

日本画像 研究奨励

計算物質科学研究センター 山崎 淳

このたび、「3Dプリンタを用いた物理量の空間配置に関する研究」により日本画像学会コニカミノルタ科学技術振興財団研究奨励賞(第20回)を受賞しました。この賞は、大学・公共機関に所属し、新画像領域で顕著な貢献のあった者に対して贈られるもので、日本画像学会による選考を経てコニカミノルタ科学技術振興財団より授与されます。授与式は3月14日に都内にて行われました。

受賞内容について報告したいと思います。

開発初期は、株式会社クロスアビリティ^{注1)}と共同で行ったものです。共同開発に至った経緯については参考資料[1]に書いてあります。また、月刊化学[2]にも分子構造と物理量を3Dプリント^{注2)}する解説記事を載せましたので、ボールスチック模型から電子雲までのながれが理解できると思います。

クロスアビリティ社との開発では、量子化学計算ソフト Gaussian で使われる cube ファイル形式から空間に広がる物理量を STL ファイル (Stereolithography または Standard Triangulated Language の略) に変換・生成する技術でした。量子化学計算ターミナルソフトソフト Winmostar と計算物質科学アプリケーションをプレイインストールした Linux distribution の MateriApps LIVE! を経由して Gamess や OpenMX など で物理量を計算し cube ファイルを取得しました。MateriApps LIVE! は、ハンズオン講習会など不定期で開催されており、実験系を含めて非専門家の方々にも利用しやすくなっております。

また、Linux と OpenFOAM を利用して国土地理院から地形データを入手して流体力学の計算を行いました。STL ファイルに変換するコードを独自に開発して、計算結果はスカラー・ベクトル量として 3D プリントできるようにしました。これにより、物質科学以外にも CAE (計算支援工学) などに幅広く利用できるようにしました。

実用的な問題として、透明樹脂を 3D プリントすると積層方向はクリアに見える反面、垂直の二軸方向からは曇って見える現象が知られております。丸紅情報システムズ社から、傾けて 3D プリントすると立方体などの 6 面に対して垂直に見た場合には内部がクリアに見えるという話をお伺いしました。原因は不明ということで、複数の分光法と

光散乱を含む光転送行列を使った光学シミュレーションで原因を調べました。結果として、界面での屈折率のムラ(4DFF 研究会 2020)と界面の粗さ(4DFF 研究会 2024)が原因であることがわかりました。なお、配信講義計算科学技術特論 A/B を受講していたおかげで、光学シミュレーションコードの開発は、並列化したコードを書くことができました。

ところで、十年ほど前までに、STL ファイル形式の限界が 3D プリンタ業界では問題視され、Voxel を使ったファイル形式の利用が始まりました。HP 社では数年前に社内独自規格による Voxel を利用できる 3D プリンタの販売を開始しました。私も Voxel の必要性を感じており、Voxel ファイル形式 FAV (FABricatable Voxel) が提案されたのをうけて開発者にお話をお伺いしに行ったところ、FAV 開発会議に参加させていただき、さらに JIS 規格原案作成員会[3]のメンバーに加えていただけることになりました。マルチスケール対応と Voxel のデータ圧縮方法について提案させていただき、採用していただきました。また、Voxel を使った物理量表現についても実施例という形で掲載させていただきました。ここまでの話と将来の展望については 4DFP 研究会に発表させていただき、解説記事が掲載されました[4]。

HP 社以外にストラタシス社製の 3D プリンタでも、Voxel の 3D プリントができるようになりました。STL ファイルを使わないで直接 3D プリントできるように物理量 - Voxel 変換コードを開発中です。計算した物理量を FAV に変換するまでのプロセスは既に報告済み(4DFF 研究会 2024)、開発中の本コードで Voxel からストラタシス社製の 3D プリンタを使い 3D プリントできることも本年初めに確認しました。

一連の技術については特許取得済み[5]です。主に、3Dプリンタに読み込めるファイル形式全般で、物理量を表現するファイルを生成するプロセスなどが特許の適用範囲となります。本技術は、一部を除いて株式会社テトラフェイスよりプラグイン^{注 3)}としてすでに製品化されております[6]。なお、去年、MIT のグループがこれらの技術を引用なしに論文を掲載しました[7]。

本技術は、文部科学省「HPCI戦略プログラム分野2「次物質・エネルギー創成」、「ポスト「京」重点課題(7)「次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成」、「元素戦略プロジェクト<拠点形成型>基盤的計算機シミュレーション手法の検討」の研究活動の一環として得られた成果です。また、開発開始当初から今までの間にお世話になった方々(個人名略)として、物性研究所(主に理論系・MateriApps 開発チーム)、丸紅情報システムズ株式会社、株式会社テトラフェイス、ファブ地球社会創造拠点(科学技術振興機構、センターオブイノベーション(COI)プログラム)及びファブ地球社会コンソーシアム、JIS B9442 原案作成委員会、日本画像学会、コニカミノルタ科学技術振興財団、株式会社クロスアビリティの皆様に感謝します。

- [1] 3D プリンター活用事例 東京大学 物性研究所 計算物質科学研究センター様 株式会社クロスアビリティ様 | 丸紅情報システムズ.
- [2] 山崎淳、古宇田光、長代新治、千田範夫、古賀良太、月刊化学(2017.3),39-42.
- [3] 3D モデル用 FAV フォーマットの仕様 "Specification of FAV format for 3D models",JIS B9442(2019).
- [4] 山崎淳、古宇田光、日本画像学会誌 Imaging Today, 2019 年 58 巻 4 号 p. 397-405.
- [5] 特許番号 7074344(JP), 011214008(US), 112019031 86V (SG).
- [6] 株式会社テトラフェイス | Physiqs.
- [7] *J. Chem. Educ.* 2024, 101, 3522–3530.

注 2) 本記事では 3D プリンタと表記をしておりますが、AM(Additive Manufacturing)の表記を好む専門家も多くいます。