成功を収め[6]、数学的にも大きな関心[7]が払われており、流体シミュレーションでも臨界点近傍の流体现象[8]や火災モデルなどへの適用が試みられている[9]。これらのマクロ・ミクロ両者の理論と技術の融合がこの分野へのブレークスルーを期待させる。

#### 4. 材料・化学と流体力学

燃焼器や化学装置などを例にとるまでもなく流体シミュレーションの理論や技術の多くは物質材料や化学工学の分野との密接な関連性をもってきたが、どちらかといえば物質の物性を直接扱うよりも乱流や混相流など力学の一般原理を追求する方向に多くの関心を向けてきたといえる。先端医療や生体科学の分野では既にそのような学際的な先駆け研究に関心が集まりつつあるが、エネルギー分野においても、特に、水素インフラを含む燃料電池技術など[10]において材料・化学と熱流体力学のコラボレーションが注目される。これらの問題では、量子論に基づく固体表面のナノレベルの現象から、マクロレベルの機械設計にいたる広範囲の知見の融合を必要とし、それらを繋ぐメソスケール・メカニズムの理解がこの分野の鍵となろう。なかでも技術伝達が比較的容易で分野の垣根を越えやすいであろう「シミュレーション」にそれらの橋渡し役が期待される。

#### 5. 人とシミュレーション

シミュレーションの本質的な目的を考えるとナビゲーションのように人の思考や判断を「助ける」ことであり、あるいは結果としては感情や感性に「訴える」ことにもなる。いずれに

してもシミュレーションの最終的な対象は「人」であるといえる。近年の IT 化とグローバルネットワークの急速な展開のもとでは、シミュレーションの内容・結果がどのように表現され配信されるかによって、その情報にアクセスする人数が数人から数十億人にまで拡大しうる。工学シミュレーションも社会的ニーズにこたえようとするならば、好むと好まざるにかかわらず、シミュレーション内容・結果だけでなく、アクセスする人への伝達手段にも関心を向けざるを得ない。これらは、CFD が計算力学の学術シーズから CAE (Computer-aided Engineering) の工学ニーズへの視点の展開であり、具体的には PSE (Problem Solving Environment) の一環として議論されよう[11]。

バーチャルリアリティや 3 次元 CG 技術などと流体シミュレーションを融合する試み[12]は様々に試行されているが、少数の専門化を対象とする限りにおいてその応用はいまだ限定的なものと思われる。この分野の展開は、ゲーム機用グラフィックボードやグローバルネットワークの発展とともに、むしろ、ゲームや PDA ソフトなどのエンターテイメントで先行するものと思われる。これらの融合技術として、グラフィックボード並列スーパーパソコンでの高速計算や iPod などの PDA 機でのインタラクティブシミュレーション[13]などに将来性を期待させる。

#### 6. まとめ

社会ニーズへの貢献の観点から、流体シミュレーション研究に寄せる期待を思いつくままに上げてみた。「京」コンピューティング研究シーズの多くがそれらの実現に向かっていることに、「シミュレーション」が工学の一分野として確立しつつあるものと心強く思う。今後は、その成果が理工学、社会ニーズへ広く開かれていくことを祈る。

#### 参考文献

- [1] 大島伸行, 応用物理 74(8), pp.1087-1091

- [2] Tsubokura, M., et.al., SAE Transactions  
Journal of Passenger Cars : Mechanical  
Systems Section 6, pp. 40-49, 2007
- [3] Tsubokura, M., et.al., Computers &  
Fluids 38(5), pp.981-990, 2009
- [4] Osher, Stanley J.; Fedkiw, Ronald P.  
Level Set Methods and Dynamic Implicit  
Surfaces. Springer-Verlag. , 2002
- [5] K.Kamemoto, K., Miyasaka, T., World  
Scientific, pp.133-145, 2000
- [6] Mohri T., Statistical Thermodynamics  
and Model Calculations in Alloy Physics  
(ed. W. Pfeiler), WILEY-VCH, pp.525-588,  
2007
- [7] Giga Y., Chen, Y., “ Ugoku Kaimen wo  
Oikakete ” , Noppon-Hyoron-Sha, 1996
- [8] Takada, N. and Tomiyama, A., JSME Int.  
J. B 49(3), pp.636-644, 2006
- [9] 稲毛, 安倍, 室田, 燃烧学会誌 52(159),  
2009
- [10] Fuel Cell and Hydrogen Technologies,  
Outline of NEDO 2008-2009,  
<http://www.nedo.go.jp/>, 2009
- [11] Miyachi,H., et.al., Proc. 1st Intern'l Conf.  
e-Science and Grid Computing, pp. 530 -  
535 , 2005
- [12] Yamazaki, T., et.al., Proc. 23rd  
Symposium Computational Fluid  
Dynamics, C7-4, 2009
- [13] AQUA FORET, Prometech software,  
2009, <http://www.prometech.co.jp/>

## シミュレーション技術への期待

大島 まり

東京大学 大学院 情報学環・生産技術研究所

## 1. まえがき

日本人の三大死因である心疾患や脳血管障害の循環器系疾患は、動脈硬化症や脳動脈瘤などの血管病変によって引き起こされることが知られている。これらの血液病変では、血流の血管内皮細胞や組織に与える力学的作用が発症・進展に関与していると考えられている[1,2]。しかし、血管網は動脈から毛細血管にわたるマルチスケールな階層構造をなし、かつ細胞の生理学的な機能変化等を伴うマルチフィジックスな現象のため、生体内計測は困難であり、その定量的解明には数値解析が有力である。

著書らは、脳動脈瘤や動脈硬化症などの血管病変を対象としたマルチスケール・マルチフィジックス シミュレーション システム “M-SPhyR (Multi-Scale and Physics Simulator) Circulation” を開発している。M-SPhyR は CT や MRI 等の医用画像を用いた患者個別のモデリングと物質輸送を含む大規模なマルチスケール血流解析および血流と血管壁の相互作用を考慮したマルチフィジックス解析の3つのプログラムから構成されている。さらに、これら3つのプログラムはモジュールにより結合しており、連成することによりマルチスケールかつマルチフィジックス解析を実現している。

## 2. M-SPhyR Circulation

M-SPhyR Circulation はマルチスケール・マルチフィジックスの観点により、血管病変を解明することを目指したソフトウェアである。図1に示されているように、主に以下の3つの主要コードから構成されている。

- 1) MC-Modeling: 血管モデリングツール
- 2) MC-BFlow: マルチスケール血流解析
- 3) MC-DIAS (Dynamic Interaction Analysis System): 流体構造連成解析

また、Add-in モジュールとして次の機構を組み込むことにより、マルチスケールおよびフィジックスに対応できるように設計している。

- ・末梢血管網を考慮した1次元・0次元血流解析モジュール
- ・血管内腔内の物質輸送解析モジュール
- ・血管壁内の物質輸送解析モジュール

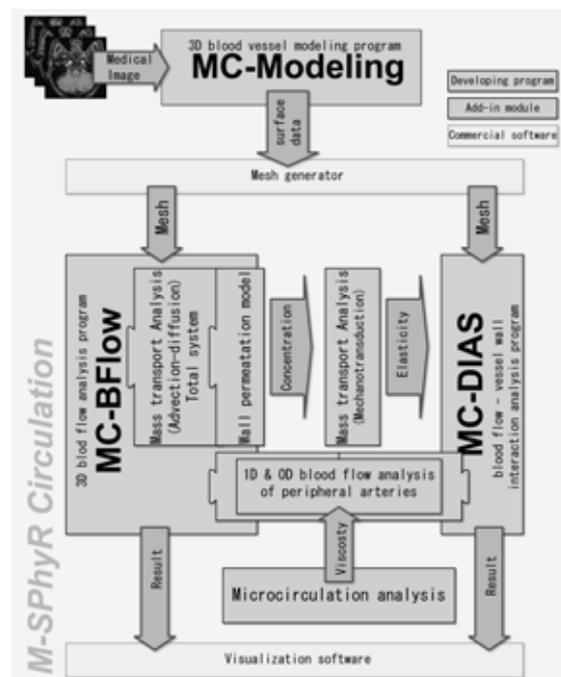


図1 M-SphyR Circulation System の概要

## 3. Image-Based Modeling and Simulation

## 3.1. 概要

脳血管内の血流シミュレーションに関する研究は、医用画像から再構築した現実に近い形状モデルを用いる Image-based modeling and simulation が主流になりつつある[3]。血管形状モデリングは、血管内部領域を抽出する領域分割過程と、抽出された血管データを3次元的に積層し表面形状を構築する3次元表面構築過程の2つに大分され、いくつかの手法が提案されている。本報では、図2にまとめた手順により

モデリングを行っている。

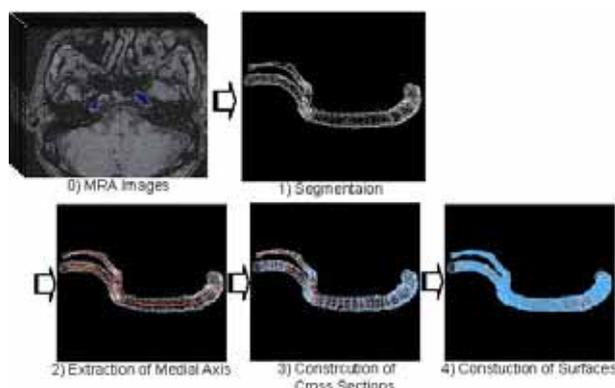


図2 3次元形状モデリング

マルチスケール大規模血流解析については、有限体積法をベースとした血流の大規模解析プログラム MC-BFlow を用いて解析を行っている。基礎方程式はニュートン性の非圧縮性流体と仮定することができるため、連続の式と Navier-Stokes 方程式である。また、血管内腔内の物質輸送解析モジュールも MC-Bflow に組み込まれており、移流拡散方程式により物質の濃度分布を得る。これらの支配方程式はエッジベースの有限体積法により離散化され、有限体積界面における物理量の補間には、界面両側の有限体積における物理量を有限体積重心と界面重心との距離によって重み付け平均した値を用いた。時間進行法には Crank Nicolson 法、運動量と圧力のカップリングには SMAC 法を用いた。圧力の Poisson 方程式の解法には不完全コレスキ分解付共役勾配 (ICCG) 法を、それ以外の行列式の解法には安定化双共役勾配 (BiCGSTAB) 法を用いた。

マルチフィジックスを考慮に入れた流体構造連成解析 MC-DIAS については、有限要素法により ALE (Arbitrary Lagrangian Eulerian) 法を用いて強連成により解いている。流体は非圧縮性流体と仮定し、構造の材料特性は弾性体あるいは超弾性体として解析を行う。解析には六面体要素を用いている。流体解析では速度 1 次および圧力 0 次の内挿関数、構造解析では変位 1 次および圧力 0 次の内挿関数を用いて近似し

ている。連成は強連成解析を行っており、行列解法には GMRES を用いている。

### 3.2. 末梢血管網を考慮した 1 次元・0 次元解析

動脈系の血管網は、動脈、小動脈、細動脈、毛細血管とさまざまなスケールの血管から構成されている。分解能の限界から医用画像では一部の血管しか得ることができず、比較的太い動脈以降の下流には医用画像で解像することのできない細い血管が存在する。これらの血管は末梢血管と呼ばれ、上流部での血圧・血流量の調節の役割を担っている。大規模な血流解析を行う際には、医用画像で得られる部分だけでなく、末梢血管を含めた循環系全体の影響を考慮する必要がある。

本研究では、末梢血管網をその形状の規則性や解剖学的知見に則って構築し、血管径に応じて 1 次元血流解析と 0 次元モデルを組み合わせる手法を用いたマルチスケールな流境界条件の数理モデル化を行った。本手法により導出された境界条件は MC-Modeling によりモデル化された患者個別モデルに対して MC-Bflow を用いる大規模 3 次元血流解析の境界条件として与えられる。図 3 にマルチスケール大規模流体解析の概要をまとめる。

### 3.3. 血管壁内の物質輸送解析

本研究では Prosi ら [4] による multi-layer モデルをもとに、流体解析、物質輸送解析、および血流が血管壁に及ぼす壁面せん断応力の影響を考慮した壁内への物質透過モデルを組み合わせた解析アルゴリズムの構築を行った。その概要を図 4 に示す。

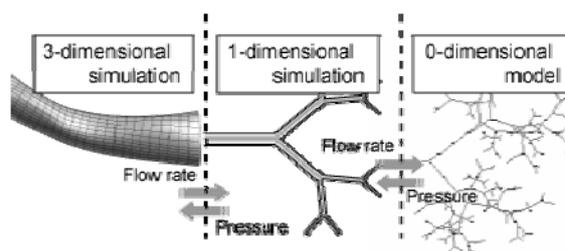


図3 マルチスケール流境界条件の概要

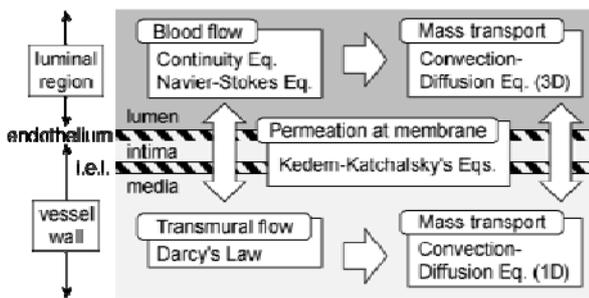


図4 マルチレイヤー血管壁モデル

### 3.4. 解析結果

マルチスケールの境界条件を用いた中大脳動脈瘤の血流と血管壁の相互作用を考慮した解析と総頸動脈における血流と濃度輸送の連成解析の2つの解析結果を示す。

解析対象は脳動脈瘤を有する59歳女性の中大脳動脈分岐部とし、CT画像より血管形状を再構築した。境界条件として、入口にはWomersley速度分布による脈動流速を固定境界条件として与え、出口には流量と同位相で変化する圧力を応力の自然境界条件として与えた。入口で与えた流速は20代男性の頸動脈で超音波計測により計測した流速波形に基づいて算出した。

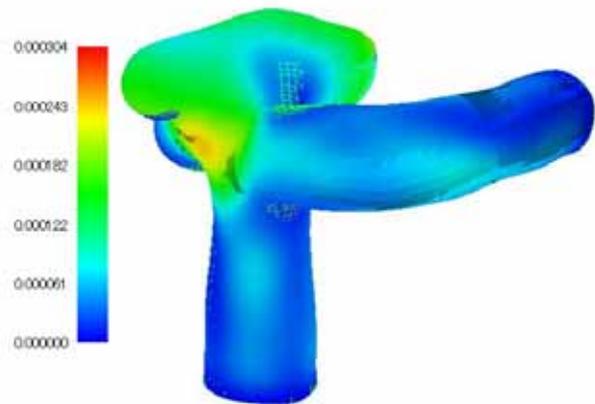
血圧の変化を境界条件として与えた構造解析のみの場合と流体構造連成解析を行った場合の変位の比較を図5(a), (b)に示す。

血管の径に対して変位の割合を比較すると、構造解析の場合には7%であり、流体構造連成解析の場合には10%である。流体構造連成解析では、血管壁での圧力の変化において血圧の変化とともに流体の動圧変化を加味しているため、変位が大きくなっている。

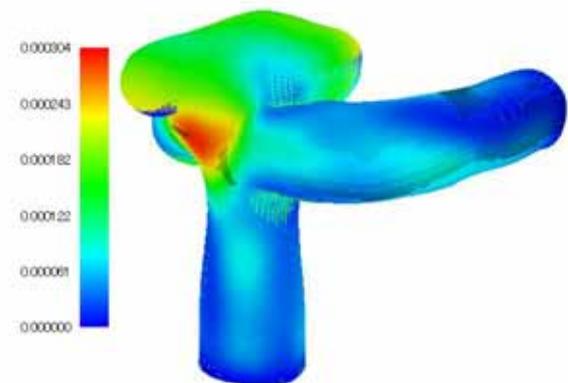
次に、血流濃度輸送の解析について示す。解析対象は66歳男性の左総頸動脈(CCA)の内頸動脈(ICA)・外頸動脈(ECA)への分岐部である。対象とする血管形状は169枚のCT画像(サイズ512×512 pixel, 解像度0.468 mm/pixel, スライス間隔0.5 mm)より3次元再構築した。

壁内への物質透過は拍動などの過渡的な現象と比較して長期的な現象であることから流れ場

は定常であると仮定した。流入境界では平均流速0.375m/s ( $Re=534$ , 拍動ピーク時)のPoiseuille分布、濃度一定とし、流出境界では自由流出とした。壁面境界はno-slipの剛体壁とし、壁面モデルとの接続を行った。また、輸送される物質としてLDLと沈着部位の一致が観測されている(123アルブミンを用いた)。



(a) 構造解析



(b) 流体構造連成解析

図5 変位に関する解析結果

図6に本手法によって得られる内壁部でのアルブミンの濃度分布を示す。ここで、物質透過には血流解析によって得られる壁面せん断応力の影響を反映し、壁面応力依存性を導入している。壁面せん断応力が1Paまでの領域では透過量は壁面せん断応力が大きくなると増加し、それ以上の値の領域では逆に減少するという透過係数の影響が如実に表れていることを示している。透過量の大きい領域は動脈硬化症の好発部位とよく一致しており、病変初期の物質透過に

壁面せん断応力が深く関わっていることが解析結果からも確認された。

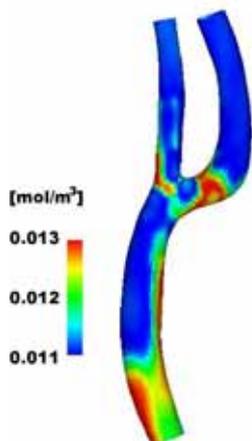


図6 濃度分布

#### 4. むすび

血管病変の計算バイオメカニクスマルチスケール・マルチフィジックス シミュレーションシステム M-SphyRにおける数値解析手法を紹介した。

血管病変の発症や進行のメカニズムを解明するためには、血管内を流れる血液の流動構造や濃度分布、およびそれらが血管壁に及ぼす影響を把握する必要がある。本シミュレーションシステムにより、脳血管内で発生している血行動態および血流による血管壁の挙動などを定性的ではあるが、把握することが可能となった。今後はより高度な生理学的な反応モデルを導入すること、本システムをプラットフォームとして患者個別に対応できるようにシステムを構築していくことが可能と考えられる。

#### 謝辞

本研究は文部科学省 IT プログラム「革新的基盤ソフトウェアの開発」の補助により、行われた。

#### 参考文献

[1] Traub, O. and Berk, B. C., Arterioscler Thromb Vasc Biol. Vol. 18, pp.677-685, 1998.

[2] Davies, P.F., PhysiolRev, Vol. 75, pp.519-560, 1995.

[3] 大島まり, 他, 日本機械学会論文集, Vol. A-70, pp.1240-1246, 2004.

[4] Prosi, M., et al., J. Biomechanics, vol.38 pp.903-917, 2005.

技術情報誌アドバンスシミュレーションは、アドバンスソフト株式会社 ホームページのシミュレーション図書館から、【カラー版】がダウンロードできます。(ダウンロードしていただくには、アドバンス/シミュレーションフォーラム会員登録が必要です。)

## シミュレーション技術への期待

大脇 創

日産自動車株式会社 総合研究所

昨今の第一原理計算、量子化学計算の発展は、その計算モデルサイズの大規模化に象徴される。シミュレーションの信頼性を高める方策としての計算モデルサイズの拡張は、ハードとソフトの両面の進化を通じて常に追究されてきた。ソフトの面に注目すると、第一原理計算では主に $O(N)$ 法[1]、量子化学計算の分野では Fragment Molecular Orbital (FMO) 法[2]がそれぞれの領域での発展を力強く牽引してきたことは、ここに記すまでもない。5~10年前までは、それら大規模計算に特化した手法は、アカデミアの一部の研究グループで開発されたプログラムでその有効性が実証されてきた。しかし最近では、 $O(N)$ 法や FMO 法を基盤にした商用ソフトが普通に市場に広がって一般的になりつつある。第一原理計算や量子化学計算の分野における時代の流れと進化が強く感じられる。さらに、次世代スパコンプロジェクトでは、それら大規模計算に特化して開発された手法が、数千~数万原子オーダーというかつてない規模の計算に適用されようとしている。

私自身も第一原理計算に基づいた研究業務に携わっている者の1人で、自身の業務では、シミュレーションの信頼性を高める目的で計算モデルサイズの拡張を図る努力を続けている。しかしながら、シミュレーションで得られる情報量や有意な結果の数は、モデルサイズに比例して単純に増加してくれる訳ではないのが現実である。シミュレーション結果として得られた現象の機構を詳細に検討することが、モデルの規模に比例して困難になることが大規模計算の最大の難点であり、掛けたコストの割にはシミュレーション実行後の研究の発展性も乏しくなりがちである。これは、民間企業の研究者が大規模計算を材料研究・開発の技術として導入しようとする際の大きな障壁になっているとも言え、

私自身も常に悩むポイントである。

では、大規模シミュレーションの価値や得られる情報量は如何にして高められるのか？つまり、単に“やっただけ”で終わってしまう大規模シミュレーションにならないためにはどうすれば良いのか？それには、いったん、大規模シミュレーションを忘れて、そのモデル系を構成する分子や固体、表面(原系)に立ち戻ることではないだろうか？つまり、原系が元々有している電子状態と、シミュレートされた現象との対応性が解析できること(そのような解析手法なり解析支援ツールが開発されること)が必要だと私は考える。

このような、いわば「原系が現象を方向付ける」というスタンスの研究として私が思い出す一例は、有機量子化学の領域で、カルボニル基などの $\pi$ 軌道面に対する還元反応の面選択性を、 $\pi$ 軌道の空間的広がりの定量的評価から見事に説明した Exterior Frontier Orbital Extension (EFOE) モデル[3]である。この $\pi$ 軌道面に対する還元反応の面選択性の問題については、ターゲット分子と還元剤分子との相互作用から定性的に説明を試みたモデルが他に幾つもあったが[3]、EFOE モデルは原系(ターゲット分子)の有する状態に着目することにより、より本質的なレベルから面選択性の問題を解き明かした。

EFOE モデルは、「原系が現象を方向付ける」というスタンスでの研究の一例であるが、もちろん、個々の分子や固体、表面がある条件下で相互作用した上で反応が起こる限りは、そのような原系の理解だけで全てが語り尽くせる訳ではないことは確かである。しかし、原系の固有の電子状態が実際にどのように現象を方向付けているかを積極的に検討すること、あるいはそういった精神に基づいて解析手法が開発されて

いる例はあいにく見受けられない。シミュレーションから得られる情報量と価値を高め、さらには以後の材料設計に結びつく可能性を広げるためにも、そのような手法やツールの開発が必要だと考えられる。

モデル系を構成する原系と現象との相関性の解析をより積極的に支援する機能が、大規模系に特化した第一原理計算を含む統合ソフトに組み込まれたら、それは一つ一つの大規模シミュレーションの価値をより高めることに繋がる。特に、コストについて常にシビアな対応が求められる民間企業の研究・開発現場にとって、材料開発ツールとして大規模シミュレーションを導入し易くなるのではないだろうか？

アドバンスソフト社が創立 10 周年の節目を迎えるに当たり、私の中にある「シミュレーション技術への期待」をせんえつながらここに述べさせていただいた次第である。

#### 参考文献

- [1] 各種  $O(N)$  法についての情報が集約されている文献として、例えば以下の論文が挙げられる ; T. Ozaki, Phys. Rev. B 74, 245101 (2006).
- [2] FMO 法については、例えば次の論文を参照されたい ; T. Nakano, T. Kaminuma, T. Sato, K. Fukuzawa, Y. Akiyama, M. Uebayasi, and K. Kitaura, Chem. Phys. Lett., 351, 475 (2002).
- [3]  $\pi$  軌道面の還元反応における面選択性の問題の総説および EFOE モデルの解説 : S. Tomoda, Chem. Rev., 99, 1243 (1999).

# シミュレーション技術への期待

独立行政法人 海洋研究開発機構

地球シミュレータセンター

## 1. シミュレーションと地球科学

シミュレーションが第3の科学と呼ばれ、実験/観測と理論の間を補間するものと考えられるようになって久しい[1]。弊機構が取り組んでいる海洋を中心とした地球科学分野の研究においても、シミュレーションは重要な役割を果たしている。

そもそも地球科学で対象となるのは大気や海洋、あるいは大地といった、極めて身近なものである。しかし、その空間的サイズは数万キロメートルに及び、海洋深層水や海洋プレート活動などは数千年から万年、億年で漸く論じ得るものである。そのため、現在に至るまでに獲得された観測データは、残念ながら時空間的にごく限られたものと言わざるを得ない。限られた観測データからでも研究者達は理論（モデル）を構築してきたが、本来の長大な時空間スケールと多種多様なパラメータゆえに、現実世界での実験で理論を検証することは、ごく一部の例外を除いて困難といえる。

そこで、数値計算によって現実世界を『模擬』するシミュレーションが重要となる。シミュレーションを行うことで理論の正当性の検証や、より高精度な理論の確立、異常気象の検証や防災に役立つデータの提供、今後の地球環境の変動予測などが可能となる。まさに冒頭で述べたように、地球科学分野では「実験/観測と理論の間を補間するもの」としてシミュレーションは機能している。

## 2. シミュレーション技術の発展

地球科学分野におけるシミュレーションの重要性は前述した通りであるが、それゆえにシミュレーション技術の発展は地球科学分野研究の発展にも大きく寄与する。

例えば2002年3月に公開された弊機構の地

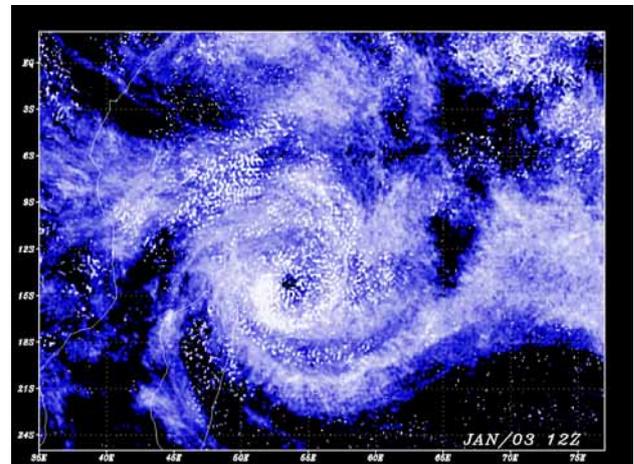


図1 地球シミュレータで実行された大気大循環モデル AFES でのサイクロン

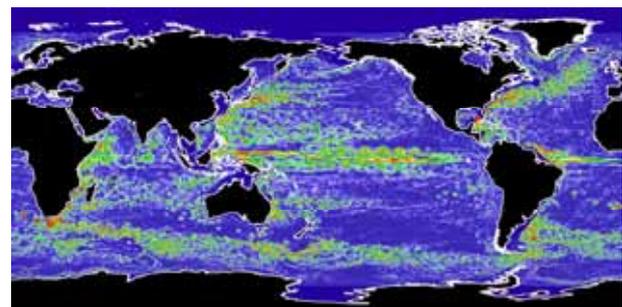


図2 地球シミュレータで実行された海洋大循環モデル OFES での海流の再現

球シミュレータ[2]は、同年スーパーコンピュータの世界ランキング Top 500 で1位を取得してハードウェア技術の進歩を示した上で、大気大循環や海流予測、地震メカニズムの解明等の様々な研究で活用された（研究事例：図1、図2）。これらの地球シミュレータでの研究成果をTV番組や書籍[3]でご覧になった読者もおられるだろう。気候変動に関する政府間パネル（IPCC）でも地球シミュレータは活用されており、その計算結果は2007年に公開された第4次評価報告書で用いられた。この後、IPCCがノーベル平和賞を受賞した[4]ことは読者もご記憶かと思う。これはシミュレーション技術の

発達が計算科学を発展させるだけでなく、人類社会に貢献できることを示した好例といえる。

このようにシミュレーションが重要な役割を果たす地球科学分野では、計算機の性能向上に関する研究者からの要望が絶えない。

そこで弊機構では現在、最新の計算機を活用した地球科学分野の研究として、HPCI 戦略プログラムの分野 3「防災・減災に資する地球変動予測」[5]を戦略機関として実施している。これは、理化学研究所と富士通株式会社が 2012 年 6 月現在、開発しているスーパーコンピュータ「京」を活用するもので、分野 3 では「地球温暖化時の台風の動向の全球的予測と集中豪雨の予測実証、および次世代型地震ハザードマップの基盤構築と津波警報の高精度化」をテーマに研究を進めている。さらに「京」の次の世代のスーパーコンピュータの活用を視野に入れた地球科学分野研究の議論も既に始まっている。これらの強力な計算機の利用により、地球科学分野の研究が格段に進展することが期待される。

### 3. 地球科学分野以外での利用

シミュレーション技術は、当然ながら地球科学以外の分野、例えば多種多様な産業分野においても活用されている。

先述の地球シミュレータでも産業利用は推進されており、過去には自動車工業会との共同研究などが行われ、現在は公開型・非公開型両方の産業利用枠が提供されている。これらの事業では、アドバンスソフト株式会社殿などの ASP 事業を実施されている企業との連携も図られている。

前述の「京」でも産業利用枠が用意されていることから、今後も高度なシミュレーション技術を活用した産業利用の展開が期待される。

### 4. 総合的なシミュレーション技術の発達

計算機の性能向上は確かに地球科学を含めた計算科学に進歩をもたらすが、それだけが計算科学の発展に寄与する訳ではない。むしろ今後は「京」に代表される超高並列計算機の活用

不可欠な並列アルゴリズムの開発や、巨大なデータのハンドリング技術なども重要になると思われる。例えば数十万コア～百万コアによる超並列計算でも高いスケーラビリティを示すアルゴリズムや、数十テラバイト以上のデータの可視化技術である。これらの技術により、高速計算による研究の迅速な進展や、極めて大量のデータからの注目すべき事象の抽出・解析が可能になる。

ソフトウェアとハードウェアはしばしば車の両輪と例えられるが、今後は計算機（ハードウェア）だけでなく、上記のようにシミュレーションコードや可視化ソフトウェア、OS 等を含めたソフトウェア全般の進歩も伴った、総合的なシミュレーション技術の発達が必要となるだろう。

### 5. おわりに

本稿では、地球科学分野からみたシミュレーション技術との関連を中心に述べてきた。地球科学での位置付けからも分かるように、地球科学を含む計算科学に貢献するためには、シミュレーション技術は実用的な技術でなくてはならない。地球シミュレータセンターでは、地球科学、ひいては計算科学の発展に寄与できるよう、今後も総合的かつ実用的なシミュレーション技術の研究開発に邁進する所存である。そのためにも、この度、10 周年を迎えられたアドバンスソフト株式会社殿には今後一層のご尽力、ご協力をお願いしたい。

### 参考文献

- [1] Stephen Wolfram, "A New Kind of Science", Wolfram Media Inc., (2002)
- [2] 地球シミュレータ Web ページ,  
<http://www.jamstec.go.jp/es/jp/index.html>
- [3] 江守 正多 (著), NHK「気候大異変」取材班 (著), 「NHK スペシャル 気候大異変 地球シミュレータの警告」, 日本放送出版協会, (2006/11)
- [4] 2007 年ノーベル平和賞,

[http://www.nobelprize.org/nobel\\_prizes/peace/laureates/2007/](http://www.nobelprize.org/nobel_prizes/peace/laureates/2007/)

- [5] HPCI 戦略プログラム (分野 3)「防災・減災に資する地球変動予測」,

<http://www.jamstec.go.jp/hpci-sp/index.html>

技術情報誌アドバンスシミュレーションは、アドバンスソフト株式会社 ホームページのシミュレーション図書館から、【カラー版】がダウンロードできます。(ダウンロードしていただくには、アドバンス/シミュレーションフォーラム会員登録が必要です。)

## シミュレーション技術への期待

笠原 直人

東京大学 大学院 工学系研究科 原子力国際専攻 教授

### 1. はじめに

「解析による設計(Design by Analysis)」という用語は、米国機械学会(ASME)が原子炉のクラス1機器の構造設計基準[1]に取り入れた設計思想を表す固有名詞であり、シミュレーション解析を利用した設計を単純に意味するものではない。本稿では、構造設計基準における「解析による設計」を簡単に振り返った後に、それを拡張し、原子炉の熱流動 - 構造問題へ適用した例を示す。また、複雑な問題に対するV&Vの留意点についても簡単に述べる。

### 2. 構造設計基準における「解析による設計」

構造設計基準における「解析による設計」の枠組みは、以下の4段階からなる。特に破損様式の想定や支配因子の抽出を間違えると無意味な計算に労力を費やすので注意が必要である。

#### 破損様式の想定

設計上考慮すべき破損様式を明確にする。軽水炉の基準では、クリープが関与しない温度領域の破損様式が想定される。高温構造設計方針はこれに加え、クリープが生じる高温域で生じる破損様式を想定する。

#### 様式毎の破損機構の定式化

各破損様式に関して、破損機構を支配する因子(応力、ひずみ、等)を抽出して、強度理論等に基づき破損限界を定式化する。

#### 弾性解析による応力、ひずみ等の算定

応力(ひずみ)解析により、破損機構を支配する因子を算定する方法を規定する。応力(ひずみ)解析には基本的に弾性解析を用いる。

#### 応力、ひずみ等の制限値の設定

材料強度データに基づく材料強度基準、重要度(機器区分)と荷重の発生頻度(運転状態)を考慮した設計係数を組み合わせ、応力、ひずみ等の制限値を設定する。

### 3. 熱流動 - 構造問題への拡張

原子力プラントにおける主要な荷重の1つに、起動停止に伴う流体温度変動があり、繰り返しによる熱疲労や変形を防止する必要がある。これは図1に示すように系統熱過渡現象と呼ばれ、流体温度変動、構造の温度応答および熱応力の発生からなる。従来、各段階を熱流動解析、構造温度解析、熱応力解析により個別評価し、積み上げる方法がとられてきた。この方法の問題は、各段階の不確定性を独立に評価して余裕をとると、段階が増えるに従い過剰な裕度が積み上がることである。

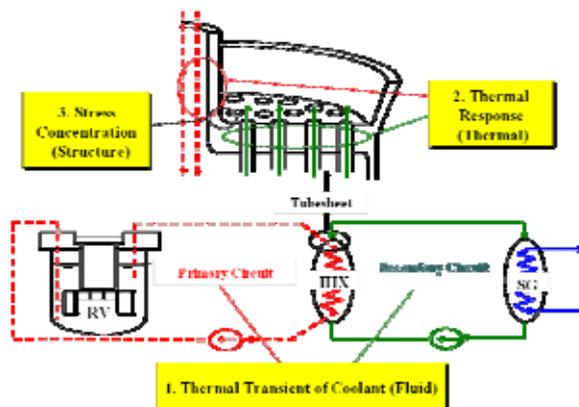


図1 系統熱過渡現象

これを克服するため、熱流動 - 構造問題を要素に分解する前の全体に「解析による設計」思想を拡張適用することを考える。

#### 破損様式の想定：

熱荷重との組み合わせにより破損様式を想定する。

例) 系統熱過渡荷重によるラチェット変形や熱疲労

#### 様式毎の破損機構の定式化：

破損機構を支配する因子について、応力・ひずみといった構造要因に留まらず、その原因となっている、制御系・ポンプ特性といったプラント因子や温度変化速度(周波数)等の熱流動因子にまで遡って抽出する。支配因子に基づき、

熱流動 - 構造を一貫させた破損機構の定式化を行う。

破損支配因子の算定法の規定：

非線形な熱流動現象や弾塑性変形を一般的に高精度で予測することは容易ではない。このため、破損の支配因子に関して少なくとも非安全側の予測とならないことを要件とすることで、解析の負担を緩和（例：構造が応答しない高周波温度ゆらぎの予測を要求しない）した算定法を開発する。

以下の、高速実証炉 JSFR の系統熱過渡問題への適用例を示す[2]。図 2 は JSFR の熱過渡現象に影響を与える主要なプラント因子である。熱流動 - 構造統合解析を実施すると、A~H の各因子に対する熱応力の感度を図 3 のように評価することができる。

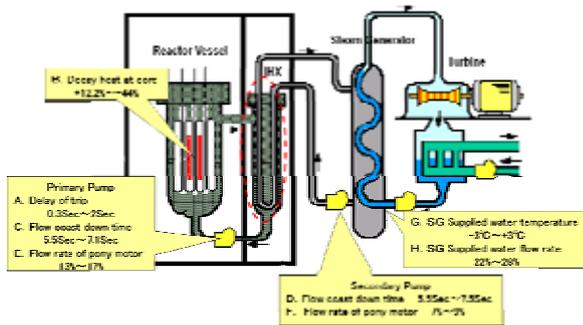


図 2 熱過渡現象に影響を与えるプラント因子

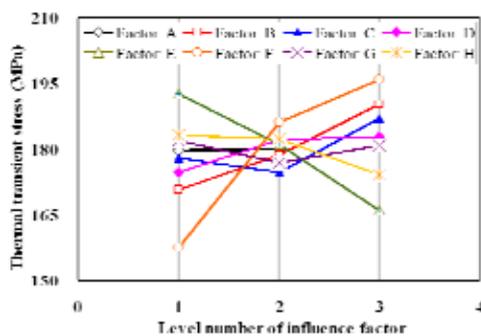


図 3 熱応力のプラント条件に対する感度

図 3 から、熱流動 - 構造全体を通じた支配因子を抽出できる。次に各因子を設計上考えられる範囲で、各種の確率分布を仮定して変動させた場合の熱応力の発生確率を図 4 に示す。従来の安全裕度積み上げ方式により評価した熱応力 214.7Mpa に比較して、各種確率分布と標準偏差の 3.5 倍 (3.5 ) のバラツキを考慮しても予

測応力 175.0MPa はかなり低いことが分かる。なお、同様のアプローチで強度因子や解析精度の不確定性を評価することも可能である。

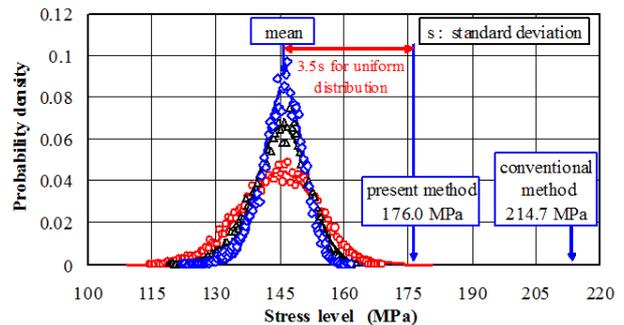


図 4 熱応力発生確率分布と従来評価の比較

#### 4. 複雑システムの V&V について

上記のような複雑な設計問題へシミュレーション解析を適用するにあたり V&V が課題になるであろう。ASME の計算固体力学に対する V&V ガイド[3]では、複雑なシステムに対する概念モデルを構築するために、階層化による分析や重要物理現象ランキングテーブル(PIRT: Phenomena Identification & Ranking Table)の利用が推奨されている。これらは、先に述べた「解析による設計」思想と整合するものである。それを活用するには、共有化された最終目標からのトップダウンの視点と、各分野からのボトムアップの視点の両者を組み合わせた俯瞰能力が要求される。

#### 参考文献

- [1] ASME Boiler and Pressure Vessel Code Sec.III, (1963)
- [2] Yang Xu, Kenichiro Satoh, Yoshio Kamishima and Naoto Kasahara, Proposal of Thermal Transient Load Modeling Method of for Fast Breeder Reactors, SMiRT-21, Div.V, #390k(2011)
- [3] ASME, Guide for Verification and Validation in Computational Solid Mechanics, V&V 10, (2006)

技術情報誌アドバンスシミュレーションは、アドバンスソフト株式会社 ホームページのシミュレーション図書館から、【カラー版】がダウンロードできます。(ダウンロードしていただくには、アドバンス/シミュレーションフォーラム会員登録が必要です。)

## シミュレーション技術への期待

片岡 勲

大阪大学 大学院 工学研究科 機械工学専攻

アドバンスソフト株式会社が設立 10 周年を迎えられるとのことおめでとうございます。私は気液二相流の解析を通じてさまざまな交流をさせていただいてきましたが、その解析能力、充実したスタッフ陣に常々敬服いたしておりましたが、その高いシミュレーション技術を用いて今後日本の産業の発展に寄与されることを期待いたしております。

エネルギー機器、化学プラント等多くの産業機器の設計や安全性評価にとって熱流動解析は最も重要なものの 1 つです。これらの機器では種々の配管、ポンプ、弁といったさまざまな構成要素の中を流体が単相流並びに気液二相流の形で流動し熱を輸送しています。これらを設計し安全性を評価するにはこうしたさまざまな構成要素の中の流れと熱伝達の挙動を正確に解析する必要があります。このうち単相流についてはシミュレーション技術が非常に発達し汎用の流体解析コード (CFD コード) が市販され広く使われています。一方、二相流特に沸騰や凝縮などの相変化を伴う二相流の数値解析についてもこの半世紀ほどの間に大規模なエネルギー機器の開発と共に発展してきました。気液二相流は液体と気体という大きく密度の異なった二つの流体が混在して流れているため、その熱流動解析は単相流に比べて非常に難しく、解析に当たっては二相流を種々の仮定によってモデル化する必要があります。初期には、気体と液体が同一の速度で流れる均質流モデルが用いられていましたが、現在では気体と液体を別個に取り扱ってその熱流動現象を解析する二流体モデルが用いられるようになっていきます。

こうした気液二相流の熱流動現象の数値解析は初期のころは最も簡単な均質流モデルを用いた計算コードでも非常に計算時間を要し、かつ計算結果が不安定な場合がありました。しかし

ながら近年、数値解析技術とコンピュータの飛躍的発展によって、最も詳細な二流体モデルを用いた解析も正確かつ迅速に行われるようになり、学生がデスクトップパソコンを用いて計算を行うことが可能となっています。二流体モデルの理論的な開発は日本人で現在米国の Purdue 大学の教授である石井護先生が 1975 年にその著書 “Thermo-fluid Dynamic Theory of Two-Phase Flow,” で公表されましたが、その当時は石井先生自らが、ご自分で開発された二流体モデルの基礎方程式が数値解析によって解かれ、計算コードとなるとは思ってはいなかったと述べておられました。それほどに気液二相流の数値解析は飛躍的な進展を遂げています。

こうした気液二相流のシミュレーション技術の飛躍的発展は今後のわが国の産業の発展に大きな力を発揮すると考えられます。沸騰や凝縮などの気液二相流を用いる大型の産業機器の開発においては、これまで機器の中での気液二相流現象を把握するために、実機を模擬した装置による実験が必要で多くの費用と時間を要していました。しかしながら、現在の気液二相流のシミュレーションコードはこうした実験に代わりうる高度な予測性能を持ちつつあります。これを用いて機器の熱流動解析とそれを用いた設計と安全解析は大幅に合理化して時間短縮を図ることが可能となると考えられます。勿論、実験による検証は不可欠ですが、これを最小限にとどめ、シミュレーションによる設計を行うことが可能となりつつあります。

このために必要なことは、気液二相流のシミュレーションコードの標準化と検証ための実験データベースの標準化であると考えられます。気液二相流については、わが国の研究者がこれまで世界をリードする役割を果たしてきており、多くの有用な実験データが存在します。こうし

たデータを系統的に収集し、データベースとして整理し、研究者、技術者がアクセスできるようなシステムを産官学の協力によって構築し、新しいシミュレーションコードを作成した場合にはこれを用いて検証を行えるようにすることが望まれます。こうしたシステムも含めて今後、気液二相流のシミュレーション技術がさらに進展し、わが国産業の発展と、国際化に寄与していくことを大いに期待します。

# BIMと融合するシミュレーション技術への期待

加藤 信介

東京大学 生産技術研究所 教授

## 1. はじめに

産業界は、日夜、国の内外で同業者との厳しい競争に晒されている。この競争は厳しく辛くもあるが、物作りにおける生産性の向上の大きな原動力となっており、わが国や世界の経済発展や文化、福祉の飛躍的な向上の大きな原動力となっている。サステナブル社会が叫ばれ、資源やエネルギーのサステナブルな利用が強調される現在、日本や世界の経済発展や福祉の向上はまさにこの労働生産性の向上のみが担うといっても過言ではないであろう。

近年の産業界における労働生産性の著しい向上は、コンピュータの飛躍的な発展、普及とその利用技術の急速な展開・普及が大きな寄与をしていることを疑う人はいないであろう。本稿ではコンピュータ利用による一連の情報革命の一端を担い、建築の設計、生産、維持管理のあり方を根本的に変革するポテンシャルを持つ

**Building Information Modeling**(以下 **BIM** と略す)のシミュレーションへの活用の期待を述べたい[1],[2]。

## 2. 仮想ビル(Virtual Building)と BIM

仮想ビル、**Virtual Building** (以下 **VB** と略す)は **Virtual Reality** (以下 **VR** と略す)の派生であり、広義のコンピュータシミュレーション技術である。**VB**は **VR**同様、現実の時空には存在していないが、コンピュータなどの情報空間の中に情報として存在し、その存在に求められる機能としての本質は、現実の時空に存在するものと同値である。

**VB**は、現実の時空に存在するものに必要、知覚される情報量はすべて、包含する。**VB**内で火災が生じれば実火災と同様に **VB**内で実現象と同様に火災が生じ、延焼し人々が避難する。地震に遭遇すれば、**VB**内で揺れが再現され、

揺れによる家具などの移動や構成材の損傷が再現され、人々の負傷も再現される。**VB**内で空調が行われれば、外部気象や室内の使い勝手により室内の温熱環境が変動し、室内に温熱環境の分布が生じる様や空調に使用される電気エネルギーやガスや上水の使用、下水への排出や建物周囲への排熱放散が再現される。**VB**は、**VR**の派生であり、建築を物として構成する構成材だけでなく構成材で実現される空間の性状、人の活動、エネルギーの使用、物理的な環境のすべて、現実の時空間で関わる人々が求める機能、知覚される状態量のすべてがコンピュータ内のデータもしくはシミュレーションとして再現される。この **VB**を実際に実現する有力なツールとして **CAD**の発展系としての **BIM**が出現し、長年絵空事であった **VB**が **BIM**により、いよいよ実現されると期待されている。

## 3. BIM とシミュレーション

**Building Information Modeling(BIM)**は、単なる 3次元 **CAD**の単なる発展系ではない。現実の建物、その構成材、構成材で実現される空間や機能に対して、これに関わる人々が期待し、知覚するすべての性状を情報空間に格納し、必要に応じて情報として出力できるもの、すなわち **Virtual Reality(VR)**の文脈に存在する仮想ビル、**Virtual Building(VB)**を実現し得る有力なツールである。**BIM**は、建物の構成材の形や関係性を属性として記述するだけでなく、時間的变化も含めて構成材で実現される空間や機能などあらゆる概念の属性を記述するものであり、空間の物理的性状や機能のシミュレーションと一体化するものである。

建物に関わるシミュレーションは **BIM**との統合により、新たな地平が築かれる。

**参考文献**

- [1] 加藤信介, 樋山恭助例→BIMの現状と課題  
(特に建築設備に関して), 空気調和衛生  
工学 Vol. 86-4, (2012.05)
- [2] 樋山恭助, 加藤信介, 刁芸婷, →BIM普及  
による空調設備設計プロセスへの影響の分  
析, ー空調設備設計技術者を対象としたア  
ンケートによる BIM に対する意識調査ー,  
空気調和衛生工学会論文集 169 (20110-4),  
pp39-48

## シミュレーション技術への期待

加藤 千幸

東京大学 生産技術研究所 革新的シミュレーション研究センター センター長・教授

昨年6月と11月の性能ランキングで世界一の性能を達成したわが国のスーパーコンピュータ「京」は実に8万個のCPU、64万個の演算コアを搭載しており、LINPACKというベンチマークテストで10.5ペタ・フロップスという性能を実現した。小生が今から30年近く前に、株式会社日立製作所機械研究所（当時）に入社した時の最初の業務が「乱流解析」であり、この時、業務に用いていた大型計算機（確か、HITAC M280/IAPであったと思う）の性能が20メガ・フロップス程度であったと記憶している。この30年近くの間、計算機の性能は1980年代のメガ・フロップスから、90年代のギガ・フロップス、2000年代のテラ・フロップスの時代を経て、2010年代は正にペタ・フロップスの時代に突入した。さらに、2020年代にはエクサ・フロップスの時代に入るものと予想されている。

では、シミュレーション技術はどうだろうか？小生はものづくり分野のシミュレーション・ソフトウェアの研究開発やその普及などに携わっており、特に、熱流体解析を専門にしている。熱流体解析分野では1990年頃から3次元の流体解析が徐々に設計や開発の現場で使われ始め、それから20年余りが経った現在では、製品開発に流体解析を用いるのは当たり前になった。丁度、構造解析分野で起こったことが凡そ20年近く後になって流体解析分野でも起こったのである。しかしながら、計算機の性能がこの間に約100万倍に向上している割には研究開発や設計現場におけるシミュレーションの活用に革新的な変化は起きたようには感じられない。

1990年代と現在を比べてみると、解析の大規模化や解析ノウハウの蓄積等により、解析精度は向上し、また、1回の設計でシミュレーショ

ンが実施される回数が増えたことは確かであろう。しかし、計算の規模を例にとっても、1990年代に流体解析が実用化された時の計算格子数は100万点程度であったが、それから20年余りが経過して、計算の規模の100万倍になり、現在では1兆点の計算格子を用いた流体解析が実用化されているかというところではない。あるいは、100万点の格子を用いた流体解析が100万ケース同時に行われていて、流体解析が最適設計の中核に位置付けられているかと言えばそうでもない。つまり、シミュレーションの普及は確実に進展してはいるが、革新的な変化は現場では起きていないということである。ここ20年、30年の計算機性能の飛躍的な向上を考えると、シミュレーションを利用する現場で、もっともっと革新的な変化が起きても良いような気がしている。

シミュレーションが今後発展していく方向性を考えてみたい。1つは解析を大規模化することにより、従来よりも高精度な、従って、信頼性がより高い解析を実現したり、あるいは、従来は要素の解析に留まっていたものに関して全体の解析を実現したりするということがある。2つ目は計算時間の短縮である。今まで一晩掛かっていた流体解析が仮に10分で終わるようになれば、設計における解析の使われ方自体に変化が起こるはずであり、設計プロセス自体の変革が期待される。3つ目は多くのケースの解析を同時に実行することにより、最適な設計解を短時間の内に見つけ出すことである。もちろん、シミュレーションに期待されることは様々な設計パラメータ間のトレードオフ関係を定量的に示してくれることであり、設計者はこの情報を基に理論的な最適設計を実現できる。最後の方向性は、これまで全くシミュレーションの対象となっていなかったような分野への展開で

あろう。例えば、人間の脳や心の働きや動きなどのシミュレーションである。

計算機性能の向上を考えると、シミュレーション技術はもっともっと発展し、ものづくりの現場での利用がさらに進展していくことが期待される。アドバンスソフト株式会社のような、実用的で高度なシミュレーション・ソフトウェアに関して豊富な開発・販売実績を有している会社が、これからもシミュレーション技術の発展のための重要な一翼を担っていくことを期待している。

# 地震津波シミュレーション技術開発の課題と期待

金田 義行

独立行政法人 海洋研究開発機構 技術研究統括 地震津波・防災研究プロジェクトリーダー

## 1. はじめに

2011年3月11日の東北地方太平洋沖地震により引き起こされた東日本大震災は近代日本の最大級の自然災害であった。マグニチュード9という規模の地震による地震動と大津波の広域複合災害を目の当たりにして、自然災害の脅威、減災対策の必要性ならびに科学技術の未熟さを痛感した。

このような地震津波の広域複合災害に対し、今後必要とされる対策の1つに高精度なシミュレーションが挙げられる。地震津波の減災に備えるシミュレーションの技術開発は研究的、社会的にも喫緊の課題である。

## 2. 地震動シミュレーション

構造物への被害想定においては、地震動シミュレーションの高精度化が必要不可欠である。南海トラフで発生するような海溝型巨大地震では広域かつ高周波成分ならびに長周期地震動がそれぞれ卓越するため、構造物への地震動被害予測では、広帯域の地震動シミュレーションが必要となる。このためには地震動シミュレーションそのものの高度化とともに地盤モデルをいかに精緻に構築するかも重要な課題である。地下構造調査やボーリング等のデータを活用して3次元的な地下構造モデルを構築するとともに、地域や堆積盆地さらには長周期地震動を考慮した場合、南海トラフ巨大地震震源域などに発達する付加体等の大規模な地下構造を統合したモデルが必要となる。

また、より現実的な地震動被害予測を達成するためには、構造物や地域全体の精緻な数値モデル化も重要である。

## 3. 津波シミュレーション

東日本大震災での甚大な被害は主として大津

波によるものであり、今後危惧される海溝型巨大地震での津波被害想定やその対策が急務である。

津波伝播シミュレーションでは非線形性の取り込みや被害を増大させる流速や流体力の評価が重要なポイントとなる。東日本大震災での津波被害に基づけば、津波が防潮堤を越波するケースや河川の遡上ならびに市内への浸水するケース、あるいは船舶や浮遊物等の2次的な被害等を想定した津波シミュレーションが今後の津波対策において不可欠である。より精緻なシミュレーション開発においてはシミュレーション手法の正当化と結果の信頼性評価が重要であり、実際の被害調査や実験結果との検証が必要である。今回の東日本大震災での津波被害の教訓を、今後の津波被害対策に活かすためには、高度化な津波シミュレーション開発と検証が早急の課題である。

## 4. 減災対策研究

地震津波被害予測に基づく対策が減災の最重要課題である。そのためには、港湾施設や沿岸構造物の安全性評価が必要である。また、海溝型巨大地震では津波襲来前に継続時間の長い強い揺れや長周期地震動が想定されている。そのため、地震動の構造物への被害さらに液状化等の地震被害に、津波複合被害を併せた広域複合災害が発生すると考えられる。その場合の対策とともに避難経路の確保や避難シミュレーションといった観点でのシミュレーションが今後さらに重要な役割となることから、さまざまな課題における地震津波シミュレーション研究の推進が今後期待されている。

また、海溝型巨大地震発生時の前後では内陸型地震や火山噴火といった災害も発生している。1707年に発生した宝永地震は東海、東南海ならびに南海地震ほぼ同時に発生したと考えられ、

東北地方太平洋沖地震前までは日本最大級の海溝型巨大地震とされていたが、宝永地震の49日後には富士山の噴火、また、4年前の1703年には元禄江戸地震(1923年大正関東地震と同じプレート境界型地震)が発生している。東北地方太平洋沖地震と同様に大津波を引き起こしたとされる869年貞観地震前後でも富士山噴火や、南海トラフでの仁和地震をはじめ内陸型地震が多数発生している歴史的事実がある。今後は、これらの事実を真摯に受けとめ、地震津波、火山噴火さらには風水害も視野に入れた被害シミュレーションの技術開発の推進を図り、ひいてはこの減災シミュレーションが日本の社会貢献のみならず国際貢献に資することを期待したい。

# 粉体シミュレーション技術への期待

加納 純也

東北大学 多元物質科学研究所 准教授

## 1. はじめに

近年のコンピュータの発達は、粉体工学の分野にも大きな流れを創り、コンピュータシミュレーションが粉体機器の設計や操作の最適化に使われ始めている。これまでの粉体機器の設計や操作は、経験に依存するところが大きく、試行錯誤的に行われてきた。この最大の要因は、粉体機器内部の粒子の動きを詳細に把握できなかったことである。粉体シミュレーションの中でも特に離散要素法 (Discrete Element Method (DEM)) は、粉体機器内部での粒子の動きの観察を可能にし、有用な情報を空間的にも時間的にも詳細に提供する。ここでは、DEMの抱える課題を整理し、今後の粉体シミュレーションに対する期待を述べる。

## 2. DEM シミュレーション

DEM は、1970 年代に Cundall ら[1]によって提案され、当初は土木工学を対象とした数値解析に使われてきた。近年では土木工学に加えて機械工学、化学工学、原子力工学、薬学など広い範囲で用いられるようになってきている。

DEM は、粉体の特徴である離散的な性格をよく表現し、運動状態にある粉体のミクロ的、マクロ的な各物理量の詳細な観察を可能にし、いまや粉体現象のモデル的考察には欠かすことのできない重要なツールになりつつある。

一方、DEM は粉体シミュレーションとして大きな成果を上げているが、その性格上、計算粒子数に対していまだに制約がある。計算機能力が向上した現在であっても、現実的に計算可能な粒子数は (われわれが現実的に待てる計算時間で扱える粒子数) およそ 100 万個である。これはコーヒースプーン一杯の砂糖とよく揶揄されるように、産業界で取り扱う粒子数を考えるとあまりに小さい。そのため、DEM の歴史

を振り返ってみても、計算の大規模化・高速化に対するアプローチは常に行われてきた。三尾らは、粒子検索部等をはじめとしたアルゴリズムの最適化を行うことによる高速化への取り組みや[2]、CPU やコンパイラ等の計算環境とプログラムの最適化について検討を行っている[3]。酒井らは、DEM 粗視化モデルを提案し、気流搬送システム[4]や流動層[5]などの体系に適用することでその妥当性を検証している。

高速化という点では、並列計算も有効である。現在市販されている CPU は、そのほとんどが複数コアを搭載したものとなってきている。このようなハードウェアの能力を十分に活用するために必要なのが、並列計算のためのプログラミングとチューニングである。並列計算の手法も様々あるが、OpenMP はプログラムへの導入のしやすさから、プログラムのチューニングにかかる時間に対して効果が見込める有効な方法であると考えられる。その他に MPI といった複数の CPU 間で情報をやり取りし並列計算を行う方法もある[6,7]。

粉体シミュレーションの最近の動向としては、固相のみをシミュレーションするのに加え、CFD (Computational Fluid Dynamics) とカップリングし、固体と気相あるいは固体と液相との混相流への展開がますます盛んになってきている。川口らは、流動層のような高濃度固気二相流に対して DEM と CFD をカップリングしたモデルを構築し、個々の粒子運動の視点に基づく数値シミュレーションを可能にし[8]、さまざまな応用研究が行われるようになってきている。木下らは、MPS(Moving Particle Semi-implicit)とカップリングした混相流への取り組みが挙げられる。固相から液相への相変化を考慮した粉体溶解挙動のシミュレーションを可能にした[9]。

これらの報告に代表されるように、粉体シミュレーションは既存のシミュレーション法の確かな発展と、新しいシミュレーション技術の融合により日進月歩の成長を遂げている。

### 3. さらなる粉体シミュレーションの発展を目指して

シミュレーションを活用するメリットは、一般に以下の点が挙げられる。(1)実験では観測できない物理量、状態量を時間的、空間的に任意に得ることができる。(2)実際に装置を作製する必要がなく、異なる装置形状における数値実験を容易に行うことができる。その一例を図1に示す。媒体攪拌ミル断面における媒体の速度分布である。媒体攪拌ミルを設計する際には、攪拌機の形状が極めて重要であり、その影響を容易に検討することができる[10]。(3)実験室では困難な実験あるいは自然界では起こらない思考実験が可能である。

これらのメリットを最大限に発揮させるには、

DEMシミュレーションをさらに大規模化して実際の装置内粒子挙動をシミュレーションすることとインターフェイスの構築が必要であると考えられる。上述したように、さらなる大規模化に向けては高速化が必要であり、ソフトウェア単体、ハードウェア単体ではなく、粉体現象を理解してそれらを最適に組み合わせる粉体シミュレーションシステムを構築する必要がある。もう一方で、粉体シミュレーションには非常に多くのパラメータを入力する必要がある。例えば、境界条件はもちろんのこと、初期条件として、粒子径とその分布、密度とその分布、装入量、操作条件として、例えば回転数、回転方向などが挙げられる。また得られる結果は、個々の粒子の位置、速度、接触力などさまざまな情報を容易に得ることができるが、その量が膨大であり、粉体現象を理解した上で、その中から必要とするものを自在に抽出しなければならない。このようなことを可能にする手軽で自在に使えるインターフェイスの確立が望まれる。

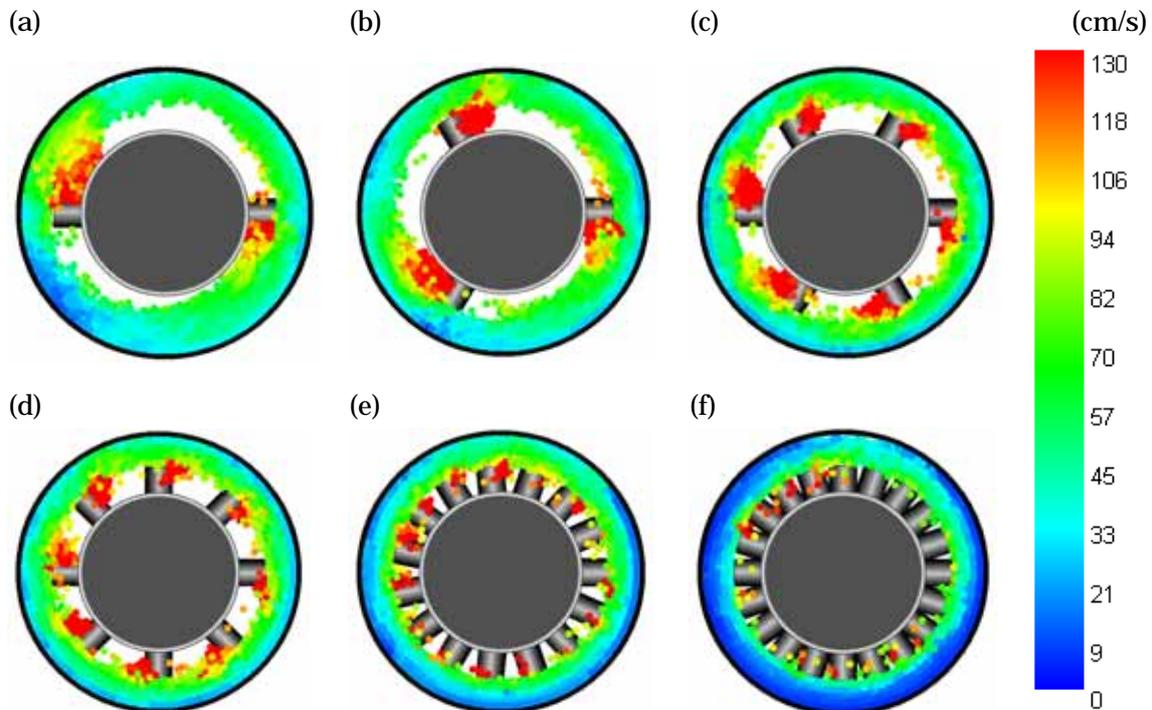


図1 媒体攪拌ミル内のビーズの速度分布  
(ジルコニアビーズ径 = 2 mm, ビーズ充填率 = 57%, 回転速度 = 600 rpm)  
(a)2-pin, (b) 3-pin, (c) 6-pin, (d) 8-pin, (e) 15-pin, (f) 20-pin

参考文献

- [1] P.A.Cundall and O.D.L.Strack: "Discrete numerical model for granular assemblies", *Geotechnique*, **29**, 47-65 (1979)
- [2] H. Mio, A. Shimosaka, Y. Shirakawa and J. Hidaka: "Optimum Cell Size for Contact Detection in the Algorithm of Discrete Element Method", *J. Chem. Eng., Japan.*, **38**, 969-975 (2005)
- [3] H. Mio, A. Shimosaka, Y. Shirakawa and J. Hidaka: "Optimum Cell Condition for Contact Detection Having Large Particle Size Ratio in Discrete Element Method", *J. Chem. Eng., Japan.*, **39**, 409-416 (2006)
- [4] M. Sakai, S. Koshizuka : "Large-Scale Discrete Element Modeling in Pneumatic Conveying", *Chemical Engineering Science*, **64**, 533-539 (2009)
- [5] M. Sakai, Y. Yamada, Y. Shigeto, K. Shibata, V.M.Kawasaki, S. Koshizuka : "Large-scale Discrete Element Modeling in a Fluidized Bed", *Int. J. Numer. Meth. Fluids*, **64**, 1319-1335 (2010)
- [6] F. Freissner and P. Eberhard : "Load balanced parallel simulation of particle-fluid DEM-SPH systems with moving boundaries", *Advances in Parallel Computing*, 15, IOS press (2008)
- [7] H. Mio, R. Higuchi, W. Ishimaru, A. Shimosaka, Y. Shirakawa, and J. Hidaka : "Effect of paddle rotational speed on particle mixing behavior in electrophotographic system by using paralleldicrete element method", *Adv. Powder Technol.*, **20**, 406-415 (2009)
- [8] 川口寿裕, 田中敏嗣, 辻裕 : "離散要素法による流動層の数値シミュレーション(噴流層の場合)", 日本機械学会論文集, **58-551B**, 2119-2125 (1992)
- [9] 木下秀則, 下坂厚子, 白川善幸, 日高重助 : "MPS 法を用いた粉体塗料溶融挙動の解析", 日本機械学会第 20 回計算力学講演会講演論文集, 489-490 (2007)
- [10] 曾田力央, 加納純也, 齋藤文良 : DEM による媒体攪拌ミル攪拌ロータのピン形状が媒体運動に及ぼす影響の解析, 粉体工学会誌, **46**, 180-186 (2009)

技術情報誌アドバンスシミュレーションは、アドバンスソフト株式会社 ホームページのシミュレーション図書館から、【カラー版】がダウンロードできます。(ダウンロードしていただくには、アドバンス/シミュレーションフォーラム会員登録が必要です。)

## アドバンスソフトへの期待

川北 至信

独立行政法人 日本原子力研究開発機構

J-PARCセンター 物質・生命科学ディビジョン 中性子利用セクション

私は茨城県東海村の独立行政法人日本原子力研究開発機構（JAEA）内に、JAEA と高エネルギー加速器研究機構（KEK）が合同で設置した大強度陽子加速器施設（J-PARC）の中の物質・生命科学実験施設（MLF）において、中性子分光器の開発および利用研究を行っております。こうした大規模施設では、世界第一級の高度な新技術を逐次開発・応用しながら、それらを惜しげもなくつぎ込んだ実験装置をコンセプト段階から数年をかけて建設し、装置コミッションングを経て、順次ユーザーへと解放されていきます。技術開発、装置建設から加速器や中性子源の運転に至るまで、莫大な費用がかかっており、私たち研究者は、それに見合った研究成果や、とりわけ国民生活の向上に近い将来確実につながるであろうサイエンスの推進に、共同利用するユーザーコミュニティとともに、大きな責務を背負っています。

MLF では、25Hz 周期の大強度陽子ビームを液体水銀ターゲットに入射し、核破砕反応によって生成されるパルス状中性子を、さらにモデレーターと呼ばれる中性子キャビティーにより物質研究に使いやすいエネルギー領域に変換し、利用しています。多くの中性子分光器では、このパルス状中性子をスーパーミラーと呼ばれる導波管（ガイド）により数十メートル離れた分光器まで導いています。さまざまなエネルギーをもって飛んでくる中性子から、特定のエネルギーの中性子を弁別するため、もしくはパルスの形状が装置の分解能に直接影響を及ぼすことからパルス形状を都合よく成形するために、チョッパーと呼ばれるスリットをもったディスクを中性子ガイドの途中に入れて、高速で回転させています。また、低速で回転するチョッパーを入れて、パルスを間引いたり、使用する中性

子のエネルギーバンドを制御するという場合もあります。こうして得られたそれぞれの装置の利用目的に合った中性子パルスを、分光器の散乱中心に導き、そこに置いてある測定試料によって四方に散乱された中性子を大きな立体角をカバーするように設置された多数の検出器で検知します。検出器では、散乱中性子を一つ一つ検知したときに、その場所と到達時間を記録します（event recording）。到達時刻を知ることによって、モデレーターから検出器までの中性子の飛行距離は分かっているので、記録された中性子のエネルギーを知ることができます。こうした中性子の分析法を、飛行時間分析（time of flight）法と呼びます。散乱中性子の角度分布、エネルギー分布を解析することで、物質の内部の原子レベルでの構造や振動状態を知ることができます。また、中性子はスピンをもっていますから、このスピンの状態を制御するデバイスも開発されています。こうした中性子の計測技術に加えて、測定試料の環境を制御する装置、つまり、温度、磁場、圧力などさまざまな環境パラメーターを変化させる装置の開発も重要な要素です。

世界第一級を自負するからには、装置に組み込まれるさまざまな最先端デバイスや試料環境装置の性能には一步の妥協も許すことはできません。しかし、こうした装置類を生かすも殺すも、これらを制御するソフトウェアの出来に依存します。とくに、中性子パルスと同期した試料環境の外場制御など、event recording 方式を最大限利用した新しいデータ収集システムを実現することが、サイエンスの新展開のために極めて重要となっています。こうした制御、データ収集からデータ解析まで、一連の流れの中でスムーズに利用者が研究できるシステム作りに

は、ソフトウェア製作会社と装置開発研究者の間の密な連携が欠かせません。アドバンスソフト株式会社には、これまでの大規模共同利用施設でのソフトウェア開発で培った経験を軸にして、さらなる発展・飛躍を期待しております。

# シミュレーション技術への期待

久保田 士郎

独立行政法人 産業技術総合研究所 安全科学研究部門 主任研究員

## 1. 爆発安全研究のためのシミュレーション

高エネルギー物質の予期せぬ爆発・燃焼が生じたときの影響評価と、それを想定した安全対策は重要である。爆発安全の研究では、複雑な爆発現象を理解することで、爆発影響を正確に予測し、安全対策を講じることを目的とする。そのための強力なツールがシミュレーション技術である。対象は着火・起爆から物質の高速大変形、破壊が組み合わされた複雑現象である。そこで、シミュレーション技術の応用は反応速度則、状態方程式、構成則、破壊則等の材料挙動に関するモデルを要求する。また、爆風は遠方にまで到達し複雑な地形や構造物等と干渉して、さまざまな様相を呈するため、数値シミュレーションに頼った評価を必要とする。

## 2. 評価法として自立するシミュレーション

上述のように爆発シミュレーションでは支配方程式の離散化手法のみならず、物質の挙動を表現できるモデルが重要な場合が多い。そこで、この分野では今日までに実験や理論をもとに多くのモデルが登場し、爆発現象を評価するために必要最低限なものは汎用ソフトにも組み込まれている。ここで、計算領域が広いこと、あるいは物質毎にパラメータが異なるか、適用できるモデルがないことが問題となる。条件の揃った限定された場合を除いて、単独で爆発現象を完全に評価できるシミュレーション技術はない。しかし、実験の労力とコストを考えると、実験の回数を減らさなければならない。そのためシミュレーションに対する期待は大きい。一昔前は、1次元の仮定を満足した実験を実施し、物質モデルのパラメータを求めることが多かった。シミュレーション技術の発達により、その縛りはなくなった。さらに進展させたいのは、シミュレーション技術そのものでシミュレーションに必要な物質モデルのパラメータを求めながら、

現実的な安全性評価のためのシミュレーションを自己完結する技術である。これはマルチスケールシミュレーション技術として、以前から考えられている技術が相当する。たとえば、衝撃状態を表現する物質モデルは密度など初期状態に依存し、それが変わっただけでパラメータの再取得を要する。この場合、メソスケールの計算によりパラメータが得られるコンセプトは理解が容易である。これに付随するのは、空隙と粒子が複雑に存在する物理場を記述する技術と、多数の粒子間の相互作用問題をロバストに解析する技術の開発である。

## 3. 起爆・爆轟シミュレーション

爆発安全の観点から重要となる起爆・爆轟波（反応物質中を超音速で伝わる反応波）の研究の歴史は古く1900年頃に基礎理論が出現した。この分野は古くから計算機応用の対象となっていたものの、技術がある程度発達する前は現象のモデル化のために数学的な工夫が駆使された。流れ場の非線形方程式を定常化し、いくつかの仮定を設定して有用なモデルが導出された。現在、高速化、低コスト化されたシミュレーション技術のおかげで、非線形方程式のまま、誰でもパラメトリックな数値実験も可能である。なぜ過去のモデルが現象を説明できてしまうのか、どこまで適用可能なのが明確にできる。速度論を取り入れた計算も容易であり、新しい現象に出会うこともありうる。シミュレーション技術の最も魅力のあるところである。

ハード・ソフト面での高速化は進展が続いており、マイクロ、メソ、マクロスケールの各視点から爆発現象をシミュレートし、安全分野への貢献、爆発エネルギーの有効利用、爆発現象の解明など、爆発シミュレーション技術の進展と応用が重要となっている。

## シミュレーション技術への期待

越塚 誠一

東京大学 大学院 工学系研究科 システム創成学専攻

ここでは国産ソフトウェア開発への期待を述べたい。

筆者の専門である流体力学および熱流動に関するシミュレーション技術は、研究に関しては、日本は海外と比較して劣ってはいない。国際会議での発表やジャーナル論文に関して、日本の研究者のものは世界的な水準にある。その一方で、商用ソフトウェアに関しては大きな差があり、国産ソフトウェアは少ない。この理由として以下に3点を挙げたい。

第1はソフトウェアを軽視する傾向が過去にあったということ。これは、着実な「ものづくり」という観点からは一概に悪いこととは必ずしも言えないが、商用ソフトウェアの開発には多大な人件費が必要でありながらその成果が実物として見えにくいということもあり、なかなかソフトウェア開発に大規模な研究予算を投じたり開発投資したりということがなかった。現在はこの状況は大きく改善され、シミュレーションソフトウェアの開発に対しても直接的な研究費が認められるようになった。

第2はベンチャー企業が日本では育ちにくいということ。国立大学が法人化して、起業を積極的に支援するようになったのは比較的最近のことである。一方、流体シミュレーションの商用ソフトウェアが海外で盛んに開発されていた頃は、まさに海外では大学発ベンチャーが盛んになった時期だった。例えば、国の委託研究によって生まれた知的財産を受託側の所有物にできるようになったのは、米国ではいわゆるバイ・ドール法によるもので1980年に制定されているが、日本では産業活力再生特別措置法第30条（現在の産業技術力強化法第19条）がこれに対応し1999年になって制定された。

第3は日本は英語圏ではないということ。商用ソフトウェアは世界的に使われており、ビジ

ネス展開において母国語が英語であることは有利になる。実際、既に普及している流体シミュレーションの商用ソフトウェアは、英国を起源とするものが多い。しかしながら、グローバル化の世界的な潮流の中では、今後は英語圏の国々の相対的な優位は崩れていくであろうが、他方で競争相手が多くなると考えられる。

このように、過去には国産の商用ソフトウェア開発に不利な状況があったが、現在ではそれらは大きく改善されている。実際に、国産ソフトウェアの開発は活発かつ継続的に行われている。特に、競争的研究資金などの国の研究費を用いて開発したソフトウェアをきっかけに、その知材を受託者が得て継続的に発展させ、商用ソフトウェアに育て上げる例が増えている。これは上記の第1と第2の問題点の改善がうまく連動していることを意味していよう。そう考えると、今後は第3の問題点に注力することが重要ではないだろうか。すなわち、国内で育てたソフトウェアを海外に展開し、グローバルな市場の中で競争していくことである。

# 耐震安全性を確かめるシミュレーション技術への期待

斉藤 大樹

独立行政法人 建築研究所 国際地震工学センター 上席研究員

## 1. はじめに

東日本大震災以降、地震や津波に対して自分の住む建物が安全かどうか、誰もが不安を感じているに違いない。しかし、地震や津波がいつ、どのくらいの大きさで来襲するのかを正確に予測することは現在の科学技術をもってしても不可能と言われている。首都直下地震や東海・東南海・南海地震など、次の巨大地震が懸念される中、信頼性の高いモデルを用いて模擬的に耐震安全性を確かめるシミュレーション技術の活用が強く求められている。

## 2. 構造設計というシミュレーション

すべての建築物は、建築基準法に則って構造設計が行われなければならない。これは、地震力や風圧力などの設計荷重に対して建築物の応答値を計算し、その値が基準で定める限界値を超えないことを確認する作業であり、狭義のシミュレーション解析ということができる。

地震の大きさが予測できない以上、そうして設計された建築物が将来の地震に対して本当に安全かどうかは誰にも分からない。そのため、被害地震が起きる度に設計法は改訂され、建築物はより安全になっている。逆を言えば、古い設計法で建てられた建築物は安全性が劣るため地震で崩壊する危険性が高いと言える。しかし、違法ではないので補強されずに放置されているのが現状である。

構造計算というシミュレーションの使い手は設計者であるが、基本的なデータを入力すればほとんどの作業は一貫構造計算プログラムが代行してくれるので、能力の低い者でも構造設計がまがりなりにもできるようになっている。中には計算結果を偽装して鉄筋の少ない危険な建築物を意図的に設計した悪質なケースもあり、大きな社会問題になった。通常の建築物は一品

生産なのでそれぞれ独自の構造設計をしており、その不正を見抜くことは容易ではない。現在は設計者が行った構造計算書を他の専門家が二重チェックするシステムが導入されている。

ゲームのシミュレーションでは、インパクトを与えるために物理法則に反するような演出をすることがあるが、構造設計というシミュレーションは建築物の安全に関わる作業であり、設計者には正しい計算を行う重い責任がある。

## 3. 耐震安全性を確かめるシミュレーション

### 3.1. 地震による建物の被害を確かめる

構造設計で用いられる一貫構造計算プログラムは、耐震偽装で悪用されたこともあり、建築基準法の構造規定にないような計算は基本的に受け付けないようになっている。そのため、いろいろな地震の揺れに対して建築物の耐震安全性を確かめるような用途には向いていない。

一方、建築物の地震応答解析を行う汎用の構造計算プログラムも存在する。大学の研究室で開発されたプログラムから市販のプログラムまで千差万別であるが、一般に専門性が高く、使いこなすまでが一苦労である。また、需要が大きくないので市販のものはかなり高価になる。

誰でも使えて地震による建築物の揺れや被害を簡単に確認できるようにしたい、その思いから、手前味噌であるが、耐震シミュレーションソフト STERA3D を開発してホームページで無料公開している[1]。構造図面があれば比較的簡単にデータを入力してビジュアルに結果を確認できるのが特徴で、私自身、複数のマンション・ギャラリーにパソコンを持ち込んでデータを入力し、地震でゆらゆらと揺れるマンションの解析結果を見ながら、住むマンションをどこにするか思案したことがある。

### 3.2. 地震による室内の被害を確かめる

日本では建築物の耐震安全性はずいぶんと改善されており、よほど古くなければ地震で倒壊する心配はない。むしろ、激しい揺れによって室内の家具が倒れたり、天井が落ちたりする被害が心配されている。東日本大震災では住宅の倒壊による死者はゼロだったが、落下した天井の下敷きになって多くの方が亡くなった。

室内被害のシミュレーションは、家具を剛体としてモデル化することで剛体の移動と衝突の問題に帰着させることができる。これは、ゲーム開発で使われる物理エンジンが得意とする分野である。現在、アドバンスソフト株式会社の協力でフリーソフトの物理エンジンを使った室内被害のシミュレーションソフトを開発している。このソフトを使うことで、一般の人が地震による室内の被害を再現して、その危険性を理解し、家具の固定などの安全対策を進めるきっかけにしてほしいと思っている。

### 3.3. 地震による煉瓦建物の被害を確かめる

開発途上国の貧困層では、煉瓦を積み上げて自分たちで家を作ることが多いが、そうした建築物は地震の揺れでひとたまりもなく崩れ落ちるため、毎年のように崩れた瓦礫の下敷きになって沢山の犠牲者が発生している。

筆者が所属する建築研究所では、地震の多い開発途上国からの技術者を受け入れて地震防災の研修を行っている。関連する研究開発も行っており、その一環として、やはりアドバンスソフト株式会社の協力で煉瓦建物の崩壊シミュレーションソフトを開発した。

このソフトでは、マウスを操作してコンピュータ画面に煉瓦を積み上げて家を作り、それが地震の揺れで崩壊する様子を再現することができる(図1)。途上国の人々が、このソフトを使って煉瓦建物の危険性を知り、少しでも安全な建築物に住んでほしいと願っている。

## 4. まとめ

誰もが気軽に耐震シミュレーションを行い、

その結果を見ながら建築物の安全性を決めるようになれば、世の中の建築物はもっと安全になるに違いない。安全性が見えないので安くて危険な建築物を選んでしまうのである。

事前に体験できない災害を数値シミュレーションで再現し、見えない安全性を可視化して分かりやすく示すことは、これからの防災にとって不可欠な技術であろう。一方で、開発側は、人命に関わる技術であるからこそ、常に最新の研究成果を取り入れてシミュレーションの信頼性を高める努力を怠ってはならないと考える。

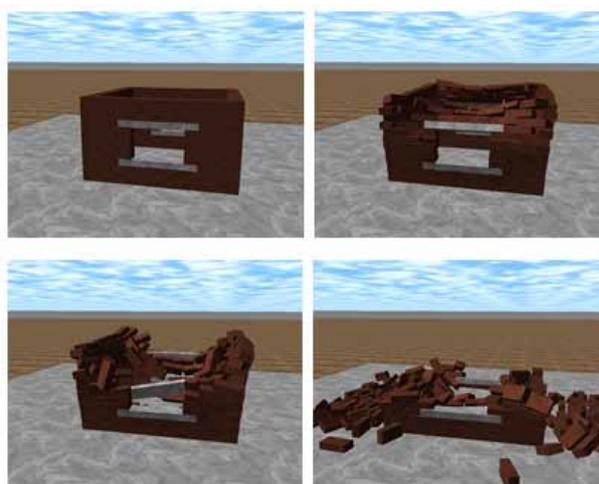


図1 煉瓦建物の崩壊シミュレーション

## 参考文献

[1] 耐震構造解析プログラム STERA\_3D

<http://iisee.kenken.go.jp/net/saito/steras3d/index.html>

技術情報誌アドバンスシミュレーションは、アドバンスソフト株式会社 ホームページのシミュレーション図書館から、【カラー版】がダウンロードできます。(ダウンロードしていただくには、アドバンス/シミュレーションフォーラム会員登録が必要です。)

## 多様化と遊び心

佐藤 文俊

東京大学 生産技術研究所 教授

アドバンスソフト株式会社様の設立 10 周年を心からお祝い申し上げます。今後益々のご発展を祈願いたしますとともに、引き続き本分野の牽引ならびに活性化にご貢献されますことを期待しております。

### 1. シミュレーション技術への期待

コンピュータシミュレーション技術に期待するという時期は疾うに過ぎている。頼りないと感じることも少なくなった。天気予報は生活の一部であるし、ピンポイント予報に至っては一次産業従事者が絶大な信頼を寄せている。災害シミュレーションを無視する人はいないだろう。特に意識していないが、交通シミュレーションの恩恵も受けている。弱い弱いと言われていた囲碁シミュレータの棋力も、いつの間にかトップクラス以外は勝つことができなくなった。

産業界でも、シミュレーションはもちろん無くってはならない道具である。そもそも、実物を代用品で置き換えた実験がシミュレーションの定義。以前から、モックアップや合成などのリアルな工程に加えて、コンピュータも使われてきたが、貧弱なメッシュや過度なモデル化を強いられたため、その役割があくまでも補助的であっただけである。しかし現在では、リアルな工程以上に詳細な情報を与え、自由度の高い実験を行えるコンピュータシミュレーションが製造業を中心に主役の座を務めている。

日進月歩のコンピュータの能力向上が、様々な分野のシミュレーションのバーチャル化を加速している。

### 2. 国際競争力

バブル時代、日本のスパコンは日米貿易摩擦のシンボルの 1 つであった。バブル崩壊直後に登場した地球シミュレータもアメリカに衝撃を

与えた。しかし、現在の日本のスパコンへは成功への賞賛の言葉こそあれ、センセーショナルな発言は見かけなくなった。むしろ中国の天河スパコンの登場に驚きを隠せないとする記事が多かった。国策としてのスパコン開発においては、アメリカによる一極支配、またはこれに日本を加えた 2 巨頭による覇権争いの構図が崩れ、多極化、パワーバランス化が進んでいる。

それを十分に見越したうえでのことと想像するが、周知のとおり、アメリカは自国が先導する co-array という仕組みを Fortran 言語の国際規約の中に組み込んできた。一般に、並列計算プログラムの性能が発揮できるか否かはプログラム側の責任に帰される。ところが co-array 仕様では、コンパイラ側が並列性能に関するかなりの要件を保証しなくてはならない。計算機アーキテクチャの設計にも大いに影響を与え、よりシビアな通信・メモリバンド幅性能が要求されることとなる。

また、計算律速が高々 1 カ所のシミュレーションには co-array タイプによる並列化の仕組みは無用だが、複雑な構造を持ち、力技が使えなかったシミュレーションにとっては福音である。すなわち、並列性能に劣ることが欠点であった欧米産の業界標準ソフトウェア群を、アメリカのスパコン上で復権させる戦略とみた。そんな大層な話かと思われるかもしれないが、これほどの財産を放っておくはずがない。

この予想が的を射たとき、日本はどのような戦略を以て迎え撃つのだろうか。

### 3. 百花繚乱

国策としてのスパコン開発には様々な意見があるものの、今後もスパコンをめぐる覇権争いは続くであろうし、国も強くこれを推し進めざるを得ないだろう。スパコン開発の多極化に伴

う超並列シミュレーションソフトウェアの標準化競争も始まっている。

このような時代にあって、シミュレーションソフトウェアの純粋な性能指向による生存競争は本道であり極めて重要ではあるが、そろそろ多様化の道も真剣に視野に入れるべきではないだろうか。多様化は、新たな価値の創生によって育まれる。いかにも日本らしいクールなシミュレーション「ソフト・パワー」とは、一体何であろうか。

日本文化の盛隆は、多様な人間の交流と新しい教育システムが浸透した時代に、タフで遊び心あふれる人材が担ってきた。筆者は、あれこれ思案を巡らせながら、来たるべき時期に向けた柔軟な人材の育成に微力を注いでいる。

## アドバンスソフトへの期待

篠島 弘幸

久留米工業高等専門学校 一般理科 物理科 教授

2002年に文部科学省の「戦略的基盤ソフトウェア開発」の実施と成果の事業化ということで設立なされたアドバンスソフト株式会社様が、この4月24日で10周年になるとのこと、一ユーザーの立場からでしかありませんが、心からお祝い申し上げます。国家の重要なプロジェクトの成果が確かに現実に実を結んだ成功例でありますアドバンスソフト株式会社様ではありますが、関係の皆様におかれましては、設立、立ち上げの頃から今に至ります10年という歳月は、いかばかりか、そのご苦労は察するに余りあります。そのご苦労の一端ですら分かっていないにも関わらず、ここではアドバンスソフト株式会社様が開発なされたソフトウェアのユーザーの一人として、今後の期待を少しばかり書かせて頂きたいと思えます。

開発を進めるとソフトウェアは、一般に内容は充実し、使い易くなります。特殊から汎用へ、より広くより深く、その考えに開発者は順化し、ソフトウェアは育ちます。こうして進化成長する最先端ソフトウェアですが、一方でユーザーは、案外特殊なままであったり、諸々の事情からハードを含めた環境が保守的であらざるを得ない場合も少なくはありません。ソフトウェアの開発や進化を考え直すというのではなく、勿論それは留め置いてはならないものでありますが、育てたソフトウェアの一部、機能を限った中での使用、各研究機関のハードウェア環境に応じた機能限定での使用等におかれましては、これまで以上の積極的なご対応を期待したいと思えます。加えて、その限定した仕様、機能が価格に反映され、少しでも安価に使用することができれば、研究費の削減が必然となる昨今、恩恵に預かれる日本の研究者は決して少なくはありません。

さて、震災後の日本では、シミュレーション

でなければ成しえない課題や分野が新たにいくつも問題として提示されたように思えます。人知をかけて解決しなければならない問題は新たな技術を必要とし、その技術の根幹には、科学の基盤が必要となるはずで。そうした研究では、分野や組織を越えた対応や取り組みが必要になることは言うまでもありません。設立10周年をお迎えになったアドバンスソフト株式会社様におかれましては、これまで培ってきたシミュレーション技術を礎にして、新たな一步を踏み出して頂くことを期待します。それによって生まれる新たなシミュレーション技術と優れたスタッフによって創出、サポートされる新しいソフトウェアが、多くの困難と課題を解決するであろうことを心から期待致します。

以上2点ほど、これまでお世話になったユーザーの願いとして、勝手ながらその期待を少しばかり書かせて頂きました。10周年をお迎えになった貴社の今後のさらなるご発展をあらためてここに祈念致します。

# シミュレーション技術への期待

澁谷 秀雄

埼玉大学大学院 理工学研究科 助教

## 1. はじめに

ガラスはレンズやミラーといった光学部品のみならず、液晶ディスプレイやハードディスク基板などにも使用されている。近年、家電製品のデジタル化・マルチメディア化に伴い、これらはさまざまな製品に使用されており、その需要は急激に増えている。

ガラス部品を製造する上で研磨工程は必要不可欠であり、その研磨剤にはレアアースである酸化セリウムが使用されている。最近、レアアース問題に関連して酸化セリウムの価格が急騰しており、製造現場を直撃している。このため、ガラス研磨の世界ではセリウム使用量の低減や代替砥粒の開発が急務となっている。

## 2. 現代の研磨加工

現代の半導体や光学部品に用いられる最先端材料にはナノメートルオーダーあるいはそれ以下のきわめて高い平滑性と形状精度ならびに原子レベルで変質層が無い無擾乱鏡面も必要とされている。これを実現する高精度研磨法として、微細砥粒で表面を微量切削する機械的作用に化学的作用を援用あるいは重畳させる化学援用機械的研磨が行われている。これは「ケミカル・メカニカルポリッシング」<sub>1</sub>、「ケモメカニカルポリッシング」<sub>2</sub>、「メカのケミカルポリッシング」<sub>3</sub>の3つに大別され、以下のように定義されている。

「ケミカル・メカニカルポリッシング」は研磨液の化学的エッチング作用と砥粒の機械的切削作用を複合させる方法である。「ケモメカニカルポリッシング」は研磨液の作用で加工物表面に生成した水和膜や酸化膜などを砥粒の切削作用で除去する方法である。「メカノケミカルポリッシング」は加工物と化学反応を生じうる軟質な砥粒を加工時に生じる力学的応力で加工物との化学反応を誘起して除去する方法である[1]。

## 3. 研磨におけるシミュレーションへの期待

須田らは異なる酸化物がナノサイズで分散した複合粒子を作製し、ガラス研磨の砥粒に用いている。その結果、それらの酸化物を単に混ぜ合わせただけの混合粒子と比較して、ナノ分散複合粒子は研磨速度や到達表面粗さを大きく向上させることを明らかにしている。これはナノ分散複合化によりガラス研磨に対してそれぞれの酸化物が持つ異なる作用が相乗的に作用していることを示している[2]。このことはガラス研磨に対して機械的あるいは化学的に作用する物質を組み合わせることで最適砥粒を新たに作り出す「砥粒設計」が可能であることを意味しており、セリウム使用量低減や代替砥粒の開発に大きな意味を持つと考えられる。しかしガラス研磨に対する各種砥粒材質の機械的・化学的作用はほとんど明らかとなっておらず、また実験的にこれらの作用を区別して見積もることは非常に困難である。シミュレーション技術でこれらの作用を定量化することができればそれは「砥粒設計」に対する指針になり得ると考えられる。

## 4. おわりに

近年、ガラス研磨において「砥粒設計」の可能性が示された。これはガラスのみならず、SiCといった機械的特性・化学的安定性に優れて加工が困難である材料にも有効であると考えられる。その際にシミュレーション技術は設計指針になり得ると期待している。

## 参考文献

- [1] 安永暢男, 高木純一郎: 精密機械加工の原理, (株)工業調査会, (2002)170
- [2] 本間隆行, 須田聖一, 川原浩一, 木下久美子, “CeO<sub>2</sub>-ZrO<sub>2</sub>-Y<sub>2</sub>O<sub>3</sub> ナノ複合砥粒のガラス研磨特性,” 精密工学会学術講演会講演論文集, Vol. 2011 秋季, (2011.09)

# 原子炉熱流動シミュレーションへの期待

高瀬 和之

独立行政法人 日本原子力研究開発機構

原子力基礎工学部門 熱流動研究グループリーダー

## 1. はじめに

計算機性能の飛躍的な発展とともに、スーパーコンピュータを利用して軽水炉内の複雑な二相流挙動を直接的に解析する手法の開発が行われている[1][2]。ここで、「直接的に解析する」ということは、物理現象に基づいて構築した数値モデルだけを使用し、試験データや二相流特有の経験則から導いた相関式等を極力使用しないことを意味する。このような機構論的な解析手法を原子炉設計に反映することによって開発期間の短縮や大幅なコストダウンが期待できる。一方、福島原発事故を受けて、シビアアクシデント時の原子炉内熱流動現象の詳細を数値的に明らかにする研究が始められている。シビアアクシデントによって溶融[3]した核燃料が事象の進展に伴って下方へと移行する現象を正確に予測することで、原子炉容器下部に蓄積される溶融核燃料の位置の特定が容易になり、効率的な廃炉技術の確立が期待できる。このような観点から、機構論的原子炉熱流動シミュレーションの現状と課題並びにアドバンスソフトへの期待について述べる。

## 2. 機構論的熱流動シミュレーション

### 2.1. 気液二相流解析の現状

図1に燃料集合体内の水-蒸気沸騰二相流解析の結果を示す。図中、赤は蒸気、青は水を表す。解析結果は、加熱開始点近傍で蒸気が発生し、後流に向かって蒸気量が增大することを示す。この傾向は中性子ラジオグラフィ（NRG）を利用した実験結果の傾向を良く再現している。

高精細画像処理技術の開発も行っている。二相流解析結果の可視化では、気相と液相の界面を正確に表示することが必要であるが、市販の可視化ソフトウェアでは混在する液滴、液膜、

気泡等の正確な画像表示は困難である。図2はレイトレーシング法を使って可視化表示したものであり、複雑な気液界面挙動のフォトリリスティックな表示に成功した例である。

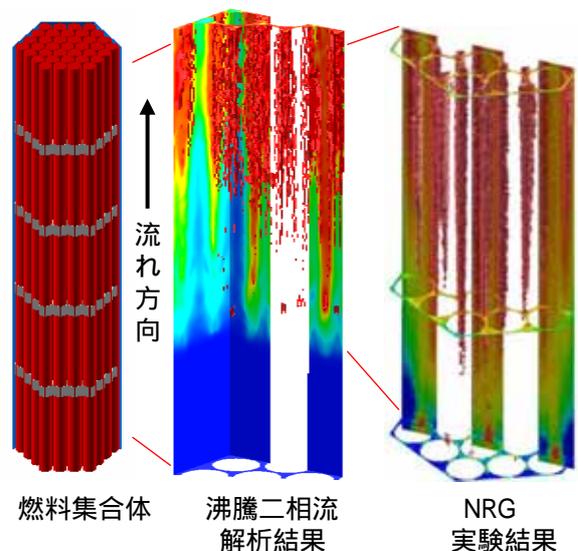
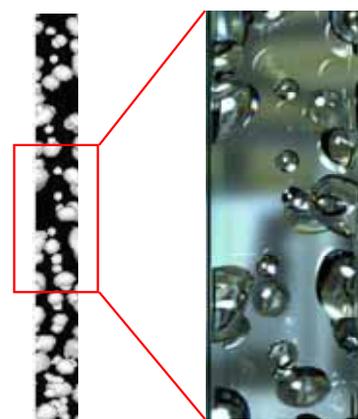


図1 燃料集合体内における水と蒸気の分布



市販の可視化  
ソフトウェア

レイトレーシング法による  
フォトリリスティック表示

図2 解析結果のフォトリリスティック表示

### 2.2. シビアアクシデント解析の課題

シビアアクシデントでは複数の事象が相互に関連するため、熱流動の現象を機構論的に取り扱うことは容易ではない。しかも、たとえ物理現象に則した機構論的モデルを開発できたとし

ても現状のスーパーコンピュータの性能では直接的に解析するは不可能である。そのため、MAAPやMELCORといったシビアアクシデント解析コード[4]では、現象を支配する幾つかのパラメータに対して相関式を用いた簡易的な解析が行われている。しかしながら、相関式は実験結果に基づいているため、実験データがない場合には高い精度の予測は困難である。すなわち、相関式に基づく解析モデルはすでに特性が解明されている現象に対してのみ有効であり、シビアアクシデントに伴う複合事象を有機的に評価するためには機構論的な解析手法の開発が必要である。IMPACT/SAMPSON[5]は軽水炉の定常運転時からシビアアクシデントまでの一連の事象を 11 個の独立モジュールを組み合わせさせて解析するコードであり、機構論的な手法を取り入れてはいるが十分に詳細とは言い難い。

### 3. 原子炉熱流動シミュレーションへの期待

原子炉における 3次元詳細熱流動シミュレーションを達成するためには、沸騰遷移に関する実用的な機構論的モデルの開発が必要であり、この開発をアドバンスソフトに期待したい。沸騰遷移は図 3 に示すように PWR では DNB、BWR ではドライアウトと呼ばれる現象である。PWR では、加熱面近傍に生じた沸騰気泡が熱流束増加に伴って増大し、加熱面全体を覆うことによって発生する。一方、BWR では加熱上面の液膜が熱流束増加に伴って消失することにより発生する。原子炉熱設計において炉心の熱的余裕を高精度で評価するためには、このような沸騰遷移の現象を正確に予測できる機構論的モデルの開発が重要な課題である。

一方、軽水炉の輸出に関してはハードとソフトの一括輸出が国際的な標準になりつつある。これまで利用していた RELAP や TRAC などの安全性評価解析コードが米国の国家戦略によって各国では自由に利用できなくなる事態が起きている。そのため、原子力安全基盤機構を中心に、日本版の軽水炉用熱流動安全性評価解析コードを開発する作業が始められている。この

開発に向けてアドバンスソフトが中心的な役割を担い、RELAP、TRAC、TRACE に代わる軽水炉用安全性評価解析コード[6]、並びに近い将来には MAAP、MELCOR に代わるシビアアクシデント解析コードの開発の中核として積極的に牽引していくことを強く期待している。

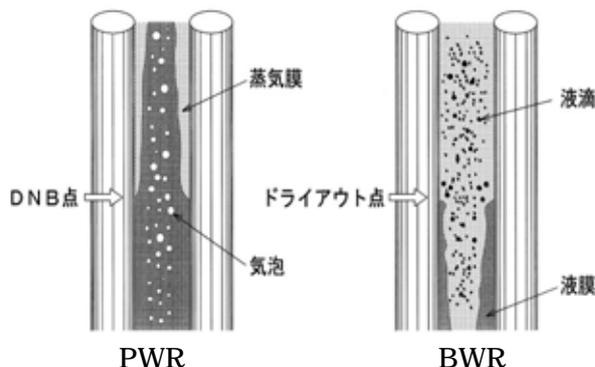


図 3 PWR と BWR における沸騰遷移[7]

### 参考文献

- [1] 高瀬和之, 吉田啓之, 原子炉熱流動シミュレーション, 計算力学シミュレーションハンドブック, 丸善, (2009) pp.110-117.
- [2] H. Yoshida, K. Takase, Development of Two-Phase Flow Correlation for Fluid Mixing Phenomena in Boiling Water Reactor, Computational Simulations and Applications, INTECH, (2011) pp.287-318.
- [3] K. Takase, et al., Numerical Visualization on Melting and Solidification of Micron-Sized Metallic Particles by Laser Irradiation, 溶接学会論文集, Vol.29, No.3 (2011) pp.43-47.
- [4] 例えば、原子力安全基盤機構、シビアアクシデント解析コードの整備に関する報告書、JNES/SAE07-069.
- [5] 例えば <http://www.iae.or.jp/group/07.html>
- [6] RIST ニュース、熱水力安全解析コードの開発に関する我が国と海外の動向, No.51, (2011) pp.30-42.
- [7] 日本原子力学会誌, 連載講座 核燃料工学の基礎 第 8 回, Vol. 47, No. 1(2005) p.43.

技術情報誌アドバンスシミュレーションは、アドバンスソフト株式会社 ホームページのシミュレーション図書館から、【カラー版】がダウンロードできます。(ダウンロードしていただくには、アドバンス/シミュレーションフォーラム会員登録が必要です。)

## シミュレーション技術への期待 未知の現象・事象の予知・予測

月森 和之

独立行政法人 日本原子力研究開発機構

次世代原子力システム研究開発部門 FBR規格・基準ユニット ユニット長

アドバンスソフト株式会社 設立10周年おめでとうございます。また、特集号への寄稿の機会をいただき光栄に思います。多少、解析システムの開発に携わった者として一言、シミュレーション技術に期待するところを述べさせていただきます。

さて、私がシミュレーション技術に今最も期待すること、それはやや漠としていますが、シミュレーション技術が「未知の現象・事象の予知・予測」に一層貢献することです。このような思いを強くしたのは、やはり東日本大震災です。自然の一撃に対して人間社会システムは、かくも脆弱な面を有している。また、ひとつの防御が機能するか否かでその後の展開は全く異なってくる可能性がある。シミュレーションを辞書で引くと「仮想現実」という意味が出ています。まさに現実のものとなる前に、あらかじめそれを想定して適切な防御策を講じることに、優れたシミュレーション技術が活かされることを期待します。そうは言っても、これは簡単なことではないとは思いますが。これまでのコンピュータシミュレーションは実際に起こった事象あるいは実験の忠実な再現、あるいはその延長での事象の理解にとどまる場合が多いように思われます。

計算機の性能も長足の進歩を遂げ、超大規模問題の解析や複雑な連成事象の解析への取り組みが進み、複雑な形状の対象についても非常に高い精度での評価が可能になったり、それまで説明できなかった現象が解き明かされたりしています。そこからさらに進んで、様々な自然現象から人工物であるわれわれの社会システムを防御する、あるいはそのような自然現象との調和を図ることを考える必要があるのではないで

しょうか。その場合、シミュレーション技術の高度化もさることながら、それらを駆使する戦略が不可欠と思われます。すぐ想起されることとして、たとえばイベントツリーのような形で、ひとつの自然界からの作用を受けて社会システムがどのように反応するか、その後の展開をシミュレーション技術を連携させて1つの仮想現実を造形し、その影響を評価することがあります。その中でネガティブな結果を回避するためには、何をすればよいのか、何が効果的なのかを分析し、今度は対策を講じた社会システムについて新たな仮想現実を描くということを繰り返して、自然界の作用に対する社会システムの安全性をよりロバストな方向に高めていく。これは思いつきにすぎませんが、言ってみれば汎シミュレーション的な技術の一層の進歩を願うものです。そして、これはシミュレーション技術が社会のリスク低減に貢献するひとつの形といえます。

アドバンスソフト殿は、多くの高度なソフトウェアパッケージを開発されるとともに解析サービスやコンサルティングなど幅広い事業を展開されていますので、上記のような観点から、多様なシミュレーション技術をさらに発展させるとともに、高度なシミュレーション技術を統括・駆使してソリューションを創出する上位システムの開発、ならびにそれに挑戦する気鋭の技術者・研究者を育成し、それをもって、社会への一層の貢献を果たされることを期待する次第です。

## シミュレーション技術への期待

出口 智如

株式会社 神戸製鋼所 機械事業部門 開発センター技術開発部

### 1. はじめに

計算機の実力の飛躍的な向上により、構造解析や流体解析を始めとするシミュレーションの大規模化や高速化、高精度化が進んでいる。この動きを受け、ものづくりの分野では、製品の信頼性や性能の向上に、シミュレーションが積極的に活用されている。本稿では、ターボ機械の一種である遠心圧縮機に関連したシミュレーション技術の期待について、簡単に述べる。

### 2. シミュレーション技術の適用と期待

遠心圧縮機の主要な構成要素を図1に示す。まず、高速回転する羽根車により圧力と運動エネルギーを上昇させる。そして、羽根車下流側の静止したディフューザーベーン（以下DV）とポリュート（スクロール）により、運動エネルギーを圧力に変換し、圧力を上昇させている。

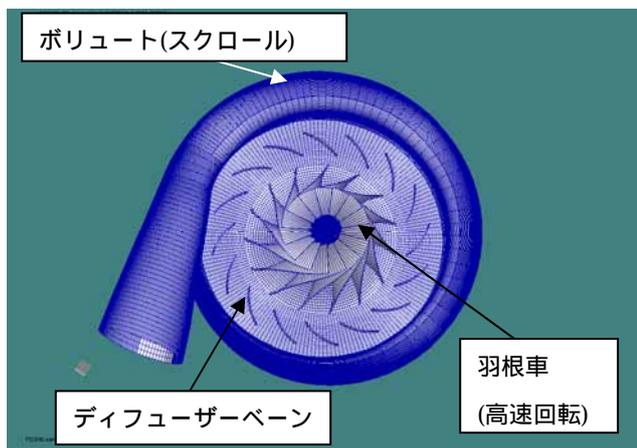


図1 遠心圧縮機の主要な構成要素

遠心圧縮機の高性能化を目的として、羽根車やDV、スクロールの形状の改善が、継続的に行われている。従来は、シミュレーションによる予測の精度や信頼性が十分でないため、実験を利用した手法を中心にして、形状の改善が行われていた。しかし、冒頭で述べたように、近

年計算機の実力が飛躍的に向上したため、構造解析や流体力学のシミュレーションの精度や速度が大きく改善されている。その結果、遠心圧縮機の高性能化に、シミュレーションを多用するようになってきている。

実験に対しシミュレーションは、精度や信頼性に劣るものの、次に述べる利点があり、今後とも活用が進むと考えられる。(1) シミュレーションの規模や内容にもよるが、実験よりも安価に早く結果を得られることが多い。(2) 原理的に対象とする物理現象の詳細を把握することが容易である。

これらシミュレーションの利点を踏まえた上で、われわれシミュレーションの使用者側からの期待を次に述べる。

#### 2.1. 高速化

設計の品質は、決められた時間内で、有用な情報をどれだけ取得できるかに大きく影響される[1]。したがって、他の条件が全く同じであるならば、シミュレーションの高速化により、有用な情報量が増すことができる。設計に有用な情報量を増やすことで、遠心圧縮機の高性能化が可能になる。実際の設計でも、計算時間が長いため、シミュレーションの活用が進んでいない場合も多いと考えられ、計算の高速化が期待される。

#### 2.2. 大規模化

現状では、計算時間だけでなく、計算の前処理や後処理に時間がかかるため、モデルを簡略化してシミュレーションを行うことが多い。例えば、図1に示した遠心圧縮機の場合であれば、ポリュートを省き、羽根車とDVの一部だけを対象にして定常の流体解析を行う場合が多い。簡略化したシミュレーションでも有益な結果は

得られるものの、より実際に近いモデルで解析を行う方が、より正確かつ信頼の高い結果を得られやすい。遠心圧縮機の場合であれば、羽根車とDV、ポリユートまでを対象とした非定常の流体解析を、実用的な計算時間で出来ることを期待している。

### 2.3. 複雑化

遠心圧縮機の場合であれば、静的な構造解析に基づいて、羽根車の強度を評価することが多い。しかし、実際の羽根車は変形し、流体力も作用する。そのため、羽根車の強度を正確に評価し、信頼性を高めるためには、FSI 解析（流体-構造連成解析）が必要となる。ただし、羽根車に非定常の流体力が作用するため、厳密な FSI 解析は、計算負荷が大きく、適用範囲は限定されたものとみられる。このような FSI 解析は、遠心圧縮機に限らずターボ機械全般の信頼性向上に寄与すると考えられ、その適用範囲拡大が期待される。

### 3. おわりに

遠心圧縮機に関連したシミュレーション技術の期待について、簡単に述べた。遠心圧縮機等のターボ機械の高性能化において、シミュレーション技術の役割は年々増している。シミュレーションソフトを使用するわれわれとしては、遠心圧縮機のような実際の製品により役立つシミュレーション技術を期待している。また、シミュレーション技術を活用するためには、われわれ使用者側の取り組みも重要である。アドバンスソフト株式会社殿をはじめとする各種ソフトウェアの開発者と共に、シミュレーションの高度化に取り組んでいきたい。

### 参考文献

- [1] E. N. Tinoco, "The Changing Role of Computational Fluid Dynamics in Aircraft Development," AIAA Paper 98-2512, 1998.

技術情報誌アドバンスシミュレーションは、アドバンスソフト株式会社 ホームページのシミュレーション図書館から、【カラー版】がダウンロードできます。（ダウンロードしていただくには、アドバンス/シミュレーションフォーラム会員登録が必要です。）

# シミュレーション技術への期待

内藤 正則

財団法人 エネルギー総合工学研究所 原子力工学センター部長

## 1. はじめに

「シミュレーション」という言葉の意味は、いわゆるコンピュータ・シミュレーション以外に、「模擬実験」や代数的に解を求める方法も含まれる。コンピュータ・シミュレーションとは、数値解析をコンピュータによって行うことであり、その解析対象は自然科学現象のほか、経済・社会科学分野における人間の振る舞いを含んだ現象も対象となる。ここでは、物理・化学現象（広義の物理現象）を対象としたコンピュータ・シミュレーションに焦点を絞って稿を進める。

## 2. シミュレーションの方法と限界

ある物理現象をコンピュータでシミュレーションするためには、まず対象となる物理現象を数式で表し（モデル化）、その数式を離散化するなどしてコンピュータで処理できるようにすることにより、プログラム（解析コード）を作成することになる。

解析コードの作成は、(1)どのような物理現象をどの範囲で、どのような体系を対象としてモデル化するか、(2)どの程度の精度が要求されるか、をまず理解することからはじまる。そして、物理現象を表す数式を解くために、対象とする領域を複数の小領域に分割して式を簡略化し、さらにその式を有限個に分けて（離散化）複数回解くというプロセスを、順を追って計算機が処理できるように変換する。離散化の方法には、例えば差分法、有限要素法、境界要素法などがあるが、これらはいずれも近似計算である。

自然科学現象は完全にはモデル化しきれないこと、モデル化で得られた数式そのものは近似式であることが多いこと、数値解法は近似計算であることから、「シミュレーションとは近似である」ことを理解しておくのが重要である。

解析コードは、モデル化の適用範囲を超えた計算であっても動作するケースが多いし、離散化の方法に依存する誤差が拡大しても結果が得られる場合も多い。「解析によれば」という表現だけで結果を示すことには意味がなく、その結果が妥当なものであることの検討が不可欠である。

## 3. 信頼される解析コードとは

解析コードには前述のような限界があるため、その利用に当たっては限界を定量的に理解しておくことが重要となる。また、解析コードを作成する際には、限界をできるだけ狭める努力が重要である。

前者の観点から重要なことは、Verification & Validation (V&V)の充実である。Verificationによって数値解法上の誤差やモデルの正しさ・誤差を把握し、Validationによって解析コードが目標とした物理現象を目標とした体系で、目標とした誤差範囲内で解を与えることを確認する。これが、解析コードの信用度を高める第一歩であろう。

シミュレーションの大きなメリットは、モデル化した物理現象の範囲内において、人間の生活感覚では理解・把握が困難な詳細な現象、あるいは「なぜそうなったのか」という現象解明に有力な解を与えてくれることにある。この意味で、結果の可視化も重要である。可視化技術によって、解析結果の時間軸を拡大あるいは縮小したり、空間の一部を切り出して拡大表示したりすることにより、複雑現象を人間の生活感覚で理解することが可能であり、物理現象を解く部分（ソルバー）に加えて、今や一体不可分な技術である。

## 4. 今後の技術開発に期待すること

前述のように、シミュレーション技術は、(1)

対象とする物理現象を数式が表すモデル化、(2) 数式をコンピュータ処理で解くための数値解法、(3) 結果の可視化技術に大別され、いずれも技術開発が必要である。そしてシミュレーションが大規模かつ複雑な現象を扱うほどコンピュータハードウェアの性能向上が大きな鍵を握る。例えば、高度なモデルを用い、最新の数値解法により、最新のコンピュータハードウェアを利用して行われている気象予測においても、それが絶対的に正しいと信じる人はほとんどいない。現実には、「おおよそ、この程度」という理解で納得している。この例でいえば、気象予測の精度を上げるには、上記(1)と(2)の高度化・高精度化が必須の課題である。ハードウェア性能の向上に伴って、流体解析の分野でいえば、ナビエ・ストークスの式を直接解く手法をより大規模体系に適用することも可能となろう。モデル化にあたって、比例係数のような調整可能なパラメータは解析結果のユーザー依存性の要因ともなる。解析結果がそのユーザーによって異なることは、一体どれが正しいのかという議論を生み、このようなユーザー依存性を排除することも解析コードの信頼度を上げ、利用を促進する上で重要である。

# シミュレーション技術への期待

中村 秀夫

独立行政法人 日本原子力研究開発機構 安全研究センター

## 1. はじめに

原子力は今、深刻な困難に直面している。昨年 3 月 11 日の震災による福島第一原子力発電所の事故は、回避すべき最悪のシビアアクシデントとして未曾有の被害をもたらし、多くの教訓を残した。今後、原子力発電を行う場合には、わが国に限らず、事故の発生防止策を見直し、徹底した実施を図り、万一事故が発生しても進展を回避・回復させる炉設計や運転員操作の妥当性について、十分な確認が必要であろう。

全ての軽水炉は設置許可の段階で安全解析による設計の妥当性確認がなされているが、今回の事故は、これまでの安全解析の想定を超えた内容があった。津波によって炉心の冷却や状態監視に必要な電源系統と最終ヒートシンクを同時に失い、バックアップの不十分さが事故をシビアアクシデントへ進展させた。

軽水炉は巨大な設備である。わが国の安全解析では、その巨大設備をごく少数のコンポーネントで代表させてノード分割し、本来は 3 次元で生じる複雑な蒸気・水の二相流動や炉心での沸騰伝熱を極めて単純化して解析する Evaluation Model (EM) コードが用いられている。これは、原子力発電の黎明期である 70 年代当時の計算機の演算速度や使い勝手に対応した方法だが、現象の現実的な再現が難しい部分があるため、保守的な仮定を設けて結果の保守性を担保している。

一方、米国スリーマイル島 (TMI) 原子力発電所 2 号機で 1979 年に発生したシビアアクシデント以降、事故現象の現実的な表現を目指した最適評価 (Best Estimate, BE) コードが各国で開発されてきた。わが国では開発されていないが、震災直前に、ソースコードが開示されないと話題になった米国の RELAP5 や TRACE、仏の CATHARE、独の ATHLET、フィンラン

ドの APROS などが含まれる。ただし BE コードは結果に不確かさを持つため、結果に保守性を担保するために、統計的に不確かさの範囲を示す Best Estimate plus Uncertainty (BEPU) 法を併用する必要がある。本手法については、米国原子力規制委員会が開発・採用する CSAU 法に倣った原子力学標準 [1] が作成されているが、わが国の安全規制には未採用である。

非常に長い前置きとなったが、今回の福島第一原子力発電所の事故に限らず、軽水炉に生じる可能性のある様々な事故を想定して、冷却材の蒸気・水二相流動と炉心冷却の状態を正確に表現することにより、事故の発生や進展の防止策の検証に用いる伝熱流動シミュレーション技術への期待を述べる。

## 2. シミュレーション技術の現状

軽水炉における事故や異常過渡に対峙するシミュレーション技術の最も重要な役割は、現象を現実的に予測して、安全基準に対する設計の妥当性の確認に供することである。このため、実証試験や模擬実験を通じて模擬精度が事前に検証・確認される。スループットの飛躍的な向上に伴い、コードの開発・検証において多岐の方法をより早く検証できるようになってきたため、より大規模かつ精緻化された解析手法の開発と、炉設計のより高精度な安全確認が可能になりつつある。

このとき、安全解析に関連して、現象を最も現実的に再現する最近の解析手段として、単相流動を扱う Computational Fluid Dynamics (CFD) 法や 3 次元二相流動解析手法が挙げられる。例えば OECD/NEA では、これらを原子炉の安全問題に用いる際のガイドラインなど [2] がまとめられ、関連したベンチマーク [3] や国際ワークショップ [4] が開催されている。ただし、

これらの手法は局所の現象模擬には優れるものの、軽水炉の全体にわたる事故現象を詳細に模擬・再現することは、「京」計算機を用いても現実的ではない。

一方、事故現象を時系列で模擬する BE 手法については BEPU と併用し、安全規制に用いられている国もある。これは、各国の BE 解析コードは良い現象模擬性を持つと考えられているからだが、昨年最終報告が出された ONED/NEA による BEMUSE タスク[5]では、PWR の大破断 LOCA<sup>\*)</sup>を模擬するベンチマークにおいて、再冠水時の燃料温度の時系列変化や最高燃料被覆管温度 (Peak Cladding Temperature, PCT) に大きなばらつきを生じた。このばらつきは異なる BE コード間で顕著であり、コード毎のユーザー効果によるそれより大きかった。さらに、PWR を模擬する LSTF 実験[6]によって JAEA が主催し 15 カ国が参加する OECD/NEA 国際共同研究プロジェクト ROSA-2[7]でも、中口径破断 LOCA 実験の実験前 (Blind) 解析において PCT に大きなばらつきを生じた。ある参加機関は、BEPU による PCT のエンベロープが実験結果を包含できなかった。

これらの結果は何を意味するのであろうか？ 結局、時系列で大きく変化し、相互に影響を及ぼし合う事故現象の再現においては、現象の発生や分岐の条件を含む多くのモデルの特性や誤差が、結果として炉心の水位や冷却の模擬における大きなばらつきとして表れたものと思われる。コード内のモデルや相関式およびそれらの組合せ (気液相間摩擦、伝熱パッケージ、等々) において、開発や検証に用いられた実験の条件範囲やスケージングの考慮の条件が異なることで、新たな不確かさを生じさせている可能性もある。一方、安全解析は全て参照データのない Blind 解析であり、解析結果でのこの様なばらつきは BE コードを用いた許認可解析に

も生じる筈である。現実には、実機の事故現象を全て実スケールで検証できる実験設備は存在しないため、コードや個々のモデルの性能検証において、如何に実サイズへの外挿適用性を確認するかが、解析コードの V&V に際する 1 つの重要な検討課題であると思われる。

### 3. シミュレーション技術に期待すること

このような課題を解決して、どの様な炉でも精度良く現実的な解析結果が得られる BE コードを整備することが、本来の目標であろう。そのための方策として、以下の 3 点を考える。

- (1) 局所の実スケール現象を十分な精度で再現できる CFD や 3 次元二相流動解析手法の開発と、現象のスケージングを考慮した「CFD グレード」実験データベースによる検証。
- (2) 高精度な BE コードの開発・整備と(1)の成果を用いた同コード用のモデルや相関式の開発・検証、ならびに BE コードの不確かさを低減する手法の確立。
- (3) これらの解析手法が安全解析や安全確認に継続的に用いられると共に、解析および実験の技術者や研究者が(1)や(2)によって継続的にコードの性能向上を行う体制を確立。

このうち(1)と(2)は、これまでの取り組みと本質的な差はないようにも見える。しかし、現在のわが国では(3)において大きな違いが生まれつつある。それは、規制支援機関である JNES がわが国独自の BE コードの開発を開始し、規制機関は開発されるコードを利用すると思われる点である。その結果、「導入コードの部分的改良と利用」というスタイルから脱却し、全ての性能に責任を持つこととなる。これによって(1)と(2)への対応が継続的になされ、福島事故の教訓やアクシデントマネジメント策を十分に考慮した世界最高水準のコードが、産や学とも協力しつつ開発されると期待している。

### 4. まとめ

わが国の軽水炉用安全解析コードは、EM 手法を含めて海外からの導入で賄われている。今

<sup>\*)</sup> LOCA: loss-of-coolant accident、配管など圧力境界の破損による冷却材喪失事故

後、わが国独自の新たな熱水力 BE コードが開発されると共に、CFD や 3 次元二相流動解析手法の開発が現象のスケーリングを考慮しつつ進むことで、安全向上の確認を精緻に行い、事故の確実な防止に貢献することを期待する。

### 参考文献

- [1] 統計的安全評価の実施基準：2008 (AESJ-SC-S001：2008), 日本原子力学会
- [2] 1) NEA/CSNI/R(2010)2 “Extension of CFD Codes Application to Two-Phase Flow Safety Problems - Phase 2”,  
2) NEA/CSNI/R(2007)13 “Assessment of CFD Codes for Nuclear Reactor Safety Problems”,  
3) NEA/CSNI/R(2007)5 “Best Practice Guidelines for the use of CFD in Nuclear Reactor Safety Applications”
- [3] NEA/CSNI/R(2011)5 “Report of the OECD/NEA - Vattenfall T-Junction Benchmark Exercise”
- [4] NEA/CSNI/R(2011)14, Proc. of the Workshop on CFD for Nuclear Reactor Safety Applications (CF4NRS-3), 2010, Bethesda, MD, USA
- [5] NEA/CSNI/R(2011)4 “BEMUSE Phase 6 Report - Status report on the area, classification of the methods, conclusions and recommendations”
- [6] JAERI-Tech 2003-037 (2003) “ROSA-V Large Scale Test Facility (LSTF) - System Description for The Third and Fourth Simulated Fuel Assemblies”
- [7] <http://www.oecd-nea.org/jointproj/rosa-2.html>

# シミュレーション技術への期待と問題点

奈良 重俊

岡山大学 大学院自然科学研究科 産業創成工学専攻

## 1. はじめに

アドバンスソフトの鳥羽さんから特集号への寄稿を頼まれ、「シミュレーション技術への期待」か「アドバンスソフトへの期待」について何か書いてほしいとのことでした。さて、ユーザーとしていろいろと思うところはあるものの、ないものねだり的なことを書いてもしょうがないので難しいですね、とお答えしたのですが、熱心なご要請をいただいたので雑感でよければと拙い文章を書くことにしました。

私が現在研究室で大学院生とともに研究を行う上で使用中のソフトウェアは「BioStation」という、第一原理計算に基づく高分子解析ソフトウェアです。このソフトは数年以上前に文部科学省により行われた国家プロジェクトの結果生み出された成果をもとに、それに参加しておられたアドバンスソフトがそれを受けて商品化したものと聞きました。

その計算手法は従来型の第一原理計算に「フラグメント分子軌道法」と呼ばれる新しい手法を加え、計算時間の短縮化などの改良を加えて商品化したもののようです。

以下に、研究室でそれを実際使用して生体高分子の解析を行ってきた、既に就職した教え子を含めて4代にわたる大学院生たちと私との共同研究の過程でつれづれに感じた事柄を記したいと思います。

## 2. シミュレーション技術に関する一般的期待

昨今のコンピュータ技術の発展は目を見張るほどのものがあることは周知の事実です。その結果 IT (Information Technology) と呼ばれる技術が産業界を席捲しつつあり、例えば自動車産業では昔は自動車会社の開発部門が風洞実験装置を持っていて試作品について空気の流れの実験を行っていましたが、現在はほとんどが計算機シミュレーションあるいは計算機実験によって事例

を絞り込むのが普通になっていると言われており、そうした事柄があらゆる分野に浸透しつつあるようです。

そんな中で、シミュレーション技術の占めるウエイトは大きなものとなっています。先に述べた(生体)高分子関連分野でも例外ではありません。特に創薬分野、材料設計、開発に伴う最適化設計、などにシミュレーション技術が大きく役に立つことが期待されています。

ただ、それらシミュレーションを実施するためのソフトウェアが著しく高価な場合が多く、これが一般ユーザーにとって悩みの種です。十分な資金を保有する大企業ならばいざ知らず、大学等の研究機関では零細な予算しかないところが多く、購入の動機はあっても手が出ないところが多いと思われま

す。従って「より良いシミュレーションソフトウェアをより安価に」というのが一般ユーザーとしての偽らざる期待と言ってよろしいかと思われま

## 3. シミュレーションに関する信頼性

さて、先にあげた「BioStation」という、第一原理計算に基づく高分子解析ソフトウェアに例をとって技術的な側面からの問題点を(ただし雑感として)少し考えてみましょう。

生体高分子は言うまでもなく、原子から構成されており、その分子量は極めて大きいことが知られています。こうした系の構造安定性を第一原理的に研究しようとした場合、まず原子配置を固定した状態で、各原子に属する電子が分子全体でどのような電子状態になっているかを調べる必要があり、そのためには与えられた構造のもとでの電子に関するシュレーディンガーの波動方程式を解かなくてはなりません。

「第一原理的に」という言葉の意味は、構成原子の原子番号や電子の電荷、質量、プランク定数など、物理学の基本定数以外に恣意性のあるパラメータを使用しないで計算するという事です。したがってそういう条件下で波動方程式を解くということは数値計算的には大変な困難をもたらします。量子力学を専門とする（あるいはそれを主とした研究手段として用いる）研究者から見るとどのソフトウェアにも「第一原理計算」と銘打っていてもおおかれ少なかれ近似は導入されています。その典型的な事柄の1つは「電子相関」と呼ばれる課題なのですが、これは本稿で与えられたスペースと内容にはそぐわないので記載は省略したいと思います。それらの問題をとりあえず置いておいても、当面の近似の良さと計算時間との「あちら立てればこちらが立たず、両方立てれば身が持たず」的ないわゆる trade-off の関係が現実問題として押し掛かってきます。そうした問題に加え、多くの場合静的な構造とは別に我々の住む世界は有限温度下であり、また様々な他の物質に囲まれて生体高分子（タンパク質）が機能を発揮するわけですから、当然その環境化でのダイナミクスを知ることが必要となります。これはいわゆる分子動力学（Molecular Dynamics: 略して MD）と呼ばれる事柄なのですが、高分子化合物（タンパク質）について MD を第一原理計算をもとに実行するのはほぼ不可能な段階です。活発にこの分野の研究を行っている方々には申し訳がない言い方ながら、分子量が巨大な高分子化合物に関する多くの MD は信頼性を犠牲にした方法を導入してとにかくやってみる（？）といった段階にあると思われま

#### 4. おわりに

ずいぶん勝手ないいびんを並べてきて顰蹙を買う結果となっているように思いますが、シミュレーションの信頼性を標榜するには極端な言い方をすれば、それに相応するお金と時間をかけなくてはならないということになり、零細な研究者には少々（おおいに？）残念な思いが出てきます。

それが今ふうの大衆化された研究の世界の流れであるのかもしれませんが、良いアイデアと大きな工夫とをもって（金銭的にもハード・ソフト的にも）比較的小規模な研究で興味深い研究を進めて行こうとする人々もまだまだいると信じたいと思います。

そういう人々のためにも「より良いシミュレーションソフトウェアをより安価に」という企業努力を今後も惜しまずに進めてゆかれることを祈念してやみません。

拙文で恐縮ながら、このあたりで筆を置くこととします。

## コンピューターシミュレーションの将来 ~ 「フェッセンデンの宇宙」型CFDのすすめ[1] ~

能見 基彦

株式会社 荏原製作所 風水力機械カンパニー 開発統括部 流体解析グループ長

海外出張が特に多いという訳ではありませんが、見知らぬ外国の地で、博物館などを見学することは楽しいものです。その中でも科学技術関係の博物館は、興味深い展示物が多く、時の経つのも忘れることがあります。現在、コンピューターのお世話にならない日はなく、電子メールやワードプロセッサ、表計算から CFD (Computational Fluid Dynamics) まで、多様な形で関わってきますが、その源流も博物館でお目にかかれます。イギリスの科学博物館では、機械式で計算機を作ろうとした有名なチャールズ・バベッジの階差機関を見ることができます。またワシントンの博物館では、ENIAC(の一部)を見学できました。ソフトウェアは、現在の博物館にはそぐわないかもしれませんが、各種の文献で、先人の苦闘を垣間見ることができます。面白いのは、19 世紀末か 20 世紀初頭に、ある研究者が手計算で流体の差分計算を実施したエピソードです。差分格子の数だけ、計算者を配置して、計算者間でデータを受け渡ししながら解析したということです。そのパイオニア精神と着想には胸を熱くするものがあります。日本では、東京大学の川口光年先生(後に慶応大学)が、タイガーの手廻し式機械計算器を、約 1 年半回し続け、円柱の後流を数値解析された有名な研究があります[2]。今から 60 年前に、プリンターすら使わない手作業で数値解析を行う大変さは、想像を絶するものがあります。恐らくは、失敗を怖れない、若者の無謀な情熱のなせる技だったのではないのでしょうか? 私も 1980 年代の半ばから、流体数値解析にかかわりましたが、現在の PC クラスタで乱流解析を行う日常と比べると隔世の感があります。産業機械メーカーからの視点では、CFD は、今では詳細な要素技術研究を除けば、日常的な道具に

なったと言ってよいかと思いますが、この時代に、新たに CFD に取り組まれる若い方は、昔なら夢のような道具を使える反面、パイオニアが試行錯誤を繰り返していた頃の熱気を肌で感じる機会が失われてしまい気の毒・・・などと言ったら言いすぎでしょうか? だいが、回り道をしてしまいました。ここから先は、何か将来研究のヒントくらいにはなるかと思い、妄想を書き連ねてみます。現在の CFD の高速化、大規模化は並列計算技術の賜物であることは間違いのないでしょう。こちらは、ある種の指数則で順調に進歩が継続しているようです。一方、その解くべくモデル式の方は、19 世紀に作られた NS 方程式で、連続体近似の範囲では完成したように見えますが、混相流や希薄流、マイクロ流れの領域ですと、まだまだ未開のジャングル状態のように思えます。また NS 方程式の範疇でも、乱流域になると、とたんに計算が困難になります。特定の課題毎にモデル式を作り、パッチワークのように全体を覆っていかうとする今のやり方では、結局のところ、例外が多すぎて、全体は覆えない懸念があります。そのアンチテーゼとしては、ボトムアップ戦略が有効そうです。量子力学計算とか、分子動力学とか、DSMC (Direct Simulation Monte Carlo) や格子ボルツマン法、これもレベルがさまざまですが、今後ますます重要性が上がっていくことでしょう。こういった観点から、第一原理計算や量子化学計算から連続体の CFD や構造解析まで一社内で手がけられている、アドバンスソフトさんの方針は注目に値するのではないのでしょうか? もちろん、量子や分子のレベルの解析では、いつまでたっても連続体に行き着かないという批判は、ここ数十年は正しいでしょうから、その間のつなぎ技術として、ボトムアップと連

続体のハイブリッド解析が、しばらくは重要な技術となるでしょう。一方、果てしなく拡大していくコンピューターの並列化の波は、どこまでいくのでしょうか？現在、通常のCFDでは、対象領域を格子で分割し、モデル式を離散化した形で数値計算します。並列計算では、対象領域をCPU単位で分割するというものですが、その行き着く先は、格子一個に対しCPUという姿でしょうか？（通信時間ロスの問題はさておき。圧縮性流体解析なら通信速度を局所音速に比例させる？）いわばインテリジェント格子とでも言うべき状態ですが、そこまでいくと、CPU自体が媒体粒子と化して、擬似連続体的な状態ともみなせます。一方、擬似連続体という言葉 키워ドにすれば、離散化したモデル式を計算で解くのではなく、仮想空間において、電子ではない媒体を利用して、離散化などない「正しい」場に境界条件と初期条件を与えて、後は勝手に振舞わせてその状態を観察するというのが、究極の、理想の姿のように思えます。どのような媒体ならそれができるのか？クォークなのかニュートリノなのか？これは実験ではないかと言われれば、そうかもしれません。（実験とは、十分細かい格子と完璧な乱流モデルを用いた解析結果であるという、内輪のジョークがあります。）もちろん、完全にこうなるとは予想しないまでも、何かこの手のアナログ的な手法が、将来の開拓分野になるのではないかと妄想しています。話が脱線しすぎましたが、読者諸兄、特に若い方に対しては、無謀なことを、ぜひお考え下さいと、お伝えして筆をおきたいと思います。

#### 参考文献

- [1] エドモンド・ハミルトン, “フェッセンデンの宇宙,” 早川書房ほか邦訳, (1937)
- [2] 川口 光年, “数値解法との出会い,” 日本機械学会誌, Vol. 87/No.785, (1984.04)

# デジタルエンジニアリングの動向と今後のシミュレーション技術への期待

畑田 敏夫

東京大学生産技術研究所 革新的シミュレーション研究センター 特任教授

## 1. はじめに

昨年国産のスパコン「京」(K computer)がピーク性能 10 ペタ・フロップスを達成して世界一の座を奪還したことに象徴されるように、わが国における高性能スパコンの利用環境は格段に充実してきた。これにより HPC (High Performance Computing) の領域におけるシミュレーション技術の様々な目的での本格的活用の時代が到来した。ここでは、このような状況下でのものづくり分野を対象とした今後のシミュレーション技術への期待について述べる。

## 2. デジタルエンジニアリングの動向の概観

IT を活用したものづくり、すなわちデジタルエンジニアリング (以下 DE) はわが国においても 1990 年代から急速に発展してきた。産業界における DE 導入の狙いは、製品開発プロセスのローカル最適化からトータル最適化へと移り、21 世紀に入るとイノベーションの創出が加わった。この経緯の中での周知の知見として、製品開発上流工程において製品の作りこみを十分に行うことがトータルコスト最小に繋がるというフロントローディング (Front-Loading) の考え方がある。この結果 DE における CAE (計算科学シミュレーション) の役割の重要性は飛躍的に増大し、その利活用が急激な広がりを見せてきた。現在では、設計が一通り終了した段階での検証作業の効率向上 (実験の代替) は勿論、新規アイデアの創出から、それを利用したモジュールレベルの最適化さらには製品全体の最適化という最上流での利用 (アップフロントローディング) にまでシミュレーションの貢献範囲は拡大しつつある。

## 3. シミュレーション技術への期待

### 3.1. 多様な目的に対応したシームレスな解析環境の実現

近年、計算機の処理能力は 1,000 倍 / 10 年という著しいスピードで向上しており、前記のような多様な用途にもリーズナブルな時間に対応できる計算機リソースが整備されてきた。これにより、シミュレーション技術には今後の主題となるものづくりイノベーション加速の主役として大きな期待が集まりつつある。このような期待に応えるためには、ソフトウェアに実装される機能についても各プロセスの目的に適ったものが用意される必要が出てきた。それは例えば、革新的アイデアの創出にはその源になる極めて精緻な解析、形状最適化時には多くのパラメータサーベイを行うための超高速解析、設計の検証時には製品全体の特性を正確に把握するための超大規模高精度解析、等々といったものである。これらの解析は設計を練り上げる過程での適確な判断と設計完成度向上のために必要な一連のプロセスであり、データインターフェイスの充実をはじめとするシームレスな解析環境の実現が今後益々重要な課題となるであろう。

### 3.2. HPC 対応ソフトウェア利活用基盤の整備

上記の解析環境を構築する上での前提になるのが、高・超並列スパコンの性能を最大限に引き出せる先端的シミュレーションソフトウェアの開発・実用化である。これに対する国家的施策の中で、2002 年度より開始された東京大学生産技術研究所 革新的シミュレーション研究センター (現在) を中核拠点とする産官学連携プロジェクト (文部科学省) では、当初より “先端性” と “実用性” を両立させるという極めて挑戦的な目標が掲げられてきたという点で他に

例を見ない。その成果としてバイオ、ナノを含む広い意味でのものづくり分野を対象とする基盤ソフトウェアが開発されフリーウェアとしてインターネット上で公開されてきた。2011年度までのそのダウンロード総件数は約8万件に達しており知名度が向上しつつある中で、ライセンス取得ベンダーによる産業界へのビジネス展開も広がりを見せてきている。

一方、2011年度より本格研究が開始されたHPCI戦略プログラム（文部科学省）では、研究成果普及施策の一つとして、図1に示すHPC/PF（High Performance Computing Platform）の開発が進められている。このHPC/PFは大きく分けて、ものづくりに必要な基盤アプリケーション群とそれを効率的・効果的に活用するためのデータベースの2システムからなる。ここに実装されるコンテンツには産業界ユーザーの利活用上の要望が反映されており、一般の技術者が先端的アプリケーションを自在に使いこなすための基盤として期待が大きい。

#### 4. おわりに

世界のものづくりの指向がコンセプトドリブン型に移行しつつある中で、わが国の今後のものづくりには、特徴である比類なき高品質設計力に加えて新しい付加価値創造力の抜本的強化が求められている。主役となるシミュレーション技術には、計算機利用環境のパラダイムシフトに呼応したアルゴリズムの導入は元より、今後新しい価値創造を加速するための機能の更なる究明・増強が要求されることになるであろう。

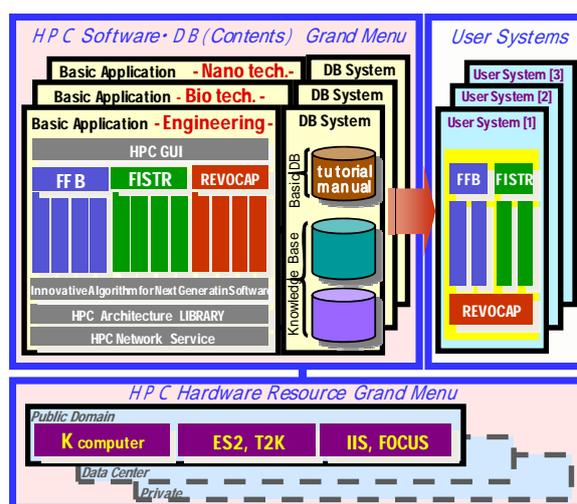


図1 HPC/PFの基本構造

技術情報誌アドバンスシミュレーションは、アドバンスソフト株式会社 ホームページのシミュレーション図書館から、【カラー版】がダウンロードできます。（ダウンロードしていただくには、アドバンス/シミュレーションフォーラム会員登録が必要です。）

## シミュレーション技術への期待

林 眞琴

茨城県 企画部

## 1. ワールドワイドでのギガコンペティションにおける製品開発動向

BRICS などの新興国の台頭により世界経済における産業競争は一段と厳しさを増している。それに加えて昨年来の円高が日本の産業界にとっては非常に強い逆風となっている。世界的競争時代における製品開発とモノ作りは、

- 1) 大量生産から多品種少量生産へ
- 2) 単機能から多機能・高性能・複雑系システム製品へ
- 3) 先進先端技術をベースにしたコンセプト設計、すなわち、価値創造型製品の先行開発
- 4) 短寿命製品の超短期開発（特に情報機器）
- 5) 製品寿命を考慮した限界設計（自動車・家電）
- 6) 資源枯渇と環境に配慮したトータルライフサイクル設計（運用・保全・リサイクル・リユース・廃棄対応）

を考慮したものでなければならなくなっている。

このような中で、設計技術の世界潮流は、

- 1) Design by Rule から Design by Analysis へ（物理現象のシミュレーションによる設計）
- 2) 局所最適化から全体最適化へ
- 3) 要素解析から全体丸ごと解析へ
- 4) 個別解析から弱連成解析へ

となりつつある。規格・基準に則った設計ルールに従った Design by Rule が依然として多くなかで、先端技術製品は高性能なコンピュータによるシミュレーションに基づく Design by Analysis に頼らなければ設計できないほど、技術が高度化している。この Design by Analysis という言い方は最近では Analysis Lead Design (ALD: 解析主導設計) に変わっているようであるが、その本質は変わらない。スーパーコンピューティングや分散コンピューティングによる高度解析支援による設計生産システムの開発が望まれるが、製品が高度化、複雑化す

ればするほど「京」コンピュータのような大規模解析が可能なコンピュータに頼らざるを得ない。コンピュータの高性能化はエンドレスの面があるが、従来のコンピュータでは、局所最適化や要素解析に留まっていたが、計算速度の飛躍的な向上とメモリ容量の爆発的な増大により、全体最適化や全体丸ごと解析も可能な時代に突入しつつある。ただし、解析の専門家ではないので正確に言うことができないが、最適化に関してはエンジンの飛躍的な性能向上が必要である。現在のエンジンでは計算回数が多すぎ、試行錯誤的な解析に過ぎないと思われる。個人的な見解であるが、例えば、タグチメソッドでは極めて少ない計算回数で合理的に目的解を得ることができるので非常に有効ではないかと考える。タグチメソッドを取り込んだ解析エンジンの開発に期待したい。

高度化する製品開発で最も重要な問題は連成解析である。例えば、最新鋭機器ではないタービン発電機であるが、小型低コストに対する要求が非常に厳しい。発電機の設計に必要な技術はまずは電磁場であるが、小型化のためには、界磁コイルに大電流を流さなければならない。それによる発熱を抑えるためには高性能な冷却システムが必要である。発電機にはロータがあり、その回転振動を抑える構造が要求される。最終的には騒音を抑え、高い構造強度信頼性を確保しなければならない。つまり、旧来の機器であるタービン発電機では、電磁場、熱、流体、振動、構造、音という多くの解析技術を駆使しなければ製品設計ができない。当然、Trade-Off の関係になる factor もあり、最適設計するためにはこれら多数の設計パラメータの連成解析が必須となる。流体と構造という 2 つのパラメータだけの場合には、強連成解析が可能で、単一ソルバーで流体と構造に関する方程式を同時に

解ける。しかし、陰解法を採用した場合にはマトリクスは非対称で、かつ、大規模となり、まだ、実製品レベルでの解析はできないのではないかと思われる。まして、電場、磁場などが入った複合的な連成解析は不可能である。そこで、東京大学生産技術研究所が主体で開発を進めてきた「革新的シミュレーションソフトウェアの開発」では、電磁場・熱・流体・構造・振動・騒音などの連成事象を汎用ソルバーを使って弱連成解析することが試みられた。この汎用ソルバーを用いる手法は計算時間はかかるが確実に解析できる強みがある。弱連成解析では、一方向連成と双方向連成が可能であり、連成の強さや物理事象に応じて選択すればよい。ただし、非線形性の強い問題ではデータ交換のタイミングが解析結果に大きく影響するので注意が必要である。また、3つ以上の物理事象が複合している場合には、連成の解法手順をどのようにするかのアロリズムの確立が必要である。

2. 理想的な DE 設計システム

コンピュータによるシミュレーションを駆使した理想的な DE(Digital Engineering)設計システムを図1に示す。3D-CAD のデータから自動的に CAE モデルを作成し、汎用ソルバーを用いて、弱連成解析を行う。解析結果は目的関数に応じて評価し、最適化を進める。評価においては設計知識や事例 DB を参照する。最適化の過程で得られた修正案に従って CAE のモデルを変更し、改めてメッシュモデルを生成する。この過程を繰り返して最適化が完了すると、解析モデルを CAE/CAD モデル変換して 3D-CAD システムに戻す。この第1次最終モデルを元に性能とコストの評価を行い、問題がなければ、最終的な設計図書の作成や、実際のモノ作りのための 3D/2D 図面を作成し、生産手配に移る。

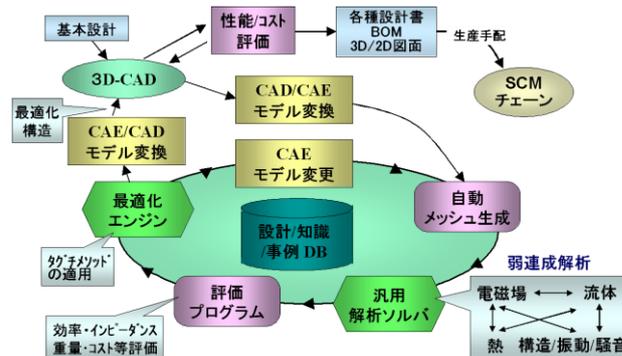


図1 理想的な DE 設計システム

このような DE システムが実現すれば、図2に示すように、白物家電、情報家電から、産業機械、自動車、交通システムなどありとあらゆる製品の、開発期間の短縮、多品種対応、高性能化、コスト低減に繋がるものと期待される。



図2 DE 設計システムの波及効果

このような理想的な DE 設計システムにまでは至っていないが、いくつかの先進的な企業では DE 技術を駆使した設計システムを製品開発に適用している。図3は米国 GE の大型ジェットエンジンの変遷を示したものである。ジェットエンジンの性能で最も重要なものはターボファンである。1960 年代の CF6 ではファンはほとんどフラットである。1990 年代後半の GE90 では 3次元翼形状に変わり性能が大幅に向上した。2000 年代の GP7200 ではファンの 3次元形状がより複雑になり、先端は後流側に伸びている。これによって、性能の飛躍的向上、低コスト化、燃費の大幅な改善と信頼性向上が達成されている。ここでは翼の根元から先端まで細かく分割して形状最適化を図ったものと推定される。モデルは大規模なものであるが、それで

も数万回も繰り返し解析を行っている。羽根形状は従来の発想では想像できないものであるが、それは DE システムであるが故に実現できたものとする。



図3 GEの大型ジェットエンジンの変遷

このように DE システムは先端製品の先行開発や価値創造型設計、あるいはまた、従来発想では予測できない製品設計に繋がるものであり、早期の実用化と戦力化が望まれる。

※技術情報誌アドバンスシミュレーションは、アドバンスソフト株式会社 ホームページのシミュレーション図書館から、【カラー版】がダウンロードできます。  
(ダウンロードしていただくには、アドバンス/シミュレーションフォーラム会員登録が必要です。)

## シミュレーション技術への期待

藤田 英輔

独立行政法人 防災科学技術研究所 地震・火山防災研究ユニット 主任研究員

## 1. 地震・津波・火山災害とシミュレーション

平成 23 年 3 月 11 日に発生した東日本大震災では、岩手・宮城・福島を中心に震度 7 の地震動に加えて、それまでの想定を超える高さに及ぶ津波も発生した。このため、多数の尊い人名が失われるなど、甚大な被害が発生した。その衝撃的な映像はテレビ報道などにより広く知られるところとなった。また、霧島山新燃岳では、平成 23 年 1 月から 2 月にかけて爆発的噴火が頻繁に発生し、噴石や火山灰の被害をもたらした。また、火砕流の危険性も指摘され、深夜にかけて住民避難も実施された。

地震・津波・火山噴火活動とそれによる災害は、複雑な要素が絡み合って発生する。地震は断層運動による現象であるが、ミクروسケールの破壊過程からマクروسケールの地震波や津波の伝播を理解する必要がある。火山噴火はマグマのダイナミクスに起因する現象である。これらの物理的なメカニズムの解明、さらには正確な災害予測には、弾性体力学・破壊力学・流体力学・熱力学などを総合的に取扱うことが必要であり、そのためにシミュレーション技術が不可欠である。

## 2. 東北地方太平洋沖地震による火山影響評価シミュレーション

火山噴火現象には、マグマの蓄積・上昇・噴出および直接的な火山災害をもたらす溶岩流・火砕流・噴煙などがあるが、ここでは一例として、東北地方太平洋沖地震による火山への影響評価シミュレーションを紹介する。

東北地方太平洋沖地震により日本列島全体が大きく変形したことが観測データより明らかになっている[1]。巨大地震のあとに火山活動が活発化する例は数多く報告されており、今回の地震後も国内の 20 の火山で地震活動の活発化が

観測されている[2,3]。これらに対応し、アドバンスソフト社 Advance/FrontSTR を用いて定量的評価を行なった[4,5]。一例として、富士山のマグマシステムへの影響評価結果を図 2 に示す。富士山の地下 15km に想定したマグマ溜まりへは約 0.6MPa 程度の応力変化が起こっていることが確認されている。

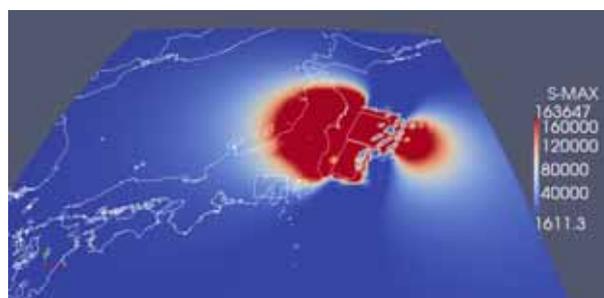


図 1 東北地方太平洋沖地震による変位分布  
(東西：東向きを+とする)

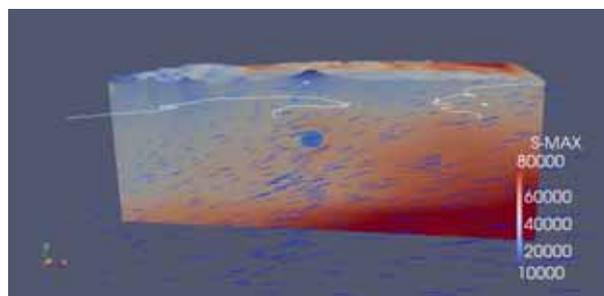


図 2 東北地方太平洋沖地震による  
最大主応力分布。

青線は最大主応力の方向を示す。マグマたまり（中央の青い部分）の周辺に応力集中が起こっている。東西に引っ張られ上下から押されている。おおよそ 0.6MPa 程度。

## 3. 将来の地震・津波・火山災害軽減に向けて

地震・津波・火山噴火現象の解明と災害を評価する手段として、数値シミュレーションは極めて有効である。特に複雑かつマルチスケールの現象に対してその効果は大きい。アドバンスソフト社の叡智を結集し、大規模なシミュレー

シミュレーションによる精度よい評価が重要であり、災害軽減のためにも比類無き貢献が期待される。

### 参考文献

- [1] Ozawa, S., T. Nishimura, H. Suito, T. Kobayashi, M. Tobita, and T. Imakiire, “Coseismic and postseismic slip of the 2011 magnitude-9 Tohoku-Oki earthquake”, *Nature*, 475, 373-376, doi:10.1038/nature10227, (2011).
- [2] Walter, T., R. and F. Amelung, Volcanic eruption following  $M \geq 9$  megathrust earthquake: Implication for the Sumatra-Andaman volcanoes, *Geology*, 35: 539-542, (2005).
- [3] 第 122 回火山噴火予知連絡会資料  
<http://www.seisvol.kishou.go.jp/tokyo/STOCK/kaisetsu/CCPVE/CCPVE08.html>
- [4] 菊池愛子, 董勤喜, “有限要素法による地震断層解析 (概要)” アドバンスシミュレーション, Vol. 4, (2010,11)
- [5] 戸田則夫 “断層面を含む地盤モデルのメッシュ生成,” アドバンスシミュレーション, Vol. 4, (2010,11)

技術情報誌アドバンスシミュレーションは、アドバンスソフト株式会社 ホームページのシミュレーション図書館から、【カラー版】がダウンロードできます。(ダウンロードしていただくには、アドバンス/シミュレーションフォーラム会員登録が必要です。)

# シミュレーション技術への期待

古谷 正裕

一般財団法人 電力中央研究所 原子力技術研究所 上席研究員

## 1. はじめに

アドバンスソフト株式会社殿が設立 10 周年を迎えられたことを謹んでお喜び申し上げます。戴いた標題について、单相流と二相流の数値流体力学(CFD)計算に限定して、筆者の経験を交えた雑感を記します。

筆者が大規模シミュレーションと出会ったのは、单相自然対流の数値計算(ラージエディシミュレーション)を学部の卒業研究として選んだときであった。既に二十年以上前の古い話で恐縮だが、当時はメモリ割り当てを 64MB 確保することも至難の業であった。3 次元数値計算では前のタイムステップの変数も極力消去する必要があったため、高次風上差分式を導出しながらも、メモリ容量とメッシュ数との二律背反の苦難に挫折した。現在は数十万円のパソコンでメモリ 64GB を実装できる現実には隔世の感がある。

現在では商用 CFD コードが広く使用されている。当時は「研究者たる者、解析は自分で作成すべし」という風潮があった。円筒座標系でさえ差分式を導出することが手間であったが、現在は差分の知識がなくとも商用 CFD コードで多面体メッシュを選択し、実用的な複雑形状の解析が可能になった。商用 CFD コードの発展と計算機の能力向上により、実用的なコストと時間で解が得られるようになった。自作中心の時代から、商用 CFD コードをいかに適切に使いこなせるかに移行している。

## 2. 单相流の CFD への期待

CFD コードを適切に使いこなすことは容易ではない。標題のシミュレーション技術は、解析コードの性能とユーザーの技量に分類される。適切な解を導き出すためには両者は密接不可分である。豊富な機能が実装されていても、ユー

ザーが誤った使い方をしては、適切な解が得られない。

解析を開始する際には、ユーザーは以下を念頭に CFD の適用を検討することになる。この検討が疎かであると、正しい解が得られない。

- (1) 評価指標を選定
- (2) 評価指標に影響する因子の同定
- (3) 解析モデルの予測性能の定量化
- (4) 評価指標の可否判定基準

以下に順を追って説明する。

### 2.1. 性能指標の選定

評価指標の選定では、何を解析で得たいか、どの指標で定量化するかを決定する。例えば必要とされる指標は、温度分布なのか、温度履歴なのか、応力や圧損であったり、与えられた問題に応じて何を定量的に求めるのか、CFD コードで得られる出力を基に何を指標にするのかを明確にする。

### 2.2. 影響因子の同定

評価指標に影響する因子の同定では、先に定めた評価指標の値を大きく変化させる因子が何であるかを定める。捉えたい現象の理解は勿論のこと、現象がどのような仮定でモデル化されているかを理解することが重要である。ベンダはモデルの仮定と適用範囲、制約条件を明示して、ユーザーに分かり易く提供されることが期待される。

ユーザーは解析で使用されるモデルに注視しがちであるが、空間メッシュの依存性が解に大きく影響することには注意すべきである。近年のメッシュ分割は、形状をソフトウェアに入力すると自動で多面体メッシュを生成するメッシュが多く存在する。なかには高機能ながら無償で利用できるソフトウェアもある。

初学者は3次元空間に隈無く配置された多面体を眺めるだけで満足しがちであるが、実は遠目に同じように見えるメッシュが大きく異なる解を生成する場合がある。ソフトウェア毎にもメッシュ分割のアルゴリズムが異なる。また入力した形状データがGUI表示では見つけにくい細部において不適切であるが故に発散しやすいメッシュが生成されることもある。

メッシュを使用する際には、メッシュ数や制約条件を入力して、性能指標への感度を調べておくことをお勧めする。余裕がある場合には、別のソフトウェアを併用するか、メッシュコンバータで一度別の形式で保存して、適切な空間刻みが設定されていることを確認することもできる。但し、複数のメッシュ構成を用いた結果が一致することでメッシュの感度が低いことが確認できるが、適切であるかどうかの判断には経験が必要である。メッシュは生成したメッシュと共に統計データや警告を出力する。これら数値は必ず確認することが肝要である。

### 2.3. 解析モデルの予測性能の定量化

解法や物理モデルが対象を予測できることを定量的に調べることは重要である。乱流モデルなどの選定においては、知識と経験から対象の流れ場を予想して、選択するモデルがどの程度の精度で予測できるかを推量する。

経験や知識を蓄積するためには、実験との比較により流れを把握し、物理モデルが適切に記述されているかを知ることと、モデル定数などの不確かさを基に、感度係数法やサンプリング法、バウンディング法などにより流れの予測誤差を把握することが重要である。多くの商用CFDコードは単相流の予測精度が高いが、これらの知見がベンチマークやパラメータサーベイ結果として系統的に提供されていない。モデルの予測性能の定量化に役立つこれらの知見がベンダから提供されることが望まれる。

### 2.4. 評価指標の合否判定基準

言うまでもなく、解析前に合否の判定基準を

定めておくことが重要である。判定基準に応じて解析方法や時間・空間刻みなどの解析条件が異なるからである。限られた計算資源と時間で最適解を導くために、解法や数値安定性を選定する。不必要に高精度を望むと、検証のための時間余裕が限定されるばかりか、最適解をも見失う恐れがある。要求仕様から合否判定基準を見極めることは解析計画法の関心事である。

### 3. 二相流のCFDへの期待

ここでは気体と液体が存在する気液二相流のCFDを対象に論じる。筆者は二十年以上前から気液二相流のCFDに携わってきた。学位研究[1]ではいわゆるCFDの他に、線形安定性解析、ノード・ジャンクション解析、実験とリアルタイム解析との融合などを行った。筆者の経験では、自由界面や少数気泡、分離流などの一部の流れを除いては、界面が多数存在する工学的な諸問題に適用できるレベルにはないと感じる。

その原因は単相流と比較すると分かり易い。無次元化した際に代表長さを一意に定めることができる単相流と異なり、二相流では気泡径などの二相流構造に起因する代表長さが流路諸元とは別に存在する。水槽を上昇する気泡を観察すると、形を変えながら揺れ動き、複雑な運動を披露する。単一気泡の上昇でさえ初期値依存性の高さがもたらす複雑さ故、進路を予測することが困難である。気泡が複数になると、気泡間の相互干渉、合体や分裂により複雑さが増大し、直接計算には非現実的な膨大な計算資源と時間を要する。直接計算が数値実験として用いられる単相乱流とは大きく異なる。

しかるに気液二相流は自然現象として観察されるのみならず、食品や石油化学に見られる蒸溜や発酵現象、火力や原子力プラントにおける沸騰現象など、解析対象は産業界にも広く存在する。

数値実験が困難である以上に、実験で詳細な情報を得ることも困難を伴う。速度分布など流れを詳細に捉えるためには、光を含む磁場や電場を照射し、気液の存在比や速度分布による変

化を捉えることが有用である。しかしながら気液二相流では、可視光の界面での反射や屈折が観測を困難にしている。例えば気泡の背後の情報が可視光では得にくい。一方で、より波長の短いX線や 線は界面での干渉を受けにくい、照射線量が限定される場合には時間分解能が低下するなどの課題がある[2]。

そこで電力中央研究所(以下、電中研と略す)では電場の変化を利用したセンサや信号処理法を開発し、CFD の検証に必要な気液二相流のデータベースを作成している。例として液膜厚さ分布計測センサと3次元速度ベクトル測定法について述べる。

### 3.1. 液膜厚さ分布センサの開発

液膜厚さ分布の過渡応答の一例として、直径約4mmの液滴が厚さ約1mmの水面に衝突する体系で、液膜厚さ分布の時間変化を計測した。図1上段は斜め上方から高速カメラで撮影した画像を示す。下段は開発したセンサで計測した液膜厚さの時間変化をサーフェスプロットと色で示す。本センサでは液滴衝突により変化する約2mm以下の液膜厚さ分布を縦横1.8mm間隔で毎秒5,000断面計測できる。

図2はセンサを外径12mmの円筒状に曲げた場合である。本センサは厚さ0.2mmで一方方向に容易に曲げ加工が可能である。センサのリード線を円筒内部から取り出すことで流れを妨げない。内径18mmの円管に挿入し、二重管アニュラス部に空気を供給し、焼結金属から水をしみ出させて液膜流を形成させる。見掛速度は  $j_L = 0.03 \text{ m/s}$  および  $j_G = 20 \text{ m/s}$  とした。焼結金属から下流側200mmの位置に幅5mm、高さ1mm、長さ100mmの立方体の流路障壁(タブ)を設置し、その下流端から5mmの位置における周方向の液膜厚さ分布の時間変動を図2中の右側に示す。青色が濃くなるほど、膜厚が厚いことを示す。タブが無い場合には70ms程度の周期構造が観察されるが、上流側にタブがある場合には攪拌効果で短い周期構造へと変化する液膜流が測定されている。下流側5mmのみの

時間変化を示したが、計測は下流側に60mmの範囲を32点で、周方向に16点で計測している。このように高速な流れにおいても、液膜厚さを面分布で毎秒5,000断面の速度で計測できる。

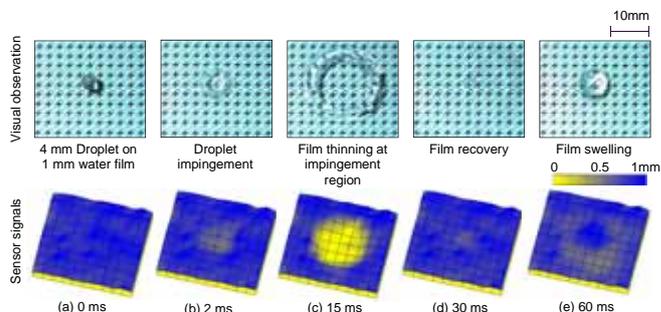


図1 Sensor signals during droplet impingement process

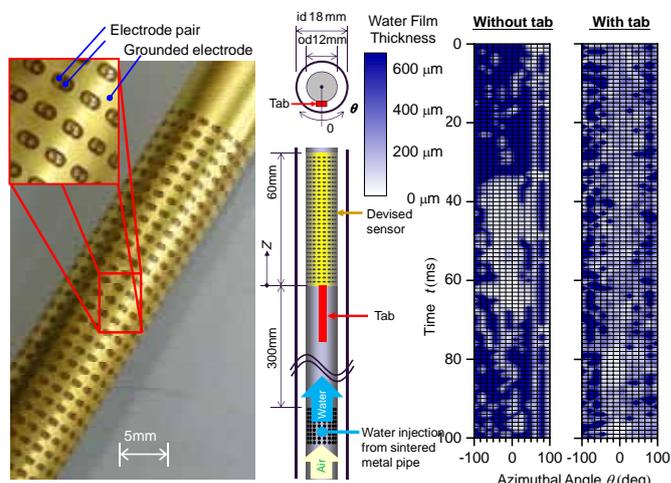
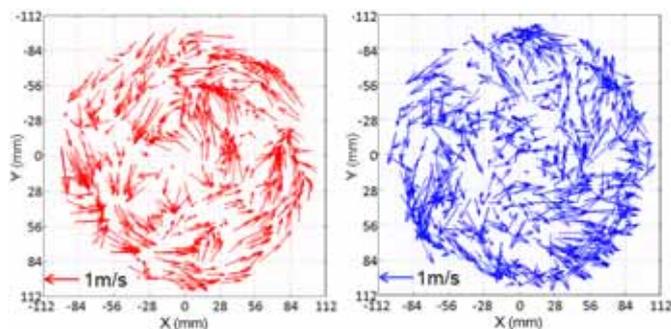


図2 Sensor signals of water film flow on after tab (flow obstacle) in annulus:  $Z = 5 \text{ mm}$ ,  $j_L = 0.03 \text{ m/s}$ ,  $j_G = 20 \text{ m/s}$



(a) Scale 128 (large bubble) (b) Scale 2 (small bubble)  
図3 Cross-sectional velocity map of swirl air-water flow  
 $j_L = 0.435 \text{ m/s}$ ,  $j_G = 0.41 \text{ m/s}$

### 3.2. 液膜厚さ分布センサの開発

二相流計測法として、Rossendorf 研究所(現スイス連邦工科大学) Prasser 氏の研究チームは、細線を縦横に格子状に張った構造のワイヤ

メッシュセンサ(WMS)を開発し、二相流や濃度分布の計測センサとして適用範囲や計測結果を広範に研究している[3]。

電中研では2組のWMSを利用し、個別気泡の3次元ベクトルや、Wavelet解析により時間・空間平均の3次元速度ベクトルを取得する方法を開発し、実験データベースを取得している。移動式プローブとは異なり、断面内の情報が同時に取得でき、大気泡下流のウェイクなど気泡間相互作用を評価できる利点がある。

図3は、内径224mmの円管内の水空気鉛直上昇旋回流の速度分布を示している。これら計測データは、揚力や抗力係数を気泡径の関数として、さらに気泡同士の相互作用力などを定式化し、CFDに組み込む予定である。

### 3.3. 複雑流路内の二相流計測センサの開発

伝熱管が林立するバンドル内は計測プローブなどの挿入が困難である。一例として、図4に矩形流路内に10本×10本のバンドルが存在する場合を述べる。前述のWMSでは11本×11本のワイヤを円管の隙間に挿入できる。また円管を電極とすることにより、電極とワイヤ間の二相流を計測することができる。一断面当たり $11 \times 11 + 4 \times 10 \times 10 = 521$ 箇所を1m以内で連続的に計測できる。

図5に流れ方向に3箇所( $Z/D_h = 293, 100, 52$ )の位置での計測結果を示す。図は左からボイド率分布、相速度分布、気泡コード長の頻度分布である。図上部に示したカラースケールは共通である。外周部に供給した気泡が合体しながら中央に集中する発達過程が計測されている。

## 4. まとめ

単相流CFDに期待される要件と、発展途上にある気液二相流CFDに必要な検証データ測定法について、筆者の経験を述べた。

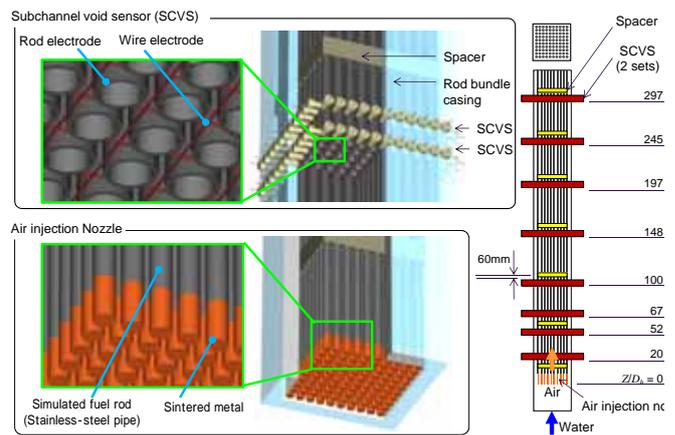


図4 Schematic of devised subchannel void sensor to acquire two-phase flow dynamics in bundle geometry

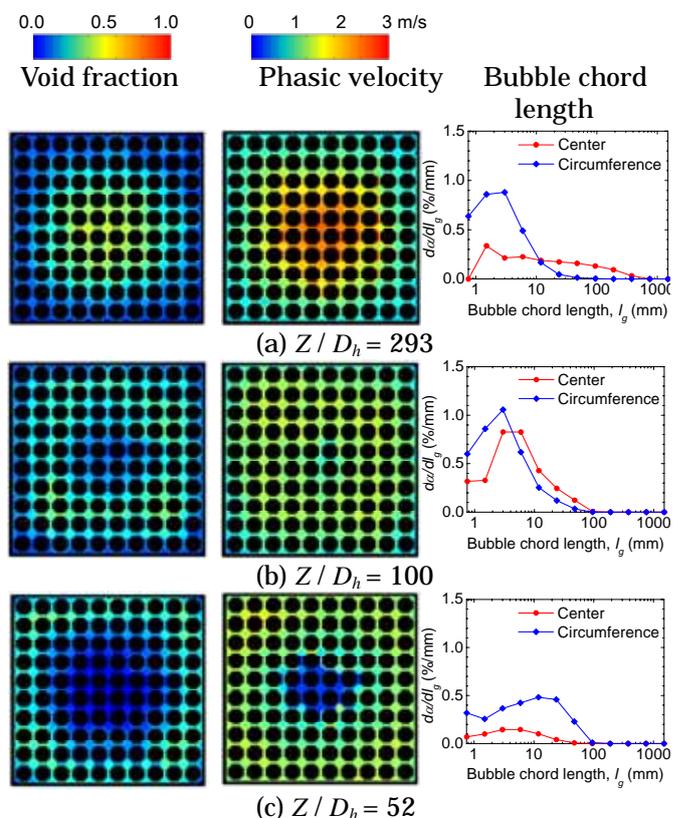


図5 Air-water two-phase flow in 10 × 10 bundle geometry  
 $j_L = 0.50$  m/s,  $j_G = 0.61$  m/s

## 謝辞

実験には一般財団法人 電力中央研究所 新井崇洋氏、金井大造氏、白川健悦氏にご協力いただいた。記して謝意を表します。

## 参考文献

- [1] M. Furuya “Experimental and Analytical Modeling of Natural Circulation and Forced Circulation BWRs,” PhD

Dissertation, Department of Radiation,  
Radionuclides, and Reactors, Delft  
University of Technology,  
ISBN1-58603-605-X, IOS Press Co.

- [2] Maad, R., Hjertaker, B.T. et al.,  
“Dynamic characterization of a high  
speed gamma-ray tomograph,” Flow  
Meas. Instrum, Vol.21, No.4, (2010)  
pp.538-545.
- [3] H.-M. Prasser, et al.: Annual Report of  
Institute of Safety Research, FZR-284,  
ISSN 1437-322X, 15, 2000.

技術情報誌アドバンスシミュレーションは、アドバンスソフト株式会社 ホームページのシミュレーション図書館から、【カラー版】がダウンロードできます。  
(ダウンロードしていただくには、アドバンス/シミュレーションフォーラム会員登録が必要です。)

# 材料・デバイス開発におけるシミュレーション技術への期待

細井 慎 小林 一

ソニー株式会社 先端マテリアル研究所 材料解析センター

## 1. 材料・デバイス開発におけるシミュレーション技術の利用

20世紀末から21世紀初頭の20年にかけて、計算機技術の発展は目覚ましいものがあった。特にハードウェアの高速化、ネットワークの高速化の恩恵は大きい。比較的安価に購入できるワークステーションを用いても、それなりの規模の電子状態計算を数日で実行でき、より大きな系で計算を実施したい場合には、手元のPCを窓口として、ネットワークの先の大型計算機にアクセスできるようになっている。実用材料への適応や、化学反応のモデル化などにはまだまだ課題は多いものの、固体物理・材料科学における電子状態計算については、密度汎関数法を中心に、計算機の高速化に伴い多くの材料に適用できるようになっており、モデル化した構造での特性の予測や物性の発現メカニズムの理解については一定の成果を上げている。

われわれは先端マテリアル研究所の材料解析センターという部署に所属しており、弊社におけるにおける先端的な材料・デバイス開発を、最先端の実験的な材料解析技術を用いて加速するとともに、広くグループ内の開発本部や事業本部、さらには製造事業所におけるさまざまな技術課題に対して、材料解析を通じてその問題解決に貢献することを使命としている。上記のような計算科学の発展を鑑みるに、今後は実験的な解析手法だけでなく、新規ナノ材料・構造による新機能探索・発現に向けて、材料合成、材料解析、物性計算を組み合わせる研究開発を加速し、先端材料開発を推進していくことが、ますます重要になってくると考えている。既にいくつかのテーマについて、大型計算機を使った計算も含め、計算機的手法を併用した取り組みを始めている。そこで本稿では、弊社における材料探索領域での計算機的手法の活用例とし

て、主に Advance/PHASE を用いた電子状態計算の事例について簡単に紹介し、今後の課題およびその解決のために期待することについて、まとめさせていただいた。あくまでも企業研究者、コード利用者側の視点であるが、コード開発者、次世代大規模計算機関係者各位には、少しでも今後の展開の参考にしていただければ幸いである。

## 2. 計算事例

### 2.1. 金属ナノ粒子表面の電子状態

燃料電池の電極触媒には、高比表面積と高触媒活性を得る目的で、PtRuのような白金系合金ナノ粒子がしばしば用いられる。しかしながら、実用化のためには更なる耐久性および触媒活性の向上が求められる。耐久性向上には、燃料電池内での Ru 溶出に伴う触媒活性低下を防止することが必要になるが、Ru ナノ粒子を Pt 層で完全被覆した“Ru core/Pt shell ナノ粒子”がその候補として挙げられる。このような被覆型のコアシェルナノ粒子のシェル部分においては、金属原子の反応性が単体ナノ粒子の表面とは大きく異なってくることが知られており、性能向上のために電子状態の議論が非常に重要となる。その上で、特に表面の Pt の Fermi 準位付近の電子状態の評価が特に注目すべき要素であると考え、われわれは、XPS のような実験的手法と同時に計算機的手法による電子状態の評価も行っている。計算機的手法としては、第一原理計算を用いた金属表面の電子状態密度 (Density Of States: DOS) や、結合エネルギーの評価を中心に研究を進めている。コアシェルナノ粒子の構造上の特徴は、大きく2つ挙げられる。1つは異種金属の接触界面が粒子表面付近に存在していることで、相互作用や格子ゆがみが導入されること、もう1つは粒子が非常に小

さいため、粒子の曲率により表面の金属の配位数が通常バルクやその表面とは大きく異なっているということである。触媒機能の発現には両方が関与しているものと考えられるが、実験的な手法だけでは、どうしても系の平均的な情報が中心になり、表面にある配位数の異なる複数のサイトの状態について、区別して詳細な議論を行うことができない。われわれは図1のように、原子を平板上に並べたスラブモデルと電子顕微鏡の観察像からモデル化したクラスターモデルを併用しながら Advance/PHASE による電子状態計算を実施した。このような複数のモデルでの計算結果の違いを評価することで、様々な電子状態変化の要因を切り分けながら、電子状態やフラグメントの吸着エネルギーの変化を計算し、機能発現メカニズムに対する理解を深めている。しかしながら、現段階の課題として、クラスターモデルでの計算を実施するためには大型計算機での実施が必要であること、それでも層数の大きなモデルを構造最適化するのは計算コストの上で困難であること、複数の構造でのエネルギー的な比較は可能であるものの、表面での化学反応の直接的なシミュレーションを実施が困難であることが挙げられる。問題解決に向けて、直近の課題はやはり計算の高速化や Order-N 化と大規模計算機の使いやすい環境づくりとなるのだろうが、中長期的には有限温度、電位印加、溶媒中など、現実の反応場における、化学反応のシミュレーションの実現が期待される。

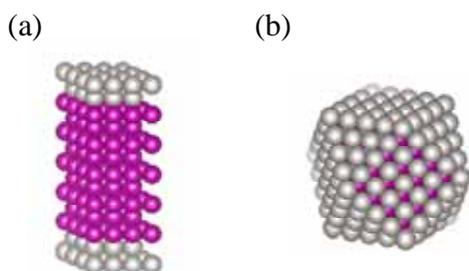


図1 (a)スラブモデル  
(b)ナノ粒子のクラスターモデル

## 2.2. 金属/有機半導体界面のエネルギー障壁の評価

有機デバイス開発において、金属/有機界面のキャリア注入障壁の制御は重要課題の1つである。界面に形成される電気二重層によって真空準位がシフトするため、キャリア注入障壁の予測は容易ではない。様々な有機材料と金属の中から望ましい組み合わせを効率的に選び出すために物性計算の活用を試みている。有機 TFT 材料として注目されている PXX 誘導体と Au について、図2に示した界面構造モデルを用いて密度汎関数法を用いた第一原理バンド計算 (PHASE) を行った。PXX 結晶構造は X 線構造解析から、Au/PXX 界面距離は全エネルギーが最小となる距離を計算 (GGA) から求めた。その結果、結晶方位とイオン化ポテンシャルの関係、真空準位シフト量、Au/PXX 界面の電気二重層の構造、界面エネルギー・接続準位等について有用な知見が得られた。しかしながら現段階では、密度汎関数法における半導体のイオン化ポテンシャルやバンドギャップの過小評価の問題のために、十分な定量精度が得られていない。この問題の解決に向けて、ハイブリッド汎関数や GW 近似などのアプローチがあるが、現時点では大きな計算コストがかかる。また、一般に金属/有機界面距離の導出には van der Waals 力の考慮が不可欠であり、こちらについても高精度な汎関数が提案されているが、やはり計算コストが大きい。前者は半導体研究者、後者は有機材料研究者にとって非常に重要な要素である。材料・デバイス開発の現場で計算結果を迅速にフィードバックするために、より高速なソフトウェア (アルゴリズム) の開発に期待したい。

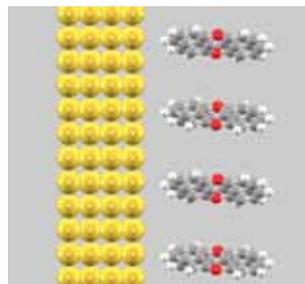


図2 Au/PXX 誘導体界面構造モデル

### 3. 今後のシミュレーション技術への期待

次世代の大型コンピュータ「京コンピュータ」については、その予算のあり方も含めて国民的な関心を呼んだ。前述の通り、実用材料の動作メカニズムの検証や、化学反応のシミュレーションなどには、第一原理計算のより大規模な系への適用が必要になるため、当然京コンピュータの一般利用に対する期待は大きい。しかしながら、現状ではソフトウェアの開発がハードウェアの発展に追いついていない印象がある。物性計算の分野で実績のあるソフトウェアはこのような大規模並列化計算のトレンドが顕在化する前に設計されたものが多く、並列化への対応が十分でないものが多い。実用材料への応用を目指した並列化効率の高いソフトウェア、あるいは計算規模の増大に対して計算量をできるだけ少なく済ませようという Order-N 法を用いたソフトウェアも開発されてはいるが、まだまだ十分な検証を経ているものは少ない。とはいえ、このような試みの中には国産のソフトウェアも散見されるので、今後の発展に期待したい。

固体物理や材料科学の分野においては、計算機の利用は解析事例で紹介したような、電子状態計算に限られるものではない。計算機的手法を実験的手法と組み合わせることで新しい解析手法を創造していくことにも期待したい。現状定性分析にとどまっている手法でも、人間の目より優れた「機械の目」を使い、画像処理やシミュレーションを組み合わせることで、現状では得られないより多くの情報を引き出せる可能性がある。大規模計算機を使って、複雑な実在材用にも適用可能な汎用性の高い新しい解析手法の創出にも期待したい。解析ソフトウェアの開発は外国の研究者の主導で行われることが多く、国産の解析ソフトウェア開発事例はまだ少ない。このような現状を変えていくためには、実験的な解析を専門とする技術者と、計算科学を専門とする技術者の意見交換が密に行われることが重要であろうと思われる。

しかしながら、利用者である材料科学の研究者は情報科学の専門家ではないことが多く、既

往のソフトウェアを並列計算用に最適化して移植するなどの作業にはなかなか参画できない。そこで、利用者、既往のソフトウェアの開発者、大規模計算機での並列計算を専門とする情報技術者が共同開発するようなコンソーシアムが発展することが望まれる。

また、既に産業利用が活発に行われている研究拠点として大型放射光施設があるが、こちらについては成果利用に対する柔軟な対応など、産業利用の促進に向けて様々な施策が実現している。京コンピュータの一般利用についても、単にハードウェアとしての計算機が提供されるだけではなく、ソフトウェアのライセンス形態や成果の公開方法などについても、企業にとって使いやすい環境づくりを話し合う場所がもたれることを期待する。

技術情報誌アドバンスシミュレーションは、アドバンスソフト株式会社 ホームページのシミュレーション図書館から、【カラー版】がダウンロードできます。(ダウンロードしていただくには、アドバンス/シミュレーションフォーラム会員登録が必要です。)

## シミュレーションへの期待

松尾 裕一

独立行政法人 宇宙航空研究開発機構 研究開発本部 数値解析グループ グループ長

私がシミュレーションというものに係って30年近くになる。昔はスパコンで徹夜してやっていた計算が、今やPCにより数時間でできるようになった。言うまでもなく計算機の進歩によるのだが、ムーアの法則によれば計算機性能は5年で10倍になるので、30年間では $10^{(30/5)}=100$ 万倍以上の速さになっているはずである。科学技術の進歩は早い、これほど進歩の早い、変わってきた分野(方法)は少ないと思う。これは、見方を変えれば、それだけ可能性・応用範囲が広がったことを意味している。もちろん、シミュレーションには計算機だけでなく良いプログラム(ソフトウェア)が伴っていないとだめだ。良いプログラムを作るには頭が必要である。プログラムは、人間の思考活動が表現されたものと言っても過言ではないだろう。すなわち、シミュレーションは、人の頭脳の結晶なのである。シミュレーションはバーチャルだとか検証しないと意味がないという声もよく聞かれるが、シミュレーションの持つこの広い可能性や頭脳の結集という側面は、人類の課題を解決してくれるかもしれないし、人類の夢を叶えてくれるかもしれないのだ。

次に、シミュレーションは、いろいろな「目」を持つことができるのだと思う。1つは、物事を細かく、「微視的に見る」目である。これは、乱流のDNSのような第一原理に基づき、要素還元的に物事の原理や構造を明らかにしようとするものである。もう1つは、物事を大きく、「巨視的に見る」目である。エンジン全体を解析したり、地球システム、太陽システム全体を解析するような類のものである。さらにもう1つは、物事を「時間的に見る」、時間を追って見る目である。時間を追うにも、気象予報のようにオンライン的に追う目と数値実験のように仮想的に追う目がある。このようにシミュレーシ

ョンは、人間が裸眼あるいは普通の時間の流れの中では見ることができない、いろいろな目を持つことができるのである。もちろん、顕微鏡や望遠鏡・宇宙船などを使えば、自分の目でも見ることができるが、設備やコストがかかる。シミュレーションは、コンピュータと頭脳さえあれば、うまくやればそれができる。このような性質を持つシミュレーションの特性をわれわれはもっとうまく活かせないかと思う。また、シミュレーションは「道具」として使うこともできる。設計や開発を支援するいわゆる工学ツールというやつだ。ものづくりや創薬などに使われているのは周知の通りである。

散漫な内容となってしまったが、シミュレーションへの期待に関連して、シミュレーションの無限の可能性とその使い道について考えてみた。シミュレーションというと、未だに何か専門家だけが操れる小難しいもの、あるいは得体の知れないものというイメージを持たれている気がするのは私の杞憂かもしれないが、そのイメージを払拭するような方向に持って行くべくシミュレーションの可能性とか楽しさについてもっとアピールしていくことが必要ではないかと思っている。シミュレーションの役割といえば、コスト削減とか産業競争力強化といった現実的路線がよく言われることではあるが、私はもっと大きなフロンティア開拓やブレークスルーにも期待して行きたいと思う。そのような方向に対してもアドバンスソフトさんにはがんばっていただきたいと思っている。また、頭脳を結集してそのようなことを可能にする世界に冠たるソフトウェアを開発していただきたいと思う。

# シミュレーション技術への期待

松崎 和愛

東京エレクトロン株式会社 技術開発センター シミュレーショングループ

## 1. はじめに

シミュレーションとの出会いは、かれこれ約20年前となります。その20年間、考えてみれば幸か不幸かシミュレーション(CFD)から離れることはなく、何らかの形で関わっていたように思います。その間、所属も大学、民間企業と変わり、その関わり方やそれに対する期待感も変わったように感じます。これまでのCFDとの関わり合いを振り返りながら、シミュレーションに対する取り留めのない私見を述べたいと思います。少しでも参考になれば幸いです。

## 2. 大学時代

私がCFDに出会ったのは、1990年初頭、研究室に配属された大学4年生の時でした。主に流体機械を研究している研究室で、今でも当時のことは鮮明に覚えています。この時代、CFDの研究が盛んな時期で、ちょっと複雑な3次元計算ができたなら喜ばれる時代でした。メッシュ生成、ソルバーのCoding、後処理のグラフィックスまで、自作でやっていました。計算機はNECのPC98シリーズに数値演算プロセッサを載せたものが主流で、IBMのUNIXマシンがぼちぼち研究室に導入され始めました。言語は、ソルバーのCodingにはFORTRAN、グラフィックスにはBASICを使っていましたが、UNIXマシンの導入を機に、C言語も勉強し始めました。OSもMS-DOSからWindows 3.1に切り替わった時期でもあり、Windows上で全工程ができるよう移植していきました。この当時は、CFDをやること自体が目的であり、実験結果と合うような解析結果をいろいろ工夫して求めることに注力していたように思います。このような経験は今でも私の財産です。

## 3. 民間企業

2004年に現在の所属会社に入り、初めて市販のCFDソフトウェアをさわり、これまで自作の環境での作業に慣れていた私にはその使いやすさに驚きを覚えたのを思い出します。また、複雑な問題でもあっさり結果がでてき、よほどのミスをしないうり計算は発散しません。会社では納期が最優先されるため、1発計算の結果がそのまま使われることが多いので、1つの計算結果を数種類のメッシュを用意し、考えられる誤差を最小にして計算結果を算出していた私にとって、非常に怖いことだと感じました(このことを認識している人は社内でもいましたが、なんとなく黙認されています)。このようにしっかりと検証されていない結果が実際のものづくりに活かされるとしたら?想像しただけで怖くなりました。会社では、まともに3次元計算をやることは少なく、主要現象の抽出(スクリーニング)をしっかりと行い、現象の次元を落としたり計算領域を絞ったりして、計算負荷や誤差を小さくして、問題解決に取り組むセンスが重要であることもいい勉強になっています。また、マイクロからマクロスケールのシミュレーションがいろんな形で行われていることを知り、シミュレーション技術の幅広さに驚きを覚えているのと同時に、特にマイクロスケールの解析はその精度検証も難しく、なかなかものづくりに直結しないもどかしさも感じています。

## 4. 今後のシミュレーション技術への期待

ものづくりに如何にシミュレーション技術を活かして、より良い装置開発あるいは開発コストの低減を目指す立場で、シミュレーション技術に関する期待を最後に列挙します。

1. 形状変更に対してフレキシブルなシミュレーション技術(メッシュ生成法、CADとの連携、メッシュレス法など)
2. 熱流体/構造の連成解析技術と機器寿命予測技術
3. Multi-Scale (時空間) 現象の解析技術

大まかなところ、これらのシミュレーション技術の進展に期待したい。これらの技術に関しての詳細は割愛するが、どの項目に対してもこれといった技術は確立されていないように思う。ものづくりの現場では、シミュレーション技術は主役にはなりえず、あくまでも設計ツールとして補助的な役割になることが多い。そう考えると、ツールを正しく上手に使いことが重要になってくる。シミュレーションを使う人の育成は、シミュレーション技術の発展に欠かせない重要な要素であることは言うまでもない。

## シミュレーション技術への期待

松宮 徹

新日本製鐵株式会社 顧問

まず最初に、アドバンスソフト株式会社設立10周年をお祝い申し上げます。「戦略的基盤ソフトウェア開発」が開始される前のある日、計算機シミュレーションに携わる産学の研究者が集められて、わが国の計算機シミュレーションの現状を踏まえて、将来何をなすべきか議論したことがあった。その議論の中で、大学ではオリジナルなソフトが開発されているにも拘わらず、開発者の周りだけでしか使われず、開発者が去るとソフトは引き継がれず消えてしまう。その結果、産業界でデファクト・スタンダードになっている計算ソフトは圧倒的に外国製であり、ソフトの世界でも外国タダ乗りの誹りを受けている。この状況を打破するには、ソフトウェアの開発だけでなく、ソフトが継続的に保守・更新されて行く仕組みを作るべきだ、との要望が強く出され、それを反映して、アドバンスソフト株式会社が生み出されたと思っている。益々のご発展を祈念したい。

昨年6月に「京」コンピュータが、地球シミュレータ以来遠のいていた世界最速の座を奪還した。スパコンの性能はこの20年間で6桁も向上し、シミュレーションできる世界は飛躍的に拡大してきている。「京」の活用にあたっては生命科学・医療・創薬、新物質・エネルギー、防災・減災に資する地球変動予測、次世代ものづくり、物質と宇宙の起源・構造、の5つの戦略領域での素晴らしい成果が上がってくることを期待している。鉄鋼業においても、特に、ものづくり、物質・エネルギーに関わっており、飛躍したいと考えている。

その方向は2つだと考える。鉄鋼製造プロセスならびに鉄鋼材料の挙動を明らかにするには、内在する素過程が実に多く、全容を明らかにするには、まさに、マルチフィジックス・マルチスケールのシミュレーションを実行しなくては

ならず、いくら計算機の性能が向上しても、これをまともに行うのは無理である。そこで、キーとなる素過程の機構を徹底的に解明するのが第一の方向である。例えば、材料組織形成に関して、粒界、異相界面の自由エネルギーは、それらが変態核形成サイトと機能し、粒成長の駆動力となることから、変態、再結晶を制御する上では避けては通れず、それらへの溶質偏析による構造・エネルギーの変化について、第一原理計算を用いて明らかにして行くべきだと考える。これらは、粒界での転位の拘束、粒界からの転位の放出能にも関わり、機械的性質の予測からも重要である。その他、バルク相の自由エネルギーを構成する溶質元素の自由エネルギー、溶質元素と空孔との相互作用、転位の移動度、粒界の移動度の支配機構に関わる素過程の定量的解析など枚挙に暇がない。これらは、「京」コンピュータの活用の戦略拠点の1つとなった計算材料科学拠点でも鋭意推進されることを期待しているし、文部科学省における構造用材料分野での「新元素戦略」のキーテクノロジーであるとも考えている。鉄鋼材料の機械的性質の飛躍的向上、元素の機能が解明されて希少元素の使用からユビキタス元素への置換を期待したい。

もう1つの方向は、全体のプロセス挙動を支配している素過程を嗅ぎ出して、先見性のあるシミュレーションを行うことである。プロセス内の流動解析だけを実施することで、今まで想像していたのと全く違った状況になっていることが判り、プロセスの操業の革新に繋がる例も多い。計算機の性能向上によって、境界条件の制約が少なく、広い領域での3次元流動解析は確実に可能な領域が広がってきている。要は結果を予見する能力を磨き、勝てるシミュレーションを行えるかである。このことは第一の方向でも重要であり、感性の高い計算を期待する。

# シミュレーション技術への期待

室井 ちあし

気象庁 予報部数値予報課 数値予報班長

## 1. はじめに

いまや数値シミュレーションは様々な科学技術の発展や社会インフラ構築において、なくてはならない基盤技術となっており、そのさらなる発展や高度化のためには産・官・学、それぞれの立場での研究開発の推進と連携が求められている。ここでは、スーパーコンピュータを利用した天気予報「数値天気予報」の技術開発を通じて筆者が考えてきたことを触れながら、今後のシミュレーション技術の発展に求められることについて、私見を述べる。

## 2. 今後のシミュレーション技術に求められるもの

日本における「数値天気予報」は1959年に開始され、当初は小規模なシミュレーションであり基礎研究的な色彩が強かったが、その後高度化・精緻化の努力が行われた。1980年代には定量的にもほぼ実用的と言えるレベルに達し、その後も必要な開発体制の強化を図り、世界との競争の中でさらなる精度向上を遂げてきた。こうして発展してきた経緯やいまだ不十分だと思われる点を踏まえ、シミュレーション開発に求められるものについて、考えてみたい。

### 2.1. 連携強化

連携強化とはよく言われることであるが、ここでは「縦の連携」と「横の連携」という切り口で述べて見たい。

「縦の連携」とは、同じ分野内での連携である。少子高齢化という日本の未来を考えれば、分野内において効率よく分担・交流を進めていくことが重要であることは言うまでもない。ベテランの経験と若い人のもつ機動性をともに活かし、かつ研究者個人がすばらしい業績をあげつつ組織も活性化することが必要である。難し

いことと受け取られるかもしれないが、シミュレーションの全体設計の議論とコード維持管理がきちんとできていれば、コード的にも組織としても風通しが非常によくある、というのが筆者の経験である。

「横の連携」とは、異なる分野間での連携である。シミュレーションの分野は違っていても、例えばその計算手法は実は非常によく似ている、ということはよくある。どのような手法が現在の高速計算機に適合しているのか、などノウハウを共有することは重要である。最近、SNS(ソーシャル・ネットワーキング・サービス)を利用した情報発信が、特に若い人たちの間で広まっている。例えば、シミュレーションをキーワードにしてSNSの利活用を推進しコミュニケーションを活発にしていく、などという取り組みがあれば素晴らしい。

### 2.2. 評価・検証の充実

シミュレーションの計算結果について実例を見る機会も多いが、いろいろなケースでも正当なのか、それともたまたまその事例ではそのような結果になっているのか、専門家以外にはなかなか判断がつかないことが多い。シミュレーションの正当性を示す努力がさらに必要である。

シミュレーションの内容は高度化しており、専門外の人間がその細かい実装など内部に立ち入ることは事実上不可能である。一方、シミュレーションは、実際の実験や理論的考察が難しいから実施しているという場合が多い。「数値天気予報」の場合は、毎日のシミュレーション結果をベースとして天気予報が発表されており、それがどの程度正しいかは、ある程度は世間の厳しい目にさらされている。またそうした評価を受けることによって、シミュレーションの課題発見につながることもある。

単に可視化して結果を示すだけでなく、それが正しいと説明し理解を求める姿勢が、シミュレーションの開発者・担当者に求められる。

### 2.3. マネージメント能力の育成

シミュレーションの目的や内容が高度になり、その開発も大がかりなものとなっている。大規模なプロジェクトを成功に導くためには、全体設計から各パーツの開発まで、一定の品質を確保しなければならない。そのためには、高い専門性を持った研究者・技術者の育成と、設計から評価検証に至る各部分を連携させることが求められる。研究者・技術者の育成については一定の考慮がされているように思われるが、技術開発を行いその成果が社会に還元できるレベルまで達するためには、組織におけるマネージメント能力の育成が必要となると思われる。

### 3. おわりに

シミュレーション技術への期待について私見を述べたが、ここではあえて技術的なことは述べず、高度化や連携といった言葉を中心に述べた。それだけシミュレーションの重要性は高まり、問題も複雑化している時代になってきているのだと、強く感じているからである。本稿が、シミュレーション技術の高度化に携わる人々への、今後の研究開発の一助となれば幸いである。

# 地震防災分野における仮想演習とシミュレーションの役割

室野 剛隆

公益財団法人 鉄道総合技術研究所 構造物技術研究部耐震構造研究室 室長

## 1. はじめに

昨今、安全神話の崩壊という言葉をよく耳にするようになった。この言葉に代表されるように、世の中はもともと安全が当たり前であると認識されることが多いわけだが、危機管理の分野では、『安全は危険と人間の英知の均衡状態だ』と言われている。危険という無秩序の存在が前提であり、それから作られる安全は特殊であり、その均衡には人間の英知が必要だということである。

昨年の東北地方太平洋沖地震における被災などの事例を見るにつけ、私たち地震/耐震工学に携わる研究者・技術者にとって、安全という均衡状態を保つことがいかに難しいかをあらためて痛感した。

地震に対して安全という均衡状態を保つには危険を事前に察知して、相応の対策をする。つまり、ある「想定」を行うわけであるが、今回の地震は、「想定外」をも想定する必要があることを示唆しているとも言われている。失敗学で有名な畑村先生は、想定外を想定するためには、「仮想演習」と「逆演算」が必要だと指摘されておられる[1]。

さて、著者の専門分野である鉄道の地震安全というテーマに上記のことを当てはめると以下のように解釈できる。つまり、鉄道は、広域に線状・面状に路線が敷設されており検討対象範囲が広く、自然(地盤)と人工物(構造物)の組み合わせであり、多くの施設(土木構造物、建築構造物、電力施設、車両)から構成されている、という特徴があり、～を踏まえて地震に対する「仮想演習」を行う場合には、想定する規模が非常に大きくなるとともに、現象が複雑となることから、われわれが持っている経験だけでは十分な仮想演習を行うことはできない。これを補ってくれるのがシミュレーシ

ョンであると考えている。それだけにシミュレーションに対する期待は高いと言える。本稿では、上記の観点から今後のシミュレーションの役割と課題について、私見をまとめさせて頂いた。

## 2. 物理モデルの高度化

今後の計算機の発展を考えると、大規模、高精度な解析が可能となることが期待されるわけであるが、計算機能力の向上に任せておけば物理モデルの高度化が不要となるわけではない。

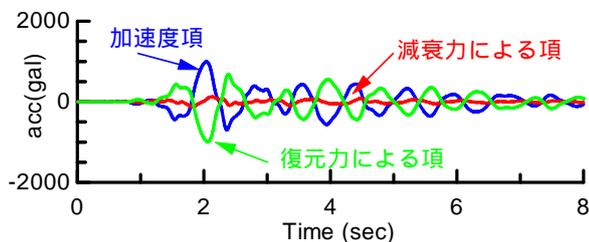
例えば著者の専門分野の鉄道の地震時安全性の観点で言えば、地震波は震源や地下構造の影響を大きく受けるが、ボクセル型有限要素法や差分法などの理論的方法により、震源から対象地点までの波動伝播解析そのものは可能になってきている。しかし、鉄道構造物に必要な1秒程度以下の周期帯域までの精度が確保されるまでの計算を行えるだけの微細な震源過程や地下構造のモデル化はなされていないのが現状である。

また、地盤～構造物の動的解析については、有限要素モデルや梁・ばねモデルを用いた解析が土木・建築分野で市民権を得ている。このモデルでは質量マトリクス[M]や剛性マトリクス[K]については物理的に算出が可能であるが、減衰についてはその発揮メカニズムが複雑であるため、減衰マトリクス[C]の合理的なモデルは存在していないと言える。一般には、比例減衰が使われるが、これは便宜的な手段であり、物理モデルがあるわけではない。特に、1995年の兵庫県南部地震以降は、部材や地盤の塑性化を考慮したシミュレーションモデルの構築が急激に進展したが、減衰については全く手付かずである。図1は著者らが地盤のシミュレーションを行った結果であるが[2]、運動方程式を以下のよ

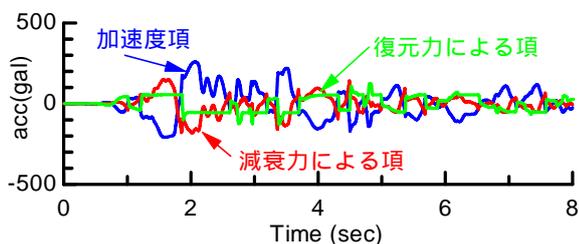
うに変形して、

$$\left( \ddot{x} + \{I\} \ddot{u}_g \right) + [M]^{-1} [C] \{\dot{x}\} + [M]^{-1} [K] \{x\} = \{0\}$$

第1項(慣性力)、第2項(減衰力)、第3項(復元力)の時刻歴を表わしたものである。線形解析の場合には、慣性力項、減衰力項、復元力項は概ね90°づつ変化しており(慣性力項には、地動 $\ddot{u}_g$ が含まれるので、その分だけ位相関係はずれる)また減衰力項が小さいことから、慣性力項と復元力項が概ね釣合う形を示す。理論と調和的である。しかし、非線形解析の場合は、土の塑性化により復元力が頭打ちになりフラットな波形となる。その結果、慣性力項は復元力項ではなく減衰力項と釣り合う形になるとともに、減衰力項が相対的に大きく評価される。現状では、このような関係が正しいのかどうかは議論されていない。大地震時には剛性が非線形性を示すのと同様に、減衰についても非線形性を有している可能性があり、何らかの物理モデルの開発が必要と考えている。



(a)線形解析



(b)非線形解析

図1 土の非線形応答解析例

一般に、シミュレーションの方法論や計算アルゴリズムが提唱されてから、実用的な問題に関してその有効性が実証されるまでには相当な年月が掛かるので、物理モデルの高度化は早期に取り掛かる必要がある。

### 3. シミュレーションと他の手法との融合

CAE (Computed Aided Engineering) が提唱されて以来、シミュレーションと実験はCAEの両輪として密接な関係にある。CAEの中において、実験は現象の発生メカニズム解明や数値解析モデルの手法や仮説の妥当性、およびモデル精度の確認や修正のために、比較参照データを提供する役割を担ってきた。しかし、昨今では実験的に測定できるデータをもとに、数値解析モデルを用いて、従来実験的に測定できなかった部位・部分のデータを得るハイブリッド実験が実施されるようになってきた。土木・建築分野でも1980年代から広く用いられるようになり[3]、近年では、数値解析および実験解析ソフトウェアやコンピュータなどのハードウェアの飛躍的な進歩により、実時間で加振試験と数値解析を融合して、実際の地震挙動の評価が可能になった(図2)[4]。

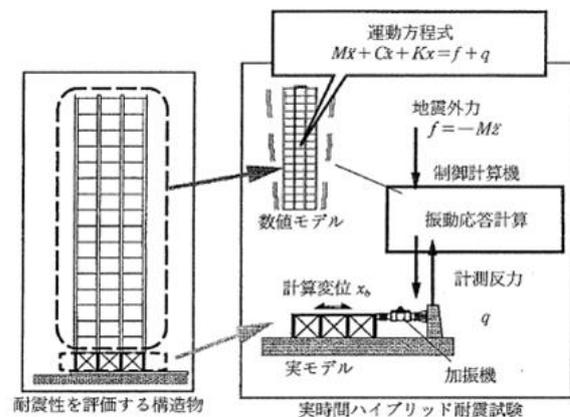


図2 実時間ハイブリッド実験の概要[4]

また、実験の代わりに経験則を用いることも有意義であろう。地震に関して言えば、先述したように、理論的方法により、長周期成分の地震動を解析することは可能になってきているが、1秒以下までの短周期成分の計算を行えるには至っていない。いずれは高度なモデル化が可能になるかもしれないが、現在は、短周期領域については、統計的グリーン関数法等(統計的な経験則)を用いて地震動を計算し、理論的手法と経験的手法を1~2秒程度を境界にして重ね合わせることで、最も合理的な方法であると言

われている。

このように、シミュレーション技術は今後も持続的に発展を続けられると思われるが、シミュレーションの苦手な部分は、実験や経験則に分担させることにより、より有益な情報を早期に得ることが可能であり、今後も有効な方法の一つであると思う。

#### 4. シミュレーションと試験・調査の一元化

シミュレーションが高度化する一方で、重要なのが解析パラメータの収集である。

東京～大阪間の鉄道構造物の地震応答をシミュレーションをすることは、現在の計算機能力であれば可能なことであるが、構造物の挙動は周辺地盤と構造物の動的相互作用により支配されるため、地盤（深さ数 10m 程度）と構造物の両者をモデル化することになる。地盤の数値モデルは地盤調査結果に基づきなされるが、その調査は数 100m おきに実施される程度である。また、構造物も 10,000 個程度存在するであろう。東京～大阪間の全ての地盤・構造物をミクロにモデル化することは不可能に近い。しかし、近年では GIS データから建物 1 つ 1 つをモデル化しようとする試みもあり[5]、今後は、従来のような「点」で捉える調査方法に加えて、衛星写真などを含め、「面」で捉える方法を積極的に開発・導入する必要がある。

さらに、先述したように試験・実験結果はモデルの確認や修正に使われることが多いが、ここにも課題がある。例えば、土の動的な性質は、変形特性試験により同定される。変形特性試験とは、小さな土の供試体にある振幅で繰返し応力を与えて、応力とひずみの関係を測定し、次に振幅を大きくして同様の作業を繰り返し、各ステージ毎の応力とひずみ関係を定義するものである。各ステージ毎に与える繰返し回数は 11 回であり、10 回目の応力～ひずみ関係に着目して土の非線形動特性を規定している。しかし、地震の際に最も私たちが知りたいのは最大値であり、そのような最大値を与えるような大きな振幅は地震中には 1～2 回程度の繰返し

である場合が多い。このように、シミュレーションで実際に必要となる物性値と、その測定方法には大きなギャップがあると言える。シミュレーションを構築/実行するグループと調査するグループが、シミュレーションと調査の一元を目指した対話をする必要があるであろう。

#### 5. おわりに

本稿では、地震防災能力の向上のための「仮想演習」を可能とするツールとしての観点から、シミュレーションの課題と期待について私見を述べさせて頂いた。

#### 参考文献

- [1] 畑村洋太郎, “「想定外」を想定せよ！失敗学からの提言”, NHK 出版, (2011)
- [2] 室野剛隆, 棚村史郎, “地盤の非線形動的解析におけるレーリー減衰の効果”, 鉄道総研報告 Vol.15, No.3, (2001)
- [3] 家村浩和, “ハイブリッド実験の展望と将来”, 土木学会論文報告集, No.356, (1985)
- [4] 堀内敏彦, 笠井洋昭, 梅北和弘, 桃井康行, 菅野正治, “実時間ハイブリッド耐震試験装置の開発”, 日本機械学会誌 102, (1999)
- [5] 堀宗朗, 田中謙吾, Sobhaninejad Gholamreza, 市村強, 小国健二, “自然災害シミュレーションのための GIS から都市モデルへの汎用的データ変換”, 土木学会論文集 A, Vol. 66, No. 1, (2010)

技術情報誌アドバンスシミュレーションは、アドバンスソフト株式会社 ホームページのシミュレーション図書館から、【カラー版】がダウンロードできます。（ダウンロードしていただくには、アドバンス/シミュレーションフォーラム会員登録が必要です。）

# 火災性状予測シミュレーション技術への期待

山田 常圭

東京大学大学院 工学系研究科 都市工学専攻 消防防災科学技術寄付講座 特任教授

## 1. 防火分野におけるシミュレーション

防火分野におけるシミュレーションの対象は、大きく物理・化学的現象としての火災性状と避難に係る人間行動の2つに分類される。人命安全は両者の相互作用に依存しており、どちらも重要であることは言うまでもない。このうち人間行動のシミュレーションは、たぶん人間の心理、判断のような社会的な要素を含んでいる。シミュレーション手法としては、最近のマルチエージェントモデル[1]を始め過去に数多く提案されているが、今後とも適用対象や結果の妥当性について、多くの現実の知見との検証を経て明かにされることを期待している。

一方、火災性状のシミュレーションは決定論的であり、人間行動シミュレーションに比べて、実用面での妥当性の検証は容易である。中でも、熱気流(煙)の伝播シミュレーションは、1970年代後半の、コンピュータが科学計算のツールとして普及し始めた頃から研究開発が進められてきた。1つはBRI[2]で代表されるゾーンモデル、もう1つはFDS[3]で代表される数値流体(CFD)モデルが知られている。どちらのモデルも、火災初期における避難安全検討の工学的設計用ツールとして普及し、予測結果の妥当性も種々の実験結果と比較検討を通じ検証が進められてきた。与条件として設計用モデル火源が与えられた時の建物内部の熱気流伝播シミュレーションは、実用段階のレベルにある。こうしたシミュレーションを現場で火災と対峙する消防隊員に紹介すると、さぞ興味を示すであろうと思いきや、説明しても反応は今ひとつはかばかしくない。

これらの防火安全設計用に開発されたツールは、火災初期の避難の成否を対象としており、消防隊員の興味のある盛期火災とは同じ火災といっても様相はずいぶん異なるのであろう。

## 2. 消防活動に必要な火災性状予測シミュレーションと技術的な課題

消防隊員にとって重要なのは、燃え盛った火災室から隣接室に延焼拡大していく過程や、さらには倒壊するのは、何時どのような状態で起きるのかといった情報である。現場で火勢が急速に拡大するのは、屋根が燃え抜けたり窓ガラスが割れたりする等、建物の部材や構造的安定性が急変することによって起きる。こうした消防活動のニーズに応える火災性状のシミュレーションは殆どされていなく、今後の開発が期待される。以下、どのような技術的課題があるか特に重要な2点について述べる。

### 2.1. 境界条件が時々刻々変化する現象への対応

既往の火災性状シミュレーションは、リジッドな壁等の周囲境界条件のもとで、熱気流の挙動がシミュレーションされるのが一般的である。しかしながら、前述のように現実の火災では、火源も熱気流の性状も、時々刻々変化する境界条件によって強い影響をうける。こうした境界条件が変化する事象の予想は、CFD等の既往の多くのシミュレーションの得意とするところではない。窓が割れたり消防活動の進入のために扉を開けることによって燃焼形態がまるで変わってしまうことはしばしば遭遇する。境界条件を急変させても数値解が発散しないようなロバストなソルバーを有するシミュレーション手法の登場を期待している。

### 2.2. 自立的燃焼拡大過程を予測できる燃焼反応シミュレーション

火災の基本は燃焼現象であり、この部分が的確にモデル化されないと、本当の意味での火災性状のシミュレーションは困難である。最近のプラスチックの調度品の中には、加熱によって

溶融滴下して、液体のように床面に拡がって燃えるような可燃物も増えてきている。可燃物の形状変化、落下等、燃焼シミュレーションにおいても、前述の境界条件の変化をいかに取り込むかが、正確な延焼拡大を予測する上で大きな課題として残っている。

今のところ、種々の可燃物を予め燃焼させて与条件として火源を入力することでシミュレーションを行う場合が多いが、自立して延焼拡大していく燃焼プロセスおよび燃焼物の形状変化を含めた熱気流分布を考慮したシミュレーションは未だ開発途上にある。いずれにしても多種多様な可燃物の燃焼性状に関する地道な燃焼データベースは必要であり、データベースの活用をはかりながら燃焼過程を予測できる総合的なシミュレーションの開発が期待される。

### 3. 将来の防火安全への多様な適用にむけて

火災性状のシミュレーションを安全面で活用する上では、単に熱気流の性状だけでなく、そこに介在する人間の動きあるいは構造的安定性といった幅広い研究領域といかに連成していくかが重要である。例えば、加熱によって生じる鉄骨造建物の耐力低下や構造体の変形や倒壊、木材の焼け細りによる梁や柱の脱落倒壊といった事象は、数値流体分野とは異なった専門領域である。その他、消防隊の放水による火勢抑制効果なども従来のシミュレーションの中では考慮されていない。こうした問題を取り扱うには、

従来の差分法のように格子をきってシミュレーションする手法だけではなく、粒子法[4]のような従来とは異なった手法をとりいれて行く必要があるかもしれない。写真は、最近行われた木造建築の校舎の実験である。現在のシミュレーションでは十分な現象の再現ができない現象が多々含まれている。近い将来、全過程を通して予測できる日が来ることを期待したい。

### 参考文献

- [1] 例えば 木村謙他, “マルチエージェントモデルによる群集歩行性状の表現” 日本建築学会計画系論文集, No.636, P.371 (2009.2)
- [2] 田中哮義他, “BRI2002 二層ゾーン建物内煙流動モデルと予測計算モデル”, (社) 建築研究振興会,(2002)
- [3] Kevin McGrattan et.al, “Fire Dynamics Simulator (Version 5)”, NIST Special Publication 1018-5 (2010.10) または <http://www.fire.nist.gov/fds/documentation.html> (2012年4月17日アクセス)
- [4] 越塚 誠一, “粒子法”, 計算力学レクチャーシリーズ, 日本計算工学会 (編集)



(a) フラッシュオーバー (b) 盛期火災の延焼過程 (c) 構造体崩落過程

写真 将来の火災性状予測シミュレーションに期待する一連の事象：

国土技術政策総合研究所による木造3階建て校舎の実大火災実験 2012年2月22日より

技術情報誌アドバンスシミュレーションは、アドバンスソフト株式会社 ホームページのシミュレーション図書館から、【カラー版】がダウンロードできます。(ダウンロードしていただくには、アドバンス/シミュレーションフォーラム会員登録が必要です。)

# プリオン病研究からのシミュレーション技術への期待

横山 隆

独立行政法人 農業・食品産業技術総合研究機構

動物衛生研究所 プリオン病研究センター 上席研究員

プリオン病は正常なプリオン蛋白質が構造変換した異常プリオン蛋白質に起因する致死性の中枢神経系疾患で、牛海綿状脳症(BSE)、やヒトのクロイツフェルト・ヤコブ病(CJD)が知られている。プリオン蛋白質は、同じアミノ酸の一次構造で、2種類以上の異なる立体構造をとる。正常型プリオン蛋白質と異常型プリオン蛋白質が良く知られているが、プリオンには生物学的性状の異なる株が存在することから、異常型プリオン蛋白質には複数のバリエーションも想定される。

この蛋白質の異常化が、プリオン病の発病機構の根幹となっており、病気の克服のためには分子レベルでのメカニズムの解明が求められている。しかし、そこには越えなければならない多くのハードルが存在している。異常プリオン蛋白質は不溶性かつ凝集性で、その構造解析がほとんど進んでいない。さらに感染性を有することが、この蛋白質の研究、解析を困難なものにしている。一方、正常プリオン蛋白質の構造は組換え蛋白質を用いて解析され、そのN末領域は不定形であることが知られているが、生体内での正常プリオン蛋白質の詳細な構造も明らかになっているとは言い難い。

蛋白質の構造変換のシミュレーションのためには、モデルを作成するための情報を集める必要がある。プリオン蛋白質の部分モデルと実験による検証を通じて、モデル化に必要な情報を集積していきたい。プリオン病研究センターとアドバンスソフトでは、これまでに家族性CJDの原因となる変異プリオン蛋白質の構造安定性を計算し、変換への引き金となる領域を推定した[1]。現在は、BSEに対する感受性、抵抗性動物における正常蛋白質の違いを明らかにすることを試みている[2]。

異なる立体構造をとる蛋白質と、それに伴う生物学的な表現型の違いについて解明していきたい。正常蛋白質の異常化プロセスのシミュレーション実現、すなわちプリオンの複製の分子メカニズム解明につながる技術の発展に期待している。

## 参考文献

- [1] Hasegawa K, Mohri S, Yokoyama T. (2010) Fragment molecular orbital calculations reveal that the E200K mutation markedly alters local structural stability in the human prion protein. *Prion* 4(1):38-44.
- [2] Hasegawa K, Mohri S, Yokoyama T. (2011) Comparison of the Structural Stability of Various Mammalian Cellular Prion Proteins Based on the Fragment Molecular Orbital Calculations. *Prion* 5 (Supplement): p95, *Prion* 2011, May 16-19, 2011. Canada

## アドバンスソフトへの期待

米川 太

出光興産株式会社 生産技術センター 主任技師

早いもので筆者が流動シミュレーションに携わってから既に20年以上になる。大学では当初の希望が叶わず流体力学の研究室に配属され、訳も分からないままなんとか自作の流動解析プログラムを作成していた。それらをパンチカードで入力し、計算機の前に並んで順番待ちという時代であった。無事卒業し入社すると、流体解析専門部署に配属された。自社開発ソフトを使用していたのはほんのわずかな期間だけで、Fluent や Star-CD 等の市販ソフトへの移行が急速に進んだ。当時は高額（確か3000万円？）な計算機を用いても数万メッシュの定常計算が精一杯であったが、学生時代にお世話になった川口先生がかつて手回し計算機で解析していたことを考えれば「なんと恵まれた環境なのか。」とバブル期の会社の設備投資に感謝しつつ計算に没頭する毎日であった。

この頃（旧）富士総合研究所さんの FLOW やクレイドル社のスクリー等の国産ソフトの導入も最大限前向きに検討したが残念ながら契約には至らず、前述の海外製ソフトを使い続けることになった。数年後、樹脂製品の解析部門に移り樹脂流動解析や樹脂製品の強度解析を担当することになったが、ここではインパネ等の複雑な形状を扱うことが多く、もはや自作ソフトで対応する等という発想はなくやはり使い勝手の良いポピュラーな海外製ソフトを使い続けた。それから10年ほど経過し、今回の本題につながるある出来事が起こり始めた。これを読んでいる皆様はおそらくほとんどの方が痛感していると思うが、ある時から海外ソフトの統廃合がはじまり、極めて一方的な価格体系の変更や従来ソフトの切捨て等、消費者本位とは180度異なる欧米型ビジネスが横行しはじめた。

数年するとまたも流体解析専門の部署にもどることになったが、ここでもすぐに同じことが

起こった。転属後まもなく、某流体解析ソフトの担当者から「開発元の方針により次年度から2倍の値上げになります、また形状作成ソフトの供給がストップしますので新規ソフト（かなり高額なもの）に変更してください」との一方的な通告がなされた。国内ユーザーの立場の弱さが浮き彫りとなった。あるセミナーで「日本人が海外メーカーに高い年貢を納め続けるのは悔しくありませんか？」というようなお話を聞いたことがあるが、この時それを痛感した。

そのような「悔しさ」も原動力の1つとなり、Advance/FrontFlow の導入検討を開始したのはちょうどこの頃になる。ある製造プラントの振動問題を検討することになったが、振動の発生源がサイクロン内部流動によるものであったためLESが必須となった（図1）。ソフトAでの計算では1ヶ月/ケースかかるのに対し、Advance/FrontFlow であれば同一計算機でも3日/ケース程度で解析できることがわかり即導入した。また、後から調査したところサイクロン旋回流動の計算においては同じLESを用いても、Advance/FrontFlow のほうがソフトAよりはるかに高精度であること、一般的には精度が良いとされているRANS(RSM)では想像以上に精度低下することを確認した（図2）。これらをきっかけに弊社においてLESの活用を加速させる活動が本格化した。一方ではLESを使用するには、解析領域、入口条件の設定、壁近傍のメッシュ品質等、数多くの難しさがあることも痛感した。

弊社では現在でもLESノウハウの標準化を目指し取り組み継続しているが、LESを専門としているアドバンスソフトの方からはこれまで多々ご指導いただき、たくさんの知見を得ることができている。われわれのような一般ユーザーにおいても今後は設計に直接反映できる超高

精度な LES 解析のニーズが高まるので、そのような信頼性の高い国内開発メーカーならではのフォローは今後とも是非継続していただきたい。

Advance/FrontFlow は市販ソフトの中では最も精度にこだわったソフトであることは間違いないので、あとは使いやすさや計算安定性が改善されれば、多くのユーザーへ普及していくと思われる。そういえば先に述べた約 20 年前の国産ソフト導入検討が頓挫したのも「使い勝手と安定性」が主要因であった。なんとか超高精度とアフターフォローを強みとした純国産ソフトのまきかえしを期待したい。

技術情報誌アドバンスシミュレーションは、アドバンスソフト株式会社 ホームページのシミュレーション図書館から、【カラー版】がダウンロードできます。(ダウンロードしていただくには、アドバンス/シミュレーションフォーラム会員登録が必要です。)

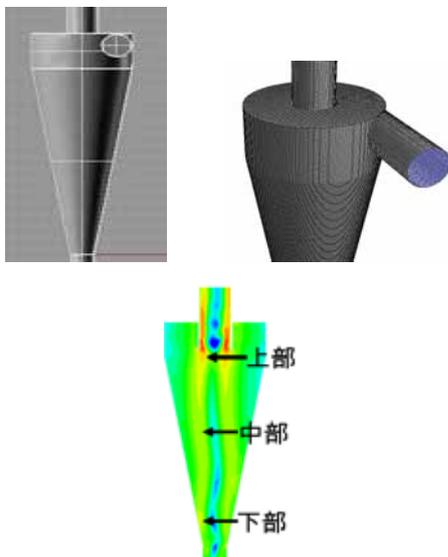


図 1 サイクロンモデル図、メッシュ例、中央断面流速コンター例

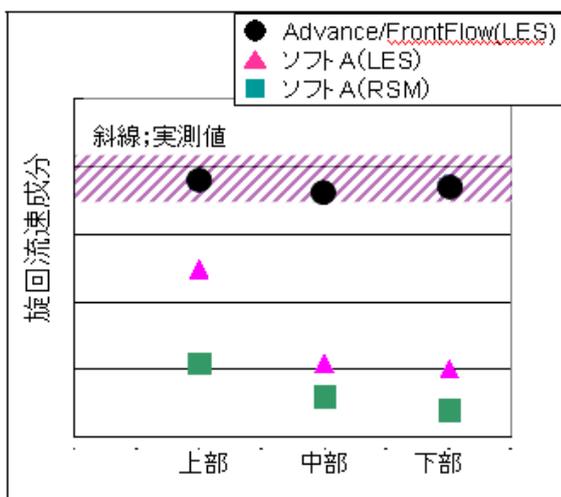


図 2 旋回流速成分

## アドバンスソフトへの期待

渡辺 正勝

光産業創成大学院大学

### 1. 光活性化アデニル酸シクラーゼの構造と機能に関する理論解析

2002年に著者らが単細胞藻ミドリムシの副鞭毛体より同定した、「光活性化アデニル酸シクラーゼ(PAC)」(論文[1])は、青色光に応答して鞭毛運動を変化させ細胞の強光からの逃避行動をもたらす、光 on のセンサーであり、「一人三役(光センシング・信号伝達・セカンドメッセンジャーcAMP合成)」のフラビン蛋白質である。

光活性化アデニル酸シクラーゼの導入による神経活動等の光制御:PACを細胞工学的に任意の細胞に導入して光条件により細胞内cAMP濃度を人為的に変化させ、各種の生命活動をコントロールする「細胞機能光スイッチ」として応用する可能性については、PACの発見当初より提唱していた。実際、東邦大の長濱辰文教授らとの共同で、cAMPによる神経応答現象が良く知られるアメフラシ感覚ニューロンにPACを導入したところ、光照射によって活動電位が変化することが明らかとなった(論文[2])。また、ドイツグループとの共同研究の成果として、アフリカツメガエル卵母細胞やヒト培養細胞においてPACの機能発現を実現して、人工発現したサイクリックヌクレオチド依存性チャネルの応答が光で制御されることが示され、さらにはショウジョウバエにおいて脳での発現と個体レベルでの行動の光制御に成功した(論文[2])。これらは、微生物光センサー導入による細胞内cAMP濃度と多様な生物機能の光制御という新しい分野を開拓した特筆すべき大成果である。

PACを構成する機能ドメイン、すなわち、光センシングドメインであるフラビン結合ドメイン(F1, F2)およびアデニル酸シクラーゼ触媒ドメイン(C1, C2)については、それぞれ他生物の類似タンパク質において、結晶構造解析

が行われている。それらの情報を元に、PACの機能ドメインのホモロジーモデリングを行い、フラビン結合特性、ATP結合特性等に関する理論解析を行った。その結果、F1とF2のフラビン結合性の違いが、発色団遠方アミノ酸残基の寄与によることが示唆されたほか、C1がATP結合に直接関与していることが示唆された。それらを基にしたドッキング解析によりサブユニット、サブユニット、PAC分子全体像のモデルができた(アドバンスソフト長谷川浩司博士と共同)。その3次元形態は、電子顕微鏡的単粒子解析の結果と極めてよく一致した。

また、最近明らかにされた硫黄細菌 *Beggiatoa* sp. PS のゲノム中には、PACの各機能モジュールの類似配列を1個ずつだけ有する遺伝子が存在する。この遺伝子は分子進化上想定されていたPACの祖先型ともいえるべきもので、構造もPACのサブユニットの半分に相当するシンプルさであり、モジュール間相互作用の解析や細胞工学的応用には格好の素材である。今回、この遺伝子にコードされるタンパク質(BsPAC)の機能解析を行い、これが光活性化能を持つアデニル酸シクラーゼとして機能することを確認し、光スイッチング能に関する突然変異解析を行った。この解析結果をこの硫黄細菌PACについての構造解析(アドバンスソフト長谷川浩司博士と共同)と合わせると、分子内信号伝達経路の空間分布について貴重な知見が得られた。

上記のように、バイオテクノロジー的にも極めて将来性のある新規蛋白質について、結晶解析の困難さを補って余りある知見をアドバンスソフト社との共同によるモデル構造解析から得ることができた。今後は、構造的のみならず光センシング領域の分光学的な実験解析と突き合わせられる電子構造的な情報のシミュレーショ

ン手段の開発や導入にも積極的な役割を果たされることを期待している。

### 参考文献

- [1] Iseki, M., Matsunaga, S., Murakami, A., Ohno, K., Shiga, K., Yoshida, K., Sugai, M., Takahashi, T., Hori, T., Watanabe, M., A blue-light-activated adenylyl cyclase mediates photoavoidance in *Euglena gracilis*. *Nature* 415: 1047-1051 (2002)
- [2] Nagahama, T., Suzuki, T., Yoshikawa, S. & Iseki, M. Functional transplant of photoactivated adenylyl cyclase (PAC) into *Aplysia* sensory neurons. *Neurosci Res.* 59 , 81-88 (2007).
- [3] Schröder-Lang, S., Schwärzel, M., Seifert, R., Strunker, T., Kateriya, S., Looser, J., Watanabe, M., Kaupp, UB., Hegemann, P. & Nagel, G. Fast manipulation of cellular cAMP level by light in vivo. *Nat Methods.* 4, 39-42 (2007).