

1. はじめに

近年、計算機の進歩は著しく、今日では日常生活において計算機は意図せずとも使われている。材料の研究・開発に計算機を使おうとする試みは計算機の誕生とともに始まっている。これに対し、当時の計算機は性能不足であり、実用面では疑問視される向きもあった。しかし、現在では計算機の発達とともに先駆者の情熱と努力により計算物理、計算化学、計算力学などの学問として成長し、また安価で高性能な計算機の出現によってプロセスCAE (Computer Aided Engineering) のように現場での応用も始まっている。そして、材料物性および材料プロセスの予測が実際に応用されるようになってきている。

この背景には、ニーズとして材料開発の効率化があげられる。材料開発には探索的側面があり、試行錯誤により多大な費用と時間が費やされている。材料研究者および開発者が従来から有する経験、知識、発想に加え、計算機による予測を活用することにより材料開発を効率的に進めることができるようになり、さらには材料の設計が可能になるものと期待されている。

ここでは、高分子材料、有機材料、複合材料(以後、総称して高分子材料とする)を対象として計算機利用の現状、動向、将来について展望する。

2. 高分子計算技術

「高分子計算技術」という言葉は我々の造語で、まだ一般的ではないので、最初にその定義と何を

する技術かを説明しておきたい。

一般に高分子合成や高分子加工などの言葉は、それぞれに高分子を合成する、高分子を加工する、という意味で用いられている。これらと同じように考えれば、高分子計算技術は高分子を計算する技術という解釈になる。ところが、「高分子を計算する」の表現に多くの方は違和感を持たれる。これは、高分子の物性を計算する、高分子の構造を計算する、などと表現すれば支障はなく、一般に高分子が計算する直接の対象にならないと理解されているためと思われる。しかし、我々は高分子という言葉をもっと広く考え、高分子に係わるすべての事象という意味で捕らえたい。世の中でも高分子を計算するという表現が実際に用いられ始めている¹⁾。

また、高分子計算技術とは、高分子分野と計算分野の境界領域にあり、異質な両分野にまたがる新しい技術分野を表そうとするものである。そのような意味では、先の違和感をなくすために計算高分子と呼ぶのがよいかもかもしれない。

いずれにしても、計算機利用による高分子材料の研究と開発、ならびにそのための数値解析技術の開発と確立を目的としている。そして、成形加工などのプロセスをも考慮して、高分子材料の材料開発から製品開発の現場において実際に活用できるものにしたいたいことから技術としている。

例えば、Fig. 1のように、要求される物性を発現するマテリアル(分子、構造、形状)はどのようなものか、またそのようなマテリアルを得るためのプロセス(合成、混合、成形)はどうしたら良いのか、を予測できることを意図している。こ

キーワード

高分子材料, 有機材料, 複合材料, 成形加工, 計算機, 分子設計, 材料設計, CAE, シミュレーション

のような観点から、高分子計算技術はマテリアル解析とプロセス解析との融合を図り、計算機利用により高分子材料の研究、開発、実用の効率化を目指している。

3. 高分子材料開発への計算機利用

3.1 計算機利用の意義

高分子材料開発における計算機利用の目的は先に述べたように材料開発の効率化である。材料開発の過程を考えると基本的には以下ようになる。はじめに用途や目的に応じて要求仕様が提示される。これに対して、要求仕様を満たす材料の調査、設計、合成、成形、そして評価が行われる。評価では物性のみならず成形性およびコストを含め総合的に判断され、候補材料が決められる。さらに最近では地球環境保護の観点から使用後のリサイクル性および易分解性なども評価の対象になっている。最後に、合成条件や加工条件などの適性化が行われ候補材料が実用となる。各過程において問題が生じれば前の過程あるいは最初に戻ってやり直すことになる。

このように材料開発の道のりは長く、初期過程で後過程の評価ができれば、無駄な実験・試作などを防ぐことができ、材料開発の効率を向上させることが十分に期待される。この事前評価手段として計算機を利用するわけである。これを概念的に表したのがFig. 2である。既知か未知かを問わず物質の中から製品に使用できるものを材料と考

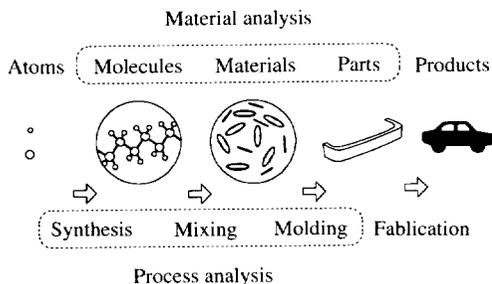


Fig. 1 Material analysis and process analysis during various steps from atoms to products for polymer and organic materials.

えると、物質を示す円と製品を示す円の重なっている部分が材料となる。従来技術においては研究・開発者の知識、経験、発想に基づく実験的手段のみによって材料が見い出されてきた。理論も用いられてはいるが、単純な系でしか解が得られず、実際のような複雑な系への応用にはいまだ至っていない。ここで、我々は新たに計算という手段を手に入れようとしているのである。ただし、計算は実験にとって代わるものでなく、実験と並んで位置付けされる。計算機によって理論を生かし、複雑な系、すなわち実際の材料開発で理論をより有効に活用しようとするものである。このように考えると材料は3つの部分に分けられる。右上がり斜線部は計算が困難なために従来通りの実験でしか見い出せない材料、逆に左上がり斜線部は計算から予測されるが現在の実験技術では実現の困難な未来の材料である。最後に中央の交差斜線部は、計算により実験結果を解明したり、計算予測に基づく実験によって見い出される材料である。すなわち、現在において計算と実験との協調により効率的な材料開発が可能になるところである。高分子計算技術はこの領域を広げることに意義がある。

3.2 計算機利用の現状

高分子材料を計算機により解析しようとするとき、その対象は分子レベルからマクロな連続体レベルまで非常に幅広くなる。現時点においてこれらを総括して扱える一般的な理論はなく、各レベ

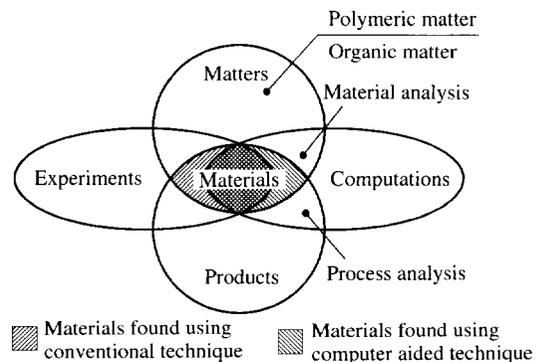


Fig. 2 Computations and experiments for developments of polymer and organic materials.

ルごとの理論を適用することになる。そのためおのずと種々の解析方法が用いられる。高分子材料開発に利用される解析方法として、分子軌道法、分子動力学法、分子力場法、モンテカルロ法、粒子シミュレーション法²⁾、有限要素法、境界要素法、差分法などがあげられる。各方法について説明することは控えるが、ここで述べておきたいことは、例えば、量子力学に基づく分子軌道法と連続体力学に基づく境界要素法を組み合わせることで溶媒効果を考慮した生体反応シミュレーションを行う³⁾、反対に流体力学、材料力学、熱力学などこれまで連続体力学であった分野で分子動力学法が用いられようになっている⁴⁾など、最近では異なる理論および分野の計算方法がお互いに複合して応用されていることである。計算技術からみれば、このようにマクロの中のミクロな予測、逆にミクロからマクロな予測が材料開発支援のための鍵となり、解析手法の複合化がさらに進展するものと思われる。

3.3 計算機利用の動向

高分子材料の開発に計算機を利用しようとする具体的な考えは1982～85年に工業技術院において調査研究され、高分子材料設計システムとして概念がまとめられた。理論、データベース、知識ベースから構成される統合的なシステムとして構想されている。このころは、高分子加工の分野で射出成形CAEの第1世代として1978年より始められている樹脂流動解析が実用的に認められてきた時期である。

低分子を対象にした分子設計システムは1983年に市販されているが、高分子用としては1988年にモレキュラーシミュレーション社（当時はバイオデザイン社）から市販された高分子設計シミュレーションシステムPolyGrafが初めてのものとなる。分子力場法および分子動力学法の計算機能、対話型の三次元分子モデリング機能とグラフィック機能、弾性率などの物性解析機能を有している。一方、三菱総合研究所は1989年にマルチクライアントプロジェクトを企画して高分子材料設計支援システムEXPODを開発し、1990年より市販している。これは知識ベースとデータベースを活用した高分子の物性予測システムである。また同様に

して1994年に向けてポリマーアロイ設計支援システムPALSARを開発している。

高分子に限らないが材料開発に計算機を利用しようとする機運が1980年後半に高まり、このころから多くの研究会などが発足している。わかっている範囲だけでも、1986年に高分子知識システム研究会（高分子学会）、1988年に計算材料科学研究会（科学技術庁）、コンピュータによる材料開発・物質設計を考える会（企業研究会）、1990年に日本量子化学プログラム交換機構（JCPE）、新材料開発とコンピュータケミストリ研究委員会（日本工業技術振興協会）、有機化合物構造推定システムCHEMICS研究会（豊橋技術科学大学）、1991年にコンピュータケミストリーによる材料開発革新調査研究会（新化学発展協会）、1992年に新複合材料開発のための数値援用設計技術と材料実験シミュレータ技術委員会（日本工業技術振興協会）、高分子計算機科学研究会（高分子学会）が発足している。

また、1990年よりコンピュータの材料科学・工学への応用国際会議CAMSEが開催されており、1991年にはComputational Polymer Science（PRA Press, USA）、1992年にComputational Materials Science（Elsevier, Netherlands）、Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering（IOP Publishing, UK）などの学術雑誌が相次いで発刊されている。

3.4 計算機利用の形態

高分子材料開発に計算機を利用する場合、実験時におけるデータ収集・処理などを除けば以下のような形態があげられる。

- (a) データベース：計算機に高分子材料に関する各種のデータ（文献、高分子名、構造、属性、物性など）が登録されており、情報収集および化学構造検索に有用である。パソコンおよび電話回線のネットワークを使って利用できる。
- (b) 知識ベース：基本的な原理と理論式、経験的な規則と実験式、さらに研究者の感動的な知識さえも計算機に登録される（これを知識ベースという）。知識ベースを組織化することにより、既知の範囲内ではあるが予測機

能が得られる。一般にエキスパートシステムとも呼ばれている。

- (c) シミュレーション：計算機を用いて各種の現象を数値解析し、その解析能力と予測能力を材料開発に利用する。計算機上で仮想の実験を行うことができ、計算機実験とも呼ばれる。未知の領域での予測も可能になる。
- (d) グラフィックス：計算機で扱うデータは膨大であり、その入出力を数値や文字で行うことは事実上困難である。そのため、計算機の描画機能、すなわちコンピュータグラフィックスを利用する。分子模型の描画は分子グラフィックス、シミュレーションのために解析モデルを作成したり計算結果を描画する場合にはプリポストシステムともいわれる。

実際にはそれぞれを単独に利用するのではなく、全体を組織化したシステムとして活用するのが望ましい。将来、日常的な高分子材料開発支援のためには総合的なシステム構築が不可欠であろう。しかし、そのようなシステムのかなめとなるのはやはりシミュレーションであり、本特集ではシミュレーションを主体に紹介している。

4．計算機利用による高分子材料開発

すべての高分子材料は原子そして分子から構成され、これらの組み合わせ、すなわち合成・重合によって高分子が生成される（Fig. 1参照）。高分子は単独で使用されるものもあるが、多くはガラス繊維など異種の粒子を混合する（複合材）、高分子どうしを混合する（ポリマーブレンド、ポリマーアロイ）などして用いられている。総称して、これらが材料と呼ばれている段階のものである。そして成形・加工によって形状が付与されて部品となり、初めて実用できる段階になる。最後にほかの部品と組み立てられて製品となる。このような行程において高分子材料開発への計算機利用は、Fig. 3に示すようなつり橋に見立てられる。計算機をケーブルとし、その下で分子、材料、部品などの状態（島）においてそれぞれの物性を予測するマテリアル解析をタワーとし、合成、混合、成形による状態変化（島の移動）を予測するプロセス解析をデッキとするつり橋である。島を移動することが材料の開発であり、それぞれの道と柱は分子設計、材料設計、CAEと呼ばれる応用技術

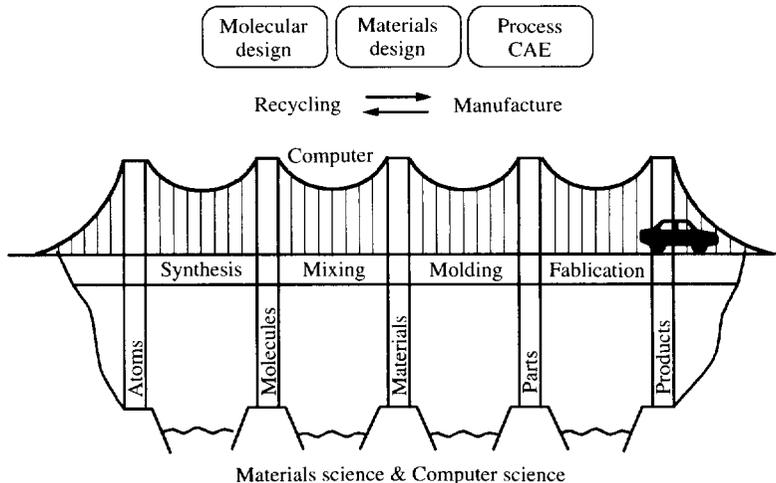


Fig. 3 Suspension bridge of computational polymer engineering constructed of materials analysis as a tower, process analysis as a deck, and computer as a cable.

に対応する。また、海中の島の状態さらに海底のようすを調べることが材料科学であり計算科学であり、これらがつり橋建設の基盤となる。

計算機技術、マテリアル解析技術、プロセス解析技術が一体となって、原子・分子から製品に至る一本の橋を築き、高分子材料開発を支援しようとする構想である。このようにして築かれた橋はおのずと両側通行となり、リサイクルおよび環境保全にも利用できる橋となろう。

5. 展望と課題

高分子研究者に対して1992年に行われた未来予測アンケートにおいて高分子構造物性の理論予測システム開発の実現時期として50%以上の研究者が2005年前後、80%以上では2010年代後半と予測している⁵⁾。比較的早い時期が予測（見方を変えれば期待）されており、前章で述べたようなつり橋を現実に具体化し活用できるものが2000年代における材料開発さらには製品開発を制するであろう。

当然のことながら、このような橋は一朝一夕にできるものではない。デッキやタワーを創る（仮想のつり橋であるので創るとした）技術はまだ開発途上であり、また創れたとしても現在の計算機では性能あるいは費用の面で維持できないであろう。技術に関して、とくにミクロとマクロとの中間にあたるメソフェーズについてはその複雑性のために普遍的な理論が得られていない現状にある。これは、よく経験することであるが、試験片ではよい特性が得られたのに実用形状に試作するとその特性が発揮されないということに当てはまる。プロセスによって材料構造そして特性が変化するのである。このプロセス依存物性の予測が大きな課題の一つとなっている。しかし、人間にはない計算機の大規模高速処理能力をいかせば、単純な基礎理論の集合により複雑性を解明するアプローチが可能となり、将来への見通しはある。力づくの計算と見下して表現される向きもあるが、決してそうではない。計算機でしかできないアプローチであり、いわば「量（数と構造）が質（物性）を変える」計算である。一方、その実用性は計算機に依存していることはいうまでもない。そ

のため計算機に対して、低価格のスーパーコンピュータ、そして次世代の計算機として精力的に開発が進められている超並列計算機⁶⁾の完成に大きな期待がかけられる。

高分子計算技術を橋に例えることができるということは、その構成要素としての、分子、材料、部品のマテリアル解析技術、合成、混合、成形のプロセス解析技術の各々について個別に並行して開発でき、それぞれの段階で利用できることを意味している。現時点において各段階の実力には大きな差があり、分子軌道法や分子動力学法計算は単分子レベルではあるが有用なツールとして認められつつあり、成形CAEはすでに実用されている。反対に、合成と混合のプロセス解析、高分子の集合体や混合体の構造物性予測はまだ開発の途にいたばかりである。

計算機シミュレーションによって材料の構造・物性を正確に計算できるということのごく限られた単純な系においてのみ可能で、実際に用いられる材料では困難であろう。そこでは、計算結果は材料開発者の理解を深め、判断を促す情報の一つとして捕らえられるべきで、計算対象に関する知識と経験に合わせて計算結果の見方など計算機利用に関する知識と経験が材料開発者にも求められることになる。早い時期から材料開発者が計算機利用に馴れ親しむ環境が必要である。

材料の研究開発は原子や分子といった目には見えない世界で行われているため常に不安がつきまとい、問題を視覚化することの必要性が提言されている⁷⁾。事実、分子動力学法計算による高分子運動のコンピュータグラフィックスは従来から分かっていることを描画しただけであっても、材料開発者が高分子をより理解したり、新しい知見を得ることができ、分子グラフィックスは現在でもすぐに役立つ機能となっている。今後、シミュレーション結果をいかに視覚化していくかが、計算機利用のなかで人間と計算機とのインターフェースとしても大きな課題となるであろう。

6. おわりに

高分子計算技術のつり橋を完成させ、それを渡る者が材料研究から製品開発を制する時代は必ず

到来するであろう。その時代は2000年代のかなり近い将来である。また、本稿で述べてきたことは高分子材料に限らず、ほかの材料でも通用することであり、計算機利用は材料一般に広く進展している。

高分子材料開発における計算機利用は、理論、計算技術、計算機性能、計算費用など解決しなければならない多くの課題を抱えているが、将来に向け着実な一歩を踏み出したところである。

参 考 文 献

- 1) 山邊時雄：“高分子を計算する”，高分子，40-11(1991)，739
- 2) Yamamoto, S. and Matsuoka, T.：“A Method for Dynamic Simulation of Rigid and Flexible Fibers in a Flow Field”，J. Chem. Phys., 98-1(1993)，644
- 3) Hoshi, H., Sakurai, M., Inoue, Y. and Chūjō, R.：“Medium Effects on the Molecular Electronic Structure. I. The Formulation of a Theory for the Estimation of a Molecular Electronic Structure Surrounded by an Anisotropic Medium”，J. Chem. Phys., 87-2(1987)，1107
- 4) 小竹進：“分子動力学と連続体力学との接点”，日本機械学会誌，96-892(1993)，189
- 5) 高分子編集委員会：“高分子科学・技術の未来予測アンケート”，高分子，41-4(1992)，248
- 6) 鈴木則久：“超並列コンピュータとその応用”，日経サイエンス，23-8(1993)，45
- 7) 上垣外修己：“材料研究発展のために”，セラミックス，28-1(1993)，2

著 者 紹 介



松岡孝明 Takaaki Matsuoka

生年：1951年。

所属：高分子加工研究室。

分野：高分子・有機材料の計算機シミュレーション。高分子成形加工のCAE。

学会等：日本機械学会，高分子学会，日本レオロジー学会，The Polymer Processing society，The Society of Plastics Engineers 会員。
工学博士。