

Title	数値シミュレーションはものづくりにもっと貢献できる： 義足の欠陥検出、金属組織の推薦アプリ、量子コンピュータなど広範な分野へ
Sub Title	
Author	池田, 亜希子(Ikeda, Akiko)
Publisher	慶應義塾大学工学部
Publication year	2023
Jtitle	新版 窮理図解 No.39 (2023. 11) ,p.2- 3
JaLC DOI	
Abstract	
Notes	慶應理工の計算固体力学と情報技術：これからのコンピュータ支援エンジニアリング (CAE : computer aided engineering) とは？ 機械工学科 村松真由 (准教授) 研究紹介
Genre	Article
URL	https://koara.lib.keio.ac.jp/xoonips/modules/xoonips/detail.php?koara_id=KO50001002-00000039-0002

慶應義塾大学学術情報リポジトリ(KOARA)に掲載されているコンテンツの著作権は、それぞれの著作者、学会または出版社/発行者に帰属し、その権利は著作権法によって保護されています。引用にあたっては、著作権法を遵守してご利用ください。

The copyrights of content available on the KeiO Associated Repository of Academic resources (KOARA) belong to the respective authors, academic societies, or publishers/issuers, and these rights are protected by the Japanese Copyright Act. When quoting the content, please follow the Japanese copyright act.

数値シミュレーションは ものづくりにもっと貢献できる

義足の欠陥検出、金属組織の推薦アプリ、
量子コンピュータなど広範な分野へ

村松さんは、数値シミュレーションの可能性を広げるため、他の手法と組み合わせたり、量子コンピュータに実装したりする方法を考えるなど、新たな分野に踏み出している。義足の欠陥検出や、金属組織を推薦するアプリケーションの開発、異なる数値シミュレーションをつなぐ方法の提案など、新境地の開拓によって達成した独自の成果について聞いた。

「有限要素法」で 物体の変形を究明する

飛行機の翼はどのくらいの荷重に耐えられるか。車のボディは衝突によってどのように壊れるのか。義足の材料内部に異物は混入していないか。安心して暮らすためには、材料について知りたいことがたくさんある。しかし、実際に実験するのは時間的にもコスト的にも難しい場合が多い。このような時に大きな力を発揮するのが、対象となる現象を表現する「数値モデル(方程式)」を利用して、コンピュータ上で模擬実験をする「数値シミュレーション」だ。

対象のスケールによって手法が異なるので、飛行機や自動車の材料を研究する

村松さんは、ミリメートルからキロメートルサイズの現象を扱うことができる「有限要素法」を主に使っている(図1)。この方法は、対象をポリゴン(多角形、表紙参照)に細かく分割し、それぞれのパーツについて運動方程式を解いて、それらを統合して対象全体がどのように変形するかを解析する。この方法は、すでに道路やビルといった構造物の設計などに実際に使われている。

「有限要素法はメインの研究テーマですが、もっと材料のことを詳しく解析できるようになりたくて、さまざまな手法と組み合わせて研究をしています」と村松さん。数値シミュレーションを、材料の開発や解析にこれまで以上に生かしたいと、自分の専門ではない分野へ次々に

飛び込んでいる。

義足の欠陥を見つけたい

—機械学習、有限要素法、応用実験を用いて

「有限要素法」に「機械学習(AIの一種)」と「応用実験」を組み合わせることで、義足の欠陥を見つけるアプリケーションだ。

義足は非常に強く軽い炭素繊維強化プラスチック(CFRP)でできている。この素材は飛行機の翼や、バイクのボディにも採用されているが、シート状の炭素繊維クロスを何枚も重ね合わせてつくるため異物が混入してしまうことがあり、それが材料の強度に影響する。そこで現場では、製品の安全保証のために、2人体制で超音波を使った全数検査を行っている。村松さんは、この負担を軽減するために、1人の検査員をAI(人工知能)で置き換えられないかと考えた。

「材料には、力を加えて変形させると発熱する性質があります。そこで、サー

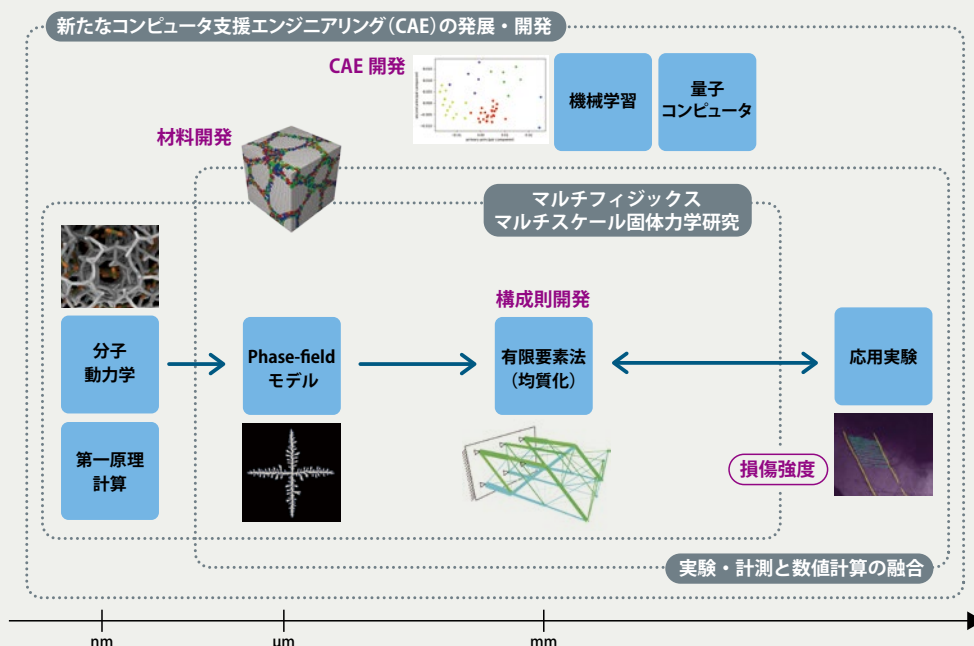


図1 村松さんの材料研究の概要

「有限要素法」を中心に、スケールの異なる数値シミュレーションや、機械学習、量子コンピュータ、応用実験を組み合わせることで、数値シミュレーションの新たな可能性を切り拓いている(灰色の点線囲み)。「マルチフィジックス、マルチスケール固体力学研究」とは、村松さんの材料研究が、熱と変形など複数の現象を組み合わせ、幅広いスケールで行われていることをいう。下部のスケールは、各数値シミュレーションが対象としているサイズに相当する。図中の画像は、各研究手法で得られた多様な研究成果。

分子動力学：原子や分子の物理的な動きの、第一原理計算：基本物理定数以外の実験値を用いない、Phase-field モデル：結晶成長の、有限要素法：複雑な形状や材質の物体や構造物それぞれのシミュレーションである。

マルカメラを使えば、材料にかかっている力の分布を温度の分布として捉えられます。この温度の分布が異物の有無により変わることを利用すれば、AIによって異物の混入を突き止めることができると考えました。

技術の実現には、異物の混入とその時の温度分布の「組み合わせデータ」をたくさん用意して、AIに学習させなくてはならない。ところがCFRPは高価なので、このデータのために幾通りもの異物が混入したCFRPを実際に大量に用意するという実験はできない。ここで力を発揮するのが、数値シミュレーションだ。少ない実験データをもとに、さまざまな異物の混入を想定したデータをコンピュータで作ることができるのだ。こうして義足への異物の混入の有無を判定するアプリケーションが誕生した(図2)。

材料の性質を決める材料組織を知りたい

—機械学習、有限要素法、Phase-fieldモデルを用いて

「材料内部のマイクロメートルサイズの組織(分離の仕方)によって、その材料の強度や加工性、変形の様式が変わるので、材料がどのような組織になる可能性があるのか、そのパターンを明らかにしたいというニーズがあります。さらに、その組織に力が加わった時の変形の様子が知りたいわけです」。この計算は、従来の数値シミュレーションでも可能だが、非常に時間がかかる。これでは実際の材料開発には役立てられないと考えた村松さんは、機械学習を2回使って問題を解決した。

「1回目の機械学習の使用によって材料の組織のパターンを考えます。2回目の

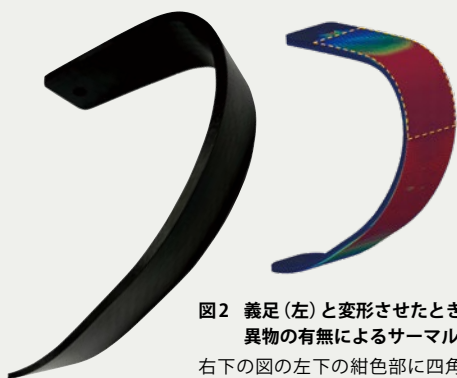


図2 義足(左)と変形させたときの応力分布(中)と異物の有無によるサーマルカメラ画像の違い(右) 右下の図の左下の紺色部に四角い異物が混入している。上の図は異物なし。

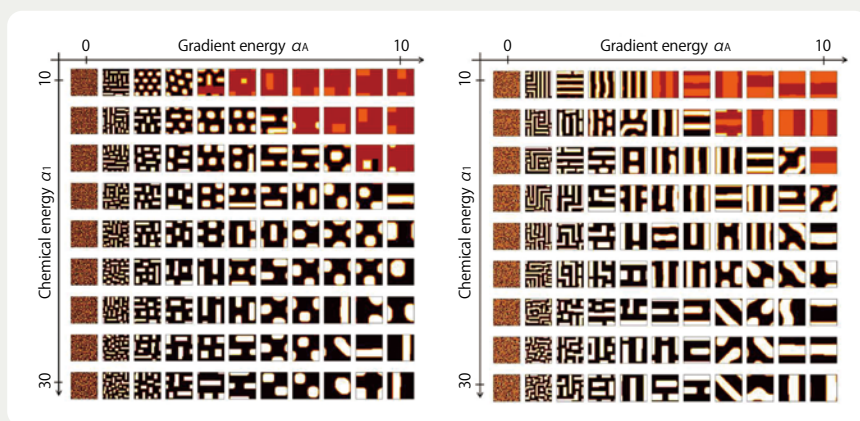


図3 量子コンピュータが導き出した材料組織のパターン

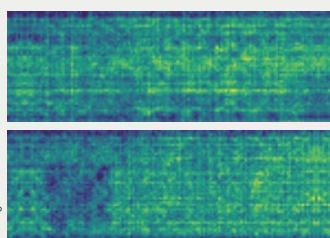
2種類の材料がどのような材料組織(分離の仕方)となるかを計算した。右に行くほど温度が高いなど材料が混ざりやすい条件の場合、下に行くほど2種類の材料の性質が異なり、混ざりあいにくい場合。左図は、2種の材料が7:3の場合、右図は6:4の場合。

機械学習の使用によって、加わった力に対してその組織がどのくらい伸びて衝撃を吸収でき、材料として強いのかを予測します。こうして望みの性質をもつ組織のパターンを推薦してくれるのです。

数値シミュレーションに新たな展開を

義足の欠陥を見つけたり、材料の組織を推薦する技術は、どちらも「数値シミュレーションで得られたデータをもとに生かしたい」という思いから誕生したものである。

村松さんは、さらにもっと先を見据えた研究にも取り組んでいる。ひとつは、「分子動力学」と「有限要素法」をつなごうとするもの。「有限要素法で材料を解析する時、その材料が金属なのかプラスチックなのか、セラミックスなのかを指定します。材料の特性が違くと、それを解くための方程式(構成則)が違います。そのため構成則が存在しないまったく新しい材料は解析できません。しかし、そもそも構成則は分子動力学による分子スケールのシミュレーションから導き出されます。それなら、分子動力学と有限要素法を直接つないでしまえばいいのでは



ないだろうか」。構成則を介さずにスケールの異なるシミュレーションをつなごうという大胆なアイデアは、すでに一部は成功しているという。

さらに、これらの数値シミュレーションを、次世代のコンピュータとして注目される量子コンピュータで実行できるようなアプリケーションの開発を進めている。量子の性質を利用する量子コンピュータは、私たちが今使っている古典コンピュータとは動作の原理が異なるため、まったく新しいアプリケーションを開発しなければならない。

こうした課題に挑めるのも、慶應義塾大学に在籍しているからこそだという。

「まず、伊藤公平塾長が量子コンピュータの研究者ですし、2018年に慶應義塾大学は、米国IBMの量子コンピュータ実機「IBM Q」の最新版にアクセスできるアジア初のハブになる(『新版 窮理図解』29号)など、量子コンピュータには強い大学です。計算力学でも使えないかと考えました」。

まだ解像度は粗いものの、いろいろな材料をブレンドしてできる組織のパターンを1秒ほどで算出できる。これまでは20分かかっていたというから、これは非常に大きな進歩であり、量子コンピュータの高精度化・実用化が待たれる(図3)。

村松さんの研究は実に幅広く、この紙面だけではとても紹介しきれない。その上、これから何の研究をするかも予想できないので、村松さんの動向から目が離せない。(取材・構成 池田亜希子)