

SIP高分子MIクラスターシンポジウム開催

高分子MIでは、長さはnmの分子レベルからmオーダーの大型バルク材料・構造体まで、時間はピコ秒から数十年までの範囲で生じた現象や性質が統一的に理解できるようデータベースを工夫しました。同時にシミュレーションに限らず、あらゆる解析式や経験式など科学技術の知識を駆使し、問題解決の道具を提供します。Length ScaleやTime Scaleを超えた普遍的な数学的記述子も取り入れ、そのソフトウェア開発も実施しました。本シンポジウムでは、これら多彩な成果を発表します。

SAMPE Japan先端材料技術展にて出展

「SAMPE Japan先端材料技術展」は先端材料技術協会が2年に一度開催している展示会で、材料とその加工・応用に関する技術を中心に、研究・開発、生産、利用ならびに教育に関する情報の発信の場となっています。SIP革新的構造材料では最新の成果の展示を通して、構造材料開発に関する最先端の情報を紹介します。

第4回先端計測拠点国際シンポジウムにて、SIPキャラバンの一環として国内セッションを併設

SIP先端計測拠点(D66)では、成果普及と国際連携促進のため毎年1回国際会議を開催しています(開催報告はURLを参照)。今年は、国内向けに日本語の国内セッションをキャラバンの一環として併催します。国際セッションでは、BAM、エアバス、ベルリン医科大学等の基調講演者や、国内の招待講演者から、金属、セラミックス、プラスチック構造材料開発の最新トピックスと、革新的構造材料の将来の夢に関する話題を提供頂くとともに、先端計測拠点のメンバーが最新成果を報告します。国内セッションでは、国際会議の話題の中から選ばれた招待講演に加え、SIP革新的構造材料の他ユニットと先端計測拠点との共同研究成果の一端を日本語で報告します。

大型シミュレータによる鍛造研究の現状及び展望(SIPキャラバンとしてシンポジウム開催)

12月14日(金)、NIMSにて表題のシンポジウムを開催します。当日は、航空機材料として使われているTi合金やNi基超合金を対象に、1500t大型鍛造シミュレータによって取得した材料データベースに基づいて確立された材料組織及び力学特性予測のモデリング技術を中心に、B21ユニットメンバーから現状及び展望を紹介します。また、SIP後も含めた今後の鍛造シミュレータ運用に関して、本成果を活用するオールジャパンの持続的な連携体制についてパネル討論を行います。なお、本シンポジウムはSIPキャラバンの一環として行われ、SIP革新的構造材料参加メンバーだけでなく、幅広い方々に参加頂けます。

SIP『革新的構造材料』成果報告会開催

平成26年度に発足したSIP革新的構造材料は、本年度が最終年度となります。今回の成果報告会は、5年間の研究開発の集大成として、講演、およびポスター発表により最新の研究成果を多くの方々に知って頂くと同時に、これらの発表を基にして、SIP革新的構造材料終了後の実用化・出口、拠点形成、研究継続を意識した議論を進める予定です。奮ってご参加ください。

■開催日時：2018年10月1日(月) 10:00-17:15
(交流会・ポスター発表 17:15-18:30)
■会場：東京大学駒場キャンパス ENEOSホール
先端科学技術研究センター 3号館南棟 1階
(東京都目黒区駒場4-6-1)
■詳細・申込：https://www.wpi-aimr.tohoku.ac.jp/SIP/index_symposium.html

■開催日時：2018年10月17日(水)-19日(金)
10:00-17:00
■会場：東京国際展示場(東京ビッグサイト)東ホール
(東京都江東区有明3-11-1)
■詳細・申込：https://biz.nikkan.co.jp/eve/sampe/

■開催日時：2018年11月15日(木)
午後(国際会議は、11/13午後から
11/15午前に同会場にて開催)
■会場：科学技術振興機構
東京本部(サイエンスプラザ) B1大会議室
(〒102-8666 東京都千代田区四番町5-3)
■詳細・申込：https://unit.aist.go.jp/tia-co/project/SIP-IMASM/sympo/2018/index_j.html

■開催日時：2018年12月14日(金)
10:00-17:15(交流会17:25-19:10)
■会場：国立研究開発法人 物質・材料研究機構
千現地区 研究本館1階 第1会議室
(茨城県つくば市千現1-2-1)
■詳細・申込：申込サイトは、近日中に http://www.nims.go.jp/へ開設予定

■開催日時：2019年1月29日(火)
10:00-17:00(予定)
■会場：イイノホール&カンファレンスセンター
(〒100-0011 東京都千代田区内幸町
2丁目1-1 飯野ビルディング)
■詳細・申込：https://www.jst.go.jp/sip/k03/sm4i/index.html/へ開設予定

Feature
1

国立研究開発法人 物質・材料研究機構
統合型材料開発・情報基盤部門 SIP-MIラボ長 渡邊 誠

MIシステムを通して
日本の材料開発の拠点を作りたい

Feature
2

航空機材料最前線——この人に聞く
JFEスチール株式会社 スチール研究所 石川 信行

新材料の開発で
ブレークスルーを生み出す

Feature D領域 MI拠点

新材料の研究開発では今、扱う材料の種類が広がり、アプローチの方法も多様化しています。求められる特性や性能も多くなり、材料内の組織は複雑になる一方です。今までの方法では新たな研究開発が難しくなりつつあります。マテリアルズインテグレーションシステム(MIシステム)は、多様な素材・プロセスの組み合わせから製造される部材・構造体の性能・寿命などを、理論や経験則、計算科学、データベースなどを融合して予測し、新材料の開発を桁違いに加速することが目的です。渡邊誠拠点長は「私たちの強みをより強くするシステムです」と、その有用性を訴えます。

MIシステムを通して日本の材料開発の拠点を作りたい



領域長／拠点長

小関 敏彦

東京大学 理事・副学長／工学系研究科教授
1983年東京大学工学系研究科修士課程(金属工学)修了。同年新日本製鐵(株)入社、鉄鋼材料の研究開発に従事。1994年米国MIT博士課程修了(材料工学、Sc.D)。2004年東京大学教授、2014年から副学長、2017年から現職。研究分野：凝固工学、計算熱力学、溶接・接合工学、鉄鋼材料学、材料組織シミュレーション。



拠点長

渡邊 誠

国立研究開発法人 物質・材料研究機構 統合型材料開発・情報基盤部門 SIP-MIラボ長
東京大学 先端科学研究センター 准教授
2000年東京大学大学院工学系研究科博士課程修了(工学博士)。同年から米国プリンストン大学、2002年から米国カリフォルニア大学サンタバーバラ校にて、耐熱コーティング材の研究開発に従事。2004年から物質・材料研究機構に着任、2016年から現職、2017年からクロスアポイント制度により、東大着任。研究分野：破壊力学、構造解析、溶射工学、非破壊評価、積層造形。

— MIシステムとは何か？

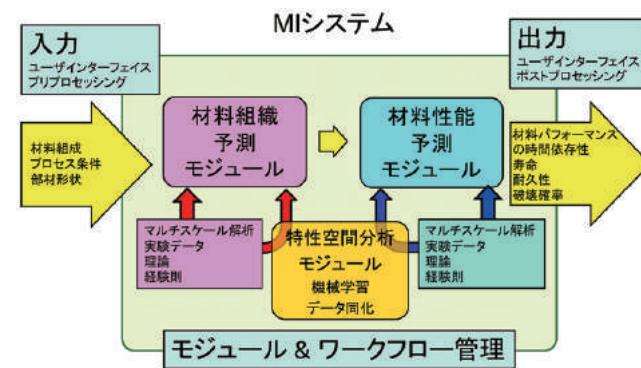
「単なるシミュレーションではありません。理論と経験と大量のデータで材料の特性や性能をコンピューターで予測するのです」

簡単に言えば、マテリアルズインテグレーションシステム(MIシステム)は、コンピューターの上で材料の性能を予測しようというものです。もし新たな材料の開発を始める前に、その性能を予測できれば、サンプルを作って組成と性能の関係を繰り返し調べるといった手間を減らせます。

一般に、材料の性能を調べる実験は時間がかかります。このMIシステムを構築できれば、このような実験の回数を大幅に減らせます。研究開発の時間を大幅に短縮でき、効率的な開発やコスト低減の実現、さらには材料選択や製造、加工プロセスの最適化、構造体の信頼性予測、診断・メンテナンス性の向上などもできるようになります。

当然、コンピューターのプログラムをいくら回しても、理論と計算だけで全てを正確に予測することはできません。しかし、不可能だからと言って諦めるのではなく、「できるところからやってみよう」というスタンスで、私たちは挑んでいます。全ての現象を理論だけで説明するのは不可能ですが、経験的な予測ならできる場合が多々あります。どんな理論があるか分からなくても、熟練の材料研究者であれば、「この組成ならこうなる」と経験的に分かたりするんですね。

過去の実験データが頭の中にあって、原因と結果を結び付



MIシステムの概念図

けているのです。それを式に書き出せば「経験式」となり、それをシステムに取り込めば、理論に基づいたシミュレーションの計算が完璧ではなくとも予測できるようになっていきます。このMIシステムは、単なるシミュレーションではありません。理論のシミュレーションと経験則、大量のデータを融合させて、コンピューターで予測するシステムです。

世界的に見て、日本は材料の分野で圧倒的な強さを誇っています。しかし昨今、急速な進歩を遂げている機械学習や人工知能などのデータサイエンスが、材料の分野にも浸透しつつあります。もしかしたら、AIに材料開発をうまく予想させるシステムを誰かが考え出すかもしれません。私たちが強いうちに、データサイエンスをいち早く取り入れることはとても重要なことなのです。このMIシステムの挑戦は、私たちの強みをさらに強くすることでもあります。

— どんな材料でも予測できるか？

「材料毎に性能が現れる仕組みは異なりますが、それぞれに対応する解析方法をシステム上に用意すれば、同じシステムでどんな材料でも対応できます」

構造材料の性能が生み出される仕組みは、材料毎に変わります。例えば、繰り返しの荷重で壊れる「疲労」や、高温で一定の重さが加わって壊れる「クリープ」などの性能は、材料の組織によってメカニズムが変わります。しかし、材料毎の個別データや解析方法を加えれば、システムはそのままでも様々な材料の予測ができるようになると思っています。その材料も、構造材料に限りません。人体の中で使うような機能性材料にも対応させることも可能で、私たちはそこも視野に入れています。

ただ、将来的にはどんな材料にも対応できるようにしたいのですが、システム開発の人数は限られていて、あらゆる材料を対象にすることは不可能です。そこで、私たちは「例題」として鉄鋼材料の溶接部をターゲットにしました。生産の現場では、切り分けた構造材料を溶接して使うことが多いですし、溶接のプロセスは単純ではないからです。

溶接するとき、金属は高い温度で一度溶けてから冷えて固まります。このとき、材料の中の組織はとても複雑なものになります。また、温度の変化によって結晶の構造が変わる「相変態」という現象も起きます。このような特徴を持つ溶接による変化の予測は非常に難しく、だからこそ「例題」として取

り上げ、「実際に予測できました」と言えるようになれば、「他の材料も予測できるだろう」と可能性を示すことができます。

それと、鉄鋼材料は、元素が多く入っていて、開発がとても難しい材料の一つです。日本はこの材料に長く取り組んできた歴史があり、多くのデータを蓄積しています。これらのデータからたくさんの経験式を作ることが可能で、こういった利点もあって、鉄鋼材料溶接部を今回の挑戦にふさわしい材料であると判断しました。

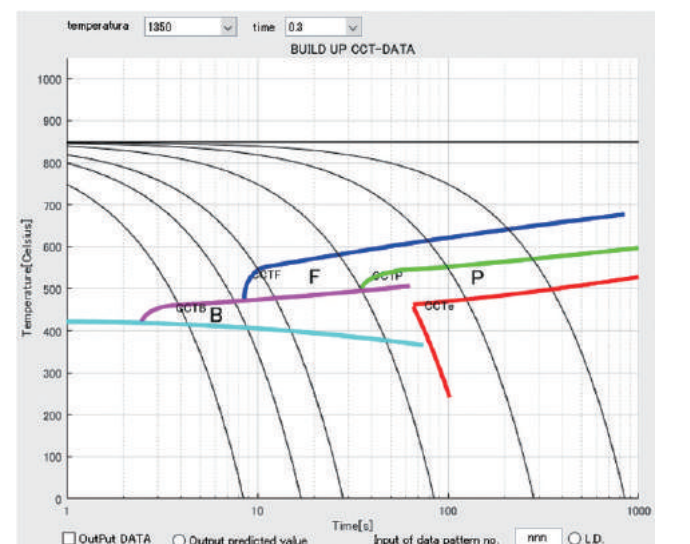
— どのように予測するか？

「いくつもの計算モジュールをつなぎデータを受け渡ししながら入力と出力を繰り返していきます」

MIシステムは、複数の計算モジュールをつなぎ、材料の組成やプロセス、使用環境から材料の組織や性能を予測し、寿命や破壊強度を推定します。「つなぐ」と簡単に言いましたが、これが大変なんです。モジュールとモジュールの間でデータをきちんと受け渡す必要があるのですが、それぞれのモジュールでは、例えるならまったく違う外国語が使われていて、そこから出てくるデータを別のモジュールに渡すときは、まず正しく翻訳しなくてはならないんですね。

具体的には、「インベントリー」と呼ばれる辞書のようなものを作る必要があり、人の手でAプログラムのパラメーター「a」にはどんな意味があるのかを登録し、同じようにCプログラムのパラメーター「c」の意味も登録していきます。その二つが同じならば、コンピューターは「これらは同じ意味だから、AとCをつなぐことができる」と判断できるようになります。このプロジェクトがスタートしてしばらくは、材料の専門書や教科書などから単語を抜き出して登録するという作業を4人くらいの方にコツコツとやってもらいました。

また、他の研究者たちが作ったプログラムを正確に理解することにも、多くの労を費やしました。もともと研究者は第三者の利用を考えて作ったわけではないので、マニュアルがありません。何が入力で、何が出力なのかを正しく把握するために、作成した研究者を訪ねて教えてもらう必要がありました。



NIMSデータを活用した鉄鋼材料の連続冷却変態(CCT)曲線の予測例

それと、計算モジュールのつなぎ方を決める「ワークフロー」も重要なのですが、数多くのモジュールがあるので、それらのつなぎ方についても課題となりました。また、多くのモジュールをつなぎ合わせようとする、どうしても足りないものも出てきます。最終的に、統合システムを担当するユニットが地道な作業を積み重ねて、不足しているものを補いながら、ワークフローを作っています。また、ワークフローを作るための「ワークフローデザイナー」も開発しました。

振り返れば、泥臭い作業をずっとやってきたように思います。でも、だからこそMIシステムは柔軟さと強靭さを合わせ持ち、どんなものにも対応できる可能性を秘めたと言えます。国のプロジェクトだからこそ、やっておくべきだったし、実際にできたと思っています。

—— 完成したらすぐに使えるか？

「システムという箱はできました。

このシステムの本領を発揮させるために
箱の中に多くの情報を入れてください」

各ユニットの研究者たちの努力によって、ゴールも見えてきました。ほぼ完成している、と言っていいと思います。システムの出来には自信があります。MIシステムは、日本オリジナルの試みです。何かの成功例をまねたわけではないので、今後どうなるかは誰にも分かりません。だからこそ、将来がとても楽しみです。しかし、どんな材料でもすぐに予測できるかというと、決してそうではありません。例題を示して、「本当に予測ができます」と実際にやってみただけです。言ってみれば、私たちは、未来を予測できる箱のようなものを作ったのですが、まだその箱しかないのです。この箱の中に、さまざまな情報を入れることが必要です。

例えば、チタンに関わる計算プログラムやデータを入れ込めば、それも予測できるようになります。アルミ合金やニッケルもそうすれば、同じように予測できます。このシステムが真の力を発揮できるかどうかは、完成後の使われ方によって決まるでしょう。ぜひ、このシステムの画期性を多くの方に理解していただき、積極的に使ってほしいと願っています。

MIシステムは、データやプログラム、方法などを集める基盤でもあるのです。このプラットフォームに、多くの知識を積み上げたい。少なくとも公的機関や大学の研究者であれば、アカデミックなメリットがあるなら自分の研究用のデータやプログラムを提供してくださと思っています。例えば、実験結果のデータから理論に関わる情報を抜き出せれば、「利用してみよう」と考える研究者は多いように思います。

システムを鍛えて精度を上げるには、とにかく使うことです。そして、多くのデータを蓄えることです。すると、実際にできることが増えていきます。材料研究者が困ったときに、「あそこに行けば何か良い解決法が見つかるかもしれない」と、いつでも駆け込める場所になるのです。研究者の中には、自分の研究用に作ったプログラムを提供することにためらいを覚える方もいます。その気持ちは分かるのですが、自分が得するためだと思って、このシステムに置いてほしいと思います。

—— 今後はどうなる？

「SIPで作ったMIシステムを
多くの方に使ってもらえるように
新たな努力を始めていきます」

SIPのプロジェクトは今年度で終わります。その次は、出来上がったMIシステムを物質・材料研究機構（NIMS）が引き取り、ここを拠点にして、多くの方に使っていただく努力を始めます。

材料メーカーなどの企業に使っていただきたいのですが、すぐに社外の実績のないシステムを活用しようとは思わないでしょう。何か、利用しやすいプログラムを用意する必要があります。例えば、MIシステムをベースにした共同研究プロジェクトを立ち上げ、さまざまな企業に参画してもらうと良いかもしれません。一緒に活動していく中で、企業の方が「このシステムは確かに使える」と実感すれば、「もっと活用しようか」と検討するようになると思います。

これから一番必要となるのは「成功例」です。企業が実際に使って、「これまでにない新しい製品を作ることができました」と画期的な成果が出ると、産業界で「活用してみようか」という流れが生じるでしょう。新製品を作るのが無理でも、例えば「性能が向上しました」とか「コストを削減できました」という成功例でもいいんです。何か企業のメリットにつながる成果が出れば、「これは使えるかもしれない」と注目してくれるはずです。

現代は、データサイエンスの成果が技術にどんどん応用されていく時代です。研究者も企業も単独で取り組んでいたら勝てません。バラバラに挑んでいては、強くなれないのです。企業においては、情報やノウハウを外に出すことについてデリケートなところがあると思います。それでも、単独主義にこだわれば、競争力を失うリスクが高まります。連携できるところを見極めていただき、基礎的なところは同じ実験をせずに済むような仕組みを、このMIシステムを通して作ってほしい。そうやって基礎レベルを日本の中で上げれば、日本の企業は開発力をさらに高め、世界的な社会問題を解決できる可能性も高めて、国外のシェアも取りやすくなると思うのです。

材料開発において、このMIシステムがその一つの拠点になればいいと思っています。



北海道大学 大学院 工学研究院 准教授

大野 宗一

Profile

2004年北海道大学大学院工学研究科博士課程修了後、助教を経て2009年より現職。

研究者
インタビュー
D61



多元系金属の 凝固・粒成長段階での、 高精度な組織予測に成功

鋼溶接熱サイクルの高温域での組織予測

MIシステムの構築を目指すD領域の中で、私が参画しているD61ユニットの役割は材料性能を左右する「組織」の予測です。金属で材料をつくる際には、溶融と凝固だけではなく、再加熱、加工、冷却など、とても複雑なプロセスを繰り返す必要があります。その各段階で、材料中の結晶の向き、間隔、大きさなどがどんどん変化していき、最終的にどのような組織になるかによって材料の特性・性能が決まります。その組織を予測するための計算モジュールの開発がD61の目指すところです。

その中で私が担当しているのは高温域での二つの現象です。溶解した金属が冷えて凝固する、そして凝固後も冷えていく過程で金属材料内の結晶粒が大きく成長していく、この二つの現象での組織を予測する計算モジュールを開発しています。予測手法の軸となるのはフェーズフィールド（PF）法。従来の方法では複雑な組織を計算するのが難しいのですが、PF法だと複雑な形状でもシンプルなアルゴリズムで計算できます。これが凝固時に進むデンドライト成長の予測にとっても有効なのです。

今回例題として扱っているのは鋼の溶接プロセスです。溶融、凝固、結晶粒成長、変態、析出などの現象が次々に起こる複雑なプロセスである溶接を対象とすることで、一連の組織変化を扱える予測モデルかどうかを検証できます。実用面も考慮して、鋼以外の多元系材料にも適用できるような計算モジュールにしています。この例題で最初のプラットフォームをつくることができれば、アルミやチタンの性能予測に展開することで航空機の構造材料の開発にもつながるはずです。

高精度の計算モジュール開発に成功

SIPにおける私の研究成果は、「凝固」と「結晶粒成長」というスケールの異なる二つの現象を扱える高精度計算モジュールを開発したことです。

凝固で扱うデンドライトは結晶粒よりも小さくて、複数のデンドライトが3次元的に成長して繋がっていくことで一個の結晶粒になります。その成長状態を予測するのが「凝固」の計算モジュール。この「凝固」モジュールの特長は、多元系にも対応できる高い汎用性がありながら特別高精度なこと。精

度という面では、今回開発したモデルは世界的にみても最高レベルです。ユーザー企業のニーズを考えた場合、様々な元素が入った材料を扱えなければ実用性がありませんので、多元系でありつつも比較的低い計算コストで、充分高い精度での計算が可能なモデルにしています。計算コストさえ許せば何元系でも対応でき、実際に六元系までは計算して組織予測を実施できています。もちろん、予測結果の検証も実施済みで、凝固条件によって決まってくる実際のデンドライトのサイズと、今回開発した計算モジュールの予測がよく一致することを確認しました。

もう一方の「結晶粒成長」については、モデルの開発により溶融から凝固、粒成長までのプロセスを同時に扱えるようになりました。これまでは、溶接のこれらの現象を一貫して扱えるモデルは世界的にも知られていないので、今回開発したものはとてもユニークなモデルです。粒界の物性を適切に入力することで、多元系合金も扱うことができます。

これら二つの計算モジュールを使いこなすにはそれなりの知識が必要ですが、ユーザーがこれらのモジュールを自由に使うことで一歩進んだ材料研究を実現できることを期待しています。

予測モデルの更なる高度化を目指して

私の個人的な研究モチベーションは「凝固などの材料組織のダイナミクスを方程式で表したい」という想いですので、今後もPF法を軸に多様な研究を展開していきたいと思っています。今回SIPで開発した二つの計算モジュールは、精度とコストの面で、現状では最高レベルのバランスからなっており、充分役に立つはずです。しかし、溶融金属の対流などの本モジュールで考慮していない現象の影響が顕在化する場合には、まだいろいろと高度化の余地があります。そのような予測モデルの高度化については、個人の研究としてSIP終了後も取り組む予定です。

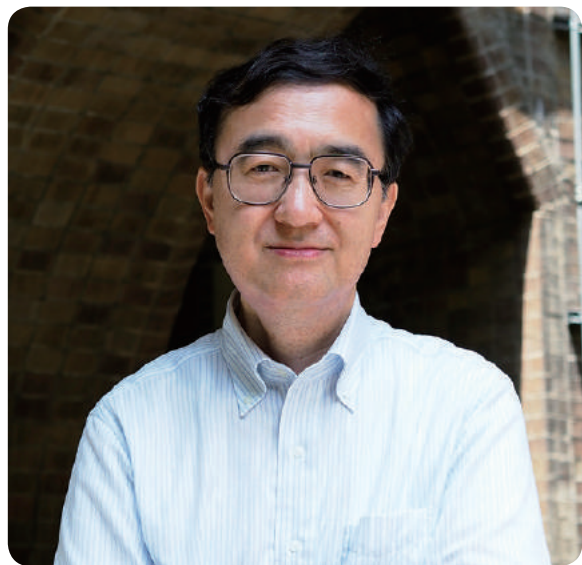
今回のような世の中の一歩先を行くプロジェクトに参画し、その進展を実際に体感して研究を進められたこと、そして自身の研究分野以外の方々のお話をきけたことは私にとって大きな財産であり、SIPにはとても感謝しています。

榎 学

Profile

東京大学大学院工学系研究科博士課程修了後、東京大学先端科学技術研究センターを経て、現職。

研究者
インタビュー
D62



安全に直結する性能を 予測できれば そのメリットは計り知れない

性能を予測できれば 開発期間を大幅に短縮できる

2017年12月、東海道・山陽新幹線の列車の台車に、き裂が生じるという事象が起きました。その原因の一つは、構造材料の「疲労」です。列車に限らず、構造物の材料は長い期間にわたって使われます。「疲労」など、安全性に関わる性能は、事故に直結する可能性があります。しかし、構造材料の性能を確かめるには、膨大な時間と手間がかかります。もし、その性能をうまく予測できたら、新たな材料の開発時間やコストを大きく引き下げることが可能です。

我々D62ユニットが担当しているのは、MIシステムにおける「性能予測システム」の開発です。安全に関わる四つの重要な性能を予測する計算モジュールを作っています。この四つの性能とは、繰り返し力をかけるときに裂が生じる「疲労」、高温下で材料が伸びてしまう「クリープ」、水素が原因で材料が脆くなる「水素脆化」、低い温度で脆くなる「脆性破壊」で、いずれも使用環境や時間に強く依存するものです。

溶接部のような非常に複雑な組織の材料でも予測できるように、物理モデルに基づくシミュレーションと情報統計力学によるデータ駆動のアプローチを融合し、計算モジュールを作り上げています。また、その予測が正しいか、実験による検証を常に行っています。

シミュレーションとデータで性能を予測

鉄鋼材料の性能は、材料の組織によって左右されます。この組織の予測はD61ユニットが取り組んでいて、我々は、その予測された組織に対して、どんな環境で使用すると、どのように変化するのかを予測します。独自の計算モジュールを作り上げて、例えば「疲労」によるき裂がどのように生じるかを予測していくのです。

金属は、微小な粒－結晶の集合体です。複雑な組織では、さまざまな方位の結晶が隣り合うことになります。この結晶の方位と外からの力のかかり方が合ってしまうと、転位が動きやすくなります。金属疲労によるき裂は、実はこうした結晶のずれによる転位が原因です。この結晶の方位も考慮した予測計

算ができるようになれば、より安全な材料を確実に作り出すことができます。我々は、物理モデルを使って、新たな「微小き裂発生・き裂進展モデル」などを構築しているところです。

また、データ駆動による予測の手法も開発中です。研究機関などが性能に関わるデータを膨大に持っていますので、それらを集めて類似度に基づいて分類。そのデータベースから、さまざまな性能を情報学的に予測できるモジュールを作ろうとしています。

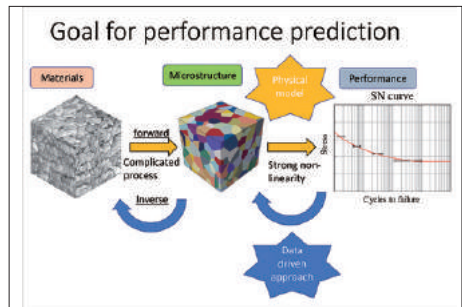
この物理モデルによるシミュレーションとデータ駆動による手法を融合することで、今までできなかった性能予測が可能になるでしょう。

このシステムで世界をリードできる

「疲労」以外の性能についても、予測計算モジュールが出来上がりつつあります。

例えば、「クリープ」については、性能を予測できるめどが立ちました。場合によっては10万時間もの長時間を要すると言われている実験を大幅に短縮できないかと期待しています。「水素脆化」については、溶接時に水素に起因して発生する割れの対策として材料の予熱が必要なのですが、溶接時の水素の拡散や割れ発生の予想により、この予熱温度を下げてコストを減らすことが可能になるでしょう。「脆性破壊」についても、原因となる脆化相を予測でうまくコントロールできるようになると、低温にも耐えられる強靱な鉄鋼材料を低コストで作れるようになると思います。

また、このMIシステムでは、さまざまな構造材料について予測するのが大きな目的です。この鉄鋼材料溶接部を対象として作った計算モジュールを土台に、アルミ合金やチタンなどの材料についても予測できるように、このシステムに組み込める計算モジュールを開発中です。



横田 秀夫

Profile

(財) 神奈川科学技術アカデミー「樋口極限メカトロニクス」プロジェクト、理化学研究所素形材工学研究室、VCADシステム研究プログラムチームリーダー、次世代生命体統合シミュレーションチームリーダーを経て現職。専門は画像処理、多次元イメージング。

研究者
インタビュー
D63



中身の構造が分かれば 材料の特性・性能も見えてきて 正確な予測も可能になる

3次元構造と特性・性能の関係

材料の特性・性能は構造によって決まります。鉄鋼材料なら、金属結晶や介在物の形や大きさ、並び方など、組織の中にある物質の3次元幾何形状が強度などの特性・性能を規定します。新しい材料を開発するとき、あらかじめ構造と特性・性能の関係が分かっていたら、求める特性・性能を作り出しやすくなります。しかし、材料の中にある金属結晶の3次元情報については、実はこれまでほとんど取得されておらず、3次元構造と特性・性能との関係は充分に理解できていないのが現状です。

我々が挑んでいるのは、3次元の情報を正確に取得するために材料の内部をより正確に捉えられるようにすることです。これまで、材料研究の場では、研究者が材料を切断して2次元の断面を顕微鏡で見ながら3次元構造を類推していました。しかし、2次元の情報だけでは限界があります。新たな観察方法を確立して、客観的かつ定量的に材料の内部の情報を得て、曲線や曲面などの形を数学で解析すれば、3次元幾何形状をより正確に捉えることができ、3次元構造と特性・性能との関係も理解が進むと考えています。

切断と撮影を繰り返して3次元情報を得る

私はもともと生物が専門です。骨の構造を正確に知りたくて、その中身を見るための観察技術も研究していました。非破壊のX線CTの場合、どうしても周りの情報に引きずられてしまい、高分解能の情報を得られません。そこで、空間の絶対的な座標と絶対的な量を計測するために考え出した方法が、切断と撮影を自動で繰り返して3次元の情報を得るやり方でした。

見たい物体の断面を次々に薄く切り出して見ていけば、内部に含まれる物の全体像をはっきりと捉えることができます。近年、精密加工の技術やイメージングの技術が向上していて、断面の情報を細かく積み重ねることで内部の構造を正確に捉えられるようになっていきます。その情報を自動で解析するプログラムを作れば、新しい観察システムを作ることが可能です。私はこのアイデアを実行して骨の中を観察したところ、その3次元構造がよく見えたのです。

これを発表すると、予想外に「アルミ材料の中も観察でき

ないか」と分野を越えて相談されて、取り組んでみるとこれもよく見えたのです。すると、「鉄でもできないか」と、発展していきました。

MIシステムでは、材料の組織の形から特性・性能を求められるようにすることが一つのポイントです。これを実現するには、特性・性能を支配している金属結晶の境界面がどのような形になっているかを正確に捉える必要があります。我々は、鉄鋼材料の表面を切削して、鏡のような表面にエッチングという化学的な処理をして、金属の結晶を見えるようにして撮影するという一連の作業を自動的に繰り返す観察システムを作りました。これにより鉄鋼材料の中もよく見えるようになり、3次元の情報が取得できました。

ちなみに、鉄鋼材料のエッチングは作業者の経験やスキルに依存する処理なのですが、これを自動化して観測装置に組み込んだのは、今回のプロジェクトにおける一つの成果です。

これまで分からなかった関係が見えてきた

MIシステムでは、3次元シミュレーションの精度を上げるため、実物のデータをしっかり突き合わせる事が不可欠です。現在、構築した観察システムを使って、サンプルの情報収集に取り組んでいます。最小0.5μmの厚さで切削し、形に関わる3次元の情報をそこから得て、約2000項目にわたる幾何形状のパラメーターを取っていきます。現在、数十のサンプルのデータ収集が終わっています。

こうして集めたデータについては、別の研究者が特性・性能と構造のつながるポイントをここから見つけ出そうとしています。これまでのやり方では分からなかったことが少しずつ見えてきていて、例えばフラットになると言われていた結晶の境界面は、実はそうでもないことなどが分かってきました。

今後、構造と特性・性能の対応関係がいろいろと出てくると期待しています。このシステムが完成してデータやノウハウが多く集まれば、ユーザーにとって有益な情報を正確に可視化して提供できるようになるでしょう。多くの人に活用いただきたいと思っています。

源 聡

Profile

1995年京都大学大学院人間・環境学研究科卒、2008年東京工業大学 総合理工学研究科 材料物理学専攻 博士(理学)。伊藤忠テクノソリューションズなどの民間企業を経て、2015年国立研究開発法人物質・材料研究機構に着任。現在は統合型材料開発・情報基盤部門主幹研究員。

研究者
インタビュー
D64



このMIシステムで 私たちの思考を広げ 今までの限界を超えたい

材料開発を加速する 統合型材料開発支援システム

このプロジェクトで実現を目指しているMIシステムとは、材料の持つ疲労寿命などの性能を、材料のミクロ組織を基軸にして予測しようとするものです。そのためには、従来の経験式のみならず、理論に立脚した精度の高い解析モジュールと、信頼性の高い実験データを機械学習などの援用で有機的に結合することが望まれます。

この結合は、マルチスケールやマルチフィジックスの実現を目指すことでもあります。物理の世界には異なるスケールがあります。原子分子レベル、ミクロンオーダー、メートルオーダーのスケールがあって、すべてのスケールを支配する方程式はありません。これらのスケールをシームレスにつなぐということがなかなかできていないため、この統合システムでその実現を目指しています。

それと同時に、シミュレーションにおける大きな課題も解決したいと思っています。シミュレーションの難点は、対象の現象論を物理モデルとして隅から隅まで分からないとパラメーターを設定できず実行できないところ。これに対して実験は現象をすべて分からなくても実行できて、何らかの結果を情報として出すことが可能です。システムの中に豊富なデータベースを内包させて、解析モジュールが必要とする物性や解析パラメーターを機械学習により推定できるようにすれば、未知のものを扱えるようになります。

昨今の構造材料は、要求される性能が増えています。成分の元素が増えてプロセスも複雑になっていて、仮説検証を前提とした開発が厳しくなりつつあります。しかし、理論モデルと実験結果をすり合わせてコンピューターを活用して計算できれば、このハードルを越えられる可能性が出てきます。

情報ネットワークに基づいた モジュール接続・ワークフロー提案

統合システムは、小さいスケールから大きいスケールまで、いくつかの計算の要素を自動でつなぐことを目指しています。D61、62、63などの解析モジュールを接続して統合し、ま

たデータの連結性や誤差評価、スケール変換などの処理を行うシステムも開発中です。

モジュールがたくさんあれば、その組み合わせ方はいくらでもあり得ます。この「ワークフロー」の決め方が難所です。そこで私たちは、標準的な教科書や試験書を参考に「AをしたらBになる」とか「CとDは同じことである」という情報を一つ一つ集めてシステムに入れていったのです。膨大な作業でしたが、これによりこれまで見えなかった情報ネットワークを構築しました。これがワークフロー作成の手がかりとなります。

また、ある教科書に「AとBは関係がある」とあり、別の教科書に「BとCは関係がある」と書いてあれば、システムがAとCの関係性を抜き出して新しいワークフローを提案できます。このようなサジェスト機能をいろいろとできるようにすることも、この統合システムの目玉の一つです。

このMIシステムを「巨人」にしたい

今、MIシステムのバージョン1.0が出来上がりつつあります。将来的には、ユーザーから提供されるデータや解析モジュールを組み込み、各ユーザーに応じた効率的な材料探索ができるようになることを期待しています。ただ、私たちは自動計算システムというだけではなく、ある計算の流れから横にどんどん展開していくようなシステムにしたいと考えています。複数のワークフローや、計算に足りないものや新たに入れたほうがいいもの、あるいは材料工学の概念マップや計算可能なものを次々に提案するようなシステム。このような形にすれば、ユーザーは「この提案されたものは何だ？」と考え始め、「ここに自分で書いた方程式をコードとして入れれば予測の精度を上げられる」とアイデアが出せるようになります。このMIシステムにあらゆる知やデータが集まり、これまで積み重ねてきた概念やデータなどが一つにつながれば、ニュートンの言う「巨人」のようなものになるはず。私たちがその肩の上に乘れば、きっと今までよりも少し遠くを見ることができるでしょう。

2 Feature

航空機材料最前線——
この人に聞く

JFEスチール株式会社 スチール研究所

石川 信行

新材料の開発で ブレークスルーを 生み出す

まったく新しい開発 アプローチが可能になる

——MIシステムの開発では、どんな役割を？

組織予測システムと性能予測システムの開発に関わっています。データベース構築のためのデータ収集や提供をしたり、シミュレーションの結果と実験データが合っているかを検証したり、モデリングを担当する大学の先生と一緒に「このデータをどう扱えば予測モデルにつなげられるのか」と考えたりしてきました。

今のコンピューターの性能をもってしても、材料開発の現場では、物理モデルだけですべての現象をいろいろな条件の下でシミュレーションするのは難しいですね。このMIシステムの一番の特徴は、物理モデルとデータサイエンスを組み合わせで最適解を出すところ。物理モデルで予測しながら、それができないところは、蓄積したデータベースから機械学習などを活用して予測する。これが今までのシミュレーションとの大きな違いです。

——企業の材料研究者にとって、このシステムを使うメリットは？

MIシステムを活用すれば、材料の組織や性能を予測することができます。材料開発における実験の回数を減らすことができるでしょう。これは大きなメリットです。ただ、そのことよりも、このシステムによって従来とは異なる開発アプローチが可能になることに、私はより期待しています。

例えば、ある現象をシミュレーションしたいとき、その物理モデルが求めるパラメータをいくつも決めなくてはなりません。でも、それがよく分からないことが多いです。材料研究者の永遠の課題です。しかし、このMIシステムは、多くのデータからパラメータを予測してくれるんです。これは、研究者にとって大きなメリットだと思います。

もう一つ、研究者が自ら計算モジュールを組み替えられるのも、このシステムの良いところです。例えば、凝固の過程で変化する成分が開発のネックになっていたら、モジュールを追加しワークフローを操って、この部分に特化した予測を行うことが可能になります。ニーズによって予測する範囲や精度を変えられるので、新しいモジュールを自ら開発し、今までとは異なるやり方で材料開発をする研究者も出てくるかもしれません。

Profile

1991年NKK（現JFEスチール）に入社、機械構造用鋼やラインパイプなどの鉄系構造材料の研究開発業務に従事。2015年より界面科学研究部長として水素脆化や腐食に関する研究を統括。

これまでにないリンクで ブレークスルー

——このシステムによって材料開発のやり方は変わる？

材料の開発は、ほとんど実験ベースです。この実験だけに集中していくと、どうしても実験結果ばかりを見るようになって、サンプルの中で何が起きているのかをイメージしなくなっていがちです。ここに一つ、課題があります。

MIシステムの良いところは、シミュレーションを介して、材料の中で起きている現象のイメージも示せることです。これが材料研究者の意識を変えるのではないかと、私は期待しています。

可視化できると、人の理解が広がります。例えば、CTスキャンで人の体の中を見れば、患部への対処法が分かりやすくなります。材料も、その中をシミュレーションで可視化できれば、どうすれば組織や性能を変えられるか分かりやすくなると思います。

——このシステムで新しい構造材料を作り出せますか？

今、鉄鋼材料に求められる性能は増える一方で、ナノレベルで複雑な組織を微妙にコントロールして何千トンの鉄鋼材料を量産しています。今後さらに多くの性能が求められるれば、組織もさらに複雑化します。そうなれば、材料研究者の経験で組織と性能をリンクさせる今までのやり方は限界に達するでしょう。

MIシステムは材料開発に変革をもたらす可能性があります。すぐに新材料が開発できる訳ではないと思います。モジュールの予測精度を高め、必要なデータを集めるなどシステムの中身を充実させなくてはなりません。しかし、若い研究者がこのMIシステムをさらに活用して新しい開発アプローチを切り開いたら、新しいアイデアがそこから出てくるように思います。もしかしたら、昨今高強度化が進んでいる鉄鋼材料の高機能化などでもブレークスルーが生まれるかもしれませんね。

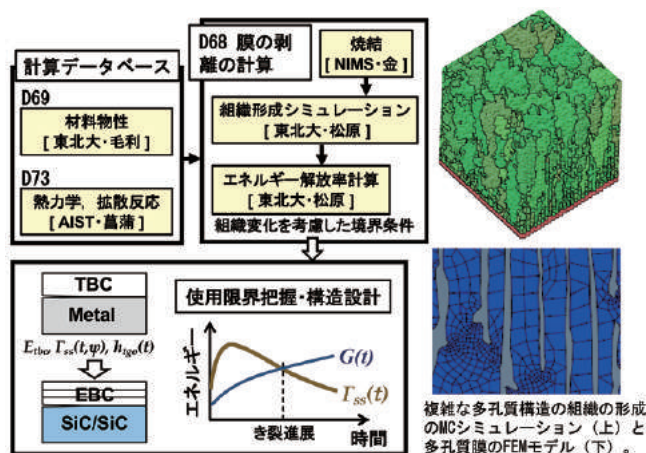
セラミックスコーティングMIクラスター



クラスター長

松原 秀彰 (D68)

東北大学 環境科学研究科 教授
東京大学工学研究科修了、同助教授、JFCC副所長を経て、現職。専門は、セラミックス、焼結、断熱、シミュレーション。



本クラスターでは、ジェットエンジン用のセラミックスコーティングのためのシミュレーション技術開発を、「高温物質移動および組織の時間依存挙動のシミュレーション技術開発」(D68)、「計算機を用いた材料支援技術への時間依存特性導入技術」(D69)、「構造材料開発に利用する計算熱力学に関する技術基盤構築」(D73)の観点で進めている。

金属や複合材料等の構造材料(基材)の上にセラミックス膜をコーティングする技術は最近目覚ましい発展を遂げている。とりわけ、ジェットエンジンや発電用タービンにおける高温・高圧部において、基材を熱から守る(熱遮蔽、TBC)あるいは腐食から守る(環境遮蔽、EBC)というセラミックスの機能が十二分に活かされた材料技術に発展してきている。

複雑な多孔質構造の形成（物理蒸着）および加熱時（ジェットエンジン使用時）の焼結や粒成長などの組織変化をシミュレーションすることが出来るようになった。組織変化をもとに、ヤング率等の特性変化を予測し、使用時の膜の性能劣化、とくに剥離（寿命）の予測を行うためのシミュレーションを進めている。また、高精度第一原理計算手法によるジルコニアの酸素拡散や計算熱力学DB開発による Yb_2SiO_5 の水蒸気耐性解析を加えて、TBCおよびEBCの両方に適用できるシミュレーション技術の開発を目指している。

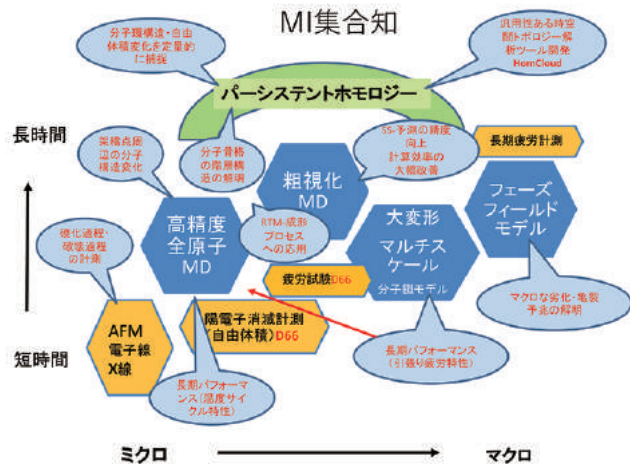
高分子MIクラスター



クラスター長

西浦 廉政 (D72)

東北大学 材料科学高等研究所 特任教授
2012年2月より東北大学WPI-AIMR主任教授、
2017年4月より材料科学高等研究所特任教授。
非線形・非平衡ダイナミクスの数理科学に従事。



本クラスターは計測、シミュレーションおよび数理科学を融合させた実用型高分子系複合材料設計ツール開発を目指し、企業を含む異分野融合型の連携により、共通言語の数学を介してスケール毎に特色ある高分子MIコアモジュール群を生み出しています。とくにエポキシ系構造用高分子材料に着目し、その分子構造と力学特性の関連性を明らかにするために、モデル硬化物を作製し、各種の力学特性評価試験、陽電子消滅法による自由体積計測、シノ触診AFM解析、各種分子動力学法、FEM解析、フェーズフィールド法等多角的に実施しています。実際、陽電子消滅法による計測により、自由体積が反応率とともに増大する傾向が定量的に確認され、全原子分子動力学法による結果とも一致しています。これらの計測・解析結果を、計算ホモロジーによる新たな記述子を用い、機械学習と融合させHomCloudのような汎用的で研究開発期間を大幅短縮できる設計支援ツールの開発を推進しています。これにより、材料の不均一性を解明し、データベースとしてまとめ、各種の逆問題への応用を進めることにより、複合材料におけるマトリックス樹脂の性能向上とその劣化予測を実現する手法の開発につながることが期待されています。

Research Topics



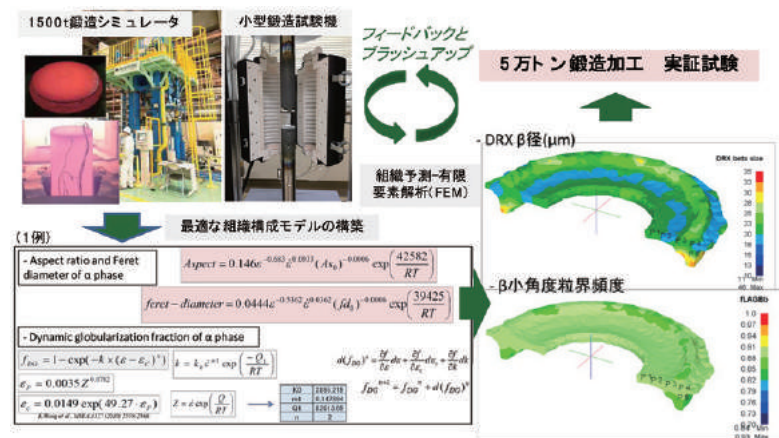
耐熱合金・金属間化合物の開発

B領域 松本 洋明

航空機Ti-17合金のより高精度な
組織・材質予測モデルの構築を目指して

航空機エンジンではチタン合金が多く使用され、中圧圧縮機にはTi-5Al-2Sn-2Zr-4Cr-4Mo(Ti-17) 合金が適用され、最適な組織制御のために適切な条件下で鍛造加工により製造される。しかしながら製造条件の選定においては“加工し易さ”を念頭に置いた経験的な要素も未だ強く、試行錯誤的に選定されているのも実状である。本プロジェクトでは本合金について小型鍛造試験—1500トン鍛造シミュレータ試験のスケール軸を考慮した鍛造実験を実施し、塑性流動特性、組織変化および機械的特性を体系的に評価した。これらの結果をベースにチタン合金に適した最適な組織予測モデルを構築するとともに、鍛造—溶体化処理—熱処理の一連の工程における組織変化を予測するモジュールを作成し、FEMに展開した。図はこれまで取り組んできた実験評価—計算の結果、流れをまとめている。組織予測の構成式は物理冶金モデルをベースとした構成式からチタン合金に

適するように修正し、多くの組織因子について最適な構成式を構築している。この最終年度では5万トン鍛造加工に展開した実証試験を行い、いずれの素材スケールもカバーする高精度な組織・材質予測モデル・モジュールの完成を目指す。



実験および計算科学の両面からの組織・材質予測モデルの最適化(研究の流れ)



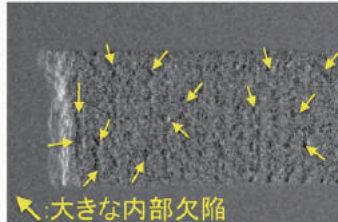
高速基材製造プロセス技術の開発／
プロセス・設計基礎技術開発

C領域 佐藤 光彦

SiC系複合材料の非破壊評価技術

SiC繊維強化SiC複合材料(CMC)は、軽量で優れた耐熱性と損傷許容性を有することから、近年、航空機エンジンを中心とした省燃費ガスジェネレータ用部品の素材として有望視されている。CMC部材は、小さな欠陥の発生では最終破壊に至らないものの、欠陥の密度や発生量が部材の力学的特性や寿命に大きく影響するため注意深く検討する必要がある。本研究開発では、一般に生体材料の細かな組織観察に利用されているタルボ・ローX線干渉計を利用し、数cmスケールのマクロな視野での観察においても、通常のX線透過観察では捉えることが困難であったミクロな欠陥(ボイド、亀裂、剥離、等々)の集まりを、非破壊で観

図：タルボ・ローX線干渉計による

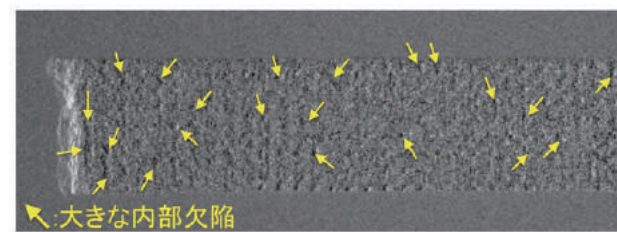


CMCの微分位相像、内部のボ

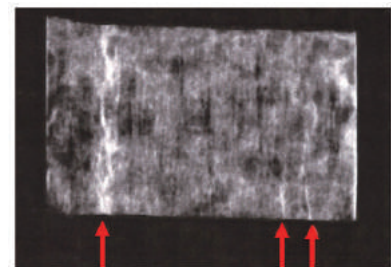
東京工科大学 片柳研究所 特別研究教授
2017年3月宇部興産(株)退職。2017年4月東京工科大学片柳研究所特別研究教授。

察、検討している。下図に、CMC試験片の観察例を示す。X線透過によるマクロ観察では捉えることが困難であったCMC内部のボイドやマトリックス中の亀裂を捉えることができています。今後は、これらの結果を基に、使用中のCMC部材の寿命評価やCMC部材中の初期欠陥が及ぼす破壊メカニズムの検討に利用する。

図：タルボ・ロー X 線干渉計による CMC の観察事例



CMCの微分位相像、内部のボイドが多数観察される。



 : CMC中の亀裂
 10mm

CMC引張試験片の小角散乱像、マトリックスに発生した亀裂が観察される。