

概要

材料科学・材料工学分野の主要課題である「マクロな現象論とミクロな物理的原理との間の関係性」を、計算機上で予測する方式について考察した。対象系の原子配置と電子数のみから必要な物性を計算する第一原理計算で扱える原子数を拡大する方式は、計算量や計算機能力の制約から、マクロスケールの物性を積み上げて議論するにはかなりの時間がかかる。モデルを組合せて予測するマルチスケールシミュレーションの方式については、ミクロからマクロにわたる時空間スケールの接続が現実のものになりつつあるが、適切なモデルの組合せ方や現象を支配する因子の選び方は必ずしも明確ではない。それらの見極めには、1D CAE として知られる、システム全体を簡便なモデルで俯瞰する方式が有効である。この方式は、これまでに報告してきた「データ活用型材料研究」のコンセプトとも融和して、材料設計の新たな時代を拓く手法となる。

Summary

In this article, we have discussed *in silico* methods to predict relationships between the microscopic principles of physics and macroscopic phenomena of materials. One such method is based on first principles calculations, in which systems are treated as condensed matter consisting of atoms. Analyses suggested that we would be unable to handle a large enough number of atoms directly by this method, to investigate the macroscopic phenomena in the near future. On the other hand, multi-scale simulations, in which different methods of simulation from micro- to macro-scales are interconnected, are becoming a realistic means of bridging the gap between the micro- and macro-scales. However, trial and error is vital to multi-scale simulations, for determining how to combine the methods in question and/or how to select the feature values necessary to describe the macroscopic phenomena in focus. In order to discern the optimal combinations of methods and/or selects the feature values, it is effective to regard the whole system using a simple model, known as 1D CAE, that focuses only on functions rather than on describing the structure. We propose a scheme to establish a new method, applying 1D CAE in concert with “data-utilized materials research” as a revolutionary method to design materials.