

SIP-MI プロジェクト,
これまでとこれから

出村 雅彦* 小関 敏彦**

1. はじめに

社会課題の解決に果たす材料の役割はますます大きくなっている。例えば、エネルギー・環境分野では、輸送機器や発電機器のエネルギー効率の向上、CO₂排出量の低減のために、軽く、強く、熱に耐える革新的な構造材料が求められ、要求される性能は年々、高度になっている。厳しい環境で長時間使用される構造材料は、信頼性を担保するための実験検証が必要で、開発は長期に渡る。マイクロ組織という非平衡状態を制御することの難しさも、研究開発が長期化する背景にあるだろう。社会からの要請にいち早く応えるためには、研究開発手法の刷新が求められている。特に、計算機の能力の飛躍的な向上、材料研究における計算科学の充実と広がり、さらに、最近のデータ科学の急速な発展を念頭に置くと、これらサイバー空間の技術を取り込むことで、研究開発を加速していくことが期待される。

このような認識のもと、材料開発をサイバーとフィジカルの融合で行う統合型材料開発システムが内閣府総合科学技術・イノベーション会議によって提案され、Society 5.0を支えるサブシステムとして取り上げられた(統合型材料開発システムについては文献⁽¹⁾⁽²⁾を参考のこと)。これに先立つ形で、内閣府 SIP(戦略的イノベーション創造プログラム)「革新的構造材料」においてマテリアルズインテグレーションというコンセプトが打ち立てられ、基盤となるシステムの開発が組織的に行われてきた。さらに、第2期のSIPでは、逆問題マテリアルズインテグレーションを中心テーマとした「統合型材料開発システムによるマテリアル革命」が課題設定され、材料開発手法の刷新を目指して事業が開始されている。

本稿では、マテリアルズインテグレーションの考え方をまとめ、引き続いて、第1期SIPの成果と第2期SIPにおけ

る研究開発のねらいについて概観する。さらに、国際的な状況を俯瞰した上で、開発するシステムを産学官の連携のためのプラットフォームとする考え方を提案する。

2. マテリアルズインテグレーション(MI)の考え方

材料の研究開発は、プロセス、組織(構造)、特性、性能という4要素の連関をつけることで行われてきた。マテリアルズインテグレーションは、実験、計算、理論、データ科学を融合し、計算機上で材料の4要素の連関をつけ、プロセスから性能までを一気通貫に予測することで、材料開発を加速するという考え方である。インテグレーションという言葉には、全てのメカニズムを理論的に解き明かすことができない中であっても、使えるものは全て使って工学的に役立つ手法を構築するという思いが込められていると、筆者は理解している。例えば、溶接部を含む耐熱部材のクリープ性能(寿命や損傷箇所)を予測したいと考えてみよう。溶接というプロセスには解明できていない点はまだあるものの、母材が経験する熱履歴は現象論的モデルに基づく熱伝導解析によって計算することができる。そして、現象論モデルに含まれるパラメータは、温度計測や溶接部マクロ組織の観察によって得られた実験データに対して合わせ込むことでより妥当な値を推定することができ、例えば、熱影響部のマクロ組織形状の予測に必要なモデルの精度を確保することは十分に可能である。同様に、クリープ現象についても、これまでに提案されているクリープ変形や損傷に関するモデルとデータベースから同定したモデルパラメーターを使用することで、数値シミュレーションによって部材全体のクリープ損傷を計算できる。これらを図1に示すように組み合わせると、全体として、溶接条件から、熱影響部のマクロ組織形状の推定を経て、部材のクリープ損傷を予測できることになる。溶接やクリープ損傷を模擬する数値シミュレーションに、データベ

* 国立研究開発法人 物質・材料研究機構 統合型材料開発・情報基盤部門(MaDIS), 副部門長(〒305-0044 つくば市並木1-1)

** 東京大学教授(現 京都先端科学大学教授)

SIP-Materials Integration Projects; Masahiko Demura*, Toshihiko Koseki**(*Research & Services Division of Materials Data and Integrated System (MaDIS), National Institute for Materials Science, Tsukuba. **The University of Tokyo, Tokyo (Present: Kyoto University of Advanced Science, Kyoto))

Keywords: materials integration, structural materials, integrated computational materials engineering, modules, workflow, data schema, systems approach, data science, inverse design

2019年4月23日受理[doi:10.2320/materia.58.489]

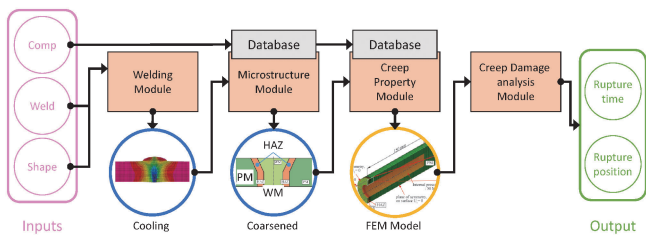


図1 溶接部を含む耐熱構造部材のクリープ損傷性能を予測するためのワークフロー。

スからモデルパラメータを抽出するためのデータ科学手法を組み合わせるなど、様々な手法を自在に統合(インテグレート)することで、プロセスから性能までを予測することができるようになる。これが、マテリアルズインテグレーションの根幹にある考え方である。

マテリアルズインテグレーションの特徴はシステム的なアプローチと予測の実効性を上げるためのデータ科学活用にある。システム的なアプローチによって、対象とする材料開発の中で、どの部分の基礎的な検討が急がれるのかという見通しを持つことができる。これは、基礎研究を担当するセクター(大学・国研等)と材料の実用化を担当するセクター(企業)との有機的な連携に役立つ。また、第2の特徴であるデータ科学の活用によって、貴重で高コストな実験から生まれるデータを有効に、また、合理的に活用する道が開かれる。

3. 第1期SIP「革新的構造材料」における研究開発の概要

SIP「革新的構造材料」の研究開発項目としてマテリアルズインテグレーションが設定され、2014年度から5年間、取り組まれた(プログラムの詳細は、JSTのホームページ⁽³⁾を参考のこと)。図2に本プロジェクトの概要をまとめた。東京大学及び物質・材料研究機構(NIMS)を中心に14の産学官の機関が参画して行われてきた⁽⁴⁾。マテリアルズインテグレーションを具体的に実現するためには、様々な手法をモジュールとして計算機上で実装し、これらを自在につなぎ合わせるための仕組みが必要という仮説のもと、材料開発専用のシステムが開発されることになった。また、構造材料にとって組織が重要な要になることと、疲労やクリープ等の時間に依存する性能を重視する観点から、組織予測と性能予測が研究開発テーマとして設定された。さらに、データ科学の活用を加え、以下の4つのテーマ構成・ユニット体制で開発を行ってきた。すなわち、組織予測、性能予測、特性空間分析(データ科学活用)、統合システムである(図2)。

開発を進めるにあたり、鉄鋼溶接部の疲労、クリープ、脆性破壊、水素脆化が例題として設定され、さらに、これらの成果がアルミニウム合金、チタン合金等に展開された。鉄鋼は様々な変態・析出を高度に組み合わせた組織制御によって性能が引き出されている点で、最も難しい対象であり、これが取り扱える枠組みであれば、広範囲の材料に展開できることが期待できる。また、溶接プロセスは様々な熱サイクル中

マテリアルズインテグレーション(MI)システム1.0の開発

- 内閣府SIP「革新的構造材料」(2014~2018年度)の一領域として実施
- 参画機関: 東京大学、NIMS、JFEスチール(株)、(株)神戸製鋼所、(株)IHI、(株)UACJ、北海道大学、名古屋大学、東京農工大学、鹿児島大学、帝京大学、東洋大学、青山学院大学、理化学研究所
- 様々な材料、プロセスに対応する汎用・総合的なシステムの構築
- 汎用的な展開が見込める高強度鋼溶接部を例題として概念実証

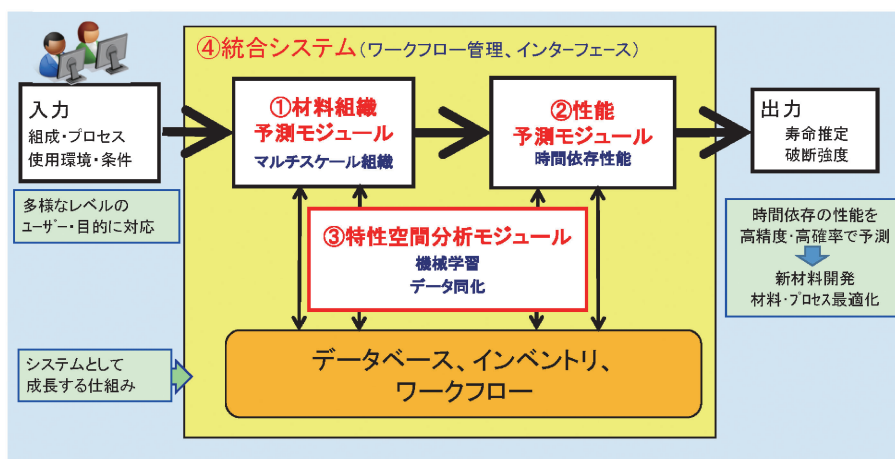


図2 第1期SIP「革新的構造材料」におけるマテリアルズインテグレーションシステムの開発プロジェクトの概要。

の凝固，変態，組織形成を含むため，この問題を扱う枠組みであれば金属材料における熱処理プロセス全般を扱うことができる．このように，汎用的に使用できることを念頭に置きつつ，具体的な例題によって概念実証(proof of concept)することが，第1期SIPにおける開発の目標であった．

実質的に4年半の研究開発の成果として，統合システムが完成し，モジュールを自在に接続するための仕組みが整えられた．組織予測や性能予測のためのモジュールが120個以上開発され，これらをつなぐワークフローも100以上が，統合システム(通称 Mint システム)に実装されている．特性空間分析においては，データ同化やモデル選択といった重要なデータ科学手法の開発が進み，その成果は Mint システムから利用できるライブラリーとして実装されている．また，鉄鋼材料を中心として発刊された各種のデータシートを収集，デジタル化し，20000点以上のデータポイントを有するデータベースを構築した．これらの成果物を用いることで，プロセスから性能を一貫予測できることが例題を通して示され，マテリアルズインテグレーションの概念実証という目標が達成されたと言える．各テーマにおける成果については，本ミニ特集に収録されている記事を参考にしてもらいたい．

4. 第2期SIP「統合型材料開発システムによるマテリアル革命」における研究開発

Mint システムが1.0として完成を迎え，マテリアルズインテグレーションの概念実証が達成されたことを受け，社会実装に向けた研究開発というステージに進むことができるようになった．ここでいう社会実装とは企業の研究開発において

マテリアルズインテグレーションが活用されることであり，これによって社会を変革する革新的な材料が次々と開発されるという将来像を目指すことになる．このような背景のもと，第2期SIPにおいて「統合型材料開発システムによるマテリアル革命」(以下，「マテリアル革命」という.)が課題として設定された．2018年11月には研究開発課題および研究責任者が採択され，2022年度末までの5年間の予定で研究開発が開始された⁽⁵⁾．

社会実装の鍵となるのが，逆問題への対応と先端構造材料・プロセスへの展開である．まず，逆問題への対応について説明する．企業においては，社会(材料ユーザー)からの要請に応じて目標となる性能要求が設定され，これを達成できる新しい材料やプロセスを研究開発するという，まさしく逆問題に常に取り組んでいる．つまり，設定した性能目標から，最適な材料・プロセスを導き出すための道具が求められていると言える．従って，マテリアルズインテグレーションが企業の研究開発の現場で活用されていくためには，日々取り組まれている逆問題に役立つことを実証していく必要がある．そのような認識に立って，逆問題マテリアルズインテグレーションの開発が課題として設定された．

図3に逆問題マテリアルズインテグレーションの開発コンセプトを示す．従来は実験で検証を行っていたために試行錯誤の回数が制限され，そのために試行錯誤の範囲も限定的なものとならざるを得なかった．マテリアルズインテグレーションを活用した新しい開発手法では，試行錯誤を実験から計算機上へと置き換え，試行錯誤のコストを大幅に低減する．その上で，さらに，データ科学を活用して，効率的かつ網羅的な試行錯誤によって，これまで見落としていたより最適な

第2期SIP「マテリアル革命」: 逆問題MIで材料開発手法を刷新

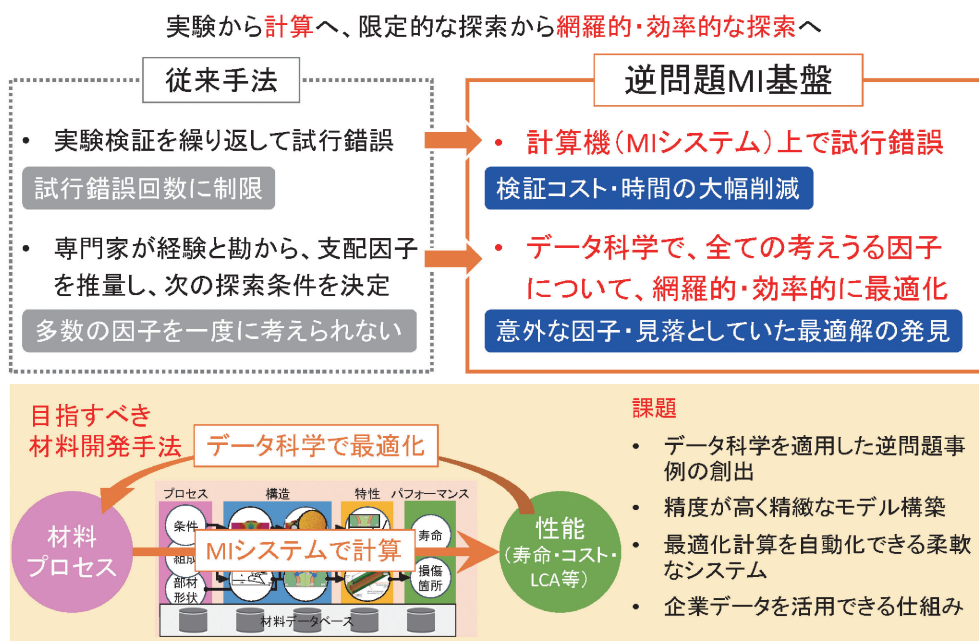


図3 第2期SIPにおける逆問題マテリアルズインテグレーションの考え方．

材料やプロセスをいち早く提案できるようになる。

社会実装する上でもう一つ重要な点は、適用できる材料・プロセスの拡大である。Mintシステムそのものは汎用的に作られているが、実際に様々な材料・プロセスの問題を解いていくためには、その対象を取り扱うためのモジュール、ワークフローの開発が必要となる。適用していく対象としては、我が国が材料上の強みを持つものであって、かつ、材料開発期間が長期化する傾向のある航空機や発電向けの先端的な構造材料及びプロセスを取り上げている。金属系では、航空機エンジンや発電向けタービンに使用される部材に粉末プロセスの適用が始まりつつあることに注目し、耐熱金属材料の粉末プロセスに対応できる逆問題マテリアルズインテグレーションを開発する。具体的には、三次元積層造形プロセス、粉末冶金・鍛造プロセス等である。第1期で開発した鉄鋼向けの数多くのモジュールを有効活用することで、十分に、これらのプロセスに対応できるものと考えている。これに加え、我が国が強みを持つ炭素繊維強化プラスチック(CFRP)についても、マテリアルズインテグレーション技術を開発することになっている。CFRPでは、量子化学計算から、高分子の相分離というメソスケール計算、さらには、繊維を含めた構造体の力学特性に関する予測技術などのシーズ技術を活かして、分子レベルから構造体までをつないで、CFRPの開発に役立つ計算ツール群を構築していく。

逆問題マテリアルズインテグレーションの開発における課題を4つ指摘しておきたい(図3)。まず、データ科学を適用した逆問題事例の創出が重要となる。最適化したい材料・プロセスの因子から目的とする性能までを予測するための順方向計算のワークフローをできるだけ早く通し、データ科学の様々な手法の適用を急ぐ必要がある。次に、精度が高く精緻なモデル構築が重要となる。考慮していない因子は最適化の対象にはできないので、考える因子を可能な限り取り込んだモデリングが望まれる。さらに、最適化計算を自動化できるようにMintシステムを改良する必要がある。また、企業内部で独自にデータを活用できる仕組みも重要であり、ある逆問題を解くときに必要な標準的なデータの記述の仕方を設計することで、企業内データの利活用が促進されると考えている。

なお、「マテリアル革命」全体の構成は、逆問題マテリアルズインテグレーションを開発するA領域、CFRPに展開するB領域、耐熱金属・セラミックスに展開するC領域となっている⁽⁶⁾。A領域は、NIMSと東京大学を中心に28の産学官の機関が連携して開発を行う。

5. 世界の状況とMintシステムの位置付け

サイバー空間で材料を開発していこうという動きは、世界的にも活発である。実際の複雑な材料問題(実課題)に対応するためにマルチスケール・マルチフィジックスにどう取り組むかという観点を縦軸として、世界的な取り組みを整理したものが図4である。SIPで開発したMintシステムは、様々

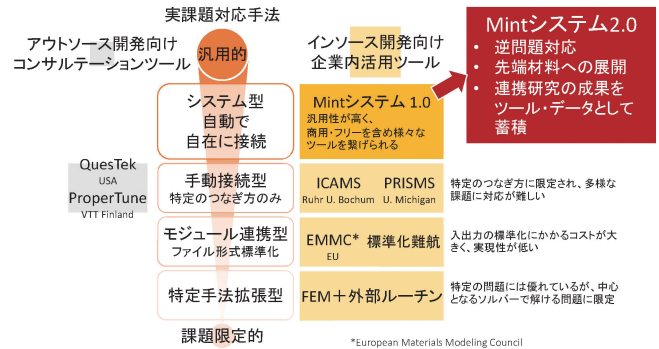


図4 材料の実問題に対応するための計算材料学的なアプローチの国際的な比較。

な計算手法をモジュールとして取り扱った上で、それぞれを接続して複雑な材料問題に対応するという考え方に立っている。類似の取り組みとして、米国ミシガン大学のPRISMS⁽⁷⁾、ドイツ・ルール大学ボーフムのICAMS⁽⁸⁾、米国ペンチャーのQuesTeK⁽⁹⁾、フィンランドの研究機関VTTで開発されているProperTune⁽¹⁰⁾などがある。PRISMSやICAMSは用意されている特定のつながりに限定され、自在な接続は企図されていない。そのため、それぞれのモジュールの接続は手動である。QuesTekとProperTuneは一般ユーザーの使用が想定されておらず、実際にどのような仕組みで複数のモジュールの接続がなされているかは不明である。ただし、基本的に材料開発や材料課題の解決を請け負うための自社内、組織内で使用するツールとして開発されていることから考えると、自動的な接続を実現するシステムをコストをかけて開発する動機付けは乏しく、開発者がその時の必要に応じて手動で接続しているものと推察される。この他に、EUのコミュニティ(EMMC, European Materials Modeling Council⁽¹¹⁾)を中心として、ファイル形式を標準化してモジュール間のデータの受け渡しを容易にするという発想の活動が行われている。実際には、対象とする材料課題ごとに扱うデータの種類が変わるため一般化が難しく、なかなか標準化が進んでいない。これらモジュール同士を対等な関係で接続していく発想の他に、特定のソルバーを中心において、これに対してサブルーチンを接続し、複雑な材料課題に対応するという戦略もある。具体的には、有限要素解析によるマクロな力学計算を中心に据え、ミクロ組織を計算するメソスケールのサブルーチンを組み込むことで、例えば、鍛造による材質予測を実現するような試みである。これは、特定の問題を解決する方法としては優れたアプローチであり、開発や計算の効率も良いと考えられる。ただし、中心とする計算手法によって解ける問題が限定されるため、汎用性が高いとは言い難い。このように俯瞰してみると、Mintシステムは、自動で自在に接続できる仕組みを実現しているという点で、世界的にみてユニークであると言える。

