

低炭素社会の実現に向けた
技術および経済・社会の定量的シナリオに基づく
イノベーション政策立案のための提案書

技術開発編

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－

平成 30 年 2 月

Synthetic Materials Design:

Fusion of 1D CAE and Data-utilized Materials Research

Strategy for Technology Development

Proposal Paper for Policy Making and Governmental Action
toward Low Carbon Societies

国立研究開発法人科学技術振興機構
低炭素社会戦略センター

LCS-FY2017-PP-13

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.

目次

概要

1. はじめに 1

2. 第一原理計算の精度..... 1

3. 第一原理計算の大規模化..... 3

4. マルチスケール連成解析..... 5

5. 計算機が支援する試行錯誤の低減 7

6. 材料版 1D CAE とデータ活用型材料研究..... 8

7. 政策立案のための提案..... 9

参考文献..... 10

1. はじめに

本稿で議論したいことは、材料科学・材料工学分野の主要課題である「マクロな現象論と物理的原理との間の関係性」を、計算機を用いてどのように予測するのか、その方式についてである。

「使われてこそ材料」という言葉があるように、材料にとっては、原理はさておき問題が解決されることが重要である。ここから、これまでに明らかにされてきたマクロな現象論と物理的原理との間の関係性が、経験的、そして各論的になるのは、自然な姿であると言えよう。

一方で、持続可能性という観点から、より効率的な開発が、現代では求められている。試行錯誤に基盤をおいた経験的・各論的な関係性の把握ではなく、様々な事象に適用可能な統一的・原理的な現象理解、さらに、そこから個別事象を導きだすような方法論が求められる。材料を「元素の組合せとその凝集構造」として理解するのは、そうした統一的・原理的な理解の一例であろう。そして、その究極の形としてあげられるのが、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」である。原子配置と電子数という、経験によらないパラメータのみから計算を行うので、第一原理計算は、未知物質や未知物性の予測可能性を担保しており、これが大きな強みとなっている。もし、アボガドロ数相当の原子を第一原理計算で実行することができたなら、マクロスケールで発現する材料特性や、その材料を加工して作られる部材の特性を、経験的なパラメータに頼ることなく計算・予測できる可能性がある。

こうした背景から、第一原理計算で実行可能な計算サイズを拡大する取り組みが進められている。本稿では、これを「原子数拡大型」方式と呼び、まず、その現状と可能性について議論する。

2. 第一原理計算の精度

第一原理計算の手法としての実際は、様々な日本語解説¹⁾がなされている。それらによれば、密度汎関数法による平面波基底および擬ポテンシャルを用いた第一原理計算では、計算コスト次第で、原子レベルスケールでの価電子状態の空間変動を記述するのに十分な精度で計算結果を得ることができる。

例えば、計算精度に影響するパラメータの一つであるカットオフエネルギーは、電子状態を記述する波動関数を平面波展開する際の基底の品質を表すパラメータで、この値が大きいほど、波動関数の細かい空間変動を記述できる。具体的には、 $25 \text{ Ry} = 340 \text{ eV} = 5.4474 \times 10^{-17} \text{ J}$ のカットオフエネルギー値に対して、 0.066 nm の大きさの構造が表現できる²⁾。

一方で、励起状態の取り扱いや、局在電子が物性に寄与する場合の取り扱いには、注意を要することがよく知られている³⁾。例えば、エネルギーバンドギャップの値を、密度汎関数法を用いて計算する時に、局所密度近似 (Local Density Approximation: LDA) と呼ばれる電子相関の近似方式を取り入れると、必ず過小評価してしまうことが知られている。したがって、バンドギャップの値をもとに求める物性値 (例えば、仕事関数や電子親和力など) については、予測に際して十分注意する必要がある。LDA の記述力を克服するために、電子間相互作用の取り扱いに関して、様々な方式が考案されている。よく利用される手法として、非局所項を取り入れる一般化勾配近似 (Generalized Gradient Approximation: GGA) と呼ばれる方式があり、多くの物質を取り扱う際に、

¹⁾ 例えば、表面科学, Vol. 28, No. 3, 2007 における「特集：第一原理計算」の記事; 応用物理学誌・基礎講座「シミュレーション総復習」における“第一原理計算のコツ” (大野隆央, 応用物理, Vol. 86 (6), 495, 2017 および Vol.86 (7), 591, 2017) など。

²⁾ 山内淳, 表面科学, Vol. 28, No. 3, 135, 2007.

³⁾ 小林一昭, 表面科学, Vol. 28, No. 3, 129, 2007.

バンドギャップや格子定数の予測精度が改善されている。局在電子の影響が強い強相関電子系のバンドギャップ予測については、局在電子間の相互作用項を直接導入する LDA+U という方式が提案されているが、U パラメータを計算する際に実験値を参照することが多く⁴⁾、完全な第一原理計算とは言えない方式となっている。

以上のように、第一原理といえども理論の適用可能な範囲というものがあることが明確に存在し、それまでの理論では記述できない限界に直面し、その度に、とくに電子間相互作用を取り扱う理論の拡張による記述範囲の拡大が図られてきていることに注意が必要である。

以下では、どのような計算精度で議論されているか、ペロブスカイト型太陽電池に関する具体的な計算事例を通して紹介する。

2.1 ペロブスカイト型太陽電池材料中におけるイオン拡散経路予測⁵⁾

本研究では、ペロブスカイト型太陽電池材料として代表的な物質 MAPbI₃ と FAPbI₃ (M=CH₃, A=NH₃, FA=(NH₂)₂CH) について、陽イオン分子の拡散メカニズムを予測している。その結果から、空孔密度の減少やイオンサイズの制御が劣化等の抑制に有効であることを明らかにした。計算は、密度汎関数法+平面波基底+ウルトラソフト型擬ポテンシャルの方法で、40 Ry のカットオフエネルギーを用いている。格子定数の予測誤差は、実験値にもよるがほぼ 1%以内、バンドギャップ値の予測誤差はおおよそ 10%以内に収まっている。予測された陽イオン分子の拡散障壁は、サブ eV の大きさであり、室温で十分に起こりうる拡散であることを示した。

2.2 ペロブスカイト太陽電池の候補材料予測⁶⁾

本研究では、11,025 個の仮想物質に対し、第一原理計算に基づく材料スクリーニングを行い、非毒性元素を用いたペロブスカイト型太陽電池の新たな材料物質として、6 タイプ/全 51 個の物質を提示している。スクリーニングに必要な指標として、結晶構造、全エネルギー、直接遷移ギャップ値、間接遷移ギャップ値、直接型/間接型、価電子帯上端/伝導帯下端の位置、電子・正孔有効質量、毒性元素の有無、ペロブスカイト型を保持するか/否かを計算し、データベース化した。それぞれの指標に応じて、計算方法を使い分けており、段階的に指標の計算とスクリーニングを繰り返す手法を採用している。バンドギャップの実験値に対する予測誤差は物質により異なり、数%~数 10%と幅が広い。

2.3 鉛フリーペロブスカイト型太陽電池に向けた光学特性予測⁷⁾

本研究では、毒性元素を用いないペロブスカイト型太陽電池の実現に向けて、計算により候補材料の探索を実施している。具体的には、CsBX₃ (B=Pb, Sn, Ge; X=I, Br, Cl) に対して、構造最適化、電子状態、光学特性 (光学吸収スペクトル)、機械特性 (弾性率、体積弾性率、せん断弾性率、ヤング率、etc.) に関して各種計算を実施、その結果、ハロゲン原子の置換により、他の物性を保ったまま電子バンドギャップのみ影響を受けることを予言している。計算は、密度汎関数法+平

-
- ⁴⁾ U パラメータを、経験パラメータを用いずに計算しようとする試みもなされていて、制限 DFT 法などの方法が知られている。
- ⁵⁾ JST・NIMS 共同プレスリリース, “ペロブスカイト太陽電池の劣化問題の原子レベル機構が理論計算から明らかに~耐久性と安定性向上への貢献に期待~”, 2017 年 8 月 21 日, <http://www.jst.go.jp/pr/announce/20150821/>, 最終アクセス確認 2017 年 11 月 10 日。
- ⁶⁾ 理化学研究所プレスリリース, “「京」でペロブスカイト太陽電池の新材料候補を発見”, 2017 年 10 月 5 日, http://www.riken.jp/pr/press/2017/20171005_1/, 最終アクセス確認 2017 年 11 月 10 日。
- ⁷⁾ M. Roknuzzaman et al., “Towards lead-free perovskite photovoltaics and optoelectronics by ab-initio simulations”, Scientific Reports, Published online: 25 October 2017, <https://www.nature.com/articles/s41598-017-13172-y#Sec10>, 最終アクセス確認 2017 年 11 月 10 日。

面波基底+ウルトラソフト型擬ポテンシャルで行われ、カットオフエネルギーは約 40 Ry で実行されている。格子定数に対する予測誤差は 3%以内、バンドギャップの実験値（光学バンドギャップ）に対しての GGA を用いた予測誤差は数 10%（最大 70%程度）の過小評価となっている。

本稿では、この後に、第一原理計算の「原子数拡大型」方式の可能性について議論する。その際、本節での考察から、精度や記述可能範囲については現状レベルを確保できるものとし、現在評価できている計算対象のサイズ増大のみに注目して議論を進めていく。

3. 第一原理計算の大規模化

「原子数拡大型」方式を取る場合に、計算可能な系のサイズをどこまで拡大できるのかは、コンピュータの計算能力を直接反映して決まる。2017 年 10 月現在、我が国における最先端の計算能力を有するコンピュータは、言うまでもなく「京」である。一方で、ポスト京として、次世代スーパーコンピュータの設計と実装について、検討が重ねられている。計算機の処理速度の向上については、10 年で 1,000 倍程度という経験則が知られており、ポスト京の具体的目標も、このペースを維持することを念頭に置き設定されている。こうした検討の結果、ポスト京が達成すべき具体的な計算目標について、計算科学ロードマップ 2017[1]としてまとめられている。

第一原理計算に関しては、ナノサイエンス・デバイスの項にて考察が行われ、「物質科学」要求性能表として、目標とする計算系とともにその計算に必要なコンピュータスペックが整理されている。このうち、項目、計算方法、問題規模、コード例を抜粋して整理した表 1 を以下に示す。

表 1 物質科学に関する次世代ハイパフォーマンス・コンピューティングの目標性能
 (文献[1]の記載内容を著者が再構成して作成)

	項目	計算方法	問題規模	コード例
1	次世代先端デバイス	第一原理計算 (擬ポテンシャル法+実空間基底)	原子数: 10万	RSDFIT
2	次世代先端デバイス	第一原理計算 (擬ポテンシャル法+平面波基底+ $O(N^3)$)	原子数: 1万 × 100MD の同時実行	PHASE、xTAPP
3	次世代先端デバイス	第一原理計算 (密度行列+最適化による $O(N)$)	原子数: 1億 × 時間ステップ数 10^4	CONQUEST
4	光・電子デバイス[1]	高精度分子軌道法	基底数: 2万 × 100万求積点	
5	分子機能	大規模分子軌道法	原子数: 1万	
6	分子機能 (タンパク質の電子状態)	フラグメント分子軌道法	残基数: 数100 (数千万次元の密行列の固有値問題)	
7	熱交換デバイスの安全性向上・ 特性解析	短距離古典分子動力学	粒子数: 4000億	
8	分子機能と物質変換	長距離古典分子動力学	原子数: 10億	
9	光・電子材料	ナノ構造体電子・電磁波ダイナミクス法	原子数: 96万 × 50000ステップ	
10	強相関電子系の機能解明	クラスターアルゴリズム量子モンテカルロ法	原子数: 1億	
11	強相関電子系の機能解明	変分モンテカルロ法	原子数: 1万	
12	物質・エネルギー変換	量子分子動力学法	100レプリカ × 100万ステップ	xTAPP + MODYLAS
13	物質・エネルギー変換	化学反応動力学・量子分子軌道法 (分子軌道法または QM/MM)	原子数: 1000 × 1000レプリカ × 10000ステップ	xTAPP + MODYLAS
14	物質・エネルギー変換	化学反応動力学・量子分子軌道法 (第一原理計算)	数万レプリカ	xTAPP + MODYLAS
15	分子構造・分子機能	分子動力学法 (feramによるリクサー強誘電体の誘電率の周波数依存)	原子数: 512 ³	
16	新物質探索	クラスター展開法(第一原理計算)	原子数: 1万 × 100イオン配置の同時 実行	
17	新材料	第一原理計算(凍結フォノン法)	原子数: 1万	
18	強相関電子系の機能解明	厳密対角化(ランチョス法)	スピンサイト数: 54 ($S_z=0$)	
19	新物質探索	フェーズフィールド法	10^{13} 空間メッシュ × 10^7 ステップ	

この表から問題規模に着目して整理を行ったのが、図 1 である。横軸は、原子数を表している。副軸は、1 原子が占める空間サイズを 0.1nm^3 と仮定して計算した、対応する空間サイズを示している。一方、縦軸は、計算のケース数を表している。多くの計算の場合、様々な原子配置に対して計算を行い、それらの結果を比較・統合することにより、物性値を得る。そのときに必要な原子配置の数をケース数と表現している。

さらに、この図の中にプロットされた数字付きの矩形は、表 1 の番号に対応している。矩形の色は、青色、赤色、オレンジ色の 3 種類からなるが、それぞれ、第一原理計算をベースにおいた計算、分子軌道法をベースにおいた計算、経験的ポテンシャルを用いた分子動力学計算を意味する。

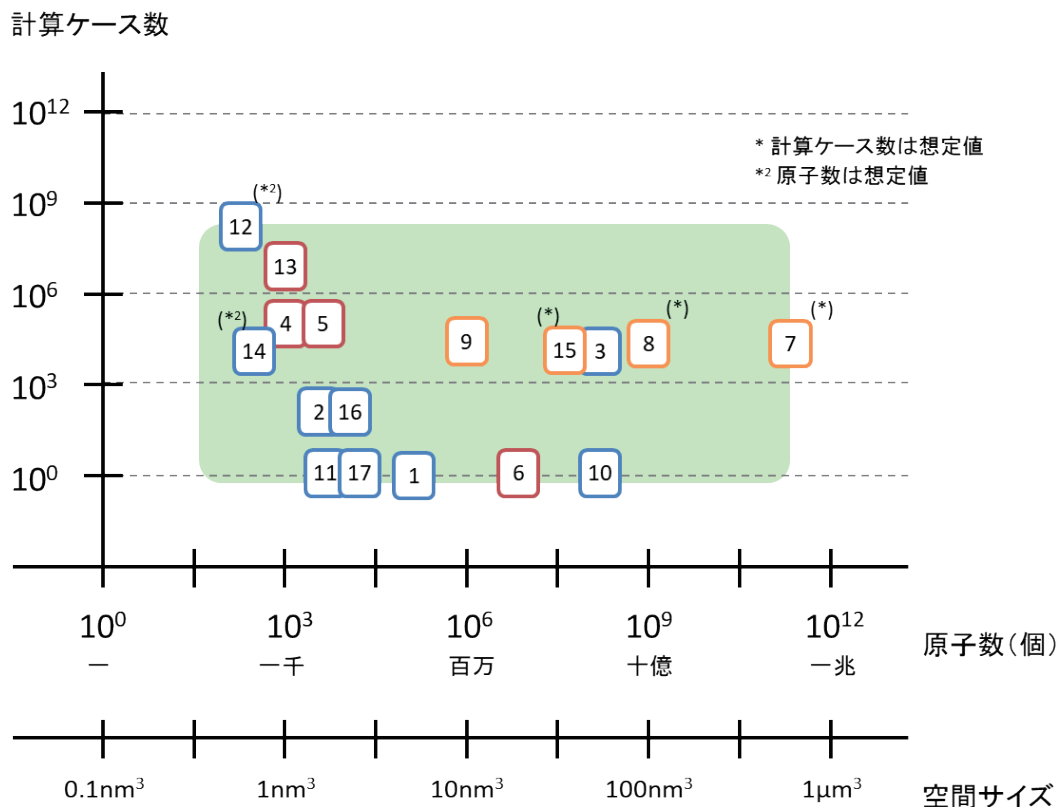


図 1 物質科学分野において次世代ハイパフォーマンス・コンピューティングにおける計算規模の到達目標
 横軸は原子数、縦軸は計算ケース数で整理してプロットした。
 横軸については、1 原子が占める空間サイズを 0.1nm^3 と仮定して、原子数から変換した。

この図から読み取れる最も重要なことは、青色、赤色のプロットの位置から、ポスト京の実現を目指す数年先の未来においては、「原子数拡大型」方式が到達できる空間スケールは、 10^9 個レベルの原子数に対応するサブマイクロスケール程度ということである。

将来の予測に関しては、計算機がこの先も 10 年で 1,000 倍のペースで発展する場合、アボガドロ数程度の原子を扱えるまでの時間は次のように見積もられる。まず、多くの第一原理計算が $O(N^3)$ と呼ばれ、 N 倍の原子数を扱うために、 N^3 のオーダーで計算量が増大する。 10^9 から 10^{23} に拡大するためには、 $(10^{14})^3 = 10^{42}$ の計算量を確保する必要があり、140 年を要する計算になる。ただし、計算上の工夫により原子数に対して計算量が比例する計算方式も考案されている。この方

式は $O(N)$ と呼ばれ、 $O(N^3)$ に比べて扱える原子数が多い。図 1 の中では、番号 3 や 10 がそれに対応する。 $O(N)$ の場合は、アボガドロ数程度の原子を扱えるようになるには、40–50 年が必要と見積もられる。

いずれにせよ、第一原理計算を大規模化して、経験的パラメータを用いることなくミクロ挙動からマクロ現象を直接説明しようとする「原子数拡大型」の方式は、マクロな現象と物理的原理との間の関係性を明らかにする方法論として魅力的であるが、これまで見てきたように計算量の制約からマクロな現象を記述できる段階に至るには、半世紀以上の時間を待つ必要があると考えられる。

4. マルチスケール連成解析

実際の材料を理解し、制御し、応用してこられたのは、電子状態のレベルから実用的なバルク材料のレベルに至る幅広いスケール領域にわたって、スケールごとに、材料の構造と性質を解明してきたからである。これは材料のマルチスケール解析と呼ばれている。実験的手法はもちろんのこと、各スケールでのシミュレーション手法も発達している。

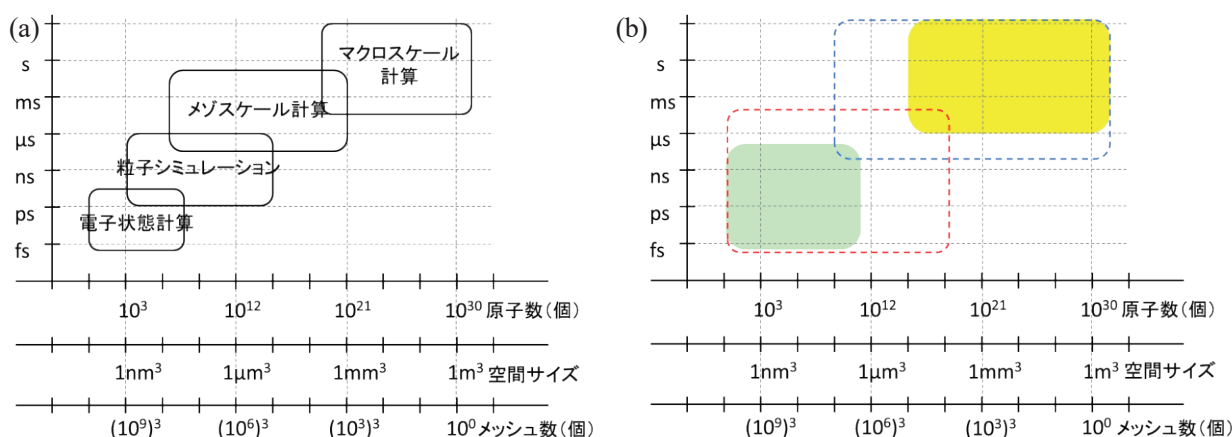


図 2 シミュレーション手法が対象とする時空間スケール

(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⁸⁾、(b) 文献[1]において議論されている計算可能な時空間スケールの現状と到達目標（量子計算：黄緑ハッチが現状、赤枠が到達目標；有限要素計算：黄色ハッチが現状、青枠が到達目標）。なお、(a)(b)のいずれも縦軸を時間スケール、横軸を空間スケールとし、プロット範囲は同一である。横軸の空間スケールは、1 原子が占める空間サイズを 0.1nm³ と仮定して、原子数から変換した。同時に、有限要素計算のメッシュ数は、1m³ の体積を等しく分割した際の立方体の体積と空間サイズが一致するように変換している。

図 2(a)は、シミュレーション手法ごとに、現時点でどのような時空間スケールを対象にしているのかを取りまとめた例の一つである。電子状態計算、粒子シミュレーション、メソスケール計算、マクロスケール計算に 4 分類し、それぞれの対象範囲を矩形領域で示している。それぞれの大きさはコンピュータの計算能力の増大とともに拡大し、したがって、図 2(a)に見られる手法間の重なる領域も時間の経過とともに拡大する。

この重なりにより、「対象とする時空間スケール領域の異なる手法の接続」という考え方が現実味を帯びてくる。複数の手法を接続する解析は、マルチスケール連成解析と呼ばれることが多い。

⁸⁾ 小野寺秀博ら，“計算材料科学の進展と展望”，鉄と鋼，100 (10)，1207，2014 の Fig.1 を著者が再構成。

例えば、計算科学ロードマップ 2017[1]では、量子計算もしくは粒子シミュレーションと連続体力学をベースとした有限要素法の計算を接続する構想が描かれている。そのスケール感を表したのが、図 2(b)である。赤色と青色で書かれた点線の矩形領域が、それぞれ、粒子シミュレーションと有限要素法の計算が目指すべきスケール領域を表し、 μm^3 の領域で共有部分を持つことが分かる。この領域で、粒子シミュレーションから計算されたパラメータを有限要素法に引き渡して、マクロ領域の予測を行うのである。

なお、図 2(b)には、黄緑色と黄色のハッチングで示した矩形領域もプロットした。これは、ポスト京において実現を目指す第一原理計算と有限要素計算の計算目標スケールを示している。とくに黄緑色の領域については、同様にハッチングされた図 1 の領域と対応している。これらの図から、ポスト京においても、第一原理計算と有限要素計算の直接的な接続は難しく、メソスケール領域を取り扱う計算手法がマクロ物性の予測に欠かせないということが分かる。

こうしたマルチスケール連成解析については、様々な事例が報告されつつある。ここでは、材料強度設計と熱電素子材料設計の研究例を紹介する。

4.1 材料強度設計の例⁹⁾

材料の強さは、電子の動きが生み出す原子間結合に支配されるが、実材料の強度は、センチメートルスケールでの機能が問題である。実材料の強度を司るのは、結晶粒の間の界面（粒界）や析出物などの内部組織であることが知られている。これらの内部組織のスケールは、電子・原子のスケールであるナノスケールと、実材料のスケールであるセンチメートルスケールの中間に位置する。したがって、強度の発現は、ミクロな電子・原子の挙動に端を発し、メソスケールの内部組織を介して支配される、典型的なマルチスケール現象として理解される。

こうした背景から、毛利らは、Fe-Si 合金を例に、計算材料科学を駆使したマルチスケール材料設計に挑んだ。第一原理計算と分子動力学計算で求めた材料定数を、有限要素法解析に用いることで、Fe-Si 系多結晶体の応力-ひずみ曲線を導出し、Si 添加による降伏応力の上昇を再現した。

ミクロスケールの手法とマクロスケールの手法を結びつけるマルチスケールアプローチの先駆的な成果として評価された。他にも、Fe 系材料の強さが、ミクロレベルの振る舞いである磁氣的性質と強く関連していることを明らかにした。また、Si 原子の振る舞いが強さに与える影響を、電子論と分子動力学法を用いて解析し、メソスケールにおける結晶粒界と転位の挙動を可視化することに成功した。

4.2 熱電素子材料設計の例¹⁰⁾

熱エネルギーを直接電気エネルギーに変換する熱電変換は、様々な用途での応用が見込まれているが、変換効率の向上が大きな課題となっている。そのためには、電気伝導をなるべくそこなわずに、熱伝導率を低減することが必要である。こうした背景から、塩見らは、熱電素子の変換効率向上に向けた材料設計とエンジニアリングを目的として、フォノン輸送の理解に基づくナノ構造化材料の設計を行った。

ナノ結晶の粒径がフォノン平均自由行程よりも十分に小さい場合、フォノンは他のフォノンには散乱されずに界面によって散乱される。このとき、平均自由行程は粒径で制限され、粒内の熱伝導率は単結晶のそれよりも小さくなる（伝導率のサイズ効果）。ナノ結晶の粒径を電子の平均自由行程よりも小さく保てば、フォノンの輸送を選択的に阻害でき、電気伝導をそれほど犠牲にす

⁹⁾ 毛利哲夫 (研究代表者), 研究課題 “ハミルトニアンからの材料強度設計 (H22 年度-H26 年度)”, JST 産学共創基礎基盤研究プログラム技術テーマ “革新的構造用金属材料創製を目指したヘテロ構造制御に基づく新指導原理の構築”。

¹⁰⁾ 塩見淳一郎, “フォノンエンジニアリングによる熱電材料の開発”, 伝熱, 55 (230), 9-17, 2016-01。

ることなく、熱伝導率を低減できる。以上が、熱電素子の変換効率を向上させる指導原理である。

ナノ結晶の構造に応じたフォノン輸送を出発点としてマクロ特性である熱伝導を予測する試みが、様々な計算手法を組合せたマルチスケール練成計算により行われた。まず、第一原理計算を用いて非調和原子間力定数を導出し、これをもとに格子振動法、分子動力学法を組合せて、単結晶内のフォノン輸送特性（分散関係）を計算する。得られた輸送特性をもとに、フォノン気体のボルツマン輸送方程式（フォノンの散乱問題）をモンテカルロ法で解くが、このときに必要な、原子レベルの界面構造に依存して決まる界面におけるフォノンの透過率は、別途、分子動力学法と非平衡グリーン関数法を組合せて求めておいたパラメータを用いる。

以上の方法で、平均粒径数 10nm のナノ結晶が数 1000 粒寄り集まったナノ多結晶体に対して、マクロ特性である熱伝導率を、経験的パラメータを用いることなく、ナノ結晶粒径と界面構造に応じて計算した。

4.3 マルチスケール連成解析における検証/実証および試行錯誤の不可避

以上の研究例に見られるように、マルチスケール連成解析では、ミクロスケール側の手法で得られる計算結果を、マクロ側の手法の特徴量に引き渡すことが行われる。これにより、第一原理計算から出発して、経験的パラメータを用いることなく、マクロ物性までを計算できる。とはいえ、モデルの組合せのなかで取り入れるべき因子を考慮しなかったり、それぞれのモデルが記述可能な範囲を外れていたりすれば、当然、予測は外れてしまう。このためマルチスケール連成解析では、実証/検証という段階は不可避ということである。もし、満足な精度で予測できない場合は、モデルの組合せ方や考慮すべき因子を見直す必要があり、ここに試行錯誤が発生する。

新材料の創製や、新機能の発現、既存材料の適用という観点から考えると、マルチスケール連成解析は有用であるが、こうした検証や試行錯誤の手間をなるべく少なくすることが重要である。この課題に対して、次節以降では、試行錯誤を含めた設計工程をコンピュータ上で完結させることによりものづくりの工程を革新した「Computer Aided Engineering (CAE)」に注目する。とりわけ、現在注目を浴びている 1D CAE[2]と呼ばれる手法と材料分野におけるマルチスケール連成解析の融合について論じてゆく。

5. 計算機が支援する試行錯誤の低減

CAE は、対象物を計算機上に模擬することで、設計と試作の試行錯誤をコンピュータ上で完結させる技術である。これにより、設計の効率化や開発期間の短縮がもたらされ、ものづくりに大変革をもたらした。通常、CAE は、有限要素法を中心として「構造」に注目し、コンピュータ上で構造を 3 次元的に精緻に模擬する。このことから 3D CAE と呼ばれることがある。

一方、近年、3D CAE に比して、1D CAE[2]と呼ばれる設計手法が提案され、注目を浴びている。その特徴として、精度や精緻さを問題にするまえに、機能に注目して全体像を俯瞰することが挙げられる。同様の考え方は、とくに自動車業界等においては、Model-Based Development (MBD) と呼ばれることも多い。

1D CAE では、例えば、デバイスの設計を行うのに、各部品の構造を気にせず、質量やバネ定数と言った離散情報で各部品を表現する。次に、それらの離散情報間を、例えば物理モデルなどを用いて繋ぎあわせ、システム全体として俯瞰する。続いて、離散情報の最適化を行い、各部品に対する要求仕様を決定する。その後、3D CAE を用い、見出された最適値を実現するように各部品の構造を設計する。その際得られた詳細情報は、1D CAE で注目する離散情報にフィードバックし、改めてシステム全体としての機能をシミュレーションベースで検証する。こうした段階を経て、1D CAE と 3D CAE の解析を行き来しながら、システムおよび個別設計の成立性を確認

した後、実際の製造を開始する、というものである[2]。

3D CAE と 1D CAE の対比は、材料シミュレーション技術を考える上でも示唆的である。「原子数拡大型」の方法やマルチスケール連成解析は、時空間における材料の構造を、原子レベルから精緻に模擬するという意味で、3D CAE 的である。しかしながら、これまで見てきたように、前者には、第一原理計算の記述可能範囲の問題と、計算量の問題が避けられない。また、後者については、計算量としては実行可能になりつつあるものの、支配因子の選定やモデルの組合せ方の点で試行錯誤が避けられない。

こうした現状に対して、機能のつながりに注目し、その全体最適化を行う 1D CAE を材料分野で実現し、3D CAE 的な手法を用いた材料構造の分析と連携できたならば、「原子数拡大型」がマイクロスケールに達しない問題、およびマルチスケール連成解析の試行錯誤の問題を低減することが期待できる。

また、先行している 1D CAE を分析すると、これまで LCS にて考察を重ねてきた「データ活用型材料研究」のコンセプトとよく整合する。このことについて、次節で詳しく述べる。

6. 材料版 1D CAE とデータ活用型材料研究

自動車分野をはじめ、すでに活用されている 1D CAE の既存フレームワークを分析すると、1D CAE に求められる機能要件は次のように整理できる。

- 6.1 対象物を構成要素に分解し、各要素の機能を離散的パラメータで表現できること
- 6.2 各種制約事項（価値や強みなど社会的制約、使用環境など物理的制約、その他）を離散的パラメータで表現できること
- 6.3 離散的指標間の関係性を（簡便に）表現できること
- 6.4 可能な限り、6.1–6.3 について整備済みの設計部品としてライブラリ化され、それらを組合せて解析対象を簡便にモデル化できること
- 6.5 指標間の関係性に基づき、全体最適化を行えること

これらの項目について、詳細を説明するとともに、材料分野への適用について考察する。

6.1 対象物を構成要素に分解し、各要素の機能を離散的パラメータで表現できること

設計する対象を要素に分解し、それぞれの要素の特徴を離散的パラメータで表現する。材料分野への適用については、材料物性を記述する機能パラメータと、各階層の構造上の特徴を記述する構造パラメータなどが、まずは重要であることを、データ活用型材料研究に関しての過去の LCS 提案書¹¹⁾[3],[4]において分析済みである。

6.2 各種制約事項を離散的パラメータで表現できること

設計するシステムの仕様を決めるのに必要な条件を離散的パラメータで表現する。これには、コストや環境性能はもちろん、システムが人間にもたらす快適さなどの主観的な条件も含まれる。材料に関して言えば、材料が本来持つ特性を、それがおかれる環境下で如何に発揮されるか、という観点が重要であり、材料の「性能」と呼ばれる。例えば、構造材料における疲労破壊やクリープ破壊は、環境と材料の相互作用によって決まる時間依存現象であり、その特徴を、標準化された試験に基づく離散的パラメータで表現する。低炭素技術に関しては、文献[3],[4]で議論したと

¹¹⁾ 低炭素社会の実現に向けた技術および経済・社会の定量的シナリオに基づくイノベーション政策立案のための提案書、科学技術振興機構低炭素社会戦略センター（以下、LCS 提案書）。

おり、LCS の活動において社会制約や価値観などの観点に基づくパラメータが議論されてきており、こうしたパラメータを設計時に考慮することが、材料技術も含めた技術の社会実装を効果的に進める観点から極めて重要である。

6.3 離散的指標間の関係性を（簡便に）表現できること

構造にまで立ち入らずに、離散的指標間の関係性のみに注目する。その関係性を記述する際には、単純な物理モデルや分野で蓄積された知見に基づく経験式などを利用する場合もあれば、データ相関関係から導く統計的モデルを利用する場合もある。物理モデルのように入力から出力を計算する根拠が明らかなモデルをホワイトボックスモデル、ニューラルネットワークのように入力に対して何らかの出力を行うが、その計算根拠が不明なモデルをブラックボックスモデルと呼ぶことがある。材料分野への適用を考えた場合、とくに、ブラックボックスモデルの構築については、インフォマティクス技術を如何に応用するかがポイントとなる。

6.4 可能な限り、6.1-6.3 について整備済みの設計部品としてライブラリ化され、それらを組合せて解析対象を簡便にモデル化できること

ID CAE では、対象を詳細に把握するのではなく、大まかで良いので機能を全体的に俯瞰できることが重要である。そのためには、モデルの精度は多少犠牲になってもよく、とりあえず手元によく使われる要素モデルをライブラリとして揃えておき、それを組合せて対象の全体像を記述することに注力できる環境を準備することが必要である。材料分野への適用を考えた場合、データ活用型材料研究に関しての過去の LCS 提案書[4]でも議論した語彙集とは、6.1 や 6.2 のライブラリとみなすことができる。また、予測モデルについても、従来からの経験則を利活用可能な形で集積し、探しやすく整理しておくことが求められる。

6.5 指標間の関係性に基づき、全体最適化を行えること

全体最適化の指標は、設計者に委ねられる。その意味で、意思決定補助・設計補助ツールとして、ユーザの意向に沿った最適化計算が行えることが必要である。材料分野においては、研究開発段階では、材料特性を最大化するような最適化を行う場合が多いが、ID CAE では、社会実装を意識した上での最適化が重要である。このことは、データ活用型材料研究に関しての過去の LCS 提案書[3],[4]においても議論した。

7. 政策立案のための提案

低炭素化技術実装の観点においても、材料という非常に複雑な対象を制御・応用する観点においても、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、本稿で考察してきたように、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。本稿では、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」と呼ぶことを提案する。そして、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。

このプログラムを推進する上で礎となるものは、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。以下に示すような具体的な方策を実行することで、関連分野であ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をはじめとして、様々な分野からの人材を糾合した統合的コミュニティを

確立するとともに、そのコミュニティ内で共通に用いられるバーチャルプラットフォームが確立されることを目指す：

- コストエンジニアリングに基づく低炭素イノベーション実現に向けた材料研究の未踏研究領域の探索
- 材料分野における 1D CAE+3D CAE 統合計算環境のアーキテクチャ設計と実装
- 上記統合計算環境に組み込み可能な予測モデル構築コンペティションの実施
- ラウンドロビンテスト¹²⁾に基づく検証データ生成
- 上記統合計算環境を活用した産学連携研究の実施

本提案は、目指す方向性から、内閣府の科学技術イノベーション総合戦略[5]の統合型材料開発を具現化する例の一つと位置づけることが可能である。

参考文献

- [1] 今後の HPCI を使った計算科学発展のための検討会編, “計算科学ロードマップ 2017”, http://hpci-aplfs.aics.riken.jp/document/roadmap2017/roadmap_170713.pdf, 最終アクセス確認 2017 年 11 月 10 日.
- [2] 1D CAE については、例えば、大富他, “1DCAE によるものづくりの革新”, 東芝レビュー, 67 (7), 7, 2012.
- [3] 低炭素社会の実現に向けた技術および経済・社会の定量的シナリオに基づくイノベーション政策立案のための提案書, “低炭素社会実現に向けたデータ活用型材料研究”, 科学技術振興機構低炭素社会戦略センター, LCS-FY2014-PP-12, 2015 年 3 月.
- [4] 低炭素社会の実現に向けた技術および経済・社会の定量的シナリオに基づくイノベーション政策立案のための提案書, “低炭素社会実現に向けたデータ活用型材料研究 (Vol.2)”, 科学技術振興機構低炭素社会戦略センター, LCS-FY2015-PP-09, 2016 年 3 月.
- [5] 内閣府, “科学技術イノベーション総合戦略 2017”, <http://www8.cao.go.jp/cstp/sogosenryaku/2017.html>, 最終アクセス確認 2017 年 11 月 10 日.

¹²⁾ 測定者の技量を含めて測定方法や測定装置の信頼性を検証するために、複数の試験機関に同一試料を回して測定を行う共同作業の一方法。

低炭素社会の実現に向けた
技術および経済・社会の定量的シナリオに基づく
イノベーション政策立案のための提案書

技術開発編

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－

平成 30 年 2 月

Synthetic Materials Design:
Fusion of 1D CAE and Data-utilized Materials Research
Strategy for Technology Development,
Proposal Paper for Policy Making and Governmental Action
toward Low Carbon Societies,
Center for Low Carbon Society Strategy,
Japan Science and Technology Agency,
2018.2

国立研究開発法人科学技術振興機構 低炭素社会戦略センター

本提案書に関するお問い合わせ先

- 提案内容について・・・低炭素社会戦略センター 特任研究員 門平 卓也 (Takuya KADOHIRA)
- 低炭素社会戦略センターの取り組みについて・・・低炭素社会戦略センター 企画運営室

〒102-8666 東京都千代田区四番町5-3 サイエンスプラザ4 階
TEL : 03-6272-9270 FAX : 03-6272-9273 E-mail : lcs@jst.go.jp
<https://www.jst.go.jp/lcs/>

© 2018 JST/LCS

許可無く複写・複製することを禁じます。
引用を行う際は、必ず出典を記述願います。
