

戦略的イノベーション創造プログラム (SIP)

2018年度 研究開発成果等報告書

課題名：統合型材料開発システムによるマテリアル革命

チーム番号：A1～A5

研究開発課題名：先端的構造材料・プロセスに対応した
逆問題M I 基盤の構築

研究期間：2018年11月1日 ～ 2019年3月31日

研究 責任者	氏 名	出村 雅彦
	所属機関	国立研究開発法人物質・材料研究機構
	部 署	統合型材料開発・情報基盤部門
	役 職	副部門長

研究開発成果等の概要

マテリアルズインテグレーション（MI）は、材料の研究開発過程をデジタル化することで研究開発手法を刷新し、研究開発の時間とコストを削減しようという新しいコンセプトである。第1期SIP「革新的構造材料」では、実験、理論、経験、計算、情報工学を融合的に扱うためのMIシステムを開発し、プロセスから性能を予測するMI1.0について例題でコンセプト実証を行ってきた。この成果を受け、本研究開発では、MIを研究開発現場へ社会実装していくために、逆問題を取り扱え、かつ、先端構造材料・プロセスに対応できるMI2.0へと進化させる。

2018年11月から開始した本年度は、逆問題の定量的な目標設定、先端材料・プロセスにおける順方向の計算技術開発、MIシステムの社会実装に向けたシステム強化・データベース基盤技術開発に取り組んだ。計画に沿って着実に進めており、特にA領域としての逆問題の設定、研究開発体制の構築や必要な設備の導入が計画通りに進んだことから、次年度以降、目標達成に向けて進む基盤が確立できたと考える。次年度以降は、A領域における研究開発を着実に行いつつ、特にB領域、C領域との連携、終了後のMIシステムの将来運用体制について検討を進めていく。

本年度の各テーマにおける研究開発成果等の概要は以下の通り。

A1「材料開発及びプロセス最適化における逆問題解析」

A1では上記全体目標を達成するため、「A1-1 次世代高強度鋼 MI」「A1-2 次世代高強度 Al 合金 MI」「A1-3 高強度鋼の接合プロセス最適化 MI」「A1-4 耐熱鋼の接合プロセス最適化 MI」「A1-5 製品応用 MI」という5つのサブテーマを設定している。2018年度は各サブテーマにおける逆問題解析に必要な材料・プロセスに関するデータベースの構築に向けた整備計画、さらにはスパースモデリングやデータ同化手法等の情報科学的手法を用いた材料設計やプロセス最適化に関する逆問題解析アルゴリズムの開発指針を策定した。

A2「プロセスデザイン」

A2では、SIP第1期において開発を進めてきたマテリアルズインテグレーション（MI）技術を、航空宇宙分野などにおいて重要なニッケル合金あるいはチタン合金といった耐熱合金、及び、超耐熱セラミックス基複合材料（CMC）の開発に展開することを大きな柱としている。C領域での実部材開発と密接な連携のもと、開発したMI技術を提供し、高性能かつ高信頼性な部材開発を加速することを目的としている。材料プロセスとして、航空機での適用が始まりつつあり、世界中で激しい開発競争が展開されている3D積層造形や粉末冶金、鍛造プロセスを対象とし、求められる性能予測に対して、必要なモジュールの開発と、それらをつなぎ合わせたワークフロー構築を進めていく。構築した順問題解析のワークフローを基盤として、最適なプロセス条件や材料組成範囲などを、効率良く導き出す逆問題MI技術の開発を進め、MIによる材料開発の革新を図る。

本テーマは8つのサブテーマ（3D積層プロセスMI、急冷非平衡合金設計MI、粉末製造プロセス最適化MI、熱処理・特性予測MI、粉末焼結MI、鍛造性能MI、CMC MI、チタン焼結合金設計MI）で構成されており、2018年度は、まず各サブテーマについて対応するC領域課題との連携体制の構築と、対象とする材料や性能、定量目標について情報共有を進め、A2で開発す

る解析モジュールやワークフロー、計測および蓄積するデータについて開発方針を確定した。

また、プロセス及び材料データ収集のために導入する各装置の設計、及び仕様を確定し導入を進めた。

- (1) 3D 積層MI : プロセス時のき裂発生を抑制し、要求高温強度を満足する合金開発を支援する技術開発を目指し、き裂発生の予測あるいは抑制可能な材料設計技術の開発に着手した。
- (2) 急冷非平衡合金設計MI : 対象ニッケル合金について組織自由エネルギー法に基づいた非平衡状態図予測モジュールのプログラムコード設計に着手した。
- (3) 粉末製造プロセス最適化MI : ガスアトマイザーによるニッケル合金粉末製造予備試験を行った。粉末製造パラメータを確認し、プロセス最適化 MI 構築に必要な実験条件を検討した。
- (4) 熱処理・特性予測MI : 対象合金材料を準備し、疲労試験条件の選定と予備試験、析出機構解明、及び物性予測用第一原理モデルや順解析ワークフローの構築、に着手した。
- (5) 粉末焼結MI : 金属粉末成形体の焼結特性を計測するために必要な雰囲気制御焼結—圧縮試験装置の仕様を決定した。
- (6) 鍛造性能MI : 解析精度向上に向けた影響因子の抽出や、データ取得計画および検証方法の立案、鍛造時の温度変化定式化を進め、大ひずみ導入試験法を考案した。
- (7) CMC MI : CMC 文献データベースをもとに、2019 年以降に MI 化（試験結果のデータベース化、理論式・経験式の MI モジュール化）を行うための手法を検討した。
- (8) チタン焼結合金設計MI : 対象とする添加元素を含む固溶強化チタン合金における固溶量-格子定数変化量-強度特性の相関に関する実験データベース構築を進めた。また、第一原理計算により、それら添加元素が機械的特性に及ぼす影響を原子レベルで解明した。

A3「原子（分子）・構造体デザイン」

<量子化学計算>

樹脂を構成する分子の全原子について、既存の計算サーバー上で反応経路自動探索法 GRRM を駆使し、非経験的分子軌道法（第一原理量子化学計算法）で主剤と硬化剤の組み合わせによる反応過程を計算することで活性化エネルギーと反応熱を得た。巨大分子系であるネットワークポリマーの架橋反応の最小エネルギー経路を効率的に低コストで計算するために、計算には二点間探索法を用いた。得られた計算値を、共同で開発している GRRM/MC/MD 分子シミュレーション法に用いることで、硬化率や物性値の定量的議論が可能になった。

<分子シミュレーション>

MP/MS シミュレーション解析ツールに関して、MD 計算におけるポテンシャルや緩和条件の適正化、弾性率の推算方法の検討を行い、航空機用樹脂として、これまで一般的に使われている代表的なエポキシモノマーおよび硬化剤モノマーからなる一成分系熱硬化性樹脂の密度、弾性率、およびガラス転移温度の予測性能を評価した結果、予測精度を 10%程度で推定できることが確認できた。特に、エポキシモノマーと硬化剤モノマーの反応性に関して、半経験的分子軌道法 MOPAC により得られた活性化エネルギーの値を用いることで、従来の計算負荷の大きい密度汎関数法によらずとも、精度よく効率的な解析が可能になった。これにより、2019 年度は、MOPAC を東レのワークステーションに導入し、研究開発を加速することが可能となった。また、in-house の MD 計算

コードに対し、架橋反応モデル（架橋反応の生成コード）を連成させることに成功した。

また、高分子材料に広く用いられる汎用力場（DREIDING や AMBER 力場）を分子モデルに対して自動的にアサインし、in-house MD 計算コードで利用可能とするワークフローを確立した。これによって、多種多様な高分子材料の MD 計算を短時間で実行開始することが可能となった。

<メゾスコピックシミュレーション>

本年度は、まずは動的な GL 理論の基礎方程式の運動係数部分と自由エネルギー部分にそれぞれ局所濃度および局所温度に依存する運動係数と、自由エネルギーに架橋反応の進行に伴う時間依存の弾性エネルギー効果を付与したモデルを構築し、シミュレーションプログラムのプロトタイプを作成を行った。粗視化分子動力学シミュレーションとの連携を図るために、局所運動係数と局所架橋点密度を外部入力できるように設計する予定である。

<複合材構造部材シミュレーション>

層厚依存性を表現可能な、繊維と樹脂の特性から薄層 CFRP の層レベルの特性を計算するモデルを検討し、実験的に取得可能な層レベル特性からモデルパラメータを逆推定するための解析の試行を実施した。これにより、許容ひずみ（設計要求）に応じた層厚（薄層 CFRP の仕様を決定）を同定するなど、次年度以降に逆問題解析のためのツールを構築する環境が整った。また、曲線座標系繊維配向角を有する CFRP を単層板レベルで有限要素モデル化し、炭素繊維プリプレグテープ（トウ）の座屈荷重と変形挙動の推定を行った。同一材料でテープ幅が一定である場合、座屈荷重はテープ板厚 H とステアリング半径 R の比率 H/R に支配されていることを確認した。得られた結果を課題 B3 に適用し、単層板供試体を試作し妥当性を評価した。

A4 「MI 統合システム」

2018 年度では、MI システムの API（アプリケーションプログラミングインターフェース）の逆問題への応用を目的として、API の改良すべき項目、追加すべき機能の洗い出しを行った。さらにユーザーヒアリングによるインターフェースの改善事項の抽出、遠隔地ユーザのためのリモートアクセス環境の構築などを目的とした。

1. SIP 第 1 期で開発を行ったアプリケーションプログラミングインターフェース（API）の逆問題へ対応を目的に、次年度以降開発すべき機能を洗い出した。
2. MI システムのユーザ・インターフェースに関して、利用者の観点から、企業研究者利用時に行ったユーザビリティに関するヒアリングを元に改善すべき点をまとめた。
3. リモートアクセス制御に関して、遠隔地のユーザの利便性を上げることを目的とし、まずはリモートアクセスに対応できるインフラの整備を行った。

1 に関しては、API で実装済み機能を洗い出し、実際の作業でできないこと、手間がかかることをリスト化した。その結果、逆問題解析に耐えられる API のジョブ管理機能や、生成されたデータやワークフローの権限設定に関する機能、語彙インベントリの情報更新機能に関する API が必須と判断し、次年度以降の開発項目とすることとした。

2 に関しては、第 1 期の企業利用フェーズの際に、実際に企業研究者と話しあった結果、改善が必要な箇所を洗い出した。例えばデータのダウンロードの画面の問題、ファイルアクセス権限

設定の分かりにくさ、生成ファイルの取り扱いの問題、大量ジョブの管理、記述子に登録できないファイルの取り扱い、などの課題が見いだされた。次年度以降、システムへの影響の大きさなどを勘案しながら改修を進めていくこととする。

3に関しては、2018 年末に東京大学にて既存の MI システムを遠隔地から動作させることを可能とした。商用コードはライセンス規約の制限上、実装することはできないが、ライセンス規約に抵触しないオープンソースのコード(R や Python コード、もしくは SIP で構築された数値計算プログラム)などを中心に、外部アクセス可能なシステム構築を行った。その後、企業メンバーに実際にログインしてもらい、リモートアクセスが可能なことを確認した。

A5「構造材料データベース」

当該テーマは全体として構造材料に特有の組織（構造）に着目しながら、データを利活用するための仕組みを構築することであり、データ記述方式の設計と組織情報の定量化技術の開発を担う。本年度は、それぞれのサブテーマにおいて、今後活用していくことになる基盤技術について整備を進めるとともに、2019 年度に取り組む対象となる材料、逆問題課題を選定した。

具体的には、データ設計方式を記述するためのトップダウンアプローチとして、構造材料のミクロ組織について、基礎的な調査を実施、アーヘン工科大学の先行研究等における、3D オブジェクトとしての分類、HDF5 を用いた記述のあり方などを調査した。次の段階として、ミクロ組織の関連、ミクロ組織と材料パフォーマンスとの関連などについて、EMMC のグループなどと協調してオントロジーを開発する環境を整備しつつある。ボトムアップアプローチでは、クリープにおける溶接プロセス最適化及びニッケル基超合金における熱処理最適化を最初のターゲットとして設定し、これに取り組むための研究開発体制を構築した。

組織情報の定量化技術に関しては、スケールの異なる材料組織の 3D 観察を実現するために、専用観察装置の新規開発を行っており装置仕様の策定が概ね完了した。また、数理的なアプローチとして「HomCloud」等のパーシステントホモロジーツールについて、その高度化に向けた適用可能性の評価及び性能試験を行い、チタン合金の電子顕微鏡観察像を例題として、組織情報の定量化が可能となることを確認した。