

材料デザイン学 第 13 回

研究手法 2/計算機シミュレーション

岸田 逸平

Last-modified: 2016/10/12 22:25:33.

目次

1	計算機シミュレーション	2
1.1	シミュレーションとは何か?	2
1.2	シミュレーションゲーム	2
1.2.1	ゲームの例の概説	3
1.2.2	シミュレータの構成	3
1.2.3	解析	5
2	材料デザインに用いられる計算	5
2.1	手計算	5
2.2	有限要素法 (Finite Element Method, FEM)	6
2.3	分子動力学法 (Molecular Dynamics, MD)	7
2.4	第一原理計算 (First-Principles Calculation、 <i>ab-initio</i> Calculation)	8
2.5	計算手法の使い分け	10
2.6	マルチスケールモデリング	12
2.7	その他	14
3	まとめ	14
3.1	授業評価アンケート	14
3.2	レポート講評	14
3.3	前回小レポート講評	14

1 計算機シミュレーション

今回は、科学的な研究・開発手法として実験・理論・計算を取り上げ、実際の実験による開発の前に対象を絞り込む事の重要性について論じた。次の材料開発のために、実際に実験をする前の段階で性能を予測し、ある程度評価しておきたい、ということである。理論と計算を組み合わせることでよりよい予測が可能となる。本節では、材料開発においてよく用いられる計算手法を幾つか紹介する。

1.1 シミュレーションとは何か？

シミュレーション【simulation】物理的・生態的・社会的等のシステムの挙動を、これとほぼ同じ法則に支配される他のシステムまたはコンピューターの挙動によって、模擬すること。(広辞苑第五版)

初期条件とルールに対して、現実あるいは仮想の現象を模倣するということだ。べつにコンピュータを使わなくても、脳内で行う練習も「シミュレーション」には含まれる。私も授業の前に準備として進行をシミュレートする。ただし、科学においてシミュレーションというと計算機を使うものにほぼ限定される。

1.2 シミュレーションゲーム

自動車教習にシミュレータを使った講習がある。現実には事故を起こすことなく、事故の原因になる状況を再現できるので 現実のリスクなく安全性を確保したまま 効果的な学習が可能となる。

コンピュータゲームのジャンルの一つにシミュレーションゲームというものがある。これも計算機シミュレーションの応用の一つだ。ただしこれはゲームなので顧客に楽しんでもらう事が第一目的であり、科学的なシミュレーションとは目的が違う。たとえばプレイヤーの選択肢がある、ネガティブな結果はゲームオーバーとなる、などの相違点がある。しかし、シミュレーションとしての核となる部分は備えているのでまずこれを例に説明を進めよう。核になるのは、モデル化とルールである。

1.2.1 ゲームの例の概説

一つのゲームを想定しよう。このゲームでは、各々のキャラクター同士が叩きあって、攻撃力と守備力でダメージを算出し、ダメージ分だけヒットポイントを減らす。ヒットポイントがゼロになるとキャラクターが使用不能になる。自軍と敵軍で交互にターンを処理し、ターン内では各キャラクターが1回ずつ行動できる。ターンを繰り返し、どちらかが勝利条件を満たせばゲームが終了する。初期条件が設定され、シミュレーションを開始すれば、ルールに従って状況変化を追い、最終的には勝敗が明らかになる。

これは非常に単純なシミュレーションであって精度の点からは問題があるが、構成要件上からは十分に戦闘のシミュレーションと呼べる物である。

1.2.2 シミュレータの構成

モデル化

§1.2.1 の説明の中に、このゲームで行われているモデル化が示されている。

人間 この例では、人間を「攻撃力・守備力・ヒットポイント」の3つのパラメータでモデル化している。勿論、人間が持つ特性はこの3つの数値ではおさまりきらない。たとえばフットワークもあるし、技術や知性、経験もある。筋力としても、上半身の力と下半身の力は別個のものだし、さらに上半身でも大胸筋と広背筋も別個のものだ。「様々な能力を大別して3つに振り分ければ良い」と、この架空のデザイナーは考えたのだろう。

戦場 シミュレート対象は経時的な変化をする戦場なので、時間経過を表現する必要がある。この時間経過をターンというシステムで表現しており、これがこのゲームにおける時間のモデル化である。

実際の戦場ではターンという時間単位はなく、散発的かつ同時多発的にイベントが発生するものだが、これをターンという時間の区切りに押し込んでしまっているわけだ。^{*1}

近似 人間にせよ戦場にせよ、作ろうとすればいくらでも精細なモデルを作ることができる。しかしその精細なモデルが解析としての実効性を持つかは別問題だ。現実の問題は様々なパラメータが複合的に絡みあって影響しているが、対象に対する精度の影響がない範囲で近似を行う。これがモデル化の肝である。

*1 時間とは別に、空間についても丸め込みを行っている。実際の空間は3次元空間だが、2次元に落とし込むこともよく行われる。

過去の講義におけるモデル化 第4回の複合材料の弾性率の議論でも

1) というものを扱った。あれは複合材料の特性を表現するために繊維に対する方向ごとに体積分率をもってモデル化を行ったものだ。勿論、材料の持つ性質は体積分率だけで近似するのは粗い近似であるが、それで説明できる部分を説明すれば良いという割り切りがそこにある。

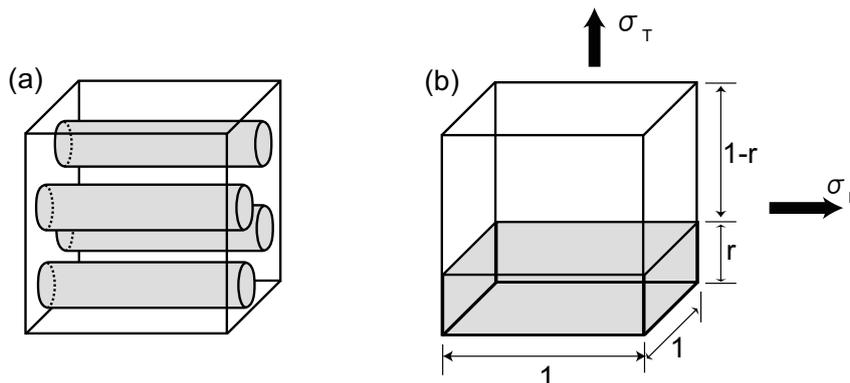


図1 (fig20131105b)

ルール

ルールの部分が科学的なシミュレーションにおける理論に相当する部分である。ほぼ再掲になるが、以下がそれに該当する。

人間に関するルール

- 攻撃力と守備力でダメージを算出。たとえば「ダメージ = 攻撃力 - 守備力」。
- ダメージ分だけヒットポイントを減らす。
- ヒットポイントがゼロになるとキャラクターが使用不能になる。

戦場に関するルール

- (a) ターン内では各キャラクターが1回ずつ行動できる。
- (b) 自軍と敵軍で交互にターンを処理し、これを繰り返す。

これらのルールがモデル化と密接に結び付いていることが分かるだろう。モデル化と理論はそれぞれ、基本的に独立では存在しえない。理論はモデルにおけるパラメータを前提とし

て論理展開されるものだし、逆にモデルを考えるとときにはそれぞれのパラメータをどのように利用するのかというルールを同時に考えるものだ。^{*2}

1.2.3 解析

初期条件

モデルとルールに従ってシミュレートしたい対象を具体的に設定する。たとえば各能力値を持ったキャラクターをマップ上に配置する、など。

結果と解析

初期条件とルールに従って、状況推移をシミュレートすることで、どちらが勝つか、損害がどのくらいか、などの結果が得られる筈だ。^{*3}

自軍の配置を調整し、よりよい条件で戦闘を終わらせるための初期条件を模索するためにも使えるだろう。

2 材料デザインに用いられる計算

2.1 手計算

モデルと理論が十分に単純であり、数式が解析的に解ける場合には計算機を用いるまでもなく、手計算で評価が可能である。^{*4}

- 複合材料の密度^{*5}・弾性率。(第4回, Fig. 1)
- 複合材料の靱性。(第5回, Fig. 2)
- 良導体の断面積による導電率の設計と価格の評価(第6回)

^{*2} ただし、依存性という観点では、理論がモデルに依存している傾向が強いとは言える。モデルのパラメータ項目が変わればそのパラメータを使う計算式が必要になるが、モデルを変更せずとも理論の計算式(特に調整パラメータが)変化することがありうる。たとえば「ダメージ = 攻撃力 / 守備力」のような式にすることも可能だろう。

^{*3} なお、プレイヤーの選択肢は科学的なシミュレーションにはほとんど関係ないので省略している。ゲームにおいてはプレイヤーによる干渉によって結果が変化することが本質的な役割を果たしており、一般的な科学的なシミュレーションとはこの点で大きく異なっている。

^{*4} なお、こういった単純な計算手法は通常、科学的手段としての計算機シミュレーションと呼ばれるものに含まれない。

^{*5} 本講義内で「線形モデル」と呼んだもの。

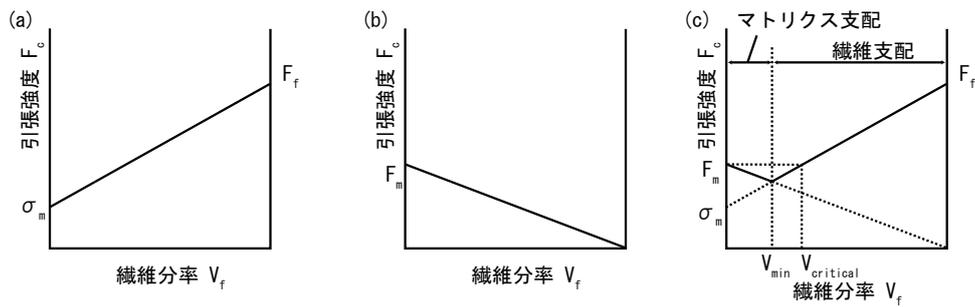


図 2 (fig20131113a)

2.2 有限要素法 (Finite Element Method, FEM)

物体を有限の区画 (_____ , Finit element) に分割し、それぞれの区画ごとに現象を解析する。主にマクロスケールの現象の解析に適用される。構造力学への応用が発達しているため、これを例に挙げる。

片持ち梁 (Fig. 3 (a), (b)) 程度ならば解析的にとけるが、航空機などの複雑な形状をした実用品では解析的に解けることはほとんどない。有限要素法は物体を解析的に解ける範囲の小領域に分割し、それぞれの部分の振舞いを総合して全体の挙動を解析する手法である。(Fig. 3 (c), (d))

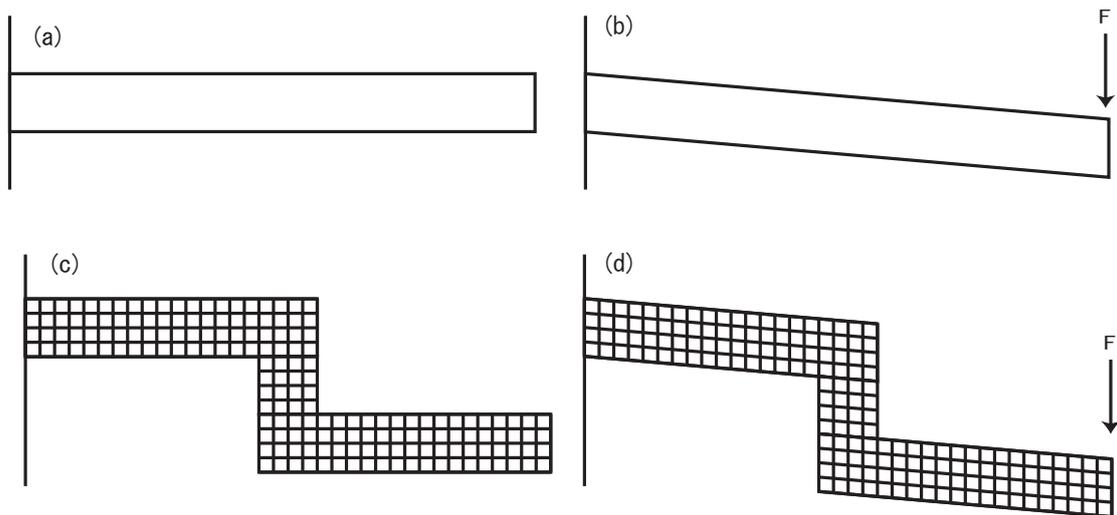


図 3 (fig20160121a)

モデル化 材料全体が、微小な区画で構成されており、それぞれを独立して解析可能という前提のもとでモデル化されている。有限要素が §1.2.2 の例における人間に相当する。

これらの有限要素の集合である固体全体が §1.2.2 の例における戦場に相当する。

理論 応力と歪みの解析の場合、_____ という確立された理論に拠っている。適切に分割された有限要素を用いれば、十分に解析的に解ける程度の形状に近似できる。これが §1.2.2 の人間に関するルールに相当する。

ある瞬間に働いている応力はその有限要素を歪ませようとし、その歪みが次の瞬間に周囲の有限要素に対して応力を働きかける。これを全ての有限要素について計算する。これが §1.2.2 の戦場に関するルールの (a) に相当する。

ある瞬間瞬間における変位と応力を任意のタイムステップを挟んで遷移させることが、§1.2.2 の戦場に関するルールの (b) に相当する。

2.3 分子動力学法 (Molecular Dynamics, MD)

§2.2 で示した FEM はバルク材料のマクロスコピックな現象を解析するのに有効な手法であったが、よりミクロな現象を解析するには適当ではない。たとえば _____ や _____ の一つ一つの運動を解析する必要がある対象、たとえば分子反応過程などの解析には適さない。

分子動力学法では物質を均質一様な連続体として捉えるのではなく、原子や分子といった粒子の集合と捉える。応用例は以下。

- タンパク質の合成、挙動など。
- 気体や液体の挙動。(Fig. 4)

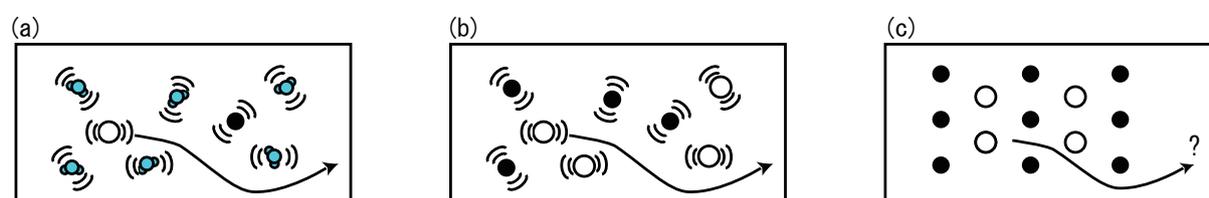


図4 (fig20131128a) イオン伝導の模式図。(a) 水溶液。(b) 溶融塩。(c) 固体。

モデル化 系全体が粒子の集合として構成されていると前提のもとでモデル化されている。粒子とは主に _____ だが、場合によっては複数原子からなる _____ を 1 つの粒子として扱う。これらの粒子が §1.2.2 の例における人間に相当する。

これらの粒子を含む空間全体が §1.2.2 の例における戦場に相当する。

理論

§1.2.2 の人間に関するルールに相当する部分 _____ という確立された理論に拠っている。すなわち、各粒子は 3 次元空間における座標と速度ベクトルという 6 つのスカラー値のパラメータを持ち、これによって運動量、エネルギーを計算する。

粒子間には相互作用が働く。帯電した粒子同士には静電的な相互作用が働く。正負それぞれに帯電した粒子間には静電引力が働くが、これをクーロンの式にそのまま適用してしまうと両粒子間の距離が無限小になるまで落ち込むことになり、現実には合わない結果を生じることになる。^{*6} 粒子には、お互い極端に近付くと斥力を及ぼすと考えられる。これらの相互作用を総合したポテンシャルが設定される。

§1.2.2 の戦場に関するルールに相当する部分 ある瞬間において、粒子に働く力を全ての粒子からの相互作用を足し合わせ、これを粒子の質量で除して加速度ベクトルとし、次の瞬間の速度ベクトルを求める。また、速度ベクトルから任意のタイムステップにおける移動距離を算出し、次の瞬間の座標を求める。これを全ての粒子について行うことが、§1.2.2 の戦場に関するルールの (a) に相当する。

このようにして求めた瞬間瞬間を繋いで経時的な変化を見ることが、§1.2.2 の戦場に関するルールの (b) に相当する。

2.4 第一原理計算 (First-Principles Calculation、*ab-initio* Calculation)

§2.3 で説明した MD は原子単位の現象を解析するのに有効な手法であったが、よりミクロな現象を解析するには適当ではない。原子より小さなもので材料の現象に強く関係するものがある。そう _____ だ。この挙動が関係する現象、電気的特性や光学的特性について、FEM や MD は適当な手法とは言い難い。(Fig. 5, 6, 7)

このような対象をシミュレートするには電子の挙動を記述した理論が必要になる。これが

^{*6} 古典力学の限界でもある。

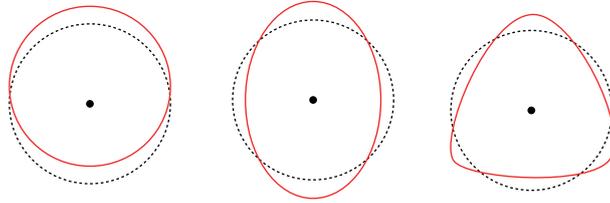
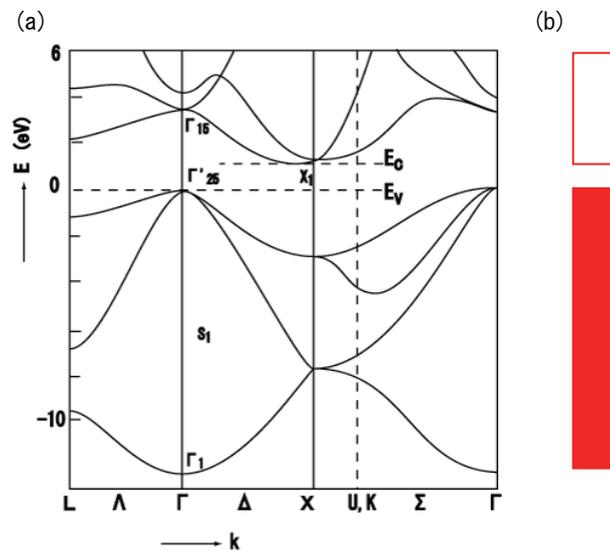


図 5 (fig20121113a) 電子 orbital の模式図。黒丸が原子核、破線が原子半径に沿った円、実線が orbital である。正確には orbital は 1 本の線で表されるわけではなく 3 次元的な広がりをもっている。



<http://ja.wikipedia.org/wiki/%E3%83%95%E3%82%A1%E3%82%A4%E3%83%AB:Si-band-schematics.PNG>

図 6 (fig20121113f) Si のバンド構造の模式図。(a) k-E 図 (Wikipedia より引用)、(b) エネルギー図と占有・非占有バンド。

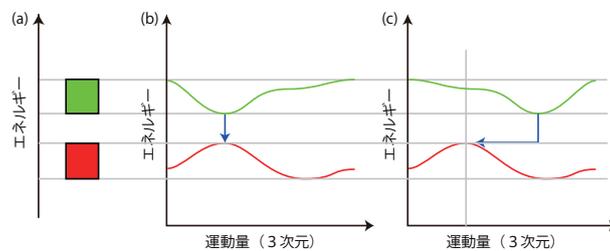


図 7 (fig20111117b)

量子力学である。量子力学を用いることで電子の挙動を正しく取り扱うことができる。なお、「第一原理」とは「実験データや経験的なパラメーターに頼らずに理論のみから成り立っている」という意味だが、とりあえずは「量子力学」のことだと思っておいてもほとんど問題はない。応用例は以下。

- 電子を媒介とする化学反応。
- 電子論から見た完全結晶や欠陥のエネルギー。

モデル化 物質が原子核と電子から構成されているとモデル化している。原子核は固定された座標に存在し、電子が波動関数として広がりを持っていると考える。この原子と電子(あるいは波動関数)のそれぞれが §1.2.2 の例における人間に相当する。

これらの粒子を含む空間全体が §1.2.2 の例における戦場に相当する。

理論 _____ という確立された理論に拠っている。^{*7} 原子核が任意の座標に配置されたとき、静電的なポテンシャル場が定まる。このポテンシャルに対して取り得る波動関数を仮定し、この波動関数がどのように変形するとより適した形になるのかを求める。この原子核・波動関数の関係が §1.2.2 の人間に関するルールに相当する。

次のステップでは波動関数を求められたより適した形に変形して、さらに数値解析的に最も適した形に近づけていく。この部分が §1.2.2 の戦場に関するルールの (b) に相当する。

この手順により、波動関数が求められる筈である。物質が持つ波動関数は無数にあるが、このうちエネルギーの低いものから順に電子が詰まっていく。電子の数は原子核の価数によって決まるので、その数だけ埋めたところでその物質の電子状態が求められることになる。(Fig. 8 (b))

2.5 計算手法の使い分け

先に述べたように、計算機シミュレーションはモデル化と理論を核に構成されている。モデル化を行うということは、そのスケール以下の構成要素の細かい挙動を無視して総体として扱うということである。そのため、そこで無視された細かい挙動が重要な役割を果たす現象については解析できないことになる。たとえば FEM では分子反応過程やイオン伝導を扱えないし、分子動力学法では電気的特性や光学的特性のほとんどを説明できない。第一原理

^{*7} 量子力学、第一原理計算というのは直感的ではなく非常にボリュームの大きな学問である。本講義はざっくりとした理解を目的としているので、細かいところには立ち入らず、厳密さを欠く表現であっても(これも)平易な表現に留める。

2.6 マルチスケールモデリング

とはいえ、マクロスケールの挙動を量子論のようなミクロスケールの理論から出発して解析することも工夫次第で可能となる。その手法の一つがマルチスケールモデリングである。簡単に言えば、小さなスケールでの計算結果をより大きなスケールの計算機シミュレーションに用いる、ということを経段的に接続していくのである。

例: 原子炉構造材料の寿命予測 構造物の寿命予測は産業上非常に重要である。特に人の足場や生活を支える大規模構造材料ではその重要性が高い。例として、橋梁や原子炉材料が挙げられる。同じコストで作っても、その寿命が尽きるギリギリまで使用してそれから作り直したいものだ。10年保つのか、20年保つのか。最適な保守計画を立てる為に、材料の劣化を予測する必要がある。原子炉は通常鉄系金属材料で構成されるが、原子炉内部で生じる中性子線により原子が弾き出され、結晶構造に変化が生じる。これが転位の運動に変化を生ぜせしめ、機械的強度と靱性に影響を与える。あまりに長期間放置すると材料が脆化し、破壊に至り、密閉すべき放射性物質が炉外へ放出される。

機械強度的な劣化とは、結晶の原子配列の乱れによって生じるものである。よってその原子配列の乱れがどのように生じるか、進展するかを知ることができれば劣化の経時変化を知ることができると言える。中性子照射による機械的性質の劣化をスケールに注目して順序立てると以下のようなになる。

1. (pm オーダー) 核反応過程
2. (nm オーダー) 原子衝突過程
3. (μm オーダー) 欠陥拡散・成長過程 (Fig. 10)
4. (mm オーダー) マクロ過程

大きなスケールの現象は、より小さなスケールの現象に依存している。ということは、最小オーダーの現象から正確に追っていけばマクロスケールの現象も解析できることになる。(Fig. 9)

手順の概略:

1. 小さな領域について計算を行って情報を抽出する。
2. 得られたデータを使って、より大きな領域の解析のための計算を行う。
3. これらを繰り返し、マクロな機械的性質を得る。

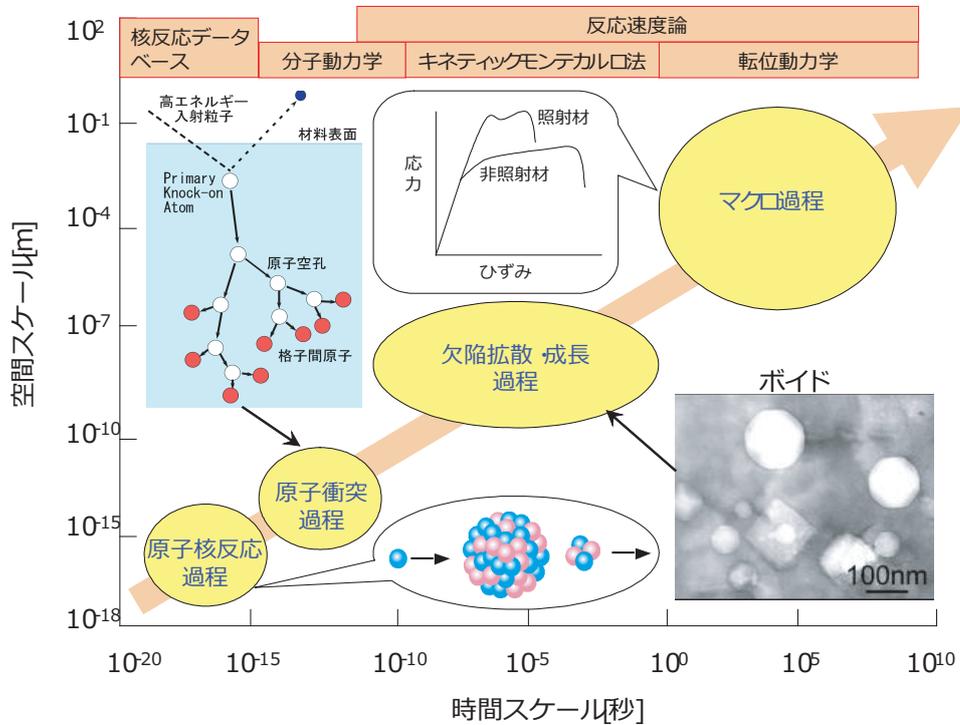


図 9 (fig20111011a) 中性子照射損傷に対するマルチスケールモデリングの概念図。

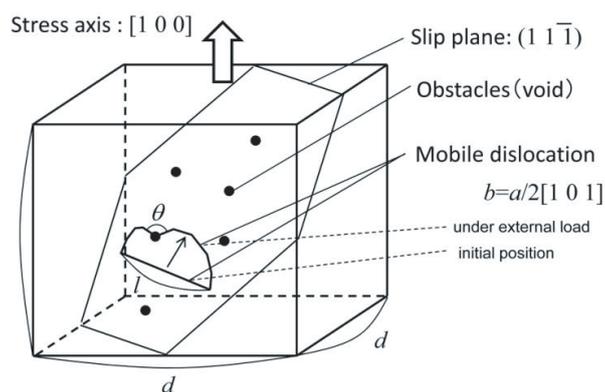


Fig. 15 A schematic illustration of a model crystal for the DDD simulations.

図 10 (fig20111011b)

2.7 その他

今回示したものが計算機シミュレーションの全てではない。基本的に、理論があればそれに従った計算プログラムが作成可能である。諸君らが将来取り組む問題に対しても、何らかの計算機シミュレーションは可能であろう。^{*9}今迄誰も作っていなかったのならば、そのシミュレータを作ることも大きな仕事として評価されうる。

3 まとめ

- モデル化とルール
- 有限要素法 (FEM)
- 分子動力学法 (MD)
- 第一原理計算
- マルチスケールモデリング

3.1 授業評価アンケート

3.2 レポート講評

次回に返却する。

3.3 前回小レポート講評

全数走査 $101 \times 31 \times 10 = 31310$ 点。

方法の説明の詳細は省略。

- 濃度について、 $\log_2 101 < 7$
- 温度について、 $\log_2 31 < 5$
- 時間について、 $\log_2 10 < 4$

$7+5+4 = 16$ 。よっておよそ 16 点のオーダー。

それぞれの軸を全数走査して 140 点 (あるいは 142 点) という答えが多かった。それぞれ

^{*9} それが有効な手段かどうかはともかくとして。

の軸について、二分探索が可能という点に注意しよう。

3.4 今回小レポート課題

冬休みの宿題レポートで選んだ対象の研究開発について、計算機シミュレーションの適用できる部分を洗い出し、それらについて可能な限り詳細に説明せよ。