

SIP-MI プロジェクトにおける
統合システムの開発源 聡¹⁾ 門平卓也²⁾
伊藤海太³⁾ 渡邊 誠⁴⁾

1. 緒 言

近年、構造材料に要求される性能が厳しく、かつ多岐にわたるようになってきた。例えば航空機材料においては、さらなる軽量化、燃焼ガスの温度上昇、高応力・腐食環境への適応などがいずれも高いレベルで求められている。こうした多岐にわたる厳しい要求に応えるために、最適化を必要とする因子は複雑化するばかりである。このような状況において、研究者やエンジニアの勘や経験に頼る従来の材料開発方法では、新規材料開発に膨大な時間を費やすことから、開発の効率化、加速が強く望まれるようになってきた。

これに対し、米国では PSPP モデル(Process, Structure, Property, Performance)⁽¹⁾に基礎においた ICME(Integrated Computational Materials Engineering)が脚光を浴びている⁽²⁾⁽³⁾。ICME とは材料開発、製造を、プロセス、構造、特性、性能に分解し、理論モデルや計算科学による解析を中心に材料開発の促進を行うものである。日本でも、2014年に開始された SIP プロジェクトの中で、航空機材料を対象とした「革新的構造材料」に関するプロジェクト⁽⁴⁾⁽⁵⁾が実行され、5年間のプロジェクトの中で欧米とも情報交換を行いながら材料設計・開発のための基盤システム、マテリアルズインテグレーションシステム(Materials Integration System, 以下 MI システム)の開発を続けてきた。

2. MI システムの開発思想

プロジェクトを通じて我々はマテリアルズインテグレーションの定義・概念⁽⁶⁾⁽⁷⁾に基づき、産官学の連携チームで材料開発のための統合的なシステム(MI システム)の開発を進めてきた。具体的には、以下を実現するための基盤システムの開発を行ってきた。

- 材料開発におけるワークフローの設計・実行
 - 材料工学の持つ概念レベルでの語彙やデータの接続性の整理
 - データの蓄積、および機械学習などによるデータの活用
- 以下、具体的に MI システムに実装された機能などを説明していく。

(1) 材料開発におけるワークフローの設計・実行

まず材料工学の問題を解くためのツール(数値計算プログラムやデータなど)の入出力データや内在する物理モデルを洗い出す。次に対象となる課題に解を与えるようなツール同士の接続(これをワークフローと呼ぶ)をユーザは試行錯誤しながら設計する。そうして設計したワークフローに対して、入力パラメータを与えて一気通貫で計算を実行する、というような仕組みを整えた。一気通貫で計算できる環境で最も重要なメリットは、事象を整理して影響しうる因子を露わに書き下すことにより、課題の解決方法を特定の研究者の主観に依存しない形で客 thể化できることである。

ユーザは MI システムを通じて、ツールの接続性の是非や効率性を、試行錯誤を通じて明示的に考えることができる。つまり、経験と勘という暗黙知を利用してきた従来の材料開発に対して、MI システムは思考の手段を提供できると考えている。

(2) 材料工学の持つ概念レベルでの語彙やデータの接続性の整理

MI システムでは、ツール間は単なる数値データや入出力ファイルを受け渡すだけでなく、合金組成やプロセス条件に付与されている材料工学上の概念(モデル化されたデータ)を受け渡すことで、ツールの開発や、ワークフローの設計をより材料工学の観点から行えるようにすることを考慮している。これにより、さまざまなスケールの事象や、異なる分野

* 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) 1)主幹研究員 2)主幹エンジニア 3)主任研究員 4)チームリーダー(〒305-0044 つくば市並木 1-1)

** 東京大学 先端科学技術研究センター; 准教授

Materials Integration System for Materials Design and Manufacturing; Satoshi Minamoto*, Takuya Kadohira*, Kaita Ito* and Makoto Watanabe** (*Research & Services Division of Materials Data and Integrated System (MaDIS), National Institute for Materials Science, Tsukuba. **Research Center for Advanced Science and Technology, The University of Tokyo, Tokyo)

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

2019年 5月 8日 受理[doi:10.2320/materia.58.511]

の物理現象を連成させて解く、などの応用がより容易になると考えている。また、材料工学の観点から設計されたワークフロー同士は、上で述べたようにさまざまな指標で比較・評価できるほか、ノウハウとしての蓄積も重要であり、今後望まれる材料設計の多様化、複雑化の対応に必要な基盤的な情報源となると期待できる。

このようにして、過去の知見を踏まえながら、材料工学の知見を踏まえて設計と評価のサイクルを回すことで、材料の特性を支配する新しい物理や重要因子を発見することに向けても、MIシステムは活用されていこうと考えている。

(3) データの蓄積、および機械学習などによるデータの活用

前述の通り、一気通貫で計算ができるように整理されたワークフローは、計算の自動化が比較的容易であり、MIシステムを介して出力される多様なデータは効率的に整理して蓄積されるために、その再利用性が確保されている。つまり蓄積データに対して、過去のデータを参照するばかりでなく、機械学習技術などを利用することで多様な予測モデルが構築でき、ワークフロー設計において組み合わせ可能なツールの一つとして再び利用することが可能である。この再利用性は非常に重要で、例えば計算に時間のかかるツールに対しては事前に生成しておいた予測モデルで代替して、着目すべき部分に焦点を当てて資源を集中させることができるなど、試行錯誤の効率化が可能である。

3. MIシステムの構成要素

図1にMIシステムのプロジェクト内での位置づけを示す。材料の性能が、材料マイクロ組織を予測する部分と性能を予測する部分に加えて、情報学的に両者をサポートする部分の部分を包括的に含むシステム構成となっている。SIPでは例題として溶接部材が持つ課題を取り上げているが、MIシステムはその他の問題にも対応できるように設計がなされている。

図2にMIシステムにおけるプラットフォームとしての機

能開発の概念図を示す。構成要素としてはワークフローの設計・実行部分、語彙インベントリ部分が主たるものであるが、いくつかのサブシステムも構築している。以下に、MIシステムの構成要素についてまとめる。

(1) ワークフローデザイナー/プレイヤー

ワークフローの設計・実行を行うアプリケーションである。ユーザはここで、実際の解析に関する試行錯誤を繰り返すことができる。ここで重要なことは、用いるプログラムの入力ファイル名などを入力ポートとして設計せずに、できるだけ材料工学上の概念に近い言葉で記述を行うことである。そのような言葉で作成されたワークフローは計算プログラムと可換なモジュールが用意できればプログラムを自在に変更しても同じ概念で計算が流れることを意味する。逆に同じ概念で記述したワークフローであってもモジュールが異なることで計算の結果が左右される場合は、他に考えるべき因子が存在することを意味している。この作業を繰り返すことが事象の理解に貢献するものとする。

(2) 特性空間語彙インベントリシステム

語彙インベントリシステムでは、材料の性能予測のための語彙情報の管理に関する概念⁽⁸⁾を実装した機能を備えている。これは記述子、予測モデル、ワークフロー、実行結果の4階層に分けて、固有識別子を付与して管理するシステムであり、階層ごとに以下のように構成される。

- (1) 材料のプロセス、構造、特性、性能の各々に関するパラメータが記述された記述子を蓄積する機能
- (2) 材料のプロセス、構造、特性、性能の少なくとも2つについての関連の入出力の情報を記述した予測モデルを記録する機能
- (3) 2つ以上の予測モデルの関連を、記述子を用いて書き下したワークフローを記録するための機能
- (4) ワークフローごとの実行結果を、各予測モデルにおける出力結果も含めて蓄積する機能

このような構成の下、設計されたワークフローが実行され、実際のデータの流れを具現化していくことになるが、併せて記述子の情報を語彙インベントリから俯瞰的に眺めるこ

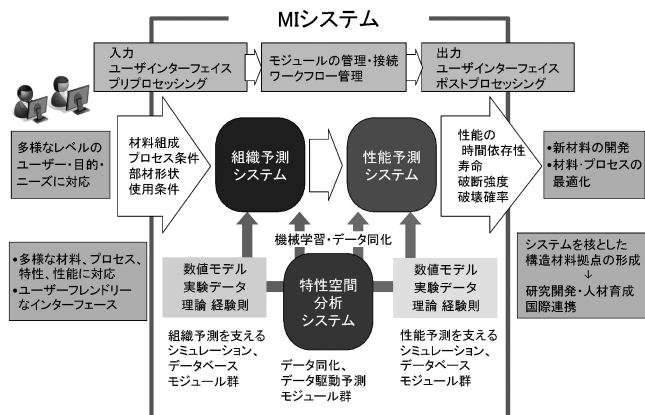


図1 プロジェクト内におけるMIシステムの位置づけ。

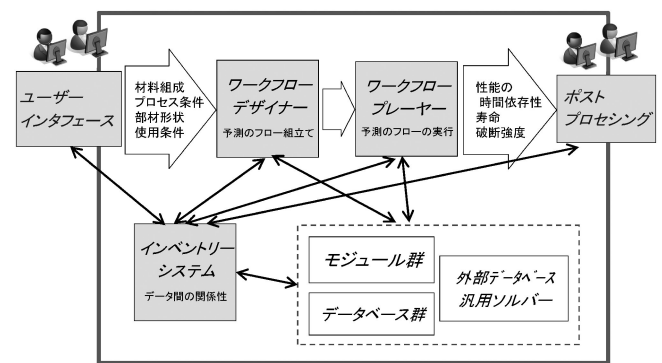


図2 MIシステムのプラットフォーム機能開発。

とで物理モデルの関係性を見ることができ、不足しているモデルや考慮すべき因子を入れ込む可能性を検証することができる。

すなわち、語彙インベントリシステムは材料工学の知識、概念を元に語彙の関係性を表現する空間であり、概念の関係性を評価するための情報を生成、解析、可視化するためのシステムである。モジュールが可換であるかどうかを形式知からのみではなく、蓄積したデータや語彙情報などからシステム側でも判断の支援を行っていく。これはさまざまなデータを集約することにより集合知としての情報抽出を目的としている。現在は、さまざまな計算データやワークフローデータに対してスコアリングを行い、類似性や接続性を判定する機能が実装されているが、スコアリングのアルゴリズムに関しては今後さらに検証を行っていく必要がある。

(3) サブシステム、あるいは外部システムとの連携機能

MI システムにはサブシステムとして、モジュールのシステムへの登録支援機能(MI モジュールビルダ)や、機械学習による予測モデル生成器(MIREA: MI REgression Analyzer)が用意されており、いずれも MI システムとの接続性を重要視して構築されている。さらに溶接問題に特化した GUI を搭載したサブシステム(WFAS: Weld Fatigue Analysis online Simulator)が開発されている。

さらにサブシステムと外部システムとの連携についても検証を行っている。例えば、国際的に広く利用されている GRANTA Design 社の材料データベース(GRANTA MI)⁽⁹⁾から検索した材料データを、MIREA を通じて抽出し、機械学習による予測モデル生成の後、MI システム上で利用可能なツールとする仕組みを構築した。

4. 溶接問題を例題とした実例

SIP では、溶接部の問題でも特にクリープ寿命解析、脆性破壊解析、疲労寿命解析、水素脆性の解析の4つの課題に関して主に取り組んできた。以下に、これまでに実装されたワークフロー例を示す。

(1) クリープ解析のためのワークフロー

図3にクリープ寿命計算におけるワークフローデザインの例を示す。青字が入力項目、黄色がツール、グレーが出力項目である。クリープ解析の場合、材料組成や試験温度、応力条件が入力パラメータとなり、クリープ寿命の値や可視化に関するファイルが出力となる。ここでは有限要素解析(FEM)の結果を用いているが、FEM 解析についても形状情報や、材料物性値を含むワークフローが作成されている。

(2) 脆性破壊解析のためのワークフロー

図4に脆性破壊の解析のためのワークフローデザインの例を示す。ここでは、材料組成情報やマイクロ組織観察から得られる情報(相分率など)も入力パラメータとして必要である。

これらの情報は熱力学計算など他の解析ツールから得ることも可能なので、そのようなツールと組み合わせていくことで、ワークフロー自体を拡張することが可能である。

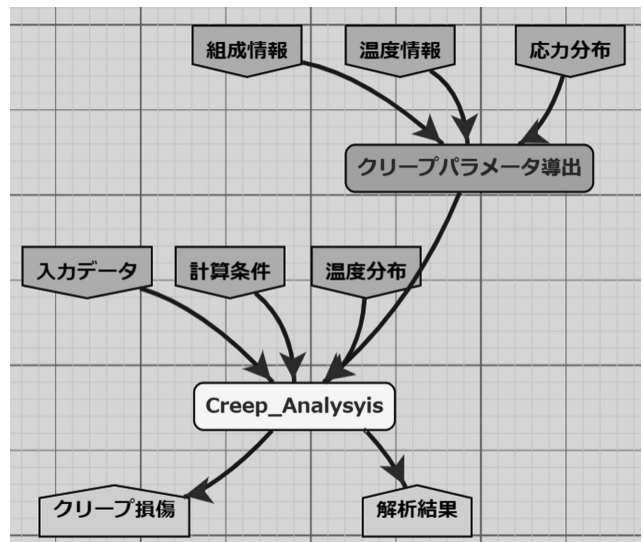


図3 クリープ寿命計算におけるワークフローデザイン例。

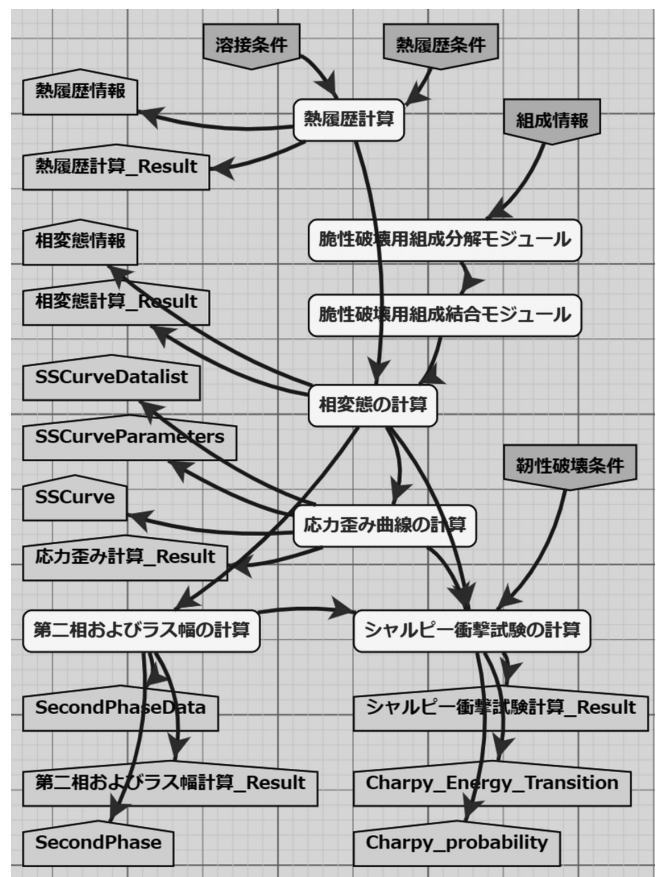


図4 脆性破壊解析のためのワークフローデザイン例。

5. ユーザ利便性と各種データへのアクセス制御

MIシステムは多岐にわたる機能を複数の機関やユーザで利用されること想定しているために、セキュリティ確保の対策がとられている。具体的にはシングルサインオン機能や、マルチテナント方式の採用、計算データや実行モジュール、ワークフローデータに対するアクセス権限設定機能などがある。アクセス権の権限設定は、組織単位、グループ単位、ユーザ単位で設定できる。

MIシステムでは、汎用化されたワークフローから多くのデータを取得し、広いパラメータ空間を見ようとするものであり、データ共有は強く推奨される。更にそのことが、データ共有の強い動機付けになることを期待する。

6. ま と め

マテリアルズインテグレーションという概念を具現化したMIシステムは、材料一般の物理現象の背景の把握をデータの活用により実現しようとしたシステムである。これまで特定の物理モデルを解くための要素技術の開発や拡張を通じて現象を捉えようとする試みは力強く行われてきている。本プロジェクトでは材料開発に必要なプロセス条件などの境界条件を検討し、材料の持つ性能などを把握しようとする試みを、データや語彙などが持つリッチな情報を元に物理モデルを見直し、データ空間を広げようとする試みを行ってきた。したがって要素技術開発は依然重要な研究テーマではあるが、それらの接続性の議論を継続的に進めていくことも今後非常に重要になると考える。特に不均一性が材料の性能の要となる構造材料においては、整理されたデータを集約しどのように接続させるかを議論し、情報工学的な手法の支援の下、データから見える因子を明確にし、物理モデルの精緻化に関する提案を行えるシステムとして成長しなければならない。

2018年11月からは、第2期SIPプロジェクト「統合型材料開発システムによるマテリアル革命」が併走する形で開始

した。引き続きMIシステムを考えるための道具としてAPIも含めて活用できるように開発を行う。さらに広く産学共同での開発を続け、利用可能なツールを拡充し、複雑化する材料開発における現象理解のためのプラットフォームとしての発展を目指す。

本研究は、内閣府総合科学技術・イノベーション会議の戦略的イノベーション創造プログラム(SIP)「革新的構造材料」及び「統合型材料開発システムによるマテリアル革命」(管理法人：JST)によって実施されました。ここに感謝申し上げます。

文 献

- (1) G. Schmitz, U. Pahl: Handbook of Software Solutions for ICME, Wiley-VCH Verlag, (2016).
- (2) 村山光宏：まてりあ, **51**(2012), 462-466.
- (3) G. B. Olson: Science, **288**(2000), 993-998.
- (4) 戦略的イノベーション創造プログラム(SIP) : <http://www.jst.go.jp/sip/k03.html>
- (5) 佐久田博司, 長谷川 大, 源 聡：マイクロサービスによるMaterials Integration 入門, (2018).
- (6) 小関敏彦：情報管理, **59**(2016), 165-171.
- (7) https://www.jst.go.jp/sip/k03/sm4i/dl/pamph_d1_j.pdf
- (8) T. Ashino: Data Science Journal, **9**(2010), 54-61.
- (9) <https://grantadesign.com/>

★★

源 聡

1995年 京都大学大学院人間・環境学研究所博士課程前期修了

1995年～2014年 民間企業勤務

2008年 博士(理学) 東京工業大学

2015年～ 現職

専門分野：計算科学

©SIP「革新的構造材料」開始からMIシステムの開発に従事。

★★



源 聡

門平卓也

伊藤海太

渡邊 誠