特 集 8
研究解説

UDC 681.3：65.012.122：620.1

バーチャル・ラボ（仮想材料実験室）の可能性

Possibility of A Virtual Laboratory for Materials Design

舘 泉 雄 治*・山 本 良 一**
Yuji TATEIZUMI and Ryoichi YAMAMOTO

知的材料設計の夢の一つとしてバーチャル・ラボ（仮想材料実験室）がある．これはバーチャル・リアリティ技術を応用して，計算機の内部に作り出した仮想世界において薄膜結晶成長シミュレーション，クラック進展シミュレーション，モレキュラードッキングなどのシミュレーション実験を行うことのできるシステムである．本稿では計算材料科学におけるバーチャル・リアリティ技術の応用可能性について論ずる．

1．はじめに

バーチャル・ラボ（仮想材料実験室）は材料系のコンピュータ・シミュレーションに対してバーチャル・リアリティ技術を応用し，計算機の内部に作り出した仮想世界において，さまざまなシミュレーション実験を行うことのできるシステムである．ただし，このバーチャル・ラボは従来のシミュレーション手法の上に確立されるので，現在行うことのできない新しいシミュレーション実験が行えるようになるわけではない．バーチャル・ラボはシミュレーションを効率よく行うための計算機利用技術であると考えることができ，究極のヒューマン・インターフェイスとしてバーチャル・リアリティ技術を使用したということになる．逆に，バーチャル・ラボではきわめて高い計算能力を必要とするため，現在の平均的なワークステーションの処理能力では，従来行われているシミュレーションを行うことも難しいであろうと予想される．

しかし，このバーチャル・ラボは材料系コンピュータ・シミュレーションの世界に画期的な変化をもたらす可能性がある．近い将来，超並列計算機の実用化などにより計算機性能の飛躍的な向上が期待されている．このような高い計算能力に支えられた非常に複雑で大規模なシミュレーション実験が可能となったとき，バーチャル・ラボは知的材料設計に不可欠な存在となり，知的材料設計という概念そのものも変わってくる可能性がある．

コンピュータのハードウェア性能や利用環境は日々進歩を続けている．シミュレーション手法などもこれにともなって変わって行く必要があり，また，将来の進歩を考慮した研究を行う必要もあるのではないかと考える．

本稿では，コンピュータ・シミュレーションの現状での問題点とその解決の方向，そして，その先にあるバーチャル・ラボの可能性などについて，筆者らの基礎的な試みを含めて述べることにする．

2．コンピュータ・シミュレーションの問題点

材料設計にコンピュータを積極的に応用するという考え方は，近年盛んになってきており，すでに計算材料科学という分野は，理論，実験と同様の市民権を得つつあるのではないかと思われる[1]．この背景には，低価格なワークステーションの普及と高性能なスーパー・コンピュータの出現があるものと考えられるが，われわれはコンピュータ・シミュレーションの現状にまだ満足してはいない．数々の不満はあるが，その中でも特に問題であると思われる点は以下の2点であると考える．

(1) 目的のシミュレーションに合う既成のソフトウェアがなく，自作する必要がある．

(2) 計算機の処理能力が低く，現実的な時間で計算を行おうとすると特別な工夫が必要となる．

まず問題点(1)の既成ソフトウェアがないということに関してであるが，現在，実用的なシミュレーションを行うための環境は非常に高価であり，利用できる人が限定されている．したがって，この分野のユーザ数は非常に少なく，商売としては成り立ちにくい状態にあるといえる．このような状況を考慮すればシミュレーションのための環境整備が遅れているのも無理からぬことではあるが，この分野の将来を考えれば早急に解決しなければならない問題であろう．

以前，パソコンのソフトウェアが少なかった頃には，実験結果をグラフにするのにBASICでプログラムを作

*東京工業高等専門学校　電気工学科
**東京大学生産技術研究所　第4部

りXYプロッタで書いた記憶がある．しかし，今となっては二度とそのような非効率的なことをすることはないであろう．そもそもグラフを作ることが目的であり，方法は問題ではないので，できるだけ効率のよい方法を選ぶ必要があるからである．

現在，計算材料科学におけるシミュレーションでは，FORTRANによるプログラミングが主流と思われる．これは，非常に効率の悪い方法であると思われるが，好む，好まざるに関わらず，これしかないというのが現状ではないだろうか．しかし，より効率のよいシミュレーション環境が整えば，非効率的な環境はいずれ淘汰されるのではないかと思われる．シミュレーションを行うのはプログラミングの専門家ではなく，あくまでシミュレーションの専門家であるべきであると考えるからである．

しかし，シミュレーション用のソフトウェアとして，パソコンのグラフ作成ソフトやワープロソフトのような汎用の既成品ができるとは考えにくい．では，どのような環境が望ましいのであろうか．一言でシミュレーションといってもさまざまなシミュレーションがあり，一概に理想環境を決めることはできないであろうが，一つのアイディアとして原子間力や電位，応力といった値を直接扱えるようにすることが考えられる．また，物理学や自然科学で培われてきた自然法則を知識ベースのような形で持ち，利用できるようにすることも有効であろう．

このようなシミュレーションの理想環境を考える場合に，Mathematicaという数式処理システムを参考にすることができる．MathematicaはWolfram Reserch社が開発した，パソコンやワークステーションで動作する数学分野の支援ソフトウェアであり，式の変形，因数分解，方程式の解，微分積分などを数値的，または，シンボリックに行うことができる．また，750程度の関数が組み込まれており，さらに，2次元，3次元のグラフを作成したり，そのグラフを時間軸で変化させ，アニメーションを作成することなども簡単に行えるようになっている．

この考えを応用して材料科学用の支援ソフトウェアを実現することができたなら，非常に強力な環境となるであろう．これは単に初心者用の環境ということだけではなく，現ユーザにとっても強力で非常に影響力のあるシステムとなるはずである．

次に，問題点(2)の計算機の処理能力の不足に関してであるが，現在行われているシミュレーションの大部分は計算機の処理能力の不足によって，大きな制約を受けているといえる．本来なら，物理学や自然科学などで考えられてきたモデルを計算機上に記述し，また，数々の自然法則を関数としてシミュレーションを行うべきなのであるが，このようなシミュレーションは有限時間内に終えることができない可能性が高い，なぜなら，自然界の法則は単純ではあるがそれを計算するには手間がかかるものが多く，また，原子や分子を扱う場合にはその個数が天文学的数値になるからである．

そこで，近似式を使用したり，系全体をマクロ的に捉え，経験的なポテンシャルにより計算を行うなど創意工夫を重ね，計算時間の短縮が試みられている．しかし，これらの方法の多くは計算量を減らす代償として複雑なモデル化を行っているため，「単純な法則で複雑な現象を表わす」という物理学，自然科学などで培われてきた人類の資産ともいえる数々の自然法則を利用することができず，また，シミュレーションの正当性を検証するために多大な努力を払う必要が生じている．

しかし，見方を変えれば，これらの問題は計算機の処理能力の向上により解決できる問題であるともいえる．きわめて乱暴な言い方をすれば，計算機開発に関連する各方面の研究者の多大なる努力とある程度の時間さえあれば解決される問題であろう．

近年の計算機能力の向上，特に，超並列計算機の実用化による急激な処理能力の向上を考えれば，計算機の処理能力の向上は意外に早いのかもしれない[2]．

どの程度処理能力が向上すればよいか，その数値を出すことは難しいであろうが，2倍，3倍といったレベルではなく，最低でも2桁，3桁，できればそれ以上の改善が必要であろう．もっとも，人間はどのように高性能な計算機を手に入れたとしても，さらに高性能な計算機を望み，際限が無いようにも思われるが．

3．バーチャル・ラボの必要性

前述の問題点をある程度克服した段階で，いよいよバーチャル・ラボの必要性が高まるであろうことが予想される．この段階でのシミュレーション実験は，プログラミング環境，処理能力などが全般的に向上し，現在よりも非常に効率がよくなっていると予想される．したがって，手軽にシミュレーション実験を行うことができるようになり，また，その内容もより大規模でより複雑になっていることが予想される．

このような大規模なシミュレーションから得られる計算結果もまた膨大な量になることが予想される．

たとえば，カー・パリネロ法を呼ばれる原子間力に作用する力を第一原理的に計算する電子論的MD法では，Si表面の最安定原子配列を求めるシミュレーションにおいて，現在すでに10^3オーダーの原子数を扱うことができるようになっている．このようなシミュレーションにおいても扱う原子数がさらに数桁増加することが予想され，そのようなシミュレーションにおける計算結果は，とても一度に全体を見ることはできなくなるであろうことが予想される．すなわち，ミクロ的に観察した場合と

マクロ的に系全体を観察した場合とでは，同じシミュレーション内容でもその切り口によってまったく異なる次元の情報が得られる可能性があるということである．これらすべての情報を一度に得たとしたら，その総量は莫大なものとなり，分析，把握することは困難であろう．したがって，いかにこの大量の結果を分析，把握するかということが重要な問題となることが予想される．

現在行われているシミュレーション結果の解析方法は，グラフやコンピュータ・グラフィックスを用いる方法が多いのではないかと思われるが，グラフなど批較的情報量の低いメディアからその現象を推測するためには，高い想像力と経験と多少の時間を必要とする．また，シミュレーションのための各種パラメータの入力などに関しても，現状では人間の意思を数値化して入力する必要があり，非常に効率が悪くなっている．

このような方法では，計算機と人間の間の情報伝達がボトルネックとなり，たとえ高性能な計算機があったとしても，その能力を最大限に引き出すことができない．この問題を解決するためには，計算機と人間の間の情報伝達手段，すなわち，ヒューマン・インターフェイスを改良する必要があると考えられる．最終的には人間の脳と計算機の間で直接データの転送を行う方式が望ましいのではないかと思われるが，近い将来このような方法が実現するとは考えにくい．人間は五感と呼ばれる感覚器官を通して外界の情報を得ているのであるから，ヒューマン・インターフェイスもこの五感を積極的に活用して扱える情報量を増やす必要がある．

従来の方法であるグラフやコンピュータ・グラフィックスといった表示方法もこの五感の一部である視覚を利用した方法ではあるが，他の感覚器官はまったく利用されていない．また，情報が一方的に送られてきており，人間側は受動的になっている．

よりよいヒューマン・インターフェイスとしては，人間の五感を最大限に活用することに留まらず，情報の伝達も相方向にする必要があろう．

4．バーチャル・ラボの応用例

バーチャル・ラボは，単独のシステムの固有名詞ではなく，バーチャル・リアリティを応用した材料系コンピュータ・シミュレーション・システムの総称として考えている．したがって，その応用例は色々考えられ，また，その応用によって色々な側面をもっている．

バーチャル・ラボの応用例を，分子間のシミュレーションを例に考えてみることにする．

このシミュレーションでは操作者の目の前に計算機が作り出した仮想空間が表示されている．この表示には立体表示できるディスプレイか Head Mounted Display と呼ばれるゴーグル，もしくはヘルメット型の表示装置を使用することになるであろう．この仮想空間の中には分子の立体映像が映し出されている．また，自分の手に相当するマニュピレータのようなものも映し出されている．操作者が特定の分子に着目して，この分子を動かそうと考えた場合，操作者は自分の手を使ってこの分子を摑もうと試みる．仮想空間の中では，手の動きに連動してマニュピレータが動くのが確認でき，操作者は違和感なく分子を摑むことができる．この分子を3次元空間の任意の方向へ動かそうとした場合には，操作者にはこの分子に対するなんらかの相互作用によって生じる反力を力のベクトルとして感じとることができる．さらに力を加え続け，ある限界を越えれば微視的な破壊現象が起こり，その時の現象，反力などを観察することができる．また，このようにして破壊した分子を他の分子に接近させた場合の挙動を観察することも可能であろう．

この例に近いシステムがすでにノースカロライナ大学の「GROPE Ⅲ」として試作され，モレキュラー・ドキングという応用がなされている[3]．

GROPE Ⅲは立体映像（視覚）とフォース・フィード・バック（触覚）などを使用したシステムであり，工業用ロボットのアームのようなマニュピレータを使用して，操作者に力を感じさせることができるのが特徴となっている．

モレキュラー・ドッキングとは，薬物設計におけるレセプターの鍵穴探しであり，薬と目される候補化合物がレセプター分子の構造中の鍵穴と一致するかどうかを調べるということで，従来からシミュレーションが盛んに行われている応用である．

GROPE Ⅲでのモレキュラー・ドキングは，操作者は目の前に映しだされた薬分子の立体映像を手で摑み，レセプター分子の構造中で一致すると思われる場所に押し込んでみる．うまく一致すればスムーズに入るが，もし一致しなければ操作者は反力を感じる．このような手順で行われる．

一般的なシミュレーションでは，事前に結合させる分子の場所，角度などを定め，パラメータとして与える必要があるが，GROPE Ⅲでは事前には何も検討する必要がなく，目の前に映し出された立体映像を見ながら直感的に，また，反力を感じながら試行錯誤的に実験を進めることができる．

GROPE Ⅲと同様に，バーチャル・ラボのシミュレーション実験ではあらかじめ実験計画を立てる必要がなく，その場の思い付きで，また，結果をみながら進めることができる．したがって，思考を中断することなく，イメージを膨らませながら連続した実験を行うことが可能であり，人間のニューロ＆ファジーで直感的な能力と高性能な計算機の正確で高速な計算能力を最大限に活用することができる．また，仮想空間でのこのような経験は

人間の認識能力を高めることも期待され，教育の分野にも応用できる可能性がある．

5．その他の応用

バーチャル・ラボの応用例として，現在すでに多数の案が考えられているが，その一部を以下に示す[4]．

(1)「仮想薄膜成長装置」

スパッタ装置やCVD装置における薄膜成長において，真空度や不純物，重力の影響など排除した理想環境での実験を行うことができる．また，ミクロからマクロまで自由に視点を変えることができ，時間軸も早送り，コマ送り，逆転など自由に制御することができる．

(2)「アトミック・マニュピレータ」

原子で文字を描くなど原子レベルでの加工を行う場合，実際の装置の操作性と人間の感覚のギャップを埋めることができる．まず仮想世界で作業を行い，無意味な動作を削除し最適化した動作で実際の装置をコントロールできる．

(3)「アトミック・サウンド・ディスプレイ」

温度，ポテンシャル，圧力，応力などを総合的に表現する場合には，音による表現が有効である可能性がある．特性ごとに特有のパターンの音が出るようにしておくと，一瞬にしてその特徴を聞き分けることができるであろう．

(4)「クラック進展シミュレータ」

ミクロな破壊現象のシミュレーションを行うことができる．また，原子やクラスタを摑み，これをグローブとして原子間力を検知したり，破壊を進行させたりすることも可能である．

(5)「仮想材料試験装置」

分子や材料を両手に摑み，引っ張り，曲げ，ねじりなどを加えた時の機械的特性をシミュレートすることができる．力は全体に加えることも，局所的に加えることもでき，また，内部にも入り込んで圧力を加えることもできる．

6．触覚の重要性

人間の五感のうち，視覚を利用した表示装置は現在最も実用化が進んでおり，近年のコンピュータ・グラフィックス技術の進歩もまた目覚しいものがある．これに対して聴覚と触覚に関する研究は殆ど成されていない．しかし，触覚はバーチャル・ラボの実現に非常に重要であると考える．なぜなら，視覚と聴覚は非接触で受動的な感覚であるのに対して，触覚は接触型で自らが加えた力に対する反力として感じることのできる唯一の能動的な感覚器官であるからである．

また，表1に示すように材料科学の分野に関係する力学的性質は非常に多く，これらは視覚に訴えるよりも，直接触覚に訴える方が自然であると思われるからである．

バーチャル・リアリティの3条以として，自律性，対話性，臨場感という項目がある．バーチャル・リアリティを応用したシミュレーションの特徴の一つがこの対話性であり，この意味からも触覚を活用することが非常に重要となる．

表1　材料科学に関する力学的性質

力学的性質の種類	具体例
静水圧	アモルファス、液体、紛体における局所的静水圧、　粒子の詰まり具合
結合エネルギー	マイクロクラスター及びアトムクラスターの結合エネルギー、 吸着エネルギーなど
弾性率	局所的弾性率の変化、　人工格子、ナノ結晶のスーパーモジュラス効果及び スーパーコンプライアンス効果など
力	異種物質界面の結合力、　接合強度、　結晶粒界の原子間結合、　分子間力、 不純物偏析による粒界脆化、　ドラッグデザインにおけるドッキングスタディ、 AFMシミュレーション、　MFMシミュレーション
応力、歪み	クラック先端の応力場、　薄膜の内部応力、　熱応力、　磁歪、　異相界面、 相変態
材料強度 (塑性変形、破壊)	降伏応力、　硬さ、　曲げ強度、　延性、　脆性、　転位運動、 マイクロマシーンの強度シミュレーション、　極限環境強度
摩擦	摩擦力、　潤滑、　凝着、　表面粗さ、　磨耗
振動	熱振動、　表面弾性波、　熱伝導

7. フォースフィードバック装置の試作

重要な感覚器官であると考える，触覚を応用した表示装置の開発を目指し，その第一段階として，フォースフィードバック装置を試作した[5]．このモデルは，DCモーターにより力感覚，感触を表現するための装置であり，自由度を1，すなわち1軸に限定した原始的なモデルである．

図1に本装置の構成図を示す．本装置はモータや各種センサのコントロール用にマイクロコンピュータを内蔵し，シリアルの通信回線（RS422）により接続したパソコンにより制御を行っている．パソコン側からの指示内容は，モータの正回転，逆回転，静止，およびPWM制御によるモータのパワーコントロールである．また，パソコン側からの要求により，アームの位置を検出するポテンショメータとアームに加わる力を検出するストレインゲージからの情報を報告している．力感覚，感触などの制御はすべてパソコン側で行い，現在のアームの位置と加わる力などからモータに加えるべきパワーを算出し指示している．

8. リアリティとクオリティ

バーチャル・リアリティに関する議論をする場合，リアリティとクオリティが混同されることがあるのではないかと思われる．たとえば，Head Mounted Displayを見たとき，そこに映し出されている仮想世界を支えているシミュレーション内容よりも，液晶の画素数や表示のレスポンスなどが興味の対象となることが多いのではないかと思われる．

バーチャル・ラボに対しても，たとえば，現実との区別ができないような綺麗なグラフィックスが期待される傾向にあるのではないかと思われる．確かに，汚いよりは綺麗な方がよいわけであるが，画像の良し悪しや多少のレスポンスの遅れなどよりも，より大切なことがあるのではないかと思われる．

たとえば，TVゲームで遊んでいる子供たちは画質の良し悪しはそれほど興味がなく，ゲームの内容により強い関心を示しているように思われる．最近のTVゲームはある程度画質が向上したとはいえ，まだまだ低レベルである．また，その操作も非常に原始的なインターフェイスを使用している．しかし，そこにリアリティを感じ，ゲームの中に登場するキャラクターに対しては人格すら感じているようである．

人間がリアリティを感じるためには，ある程度画質等のクオリティが要求されるが，より大切なのはインタラクティブであるということである．すなわち，操作者の意思で操作を行い，その行動に対するレスポンスがリアルタイムに反映されるということである．

前述のTVゲームの映像や音のクオリティを高めたとしても，映画のようにただ受動的に見ているだけではリアリティは感じられないであろう．

バーチャル・ラボが実現したとしても，初期のモデルでは画像の質，レスポンスの遅れなどに問題が残るのではないかと予想される．しかし，より重要なのは仮想世界で材料実験ができるということであり，画像の質やレスポンスの改善は次の段階で行えばよいのではないかと考える．

9. バーチャル・ラボでできること

前述したTVゲームには「裏技」と称するテクニッ

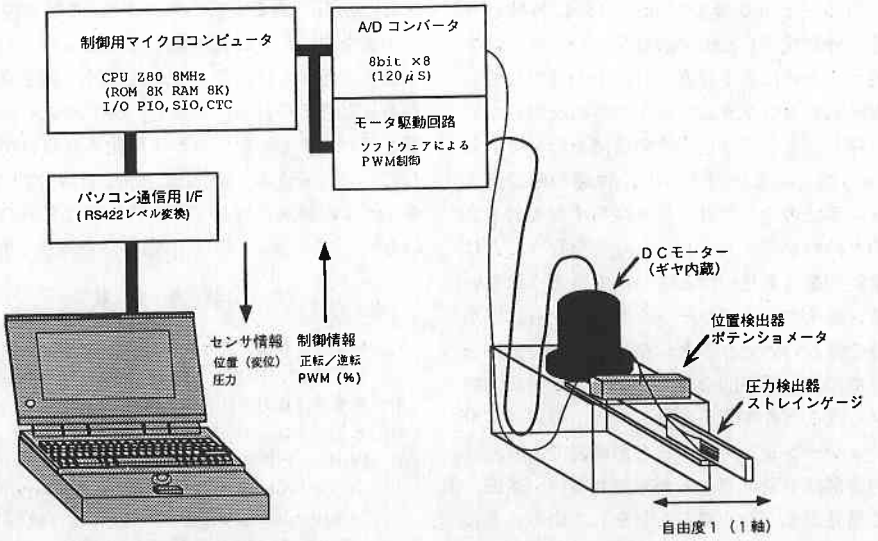

図1　フォースフィードバック装置の構成図

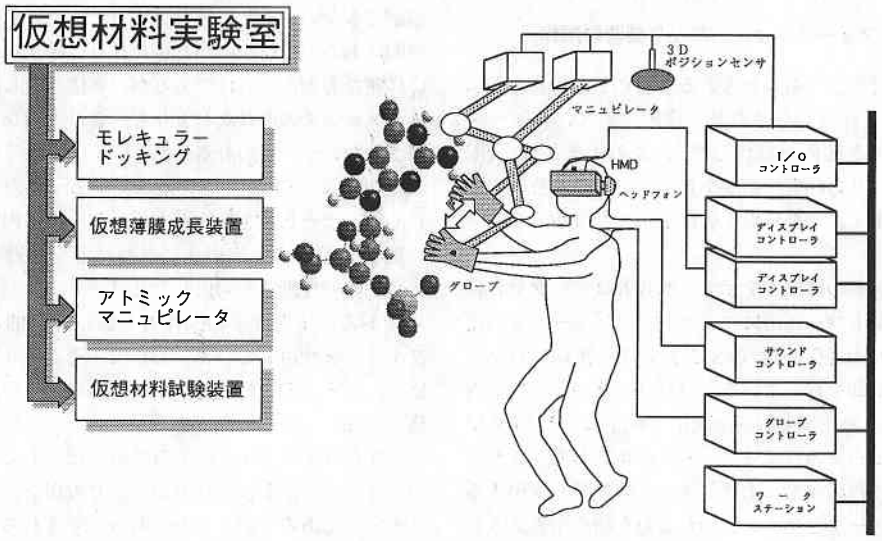

図2　バーチャル・ラボの構想
（仮想材料実験室）

クがあるそうである．これは，そのゲームを作成したプログラマでも気づかなかったような特殊な条件下で起こる現象をうまく利用したテクニックであり，通常の操作ではなかなか見つけられないため，これを見つけようと一生懸命になっている子供たちも多いようである．これらの裏技は，当初プログラムのバグから生じたものであろうと推測される．もともとプログラムのバグを見つけるのは至難の技であり，プログラムリストを眺めていてもなかなか見つけることはできない．しかし，子供たちはTVゲームという仮想世界のなかでプレーするなかで，自然に認識能力を磨き，これらの裏技を見つけることができるようになったのである．

従来のシミュレーション実験では，事前に各種パラメータなどを十分に検討した上で計算を行い，その結果は把握・分析するためにある程度の時間をかけてしていた．これはゲームのプログラムリストを眺めながらプログラムのバグ探し，もしくは正当性の確認を行っていることに相当するのではないだろうか．理論の確認，シミュレーション手法の確立や計算量を減らすためのさまざまな工夫のためのシミュレーションなどを行うことはできるが，前述の裏技を見つけることはできそうにない．

したがって，従来のシミュレーション実験からは偶然の発見は期待できないということになる．しかし，バーチャル・ラボでの試行錯誤的なシミュレーションにおいては，思い立ったことをすぐに実行したり，時には突飛な発想のシミュレーションを行うことが可能であり，材料開発における裏技を発見できるかも知れない．過去，多くの重要な発見がまったく別のことをしているときに偶然に見つかっていることを考えれば，ある程度期待してもよいのではないだろうか．

図2に筆者らが計画しているバーチャル・ラボの構想図を示す．バーチャル・ラボはまだ机上の構想でしかない．したがってバーチャル・ラボがどのような可能性を秘めているかは未知数の部分が多い．しかし，バーチャル・ラボが実現すれば予想もしなかったような応用が数多く見つかるのではないかと期待している．バーチャル・ラボで何ができるのかという質問はコンピュータで何ができるのかという質問と似た面があると考える．何ができるのかではなく，何がしたいのかが重要であろう．

かつて日本語ワープロは実現不可能であると言われた．理由は漢字は種類が多く，有効な入力手段がないと考えられたからである．しかし，かな-漢字変換というアイディアを得て一気に実用化するに至った．バーチャル・ラボも実現するには数多くの技術的問題を克服する必要があると考えられる．しかし，必ずやこれらの問題を克服してバーチャル・ラボが実用化される日がくると確信している．そして，少なくとも，われわれはバーチャル・ラボの将来に対して夢を持ち続けていたいと考えている[6]．

（1993年7月15日受理）

参考文献

1) 特集「計算機による材料設計」：日本金属学会会報，Vol. 31, No. 7, 1992.
2) 特集「計算力学における並列コンピューティング」：コンピュートロール，第40号，コロナ社，1992
3) Frederic P Brooks Jr, Ming Ough-You申g, James J. Batter: Project GROPE-Haptic Displays for Sintific Visualization: Computer Graphics, Vol. 24, No. 4, pp 177-185, ACM SIGGARPH '90 1990

4) 舘泉，山本他：バーチャル・リアリティの計算材料科学への応用：日本金属学会会報，Vol. 32，No. 1，1993.
5) 舘泉：フォースフィードバック装置の試作：東京工業高等専門学校　科学技術研究センター年報，第2号，1993
6) 舘泉，山本：超並列計算機は天地創造の夢をみるか(バーチャル・リアリティによる材料科学へのアプローチ)：バウンダリー，7月号，コロナ社，1993