

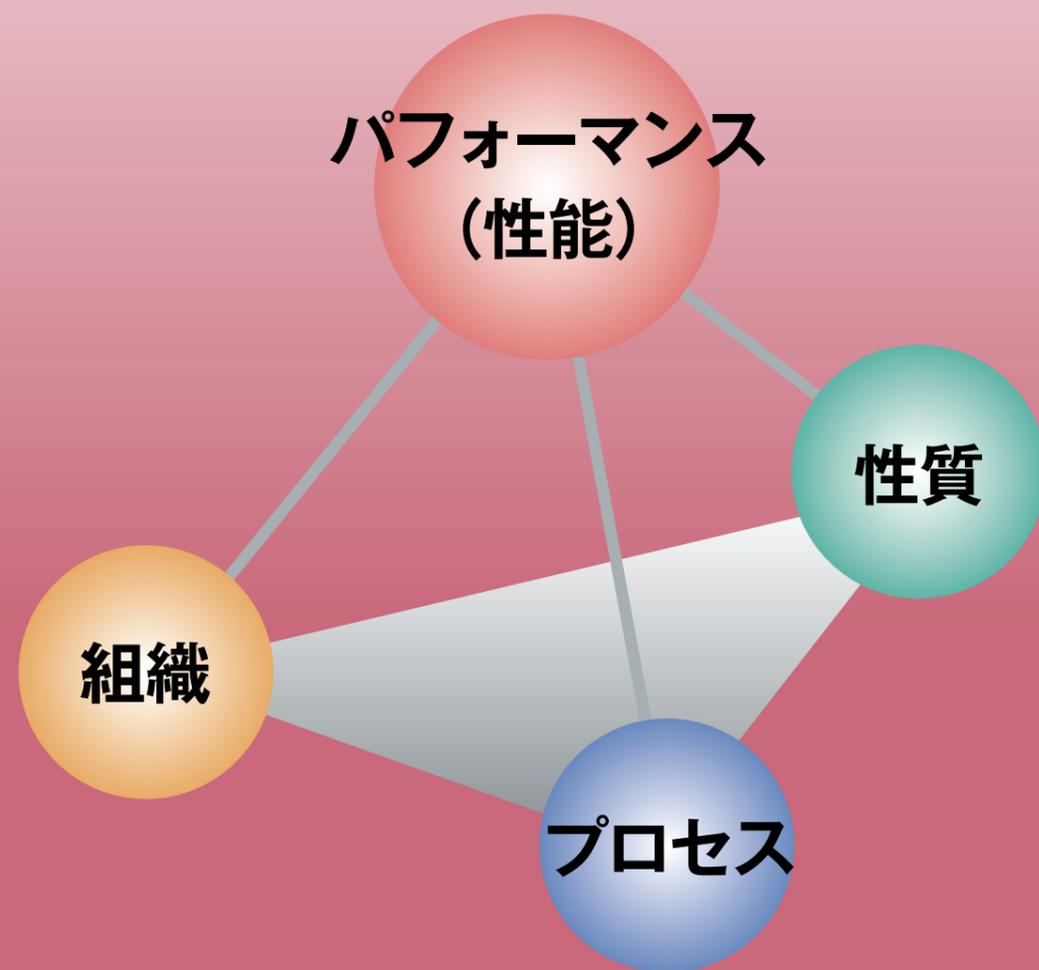
材料科学の英知を結集する

優れた構造材料を、より早く創出する開発手法「マテリアルズインテグレーション」

航空機や自動車、ビルや橋のような建築物まで、物の形を保つ素材が構造材料である。素材は、鉄やアルミニウムなどの金属、セラミックス、木材や高分子材料などさまざま。耐熱性、耐食性、高剛性、靱（じん）性を生かして、適材適所で活用されている。「戦略的イノベーション創造プログラム (SIP)」の課題のひとつ「革新的構造材料」では、航空機の性能を高める革新的な材料の

開発をめざす。ねらいの1つが、「マテリアルズインテグレーション」。材料開発の優れた経験や暗黙知、理論、実験の成果と、データ科学やシミュレーション、AI(人工知能)などの計算科学を融合することで、材料開発を飛躍的に効率化することをめざす。その挑戦的な取り組みを紹介する。

材料を構成する4要素



温めた「逆問題」で、航空機開発に新境地を



岸 輝雄 (きし てるお)

東京大学名誉教授 / 物質・材料研究機構名誉顧問
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」プログラムディレクター

1969年東京大学大学院工学系博士課程修了(工学博士)。74年東京大学助教授、88年同大学先端科学技術研究センター教授。95年同センター長。97年通商産業省工業技術院産業技術融合領域研究所所長。2000年東京大学名誉教授。01年物質・材料研究機構理事、03年日本物学会議副会長、07年日本工学会会長、13年新構造材料技術研究組合理事長、14年内閣府プログラムディレクター、15年外務省外務大臣科学技術顧問参与。

SIPの「革新的構造材料」は、強く、軽く、熱にも強い新しい構造材料を開発し、日本の航空機産業を成長させることをめざしている。「マテリアルズインテグレーション (MI)」という新しい材料開発手法の創出にも挑戦している。MIは材料科学をどのように変えていくのだろうか。

ターゲットを航空機の構造材料に

内閣府の「戦略的イノベーション創造プログラム (SIP)」は、2014年にスタートした。総合科学技術・イノベーション会議 (CSTI) が司令塔となり、府省や分野の枠を超えて科学技術イノベーションを起こそうという意欲的な大型プロジェクトである。その課題の1つが、東京大学の岸輝雄名誉教授がプログラムディレクターとして統括する「革新的構造材料」だ。

500人前後の乗客を乗せて音速に近い速度で飛ぶ大型ジェット旅客機は、安全かつエネルギー効率の高い輸送が要求される。そのために、高い強度だけでなく、材料の軽さ、

そして耐熱をも両立する機体材料が求められる。一方、高層ビルは、頑丈さだけでなく地震の揺れにも耐えるしなやかさが構造材に必要だ。物にはそれぞれの役割を果たすために求められる性能や品質があり、それに深く関わっているのが構造材料である。

長大橋、柔構造の高層ビル、軽く丈夫な自動車などの開発で豊富な実績をもつ日本は、高性能な構造材料の開発で世界をリードしており、国内でも重要な産業となっている。「しかし、丈夫で軽だけでなく、耐熱性を求められる航空機の材料分野では、日本はなかなか世界をリードできていません。SIP革新的構造材料では主に、耐熱性に重点をおき、航空機用の革新的構造材料を開発することで、

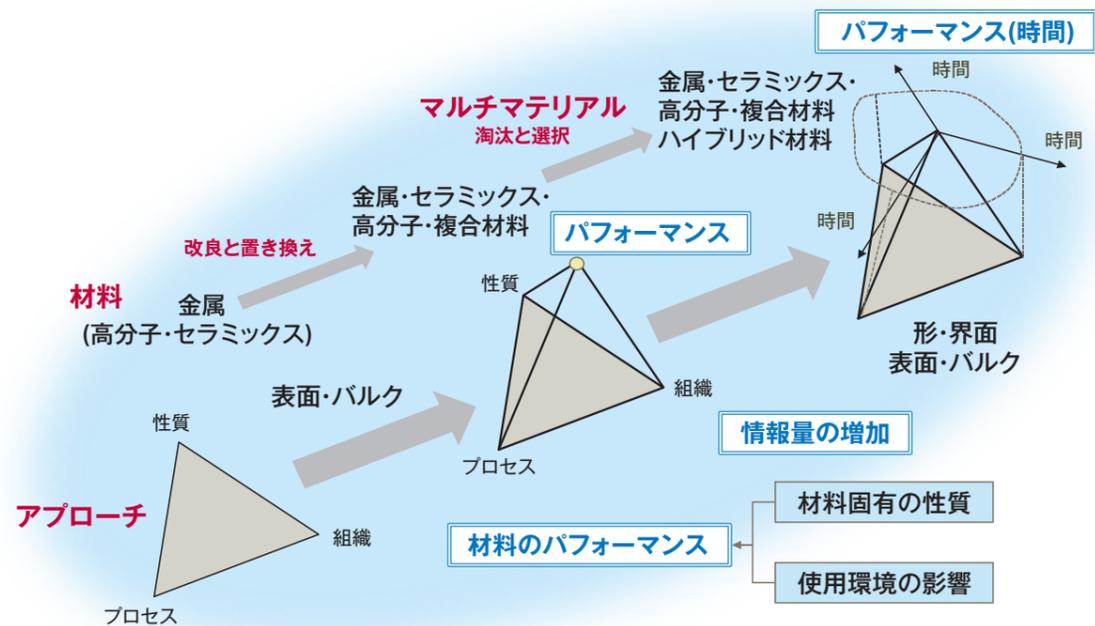
日本の航空機産業を盛り上げたいのです」と岸さんは語る。

そのためのテーマは4つ。航空機用樹脂の開発とFRP(繊維強化プラスチック)の開発、耐熱合金・金属間化合物などの開発、耐環境性セラミックスコーティングの開発、マテリアルズインテグレーション (MI) である。

耐熱性は3つのレベルに分け、300℃程度までに耐える樹脂複合材料、1000℃程度までの金属系材料、1300～1400℃までのセラミックス複合材料の開発をめざす。

4つ目のMIとは、材料の組織や性能(パフォーマンス)を予測するためのシステムや方法論を統合した開発支援ツールである。

ただし、岸さんのめざすMIは単なるシミュ



SIP革新的構造材料のマテリアルズインテグレーションでは、プロセス、組織、性質という従来の材料研究に加えて使用時のパフォーマンスを導入し、求められるパフォーマンスの実現・解決に必要な基礎基盤技術と結び付ける。材料種類の壁を超えたマルチマテリアル時代にも役立つことを視野に入れている。

レーションソフトではないという。「シミュレーション等の計算手法だけではありません。材料工学における既存の理論や、実験データ、そして研究者や技術者の『経験と勘』というもので取り込み、それをつなぎ、システム化していきます。そのシステムを用い、材料の開発や製造にかかる時間を短縮していきます。かなり挑戦的なことですが、取り組み意義は大きいと考え、材料開発である他の3テーマとは独立したテーマにしました」。

手間、時間、コストの効率化を

材料の研究開発では、組織、プロセス、性質、パフォーマンスという4つの要素がある。「組織」とは、材料の中の原子のつながりや結晶の構成のことである。実用材料は小さな結晶が複雑に組み合わさってできており、空間的に見ると、その原子や原子サイズの欠陥の並び方、元素の分布は均一ではない。これらも材料学では組織と呼び、他の物質科学にない着目点としている。組織は、目視で確認できるマクロなスケールから、光学顕微鏡、さらには電子顕微鏡で観察して初めて見えてくるミクロなもので階層的に構成されており、材料の特性に大きく影響を与える。素材をどう加工すれば目的とする組織をつ

ることができるのか、いわば料理のレシピにあたるのが「プロセス」だ。それらによって「性質」が決まる。例えば、10トンの引っ張り力に耐えられる、ある力を加えたとどだけ変形するといった、材料固有の特性だ。その材料が実際に使われる際に発揮するのが「性能」だ。MIでは部材の実使用環境下での性能を「パフォーマンス」として、4つ目の要素としている。

構造材料は、建物や橋、発電所など、数10～100年という長い歳月で社会を支えるインフラに使用されるため、実際に長期間使われたときのパフォーマンスが問われる。例えば、湿度の多い環境に数万時間置いた場合、何万回も繰り返した力を加えた場合、パフォーマンスがどのように変化していくのか。1年は約9,000時間だから、10年使う製品では10万時間経ったときのパフォーマンスを確認しておかないと、安心して使うことはできない。

「そのため、特に構造材料の開発では、何年も、何十年もかけてパフォーマンスを評価する試験が行われてきました。しかし、4つの要素の関係は複雑で、『このプロセスでつくった構造の材料の性質がどのようなもので、別の材料と溶接したときにはどのようなパ

フォーマンスを示すか』といったことを評価するには、膨大な手間と時間、コストがかかっていました。優れた材料をより早く開発するには、そうした評価のための実験の回数を減らすなど、効率化を追求しなければなりません」と岸さん。

材料開発は、研究者や技術者の「経験と勘」に頼る部分が多い。理論や計算科学を導入しつつも、経験則に基づいて実験的に材料を合成する。その材料の構造やパフォーマンスをさまざまな角度から評価し、その結果をもとに次の実験に移り、また評価を繰り返しながら材料を探索していた。競争環境が厳しさを増す中では、そうした地道に実験を重ねる手法には限界がある。

MIでは、これまでに得られた材料科学の成果、理論、研究者の経験と知見、実験も活用しながら、データ解析やシミュレーション、人工知能 (AI) などの最先端の情報技術を融合させ、材料開発を総合的に支援することで、材料開発の飛躍的な効率化をめざしている。「情報技術を活用するというと、コンピューターの中で簡単にできてしまうように思われるかもしれませんが、それほど簡単なことではありません。実験も計算科学も同じぐらい重要で、シミュレーションだけではなく、実験

データを取り込んだデータ科学としての構築を重視しています。データを中心に材料の性質を解析していくことで、実験を効果的に行うことができるようになり、開発効率は大きく上がると考えられます」と強調する。

新たな「逆問題」の発想で挽回

さらに、岸さんが中心となって進めるMIには、欧米にはない独自の発想がある。それは「逆問題」の発想だ。

「このような素材を使って、こういうプロセスでつくれば、こんな組織になり、特別な性質とパフォーマンスをもつ材料になる」と、素材を出発点に考えるのが「順問題」だ。逆に、「こういうパフォーマンスの材料がほしい」という目標を定め、「それにはどの素材を用いて、どんな組織にすればいいか、そのためのプロセスはどうするか」と、さかのぼって考えていくのが逆問題だ。熟練の材料研究者による暗黙知や勘による材料開発は、逆問題を解くような考え方で進められることが多い。

「逆問題の発想こそが、効率的、効果的な材料開発には重要であり、これを実現できるようにしたことが、われわれのMIの最も大きなポイントです。「材料のつくり方(プロセス)と組織」「組織と性質」「性質と最終的なパフォーマンス」というように、すべての要素を一つながりで扱うことをめざして、それが実現できれば、新たな合理的な方法が可能になります。将来は、逆問題の解析から新しい材料開発ができるようにしたいというのが、大きな目標です」。

この逆問題の発想や、プロセス・組織・性質・パフォーマンスを一貫通貫につなぐシステムの構築に挑んでいるのは、現在のところ日本だけである。これまでに蓄積してきた材料分

野の知見や、実験データの取得に欠かせないセンサー技術などの強みも生かしながら、MIを実用化することができれば、日本の材料科学は新たな境地を切り拓き、さらに強くなると期待できる。

計算科学が「逆問題」を進化させた

逆問題は、岸さん自身の研究とも大きく関係している。岸さんの専門は構造材料の非破壊検査だ。ものが割れるときには、内部で体積や形状が変化する弾性波が生じる。これをセンサーでとらえて、材料の内部の変形のタイプや大きさ、角度などを分析してきた。1980～90年代に取り組んだのが、構造材料の変形、破壊の際に生じる弾性波をとらえて定量評価する方法だった。

そのときも「この材料にこのような力を加えると、こう割れる」という順問題ではなく、「このような割れ方は、こういう力がこの材料に加わったときに起こる。ということは、このような割れ方をしない構造材料は、こういう材料でこう作るよ」という逆問題から切り込んだ。

以来、逆問題を解く手法の確立は長らく岸さんの大きなテーマとなった。しかし、逆問題は、順問題と比べて逆にたどっていくための選択肢の数がはるかに多くなるため、計算で解くのは簡単ではない。コンピューターが高速化した近年になって、ようやく大規模な形で実現できる可能性が見えてきたのだ。

「現在、MIの基本概念はほぼでき上がっており、個々のモジュール情報や、組織、力学的性質の情報をつなぐ作業も順調に進んでいます。ここに時間・空間を織り込んでモジュールをつなぎ、できた材料の寿命まで予測するところをめざしています」と、岸さんは成果に

一定の手応えを感じている。寿命の予測にはまだ壁もあるが、夢は着々と実現に近づいているようだ。

「とはいえ、MIはSIPの研究期間(5年)だけで完結できるものではありません。現在、『金属材料』『セラミックスコーティング』『高分子材料』という3つの領域で、それぞれパフォーマンス予測システムの開発を進めています。まずは航空機用の材料をターゲットに、プログラム終了時にはある程度の精度で予測ができることを示す計画です。それで終わらせることなく、継続的に研究に取り組み、航空機用材料以外への適用や、逆問題への挑戦を続けていかなければなりません」。

そのためには、研究を継続するための拠点の整備や、産業界との連携など、解決すべき課題もあるが、SIPを通して日本の産学官連携が本格化しつつあることにも、岸さんは手応えを感じているという。

「産学連携の重要性が叫ばれて久しいが、これまでは両者の間に壁があり、技術革新や新産業の創出につながるような成果を、最初から産学が一体となってめざす、ほんとうの意味での連携はなかなか実現できませんでした。SIPでは、実社会で役立つ成果に学術面でどう貢献できるのかが明確であることから、現場の研究者たちの意識も変わり始めています。産学間の壁に、ようやく風穴が開き始めたと感じています」。

この産学の研究者たちの意識の変化が、成果として形になるのはまだ先のこともかもしれない。この新しい連携のあり方は、今後確実に大きな技術革新を生み出していく力となるだろう。産学連携とMIの相乗効果により、航空機産業にとどまらず日本の産業全体を大きく変えていくに違いない。

TRLで研究開発の現状をつかむ

SIP「革新的構造材料」は、TRL (Technology Readiness Level: 技術成熟度レベル) による管理を導入していることも特徴的だ。TRLは、開発中の技術が実用化にどれだけ近づいているかを9段階で示し、異なるタイプの技術の成熟度を定量的に比較できることから、航空機産業の技術開発を管理する上で欠かせない指標となっている。おおむね、レベル1～3は基礎研究段階、4～6

が実証実験のできる段階、7～8で実用化レベル、9で実運用となる。導入のメリットは、現状技術の位置づけを明確にできることだ。目標に対して現実的に向かいやすくなり、研究開発が促進できる。「革新的構造材料」では、耐熱樹脂材料はレベル5～6をめざした開発を進め、耐熱セラミックス材料の開発はレベル3程度の到達を見込んでいる。すべての研究開発に

TRLが適用できるわけではなく、MIはTRLによる管理が適さない種類のプロジェクトだ。ただ、TRLの考え方は、複数の分野にまたがる研究開発を早く、着実に推進するためには有効であり、今後は航空機分野に限らず、広く適用されていくかもしれない。

インタビュー

新しい材料開発システム、MIの可能性を拓く

インタビュー1 計算とデータ、知を組み合わせた性能予測の基盤をつくる



東京大学工学系研究科 小関敏彦 教授

材料の進化が構造体や製品の性能を高める

構造材料の進化は、それを利用する構造体や製品の性能や信頼性を向上させます。例えば、強度と延性を高めた鉄鋼材料の開発は、軽量で低燃費、かつ衝突安全性の高い自動車の開発を可能にします。火力発電の効率を上げCO₂排出量の低減を可能にするのは、より高温に耐えられるボイラー管やタービンの材料開発です。

グローバルな競争力や社会の一層の安心・安全、環境対応が求められる中、より高性能で信頼性の高い構造体や製品をより早く実現するには、優れた材料を効率よく開発する必要があります。日本は産業でも学術でも材料分野が強い国ですが、今後も国際的な競争力

を保ち、新たな材料の開発を先行し続けるには、材料開発の革新が必要です。

マテリアルズインテグレーション (MI) は、まさにそれをめざす取り組みです。MIでは、これまで蓄積されてきた多様な実験データや知をデータベース化し、材料プロセス中の組織形成や使用中の材料挙動のシミュレーションと組み合わせ、材料の性能を予測することをめざします。近年、データ科学の急速な発展により、データを駆使した予測や数値シミュレーションとのデータ同化による予測の高精度化が可能になりました。また、大規模でマルチスケールの多様なシミュレーション技術が発展してきました。MIではこうした技術を積極的に活用し、様々な材料組成やプロセスに対応する材料の時間依存の性能予測

を可能にします。

さらに、経験を積んだ材料研究者やエンジニアが行う材料の選択やプロセス条件の決定などの材料設計の流れをシステム内で再現・学習し、最適な材料性能を達成するための提案までできるようにし、幅広く活用できるツールに育てていきます。これによって、少ない実験・コストで最大の効果を得るとともに、新しい材料、優れた材料プロ

セスの効率的な開発を支援します。

「溶接」を例題にシステムを構築

MIシステムは、材料の組成や製造プロセスの条件、材料の使われる環境や条件を入力し、材料の性能を予測する様々なモジュール群を選んでつなぎ、入力から性能まで一貫した予測を可能にします。材料の性能は組織や構造に大きく依存するので、材料の組織予測を行うモジュール群、組織予測を組み入れて材料の性能予測を行うモジュール群、組織や性能の予測を支援するデータ分析やデータ同化を行うモジュール群を開発する3つのユニットと、それらのモジュールをつないで自在なワークフローを可能にし、誰もが利用できるような入出力のインターフェースを備えた統合システムを開発するユニットの4ユニット体制で進めています。

例題として「鋼の溶接」を取り上げ、組織予測と性能予測のモジュール群を開発し、統合システム上で一貫して動作することをめざしています。その完成後、統合システム上に多様な材料やプロセスのモジュール群を搭載し、汎用性の高いMIシステムに成長させていくつもりです。鋼は構造材料の中で最も広く使われ、構造体へは多くの場合、溶接して使われます。鋼の溶接部の組織は溶けて固まる複雑な熱サイクル中の相変態・析出を経てつくられるため、その予測モジュール群は他の多くの材料プロセスに適用できます。多くの場合、鋼の溶接部は母材より性能が低いため、実用上も重要な性能予測モジュール群の開発となり、それらは他の材料の性能予測にも広く適用できます。またこれまで、鋼の溶接部の性能のデータの蓄積は豊富であり、MIシステムがうまく機能しているか検証しやすい面もあります。もちろんプログラム全体で取り組んでいるNi合金やTi合金などの航空機用材料の性能予測への展開も取り組んでいきます。

この開発は拡張性の高いMIシステムの基盤を構築するもので、日本中の材料にかかわる様々な企業や研究機関、研究者が知恵とデータを結集するプラットフォームとなるように進めていきたいです。

インタビュー2 「マルチマテリアル」でものづくりを変え、新たな学術を作る



東京大学工学系研究科 香川豊 教授

適材適所の材料選択を可能に

ものづくりの世界では、マルチマテリアル化が進んでいます。マルチマテリアルとは、鋼板、アルミニウム、チタン、FRP (繊維強化プラスチック) などの素材それぞれが持つ優れた特性を生かしながら、適材適所で使用するという考え方です。背景には、地球温暖化対策としての低燃費化や高効率化、そのための軽量化という大きな流れがあります。また、金属材料や高分子材料の製造技術、成型技術も高度化し、従来の技術では出せなかったような性質やパフォーマンスを実現できるようになったこともあげられます。

例えば、航空機では、アルミニウムが使われてきた部分にCFRPが、自動車では、鋼板が使われてきた部分に、軽量のアルミニウムやFRPが使われるなど、最適な材料を選択することが増えてきました。マテリアルズインテグレーション (MI) が、金属材料を基礎としながら、セラミックスコーティングや高分子材料にも適用することをめざしているのは、そのようなマルチマテリアル化の動きとかがわっています。

ある用途や求めるパフォーマンスに対して、どの材料を選ぶのがいいのか、材料の種類を超えて選択肢を示せるシステムが可能になると、ものづくりの現場が変わるでしょう。高度な専門知識を持たない人でも最適な材料が選択できるようになれば、開発を効率化する上

で大きな助けになるはずですが。

また、学術面からも期待できることがあります。材料開発は工業的な側面からの発展が強く、金属とセラミックスと高分子を同じ学問体系で教えるようにはなっていないのです。MIの取り組みは、それぞれの材料に関する知識や理論をまとめ、固有の課題と共通する課題を整理することにもつながるため、学術的に体系化することにも貢献できると考えています。

異分野によるチーム編成

セラミックスコーティングとは、金属材料や高分子材料の表面にセラミックスの薄い膜を作ることで、熱、圧力、摩擦などの影響から材料を保護する、優れた表面処理技術です。主に航空機エンジンや発電タービンなど、高温・高圧にさらされる部品に使われます。このプログラムでも、航空機エンジン用部材の耐熱性や耐環境性を高めるコーティングのパフォーマンス予測を目標としています。将来の部材開発の国際連携を視野に入れて、アメリカ、イギリス、ドイツとの共同研究を取り入れています。

高分子材料には、たくさんの合成樹脂がありますが、まず航空機に用いられるエポキシ系樹脂をターゲットとしてパフォーマンス予測に取り組んでいます。特に、高分子材料のMIは、必要となる技術分野が広く、種類も多いため、化学だけでなく、数学、医学、物理、機械、計測など、さまざまな専門分野の研究者たちがチームを組んで連携しながら研究を進めています。

異分野の知を効果的に結びつけるチームを作るのは簡単なことではなく、プログラムの序盤はチーム編成に費やしました。しかし、そうした幅広い研究者を結集して1つの問題にチャレンジできるのは、SIPという大規模なプログラムだからこそ可能です。この取り組みがブレークスルーを生み出して材料科学に新しい風を吹き込み、新たな学問分野を生み出すことにつながるかもしれません。

構造材料は成熟分野とも言われていますが、取り組むべきテーマはまだたくさんありますし、MIという材料開発の新しい方法論を生み出していくことは、学術と産業の両面で日本の競争力を高めるはずですが、MIによって優れた材料が早く開発できることは、より環境に優しく快適な社会へと向かう原動力になるでしょう。

SIPのプログラムが終わったのちも、MIの完成をめざした取り組みは続きます。個別の研究テーマを採択する際には、若手研究者に門戸を開くことを意識してきましたが、このプログラムを通じて若手研究者が育つのを期待するとともに、MIそのものが人材育成の場となることも願っています。

マテリアルズインテグレーションによる材料学の体系化

