

## シンセティック材料設計-1D CAEとデータ活用型材料研究の融合-

材料科学・材料工学分野の主要課題「マクロな現象論とミクロな物理的原理を結びつける方式」について調査・分析した結果をもとに、1D CAE手法と「データ活用型材料研究」の融合により実現される「シンセティック材料設計」のコンセプトを提案。

### ■ 第一原理計算の大規模化についての考察

- 対象系の原子配置と電子数のみを入力パラメータとして計算する第一原理計算を用いて、原子数をマクロスケールに対応するまで拡大してマクロ物性を計算するには、計算量や計算機能力の制約から相応の時間が必要となる（アボガドロ数程度の原子を扱えるようになるのに4-50年必要との試算あり）。

### ■ 材料版 1D CAE とデータ活用型材料研究

- 機械設計分野で活用が進んでいる1D CAE(Computer Aided Engineering)のコンセプトを材料工学分野に展開することで、マクロな物性予測を行うアイデアを提起。
- 1D CAE に求められる機能要件を分析した結果、上記の展開には、LCSが考察してきた「データ活用型材料研究」が鍵を握ることを考察。

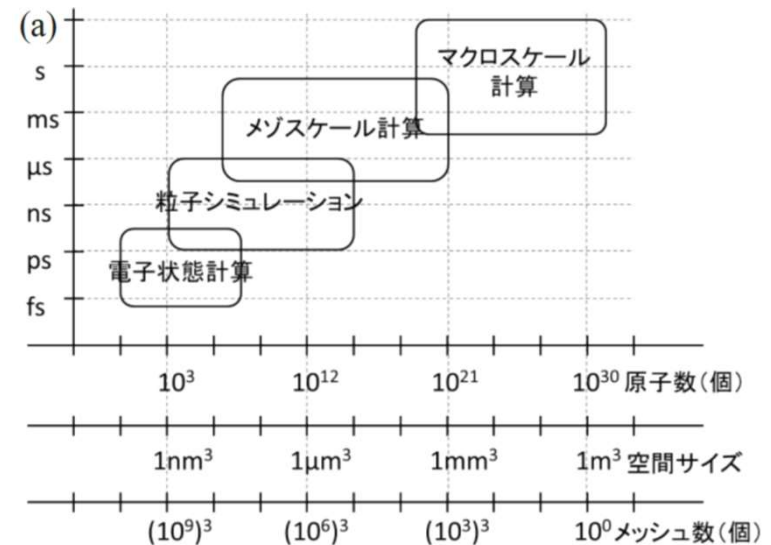


図 シミュレーション手法が対象とする時空間スケール  
(a)手法別に対象とする時空間スケールをプロットしたもの

### 政策立案のための提案

- 低炭素化技術の実装においても、材料という非常に複雑な対象を制御・応用する観点から、システム全体を俯瞰しながら開発目標を見定めることが求められている。その際、「第一原理計算」のみならず、問題に応じて既存の様々なモデルを適材適所で組合せ、総合的に解析を行うアプローチが極めて重要である。本提案書では、これを「シンセティック（総合的）アプローチに基づく材料設計」と呼ぶ。このアプローチに基づいて、材料研究分野における既存技術の整理と新技術の開発を体系的に行い、それらを総合して問題解決にあたる基礎研究プログラムの創設を提案する。
- プログラム推進で礎となるは、様々なモデルを適材適所で組合せられるバーチャルプラットフォームと、その上で活動するコストエンジニアリング分野、材料科学・材料工学分野、情報科学分野、ソフトウェア工学分野等の材料開発者から材料ユーザ・社会変革を起こすイノベータまでを包含する統合的コミュニティである。