発 行 所 日本機械学会 計算力学部門
お問合せ 03-3560-3505

ISSN 1340-6582

日本機械学会 計算力学部門

CMD Newsletter

COMPUTATIONAL MECHANICS

計算力学部門ニュースレター No.46

April, 2011

3月11日に発生しました東日本大震災におきまして、亡くなられた皆様のご冥福をお祈りいたしますとともに、被災された皆様に謹んでお見舞い申し上げます。

目次

部門長就任・退任の挨拶 ……2
- 部門長就任にあたって 梶島岳夫
- 部門長退任にあたって 辰岡正樹

トピックス ……4
- 日本機械学会計算力学部門初代委員長の矢川元基先生が「国際計算力学連合会長」に選出されました 辰岡正樹

部門賞 ……4
- 2010年度計算力学部門賞贈賞報告 大林 茂
- 功績賞を受賞して 大野信忠
- Thoughts upon Receiving the JSME Computational Mechanics Award Gui-Rong Liu
- 業績賞を受賞して 西脇眞二
- 業績賞を受賞して 山本 誠
- 業績賞を受賞して 秋葉 博

特集・オープンソースCAE ……11
- オープンソースCAE開発のために必要なこと ―流体解析システムFrontFlow/redを事例として― 大島伸行
- 次世代流体解析ソフトウェア FrontFlow/red 張 会来
- OpenFOAMの現状と課題 大槻真人
- CAE信頼性評価の動向とOpenFOAMの検証 柴田直文
- OpenFOAMを用いた燃焼解析 山本研二
- オープンCAE：DEXCSの可能性 柴田良一／野村悦治
- ソフトマテリアルのための統合化プラットフォームOCTA 青柳岳司
- オープンソースコードを用いた粗視化分子動力学シミュレーションの取り組み 篠田 渉

計算力学部門への期待と望むところ ……27
- 有限要素法×材料力学＝面白い 岸 正彦
- 計算力学部門への期待と望むところ ―粒子法とGPGPUとの出会いを通じて― 川上 浩
- 繊維製品への数値解析法の適用の期待 横山敦士
- CAE／計算力学部門への期待と望むところ 戒田拓洋

部門からのお知らせ ……35
- 第23回計算力学講演会開催報告 大橋鉄也
- 第23回計算力学講演会優秀講演表彰 辰岡正樹
- 2011年度年次大会の部門企画について 天谷賢治
- 第24回（2011年度）計算力学講演会のご案内 多田直哉
- 25周年記念計算力学部門講演会および記念国際会議のお知らせ 平野 徹

委員会・研究会からのお知らせ ……41
- 2010年度計算力学技術者認定事業報告 長嶋利夫
- JCST (Journal of Computational Science and Technology）の紹介と投稿のお願い 岡田 裕
- 2011年度日本機械学会計算力学部門賞（功績賞・業績賞）募集要項 熊谷理香

部門長就任・退任の挨拶

部門長就任にあたって

梶島　岳夫
大阪大学 大学院工学研究科 機械工学専攻

第89期計算力学部門長就任のご挨拶を申し上げるにあたり、ホームページに掲載されているニュースレターから歴代部門長の所信を通読しました。いずれも計算力学に関する見識と部門運営に対する情熱にあふれた格調高いメッセージでした。筆者自身は、諸先輩の功績を継承しつつ、若干のスパイスを追加できればと望むのみです。

計算力学は、様々な意味で岐路にさしかかっていると言えるでしょう。四半世紀ほど前は、“Computers vs. Wind Tunnels”なる刺激的な表題の論文（Chapman, D. R., et al., 1975）が話題になり、筆者の研究分野であるCFD（Computational Fluid Dynamics）はまさに興隆期でした。それゆえに無理解との闘いも少なからずあり、講演会では「実験せずに結論できるのか？」という批判的質問が飛び交ったことを記憶しております。爾来、Colorful Fluid DynamicsとかComputation for Directorなどと言葉遊びしながらも、多くの研究者が「本寸法のシミュレーション」を目指して営々と努力を続けました。その結果、シミュレーションだけで解決できる問題も増えています。さらに、シミュレーションでなければ解決できない課題、シミュレーションによる発見などの方法論が議論される今日、計算力学にはいっそう質の高い発展が期待されます。

コンピューターについて、社会現象と言ってもよい動きが最近ありました。新たな高性能計算機システムの設置は、第三期（2006～2010年度）科学技術基本計画では強化すべき共用研究設備の筆頭でもあり、順風満帆であるかのようでした。しかし、2009年には、関連企業の部分的な離脱に続き、いわゆる事業仕分けの荒波を受けました。その後、多くの識者が憤慨し、危機感をもち、個人として、あるいは組織だって意見を公表しました。ここでは一連の動きを振り返ることはいたしませんが、筆者としては質問を発した側の次の一言『この初めての盛り上がりを有効に利用すべきは（中略）科学者の方たちだと私は思っています』（蓮舫著「一番じゃなきゃダメですか？」PHP研究所）が印象的でした。これがご本人の当初の意図であったかは知る由もありませんが。

世界最高峰の計算機を磨き上げても、計算力学が自然に発展するわけではなく、産業競争力が高まる保証もありません。たとえは良くないかも知れませんが、計算力学の研究者にとって、計算機は武器といえるでしょう。ここで想起すべきは、『日本の兵器の開発が、それぞれの兵器の戦闘力を直接増すことだけに力を入れすぎ（中略）この傾向は、反省されることなく戦後にも持ち越された』（木村英紀著「ものつくり敗戦」日本経済新聞出版社）の指摘です。匠の技に依存した先鋭化や大艦巨砲主義の挫折を技術面から分析し、「理論」「システム」「ソフトウェア」の重要性を論じたこの書物は、計算力学が目指すべき方向を考えるためにも示唆に富んでいます。

計算力学の分野は、世界一の計算機の出現を待つだけと言える段階にあるでしょうか。基礎研究では、自己満足的な計算手法の作成に没頭する傾向はないでしょうか。論文に載っている計算結果は、その方法で可能な唯一のケースかも知れないから、眉に唾して見なければならぬという戒めは今でもあります。一方、応用技術は、市販ソフトウェアを「活用」できる範囲での適用にとどまってはいないでしょうか。既存の方法を既知の現象に適用し、既に把握されているパラメーターを操作すれば解決できる程度の技術課題はブレイクスルーとは無縁でしょう。

その意味で、計算力学の現状は、難題を放置したままの中途半端な成熟期にあるという認識を禁じ得ません。興隆期は、新規参入する若手にとって魅力的です。完成後は、新たな課題に活用される道具となります。両者の間で成熟しつつある段階では、何がわかっていないのかは十分にわかっているのに、労多くして功少なしの予感がするから次世代から敬遠されるような停滞期に陥ることは避けなければなりません。そのため、数値シミュレーションの無限の可能性を明確化し、新規領域の開拓を促進する交流の場としての部門の役割、さらに部門登録者の責任は重大です。

筆者も時々、計算法やモデルについて相談を受けることがあります。しかし、万能の方法は存在しないので、解析する目的や使用可能な計算機によって、最適な手段は異なるはずです。「対象を徹底的に検討した結果、当面の答えが得られたから、計算（あるいは測定）する必要がなくなったという状態が理想です」と、自分としては会心の回答を準備しているのですが、質問者が必ずしも満足してくれないのが難点です。いずれにしても、計算や実験に取りかかる前の考察が十分である場合のみ、結果を鵜呑みにせずに有効利用することができ、現実と合致しない場合の対処も的確にできるはずです。その際に求められるのは、高性能な計算機や多機能な計算ソフトウェアだけではなく、考察や判断のために不可欠な知識の総合です。

計算力学の成果物は、新しい技術を開発したり、差し迫った社会的問題を解決したりするための工学ツールとしての価値と機能を持たなければなりません。工学的な意味において新たな発展のためのキーワードとして、前掲の「理論」「システム」「ソフトウェア」とともに、普遍的な知識に統合す

る「数学モデル」の重要性を強調したいと思います。

最後に、今期の計算力学部門に関連して、既に始まっている新しい動きをいくつか紹介しておきたいと存じます。ひとつは、2012年度には部門創設25周年として、定例の計算力学講演会に加え、特に進展著しいアジア地域のいっそうの振興と日本のリーダーシップをアピールする国際的な記念行事が企画され、実行委員会（姫野龍太郎委員長）が発足しています。また、国内での基盤を確固たるものにするため、日本学術会議「計算科学シミュレーションと工学設計分科会」（矢川元基委員長）に計算力学小委員会が設置され、発足時には当部門から筆者が出席しました。ここでは、各学協会が企画する国内会議・国際会議における連携のほか、若手育成、産学協同、国際貢献などの方策が話し合われています。

第88期の計算力学部門は、辰岡正樹部門長の主導により、CAE懇話会が第23回計算力学講演会に協賛してフォーラムを開催するなど、企業技術者の参画と交流が促進されました。また、総務委員会の寺本進幹事、広報委員会の東川芳晃幹事、白崎実幹事のご活躍は印象的でした。また、運営委員会、各委員会の皆様にも絶大なるご協力をいただき、個人的にも様々な経験をした1年でした。第89期は、澁谷忠弘幹事とともに、吉村忍副部門長はじめ新たなメンバーをお迎えして、部門の運営にあたります。部門登録会員各位には、従前にも増してご支援くださるようお願い申し上げます。

追記

2011年3月11日に発生した東日本大地震により被災された各位には心からお見舞い申し上げます。数週間が経過した今も余震が続き、放射性物質の漏洩は終息しない状況で、災禍からの復旧は緒に就いたばかりです。日本機械学会としての対応はホームページで随時表明されています。計算力学部門もこれに呼応した活動を展開します。当部門は、自然災害や重大事故に関連して、実験に代わって最悪の事態を扱う唯一の手段となり得る数値シミュレーションを主な対象とします。その多くの研究成果が被害の低減や復興の支援に活かされなければなりません。そのためには（予測の的中率ではなく、不確実要素が明示的であるという意味での）信頼性が公開性を伴って高められることが不可欠であると、様々な報道に接して痛感した次第です。

部門長退任にあたって

辰岡　正樹
株式会社アルゴグラフィックス

東日本大震災で亡くなられた多数の方々のご冥福を祈念し、謹んでお悔やみ申し上げますとともに、被災された皆様に心よりお見舞い申し上げます。

†

このたび、第88期計算力学部門長を退任することになりました。この1年間、皆様の暖かいご協力でなんとか部門長の任務を全うすることができました。計算力学部門の活動を支えていただきました総務委員の皆様や運営委員の皆様をはじめとして、年次大会や部門講演会の実行委員の方々、各種の講習会や研究会を企画運営していただいた方々に深く感謝いたします。特に部門幹事の寺本先生（東京大学）、日本機械学会の熊谷さんには、大変お世話になりました。心より感謝いたします。また、通例では、任期2年のところ1年間延長して、広報委員を担当いただきました、白崎先生（横浜国大）、東川さん（住友化学）には、部門の新しい情報配信の取り決めと運用、ニュースレターの充実とWEB版の改善に、それぞれ積極的に、かつ献身的にご対応いただきました。厚くお礼申し上げます。

1年前に部門長就任挨拶で，私自身の思いを書きました。企業からの学会活動への参画の推進、人材育成、海外特にアジア諸国との連携の推進の3つです。それらを実現できたとは言えませんが、今後も学会活動の範囲に限らず、より広い視点にたって、継続して取り組みたいと考えています。

今期の計算力学部門で実施すべき重要な項目の一つは、部門25周年記念計算力学講演会の大枠を決めることでした。現在進行中ではありますが、計算力学講演会と連携して、国際会議を開催することが決まっています。計算力学講演会の実行委員長を平野徹様（ダイキン情報システム）に、国際会議の委員長を姫野龍太郎様（理化学研究所）にお願いしています。開催場所は、京コンピュータが設置される神戸市ポートアイランドを予定しています。平野実行委員長のリーダーシップにより、企業からの参加者の増加が期待されます。また、姫野実行委員長のご提案で、アジア諸国からの計算力学分野の若手研究者の参画を推進する計画もあり、非常に楽しみにしております。

計算力学は、ものづくりをリードしてゆく重要な役割を担っています。また、ものづくりは、日本の将来を決める重要な要素のひとつであります。このような視点にたって、計算力学の研究、製品開発への適用において、計算力学部門の皆様が、さらなる実績をあげることを祈念しております。

最後に本部門のより一層の発展を期待しまして、来期の梶島岳夫部門長、吉村忍副部門長にバトンタッチしたいと思います。

トピックス

日本機械学会計算力学部門初代委員長の矢川元基氏が「国際計算力学連合会長」に選出されました

辰岡　正樹
株式会社アルゴグラフィックス

2010 年 7 月 19 日～23 日、オーストラリア・シドニーにて「第 9 回計算力学世界大会（WCCM）・第 4 回アジア太平洋計算力学大会（APCOM）合同大会」が開催され、22 日に同会場にて行われた国際計算力学連合理事会において、矢川元基東洋大学計算力学研究センター長・大学院教授が国際計算力学連合会の 6 代目会長に選出されました。

本計算力学部門としても大変名誉なことです。なお、アジア太平洋地区からの会長選出はこれが初めてであり、ちなみに、これまでの会長は、O.C.Zienkiewicz（U.K.）, A.Samuelson（Sweden）, T.J.Oden（U.S.A.）, T.J.R. Hughes（U.S.A.）, E. Oñate（Spain）でした。国際計算力学連合(IACM)は、1981 年に設立された世界の計算力学関係者の集まりです。当初は 4 年に一度、2002 年以降は 2 年に一度、世界の地域をまわり、国際会議（WCCM）を行うことが定められています。

これまでの WCCM は

WCCM '10,　オーストラリア・シドニー、7/19～7/23
WCCM '08,　イタリア・ベニス、6/30～7/4
WCCM '06,　アメリカ・ロサンゼルス、7/16～7/22
WCCM '04,　中国・北京、9/5～9/10
WCCM '02,　オーストリア・ウィーン、7/7～7/12
WCCM '98,　アルゼンチン・ブエノスアイレス、6/29～7/2

矢川元基先生

WCCM '94,　日本・千葉、8/1～8/5
WCCM '90,　ドイツ・シュトゥットガルト、8/27～8/31
WCCM '86,　アメリカ・オースティン、9/22～9/26

2012 年にはブラジル・サンパウロで開催、また 2014 年にはスペイン・バルセロナにて開催予定であり、いずれも 1000 名から 4000 名規模の大会となるといわれています。

部門賞

2010年度計算力学部門賞贈賞報告

大林　茂
東北大学 流体科学研究所 流体融合研究センター

計算力学部門では、1990年度より部門賞として功績賞，業績賞を設けております。功績賞は、学術、技術、教育、学会活動、出版、国際交流など計算力学の発展と進歩に幅広くまた顕著な貢献のあった個人を、業績賞は、計算力学の分野で顕著な研究もしくは技術開発の業績を挙げた個人をそれぞれ対象とするものです。歴代受賞者の一覧は、下記部門ホームページに掲載されております。

http://www.jsme.or.jp/cmd/

2010年度の部門賞については、当ニュースレターNo.44に推薦依頼のご案内を掲載し、2010年6月30日までに推薦のあった候補者について選考委員による慎重かつ厳正なる審査を行った結果、9月24日の部門拡大運営委員会において受賞者は下記の方々に決定されました。

功績賞　大野信忠 氏
（名古屋大学　教授）

功績賞　Gui-Rong Liu氏
（National University of Singapore　教授
※現在はUniversity of Cincinnati　教授）

業績賞　秋葉　博 氏
（株式会社アライドエンジニアリング　社長）

業績賞　**西脇眞二 氏**
（京都大学　教授）

業績賞　**山本　誠 氏**
（東京理科大学　教授）

大野信忠氏は、非弾性構成式（Ohno-Wangモデル）の開発および実装、均質化法の理論構築とその応用に卓越した業績を挙げてこられました。また本計算力学部門に関しては、2007年度副部門長、2008年度部門長を務めて本部門の発展に貢献され、2000年に開催された第13回計算力学講演会では、副実行委員長としてその成功に尽力されました。また、多くの著名な国際学術雑誌の編修委員、編修委員長を務められており、国際的にご活躍されています。大野氏のご略歴は次の通りです。

1973年3月　名古屋大学工学部機械学科卒業
1978年3月　名古屋大学大学院工学研究科機械工学専攻博士課程後期課程単位取得退学
1978年4月　名古屋大学（工学部）助手、1979年10月工学博士（名古屋大学）
1980年10月　豊橋技術科学大学（工学部）助手
1982年4月～1983年3月　米国Harvard大学（応用科学部門）客員研究員
1983年4月　豊橋技術科学大学（工学部）講師
1984年4月　豊橋技術科学大学（工学部）助教授
1988年4月　名古屋大学（工学部）助教授
1994年4月　名古屋大学（工学部）教授
1997年4月　名古屋大学（大学院工学研究科）教授（現職）
2006年5月～2007年3月　京都大学（エネルギー科学研究科）客員教授

Gui-Rong Liu氏は、複合材料の波動・振動解析、メッシュフリー法解析ならびにその応用に卓越した業績を挙げてこられました。また、日本を含むアジア・太平洋地域を中心として国際的な計算力学分野の発展に多大な功績があり、2004年にAPACM (Asian Pacific Association for Computational Mechanics) Award for Computational Mechanics、2010年にIACM (International Association for Computational Mechanics) Fellow Awardを受賞されています。Gui-Rong Liu氏のご略歴は次の通りです。

1981年　Hunan University卒業
1991年　東北大学大学院工学研究科博士課程修了（工学博士）
1991年　東北大学助手
1991年　Postdoctoral Fellow, Northwestern University
1993年　Research Scientist, National University of Singapore (NUS)
1995年　Lecture, NUS
1998年　Senior Lecture, NUS
1999年　Associate Professor, NUS
2006年　Full Professor, NUS
2010年　Secretary General of APACM（至現在）
APACM：アジア－太平洋計算力学連合
2011年　Professor, University of Cincinnati（現職）

秋葉　博氏は、日本学術振興会未来開拓推進事業・ADVENTUREプロジェクトの開発した構造解析システムADVENTUREに大幅な改良と機能追加を加えた機械構造物の構造解析システム（ADVENTURECluster）の開発に顕著な実績をあげ、その商用化に多大な貢献をされました。このシステムの導入サイトは国内で100以上にのぼり、海外にも輸出されています。秋葉氏のご略歴は次の通りです。

1980年　東京工業大学大学院総合理工学研究科修士課程修了
1998年　博士（工学）、東京大学
1981年　株式会社アライドエンジニアリング入社
1997年より　ADVENTUREプロジェクトに参加し、ADVENTUREClusterを開発。現在に至る

西脇眞二氏は、最適設計および構造最適化の分野、特にトポロジー最適化の基礎理論から、アクチュエータやセンサーなどの機能構造の創成設計や、機械システムの創成設計への展開、電磁波伝搬問題等の構造以外の物理問題への展開に関して、独創的かつ優れた業績を挙げてこられました。西脇氏のご略歴は次の通りです。

1986年3月　京都大学工学部精密工学科卒業
1988年3月　京都大学大学院工学研究科精密工学専攻修士課程修了
1988年4月　株式会社豊田中央研究所入社
1998年6月　米国ミシガン大学機械工学・応用力学学科博士課程修了、Ph.D.
2002年3月　株式会社豊田中央研究所退社
2002年4月　京都大学大学院工学研究科助教授就任
2007年4月　同准教授
2009年4月　同教授（現職）

山本　誠氏は、ジェットエンジン、サイクロン、マイクロセンサ等の熱流体・乱流モデル解析に関する優れた研究業績を挙げてこられました。また、最近は着氷現象、電気化学加工プロセス等のマルチフィジックス問題にも卓越した成果を挙げています。山本氏のご略歴は次の通りです。

1978年4月　東京大学理科I類　入学
1987年8月　東京大学大学院工学系研究科単位取得退学
1987年9月　石川島播磨重工業（株）航空宇宙事業本部入社
（1988年：　工学博士「応力方程式モデルによるローブミキサー流れの基礎研究」）
1990年5月　東京理科大学工学部　講師
1995年4月　同　助教授
2004年4月　同　教授
2009年6月　同　工学部長

功績賞を受賞して

大野　信忠
名古屋大学 大学院工学研究科 計算理工学専攻

この度は、計算力学部門功績賞という立派な賞をいただき、誠に光栄に存じます。これまで御指導いただきました先生方、一緒に研究に取り組んでくれました多くの方々および研究室の諸君に、この場をお借りして、深く御礼申しあげます。

受賞対象の一つであります非弾性構成式の研究は、1979年に学位取得後これまでずっと取り組んできたものです。1985年ごろから原子力関係の委員会や非弾性構成式の研究会に参加して勉強させていただくうちに、ラチェット変形の解析に適した塑性構成式がないとの御指摘をいただきました。ラチェット変形とは、繰返し負荷のもとで繰返し数とともに漸進的に増大する塑性変形であるため、単純な塑性構成式では適切な解析結果を得ることができません。そこで、高度化した非線形移動硬化モデルを1991年に提案し、当時問題となっておりました液面熱ラチェットを解析しましたところ、大変よい結果が得られました。提案いたしました構成式は皆様からOhno-Wangモデルと呼ばれ、お褒めの言葉をいただきました。このモデルは、国内外でよく知られており、その主要論文5編の引用回数は合計で500回を超えています。

上述の液面熱ラチェットの解析は、提案した塑性モデルを自作のFEMプログラムに実装して行っておりましたので、企業の研究者の方々から、市販の汎用FEMソフトで使用できるようにしてほしいと要請されました。これに応じるため、汎用FEMソフトのユーザーサブルーチンを利用して実装するためのアルゴリズムとプログラムを開発しましたところ、原子力関係の委員会や企業等で使用していただくことができました。その後、この研究成果を鉛フリーはんだに適用できないかとのお話をいただきました。鉛フリーはんだは、電子パッケージングの分野で環境保護の観点から重要となった材料であり、速度依存性と温度依存性が著しいことが大きな特徴です。これらの特徴を踏まえて、2000年から鉛フリーはんだに適した非弾性材料モデルを定式化するとともに、その実装アルゴリズムとプログラムの開発を行いました。

上に述べましたように、これまでに二種類の非弾性構成式、すなわちラチェット変形の解析を主目的とした塑性モデルと鉛フリーはんだを主対象とした非弾性モデルの開発・実装を行ってきました。これらの研究で作成しました実装プログラムは、商用FEMソフトに採用されており、また汎用FEMソフトのユーザーサブルーチンとしても提供しております。研究成果が単なる論文発表に終わらず、このように社会貢献できたことは大変嬉しく思っています。なお現在、二種類の非弾性構成式を一つのソフトで利用できるように一体化し、より広範囲の非弾性解析に役立つ材料モデルソフトOLMATS（Ohno Laboratory Material Models Software）を開発中です。

もう一つの受賞対象であります均質化法の研究につきましては、教授に昇進してから一年後の1995年に始めました。微視構造が周期的である周期固体に生じる変位をスケール比によって漸近展開する研究は、1970年代後半から行われていました。しかし、構成材料が非線形なひずみ速度依存性を示す場合の均質化法について文献調査しましたところ、まったく見当たりませんでした。そこで、ひずみ速度依存の場合の均質化法の研究を開始し、この場合に解くべき境界値問題を導出するとともに、その応用として連続繊維強化複合材料や織物複合材料の変形特性を解析し、実験結果との大変よい一致を得ました。

均質化法の研究は、その後、大変形の場合に発展させ、理論構築を行うとともにセル状固体の微視的座屈現象に適用しました。この結果、面内圧縮負荷を受ける六角形ハニカムの二軸座屈や花状座屈のメカニズムを均質化法により解明することができました。これは、微視的分岐のセル周期長さ依存性と巨視的不安定の関係を明らかにした第一級の理論・計算力学的成果として国際的に高く評価され、5回のPlenary Lectureを含む約20回の招待講演の機会を国内外の学術講演会で与えられました。私自身は、人前で目立つことが好きな人間ではあるとは思っておりません。それ故に大学での研究生活を選びましたので、Plenary Lectureのような栄えある機会を研究成果によってはからずも与えられたことは、研究者冥利に尽きると感じています。

昨年1月にカリブ海のSt. Kitts島で開催されました16th International Symposium on Plasticityでは、小生のこれまでの研究業績を顕彰して二つの記念ミニシンポジウムが開催され、約30件の研究発表が国内外の研究者により行われました。また現在、小生の記念特集号をInternational Journal of Plasticityで発行するための準備が進められています。これは、人生の節目節目で温かい御助言・御指導を下さいました先生方と、これまで一緒に研究に励んでくれました皆様のお陰であり、改めて御礼申し上げます。

30年前にハーバード大学で一年間お世話になったJohn Hutchinson先生の70歳記念シンポジウムが、昨年11月に開催され、先生は最近の研究成果を発表されました。先生にとって研究はplayであり、楽しみだそうです。彼我の絶対的な差を感じるのみですが、今後さらに精進し、そのような心境に少しでも近づきたいと考えています。

Thoughts upon Receiving the JSME Computational Mechanics Award

Gui-Rong Liu
Professor and Ohio Eminent Scholar, School of Aerospace Systems, University of Cincinnati, USA

It is a great honor to receive the 2010 Computational Mechanics Award from the Japan Society of Mechanical Engineering. I would like to take this opportunity to express some of my thoughts in this short article.

One of the most important trainings of my life was the Ph.D study done at the Tohoku University, Japan, under the supervision of my dearest Professor Junji Tani. Please allow me to express my sincere appreciation to his wisdom and efforts in guiding me in the challenging area of research in computational mechanics. His invaluable encouragement and belief-in-me has been one of the most important source energy for my pursuing in this field. Thank you so much, Prof. Tani!

Much of my research work and academic activities would not be possible without the guidance of Professor Genki Yagawa. He has been my mentor for more than two decades. He is an ideal example of academic excellence and outstanding team player uniting everyone for the advancement of computational mechanics. We often meet at international conferences, and it has been so enjoyable and fruitful every time discussing with him. Thank you so much, Prof. Yagawa!

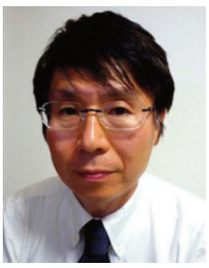
Computational Mechanics is a discipline of rigor. I believe the best possible training in this regard is from Professor Achenbach at Northwestern University. How many professors in the whole world would correct students' paper word-by-word for as much as 20 rounds, while handling multimillion dollar projects? I was so lucky to write such papers with Professor Achenbach. Two years at NU were short, but the benefit of the perfectionism was for my lifetime! Thank you so much, Prof. Achenbach!

Of course, my appreciation to my family is enormous. However, since you all know what I am going to say, I choose to skip it.

Instead, I would like to thank all my Japanese friends and colleagues, many of whom have told me Japanese and read my papers written in strange Japanese! In particular, Professor Noriyuki Miyazaki has been acting both roles: my mentor and my friend.

I would like to finally express my sincere appreciation to my friend, late Professor Hirohisa Noguchi. We were working and planning together on so many exciting academic activities, but he left us too soon, too soon! I would like to share with Hiro the honor of this award.

Thank you all so much!



業績賞を受賞して

西脇　眞二
京都大学大学院 工学研究科 機械理工学専攻

この度は、計算力学部門業績賞という大変栄誉ある賞をいただきまして、大変光栄に思いますとともに、これまでにご支援いただいて参りました先生方、計算力学部門関係者の皆様に厚く御礼申し上げます。

私の計算力学との関わりは、まずは実務から始まりました。京都大学にて修士課程を修了した後、（株）豊田中央研究所に入社いたしましたが、入社後からの研究テーマは、もっぱら自動車部品の有限要素法を用いた性能評価法の開発でした。この間には、計算力学の応用面、すなわちどのように解析モデルを作成し、そしてどのように評価するかというような、実用的な方法やテクニックを学ぶことができました。特に、数値解析結果の検証のための実験検証については、実験装置の作成から、実験まで携わる機会を得ることができ、実用的な面からの数値解析の長所・短所など、そこで学んだことはその後の研究人生の大きな糧となりました。このような機会を設けてくださった私の最初の上司でありました（株）豊田中央研究所の森信行氏に深く感謝申し上げます。

計算力学の理論的な側面に関する関わりは、ミシガン大学にて、菊池昇先生にご指導いただいたことから始まります。ミシガン大学に留学する以前にも、会社の業務にて、片手間に有限要素法の中身を少しは囓っていましたが、本格的に勉強を始めたのは、やはりミシガン大学への留学からです。当時、私は理論も何も全く知らず、菊池先生から有限要素法の基礎から、それに関連する数学理論、さらには構造最適化の理論、またその歴史まで多くのものをご教授いただきました。この間に勉強できましたことは、その後の研究人生に対して大変な意義がありました。特に、菊池研究室はトポロジー最適化分野の牽引車的役割を長年担ってきましたが、当時も、研究室で学ぶこと全てが世界の最前線の内容であり、一つ一つを勉強することに深い感慨をもったことを覚えております．この度の受賞対象としていただいた研究内容であります「トポロジー最適化の基礎理論に関する研究」と「トポロジー最適化による機能構造物・機械システムの創成設計法」の多くは、菊池先生の下で学んだ内容が基礎となっており、あらためて菊池先生に感謝申し上げる次第です。

また、最適化の理論的な面に関しては、私のもう一人のアドバイザーでしたPanos Papalambros先生にご指導いただきながら学ぶことができました。Papalambros先生のご指導により、最適化問題を厳密に記述するための基礎から、最適化手法の理論と応用方法など、多くのものを学ぶことができました。Papalambros先生の下で学んだことも、上の二つの受賞対象の研究内容を進めるのに基礎となっており、Papalambros先生にも厚く御礼申し上げる次第です。

留学後には、（株）豊田中央研究所において新しいCAEとして、First Order Analysis (FOA)に携わりました。このFOAは、機械製品の構想設計を支援するための新しいCAEの枠組みとして、最初はアメリカの自動車会社であるGMの設計部署から提案されたアイデアで、当時ミシガン大学で具体的な展開が始まったばかりだったと覚えております。幸いなことに、私の帰国後すぐに、菊池先生を（株）豊田中央研究所をお招きできることになり、再び菊池先生のご指導のもと、（株）豊田中央研究所にてFOAの開発を始めました。このFOAの基礎は、梁・板理論などの計算工学分野では、今や古典になりつつある理論に立脚しており、いわば現在のCAEのアンチテーゼを示すような側面があり、開発当初から、賛否両論のご意見をいただきました。当時は大変苦労しましたが、今思い返せば、会社の同僚と非常に楽しい時間を過ごすことができました。

その後、2002年からは縁あって、京都大学にて教鞭をとる機会を得、それ以降は、学術的な観点から構造最適化に関する研究に従事してまいりました。この度の受賞対象としていただいた「トポロジー最適化の基礎理論に関する研究」としまして、レベルセット法による形状表現方法を行いながらフェーズフィールド法の考え方に基づき形状更新をする新しいトポロジー最適化の方法を、世界に先駆けて提案できました。また、その他の受賞対象としていただいた「トポロジー最適化による機能構造物・機械システムの創成設計法」と、「トポロジー最適化の電磁波・熱・音場問題への展開」につきましては、構造問題以外の他の分野を専門となさっている先生方、企業の方との共同研究により、トポロジー最適化を大きく発展させることができました。特に、電磁波問題への展開に関する研究成果については、（株）豊田中央研究所の野村壮史氏をはじめ多くの研究者の方々との長年の共同研究、北見工業大学の平山浩一先生、ミシガン州立大学のAlejandro Diaz先生、デンマーク工科大学のOle Sigmund先生のご指導のたまものです。厚く御礼申し上げます。

最後に、京都大学における研究活動をご指導、ご支援いただきました京都大学名誉教授の吉村允孝先生、京都大学の泉井一浩先生、さらに研究を通して巣立っていった多くの学生諸君にも深く感謝申し上げます。

トポロジー最適化は、まだまだ多くの興味ある研究課題をもち、今後さらに大きく発展していくと期待しています。今後もその発展に貢献できることを切に願うとともに、精進して参りたいと思います。

末筆ながら、ご推薦いただきました先生、また選考いただきました関連委員の皆様に厚く御礼申し上げます。

業績賞を受賞して

山本　誠
東京理科大学 工学部機械工学科

このたびは、計算力学部門・業績賞という栄誉ある賞をいただき、皆様に心より感謝申し上げます。私のこれまでの研究成果や学会活動を高く評価していただけたことは、非才な我が身に余る光栄だと思っています。また一方で、「学会・部門に一層の貢献をせよ」との叱咤激励の声であると感じられ、身の引き締まる思いを味わっています。

さて、私が数値流体力学（CFD）に取り組み始めたのは、1982年、東京大学・田古里・荒川研究室の修士1年生のときでした。当時は我が国の数値流体力学の黎明期にあたり、文献も参考資料もほとんど手に入らない状態で、有限体積法に関するたったひとつの論文を拠り所にして、2次元乱流ジェットをk-εモデルで計算するプログラムを独自に作成しました。四苦八苦の末に結果が得られたときには、CFDで実験データが再現できることに大いに感動したことを昨日のことのように覚えています。同時に、物理現象をモデル化する醍醐味や面白さを実感しました。結局、このときの研究が一生の仕事を決めたわけであり、テーマを与えていただいた田古里哲夫先生と荒川忠一先生には感謝の言葉も見つかりません。ちなみに、上記の2次元乱流ジェットの計算は、現在であれば卒業論文にもならないような演習的内容でしたが、当時の機械工学分野におけるCFDのレベルはその程度の初歩的段階でした。

その後、応力方程式モデルの研究に取り組んだ博士課程を経て、石川島播磨重工業（株）（現IHI、以下同様）に就職し、ジェットエンジンのファン・圧縮機の空力設計業務に携わりました。IHIでは様々な技術的に貴重な体験をしましたが、ひとつだけ例を挙げるとすると、翼の表面粗さの問題があります。ジェットエンジンの翼は一般に切削加工と仕上げ研磨により製作されていましたが、当時、最終的な表面粗さをどの程度に設定するかは完全に経験に基づいていました。あるとき、生産現場から、仕上げ加工のコストを低減するため、表面粗さをできるだけ粗くできないかとの検討要求が出ました。種々検討の結果、生産現場の要求する粗さにしても流体力学的には問題がないこと、すなわち流体力学的に滑らかな表面であることが分かりましたが、塵埃や氷などの翼表面への付着特性が変化することによる空力性能や安全性の低下が心配であるため、最終的に、経験的に設定していた従来の表面粗さを墨守することに決まりました。このとき、「ものづくり」というのは流体力学あるいは純粋な理論だけでは決まらないことと、高性能で高信頼性の製品をより安価に製造するためには、その製品に起こり得るあらゆる現象を想定した設計が必要であることを痛感しました。IHIにおけるこのような数多くの体験が現在の私の研究スタイルの原型となっています。いまさらですが、IHIは、工学技術者・研究者として「ものづくり」の現場を知ることの大切さを教えてくれたすばらしい会社であったと思っています。

1990年に縁あって東京理科大学に移り、学生を指導しながらの研究活動を始めました。着任後の10年間は、乱流モデルや離散化スキームなどの提案・改良とその産業応用に関する研究を行っていました。例えば、北村修君（みずほ情報総研）による固気混相流用の応力方程式モデルの提案とサイクロン分離器への応用、戸田和之君（千葉科学大学）が取り組んだ圧縮性乱流モデルの開発と超音速モデル燃焼器への適用、壇原伸補君（防衛省）の手掛けた圧縮性乱流モデルの検証と超音速インテーク設計への応用、などがこの当時の主要な研究テーマでした。

1990年代後半になると、乱流モデルも数値計算手法も成熟し、数多くのCFDソフトウェアが市販され、企業の設計現場にCFDが浸透していきました。この状況はCFDの研究にとっては、大きな転機だったと思います。多くの企業がCFD研究から足を洗い、CFDソフト・ユーザになっていきました。また、大学のCFD研究者は、大規模計算（HPC）、バイオ、混相流、マイクロ流といった新たな分野にシフトし始めました。私は、IHIでの経験をベースとし、また世界中で誰も取り組んでいないことを重視して、このころ（正確には1997年）からマルチフィジックスCFDの研究に着手しました。最初は、サンドエロージョンと水素燃焼ガスタービンの問題に取り組みましましたが、徐々に守備範囲を広げ、マルチフィジックスCFDの研究テーマを増やして行きました。この流れが南雲貴志君（IHI）による水素燃焼ガスタービン、鈴木正也君（東京理科大学）による圧縮機動静翼干渉場におけるサンドエロージョン、坪井涼君（東京理科大学）による圧縮機翼の電気化学加工、などの研究へと発展して行きました。現在では、卒業論文、修士論文のほとんどの研究テーマがマルチフィジックスCFDに関連したものとなっています。

一方、市販CFDソフトの普及に伴って、熱流体力学の素人が数値計算を実行するため、結果の妥当性を判断できないという問題が顕在化してきたのも1990年代後半のことです。このため、吉村忍先生（東京大学）が2002年から計算力学技術者認定事業を始めたことは、皆様ご存知のことと思います。私も吉村先生に便乗し、店橋護先生（東京工業大学）の強力なバックアップの下、日本全国の熱流体系の大学教員・企業人を結集して熱流体分野の認定事業を2003年から開始しました。現在、受験者・認定者も順調に増加し、健全かつ収益力のある事業に育ったことは、喜ばしい限りです。

最後に、本稿で挙げさせていただいた先生・研究室卒業生の他にも多くの先生・友人・企業の方・学生に支えていただいた（ている）ことを、この場を借りて、深く感謝したいと思います。マルチフィジックスCFDの研究も計算力学技術者認定事業も今まで以上に発展させなければいけないと思っています。これからも皆様のご支援・ご協力をいただき、研究活動・学会活動に邁進していきたいと思います。今後とも、ますますのご指導・ご支援のほど、よろしくお願い申し上げます。

業績賞を受賞して

秋葉　博
株式会社アライドエンジニアリング

さかのぼると、2001年設計工学・システム部門の優秀研究表彰、2007年機械学会技術賞、同年、本部門の優秀講演表彰に続いて、機械学会からは4度目の表彰となる、名誉ある計算力学部門業績賞をいただいた。これらはすべてADVENTURECluster（以下ADVCと記す）という並列処理による大規模構造解析・CAEソフトウェアの開発と普及を評価していただいたものだ。開発のもととなったのは日本学術振興会ADVENTUREプロジェクト（1997年～2002年、リーダ東大・吉村忍教授）である。筆者らは、プロジェクトでできた並列構造解析システムADVENTUREをフレームワークに用いてその商用版ADVCを開発し、ADVCは、ほぼ市場を独占していた海外製ソフトウェアと肩を並べて、広く使われるようになった。

今回の表彰は筆者個人に与えられたものだが、他の3賞は何人もの共同研究者、技術者のグループの受賞だった。業績賞の「業績」は、筆者個人が築き上げたものではなく、われわれグループが貢献したものなのだが、さらにもう一つある。たとえ良いものを作ったとしても、使ってもらえなければ何の値打もないだろう。つまり、今回の業績賞の受賞は、筆者あるいは開発者グループだけが浴するものではなく、実は同時に、エンドユーザ、およびエンドユーザとわれわれをつなぐ営業担当者の厚い層があってこそのものである。

ADVCの開発は大変だった。他社製の商用CAE・構造解析コードは、並列処理と大規模解析は別として、機能、普及ともに相当なところまでいっている。新規開発のコードの機能を、他の商用コードのレベルにまで上げるのは簡単にはいかない。ADVC開発初期には、基本的な機能の開発に追われた。できてしまえば当り前なのだが。さらに、収束性の問題、パフォーマンスの問題。あの機能が足りない、この機能がないとウチでは使えない……。流れが変わったのは、CAEソフトとして基本的な技術がおおよそ形をなしてきた当たりからだ。

いかに普及させるか。知名度がなければ振り向きもされない。2000年前後といえば、一般には並列処理も未成熟だったし、大規模解析についても、「そんなものは必要ない」とよく言われたものだ。しかし、幸運にも、大規模解析に目を向けてくれる現場の技術者もいた。新しい技術で自社の製品や設計や開発を革新していく、そういうエネルギーを持つ人たちは必ずいる。もちろん、ADVCやわれわれの開発そのものに好意的であるということではなく、自社の製品の開発、生産技術の変革がモチベーションなのだ。

ADVENTUREプロジェクトから10年を経て、コンピュータの劇的なコストパフォーマンスの向上もあり、構造、流体含め、一般に大規模解析はそれなりの地位を築いたと思われる。

ただ、新しい技術の普及には必ず困難が伴う。成功するかどうかは開発側の技術力や熱意だけではなく、使う側のパワーが不可欠であることを、筆者は目の当たりにしてきた。このパワーが、 ADVCの産業界での普及のトリガーとなったと思う。上に述べた「厚い層」のことである。

ある自動車メーカでは、エンジンのフルモデルの解析に難渋していた。営業担当者からメーカの技術者にADVCが紹介された。既存のコードとADVCの両方で同じモデルでテストされた。既存コードでは答えが出ず、途中で計算が打ち切られた。われわれはあるコンピュータメーカの協力を得て、弾塑性解析の収束性の改善など様々な改良を加え、最終的には1日で解いた。これでADVCの導入が決まった。

別のある自動車メーカでは、エンジンの全体解析の中で、ある部品のモデルの単純化の検証に、ADVCが用いられた。いわば逆の発想だ。よい結果が得られたのだが、ここにいたるまでのユーザの熱意と努力には、頭が下がる思いだ。

ある電子機器メーカでは、それまでは部分的な解析や2次元解析で強度解析、寿命評価などを行っていた。本来は全体を解くべきかもしれない。私は当時の担当者にADVCの評価をたのんだ。担当者は最初は大規模解析には懐疑的だったが、いくつもの問題を解くうちに、「これはなんだ」というように、結果を見てくれるようになった。今ではこのメーカの複数の部門で使われている。ただ、全体解析の中で、見たいのははんだ接合部など細かい部分であることも多い。大規模解析にも限界はあり、ある時期に、ADVCにサブモデル解析機能（全体の解をもとに詳細部分の解析をやり直す機能。これもできてしまえば当たり前の機能である）も追加した。

もちろんよいことばかりではない。深刻なバグを作ってしまったこともある。これら様々な応援や試練を経て、ADVCは多くのユーザを獲得してきた。

大きなプロジェクトでは、ADVCは東京電力・柏崎刈羽原子力発電所の原子炉3次元耐震解析、宇宙航空研究開発機構（JAXA）のロケットエンジンの研究開発、防災科学技術研究所（NIED）の数値震動台の開発などに活躍し、成果を上げつつある。

今後も業績賞の名に恥じない、さらに良いソフトを開発し、さらに広い普及を、開発者、営業担当者やユーザとともに行っていきたい。

『特集』オープンソースCAE

オープンソースCAE開発のために必要なこと －流体解析システムFrontFlow/redを事例として－

大島　伸行
北海道大学 工学院機械宇宙工学部門

1．オープンソースCAEのコスト

計算のプロフェッショナルである（あるいはそれを目指す）本報の読者においては「オープンソース」あるいは「フリーソフト」と呼ばれる一群のソフトウェアが「開発コストが安い故にフリー」と考える方はおられないと思う。少なくとも本特集に取り上げられるような多数の利用者を得たソフトウェアの開発には当然のことながら膨大なコストが費やされている。では、そのコストは誰が、どのような目的で負担しうるのか？

まず、ソフトウェア開発にはコストがかかることを認めたとき、「オープンソース」とそうでないものとを分けるのは誰がそのコストを負担するか？であろう。後者を仮に利用料を支払うソフトウェアとして「ライセンスドソース」と呼ぶならば負担者は当然その「利用者」であろう。ならば、「オープンソース」のコスト負担者は「開発者」に違いない。つまり、「オープンソース」開発に際しては、開発者自身（あるいはその周囲）においてコストに見合うメリット（学術的関心、研究費の支援、地位の向上、市場開拓、人材育成、・・・）が求められる。

そこには対象となるソフトウェアの意図、ここでは「CAE」とは何か？ について開発にかかわる多数の人々のコンセンサスが必要となる。以下では、筆者が開発に携わった流体解析システムFrontFlowを事例として、開発に際して必要とされた技術条件、開発環境、実施体制などを辿りつつ、オープンソースCAEが今後も成立しうる条件について考えてみたい。

2．オープンソースCAEの開発シーズ

他の分野と同じく、ソフトウェア研究の第一の動機が学術的あるいは技術的関心にあることはいうまでもない。ソフトウェア工学における新しいコンセプト、アルゴリズム、スキームを実証したい、あるいは、計算規模や速度などの技術的限界を克服したい、などの研究目標を多数が共有するならば、その達成「過程」に対して価値が認められ、コスト負担のコンセンサスが可能となる。たとえば、FrontFlowにおいては、以下の目標を掲げて研究開発を進めた。

1）乱流LESに代表されるスケール分離の概念に基づく様々な複雑現象シミュレーションモデルの開発：具体的には、乱流の非定常現象、構造と流れの連成、流体音、粒子流、反応流、多孔質流などへ応用実証が試みられた。

2）次世代超並列化コンピュータを前提としたソフトウェア実装による超大規模計算の実現：具体的には、フォーミュラーカーの非定常空力や原子炉高圧ポンプの構造-流れ連成などの複雑な工学問題における1億超要素規模CFDの実証が試みられた。

3）オブジェクト指向的なソフトウェア設計によるマルチディシプリンな連成シミュレーションの実現：具体的には、流れ解析と様々な連成モデルの機能サブルーチン化、プリ・ポスト構造化データの設計と公開、連成カップラーライブラリの開発、汎用ワークベンチの開発などが試みられた。

これらは開発に参加したメンバーらによる先駆的な開発シーズの集積によって具体化し、さらには他分野を含む多数の関心と協力を得ることで実現したと考える。その開発過程において「オープンソース」であることが知識の集積、伝達、展開に大きなメリットとなったことは特筆されよう。公開され多数の閲覧を受けたソフトウェア（幸いにもFront Flow/redはその一つとなった）においては当初計画された応用対象以外(燃料電池など)への展開が進められたことも「オープンソース」のメリットを生かした成果といえる。

先駆的な開発シーズは複数の分野、研究者、対象に分散しており、それへの関心や開発資金も様々である。そこにある既成の垣根を越えるには相当の（精神的／物理的）コストが掛かることを多くの読者が経験されていよう。ソフトウェア開発における「オープンソース」は、具体的な開発シーズを明らかにし多数が共有する際においてのコスト・ミニマムな解の一つともいえる。このような「オープンソース」のメリットを享受するためには、学術知識においては学会や論文誌が、情報においてはインターネットやフェースブックなどが役割を果たしているように、ソフトウェアに対してもコミュニティとその運用法を育てていくことが重要と思われる。

3．オープンソースCAEの開発ニーズ

核物理や宇宙物理におけるシミュレーションではソフトウェア利用者＝開発者（もしくは同じコミュニティ）であり、ニーズ（科学的関心）がソフトウェア開発の動機に直結している。 CAEでも原子力や航空などの特定分野を除いては汎用市販ソフトウェアもない黎明期（CFDでは90年代初頭まで）には、同様の構図があり、たとえば自動車空力シミュレーションでは多くのハウスコード開発が報告されていた。しかしながら、普遍的価値を目指す「計算科学」とは異なり、他者に対する相対的価値を目指す「工学＝CAE」では特定ソフトウェアが普及して全ての利用者が同一のものを用いれば付加価値はむしろ低下するという矛盾が生じてしまう。小さな付加価値にみあう利用者コストは当然小さく、ソフトウェア開発は次第にプロによる効率的な商用化に委ねられる。

では、CAE利用者からみてコストの高い「オープンソース」開発のメリットはどこに残されるのか？と問うとき、先行的でニッチな技術開発への「投資」が有望な可能性と考えられる。FrontFlow開発では、計画開始時には認識され始めていた地球温暖化に代表されるサステナブル社会に向けての工学パラダイムシフトを想定して、それに関わる以下のような先行的技術開発を応用対象として取り上げた。

1）次世代エネルギー開発に関わる複雑現象シミュレーション：
対象として、原子炉管路のサーマルストライピング、ターボ機械の低騒音化、低NOxガスタービン燃焼器、GDIエンジン、低Cd車両などが当初計画で取り上げられ、燃料電池、風車設計などへの応用も図られた。具体的な設計ニーズとしては、非定常熱流動、構造-流れ連成、流体音、乱流燃焼、スプレー流れなどの予測実現を目指した。
2）バーチャルデザインの基盤となる高精度シミュレーション：
CAD/CAM（設計・製造）からCAE（開発）へコンピュータ援用の上流化において、デザイン・製造の精度に見合うシミュレーション精度として3桁の空間・時間解像度を目指した。
3）医療工学、材料工学、社会工学など異分野へのCFD応用：
将来有望なニッチ技術へのCFD応用として、血液流れなどの医療分野、建物安全性などの建築分野、CVDプロセスなどの材料分野への展開を目指した。それらの成果はM-SPhyR(血流)、EVE SAYFA（都市安全）などの独自ソフトウェアの一部として活用されている。
当然のことながら、これらの先行的な技術開発の対象は固定されず、順次更新されていくことが「オープンソース」のメリットを生かす重要な条件である。

4．オープンソースCAEの教育的価値

ソフトウェア・プログラムがコンピュータ・ハードウェアと人間とを繋ぐ技術である限り、それを運用する人材に最も大きなコストが掛かることは避けられない。多くの教科書が示すように、ソフトウェアの利用者、開発者のいずれにおいても最も良いテキストはソースプログラムといわれており、その意味で「オープンソース」の教育的価値には注目できる。特に、実務に利用されているオープンソースCAEでは、初心者から専門家までが共通のテキスト（ソースプログラム）を用いることによる教育コストの低減効果が大きいといえる。ここでいう教育には大学授業や演習などの個々の人材育成という観点とともに、ソフトウェア導入教育の充実による利用者拡大といった具体的なニーズも大きい。そのためのコスト負担はソフトウェア利用者には導入費用として、開発者（提供者）には付加的作業として生じる。
オブジェクト指向プログラミングなどのソフトウェア技術の基本として、利用者や開発者からプログラムの不要部分を意図的に隠蔽することがプログラム開発や運用の安全性と効率性を高めるという考え方が用いられるが、そこにはプログラムを実行するという本来の意図がある。しかし、ソースプログラムを教育目的で用いる際には、むしろその意図を知ることが重要であり、利用、開発時には隠蔽した情報が必要となる。たとえば商用ソフトウェアではユーザーマニュアルやリファレンス・マニュアルなどのドキュメントが別途提供されることが多いが、それらのコストが利用者／開発者の負担となることはいうまでもない。「オープンソース」ではプログラム自体がそれらのドキュメントを兼ねることで教育コストの低減につながる。
また、人材育成においてコンピュータ環境にかかるコストも無視しがたい。安価なソフトウェアであっても多数の学生の教育にはライセンス費の負担が大きなものとなるため,アカデミックディスカウントなどの戦略的投資が助けとなる。一方、FrontFlowが指向するハイエンドHPCにおいてはハードウェアリソースのコストが高く、利用できる期間、場所、機種の制約が人材育成の大きな負担となることから、「オープンソース」のポータビリティが有用性をもつ。たとえば、FrontFlow/redの事例においては、同一のソースプログラムを用いてWEBサイトでのダウンロード公開（主として利用者サイトでの運用）と大学情報センターの共同利用計算機システム上での公開（主として開発者サイトでの運用）を行っており、大学での演習講義、情報センターや学協会による講習会、学位研究での利用、企業技術研修としての利用など、必要に応じて利用可能なハードウェアリソースを使った実習が行われている。
ここで、「オープンソース」を介したソフトウェア技術の取得を志す方への助言として、スポーツにおいてトップアスリートへの敬意が、学問において先人への敬意が大事なアプローチであるのと同様に、「オープンソース」の優れたプログラマーへの敬意を大切にしていただきたい。利用において「オープンソース」はコミュニティの資産として共有されるが、プログラム自体がプログラマー個々の著作物として学術論文と同様に価値あることを心にとめられたい。

5．これから何を目指すか

ハイエンドHPCの観点からは、開発シーズとして「京」級スパコンへの実装が当面のターゲットとなろう。具体的には
1）数十～数百億要素規模の大規模CFDシミュレーション、
2）数百～数千ケース規模の最適化CFDシミュレーション
などの実現が目標とされており、計算速度向上のためには従来規模とは異なる問題（並列計算の階層化、探索計算の増大、丸め誤差影響など）に対する新しいアルゴリズムが求められる。また、計算発散や不適切な数値解の自動認識、超大規模の格子生成やデータ管理など計算運用に関わる技術精度も重要となろう。一方、シミュレーションの開発ニーズとしてはFrontFlow開発でも取り上げたサステナブル社会、バーチャルデザイン、医療工学、新材料などがますます重要度を高めている。
ここで最も懸念されることは、これらの開発シーズ、ニーズの受け皿としてCFD（あるいはCAE）だけでは人材的、資金的に支え切れない状況である。もう一段階の発展を目指すには、学術、応用の分野を超えた再編が求められる。その一つの試みとして、これまで蓄積されてきたCFDにおける様々なモデル化、数値手法を、他分野と共有できる一般的な技術要素に基づいて再設計することで、ソフトウェア開発のコストをより広い分野で分担できる仕組みを検討し始めている。他分野と知識、技術を共有し,そのコストを分担するための方法として「オープンソース」の役割に期待している。

6．蛇　足

皆さんは、子供がコンピュータゲームやブログに夢中になるのを見てどうされますか？「一流のプレイヤーを目指しなさい」「コンピュータのプログラムを教えてあげよう」あるいは「そんなことは止めて勉強しなさい！」オープンソース開発の悩みと喜びはそのあたりから始まります。かの有名なポケモンではその世界が広がりつづけることを「オープンエンデッド」と呼ぶそうです。「オープンソースCAE」にも同様の思いがこめられているとすれば、その世界を自分の手で広げてみませんか？ 24時間「オープン」していますので。

参考資料：大島、社会ニーズにこたえるマルチフィジックス流体シミュレーション、機論B76-765、pp.729-732(2010)

次世代流体解析ソフトウェア FrontFlow/red

張　会来
株式会社 数値フローデザイン

1．FrontFlow/redの開発経緯と現状

計算科学は理論・実験に次ぐ第三の方法として、バイオ、ナノ、デジタルエンジニアリングなどの多くの学術・技術分野において今後益々発展するとともに、産業競争力の維持・強化のための重要な共通技術基盤となることが期待されている。日本は、高速コンピュータなどのハードウェアに関して世界をリードしているが、これらのハードウェアを活用した高度なソフトウェアの開発においては一層の努力が必要とされている。

とりわけ、産業競争力や社会生活の安全性に直結する応用ソフトウェアに関しては、長期的なビジョンのもとに戦略的な取り組みが必要との認識がある。このような状況の中、東京大学生産技術研究所では2002年度から文部科学省ITプログラムの一環として、世界最先端の実用的シミュレーションソフトウェアを開発、普及を図ることを目的とした、「戦略的基盤ソフトウェアの開発」プロジェクト、2005年度から新たに開始された文部科学省次世代IT基盤構築のための研究開発プログラムの一環として「戦略的革新シミュレーションソフトウェアの研究開発」プロジェクトが進められて来た。[1)、2)、3)]

現在では、北海道大学計算流体工学研究室において、(1)FrontFlow/red公開版のバージョンアップおよびダウンロードなどソフトウェアの管理、(2) FrontFlow/redユーザマニュアルなどドキュメントの整備、(3) FrontFlow/redへの新たな数値アルゴリズムおよび理論の研究開発、などを行いながら、実用流れ設計への適用に向けた各分野の研究に取り組まれている。[4)、5)]

2．FrontFlow/redの特徴と機能

近年、流体シミュレーション研究の一つの大きな壁であった乱流予測モデリングに関して大きなブレイクスルーが為されつつある。すなわち、膨大な演算量を必要とする原理方程式に基づく乱流の直接数値シミュレーションが実際に実行され、乱流研究に多くの知見を与えたことにある。数値実験としてDNSの有用性が広く認識され、また、その近似解析モデルといえるLES (Large Eddy Simulation) が開発されたことで、乱流数値シミュレーションを本格的に工学問題に適用していくことが可能となってきた。

FrontFlow/redは、乱流現象の予測と制御が重要な課題であるエネルギー流動の予測シミュレーションを主な対象に、LESを基礎とする数値解析モデリングを実用化し、マルチフィジックスな連成問題の実用的シミュレーションを実現するソフトウェアである。また、過酷な設計開発環境を強いられる産業界での実用に耐えうるため、パソコンからスーパーコンピューターまでシームレスに対応し、分散メモリ数百以上のノードを用いた、1億点以上の非構造格子で効率的な並列解析も実現している。

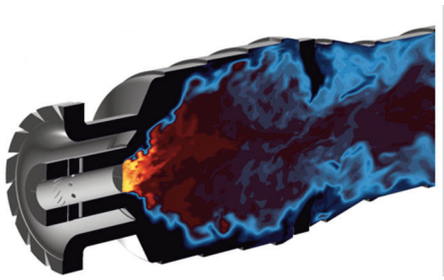
FrontFlow/redの主な機能を表１に示す。

表１．FrontFlow/redの主要機能

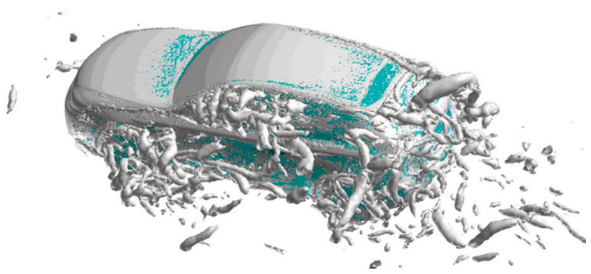
項　目	主要機能
基本機能	・定常、非定常（SMAC 法、PISO 法） ・非圧縮性、圧縮性 ・固体-流体熱連成解析、輻射モデル熱連成、マルチ領域流体解析、移動メッシュ(ALE)、移動境界、不連続界面、スライディング界面、Euler 2 相流、自由表面、Lagrangian 粒子追跡法による多相流 ・自動領域分割と MPI による大規模並列計算、ベクトル計算機対応 ・6 面体、4 面体、3 角柱、4 角錐
基本離散化法	有限体積法（N-S 離散化法）、節点中心法、セル中心法
時間積分法	Euler 陽解法・陰解法、2 次精度 Crank-Nicolson 法、2 次精度 Adams-Bashforth 法、3 次精度 Adams-Moulton 法、4 次精度 Runge-Kutta 法
移流項離散化	1 次風上差分、2 次中心差分、2 次または 3 次風上差分＋TVD 法、MUSCL スキーム、2 次中心差分＋1 次風上または 3 次風上ブレンド法
乱流モデル	SA、標準・Realisable K-ε モデル、RNG-K-ε モデル、応力方程式モデル、非線形渦粘性モデル、低レイノルズ数型 K-ε モデル、SST K-ω、標準 Smagorinsky モデル、Dynamic SGS モデル、Lagrangian-Dynamic SGS モデル、DES など
熱物性および輸送係数	・NASA データベース：7 係数多項式による定圧比熱、エンタルピー、エントロピー、自由ギブスエネルギー ・Sutherland 式粘性係数、Smooke シンプル粘性係数、 ・Mix-Kinetic：熱伝導率、粘性係数、熱拡散係数
ガス燃焼・反応モデル	・詳細反応　：逆反応、圧力依存(Lindemann)、第 3 体促進、非整数化学量論係数、任意反応指数 ・総括反応　：アレニウス型（マルチステップ反応） ・渦消散モデル(EDB)、渦消散-アレニウス型ハイブリッドモデル/渦散逸モデル(Eddy Dissipation)、FLAMELET 燃焼モデル(拡散燃焼、予混合、部分予混合) ・ポストフレーム　：NOx、HC、CO ・その他、多数の表面反応・固体粒子表面反応モデル
ユーザーサブルーチン	初期条件、流入・壁面境界条件、質量・運動量・エネルギー、化学種に対するソース項、任意スカラー量のソース項、表面熱分解と表面蒸発及び反応モデル、ユーザー定義ガス、ユーザー定義移動メッシュ、ユーザー定義輸送物性、粒子の初期条件、噴霧モデル、解析結果出力など
プリポスト対応	・対応メッシャー　：Gridgen、Pointwise など ・対応可視化ツール：FIELDVIEW、AVS、MicroAVS、Paraview など
稼働環境	・IRIX64、LINUX、SuperUX (地球シミュレータなど)、ALX-5L(SR11000) ＊1 必須：Fortran90、MPI ライブラリ(MPICH 1.2 以上)

3．FrontFlow/redによる複雑且つ大規模な解析事例

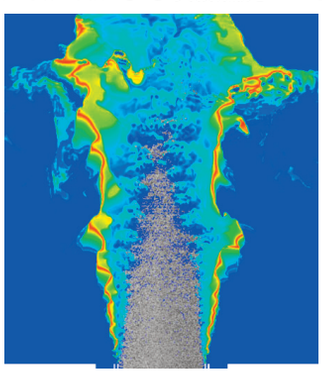
（1）北海道大学大学院工学研究院計算流体工学研究室
大島伸行教授
FrontFlow/redによるガスタービン燃焼器の火炎流れ解析



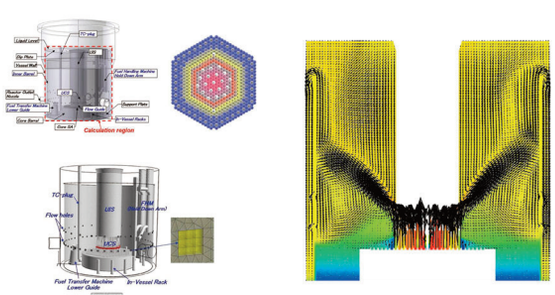
（2）北海道大学大学院工学研究院計算流体工学研究室
坪倉誠准教授
FrontFlow/red AERO 64.0による横風遭遇の非定常空力解析



（3）京都大学工学研究科機械理工学　黒瀬良一准教授
NuFD/FrontFlowRedによる噴霧燃焼のLES解析

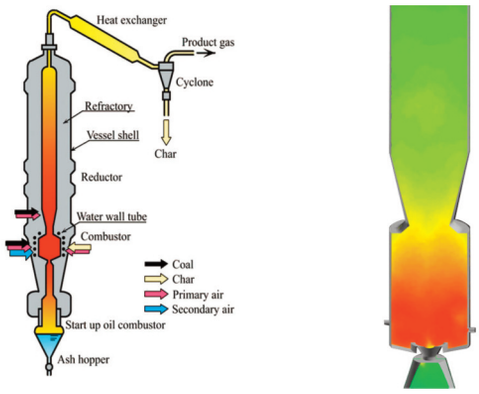


（4）独立行政法人日本原子力研究開発機構　大平博昭様
NuFD/FrontFlowRedによるもんじゅ原子炉上部プレナムの熱流動解析

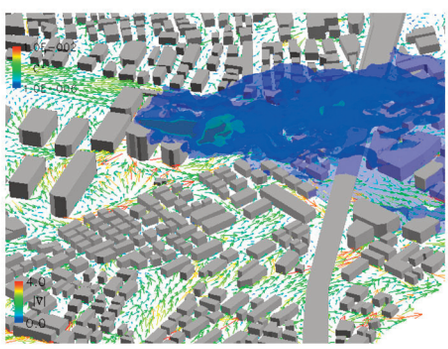


NUTHOS-8プロシーディングより

（5）財団法人 電力中央研究所　渡邊裕章様
NuFD/FrontFlowRedによる高精度実機ガス化炉シミュレータの開発



（6）財団法人 電力中央研究所　道岡武信様、佐藤歩様
NuFD/FrontFlowRedによる実気象場でのガス拡散解析



4．今後の展望

今後も、乱流の非定常3次元解析、反応流や混相流など複雑系流れ、構造や音響場との連成解析、1億点規模の実機形状解析など、デジタルエンジニアリングへの適用を目指し、様々な実用問題で実証を進め、東京大学生産技術研究所及び北海道大学機械宇宙工学部門計算流体工学研究室が中心となり、FrontFlow/redをオープンソースとして提供して行く予定である。

また計算科学分野において、開発したソフトウェアの継続的な改良・開発体制の構築が重要であり、本プロジェクトでは当社等がプロジェクト成果を事業化し、顧客からのニーズに応じたソフトウェアの改良・開発の体制が作られている。この取り組みが、計算科学発展の一助になれば幸いである。

参考文献

1）戦略的基盤ソフトウェアの開発、（2002-2005）、東京
2）戦略的革新シミュレーションソフトウェアの研究開発、（2005-2008）、東京
3）大島、応用物理74（8）pp.1087-1091（2005）
4）大島、機論76-765、pp. 729-732（2010）
5）FrontFlow/red 公開版ver.3.1 ダウンロードサイト
http://www.eng.hokudai.ac.jp/labo/fluid/index.html

OpenFOAMの現状と課題

大槻　真人
株式会社CAEソリューションズ フルイド事業部

はじめに

本稿では、オープンソースのCFDツールとしてひろく普及しつつあるOpenFOAM[注1)]と関連情報について紹介したい。OpenFOAMの利用を検討されている方々の参考になれば幸いである。

概要と特徴

OpenFOAMはC++で開発されたオープンソースの流体計算用ライブラリであり、英国のOpenCFD社が開発・配布を行っている[1)]。OpenFOAMはOpenCFD社のWebサイトから無償でダウンロードできる。配布パッケージには、OpenFOAMライブラリを用いて開発されたソルバ（標準ソルバと呼ばれる）と、これらソルバで実行可能な例題およびソースファイルが添付されている。簡易メッシャと可視化ツールも同梱されており、インストールした直後から計算を実行して可視化までを配布パッケージのみで行うことができる。

”FOAM”はField Operation And Manipurationの略であり、流体を記述する偏微分方程式を有限体積法によって離散化して解くためのデータ構造と演算がクラスライブラリとして整備されている。離散化手法は非構造メッシュに対応しており、４面体や６面体のみならず任意の数の面で構成される多面体メッシュが利用可能である。OpenFOAMには領域分割による並列計算のためのクラスライブラリが含まれており、OpenFOAMを用いて開発されたソルバはそのまま並列で実行することが可能である。

OpenFOAMのクラス呼び出しは偏微分方程式の数学的表記から類推しやすいように工夫されており、従来のFOTRANやCによるプログラミングのように、配列インデックスの管理に悩まされることなくソルバを記述することが可能である。たとえば運動量保存式

$$\frac{\partial \rho \mathbf{U}}{\partial t} + \nabla \cdot \phi \mathbf{U} - \nabla \cdot \mu \nabla \mathbf{U} = -\nabla p$$

はOpenFOAMにおいて次のように記述される。

```
ddt(tho, U)  +  fvm::div(phi, U) – fvm::laplacian(mu, U)
==  - fvc::grad(p)
```

OpenFOAMの開発はLinuxで行われており、コンパイラや参照ライブラリ、可視化ツールなどもすべてGPLに準拠したソフトウエアを利用している。標準的な実行環境はLinuxおよびMacOSXであるが、Windows上で稼働する仮想マシンにLinuxをインストールして実行するパッケージ[2)]や、クロスコンパイラを用いてWindowsにOpenFOAMをポートしたパッケージ[3)]などがサードパーティーによって開発・配布されている。

配布内容

マルチブロック６面体メッシュを生成可能な簡易メッシャblockMeshが付属している。OpenFOAMは一般の非構造格子に対応しているが、非構造格子を生成可能なメッシャはOpenFOAMには付属していない。複雑形状を模擬するためボクセル格子中にSTLフォーマットの表面形状を読み込んで表面近傍で細分化・適合したメッシュを生成するツールsnappyHexMeshが用意されている。商用CFDソフトウエアや汎用メッシャからのコンバータも付属している。

OpenFOAM-1.3まではJAVAを用いた簡易GUIであるFoamXが添付され、条件設定やソルバの起動をGUIから行うことができた。しかしながらこのGUIはOpenFOAM-1.4以降開発が停止され、現在ではパッケージに含まれていない。

OpenFOAMのソルバは用途ごとに異なる名称で作成されている。このため数多くのソルバが存在する。表1にOpenFOAMの主要なソルバの一覧を示す。非圧縮乱流や燃焼、自由表面のソルバ商用CFDソフトウエアの機能にほぼ匹敵するものが開発されている。移動格子の機能は存在するが、スライディングメッシュの機能はOpenCFD社版のOpenFOAMには存在しない。

オープンソースの高機能可視化ツールであるparaview[4)]を利用したparaFoamと呼ばれるツールが同梱されている。この他、商用の可視化ツールFieldView,Ensight,Tecplot等へのデータコンバータが添付されている。

付属ドキュメントとしてはユーザーズガイド (PDF) が同梱されている。プログラマーズガイドはOpenFOAM-1.6まで添付されていたが、最新版では維持管理が停止された。さらにDoxygenを用いたC++ソースファイルのドキュメント(html)があり、Webブラウザを用いて閲覧できる。商用CFDソフトと比較すると、ドキュメントは充実しているとは言い難い。

開発経緯

OpenFOAMの起源は1990年代に遡る。1989年から1992年にかけて英国Inperial CollegeのGosman研において維持管理されていた有限体積法のFORTRANコードがC++によって書き換えられ、Henry WellerとHrvoje Jasakによって現在のOpenFOAMの原型が開発された。その後、同研究室での博士研究の成果として、乱流燃焼や自由表面等、FOAMライブラリを使用したソルバが開発された。1999年にはHenry WellerとHrvoje JasakによってNabra社が設立され、商用流

体ライブラリFOAMとして販売・サポートが開始された。日本では株式会社フルイドテクノロジー（2006年より株式会社CAEソリューション）が総代理店として販売サポートを行った。2004年にHenry WellerらはFOAMをGNU・GPLに準拠したオープンソース・ソフトウエアOpenFOAMとして無償配布することを決断し、Nabra社を解散して新規にOpenCFD社を設立した。以後OpenCFD社がOpenFOAMの商標を保持しており、開発と維持管理ならびに配布を行っている。

利用動向

オープンソース化された後、OpenFOAMは大学や研究機関を中心に急速にユーザーを増加させた。大学院の教育課程[5]に組み入れられたり、各種の開発プロジェクトに採用されている。リリース当初はCFD開発のツールとして利用されることが多かったが、近年では同梱されているソルバがそのまま実用計算に利用される事例も増加しつつある。とくに、近年では並列計算のためのハードウエアが比較的安価に入手できるようになったのに対し、並列計算のための商用流体ソフトウエアのライセンス料はコア数に比例して増加することから、大規模並列計算や最適化のための多くの解析ケースが必要な計算にOpenFOAMを導入する試みが企業においても進みつつある。またFOCUS[6]など企業が利用可能なスーパーコンピュータへのインストールも計画されている。

開発動向

OpenFOAMは2004年にOpenFOAM-1.0がリリースされて以後、ほぼ1年に一度バージョンアップされており、最新バージョンはOpenFOAM-1.7.1 (2010年12月)である。近年では直接シミュレーションモンテカルロ法を(DSMC)を用いた希薄気体用のソルバや微粉炭燃焼ソルバなどがOpenFOAMの標準ソルバに追加された。

OpenCFD社による「公式」版と並行して、Hrvoje Jasakらが中心となるグループ（OpenFOAM Extention Project）によって拡張版の開発が進められており、最新版はOpenFOAM-1.6-extという名称で公開されている[7]。拡張版には、オリジナルのOpenFOAMではサポートされていないスライディングメッシュなどが追加されている。流体構造連成機能も開発課題にあがっている。

商用のOpenFOAM用プリプロセサも開発されつつある。CAEソリューションズではFemapをベースとしたプリプロセサFOAMAP[8]を開発し販売を開始した。

サポート体制

開発元のOpenCFD社が有償のトレーニングやコンサルティングを実施しているほか、弊社[9]も含め、サポートビジネスを展開する企業は国内外で増加しつつある。また、欧州の大学・研究機関を中心にOpenFOAMの国際ワークショップ[10]が毎年開催され、活況を呈している。国内ではOpenCAE学会[11]が講習会などの普及活動を行っている。

今後の課題

非構造メッシャを含むプリプロセッサへの要望は多い。ドキュメントに関しても現状では不足と思われる。企業への導入にあたってはさらなる検証データの蓄積と公開が必要と考えられる。

注1）OpenFOAMは英国OpenCFD社の登録商標である。

参考資料

1) http://www.openfoam.com/
2) http://dexcs.gifu-nct.ac.jp/
3) http://www.symscape.com/openfoam-on-windows
4) http://www.paraview.org/
5) http://www.tfd.chalmers.se/~hani/kurser/OS_CFD/
6) http://www.j-focus.or.jp/
7) http://sourceforge.net/projects/openfoam-extend/
8) http://www.cae-sc.com/products/foamap.html
9) http://www.cae-sc.com/products/openfoam.html
10) http://www.openfoamworkshop.org/
11) http://www.opencae.jp/

表1　OpenFOAMの主要なソルバ(OpenFOAM-1.7)

非圧縮流	
channelFoam	チャネル流れ用LES
pisoFoam	非定常RAS/LES
simpleFoam	定常RAS/
shallowWaterFoam	浅水長波方程式
圧縮流	
sonicFoam	遷音速―亜音速流（気体）
sonicLiquidFoam	遷音速―亜音速流（液体）
rhoSimpleFoam	定常RAS
rhoPisoFoam	非定常乱流RAS/LES
自由表面（等温）	
bubbleFoam	気泡流
interFoam	非圧縮VOF2流体RAS/LES
compressibleInterFoam	圧縮VOF2流体
interPhaseChangeFoam	非圧縮VOF2流体キャビテーション
twoPhaseEulerFoam	連続相と分散相の２相流
燃焼流	
dieselFoam	スプレイ燃焼
dieselEngineFoam	シリンダ内スプレイ燃焼
reactingFoam	化学反応流
XiFoam	予混合/部分予混合乱流燃焼
PDRFoam	圧縮性予混合/部分予混合乱流燃焼
fireFoam	乱流拡散燃焼（火災）
ラグランジュ粒子	
coalChemistryFoam	微粉炭燃焼
reactingParcelFoam	化学反応流
mdFoam	分子動力学
直接シミュレーションモンテカルロ(DSMC)	
dsmcFoam	希薄流

CAE信頼性評価の動向とOpenFOAMの検証

柴田　直文
東芝インフォメーションシステムズ株式会社
エンジニアリングシステム・サービスオフィス

1. はじめに

OpenFOAMは高機能な数値計算ライブラリをパッケージしたオープンソースソフトウェア（以下OSS）として注目を集めており、産業分野においても利用が広がっている。一方、運用においては自己責任が前提であり、解析結果の信頼性についてユーザは十分に注意を払う必要がある。近年高まりつつあるCAE信頼性評価の動向とOpenFOAMの検証について紹介する。

2. OpenFOAMに対する期待と課題

OpenFOAMはオブジェクト指向言語C++で記述された数値計算用プログラミングライブラリのパッケージである。数値流体解析（Computational Fluid Dynamics：以下CFD）を指向した標準ソルバとチュートリアルデータを多数収録しており、CFDツールとしても容易に利用することができる。ユーザから見た最も大きな期待はコストメリットに関するものであろう。ある設計評価におけるOpenFOAMと商用コードのコストを図1に示す。OpenFOAMではライセンスコストの負担がないため全体のコストが大幅に低減されている。こうしたコストメリットに加えて、OpenFOAMはOSSの中では使いやすく高機能であり、製品設計・開発における評価ツールとして期待が非常に大きい。

一方、OSSであるが故に運用に際しては様々な面で自己責任に負う部分が大きく、ユーザの負担となっている。図1に示す例では商用コードに対して運用コストは倍増しており、商用コードのような質の高いサポートを受けることができない影響が現れている。最も本質的かつ重要な問題はコードの信頼性保証である。現在のところ、OSSの信頼性を保証する仕組みや組織は存在していない。OSSのコストメリットを享受する前提として、ユーザはコードの信頼性を自身の手で検証し、確認しなければならない。

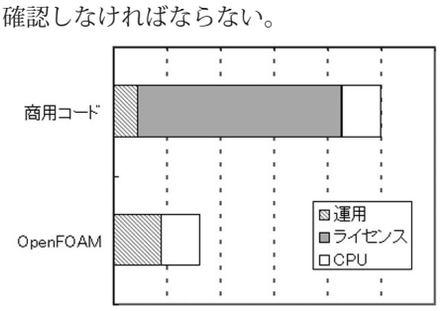


図1　ある設計評価におけるCFDのコスト

3. CAE信頼性評価の動向

実験の代替手段としてComputational Aided Engineering（以下CAE）の展開が進み、現在ではCAEは重要な産業基盤の一つとなっている。企業にとって、製品の社会的責任や競争力の裏づけとしてCAEの信頼性の重要さは増す一方であり、計算精度を保証する仕組みや技術に対する要求が高まっている。こうした背景を受け、学会や業界団体においてCAE信頼性評価の標準化に関する議論が活発になっている。米国ではASMEを中心に信頼性評価に関する理論の構築とプロセスの標準化が進んでおり、2006年には構造解析に関するガイドライン（V&V10）、2009年には熱流体解析に関する標準（V&V20）が発行されている。英国ではNAFEMSにおいてISO9001に準拠したCAEプロセスの整備が進んでいる。国内においてはJSMEによってCAE技術者の力量に着目した計算力学技術者認定制度が2003年から施行され、定着している。2009年からはJSCESのHQC研究分科会において信頼性確保のための方法論や技術の確立に向けた検討が進められている。2010年にはJANTIからCAEに対する具体的な品質要求の標準が発行されている。

このようにCAEの信頼性に対する要求とそれに応えるための仕組み作りは高まっており、今後はこうした動きに対応することなく数値計算コードを設計評価に使用することは難しくなると予想される。

4. CFDにおける信頼性評価

Ferziger & Peric（2002）によると、CFDにおける計算プロセスから誤差要因を階層的に整理することができる。それぞれの誤差要因についてはASME V&V20を始めとして系統的な検証および対応方法の標準化が議論されている。誤差要因の階層と標準化の対応を図2に示す。ある階層の誤差検討においては、より下層の誤差が十分に小さいことが必要である。例えばモデリング誤差を議論する場合、反復誤差および離散誤差に関する問題は解決していることが前提となる。この前提が満たされない場合、図3に示すように結果評価を誤るリスクがある。計算結果の信頼性においては誤差の評価が重要であり、最も基本的な階層に位置するコードの信頼性評価が非常に重要である。

ASME V&V20はこうした誤差の階層のほぼ全域に対して言及しており、分析プロセスを具体的に示している。特に離散誤差の重要性に着目しており、離散誤差分析からコードの信頼性を検証することを奨めている。

尚、ASME V&V20では誤差と不確かさを区別するが、ここでは便宜上、誤差に統一して呼ぶことにする。

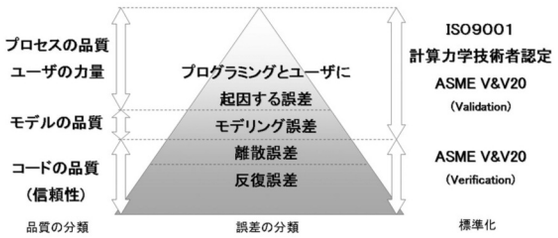


図2　誤差の階層構造

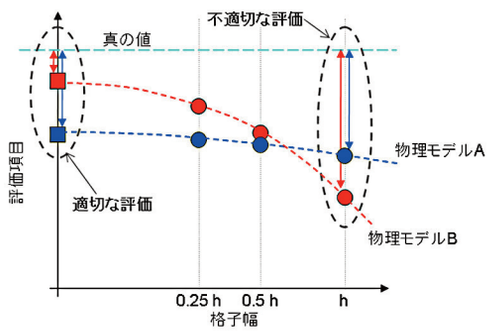


図3　離散誤差評価の重要性

5. OpenFOAMの信頼性評価

OpenFOAMにおけるコードの信頼性評価の一例を紹介する。評価手法はASME V&V20のcode verificationに準拠する。code verificationでは、真値が判明している問題についてCFDを行い、離散誤差を評価することでコードが正しく機能していることを検証する。離散誤差の分析においては、3種類以上の異なる解像度の格子を用いて格子に対する収束性を評価する。ここでは、評価対象をOpenFOAMの標準ソルバの一つであるsimpleFoamとする。simpleFoamは定常・非圧縮性流体解析ソルバである。

図4に平均格子幅に対する評価量の変化を示す。評価量は速度場を基に算出したある平均量である。平均格子幅に対する評価量の誤差の変化を図4に示す。ここで、破線は空間一次精度、実線は空間二次精度の離散化スキームによる計算結果を表す。図4を見ると、格子が細かくなるにつれて評価量は単調に収束する傾向があることがわかる。これは実用的なCFDコードとして好ましい特性であると言える。図5を見ると、平均格子幅に対する誤差変化の傾きが離散化スキームの次数に近いことがわかる。ASME V&V20によれば、このような傾向はコードが適切に機能していることを証明していると考えられる。離散誤差の分析結果から、simpleFoamは定常・非圧縮性流体解析コードとして十分な信頼性を持っていると判断できる。離散誤差の分析においては、こうした信頼性に関する情報の他に離散化スキームの特性や格子タイプから計算精度が受ける影響を知ることもできる。こうした情報は、実際の設計検討においてCFDを効率良く実施する際に非常に有用である。

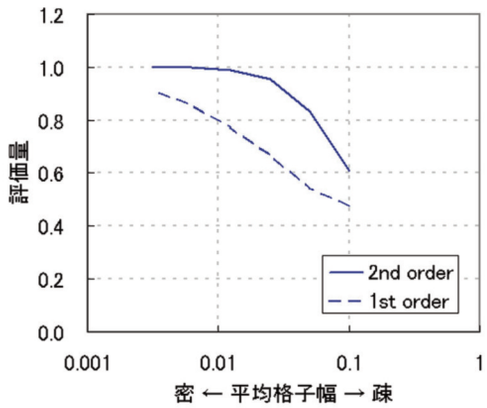


図4　評価量の格子依存性

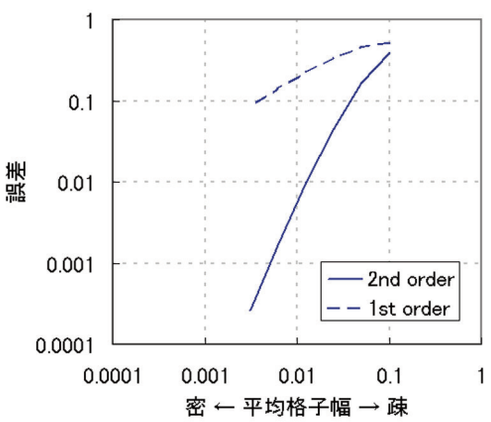


図5　誤差の格子依存性

上述の事例では、simpleFoamという特定のソルバについてコードの検証を行った。計算手法や方程式系が異なる場合には、あらためてコードの検証を行う必要がある。事例では乱流モデルは使用していないので、乱流モデルを使う問題においては別途検証が必要である。圧縮性流れや自由表面流れに対しても同様である。物理モデルや計算手法が複雑化した場合、誤差分析そのものが難しい場合がある。ASME V&V20では格子が粗い場合や乱流モデルを使う場合の他、不連続な物理現象に関する誤差分析は難しいことが示唆されている。

6. おわりに

CFDの信頼性評価に関する議論は現在も進められており、今後は評価手法もさらに洗練されて行くものと思われる。また、CFDの信頼性評価に対する社会的要求および経営上の重要性は今後も増大すると考えられる。OSSの利用においても信頼性評価は必要不可欠であり、コスト効果の実現と両輪を成すテーマとして検討を続けることが重要である。

OpenFOAMを用いた燃焼解析

山本　研二
（株）日立製作所 日立研究所

1．はじめに

OpenFOAM®(Open Field Operation and Manipulation)[1)2)]は、OpenCFD社が開発しているオープンソースのCFDソフトである。このソフトは、CFDのための数多くの標準計算ライブラリと、このライブラリを用いた多数の標準解析プログラムを有し、大学の基礎研究から企業での業務まで幅広く使用されている。さらに、ソースコードが全て公開されているので、独自の解析モデルを自由に組み込むことも可能である。本報告では、OpenFOAMの特徴とOpenFOAMを基に当社で開発した燃焼解析プログラムについて紹介する。

2．OpenFOAMの特徴

ユーザ側から見たOpenFOAMの特徴は、解析機能の多さであり、開発者側から見た特徴は、開発効率の高さである。以下では、これらの特徴をまとめる。

（解析機能）
- すぐに使える多数の標準解析プログラムが用意されている。
- 標準で並列計算が可能で、並列化効率が高い。
- 様々な計算の前処理、後処理のツールが用意されている。特にメッシュ関連のツールが充実している。
- 多数の入出力ファイル形式に対応している。

（開発効率）
- オブジェクト指向言語C++で記述されているので、開発効率が高い。
- 乱流、伝熱、燃焼等のモデルがまとめられた標準計算ライブラリを利用できる。
- ソースコードが全て公開されているので、プログラム開発時に参考にできる。
- WEB上のフォーラムに問い合わせができる。
- 定期的にプログラムがバージョンアップする。

ここでは、一例として、スカラーの輸送方程式を計算するプログラムの作成方法について紹介する。対象とする方程式を式(1)とする。

$$\frac{\partial T}{\partial t}+\frac{\partial u_j T}{\partial x_j}=D_T\frac{\partial^2 T}{\partial x_j \partial x_j} \qquad (1)$$

この式を計算するOpenFOAMのプログラムの中心部分を図１に示す。fvmという記号は有限体積法を用いて陰解法で計算することを意味する。また、ddt(T)はTの時間微分を、div(phi,T)は移流項を、laplacian（DT,T）は拡散項を示す。このように、OpenFOAMでは、数式を書くようにプログラムを開発できる。しかも、このままで並列計算ができる。

```
solve
(
    fvm::ddt(T)
  + fvm::div(phi, T)
  ==
  fvm::laplacian(DT, T)
);
```

図１　スカラー輸送法手式の計算プログラム

しかし、OpenFOAMでプログラムを開発できるようになるには、以下のハードルを越えなければならない。
- プログラミングに独特のルールがあり、慣れるまで時間がかかる。
- クラス階層が深く、プログラムの全体構造が分かりにくい。

独学でOpenFOAMを学習するのは効率が悪いので、勉強会やセミナーへの参加をお勧めします。

3．燃焼解析プログラム

当社では、社内で使用されている燃焼関係の解析プログラムの統一を目的に、nextFlame（社内コードネーム）を開発した。開発の初めに、多数の解析プログラムを比較し、ベースソルバーとしてOpenFOAMの採用を決定した。現在、燃焼装置の開発にnextFlameを活用している。

nextFlameの構成を図２に示す。OpenFOAM-1.3に、精度が高く、計算効率の高い独自のモデルを多数組み込んでいる。以下において、代表的なモデルについて紹介する。

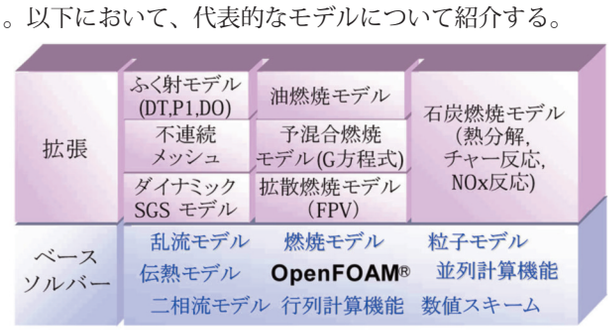


図２　燃焼解析プログラムnextFlameの構成

（ふく射伝熱）

ふく射輸送方程式の計算方法として、DT法[3)]、P1法、DO法のソルバー組み込んだ。DT法の光線の計算には、OpenFOAMの粒子計算ライブラリ（particleクラス）を利用

した。P1法、DO法の基礎式は、流動計算と似た移流・拡散方程式で表されため、容易にプログラムを開発できた。

（油燃焼）

OpenFOAMの標準ライブラリdieselSprayを基に開発した、高精度油燃焼モデルを組み込んだ。dieselSprayには、インジェクター・粒子分裂・衝突・蒸発などのモデルが組み込まれている。

（ガス燃焼）

拡散燃焼のモデルとして、Flamelet Progress Variable モデル、予混合燃焼モデルとして、G方程式モデルを組み込んだ[4]。OpenFOAMを使用することで、方程式の追加などのプログラミングが簡単になり、燃焼モデルの開発に注力することができた。

（石炭燃焼）

OpenFOAM-1.3は、石炭燃焼のモデルを備えていない。そこで、熱分解、チャー反応、NOx反応等のモデル[5]を新規に開発して組み込んだ。新規の開発であっても、似た機能を持ったプログラム（この場合はdieselSpray）を参考にすることで開発期間を短縮できる。

（不連続メッシュ機能）

OpenFOAMは市販ソフトに引けを取らない、メッシュ機能を有する。その中で、不連続メッシュ機能（二つのメッシュを別々に作成した後、接続した１つのメッシュに接続する機能）は、複雑な形状のメッシュ作成に威力を発揮する。この不連続メッシュ機能を拡張し、多数のメッシュ（通常50個ぐらい）を、接続するプログラムを開発した。

４．解析事例

以下では、nextFlameを用いた二つの解析事例を紹介する。

（微粉炭着火実験の解析）

一つ目の事例は、石炭供給量1.3 kg/hの実験室規模の燃焼実験の解析である。中心のノズルから微粉炭を含んだ空気を10 m/sで噴き上げ、その外側に供給する1510 Kの高温ガスを用いて、微粉炭を着火させる。乱流計算に、LESモデルを使用した。

図３に、石炭粒子の温度とガス温度の等値面（1560K）の計算結果、高速度カメラで撮影した火炎画像を示す。石炭粒子の温度は、ノズル付近では低いが、下流では高温ガスにより加熱され上昇している。火炎画像とガス温度の等値面の比較から、計算により着火位置を予測できることが分かった。

（低NOxバーナの解析）

二つ目の事例は、石炭供給量500 kg/hの低NOx燃焼バーナの解析である。乱流計算に、LESモデルを用いた。燃焼炉内に存在する粒子数は，約300万個である。

図４に、計算で得られたガス温度の等値面と流線を示す。

LESモデルを用いることで、火炎の揺らぎや循環流を予測できることが分かった。また、バーナ中心軸上の温度と酸素濃度は，実験データと良く一致していることを確認している。

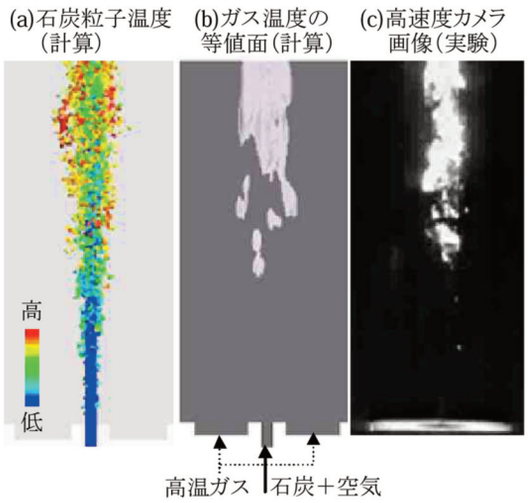


図３　微粉炭着火実験の解析と実験結果

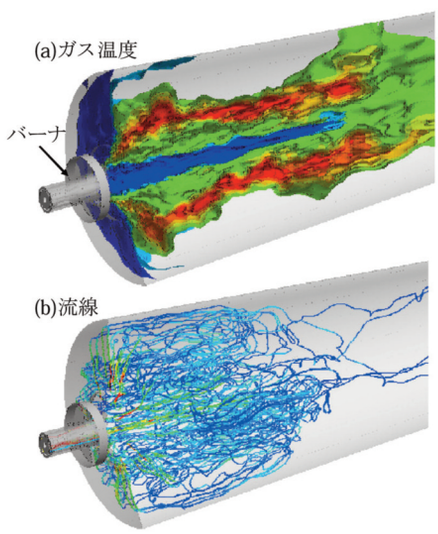


図４　低NOxバーナの解析結果

５．おわりに

オープンソースのCFDソフト集であるOpenFOAMの特徴とOpenFOAMを基に開発した燃焼解析プログラムnextFlameについて紹介した。OpenFOAMを活用することで、さらに精度の高いツールを効率的に開発していきたいと考えている。

参考文献

1）OpenCFD Ltd., <http://www.openfoam.com/>
2）OpenFOAM®ディスカッションボード
<http://groups.google.com/group/openfoam>
3）山本研二, 室田知也, 岡崎輝幸, 押領司一浩, 機論B編 75巻759号(2009)
4）室田知也, 山本研二,　第47回 燃焼シンポジウムB114 (2009)
5）Yamamoto, K., Murota, T., Okazaki, T., Taniguchi, M., Proc. of the Combust. Institute Vol. 33 (2011)

オープンCAE：DEXCSの可能性

柴田良一　岐阜工業高等専門学校 建築学科（左）
野村悦治　株式会社デンソー 技術管理部（右）

1．オープンCAEへの期待

ものつくりにおけるCAEへの期待は大ですが、導入や運用のコストの大きさから、中小企業にとっては未だ障壁も大きいという声も聞かれます。一方でハードウエアの価格性能比は著しく向上し、かつてスパコンでしかできなかった大規模で複雑なCAEが手元のパソコンで処理可能になっています。このような技術革新のなかで、商用CAEのソフトウエア価格がシステム構築費用の大半を占めるようになると、様々な問題が指摘されるようなりました。

問題１：教育研修において、多数の受講者に対して商用CAEのライセンスを確保することは多額の経費が必要となる。

問題２：研究開発において、専門技術者が大規模並列処理や解析機能の改良が必要な場合に商用CAEは対応が難しい。

そこで注目されているのがオープンソースのCAEシステムです。直接的には経費削減の効果が期待され、さらに設計者の技術力向上など様々な効果が期待されています。

2．オープンCAEの定義

オープンソースCAEにおける「オープン」の意味については、GPLの３つの自由に拠るものと我々は考えています。

・利用：プログラムを自由に利用できる
・改良：ソースコードを自由に改良できる
・配布：複製や改良を自由に再配布できる

これらはオープンソースの発展におけるコミュニティの成立に不可欠の条件であって、上記の問題１に対して導入コストの面だけ捉えて利用の自由が注目されますが、問題２に対する改良の自由も非常に大きな意味を持ちます。またコミュニティが成立するためには配布の自由が不可欠になります。

我々のDEXCS（デックス）では、「オープンCAE」と呼んでいますが、これはソースコードに関する上記の３つの自由に加えて、活用知識の共有を目指しているためです。「利用・改良・配布・知識」これらをオープンにすることで、新しいCAEの可能性を展開して行こうと活動を進めています。

これまでのCAEでは、独自CAEの開発か商用CAEの導入かの選択でした。しかし、独自CAEでは、特にプリポストなどのGUI的な機能をユーザーの多様なニーズに応えるのが困難で、商用CAEの導入では前述の問題が指摘され、第３のオープンCAEに、これらの問題を解決する可能性があると思います。

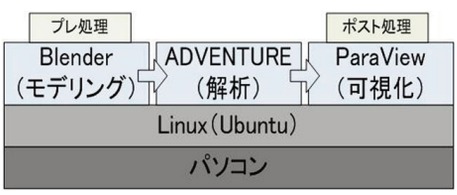


図１　DEXCS（デックス）の基本構成

3．DEXCSの紹介

DEXCSは、Digital Engineering on eXtensible Computing Systemの頭文字から名付けられ、拡張性を持つ設計支援用解析システムとして、以下の３つの目標を持って開発されているオープンCAEです。

・構築や運用に手間がいらず，教育用途に手軽に利用できる
・計算だけでなく，データ作成や結果の可視化まで対応する
・モジュールの追加で，実用設計の支援解析にも適用できる

これらの目標を実現するために、DEXCSは、次の特徴を持っています。

・図１のように基本OSのUbuntu上にCAEに必要なツールを全て組み込んであり、All-In-Oneで配布できます。
・ダウンロードしたISOイメージを用いて、DVD起動や仮想マシン起動が可能で、HDDにインストールも出来ます。
・操作はDEXCSランチャーに集約され、最小限の単純なマウス操作でCAE解析を効率的に実現しています。
・初心者のCAE習得を支援するために、サンプル形状や初期設定が用意されており、確実に解析を演習できます。

現在は、以下の３つのバリエーションがあり、後半で内容を説明します。

・DEXCS-Adventure：基本構造解析用
　構造解析ソルバーとしてADVENTUREを利用
・DEXCS-Salome：実用構造解析用
　構造解析ソルバーとしてSALOME-Mecaを利用
・DEXCS for OpenFOAM：流体解析用
　流体解析ソルバーとしてOpenFOAMを利用

4．開発の経緯と状況

開発は、岐阜工業高等専門学校の柴田研究室と株式会社デンソーの技術管理部との共同研究として行われ、下記の公式サイトより、登録の上、無償でダウンロードすることができます。

DEXCS公式サイト：http://dexcs.gifu-nct.ac.jp

2007年より公開を開始し、ほぼ毎年更新を続けており、現時点で最新版が2010となっており、登録者数が約1000名で総ダウンロード数が約3700件となっています。各システムは1GB以上のファイル容量となるため、オープンCAE学会の協力を得て、DVD実費配布サービスも行われています。

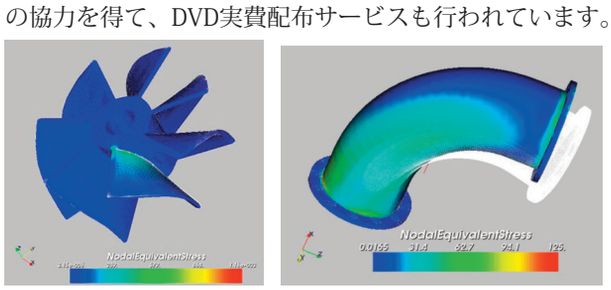


図２　DEXCS-Adventureの解析例

５．DEXCS-Adventureの解析機能

これは、主に学校教育や技術研修での活用を目的として開発されたDEXCSで、以下に示す基本的な構造解析の機能を持っています。

- CAEの基本概念の学習を効率よく進めるために、ランチャーの操作を絞り込んで単純にしています。
- 煩雑になるモデリング操作を単純化するために、単一物性の部品レベルでの解析を対象にしています。
- 高度なCAEへの展開を実習するために、大変形解析や弾塑性解析の機能を持ち、増分解析が可能です。
- 大規模モデルの増分解析を効率よく実行するために、並列処理クラスタとの連携機能があります。

手軽に基本的な構造解析CAEに取り組むことが可能で、さらには通常のパソコンで数十万要素レベルの解析まで対応できるので、座屈解析や耐力評価などにも活用することが可能です。

解析ソルバーは、東京大学吉村先生らが開発されたADVENTURE-Solidを用いています。モデリングでは3D-CGソフトのBlenderを用いており、複雑な形状を作成することや、他の3D-CADよりSTL形式データを流用することも可能です。可視化ではParaViewを用いて、図２に示すような分かり易い応力分布や変形状態を示すことができます。

６．DEXCS-Salomeの解析機能

これは、主に研究開発や設計業務での活用を目的として開発されたDEXCSで、以下に示す実践的な構造解析の機能を持っています。

- プリポスト機能とランチャー機能を備えたSALOMEを用いて、商用CAEと同様な汎用構造解析システムです。
- 実務での利用を前提に構築されており、複数の部品により構成された複雑で大規模な解析が可能です。
- 解析機能としては、設計業務で必要となる接触解析、熱応力解析、周波数応答、動的解析にも対応しています。
- 並列処理で大規模解析に対応し、シェル要素を用いた合理的なモデリング機能も持っています。

ここで用いているSALOME-Mecaは、解析ソルバーCode_AsterとプリポストSALOMEを統合したシステムで、フランスの電力公社EDUで開発されたものです。

発電所開発の設計業務を目標にして、実務設計で必要とされる機能を全て備えており、膨大な仏文解説文書により技術情報が公開されています。モデリングにおいてはIGES,STEPなどのフィーチャー系のデータを流用することも可能です。図３は、接触解析の結果です。

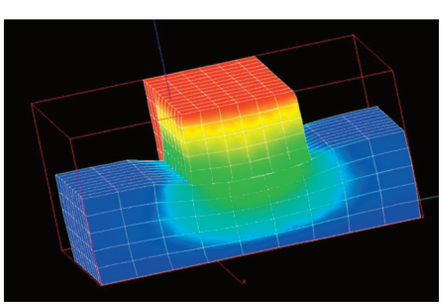


図３DEXCS-Saloeの解析例

７．DEXCS for OpenFOAMの解析機能

OpenFOAMは、日本機械学会誌2008年12月号にてトピックス紹介されたように、近年、劇的にユーザー数を増やしているオープンソースCFD統合ソフトウエアです。DEXCS for OpenFOAMでは、手軽に本格的なCFDを体験できることを目標に、ボタンを順番に押していくだけで、図４に示すような複雑な物体周りの流れ解析（定常非圧縮性乱流計算）が可能です。

これにはOpenFOAMでVer.1.5以降、SnappyHexMesh という六面体をベースにした自動メッシュ作成ツールが使えるようになったことが大きく寄与しています。但し、この設定ファイルは形状データに応じて書き換えが必要になるので、この主要パラメタをGUIパネルで簡単に編集できるようにしたツールも組み込むことにしました。これでSTLなど３次元形状のポリゴン系のモデルデータさえあれば、GUI操作で簡単な仮想風洞試験ができることを実感してもらえると思います。

動画チュートリアルも同梱してあり、DEXCSランチャーの操作方法を覚えるかたわらで、OpenFOAMの計算に必要なパラメータファイルの概要や構成についても学習できるようになっています。これからOpenFOAMの本格的な勉強や活用を考える際の足掛かりとして利用してもらえればよく、本格的な活用では、ランチャーをカスタマイズして利用するのがベストとして、ランチャーのカスタマイズツールも同梱しました。なお、最新版ではマルチコア対応の並列計算が可能で、64bit版 もあります。

８．DEXCSの活用事例

以上で説明した３つのDEXCSは、目的に応じて様々な活用が進んでおり、以下では企業での活用の事例について紹介します。

- 株式会社デンソー：
  技術研修にDEXCS-Adventureを採用し技術力向上を狙う
  カスタマイズした DEXCS for OpenFOAM を定型的なCAE業務や研究ニーズに特化した用途に適用
- 株式会社豊田自動織機：
  技術研修において実験と理論とCAEを連携した実践教育
  今後は設計技術の向上を目指し応用教育へ展開する計画
- 住友軽金属工業株式会社：
  研修用ソフトのコストを抑えCAEの効果的な学習を展開
  簡潔な操作手順が技術教育の効率化に貢献すると評価

この他にも、DEXCSをオープンCAEのプラットホームとして活用し、業務用解析システムの構築を進める企業もあります。

オープンCAEの発展には、何よりもコミュニティでの活動が不可欠です。皆さまの、様々な形での御協力を期待するところです。手軽に始められるオープンCAE：DEXCSを是非お試しください。

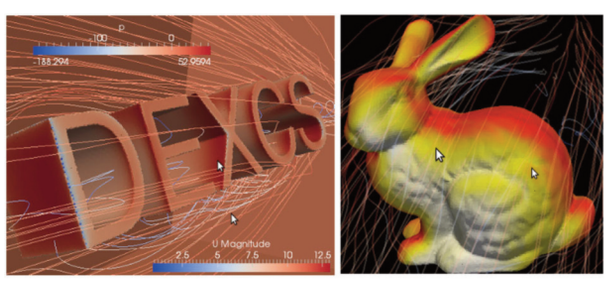


図４　DEXCS for OpenFOAMの解析例

ソフトマテリアルのための統合化プラットフォーム OCTA

青柳　岳司
旭化成（株）基盤技術研究所

1. はじめに

材料開発、分子設計の分野では古くから量子化学計算、分子動力学計算などの分子シミュレーションが利用されており、薬物設計、半導体開発、化学反応設計などの分野で成果を上げている。しかし、高分子や液晶、界面活性剤などのソフトマテリアルといわれる材料は、その特性を示す空間スケール、時間スケールが広範にわたり、原子1つ1つをまともに取り扱う正攻法の分子シミュレーションではカバーできない場合が多い。

一方、樹脂部品設計の分野においては、射出成形用金型設計などでCAEが汎用技術として用いられているが、材料そのものの物性予測、あるいは分子設計に対してまではアプローチすることが出来ない。

OCTA (Open Computational Tool for Advanced material technology) は、このような分子シミュレーションとCAEの中間領域（メソ領域）のシミュレータ、および各種シミュレータを統合しうるプラットフォーム環境を開発する目的で、経済産業省およびNEDOのプロジェクト「高機能材料設計プラットフォームの研究開発」において開発が行われ、2002年4月に初期のシステムが公開された[1]。その後、OCTAはフリーウエアおよび一部商用パッケージとして公開、販売が続けられている。そしてフリーウエアに関しては、ユーザーグループなどの力により、開発、メンテナンスが続けられており、数多くのユーザーに活用されている。

本稿では、フリーウエアとしてのOCTAの概要と現状、適用事例に関して紹介する。

2. OCTAシステムの概要

OCTAは図1に示すような4つのシミュレータ(COGNAC, PASTA,SUSHI,MUFFIN)、およびそれらのシミュレータを統合するプラットフォーム (GOURMET) からなる。以下に各々のモジュールに関して簡単に説明する。

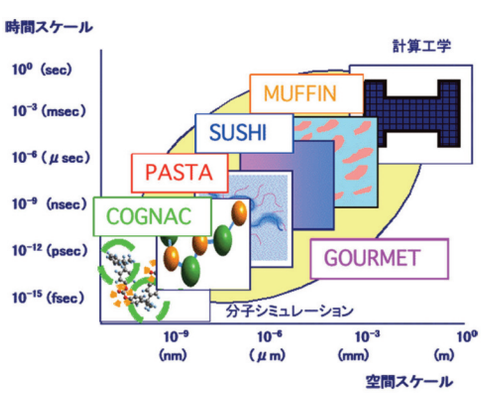


図1　OCTAの構成

2.1 GOURMET

OCTAに含まれるシミュレータは、分子動力学のような粒子モデルから、有限差分法、有限要素法を用いる連続体モデルまで幅広い計算モデルを含んでいる。従って、それらシミュレータの入出力データの内容も様々である。統合ユーザーインターフェースGOURMET (Graphical Open User interface foR Multiscale-analysis EnvironmenT) は、これら多様なデータを編集、解析するためのツール、GUIとして開発された。各シミュレータはGOURMET上で共通の操作感により、入力データの編集、出力結果のグラフィックス表示、グラフ作成、各種ツールによる解析などを行うことが出来る。またユーザーが独自に開発したシミュレータでも、入出力をUDF (User Definable Format)というデータ記述形式に従えば、グラフィックス表示、グラフ作成などGOURMETの提供するデータ解析機能を簡便に利用することが出来る。

2.2 COGNAC

汎用粗視化分子動力学(MD)シミュレータCOGNAC (COarse-Grained molecular dynamics programs by NAgoya Cooperation)[2]は、数原子、あるいは高分子の場合数モノマーユニット程度を一つの構成単位（セグメント）とし、セグメントの運動をシミュレーションするという粗視化MDを行うシミュレータである。ミクロな分子シミュレーションに最も近く、主に高分子鎖の構造とダイナミクスを取り扱うことができる。

2.3 PASTA

レオロジーシミュレータPASTA (Polymer rheology Analyzer with Slip-link model of enTAnglement)はDual-slip link モデル[3]に基づいて、絡み合い高分子系のレオロジー予測をおこなう。このDual-slip link モデルとは高分子の絡み合いを一つの単位とした、粗視化の程度の高いモデルであり、粗視化MDをもってしても困難な絡み合いを有する実用的な高分子材料の分子量、分子量分布を扱い、かつ実測に対応する時間スケールでの溶融粘弾性の予測が可能である。

2.4 SUSHI

動的平均場シミュレータSUSHI (Simulation Utilities for Soft and Hard Interfaces)は、平均場理論に基づき、相溶、非相溶系の分子構造および相分離構造を予測する[4]。ホモポリマー／ブロックコポリマー、直鎖／分岐鎖など、任意の分子アーキテクチャに対応し、それら任意の分子の混合における、相分離の際の静的および動的構造を予測することが出来る。

特に粒子シミュレーションと異なり、1次元、2次元の計

算モデルを用いることが可能で、相分離構造予測に対して簡便なスクリーニングから精緻な3次元構造予測まで適用の範囲は広い。

2.5 MUFFIN

多相構造シミュレータMUFFIN (MUltiFarious FIeld simulator for Non-equilibrium system)は相分離構造、液的分散系等の複数の相からなる流体、および固体の構造と物性のシミュレーションをおこなう。流体系モジュールでは、高分子混合状態のせん断流動下における相分離、液的分散系における液的の合体と分裂、電気粘性流体の電場印可下における挙動などをシミュレーションすることが出来る。固体系モジュールでは多相構造の線形弾性率予測などの構造解析を実行することが出来る。

3. OCTAの適用事例

OCTAを用いた適用事例、特にCAEとの連携が期待される高分子材料の物性予測に関して事例を挙げる。

3.1 ポリマーブレンド界面強度予測[5)]

ポリマーブレンドの相分離により形成するような多相構造を持つ材料の機械的物性をCAEで予測する場合、界面の物性をいかに与えるかが重要になる。この界面物性をメソスケールシミュレーションにより予測できると、マクロレベルのCAEの精度、計算モデルの妥当性が向上することが期待される。

図2に、例としてブロックコポリマーを相容化剤として添加した際の、ポリマーブレンド界面の剥離挙動を粗視化MDにより検討した例を示す。濃い色で表示しているブロックコポリマーがポリマーブレンド界面に凝集し、剥離時には双方の面とのアンカー効果を発現し界面を強化することが観察される。

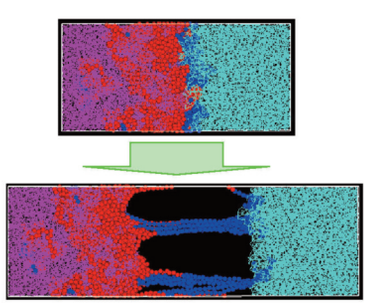


図2 粗視化MDによるブロックコポリマーにより強化されたポリマーブレンド界面の剥離挙動シミュレーション

3.2 溶融高分子の伸張粘度予測[6)]

樹脂流動CAEを行うためには溶融高分子の粘弾性データを与える必要がある。通常のずり粘度などは簡単に測定することが可能であるが、伸張粘度は測定することが一般には困難である。メソスケールシミュレーションによりこの伸張粘度を予測出来れば、実測に比較して簡便にCAEの物性データとして利用できることが期待される。図3にPASTAを用いた溶融ポリスチレンの伸張粘度予測の例を示す。図に示すように伸張粘度に特有の高ひずみ速度におけるひずみ硬化の挙動も再現されている。

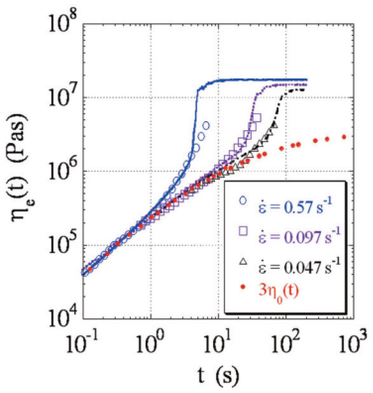


図3 PASTAによる溶融ポリスチレンの伸張粘度予測の例。ラインは計算値、プロットは実測値を示す

4. フリー版OCTAの現況と今後

国家研究プロジェクトが終了した時点でユーザーグループが組織され、ウェブページ(http:/octa.jp/)を通してOCTAが公開された。現在でもユーザーグループが中心になりバージョンアップが継続され、2010年8月には最新版のOCTA2010がリリースされた。

また、このウェブページではOCTAシステムの公開と共に、掲示板において情報公開、利用に関する議論等が行われ、OCTA普及に一役買っている。

その他、新化学発展協会（2011年4月より新化学技術推進協会）、高分子学会などで研究会、講座などが企画され、常に新たなユーザーに対して門戸が開かれている。

このようにOCTAに関する様々な活動は、プロジェクト終了後10年近くなる現在でも精力的に進められ、ユーザー数も着実に伸びている。少なくとも国内においては、ソフトマテリアルのメソスケールシミュレータとしてデファクトスタンダードの地位を獲得したと言っても過言ではなかろう。

しかしながら、海外の大学、国研などにおいて研究として継続的に開発され、フリーウエアとして公開されているソフトウエアとは異なり、OCTAは公開、サポートはもとより開発自体がフリーなボランティアの手に委ねられている。そのため、例えば並列化、大規模計算機対応など、時流に応じた開発などにまでは行き届いていないのが現状である。

今後、世の中で唯一といってもいいソフトマテリアルのための統合シミュレーションシステムOCTAが持続的に発展し、次世代のシミュレータ開発への足がかりとなる環境が整備されることが望まれる。

参考文献

1) http://octa.jp/よりダウンロード可能
2) T.Aoyagi, F.Sawa, T.Shoji, H.Fukunaga, J.Takimoto and M.Doi: Comput. Phys. Commun., 145, 267 (2002).
3) J.Takimoto, H.Tasaki and M.Doi, Proceedings of the XIIIth International Congress on Rheology, 2, 97 (2000).
4) 本田隆, 浦下真治, 森田裕史, 長谷川龍一, 川勝年洋, 土井正男, 高分子論文集, 56, 762 (1999).
5) T.Aoyagi, Nihon Reoroji Gakkaishi, 37, 69 (2009).
6) T.Aoyagi, T.Honda, F.Sawa, M.Sasaki and Y.Nishio, Nihon Reoroji Gakkaisi, 30,247 (2002).

オープンソースコードを用いた粗視化分子動力学シミュレーションの取り組み

篠田　渉
産業技術総合研究所ナノシステム研究部門

粗視化分子モデル　分子動力学シミュレーション　オープンソース

1. はじめに

ソフトマテリアルの構造や物性の研究では、しばしばナノからミリスケールに渡るマルチスケールの現象を取り扱う必要があり、これまでに様々なレベル(解像度)における物理法則に則ったシミュレーション手法が開発されてきた。その多くは連続体理論に基づく現象論的なシミュレーションであるが、一方で分子構造に立ち返ってその設計の指針を与えるべく、分子モデルを用いた(分子動力学)シミュレーション技術も計算機の発展と共にその利用・適用範囲を広げつつある。しかしながら、全原子をあらわに取り扱うシミュレーションでは自ずと限界があり、時間・空間スケールの問題が未だに大きい。近年、我々は全原子モデルからの構造データや熱力学(界面)物性の再現に基づいた粗視化分子モデルを提案し、特に脂質や界面活性剤を含む水溶液系を中心に研究を行ってきた。これにより50 nm程度の分子系の取り得る構造やその物性を定量的に解析することが可能となってきている。その分子モデル開発や拡張において、分子動力学シミュレーションのオープンソースコードが果たした役割は小さくない。筆者自身が独自に開発しているソフトウェアMPDyn(1)だけでなく、より高並列な環境で高速稼働するSandia National Labで開発されたLAMMPS(2)の使用によってリポソームのような大きな分子集合構造のシミュレーションが容易になったことは特筆に値する。本稿では、オープンソースコードの利用によって開発してきた粗視化分子モデリングの方法と応用計算例を簡単に紹介したい。

2. 粗視化分子モデリング

脂質や界面活性剤が水溶液中で自発的に形成するミセル、ヘキサゴナル、ラメラ、ベシクルなどの様々な分子自己集合構造を予測し、またその集合プロセスをシミュレーション時間内に観測するため、粗視化モデルを導入した。しかし、粗視化単位を大きくする(解像度を下げる)と情報の欠落から精度や汎用性が下がることは避けられない。そのため、粗視化分子モデルの決定には再現すべき物性や構造の解像度をあらかじめ設定しパラメータフィッティングを行う必要がある。紙面の関係上、ここでは簡略して記述するが、上記のような分子集合体の示すモルフォロジーを決定する重要な物性として、表面・界面張力、密度、溶媒和自由エネルギーが挙げられ、それらの実験値と全原子モデルから得られた分子分布関数を再現するようなモデルの構築を行った。(3,4)これらターゲット物性のパラメータフィッティングを系統的に行うことで、最大限許される粗視化レベルもほぼ自動的に決定される。試行錯誤を経て、結局、我々が導入した粗視化レベルは，基本的に重原子(非水素原子)３つとそれに結合する水素原子を一つの中心力相互作用サイト(例えばプロピレン基$CH_3CH_2CH_2$-を一つの粗視化サイト)として近似することとした。一般的な脂質分子のサイズ(M>～700)を考えれば、両親媒脂質分子の異方性を記述するのに十分な解像度を持つことがわかる。図1には例として代表的な脂質分子であるジミリストイルホスファチジルコリン(DMPC)の分子構造を示す。粗視化手続きには多様な手法が存在するが、我々は力場関数モデルを用いて粗視化を行った。力場関数型は生体分子系の汎用力場で用いられるような相互作用関数を用い、分子内の振動、変角ポテンシャルと、非共有結合相互作用としてLennard-Jones(LJ)項とクーロンポテンシャルによって分子系を記述した。しかし、関数型の具体的な選択には注意を要し、特にLJ項については関数のべき乗数を含めてフィッティングを施し、構造などの諸データの再現を改良している。

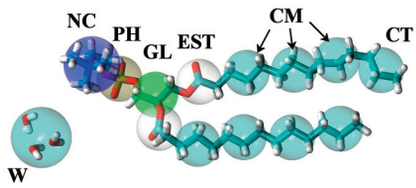


図1： DMPCと水の粗視化モデル。粗視化粒子と全原子の対応はNC: $(CH_3)_3NCH_2CH_2$-, PH: -PO_4-, GL: -CH_2CHCH_2-, EST: -$OCOCH_2$-, CM: -$CH_2CH_2CH_2$-, CT: -$CH_2CH_2CH_3$, W: $(H_2O)_3$

$$U_{\mathrm{LJ}}\left(r_{ij}\right)=B\varepsilon_{ij}\left\{\left(\frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}}\right)^{m}-\left(\frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}}\right)^{n}\right\}.$$

LJ項のべき乗数は最適化の結果、{m,n}={12,4} (LJ12-4)及び{9,6} (LJ9-6)を選択した。係数Bは関数型に応じて$3(3)^{1/2}/2$ (LJ12-4)、27/4 (LJ9-6)と設定することで、εがポテンシャルミニマムの深さ、σがU=0となる距離と対応するため、相互作用パラメータの意義が直感的に理解しやすい。水分子が関係する相互作用にはLJ12-4、それ以外の相互作用はLJ 9-6を用いている。(3)

このような関数型までの最適化を行うためには、もちろん既存のソフトウェアを改変して使用しなくてはならず、新しいモデルの導入にはオープンソースコードの利用が欠かせないことがわかる。本研究ではMPDynを用いて様々な関数型を用いてフィッティングを試行し、上記のような関数型に決めた後、共同研究者らがそれぞれLAMMPSなどの他のオープンソースコードへと移植し使用可能とした。最近はGPUで動くソフトウェアHOOMD (5)に本粗視化モデルが移植されており、より省資源で高速に粗視化分子動力学シミュレーションを行うことができるようになった。また、モデル開発に

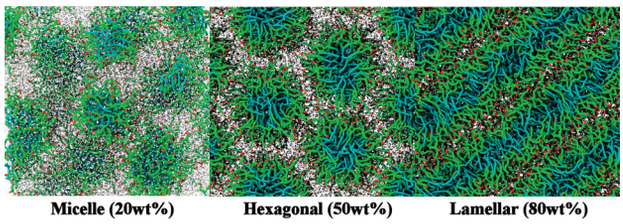


図２：ノニオン性界面活性剤 ($C_{12}E_6$)の水溶液中における自己集合構造。括弧内はそれぞれ界面活性剤濃度。

は通常の分子動力学シミュレーション以外に各種自由エネルギー計算を行う必要があり、計算負荷は非常に高い。これらをいかに効率よく実行できるかは大きな問題であり、手法の開発・改良が必要であり、そのためにもオープンソースコードを活用する意義は高い。

3. 粗視化分子動力学シミュレーション

先述の界面物性や構造を再現する系統的なパラメタリングを施すことで、これまでに非イオン性、イオン性界面活性剤、脂質分子の粗視化モデルを提案した。(3,4,6,7)先述のように、粗視化によって自己集合構造の形成を計算時間内に観測することが可能となり、またその構造はモデルの最適化において使用した物性によって保証される。ここではいくつかシミュレーションによって得られた分子集合体のモルフォロジーが、分子によって大きく異なり、それが実験と良く一致することを示したい。図2には非イオン性界面活性剤$C_{12}E_6$の濃度依存によるモルフォロジー変化を示す。ミセルは球状の凝集体であり、ヘキサゴナルはチューブの一軸方向での並び、ラメラはシート状のスタックである。これらの構造はランダムな初期配置からシミュレーション時間内に自発的に形成され、その構造は実験と良く対応している。さらに複雑なキュービック相や逆ヘキサゴナル相の形成を観測することにも成功している。これら自己集合構造は分子構造の微妙な変化によって敏感に大きく変化する。そのため、これらを定量的に評価するためには、分子科学に根ざしたモデルの構築が必要であり、本モデルはこれまでの現象論モデルと異なり、かなり精密に相図を再現する。

並列効率の高いLAMMPSを使用することで、生体模倣材料や薬物搬送システム(DDS)などで用いられるリポソームのような大規模系のシミュレーションが可能となった。図3には水溶液中におけるDMPC分子のランダムな凝集体構造から球状リポソームに変化した際の構造変化を示す。この形態変化は凝集にかかる時間に比べずっと短時間で起こっている。

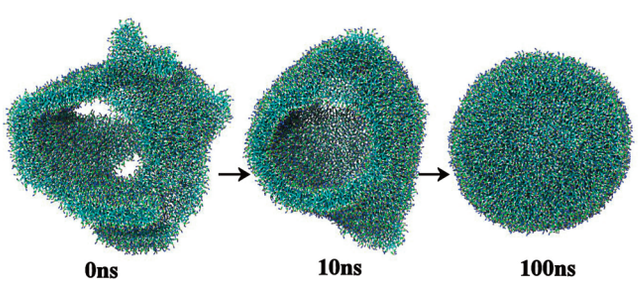


図３：DMPC5000分子からなる凝集体構造の変化。

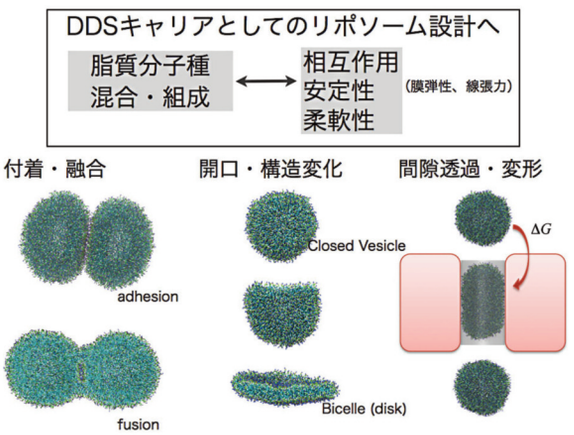


図４：DDSキャリアとしてのリポソーム性能評価。分子シミュレーションによる検討が可能な分子プロセス。

一度、球状のリポソーム構造が形成されるとかなり高い安定性を示すこともわかってきた。

DDSではこのリポソームに薬物を入れ患部に輸送する。血流に乗って輸送される途中、リポソームの様々な環境変化が起こり、それは図４に列挙したような各プロセスにブレークダウンできよう。これらのプロセスにおける自由エネルギー変化を分子シミュレーションによって評価することは、最適な脂質組成などのリポソーム設計指針を与えるために非常に有意義であると考えられる。現在、我々はこれらの自由エネルギー計算を可能とすべく手法開発を行い、開口や変形に関する自由エネルギー計算はすでに実現している。

4. おわりに

本稿では触れなかったが、ペプチド(8)、フラーレン(9)などのナノ粒子の粗視化モデルはすでに完成しており、その適用範囲を徐々に広げている。同様のアプローチはポリマー材料についても拡張可能であり、プログラムソースの公開とともにモデルの公開も進めていく予定である。

参照

(1) http://staff.aist.go.jp/w.shinoda/MPDyn/index.html
(2) http://lammps.sandia.gov/
(3) W. Shinoda, et al., Mol. Simul. 33, 27 (2007).
(4) W. Shinoda, et al., Soft Matter, 4, 2454 (2008).
(5) http://codeblue.umich.edu/hoomd-blue/
(6) W. Shinoda, et al., J. Phys. Chem. B, 114, 6836 (2010).
(7) X. He, et al., Chem. Phys. Lett. 487, 71 (2010).
(8) R. DeVane, et al., J. Chem. Theory Comput. 5, 2115 (2009).
(9) R. DeVane, et al., J. Phys. Chem. B, 114, 6386 (2010).

計算力学部門への期待と望むところ

有限要素法×材料力学＝面白い

岸　正彦
株式会社　三造試験センター

1．はじめに

企業人としての現役時代に私は、社内製品の応力解析、熱伝導解析、振動解析を有限要素法と材料力学などで実行し、その結果を用いて強度評価を行ってきました。その初期は有限要素法の黎明期でもあり、材料力学の方が主役でした。有限要素法解析の技術の蓄積ができると、広く社内に有限要素法関連の教育を行い、同時に、社外の講師も勤めました。

フルタイムの現役を退いて10年になります。その間、有限要素法による構造解析と強度評価の手順とノウハウをまとめ、３冊の単行本1), 2), 3) を出版しました。また、それらを教材にして、講義や講習会も行ってきました。今日までの活動で、設計関係のエンジニアが求めている有限要素法関連の情報、あるいは彼らに欠落している情報がどんなものかを感じ取ってきました。以降の記述で「有限要素法による応力解析」を、FEAと略記します。

若手設計エンジニアの多くは、材料力学のはりや板の知識が少なく、3D-CADからモデラを利用してソリッド要素によるFEAを行っているようです。3D-CADの利用を前提にすると、はり要素や板要素にモデル化するより、ソリッド要素を使う方が手軽と感じており、構造形状に依存することなくソリッド要素を使うことに疑問も感じていないようです。

その背景には、単に材料力学の知識不足だけでなく、汎用ソフトウェアの使い勝手のよさ、ソリッド要素の要素特性の改善、図形処理の高速化、コンピュータの演算能力の向上などがあげられます。有限要素法のブラックボックス化が危惧されて久しいのですが、それはますます進んでいるように感じます。

私がFEAをはじめた時代は、材料力学を基礎に有限要素法の理論を学び、プログラミングをしてソフトウェアを作り、FEAの結果を材料力学や実験で求められる値と検証してきました。今の時代にこれをそのまま要求することは間尺に合わないでしょうから、3D-CADからFEAを実行することも否定はしません。むしろ優良な汎用ソフトウェアを用いて、いきなりFEAを実施することもよしと思っています。

それは、FEAで結果を出す喜びをまず感じ取り、それからFEAの内容に関心を持ち、理論やはりと板などの勉強へと進んでゆく方が、抵抗が少ないと思われるからです。さらに、そこに「力学的な面白さ」が感じられると、より勉強がしたくなるはずです。その勉強のきっかけとなりそうないくつかの「力学的な面白さ」を以下に書いてみました。

2．ポアソン比ν

ポアソン比とは？　と問われて、鉄鋼材料でその値が約0.3と答えられても、その物理的意味を知らずに利用している人が多いようです。

図１の断面積A、長さL、幅B、縦弾性係数Eの弾性棒で説明してみれば、棒の軸方向に単純な垂直力Fを作用させると、単軸垂直応力σ（引張応力または圧縮応力）が生じ、その方向に縦ひずみε_1を生じると共に、その直角方向には逆符号の横ひずみε_2が生じます。ここで$-\varepsilon_2/\varepsilon_1$の値をポアソン比と呼び、記号はνを使います。弾性範囲では同一材料について一定です。νは一見地味な弾性定数ですが、実に様々な力学的な役割を果たしています。

パイプを圧縮すると板厚、内径、外径が共に増加するのは、νの存在を意味しています。長方形の平板を片持ち板のように曲げると、１次元的な曲げではなく、鞍型に変形するのも同様です。これらはFEAでνをパラメターに解析してみれば明らかです。ここで注意したいのは、ν＝0.0はFEAで実行できないでしょうから、0.001などとします。νが実感できる様々な現象は、参考文献１）§27.3(7)にも示しました。

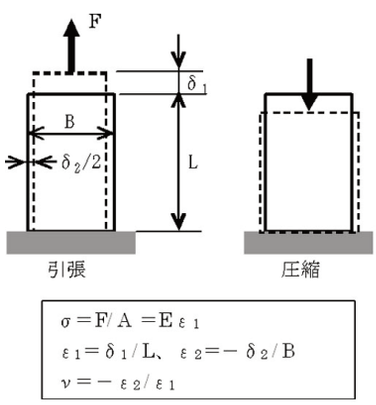


図１　ポアソン比ν

3．縦弾性係数Eとポアソン比ν

FEAの材料データとして、線形弾性の等方性材料の場合、Eとνを入力する必要があります。横弾性係数（せん断弾性係数）Gはどうなっているのでしょう。Gの入力がないとせん断変形は計算されないと早合点する人もいるようですが、そんなことはなく、Gが次式で計算されます。

$$G=E/2(1+\nu)$$

E, G, νは弾性定数と呼ばれ、２者が決まれば残りの第３者が決まります。従って、３者を入力すると、矛盾が生じないように、いずれかの２者が優先されるはずです。

FEAで異方性材料とすれば、３者の従属関係がなくなるため、Gを極端に大きくしてせん断変形を事実上なくした結果などを求めることができます。

4．先端集中荷重を受ける片持ちはり

先端集中荷重Fを受ける片持ちはりの先端の曲げ変位δと固定端応力σは、はりの長さをL、断面２次モーメントをI、断面係数をZとすれば、周知のように、次の通りです。

$\delta = FL^3 / 3EI$

$\sigma = \pm FL / Z$

FEAで、はり要素を用いてこれらに相当する値を求めると、σは完全に一致しますが、δはやや大き目の値となります。この差を誤差であるとして片付けてはいけません。FEAの結果には曲げ変形だけでなく、せん断変形も含まれています。材料力学でせん断変形も含めれば、実用上の一致が得られるでしょう。

はりのような構造でも、曲げ変形のみでなく、せん断変形もあることを、FEAで実感できます。参考文献１）§26.1と参考文献２）§2.2で詳しく解説しています。

片持ち板の場合は、参考文献２）§3.2に示すように、ポアソン比の役割も確かめられます。

5．片持ちはりのソリッド要素による解析

3D-CADからモデラを利用してソリッド要素によるFEAを行うことが日常的になっている現状で、片持ちはりの解析も例外ではないでしょう。ところが、その場合、荷重点や固定点の境界条件が単純ではなく、また応力が複雑な結果となるでしょう。共に「点」ではなく「面」であることがその原因の1つです。荷重を先端面にどの様に与えるか、中央の１点なのか、端面に一様分布なのか、現実と相談する必要があります。固定面に分布する応力をどのように評価するのかも判断が要ります。

基本的な強度を評価するには、ソリッド要素よりはり要素（４項の方法）を用いて「点」としての応力で十分であり、応力集中が必要であるとしても応力集中係数で処理する方法があります。ソリッド要素を用いると、要素分割や形状が適切な場合に限り、応力集中した現実の応力が得られますが、疲労評価が求められていなければ不要のことです。強度評価の知識を習得しないと無駄な解析をすることになります。

参考文献３）§2-7では、はり要素、板要素、ソリッド要素でモデル化した片持ちはりの比較をしています。

6．サンブナンの原理

機械工学便覧によれば、サンブナンの原理は、次のように説明されています。

荷重の分布状態に差があっても、合力および合モーメントが等しい場合には、荷重領域から十分に離れた断面に生じる変位および応力は等しい。

では、「十分に離れた」とは、どれくらい離れればよいといえるのでしょうか。この原理は、証明されていることではなく、経験的に理解されている性質ですが、有限要素法が出現したことで計算実験により確認することが可能となりました。力の合計が等しいいくつかの具体例で、FEAを実行してみればよいことになります。その結果、必ずしもすべてには適用できませんが「十分に離れた」とは、板構造であれば板幅程度、はり構造であればはり背程度でよさそうです。参考文献３）P.154で、計算例を示しています。

実問題に材料力学や有限要素法を適用する場合、大なり小なり構造や荷重の簡略化が必要となります。そのとき、この原理を応用すると、解析の着目部から離れた位置に作用する荷重を、合力と合モーメントの等しい集中荷重や分布荷重に置換できたり、また、解析の着目部から離れた位置の構造を省略し、その仮想の断面に平面保持の拘束条件と等価な荷重条件を与えることができます。

7．入力エラー

FEAで入力のエラーは、入力データが多いだけに不可避ともいえますが、決してエラーがあってはいけません。現実に起したエラーの原因は、理論を学ぶことでかなりの絞込みが可能となります。一例として、縦弾性係数Eの入力を誤った場合を想定してみます。

入力したEの大小に関係なく、結果の応力は適切です。応力は荷重との釣合いから決まるためです。一方、変形はEの大小に逆比例します。ただし、熱応力の場合は、応力が線膨張係数とEとの積に比例するために、Eの大小がそのまま応力の大小となります。

これらのことは材料力学を学べば容易に推測ができます。さらに有限要素法理論を学べば完璧でしょう。

8．おわりに

以上の内容は、このニュースレターの読者には幼稚すぎるでしょう。しかし、材料力学をあまり学ばずにFEAを行っているエンジニアに、材料力学への関心を持たすためには役立つのではと思います。その対象者の多くがこのニュースレターの読者にはなっていないでしょうから、私がここに書いただけでは何の役にも立ちません。僭越ではありますが、有限要素法関連のご指導をされる読者の方々が、このような内容をお使いいただければ幸いです。

材料力学に関する教科書は沢山ありますが、FEAのために限定したものは知りません。その最小限は参考文献１）§25で記述しました。また、参考文献４）P.27でも解説しました。しかし、ひたすら退屈で、面白くないのが事実です。

ひずみゲージを使う実験は設備が必要ですが、FEAによる計算実験はパソコンとソフトウェアがあれば、納得するまで何回でも一人で容易に可能です。様々なパラメターでFEAを実行し、材料力学の結果と比較することで「力学的な面白さ」を感じてくれることを期待します。

計算力学部門では、材料力学を前面に出すことはないでしょうが、FEAに関連させてぜひ材料力学の重要性を常々伝えていただければと思います。

参考文献

１）岸正彦「構造解析のための有限要素法実践ハンドブック」森北出版、2006.5.30
２）岸正彦「例題で学ぶ有限要素法応力解析のノウハウ」森北出版、2008.4.4
３）岸正彦「図解入門 よくわかる最新 有限要素法の基本と仕組み」秀和システム、2010.8.6
４）岸正彦「情緒的な材料力学と論理的な有限要素法」CAE懇話会会誌第６号、2009.4.28

計算力学部門への期待と望むところ ～粒子法とGPGPUとの出会いを通じて～

川上　浩
プロメテック・ソフトウェア株式会社

1．はじめに

プロメテック・ソフトウェア株式会社は、東京大学の越塚誠一教授によって考案された粒子法（MPS法： Moving Particle Simulation Method）という新しいシミュレーション技術と、東京大学（理学部情報科学科）西田友是教授の可視化技術（フォトリアリスティックCG）を融合する事で新しいシュミレーションシーンを創出する事を創業以来目指してきている大学発ベンチャー企業である。創業者（藤澤智光）の創業モチベーション・創業の熱い想いの源泉が日本機械学会・計算力学部門 “CGの手法を活用した計算力学の可視化研究会（A-TS01-16）” にあったという事は間違いない。そしてその熱い想いが、2004年10月に ”High Performance Simulation & Computer Graphics” をコンセプトに弊社を創業するに至るのである。弊社は現在に至るまで、工学系の粒子法という革新的な知恵・知識と理学部系のCG・GPUに関する知恵・知識を融合させて新たなビジネスシーンを創出する事にチャレンジを続けている。弊社がCAE業界の中でもいち早くGPUコンピューティングという超並列計算技術に着目できたのは、計算力学部門を含めた学会・民間との様々な交流を通じて御指導・御鞭撻を頂戴した大学・民間研究者やCAE業界の人たちとの出会い、そして画期的なテクノロジーとの巡り合わせがあっての事である。

創業以来の想いが、6年半の歳月をかけて、2011年3月にようやくCAEソフトウェアParticleworks Ver2.5として市場に投入される事となった。本稿では “High Performance Simulation” をキーワードにその技術的な背景と成果を簡単に述べてみたい。

2．粒子法とGPUコンピューティング

GPUの大きな特長は数百個オーダーの多数の演算器が、並列計算に最適化されたアーキテクチャでメモリと結合されており、その結果、CPUに比較して高速な実効メモリバンド幅が実現されていることである。格子法を含む多くのCAEソフトウェアでは、演算そのものよりもメモリへのアクセススピードによって、その実行演算速度が決まることになる。実質の計算速度を上げる為には、演算器の数を増やすだけではなく、高速の実効メモリバンド幅が実現されていることも重要な要素となる。演算そのものが高速でできたとしても、メモリから演算コアへのデータ転送が追い付かず、メモリバンド幅の性能でCAEソフトウェアの実質性能が決まってしまうからである。一時代を創出したベクトルマシンと類似している。

CPUに比較してGPUの高速なメモリバンド幅は、元来の用途である３DCGの描画だけでなく、旨く使えば多くの計算工学／CAE分野のアプリケーションにも非常に有用となるはずである。

粒子法はメッシュを作成する必要がないという格子法に対する圧倒的なアドバンテージがありシミュレーションの敷居を低くする事に繋がっている。しかし、粒子法では空間解像度を局所的に変えて解析精度向上と演算スピードの向上を行うという事が実用レベルではできない。このことから、実用的な演算をするには膨大な演算をする事が避けられない。また、粒子法特有の処理である、粒子に近接する粒子を探索する処理もあり、格子法に比較しても並列化効率を上げるには大きな計算コストを要する。

粒子法をGPU上に実装するためにGPU上でのメモリアクセス速度が低下しにくいようなデータ構造とそれを実現するようなアルゴリズムを新規に開発した（特許申請中）。粒子法でのシミュレーションでは、ランダムメモリアクセスが多く発生するために一般的にはGPUには向かないと言われているが、弊社ではハードウェアアーキテクチャを意識したデータ構造とアルゴリズムを実装することにより、実務上十分な高速演算を実現する事に成功した。

3．粒子法実用化ベンチ

モデルH（図1）は既存CAEソフトウェアのポスト処理とは異なったフォトリアリスティクな表現で描画をしたもので、粒子数約30万粒子でモデル化された高粘性攪拌のシミュレーション事例である。本モデル事例ではCore i7 920 (4コア)SMP演算比Tesla2070利用で7.36倍、GeForce580では11.42倍の高速演算を実現した（図2）。演算粒子数による利用メモリがGPU搭載メモリ上に乗ればこの高速演算が実現する。

このパフォーマンスの差は現状のGPU製品ラインナップで

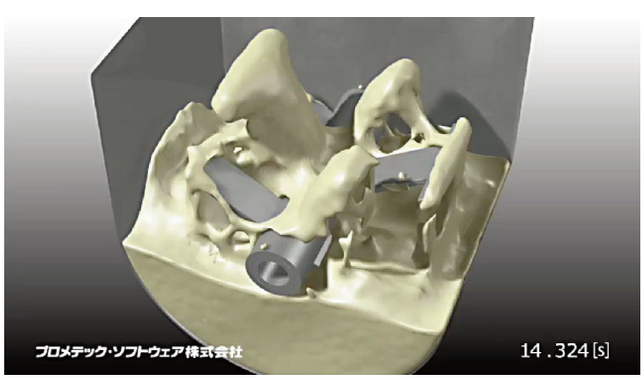


図1　モデルH（高粘性流体攪拌解析）

は、GeForce580のメモリバンド幅（192GB/s）がTesla 2070(144GB/s)より広い事に起因と思われる。倍精度浮動小数点演算性能差よりメモリ転送レートが演算スピードの優劣を決めていると言っても過言ではない。GeForce580のアーキテクチャが近々Teslaに搭載されると期待される新しいTeslaＸＸＸ次世代シリーズでは、倍精度浮動小数点演算性能を最大限生かせる実効メモリバンド幅もGeForce580同等以上になるとされている。

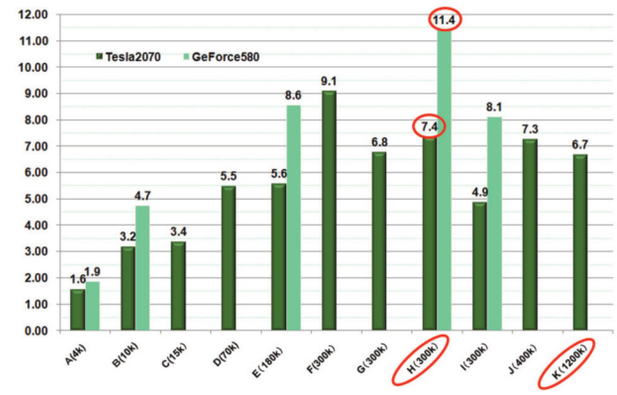


図2　演算パフォーマンス（Core i7 920 (4コア)SMP演算比）

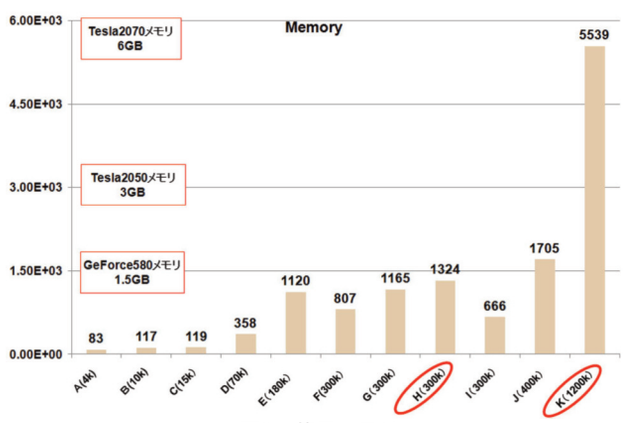


図3　使用メモリ

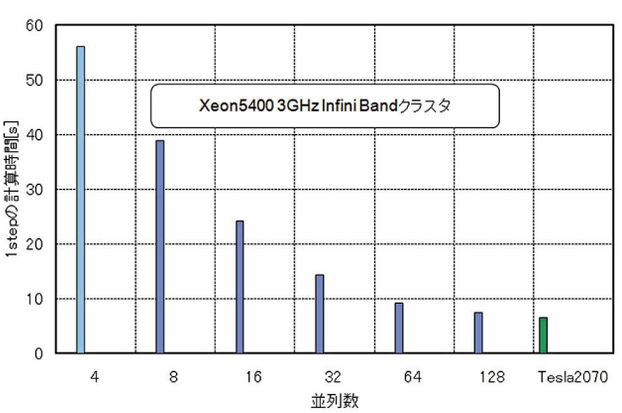


図4　モデルKのSMP、MPPクラスタパフォーマンス

モデルKは弊社顧客の実運用モデル（120万粒子）でのベンチである。本解析に必要なメモリが5.5GB必要となりGeForce580の1.5GBメモリではメモリ不足で解析ができない。Tesla2070の6GBで実行可能なモデル規模である（図3）。図4では本モデルでのCPUクラスタでのスケーラビリティを表している。128コア構成のクラスタパフォーマンスをTesla2070が1枚で同等以上のパフォーマンスを示している事が判る。この事は1000万円相当クラスのクラスタシステムでの演算を50-60万円程度の1台のデスクサイドPCで演算する事が可能である事を示している。

尚、Particleworksでは1枚のGPUのみでの演算だけでなく、複数枚のGPUを同時利用する演算も可能となっている。（1ノード内でのマルチGPU演算）これにより、さらなる高速演算の実現や大容量メモリの確保が可能になる事で、不可能と考えられていた粒子法による超大規模モデル演算も可能になる。すなわち、1ノード内に4枚のTesla2070を搭載したデスクサイドPCでさらなる高速演算が期待できる。又、現状でも500万粒子程度のモデル規模の解析が可能になり、これはまさにPersonal Super Computerの誕生と言っていいであろう。ここ数年のGPU演算パフォーマンスの向上は急速に向上しており、NVIDIA社等のメーカーからのロードマップも意欲的なものが表明されている。2−3年後には確実に大幅にパフォーマンスが向上し、劇的なコンピューティング環境が訪れるであろう。

4．最後に

粒子法はメッシュを作成する必要がなくCADモデルから直接解析できる。それに加えて普段使うようなＰＣで超高速演算が実現できれば、現在のCAEユーザー以外のCAE解析の専門家ではない設計者やデザイナー等の職種の方が自由表面問題や連成問題を意識せずに簡単に取扱う事が可能になるだろう。単なる高速性の追求ではなく、革新的なGUIや革新的な利用形態が提案できるようになると、モノづくりの仕組みすら変わる可能性がある。

このような事を実現するためには、粒子法のようなCAEの新時代を創るかもしれない革新的なシミュレーションテクノロジーだけでは実現はおぼつかない。様々な立場や考えを持った人たちの繋がりを無くして語れないのである。その繋がりを創出する機会や人材育成を企業・大学等の研究者が積極的に参加できるような仕組み作りを日本機械学会の計算力学部門には期待したい。

日本機械学会の計算力学部門に関わるメンバーによって、人とテクノロジーとの繋がりを“作り”、革新的な製品を “造り”、そして新しい時代を “創る” 事が成されると信じている。日本発・日本CAEソフトで世界を驚かせたいものである。

文　献

1）藤澤智光　“粒子法とGPGPUでシミュレーションの新時代を切り開くプロメテック” 映像情報メディア学会誌　VOL65 2 PP181-185

繊維製品への数値解析法の適用の期待

横山　敦士
京都工芸繊維大学 大学院 工芸科学研究科 先端ファイブロ科学部門

コンピュータをはじめとした情報機器は急速な性能向上により、従来では考えられなかったような分野でのコンピュータ利用が進んできている。製品設計の分野においてもCAE（Computer Aided Engineering）技術を代表とするコンピュータ利用が急速に進んでいる。CAE技術の中核となる有限要素法の基礎理論は50年前には作られており、さらにその基礎となっている構造力学の諸理論は100年前には完成している。NASTRAN等の商用ソフトウェアも1960年代から1970年代にほぼ出そろっており、40年を超える歴史を有している。私がCAEに初めに関わったのが大学院生時代で約25年前になり、その当時は紙製のパンチカードに4000枚程度の有限要素法プログラムを自作して研究に利用していた。大学院修了後に就職して最初に出会った商用ソフトウェアはSAPでこれを用いて今から見れば簡単な構造計算を行っていた。これらの歴史を見てくるとCAE技術は約50年の歴史を有しており、それほど目新しい技術では無いことが感じられる。

ただ、この50年間にシミュレーションが出来るようになった現象は飛躍的に広がってきている。当初、私が使用していた商用ソフトウェアSAPがソースコードで約2万行のプログラムであったものが現在のソフトウェアでは100万行を超えているものもあり、大規模な構造計算が可能となって来ている。また、計算対象も単純な梁の計算から複雑な構造体全体のシミュレーションが可能となっている。数年前まで何とかして構造を単純化しないと計算出来ないと悩んでいて、また、その手法がノウハウになっていた問題が何も考えなくてもそのまま計算できるようになってきている。さらに計算できる現象そのものも当初、弾性計算だけであったものが塑性現象、粘性現象と広がってきている。さらに静的な問題から動的、衝撃的な問題の計算も可能なり、一方、構造解析だけではなく流体解析、電磁場解析等、解析の種類も広がってきている。

これらのCAE技術の発展はひとえにコンピュータの高性能化・低価格により実現できたものであり、3次元の構造解析など、従来を研究上では可能でも現実の設計業務では不可能と考えられてきたCAE技術が利用可能なところまで到達してきている。20年前には全く実現不可能であり、夢物語であったシミュレーションが卓上のパソコンで実現可能な時代となっている。このため種々の設計業務への利用の期待が高まってきている。実際、設計業務では開発期間の短縮やコスト削減の要求の高まりに従って、コンピュータを用いた設計が急速に広がってきている。このように急速に導入が進んでいるCAE技術で何でも計算で済ませられる感があるが、問題がないかと言えば依然として多くの問題が存在していると言わざるを得ない。商用ソフトウェアが開発されてからほぼ半世紀が経つがその当初に存在した問題が解決されてきたかと考えると、必ずしも解決されてきているとは言えないと思われる。この問題は理解しておくことがCAEソフトウェアを設計業務に利用するために有用である。そこで、少しこの問題を整理してみたい。

さて、シミュレーションソフトウェアはどのように複雑なものを計算する高級なソフトウェアといえどもデジタルの入力データをある手続きにより計算して、結果を出力するブラックボックスと見なすことが出来る。このことは結局、計算の善し悪しはソフトウェアの性能以前に入力データの品質により決定されることが判る。

入力データとして初めに考えられるのは形状データである。これはCADデータが有れば比較的簡単に得られると思えるが人体等形状が決定できない問題もある。次が材料定数であるがシミュレーションに要求される現象が複雑となり、高度の解析機能が必要とされる問題では、計算に際して設計者に要求される知識が高度となり、それに相まって必要とする物性値等の設定すべき条件が複雑で計測困難な値となることが多い。

さらに、支持状態や、荷重負荷状態を表現する境界条件を入力する必要がある。この条件も解析機能が高度になるに従い単純に設定が出来ない場合が増えてきて、結局ある程度妥協しながら設定していく必要に迫られる場合が多い。これらの情報の品質に注意しておかないと結局、どのように高級なソフトウェアを使用して高度な計算をしても要求される精度を保障する計算結果を得られないこととなる。

従って、計算の精度を保障すると言うことは入力データの品質、ソフトウェアの性能、出力データの評価法のそれぞれを単独ではなく、総合的に評価しながら取捨選択して計算を行うことが設計者に要求されている。CAEを仕事に使用する技術者に対してはこれらのバランス感覚を持つことが要求されているが、この感覚を涵養するためには多様が知識、経験が必要であるが、なかなか短時間には難しく技術者養成の課題となっている。

CAEはComputer Aided Engineeringの頭文字をとったものであることは上述しているが、CAE技術はEngineeringつまり工学であることがくせ者で、単純なソフトウェア技術として捉えることが不可能である。CAEソフトウェアの利用にはその背後に広範な工学一般の知識・技術をその利用に際して要求されるところがある。さらに言えば、もの作りの現場のノウハウまで必要がある場合がある。つまり、ものづくりそのものに密着した技術であり、もの作りの現場を離れては存

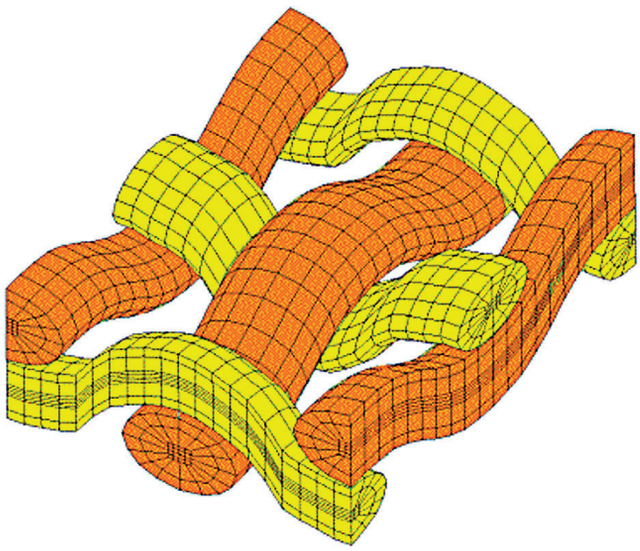


図　織物構造モデル

在し得ないところにその独特の難しさがあるように思える。この特徴は他のCADに代表されるコンピュータ支援技術との大きな違いであり、端的に言うと広範なものづくりに関する知識に裏打ちされた工学的なセンスがCAEソフトウェアを利用するために必要な条件になるようだ。

筆者は大学に在職しており、上述してきたような学問、技術を学生に教える立場にあるのではあるが、その範囲があまりにも広範にわたるために一つの教育カリキュラムに馴染まず、結局は工学全般を教育することになる。つまり、CAE技術を身につけるためには従来の教育カリキュラムを十分習得することが第一であり、その涵養の上に、ものづくり現場におけるノウハウを身につけることによる工学センスを磨くことが効率的ではないかと思っている。

このようなことを言うと大学ではCAEに関する技術を教えることができないとられる恐れがあるが、大学で教えるべきはものづくりに必要な工学基礎であり、これとものづくりに必要な技術を実感するための実験を組み合わせた実践的な教育をしていく必要があるというありきたりな結論になってしまう。

さて、以上の状況を元にして繊維製品に対するCAE技術の適用にしての現状と課題を考えてみたい。繊維製品はその特徴的な特性により身の回りでもっとも身近に使用されている材料である。特に人体と常時接触する部分にはほとんどこの繊維材料が使用されている。従って、繊維製品に対するCAE技術を考える場合には繊維製品の特性評価だけではなく人体に対するシミュレーション技術の課題や、人体と繊維製品の接触を考えるなど幅広い問題を考えないといけない。

まず、形状データに関しては、繊維製品は厚さが薄く、変形が容易であることがその特徴であるため、形状を特定しにくい場合が多い。また、その構造はフィラメント、撚り構造、織構造等、構造が複雑な階層構造を有しておりそれぞれが互いに影響し合っており最終的な繊維製品全体の特性に対して影響を与えているため複雑な構造をしている。

次に材料定数については上記の複雑な構造が材料定数に影響を与えているために他の均質材料では考えられないような特性を持っており、それぞれが相互に影響を与えているためにその特性の特定を困難にしている。さらに境界条件であるが接触しているのが通常人体であるため、人体の挙動を表現できなければ設定が困難である。

上図は、研究室で開発している織物構造体の数値解析モデルの一例である。このモデルは織物の単位構造を表現しており、織物特有の非線形変形挙動を表現することが出来るようになっている。これを見ると数値解析もすぐにでも出来そうだが問題が多数存在している。

例えば織物を構成する経糸、緯糸それぞれが単一の材料ではなく、フィラメントが複雑な構造をして絡まっており、さらには空隙が多数存在している。この空隙が問題で、変形に伴い大きく変化する。例えば引張り変形に対して単糸の見かけのポアソン比は2を超えることが多い。このような状態を見れば繊維製品は究極の不均質材料であり、通常の解析手法ではなかなか太刀打ちが出来そうもない。当方でも種々の手法を開発しては適用しているが未だ決め手になる手法が開発できているわけではない。

このように、繊維製品に対するCAE技術の適用に関する課題を列挙してみたが、このままだと絶望的な状況とも思えてくる。数年前までのコンピュータの性能や解析技術ではおそらく絶望だと言うことになったと思われるが、現在、やっとその緒につける状況が整いだしていると思っている。

フイルム等の均質材料の応用としてではなく繊維製品そのものの解析技術としての現実の現象を見据えた大胆な仮定とモデル化の知見を駆使することで工業製品としてはもっとも複雑な構造を持っているであろう材料の一つである繊維製品に対するCAE技術を用いた設計が実現できる時期が来ていると考えられる。工業製品としては、大きな生産量がある、繊維製品に対してのCAE技術の適用の期待は今後も高まっていくことが予想されることも相まって、今後の数値解析技術の進展に期待したい。

CAE／計算力学部門への期待と望むところ

戒田　拓洋
住友化学株式会社 生産技術センター

1．はじめに

ものづくりを目指す工学の三要素として、設計、製造、メンテナンスが挙げられる。筆者はこれら三要素の中で主に化学プラント圧力設備のメンテナンスに関わっている。化学プラントで使用される圧力容器、配管等の圧力設備は使用中に損傷、劣化を生じる。個々の設備の損傷原因調査、余寿命評価等を実施し、化学プラントの安全性、信頼性を確保することが筆者の業務である。一般に、ものづくりと計算力学又はCAEについて語られるとき、対象となるのは設計又は製造であり、メンテナンスが主題となることは必ずしも多くない。実際の化学プラントの現場においても、今の日本国内でCAEが日常的、直接的にメンテナンス分野に利用されることは少ない。しかしながら、筆者はプラントメンテナンス業務にCAEを積極的に活用することで、世の中の役に立つ成果を挙げることができると考えている。ここでは、化学プラント圧力設備のメンテナンスに関する現状を踏まえ、CAE並びに計算力学部門に期待するところを述べたい。

2．化学プラント圧力設備のメンテナンスの現状

日本の化学業界では、高度成長期に建設されたプラント設備の供用期間が40年に達しようとしている。多くの設備が問題なく運転されている一方で、損傷や劣化が顕在化している設備も存在する。加えて、アジアを中心に大型プラントの建設が進み、新規設備の稼働が開始されている。プラントユーザーはこれらの多種多様な経歴、特徴を持つ設備について、それぞれの運転状況、想定される損傷や劣化の種類、要求性能に合致したメンテナンスを実施していかなければならない。

本稿では、対象とする損傷の種類を圧力設備に生じる代表的な損傷の一つである減肉とする。これまで、国内の化学プラント圧力設備のメンテナンスの考え方は「機器は製造時の性能が維持されなければならない」とされてきた。圧力設備のシェルの厚さは設計規格によって定められた必要最小厚さ以上とすることが法令によって定められている。必要最小厚さを部分的にでも下回る減肉が発見されると、製造時の耐圧性能が維持されていないと判断される。したがって、減肉が発見された場合には、減肉部の補修又は取り換えを実施しなければならない。以上の従来の考え方には二つの問題点がある。最初の問題点は、製造時の性能は使用直後から低下し、どのような機器であってもいずれは寿命を迎えるという事実との矛盾である。この矛盾を解消するためには、設計、製造規格とは別に、性能の使用中低下を前提としたメンテナンス規格が必要となる。次の問題点は、部分的な減肉に対して補修を行うことが必ずしも設備の安全につながらないことである。減肉損傷に対して溶接による補修を行う場合、溶接欠陥や熱変形、残留応力を与えるリスクがある。溶接補修を起点として二次的な損傷を引き起こした例は少なくない。

現在、石油精製、石油化学業界では、これらの問題点の解決を目指してメンテナンス規格の作成、検討を行っている。その中で、筆者は、メンテナンス規格におけるCAEの利用に期待している。

3．CAEへの期待と課題

メンテナンス規格は、

- ●損傷、劣化を特定しその範囲を評価する検査規格
- ●検査結果をもとに損傷、劣化が健全性に影響を与えるかを判断する評価規格
- ●評価結果から継続供用が困難とされた設備の補修・取り換え規格

の三つに分類される。その内、評価規格は評価対象である圧力設備について運転条件（Service）に合致（Fit）しているかを判断する規格であることから、Fitness-For-Service (FFS)規格と呼ばれる。FFS規格では、圧力設備が要求される性能を定量的に評価する方法を与える。その評価のことをFFS評価と呼ぶ。本稿では、米国石油協会と米国機械学会の共同規格であるAPI 579-1/ASME FFS-1を既存のFFS規格の一つとして参考にする。API 579-1/ASME FFS-1で示されている非クリープ領域での圧力設備の要求性能を次に示す。

- ●塑性崩壊の防止
- ●局部破壊の防止
- ●座屈の防止
- ●繰り返し荷重による破壊（疲労、ラチェッティング）の防止

これらの要求性能を評価するために有限要素法（FEM）による応力解析の利用が期待できる。API 579-1/ASME FFS-1では、応力解析に基づく評価手法はレベル3評価手法として定義されており、解析手法（弾性解析、極限解析、弾塑性解析）ごとに評価基準を与えている。ここで用いられる応力解析手法は、計算力学という観点から考えると、学術的に最新のシミュレーション手法を用いているわけではない。むしろ、既存の解析手法を圧力設備のFFS評価に適用するために、高度に体系化された手法群と言える。一般に圧力設備のシェルは発生応力が弾性範囲内に収まるよう設計段階で考慮されていることから、減肉を生じた場合でも減肉部が弾性範囲内に収まるケースが多い。したがって、FFS評価にFEMを利用する場合、弾性解析でも十分に対応できる。この事実は、FEM利用の技術的ハードルを下げ、日常的に利用して成果を得ることを期待させる。

しかしながら、現状では日本国内のプラントメンテナンス分野においてFEMに代表されるCAEの利用は進んでいない。

導入に向けては、次の課題が挙げられる。

- ●圧力設備の要求性能の認識統一：日本国内において、圧力設備が要求される性能の認識統一が未だされていない。例えば、塑性崩壊とはどのような状態で、シミュレーションではどのように定義されるかの認識統一がされていない。限界状態が明確になっていないことから、FEM解析結果の評価について、しばしば議論の食い違いが生じている。
- ●解析結果の品質保証：FEMを用いたFFS評価結果の妥当性を判断する方法が望まれている。圧力設備は、対応する法令にしたがって製造、保安がされており社会への説明責任を有する。高度な解析手法を利用するほど、その妥当性の評価が課題となる。
- ●材料特性データの充実：FEMを利用するにあたって使用する材料特性データ、具体的には各温度域における応力－ひずみ曲線の充実が望まれる。弾塑性解析を行う場合に重要になる。

4．API 579-1/ASME FFS-1におけるCAE利用

次に、メンテナンスにおけるCAE利用について先行しているASME規格の中で、その思想の特徴をよく表していると筆者が考えるものを挙げたい。

弾塑性解析を行う場合、応力－ひずみ曲線の充実が望まれることを先に述べた。この課題の本質は、解析に用いる応力－ひずみ曲線が得られないことではなく、応力－ひずみ曲線の選択によって解析結果がばらついてしまうことにあると考えられる。規格として、解析者によって結果が大きく変わることは望ましくない。ASME規格ではこの課題に対して、解析に用いる応力－ひずみ曲線を規格に示すことで対応している。ここでは参考までにASME規格で示されているRamberg - Osgood Modelを紹介する。Ramberg - Osgood Modelでは，真応力σ_tと真ひずみε_{ts}の関係式を次のように表す。

$$\varepsilon_{ts} = \frac{\sigma_t}{E_y} + \left(\frac{\sigma_t}{H_{RO}}\right)^{\frac{1}{n_{RO}}} \tag{1}$$

ここで、E_yは評価対象の運転温度における弾性率である。ASME規格では、定数n_{RO}とH_{RO}を、引張強さσ_{uts}、降伏応力σ_{ys}を用いて次の式で与えている。

$$n_{RO} = \frac{1 + 1.3495\left(\frac{\sigma_{ys}}{\sigma_{uts}}\right) - 5.3117\left(\frac{\sigma_{ys}}{\sigma_{uts}}\right)^2 + 2.9643\left(\frac{\sigma_{ys}}{\sigma_{uts}}\right)^3}{1.1249 + 11.0097\left(\frac{\sigma_{ys}}{\sigma_{uts}}\right) - 11.7464\left(\frac{\sigma_{ys}}{\sigma_{uts}}\right)^2} \tag{2}$$

$$H_{RO} = \frac{\sigma_{uts}\exp[n_{RO}]}{{n_{RO}}^{n_{RO}}} \tag{3}$$

筆者は、式(2)で示したn_{RO}の与え方にASMEの大胆さを感じる。応力－ひずみ曲線は鋼種、試験温度、ヒートによって千差万別であることはいうまでもない。厳密に規定しようとすれば膨大なデータの整理が必要で、仮に整理できたとしても実際に解析に利用する際の利便性が低下する。ASMEでは応力－ひずみ曲線の厳密性に目をつむり、解析者の利便性向上と弾塑性解析結果のばらつきを小さくすることを重要視したものと考えられる。式(2)は降伏比をパラメータとしたデータフィッティングの結果、得られたものであることは明らかである。なお、このRamberg – Osgood ModelはAPI 579-1/ASME FFS-1のAnnex Fに記載されている。Annex Fにはこの他にも、引張強さ、降伏応力、クリープ特性、破壊靭性、き裂進展特性等、FFS評価に用いる各種材料特性が纏められている。材料と温度の情報から引張強さと降伏応力を求めることができるので、設計情報（材料、運転温度）が分かれば、自動的に応力－ひずみ曲線が得られるようになっている。式(2)の妥当性はさておき、CAEを利用した評価体系作りの観点からは見習うべきところは多い。

5．計算力学部門への期待と望むところ

ここまで、国内におけるプラント圧力設備のメンテナンス分野でCAEの利用が少ない現状と、利用を促進するための課題、並びにASME規格の状況を述べてきた。以上を踏まえ、計算力学部門への期待と望むところを述べたい。

圧力設備のメンテナンス分野で望まれているCAE技術は、講演会で発表されるような最新の高度なCAE技術ではなく、既存のCAEを利用した評価体系である。この評価体系には、圧力設備の要求性能と明確な評価基準、解析結果の品質保証、材料特性データの充実が含まれる。評価体系が完成し、社会に認められればCAE利用は増え、圧力設備の安全性、信頼性確保への貢献が期待される。ここで述べたことは学術的に新たな知見を得られるようなテーマばかりではないが、CAE利用の普及を目的として、メンテナンス分野に関する議論の輪が計算力学部門にも広がることを望みたい。

CAEを利用した評価体系を考えたとき、計算力学技術者の資格制度に大いに期待している。現在の認定制度が、人材育成、技術者の自己研鑽だけでなく、CAEを用いたFFS評価の実務に計算力学技術者が携わることで品質が保証されるシステム構築に発展することを期待する。

6．おわりに

プラント圧力設備のメンテナンス分野では、計算力学を使いたくても実務で十分に使えない状況にある中で、本稿ではその現状を思うままに書かせていただいた。至らぬ文章で執筆をご依頼いただいた趣旨に沿わなかったかもしれないと危惧している。この点についてはご容赦いただきたい。学会ないしは計算力学部門に望むところは、Mechanical Engineersの末席に座る一人として、自身が解決していかなければならない課題でもあろう。先に述べたように石油精製、石油化学業界では、石油連盟、石油化学工業協会においてプラントユーザー自身がFFS基準委員会を設立し、大学、プラントエンジニアリング会社の協力を得ながらFFS基準の作成を目指して活動している。本稿で解説した内容もFFS基準委員会における調査の成果の一部である。調査、検討を進めるにつれて、議論の輪を広げ、課題を共有できるところは共有して解決を目指していく必要性を強く感じている。本稿がその一助になれば幸いである。

部門からのお知らせ

第23回計算力学講演会開催報告

大橋　鉄也
北見工業大学 工学部 機械工学科

第 23 回目にあたる 2010 年度計算力学講演会は 2010 年 9 月 23 日（木）から 25 日（土）の日程で、北海道北見市にある北見工業大学を会場として開催されました（写真 1）。例年よりも開催時期が早くまた、多くの方々にとって遠隔の地での開催となりましたが、約 380 名の方々に参加登録をいただき、講演、フォーラム、部門表彰式、部門懇親会などが開かれ、例年と変わりのない稔りある講演会となったと考えております。

講演テーマとしてはメッシュフリー、マルチスケール、最適化、き裂などが多く取り上げられた印象を持ちました。また特別講演にはスペイン CIMNE （International Center for Numerical Methods in Engineering）の Director、 Prof. Eugenio Onate に Advances in the Particle Finite Element Method for Solving Multidisciplinary Problems in Engineering の題目でご講演いただきました（写真 2、3）。従来の空間離散化ではアプローチが難しいと思われる波濤や炎の伝播などのシミュレーションなど非常に興味深い例が紹介され、多数の参加者が熱心に聴講しました。フォーラムは「JCST（Journal of computational science and technology）国際フォーラム」、「企業における CAE の適用」、「低炭素社会向けシミュレーション技術」の 3 題について開催され、いづれも長時間の充実した議論がなされました。また、今回の講演会では初めての試みとして、オーガナイズドセッション乗り合いのポスターセッションが企画され、口頭講演のセッションに勝るとも劣らない大変活発な議論が行われました（写真 4、5）。若手を中心としたポスター発表者には大きな刺激になると同時に、口頭による講演の場合とは異なった側面からの議論も喚起され、収穫の多い企画となりました。

特別講演の後に行われた部門表彰式では、部門功績賞、部門業績賞の授賞式が行われました（写真 6）。懇親会は北見市内のホテルを会場とし、辰岡部門長の挨拶のあと特別講演を行っていただいた Prof. Onate、部門賞受賞者らからの挨拶のほかに、次年度部門講演会の実行委員長である、岡山大学の多田教授からぜひ多くの参加をいただきたいとのご挨拶で幕を閉じました（写真 7、8）。

北見市を含むオホーツク地域は食べ物、植生、気象条件、野生動物、文化的成り立ちなど多くの点で特徴の多い土地ですが、参加いただいた方々にはその一端でもお楽しみいただけたのではないでしょうか。写真 9 は最終日の午後 Onate 先生と松井先生（横浜国大）を北見市近郊の小さな湖にご案内した際のものです。皆さま、機会があればまたぜひおいで下さい。

写真 1　9月23日朝 参加受付風景

写真 2　辰岡部門長の司会によるProf. Onate の特別講演

写真 3　特別講演に対する質疑応答

写真4　ポスターセッション風景

写真７　懇親会

写真５　ポスターセッション風景

写真８　次回講演会実行委員長の多田先生（岡山大）のご挨拶

写真６　部門表彰式

写真９　北見近郊へのshort excursion

第23回計算力学講演会優秀講演表彰

辰岡　正樹
(株)アルゴグラフィックス

2010年9月23日（木）～25日（土）に北見工業大学で開催された第23回計算力学講演会における講演等について，座長および参加者に評価をお願いした結果に基づき表彰選考委員会において選考を行い，優秀講演表彰3名，優秀技術講演表彰3名，日本機械学会若手優秀講演フェロー賞２名を表彰することとなりました．

表彰状を受賞者にお送りするとともに，本誌上に公開してお祝い申し上げます．

●優秀講演表彰

大島伸行（北海道大学）
「高分子形燃料電池の触媒層内の水輸送モデル」

坪田健一（千葉大学）
「単純せん断流中の赤血球運動の三次元粒子法シミュレーション」

越山顕一朗（大阪大学）
「細胞の高速な変形に伴う膜破断：分子動力学シミュレーション」

●優秀技術講演表彰

吉田広顕（豊田中央研究所）
「移流-拡散方程式に対する多緩和時間モデルを用いた格子ボルツマン法」

淀　薫（インサイト）
「ADVENTURE2における大規模並列解析結果の可視化技術」

早坂　靖（日立製作所）
「逆問題解析を用いたガスタービン静止体の実働境界条件の同定」

●日本機械学会若手優秀講演フェロー賞

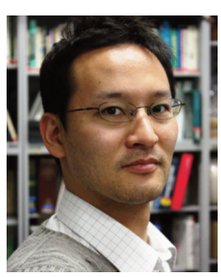
木下惠介（金沢大学）
「粒界構造と転位ピン止め効果に関する原子レベル解析」

乙守正樹（京都大学）
「最小寸法制約を考慮したトポロジー最適化」

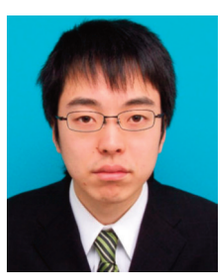
●優秀講演表彰

大島伸行君

坪田健一君


越山顕一朗君

●日本機械学会若手優秀講演フェロー賞


木下惠介君

乙守正樹君

●優秀技術講演表彰

吉田広顕君

淀 薫君

早坂 靖君

2011 年度年次大会の部門企画について

天谷　賢治
東京工業大学 大学院 情報理工学研究科（情報環境学専攻）

2011 年9 月11日（日）を市民開放行事にあて、9 月15日（木）まで、東京工業大学（152-8551東京都目黒区大岡山2-12-1）において、2011 年度年次大会が開催される予定です。2011年度の大会では『機械工学が牽引するイノベーション』をキャッチフレーズとし，『「安心・安全」「エコロジー」「クオリティオブライフ」の調和ある価値の創造』のテーマのもとで、大会企画が進められています。計算力学部門のオーガナイズドセッションにつきましては、トータルで8 件となりました。詳細につきましては、大会のホームページhttp://www.jsme.or.jp/2011am/をご参照ください。特別行事企画といたしましても、大会のキーワードにそった、基調講演、先端技術フォーラム、ワークショップを計画しております。これらについては、後述の一覧、および、順次更新されつつある大会のホームページをご覧下さい。

［先端技術フォーラム］
テーマ：フルードインフォマティクスの基礎
企画者：白山　晋（東京大学）
企画部門：流体工学部門、計算力学部門

テーマ：フルードインフォマティクスの応用と展開
企画者：古川裕之（名城大学）
企画部門：流体工学部門、計算力学部門

テーマ：クオリティオブライフを目指して
企画者：萩原一郎（東京工業大学）
企画部門：計算力学部門、機械力学・計測制御部門

［ワークショップ］
テーマ：流体コードの高速演算と大規模モデルの取扱
企画者：渡邉　聡（九州大学）
企画部門：流体工学部門、計算力学部門

＜申込・問合せ先＞
天谷賢治（東京工業大学　大学院情報理工学研究科情報環境学専攻）TEL 03-5734-2856、kamaya@mei.titech.ac.jp

第24回（2011年度）計算力学講演会のご案内

多田　直哉
岡山大学 大学院自然科学研究科 産業創成工学専攻

24回目となる2011年度の計算力学講演会を2011年10月8日（土）から10日（月）の三日間、岡山大学津島キャンパス（岡山市北区）で開催します。秋の行楽に最適な三連休ではありますが、今年は皆様方に岡山の秋を楽しんで頂けたらと思っております。

さて、開催に向けて昨年末にオーガナイズド・セッションを募集しましたが、皆様方のご協力により以下のように多数のOSが企画されることになりました。

■オーガナイズド・セッション一覧（○が代表者）
1. 電子デバイス・電子材料と計算力学
　池田　徹（京大）、○小金丸正明（福岡工技セ）
2. 接着・接合・界面・薄膜の理論と実験および信頼性評価
　○池田　徹（京大）、古口日出男（長岡技大）
3. 計算力学に貢献する実験的アプローチ
　○清水一郎（岡山大）、鈴木新一（豊橋技科大）、横山隆（岡山理科大）、小野勇一（鳥取大）
4. 大規模並列・連成解析と関連話題
　塩谷隆二（東洋大）、○荻野正雄（九大）
5. メッシュフリー／粒子法とその関連技術
　酒井　譲（横国大）、越塚誠一（東大）、○萩原世也（佐賀大）
6. 境界要素法の高度化と最新応用
　○松本敏郎（名大）、西村直志（京大）、天谷賢治（東工大）
7. 材料の組織・強度に関するマルチスケールアナリシス
　○奥村　大（名大）、中曽根祐司（東理大）、志澤一之（慶大）、大橋鉄也（北見工大）
　注）希望者を募ってOS「電子・原子・マルチシミュレーションに基づく材料特性評価」との合同ポスターセッショ

ンを実施する予定．希望しない場合は通常のオーラル発表．

8．電子・原子・マルチシミュレーションに基づく材料特性評価
○屋代如月（神戸大）、下川智嗣（金沢大）、香山正憲（産総研）、渋谷陽二（阪大）
注）希望者を募ってOS「材料の組織・強度に関するマルチスケールアナリシス」との合同ポスターセッションを実施する予定。希望しない場合は通常のオーラル発表。

9．フェーズフィールド法とその多様な展開
○高木知弘（京工繊大）、小山敏幸（名工大）、上原拓也（山形大）、高田尚樹（産総研）

10．逆問題解析手法の開発と最新応用
○井上裕嗣（東工大）、久保司郎（阪大）、松本敏郎（名大）、天谷賢治（東工大）

11．機能性材料の応力解析と機能発現に関する数値シミュレーション
上辻靖智（大工大）、海津浩一（兵庫県立大）、○坂田誠一郎（島根大）

12．破壊力学とき裂の解析・き裂進展シミュレーション
○岡田　裕（東京理科大）、菊池正紀（東理大）、長嶋利夫（上智大）、河合浩志（東大）

13．フォトニック・フォノニック構造の設計とシミュレーション
○松本敏郎（名大）、西村直志（京大）、鶴田健二（岡山大）

14．シリコンとシミュレーション
○辛　平（コバレントマテリアル）、末岡浩治（岡山県立大）

15．固体物理／流体物理のマルチフィジックス／マルチスケール解析
○須賀一彦（阪府大）、鶴田健二（岡山大）、尾形修司（名工大）、後藤俊幸（名工大）

16．エネルギー機器システムの設計・保守へのCFD適用
○稲田文夫（電中研）、寺坂晴夫（会津大）、遠藤誉英（東京電力）

17．混相流の数値流体力学
○柳瀬眞一郎（岡山大）

18．流体の数値計算手法と数値シミュレーション
登坂宣好（東京電機大）、○近藤典夫（日大）

19．衝撃・崩壊問題
○磯部大吾郎（筑波大）、小笠原永久（防衛大）

20．次世代CAD/CAM/CAE/CG/CSCW/CAT/C-Control
○萩原一郎（東工大）、秋葉 博（アライドエンジニアリング）、田辺　誠（神奈川工科大）、福島直人（東工大）、西浦光一（インテグラル・テクノロジー）

21．癒し工学とその周辺技術
○北岡哲子（東工大）、萩原一郎（東工大）

これらのオーガナイズド・セッションに加えて「一般セッション」も設定します．いずれのテーマにも該当しないようなご研究に関しましては、そちらでの発表をお考え下さい。

フォーラムに関しても、最近話題となっている低炭素社会、製品設計・開発で必須のツールとなっているCAEに加えて、国際フォーラム、地域産業に関して以下の5つのテーマが企画されています。

■フォーラム一覧（企画者）

1．低炭素社会向けシミュレーション技術
金山　寛（九大）、田上大助（九大）

2．企業におけるCAEの適用
辰岡正樹（アルゴグラフィックス）

3．オープンソースCAE
辰岡正樹（アルゴグラフィックス）

4．JCST（Journal of Computational Science and Technology）国際フォーラム
岡田　裕（東京理科大）、高野直樹（慶應大）

5．地域産業における計算力学の活用事例
西田典秀（岡工技セ）、永山則之（岡工技セ）

計算力学分野では、原子レベルから連続体レベルまでの様々なスケールでシミュレーションが行われていますが、この度のフォーラムも岡山ローカルから世界グローバルまで地理的な意味でマルチスケールとなっています。

以上のオーガナイズド・セッションとフォーラムに加え、「特別講演」や「懇親会」も予定しています。詳細は末尾に記載しました本講演会のウェブサイトで随時お知らせしますのでどうぞご期待下さい。

■特別講演（予定）

「スーパーコンピュータとバーチャルリアリティで探る地磁気の起源」
陰山　聡　氏（神戸大）

「題目未定」
Gui-Rong Liu氏（National University of Singapore）

最後に、講演に関するスケジュールは、以下のようになっております。

講演申込締切　2011年 5月13日（金）
講演採択通知　2011年 6月中旬
講演原稿締切　2011年 7月15日（金）

このニュースレターが皆様のお手元に届く頃には、すでに講演申込みが始まっていることと思います。お申し込みをお願いいたします。

多数の方々と「晴れの国岡山」でお会いできることを楽しみにしております。

委員長：多田直哉
岡山大学　大学院自然科学研究科
産業創成工学専攻　機械生産開発学講座

〒700-8530　岡山市北区津島中3-1-1
Tel: 086-251-8032、Fax: 086-251-8266
E-mail: tada@mech.okayama-u.ac.jp

幹事：清水一郎
岡山大学　大学院自然科学研究科
産業創成工学専攻　機械生産開発学講座
〒700-8530　岡山市北区津島中3-1-1
Tel: 086-251-8031、Fax: 086-251-8266
E-mail: shimizu@mech.okayama-u.ac.jp

問い合わせ先：熊谷理香
日本機械学会　総合企画グループ
計算力学講演会担当
〒160-0016　東京都新宿区信濃町35
信濃町煉瓦館5階
Tel: 03-5360-3505、Fax: 03-5360-3509
E-mail: kumagai@jsme.or.jp

参　考：

1）日本機械学会ホームページ
http://www.jsme.or.jp/
2）本講演会ホームページ
http://www.jsme.or.jp/conference/cmdconf11/
3）岡山大学ホームページ
http://www.okayama-u.ac.jp/
4）おかやま観光コンベンション協会ホームページ
http://www.okayama-kanko.net/

25周年記念計算力学部門講演会および記念国際会議のお知らせ

平野　徹
ダイキン情報システム株式会社

第25回計算力学講演会の実行委員長を拝命しました、平野徹(ダイキン情報システム)です。

2012年は、計算力学部門設立25周年の記念の年となります。

そこで、2012年の計算力学講演会は、計算力学講演会（国内会議）と連携して、記念国際会議を開催します。

開催場所は、2012年秋に稼働予定の「京コンピュータ」の設置施設（計算科学研究機構：AICS）の周辺地域、神戸ポートアイランド南地区となります。2012年10月14日から16日に国内会議を、10月17日から19日に国際会議を開催します。

従来の計算力学講演会は、ひとつの大学のキャンパス内で開催していましたが、第25回計算力学講演会および国際会議は、京コンピュータに隣接した複数の建屋（複数の大学と研究施設）に跨って開催することとなります。国際会議の実行委員長は、姫野龍太郎氏（理研情報基盤センター）です。実行委員会には、神戸を中心に複数の大学の先生方、また企業の方にも参画いただき、産官学が連携して、記念の会議を盛り上げてゆくことを計画しています。国内会議と国際会議は、ある程度独立はしていますが、お互いに連携を取りながら、かつ京コンピュータに近い場所での開催という地の利を活かした内容にするように準備を進めています。

詳細につきましては、確定次第、適宜ご案内させていただきます。1年半後となりますが、ぜひ皆様に積極的にご参加いただきますようお願い申し上げます。

開催日時：2012年10月14日-19日
開催場所：神戸ポートアイランド南地区

委員会・研究会からのお知らせ

2010年度計算力学技術者認定事業報告

長嶋利夫
上智大学理工学部

2003 年度にスタートした計算力学技術者（CAE 技術者)認定事業[1]も、その後着実に発展している。2007 年度からは、固体力学分野の有限要素法解析技術者（1 級)、(2 級)、(初級)、熱流体力学分野の解析技術者（1 級)、(2 級)、(初級）の 2 分野 6 クラスの認定事業が行われており、さらに 2009 年度からは、最上位資格である計算力学上級アナリストの認定も開始し、2 分野 8 クラスで実施されるようになっている。

2010 年度は、上級アナリスト認定試験が 2010 年 9 月 19 日に関東会場（機械振興会館）で行われた。また、2010 年 12 月 11 日に、固体力学分野 1 級、2 級については関東地区 A 会場（慶應義塾大学理工学部矢上キャンパス)、東海地区 A 会場（名古屋大学工学研究科キャンパス)、関西地区 A 会場（大阪工業大学大宮キャンパス)、北陸地区 A 会場（金沢大学角間キャンパス)、九州地区 A 会場（九州大学伊都キャンパス）の 5 会場で行われ、また、熱流体力学分野 1 級、2 級については関東地区 B 会場（慶應義塾大学理工学部矢上キャンパス)、東海地区 B 会場（名古屋工業大学御器所キャンパス)、関西地区 B 会場（大阪工業大学大宮キャンパス)、九州地区 B 会場（九州大学伊都キャンパス)の 4 会場において行われた。本認定試験は、本会イノベーションセンターが主催し、計算力学部門をはじめとする本会関連 7 部門・4 支部の協力、55 の国内計算力学関連学協会の協賛ならびに日本機械工業連合会、日本産業機械工業会、日本電機工業会の後援により実施された。

本年度の固体力学（上級）(1 級)、(2 級）試験の、申込者数、受験者数、合格者数は、それぞれ、17/183/721 名（合計 921 名)、13/134/566 名（合計 713 名)、11/75/164 名（合計 250 名）となった。また、熱流体力学（上級）(1 級)、(2 級）試験の、申込者数、受験者数、合格者数は、それぞれ、2/132/203 名（合計 337 名)、2/111/162 名（合計 275 名)、2/55/138 名（合計 195 名）となった。2003-2010 年の合計では、固体力学（1 級）の合格者は 570 名、固体力学（2 級）は 1311 名、熱流体力学（1 級）は 177 名、熱流体力学（2 級）は 649 名となり、その延べ人数は 2,707 名となる。また、2006 年度からスタートした公認 CAE 講習会の受講修了に基づき認定する初級については、固体力学分野の有限要素法解析技術者（初級）が 90 名（累計 294 名)、熱流体力学分野の解析技術者（初級）が 29 名（累計 141 名）認定された。8 クラスの累計では延べ 3,174 名の方が本会認定の計算力学技術者として様々な分野で活躍していることになる。計算力学部門の部門登録者数が約 6,000 名(第 1 位～第 5 位合計、2011 年 2 月末現在）であることを考えると、その数の大きさが実感できるであろう。合格された方々が認定技術者として職場でより一層活躍されることが、本資格の評価を高めることにつながっていくことを大いに期待している。また、今回惜しくも合格されなかった方々についても、本年 9 月に上級試験、12 月に 1 級、2 級試験を予定しているので、勉強を継続し是非とも再挑戦していただきたい。試験結果の概要と上級、1 、2 級合格者氏名は、本認定事業のホームページ[2]上に公開されている。

さて、2003 年にスタートした計算力学技術者（ＣＡＥ技術者）資格認定事業は 2010 年で開始 8 年目を迎えた。その間に本資格認定を受けた「認定計算力学技術者」は、2 級・ 1 級・上級アナリストのレベルにおいて延べ 2,500 名を超えた。この認定計算力学技術者のネットワーク作りおよび技術力向上のためのフォローアップを目的とし、2010 年 7 月 27 日に本会会議室にて「認定計算力学技術者交流会」を開催した。このような交流会を今後も継続的に開催する予定である。

現在、本会計算力学技術者資格認定専門委員会においては、NAFEMS の認定解析士（RA）制度との相互認証の可能性や、新たに振動解析分野の認定事業を実施することも検討中であることを報告しておく。

なお、本認定事業の実施にあたっては、本部門に所属する非常に多くの方々の献身的なご協力を得た。ここに感謝申し上げるとともに、引き続き一層のご支援をお願いしたい。

1）http://www.jsme.or.jp/cee/cmnintei.htm
2）http://www.jsme.or.jp/cee/cmnintei.htm

JCST（Journal of Computational Science and Technology）の紹介と投稿のお願い

岡田　裕
東京理科大学 理工学部 機械工学科

１．はじめに

JCST（Journal of Computational Science and Technology）は、計算力学部門が発行する日本機械学会の英文ジャーナルの一つとして2007年に発刊された。このニューズレターが発行されるころには、創刊から丸4年になる。準備委員会の理研・姫野委員長、初代編修委員長の東工大・萩原一郎先生から、九州大学・金山寛先生、そして私（東京理科大学・岡田）へと委員長を引き継ぎ、また、全ての方々のお名前を挙げることはできないが、多くの編修委員の方々に支えられ編修作業を行ってきました。さらに、”論文投稿”という形でさらに多くの皆様に支えられてきました。

細かいことを述べる前に、まずはJCSTの売りは何か？について紹介させて頂きたい。おそらく、下記の2点に尽きると思う。

■審査の速さ【現在まで最短29日、平均119日、最長439日】

最長記録は、校閲プロセス中のあちこちで連絡ミス等が重なった結果でした。創刊直後に発生したもので、それ以降このような事例は発生していない。掲載可のものは大体3ヵ月で可決され、その後フォーマット修正の後WEBにアップされている。JCSTは、投稿から可決までの平均日数はJSMEジャーナルの中で最短である。また、掲載可となった論文は逐次WEBにアップされていく。

■購読がフリー【「科学技術情報発信・流通総合システム」（J-STAGE）上で無料公開】

これはあくまで読み手にとってのメリットのようにも感じられるが、情報発信をする側としても多くの読者を獲得するために大変有利なことである。試しに、筆者の論文をGoogleから"okada s-fem”で検索してみると、１ページ目の8番目でhttp://ci.nii.ac.jp/の関連ページをヒットし、さらにもうワンクリックで論文のページを開き読むことができた。ちなみに、筆者の他の論文へのリンクもヒットするが、無料公開されていないものは職場の外（学外）のインターネット環境で作業しているような場合諦めなければならない場合が多い。また、職場からでも大学図書館が購読していなものは駄目である。

本稿では、JCSTの飛躍を願い、以下に現在までの経緯や現状を紹介し、そして少々の私見を述べさせて頂くこととする。そして、お読みになった後でJ-STAGE上のJCSTのサイト："http://www.jstage.jst.go.jp/browse/jcst" をご覧頂きたい。何かしら面白いと思う情報があるかもしれません。さらに、日本機械学会の英文ジャーナルのページ "http://www.i-product.biz/jsme/" で執筆要項等もご覧いただき、ご投稿について検討して頂きたい。

２．現在までの経緯

はじめに、他の機会でも紹介しているが、旧英文誌JSME International Journal からJSME英文ジャーナルに移行するに至った背景や目的について紹介する。なお、この中身の大部分は2007年度の計算力学講演会で開催したJCSTフォーラムで発表したものの抜粋（名古屋大学・大野信忠先生に御寄稿頂いた部分）である。

★

日本機械学会の旧英文論文誌JSME International Journalは、会員の要望の多様化・グローバル化に伴い、投稿論文数の伸び悩みやインパクトファクターの低迷といった問題を抱えていた。また、財務的な問題も大きな懸案事項であった。このような状況を克服して、技術・学術情報のグローバル化や機械工学分野の学術活動の多様化に適切に対応するために、日本機械学会編修理事会では2002年に「論文集発行形態検討委員会」を設置して多方面から検討を重ね、次のような検討結果を得た。

１）論文集発行形態改革の基本方針（論文集の基本的役割）
英文論文集：機械工学に関する学術・技術情報を国際的に発信する媒体
和文論文集：専門技術者集団である日本機械学会の会員相互間における情報交流・活用の媒体

２）部門英文ジャーナルの発行：部門独自の出版活動を活発化するため、電子ジャーナルにより発行する（冊子体は発行しない）。

３）編修体制：部門が主体となった編修体制とする。

４）製作コストの低減：投稿・審査システムを電子媒体上に構築する。

５）経費の負担：上記コストの低減のうえ、電子ジャーナル製作（論文掲載）に関するコストは著者が負うことを基本とする。

６）電子ジャーナルの公開場所：電子ジャーナルの普及のためには閲覧は当面無料公開とする。

上述の検討結果に基づいて、各部門で英文ジャーナルの発行が検討された。その結果、まず流体工学部門と熱工学部門がそれぞれ2005年11月に英文論文発行の試行を開始し、2006年6月にはJournal of Fluid Science and TechnologyとJournal of Thermal Science and Technologyの創刊号が発刊された。現在では、11の部門英文ジャーナルが登録され、

科学技術振興機構（JST）が構築した「科学技術情報発信・流通総合システム」（J-STAGE）で無料公開されている。

★

上記の文章はおよそ2年前のものであり、状況は若干変化しているものの大差無い。その後、熱工学部門のJTST（Journal of Thermal Science and Technology）と機素潤滑設計部門、設計工学-システム部門、生産加工・工作機械部門、生産システム部門、情報・知能・精密機器部門合同のJAMDSM（Journal of Advanced Mechanical Design, Systems, and Manufacturing）にインパクトファクター（IF）が付くこととなった。

他のジャーナルもトムソン・ロイター社によって調査が行われているが、漏れ聞くところによればあまりいいニュースは無いようである。現在のところ、JCSTは被引用数が少ないのでインパクトファクターの対象外。2〜3年後に再審査と聞いている。

3．JCSTの現状（投稿数等）

表1に2010年度第2回英文ジャーナル連絡会議（11月15日開催）で配布されたた2010年10月31日現在でのJCSTの投稿や審査の情況を示す。また、2008年8月30日の時点でのデータも表2に示す。これらだけからは、約2年でおよそ90件の投稿があったことがわかる。この数が多いのか少ないのか議論が分かれるところであろうが、他のJSMEジャーナルに比較すると少々少ない。表3に各ジャーナルの投稿数のサマリーを示す。これからは、他のJSMEジャーナルと比較して計算力学部門のJCSTが投稿数だけを見ると苦戦中といえる。

過去には、再録論文の推薦や勧誘を積極に行っていたこともあり、JCSTへの投稿論文の大半が再録論文（日本機械学会論文集に掲載された和文論文を内容を変えずに英文にするもの）の時期があったが、最近ではオリジナル（英文ジャーナルに直接投稿するもの）が大半である。また、今年度に入ってからの投稿数は大体、毎月2編程度となっている。

4．JCSTの現状（校閲のスピードアップ）

これが、JCSTの最大の「売り」である。冒頭にも書いたが、現在までの受付から可決までの平均日数は119日（約4カ月）、最短は29日である（表１）。2年半前のデータと比較して、最短の29日はある種のチャンピオンデータであろうが、受付から可決までの平均日数も短くすることができた。一方、最長の439日要したものは、校閲プロセスのどこかで滞りが発生した事例である。このようなことが頻繁に発生すると迅速な審査と掲載がその特長であるべき電子ジャーナルの魅力が薄れてしまう。そこで、何らかの滞りが見られた場合、事務局から編修委員長と副編修委員長に連絡する体制を敷いている。

5．JCSTが魅力あるジャーナルに育つために

以下、JCSTを魅力あるジャーナルにしていくために計算力学部門関係者の方々にお願したいことについて、筆者の私

表１　JCST投稿論文・審査の最新状況
（2010年10月31日までの情況）

投稿論文の内訳／審査状況						
総数	審査状況・国内と国外の内訳					
150*	可決		否決		審査中	
	国内	海外	国内	海外	国内	海外
	122	1	10	7	4	1
	審査状況・Original Paper（原著）と Translated Paper（再録）の内訳（国内論文に限る）					
	可決		否決		審査中	
	原著	再録	原著	再録	原著	再録
	53	69	10	0	4	0
受付〜可決（掲載）に要した日数						
平均		最短		最長		
119 日		29 日		439 日		

*内 5 件取下げ

表2　およそ2年前のJCST投稿論文・審査の状況
（2008年8月20日までの情況）

投稿論文の内訳／審査状況						
総数	審査状況・国内と国外の内訳					
60*	可決		否決		審査中	
	国内	海外	国内	海外	国内	海外
	44	0	3	2	9	1
	審査状況・Original Paper（原著）と Translated Paper（再録）の内訳（国内論文に限る）					
	可決		否決		審査中	
	原著	再録	原著	再録	原著	再録
	25	19	3	0	9	0
受付〜可決（掲載）に要した日数						
平均		最短		最長		
132 日		42 日		439 日		

*内１件取下げ

表3　JSMEジャーナルの投稿状況サマリー
(2010年10月31日までの情況)

部門	名称	投稿状況（内訳）*				
		総数	原著	再録	国内	海外
流体工学	JFST	415	298	110	329	86
熱工学	JTST	238	215	17	171	67
バイオエンジニアリング	JBSE	261	246	0**	212	49
環境工学	JEE	267	95	169	258	9
材料力学・機械材料・材料加工	JMMP	696	574	110	555	141
機械力学計測制御	JSDD	492	341	143	381	111
機素潤滑設計など 5 部門***	JAMDSM	500	455	41	366	134
動力エネルギーシステム	JPES	299	299	0**	224	75
計算力学	JCST	150	81	69	140	10
宇宙工学	SPACEE	29	26	3	22	7
交通・物流	JMTL	129	117	8	103	26

*レビューも投稿総数に含むので，原著と再録の合計が投稿総数と一致しない場合がある

**JBSE と JPES は再録論文を受け付けない

***機素潤滑設計など 5 部門：機素潤滑設計部門，設計工学-システム部門，生産加工・工作機械部門，生産システム部門，情報・知能・精密機器部門

見を紹介させて頂く。

はじめに、計算力学部門の性格とJCSTの情況について考える。言うまでもなく、計算力学とは様々な工学問題を解くための手法であり、固体力学、流体力学、熱力学や生体力学といった、それぞれ体系を持った工学分野で使用される。計算力学関連の研究者や技術者の多くは、それらの工学分野に軸足を持ち、計算力学手法の応用によって問題を解く、または計算力学手法自体の研究開発を行っている。多くの研究者や技術者は、同じJSMEジャーナルであってもJCSTの他に選択肢があるので、計算力学の応用分野を重く見るか、計算力学手法を重く見るかで投稿するジャーナルを選択することになると思う。

一方、同じ英文で書くなら、JSMEジャーナルでなくて、海外で既に実績を上げているジャーナルに投稿したいと考える場合も多いであろう。筆者はその考え自体健全だと思うし、ある程度はそうすべきだと思う。さらに、国内では応用数理学会が英文ジャーナル（Japan Journal of Industrial and Applied Mathematics）を発行するなど、投稿者の取り合いのような状況になってしまっている。

このような状況の中で、どうすれば、JCSTが我々の情報発信と情報取得の媒体として魅力的なジャーナルに育っていくかであるが、筆者個人の意見としては（ここは意見が分かれるところ）決して量（投稿や掲載論文数）を追い求めることは必要でないと考えている。問題は、如何に他のジャーナルの論文から引用されるかであると思う。そこで、活発な研究活動をされている研究者や技術者の方々には、投稿される英文論文の数編に一編程度でいいのでJCSTに投稿されることを考えて頂きたい。さらに、ご自身で海外の雑誌等に投稿されるときにはJCSTに投稿された論文を是非リファレンスに加えて頂きたい。その結果として、海外の読者がJCSTをヒットしてくれるようになれば、引用されるチャンスが増え、結果としてインパクトファクターの取得に繋がると思う。もう一点は（これも意見が分かれるところ）、機械学会論文集に掲載された和文論文のうち、いい方は悪いが、そのまま埋もれてしまいそうになっているものは、再録論文として投稿して頂きたい。そうすれば、将来、発展した内容で他のジャーナルであっても英文論文を書いた時に引用することができる。

現状はなかなか厳しいものがあるが、まずはご自身の論文でJCSTの論文を引用して頂き、子引き、孫引きの結果として世界中の研究者や技術者にJCSTを見てもらいたいと考えている。

次に、やはりある程度海外からも注目される存在になるためには、海外からの投稿がある程度の割合を占めることが必要と思われる。そのためには、まずは関係の国際会議とリンクした特集号の企画をお願いしたい。ただし、しっかりしたPeer-Review を行って論文の質を確保して頂くことが前提になる。

一方、目標とすべき論文投稿数や掲載数だが、なかなか難しい問題である。沢山あればいいかというと、限度があると思う。JCSTの場合、当面は国内研究者の投稿が主体であろう。論文投稿をする関連分野の研究者や技術者の数が限られているので、投稿・掲載論文数にもおのずと限度がある。他のJSMEジャーナルのように年間100件以上とすることは難しいように思う。あまり根拠の無い数字だが、現在の倍程度（年間70件）程度を目指すべきであろうと考えている。

6. おわりに

本稿では、JCST（Journal of Computational Science and Technology）創刊に至った経緯、現在までの情況と、魅力のあるジャーナルにするための筆者の私見を紹介させて頂いた。JCSTを我々の魅力ある情報発信媒体とするために繰返しになるが、以下の2点をお願いしたい。

■海外を含め、多くのジャーナルがある中で、数編に一編はJCSTにご投稿願いたい。そして、他のジャーナルに論文を投稿される際は、ご自身のものを含めJCSTの論文を引用して頂きたい。

■関連の国際会議のオーガナイズドセッション企画などをされる際には特集号企画をご検討頂きたい。しっかりとしたPeer-Review を行うことが前提になるが、特集号企画者にはGuest Editorとして、校閲プロセスをハンドリングして頂くことで論文受付から掲載までの期間短縮を図って頂きたい。

つきましては、"http://www.jstage.jst.go.jp/browse/jcst"をしつこいようですがまずはご覧ください。また、特集号企画等について不明な点は岡田（hokada@rs.noda.tus.ac.jp）にお問い合わせ下さい。

★2011年度JCST編修委員会委員（◎：編修委員長、○副編修委員長、☆アドバイザリーボード）

石井英二（日立製作所）、岩本薫（東京農工大）、◎岡田　裕（東京理科大）、奥田洋司（東京大）、北栄輔（名古屋大）、白山　晋（東京大）、○高野 直樹（慶應義塾大）、多田幸生（神戸大）、西口磯春（神奈川工科大）、萩原世也（佐賀大）、松島紀佐（富山大）、水野　衛（秋田県立大）、☆金山　寛（九州大）

2011年度日本機械学会計算力学部門賞（功績賞・業績賞）募集要項

本部門では、計算力学分野の進展を図るため、平成２年度より２種類の部門賞を設置しております。本年度も下記の要領で受賞候補者を募集しますので、数多くのご応募をお願いします。

１．対象となる業績

A.　功績賞

学術、技術、教育、学会活動、出版、国際交流などで計算力学の発展と進歩に幅広くまた顕著な貢献のあった個人。

B.　業績賞

計算力学の分野で顕著な研究または技術開発の業績を挙げた個人。

２．受賞者数

部門賞通則第５項に従う。本部門は5名以内(但し、2011年8月末日の部門登録者数が5000名以上、6000名未満の場合)。

３．表彰の方法、時期

審査の上、2011年10月8日～10日に予定されている第24回計算力学講演会において、楯の贈与をもって行う。

４．募集の方法

公募によるものとし、他薦とする。

５．提出書類

推薦には、A4サイズ用紙２枚以内に(1)推薦者氏名、(2)推薦者所属・連絡先、 (3)被推薦者氏名、(4)被推薦者所属・連絡先、(5)A.かB.を明記し、(6)推薦理由を記入の上、提出するものとする。ただし、功績賞にはA4サイズ用紙１枚の研究業績書 と、A4サイズ用紙１枚の略歴書を添付できる。また、業績賞にはA4サイズ用紙１枚の研究業績書を添付できる。なお、提出された書類は返却しない。指定された用紙枚数は厳守のこと。

６．提出締切日：2011年６月30日（木）

７．提出先

〒160-0016東京都新宿区信濃町35番地　信濃町煉瓦館５階
日本機械学会計算力学部門［担当職員：熊谷理香］
電話 03-5360-3505 / FAX 03-5360-3509
E-mail: kumagai@jsme.or.jp

計算力学部門ニュースレターへの広告募集のご案内

日本機械学会計算力学部門におきましては、5,300名に及ぶ登録者への大切なサービスとして毎年春（4月）と秋（10月）の年2回 ニュースレターを発行しております。

ニュースレターは全体でA4版モノクロの32～40ページ程度の刷り上がりとなります。毎号、計算力学部門に相応しい１ページあるいは1/2ページの企業広告の募集を行っておりますのでご案内申し上げます。

詳しいお問い合わせは、下記担当者宛までお願いいたします。

〒160-0016 東京都新宿区信濃町３５番地 信濃町煉瓦館５階
一般社団法人　日本機械学会
計算力学部門担当　熊谷　理香
Tel : 03-5360-3505　Fax : 03-5360-3509　E-mail : kumagai@jsme.or.jp

《各行事の問い合わせ、申込先》

日本機械学会計算力学部門担当　熊谷理香　E-mail: kumagai@jsme.or.jp
〒160-0016　東京都新宿区信濃町35番地　信濃町煉瓦館5F　TEL 03-5360-3505　FAX 03-5360-3509

計算力学部門ニュースレター　No. 46 : 2011年4月25日発行
ニュースレターのカラー版（No. 41～）につきましては、日本機械学会計算力学部門の下記URLをご覧下さい。
http://www.jsme.or.jp/cmd/Newsletter/index.html
編集責任者：広報委員会委員長　辰岡正樹
ニュースレターへのご投稿やお問い合わせは下記の広報委員会幹事までご連絡ください。
広報委員会 幹事　東川芳晃
住友化学株式会社 樹脂開発センター
〒299-0295　千葉県袖ヶ浦市北袖2番地1
TEL：0436-61-5138　FAX：0436-61-5127　E-Mail：togawa@sc.sumitomo-chem.co.jp

印刷：生々文献サービス／〒151-0053 東京都渋谷区代々木2-36-6／TEL.03-3375-8446／FAX 03-3375-8447／E-mail: seiseibunken@nifty.com