



解説

研究会成果報告-2

計算工学による組織・特性予測技術に関する将来展望

Future Perspectives on Computational Engineering for Predicting Microstructures and Mechanical Properties

小山敏幸

Toshiyuki Koyama

名古屋工業大学大学院
工学研究科 教授

1 はじめに

近年、第一原理計算支援の状態図計算、フェーズフィールド法などを用いた材料組織形成モデル、さらにミクロ組織とマクロ的力学特性を結びつけるマルチスケールモデリングの研究等が、種々の分野で横断的に進展し、こうした新手法を活用することで、鉄鋼材料の組織・材質予測の適用範囲を、これまで以上に拡張する環境が整ってきた。この環境変化を受けて日本鉄鋼協会は、新たなステージに入った組織材質予測技術を次世代の鉄鋼研究の重要研究課題と位置づけ、「鉄鋼科学技術戦略ロードマップ」にその開発スケジュールを明記することとなった。本解説では、「鉄鋼科学技術戦略ロードマップ」に沿って活動を終えた「計算工学による組織と特性予測技術Ⅱ研究会 (H22～H24, 主査：小山敏幸, 材料の組織と特性部会・創形創質工学部会)」(以下、計算工学研究会Ⅱと記載)の内容を軸に、計算工学による組織・特性予測技術に関する将来展望を、若干私見を交えつつ述べさせていただきたい。

計算工学研究会Ⅱは、「計算工学による組織と特性予測技術研究会 (H18～H21, 主査：瀬沼武秀, 材料の組織と特性部会・創形創質工学部会)」(以下、計算工学研究会Ⅰと記載)の後継として、平成22年に同名の研究会Ⅱとして発足した。計算工学研究会ⅠおよびⅡともに、すでに終了しているので、研究成果の個々の詳細に関しては、両研究会の最終報告書^{1,2)}をご参照いただきたい(また近年の計算材料科学の進展については、「鉄と鋼」第100巻特集でも企画されているので、こちらもご参照いただきたい)。本稿では、紙面の関係もあり、基本的に個々の最新研究に関しては言及せず、当該分野の一連の流れを紹介するとともに、今後の展開の方向性について考えてみたい。

なお計算工学研究会ⅠとⅡは、上述のように材料の組織と特性部会と創形創質工学部会の二部会にまたがって運営され

た経緯もあり、非常の多方面の方々から暖かいご支援をいただいた。直接のメンバーである幹事・審議委員・委員・オブザーバーの方々をはじめ、材料の組織と特性部会および創形創質工学部会の関係各位のご協力に、あらためて心より感謝申し上げる次第である。

2 計算工学研究会Ⅱの目標

計算工学研究会Ⅰに始まる一連の研究会の最終目標は、「組織材質予測の総合一貫モデルの構築」にある。近年種々の分野にて、広く横断的に計算工学の新手法が発展しており、計算工学研究会Ⅰでは、まずこれら最新要素技術の集約が行われた。具体的には、第一原理計算活用型の状態図解析、Nモデル(古典的核形成-成長モデルの集大成)、フェーズフィールド法(各種組織形成シミュレーション)、均質化法やセカント法(組織形態を活用する力学解析法)、結晶塑性理論(転位を直接考慮した力学解析法)、および塑性ポテンシャル理論(パウシンガー効果までも扱える新手法)等が総括された¹⁾。その結果、次世代の高強度鋼(ハイテン等)の力学特性の解析には、組織形態(モフォロジー)情報の正確な考慮が不可欠であることが明らかとなり、組織形態情報に関する解析手法の整備(組織形成の計算と組織形態情報のデータベース化)が、今後の高強度鋼開発に急務であるという結論に達した。これを受けて計算工学研究会Ⅱの課題目標が以下の3点に絞り込まれた。

- 1) 鉄鋼材料における各種組織形成シミュレーションの本格的実現
- 2) 組織のモフォロジーを考慮した、イメージベースの力学特性計算の高度化
- 3) シミュレーションプログラム演習を活用した実効的人材育成

以上により、組織形態情報とその解析データの短期的拡大を実現し、これら組織形態情報を縦横に活用できる環境（人材育成も含む）を整備することが、計算工学会Ⅱの目的とされた。

3 計算工学会Ⅱの活動概要

計算工学会Ⅱでは、上記課題に的を絞り、材料の組織と特性部会と創成創形工学部会が共同で研究会を運営し、いわゆる材料研究者・技術者と機械研究者・技術者が相互に詳細な議論を交わすことによって、従来の枠を超えた実効的な組織・特性設計の実現を目指した。主な活動内容・成果は以下の4点にまとめられる（計算工学会Ⅱの特徴は、以上を通じ、基礎理論の詳細な理解と、実際のプログラム環境・データベース等を同時に共有することにより、ブラックボックスではない計算工学習得・活用の方法論を実効的に提案した点にある）。

1) 勉強会・討論会形式を重視した研究会運営および情報発信

鉄鋼材料における熱力学、カルファド法による計算状態図、フェーズフィールド法、フェーズフィールド微視的弾性論、マクロ塑性構成式、ならびに改良型セカント法等に関する基礎から応用までの詳細な勉強会を開催した。また定例の研究会や本協会の大会における討論会およびシンポジウムを通じて、当該分野における実験・解析技術の発展に関する情報収集・情報発信も合わせて行った。本研究会期間中に、本協会誌および欧文誌において、当研究会メンバーを主な執筆者とする当該分野の特集が二回組まれている^{3,4)}。

2) 研究者・技術者が自身のパソコンにて計算可能な環境の整備

組織形態形成の計算でベースとなるフェーズフィールド法の基盤シミュレーションプログラム各種、および力学特性計算の基本プログラムである種々のセカント法に関するプログラム各種について、計算環境設定法とシミュレーションのソースコードを参加委員全員に配布し、委員が各々、組織形成シミュレーションおよび力学特性シミュレーションを自身のパソコンにて行える環境を整えた。

3) 計算理論に関する詳細テキストの作成

特に若手の研究者・技術者育成の促進を目的に、組織形成シミュレーションおよび力学特性計算に関する定番のモデルケースとして、フェーズフィールド法と改良型セカント法に関する詳細な解説テキスト⁵⁾を内部資料（非公開）として作成し、参加委員全員に配布した（計算工学会Ⅱの最終報告書²⁾にも、その一部が含まれている）。また計算工学会Ⅱの活動期間中に、研究会メンバーにより、本研究会内容に

関連する教科書・専門書・演習書も複数出版されている^{6,9)}。

4) 組織形態イメージデータに関する基本サンプル例の配布

組織と力学特性との関連性を定量的に考察するためには、組織形態を系統的に変化させたサンプル組織が不可欠である。これを可能とするサンプル組織生成プログラム、ならびにイメージデータの基本サンプル例を参加委員全員に配布した。

4 計算工学会Ⅱの成果と残された課題

計算工学会Ⅱにて得られた成果を、「2. 計算工学会Ⅱの目標」にて説明した3つの目標に沿って概略をまとめるとともに、残された課題について言及する。

4.1 計算工学会Ⅱの成果

(1) 鉄鋼材料における各種鉄鋼組織形成シミュレーションの本格的実現

計算工学会Ⅱでは、組織形成シミュレーション関連に関しては、状態図計算からフェーズフィールド組織形成計算、また不均一場を考慮した力学計算など、現時点における先端を集約することができた²⁾。しかし残念ながら、鉄鋼材料に対する組織予測の計算レベルは現在、日常使われるような実用段階には至っていない（この理由に関しては、以下の5.1参照）。今後、オーステナイトからのフェライト析出等、定量的にモデル化しやすい対象から、部分的に実用段階に入っていくものと思われる。

(2) 組織のモフォロジーを考慮したイメージベースの力学特性計算の高度化

三次元 (3D) 組織解析技術の最新情報を収集するとともに、組織形態（モフォロジー）情報を均質化法やセカント法の入力データとして活用した力学特性解析法を集約した。特に渡邊ら²⁾による、均質化法を用いた鉄鋼材料の力学特性に対する内部組織形態最適化の試みは、力学特性を最適化する組織形態自身を逆問題から求めてしまうもので、材料組織設計の新概念を含み特筆に価すると考える。また組織イメージと特性情報をアーカイブ化する方法論を議論し、この活動はその後、「鉄鋼ゲノムの解明（座長：森戸茂一）」フォーラム¹⁰⁾を経て、現在「鉄鋼インフォマティクス研究会（主査：足立吉隆）」へと結びついている（後述）。

(3) シミュレーションプログラム演習を活用した実効的な人材育成

フェーズフィールド法と改良型セカント法に関するシミュレーションプログラム数十点を参加委員全員に配布するとともに、また当該計算理論に関する詳細な解説テキストを作成し、個々の研究者・技術者が独自にかつ実効的に学習できる

環境を整えた（特にパソコンにおける計算環境の設定は、今後の継続的学習の便宜も考慮し、著者によるフェーズフィールド法の演習書⁹⁾の計算環境に一致させた）。

4.2 残された課題

組織シミュレーションおよび力学特性計算の定量性に関して、鉄鋼材料に関する各論は増えたが、実用にはまだ遠いと結論せざるを得ない。理由はある意味単純で、系統的な計算と検証実験の絶対量の不足である。計算状態図研究の歴史にみるように、材料分野における多様な現象の一般化・実用化には、大規模かつ系統的な計算法の確立（データベースも含む）と、それを支える膨大な検証実験の双方が必要である。計算工学研究会Ⅱにて、多分野の委員の方々のご協力により、現状における最先端の組織シミュレーション手法と力学特性計算の双方を総括できたと考えるが、これらを実用的一般論とするためには、計算手法と組織・特性実験の系統的なデータベース化、および計算と実験とを有機的に連携させた特性予測法が必要である。これが計算工学研究会Ⅱにて残された課題であるが、この課題克服も含む形にて、今年度新たな研究会が発足した。「鉄鋼インフォマティクス研究会（主査：足立吉隆）」である（この研究会の内容に関しては、以下の将来展望においてふれる）。

5 将来展望

計算工学研究会ⅠおよびⅡを通じて、これからの鉄鋼材料科学・工学にて中心となると思われる一連の要素技術の整備が進められた。最後にやや私見が入るが、周辺情報も含めて、各要素技術の状況と今後の当該分野の展開に関する留意点をまとめてみたい。

5.1 一連の要素技術の現状と組織形成シミュレーションについて

鉄鋼材料への適用を念頭に置き、一連の要素技術の状況を三段階で分類してみよう（あくまで著者の見解である点に注意されたい）。◎：実用段階（材料学では完全無欠の実用システムは原理的にありえないので部分的な例外は認める）、○：試行段階（実際の材料を扱える場合が出てきたが、どちらかといえば研究段階であるもの）、△：研究段階（定性的な議論が中心で、現象の本質的理解が主目的である場合）。

- 第一原理計算（電子状態計算）
- ◎ 計算状態図（CALPHAD法）
- 第一原理計算活用型の状態図解析
- △ 分子シミュレーション（MD, MC等）
- ◎ 古典的核形成-成長モデル（L-Sモデル, Nモデル等）

- 組織形態形成シミュレーション（フェーズフィールド法）
- 組織形態を活用する力学解析法（均質化法やセカント法）
- △ 転位を直接考慮した力学解析法（結晶塑性理論）
- ◎ 集合組織解析法と集合組織を考慮した変形挙動解析
- ◎ バウシinger効果までも扱える精緻な塑性ポテンシャル理論

もちろん部分的には、各分野◎もあれば△もある点を記しておく。また上記の分類において、△は、○にするかどうか迷ってつけている。一昔前の計算科学・工学の印象と比較すると、十分と言えないまでも近年種々の分野で計算科学・工学はやはり進展していると断言してさしつかえないであろう。

さて計算工学研究会Ⅱでは、フェーズフィールド法と組織イメージ活用型の力学特性解析に重点を置いた活動を行った。先述のように、シミュレーションプログラムや理論の詳細にわたる解説書の配布等を行い、現状において入手可能な技術・知識の集積・共有化はある程度達成できたと思われる。しかし残念ながら、当該解析手法は、現在まだまだ汎用的な実用段階には至っていない。研究段階から一部試行段階が出てきた程度であろう。

フェーズフィールド法は不均一な材料組織形成の総合的なシミュレーション手法であり、また鉄鋼材料の組織が、材料科学・工学の中で最も複雑な組織であることは周知の事実である。したがって、鉄鋼の組織形成シミュレーションの完成は、あらゆる材料分野の組織形成シミュレーションの実現を意味する反面、最もハードルの高い研究対象でもある。磁性材料、電子材料、非鉄金属材料などの機能・構造材料の組織形成シミュレーションは、少なくとも鉄鋼材料の場合よりもハードルは低くかつ社会的要求も決して低く無いことを考えると、現実として、おそらく他の種々の材料分野における組織形成計算技術が、時系列的にまず進展する可能性が高い。この意味において、鉄鋼以外の材料分野における組織形成シミュレーションを、今後も必要に応じて注視していくことが肝要と考えられる。

5.2 微視的分析・解析技術の進展

最近「機能元素」とよばれる材料学分野において、電子顕微鏡を用いた原子スケールでの分析技術が著しく進展した¹¹⁾。合わせて、第一原理計算との連携がこれを効果的にサポートしている¹¹⁾。コンセプトは単純である。いわゆる微量添加元素が、材料の諸特性を大きく改善している場合である（この添加元素が機能元素と呼ばれる）。機能元素は微量であるので、これが均一に材料内に分散し材料特性が向上することは通常考えられない（何らかの核形成のトリガーとして働く場

合は例外である)。ほとんどの場合、機能元素は、結晶粒界、相境界、転位、もしくは逆位相境界などの欠陥位置に局在しており、このような例は材料学の至る所に見ることができる。近年の電子顕微鏡の分析分解能の向上がまずこの局所領域の定量解析を可能にした。一方、第一原理計算は、周知のように、原子スケールを対象とした解析では他を寄せつけない武器である。原子スケールでの軽元素分析・解析の進展は、今後の鉄鋼材料の分野において大きなブレイクスルーをもたらす可能性が高い。鉄鋼分野は、常にその時代の最先端の材料分析技術を駆使してきた歴史があり、鉄鋼材料における機能元素の役割解明の分野は、中期的観点において大きく進展すると思われる。鉄鋼材料において、B、C、N、およびOの原子レベルの挙動を実験的に捉え、同時に電子論計算からその挙動を日常的に解析・議論することは、すぐ目の前の現実であろう(さらにもう一步進めて、水素Hの挙動の定量分析・理解は、多量空孔と破壊のメカニズム解明も含めて、現在まさにホットな課題である)。

5.3 変形理論・解析技術の進展

結晶粒微細化技術の進展によって、従来では得られなかった微結晶材料の変形挙動が解析可能となった結果、変形挙動の結晶粒サイズ依存性に関する対照実験から、最近、変形に関する新たな知見が種々得られ始めている。また中性子線回折技術とEBSD技術の融合は、マクロとミクロの観点からの変形不均一性の測定を可能にした^{12,13)}。まさに結晶粒ごとの変形挙動の相違や、各相ごとの変形挙動の相違を直接議論できる時代の到来である。また電子顕微鏡内における変形挙動のその場観察技術の進展は、変形のメカニズムの本質を観ることを可能にした。転位だけでなく回位まで考慮した結晶塑性理論に基づく変形挙動の解析や、分子動力学法を駆使した欠陥ダイナミクスの可視化の進展も著しい¹⁴⁾。新元素戦略(構造材料)では、基本変形単位として"プラストン"なる新概念を提唱し、従来の変形理論を一般化するような分野が進展しようとしている¹⁵⁾。すなわち、近未来的に、変形現象一般に対し、微視的な理解とマクロの塑性変形との関係解明が一步進むと思われる。

5.4 三次元材料組織情報の活用

近年、三次元材料組織情報のさらなる積極的活用の世界的気運が高まっているように見受けられる(昨年度終了した「鉄鋼ゲノムの解明フォーラム」もこの一環である)。これは、実験的に材料の三次元組織情報を、種々の空間スケールにおいて測定できるようになってきたこと^{12,13)}、およびフェーズフィールド法に代表されるように、不均一な組織形態そのものを対象としたシミュレーション手法が発展してきたことに

起因する¹²⁾。つまり三次元組織情報を実験およびシミュレーションで扱うことの出来る時代の到来を見越して、"これを制することが次世代の各種材料開発に有効"と考える技術者が多いことが理由である(この類推は、医療および気象分野の進展の歴史とのアナロジーと考えられる)。

「材料の特性はその内部組織に依存するので、材料開発の多くはその内部組織制御により実現できる」は材料組織学の常識である。したがって、より詳細な内部組織情報を手にした所が、より精緻に材料特性を最適化できることは自明であろう(統計解析で、より多くの因子を考慮できるのであれば、予測・最適化精度は理論的に向上する)。ただし最適化であるので、革命的な向上ではなく、おそらく一步・もしくは半歩先んじる程度かもしれないが、工業的にはこの差は重要と考える次第である。

5.5 米国における材料ゲノムプロジェクトの展開

2011年の6月、オバマ大統領によって、米国に置ける材料ゲノムプロジェクト推進の意向が示され、これを受けて、2012年、米国エネルギー省(DOE)、国防総省(DOD)、NIST(National Institute for Standards and Technology)、NSF(National Science Foundation)を中心に、正式に材料ゲノムイニシアチブ(MGI)が発信した(NSFはDMREF(Designing Materials to Revolutionize and Engineer our Future)プログラムを通じて参加)^{16,17)}。このプロジェクトの目的は、大規模材料データベースと大量の実験データ、および最新の各分野における材料計算科学の手法を縦横無尽に有機的に結びつけることにより、材料開発の圧倒的スピードアップを実現する実効的インフラ整備にある(人材教育も含まれる)。MGIの主要ターゲット材料は現在、半導体パワーデバイス、リチウムイオン電池、コーティング材料、Mg合金、セラミクス焼結、スピントロニクス、グラフェン、生体高分子複合材料などであり^{16,17)}、鉄鋼関連は中心的な対象とはなっていないようである。しかし、MGIのインフラは材料開発一般に対応する枠組みと理解できるので、種々の材料開発を目指した横展開が始まれば、鉄鋼材料の開発研究に対しても、言うまでも無く大きな脅威である。

5.6 インフォマティクスの活用

上記MGIの動きを視野に入れた形にて今年度発足した研究会が、先に記した「鉄鋼インフォマティクス研究会(主査:足立吉隆)」である。この研究会は、計算工学研究会IとII、ならびに「階層的3D4D解析に基づく材料信頼性向上フォーラム」と「鉄鋼ゲノムの解明フォーラム」の全てが融合した内容を有し、「鉄鋼科学技術戦略ロードマップ」の基盤研究方針に沿った、当該分野における集大成的な研究会である。最先

端3D組織解析手法、階層的歪測定手法、フェーズフィールド法、マイクロメカニクス、結晶塑性理論等を垣根なく有機的に連動させ、当該分野の基盤を構築するとともに、三次元材料組織・特性のデジタルアーカイブを日本学術振興会第176委員会と連携して整備することを目的としている。さらにこの新研究会は、次世代の材料インフォマティクス（マテリアルズインテグレーション）分野への貢献も期待されている。

特にインフォマティクスの観点からは、近年のビッグデータ活用時代を反映し、材料分野もこの視点での動きが活発化しそうである。従来、実験・理論に続く第三の手法としてシミュレーションがクローズアップされた時代があったが、最近では、「ビッグデータ」という言葉に象徴されるように、データそれ自体も大きな地位を占めるに至った。材料に関する測定データ量も、EBSDや三次元組織データなど、少し前までは考えられないほど大容量化しつつある。このような背景の下、材料工学におけるシミュレーションと実験データの「データ同化」¹⁸⁾の概念が、今後のマテリアルズインテグレーション分野において重要な役割を果たすと考えられる。

6 おわりに

上記の米国のMGIプロジェクトに関連して、現在、材料計算科学の各種手法を教育する環境整備が、米国の多くの主要大学に展開されているようである。最新鋭の材料計算解析技術を日常的な大学カリキュラム内で演習し、パッケージ化された第一原理計算、状態図計算、フェーズフィールド組織シミュレーション、また材料スクリーニング用の大量の材料データベース操作法など、当たり前のように操作できる学生の連続的輩出を狙っていることと思われる。材料開発の圧倒的スピードアップには、結局、それを遂行できる人材を効率的に増やすことが最も確実である（旧態依然のわが国の材料教育カリキュラムでは、全くケンカにならないので、早期の大改革が必要と考える次第である）。

以上のように総合的な材料開発力の強化が進む一方で、前回のISSS 2012¹⁹⁾に代表されるように、鉄鋼材料における原理原則的な部分を、よりきちんと整備しておくことが将来の飛躍に重要ではないかとする声も高まっている。あくまで個人的な意見であるが、「鉄鋼材料学」がついに、「鉄鋼材料科学」と呼ぶべき新しいステージに移行する時期にさしかかったのではないかという印象を持っている。この実現には、三次元材料組織情報をも含めた大容量材料データの有機的整備と、最先端の実験・計算手法を用いた、教科書レベルの内容に関する鉄鋼材料学の洗い直しが必要であるが、それなりに武器・環境が揃いつつある現在、我々は大きな分岐点に立っているのかもしれない。日本鉄鋼協会として忌憚なくい

ま本当に何が大切なのかを議論し、30年後に「鉄鋼を精緻なScienceにしたのは日本ですね!」と、協会が世界から賞賛される場面を夢見ている…。

参考文献

- 1) 日本鉄鋼協会：計算工学による組織と特性予測技術研究会 最終報告書, (2010)
- 2) 日本鉄鋼協会：計算工学による組織と特性予測技術II研究会 最終報告書, (2013)
- 3) 特集号「鉄鋼材料の組織・特性予測技術の最前線」, 鉄と鋼, 97 (2011), 4.
- 4) Special Issue on Cutting Edge of Mathematical Models for Predicting Microstructures and Mechanical Properties of Steels, ISIJ Int., 52 (2012), No.4.
- 5) 小山敏幸：計算工学による組織と特性予測技術II研究会 (H22-H24) 資料, (2011)
- 6) 小山敏幸：材料設計計算工学-計算組織学編-, 内田老鶴圃, (2011)
- 7) 高木知弘, 山中晃徳：フェーズフィールド法—数値シミュレーションによる材料組織設計—, 養賢堂, (2012)
- 8) 小山敏幸, 塚田祐貴：材料組織弾性学と組織形成 フェーズフィールド微視的弾性論の基礎と応用, 内田老鶴圃, (2012)
- 9) 小山敏幸, 高木知弘：フェーズフィールド法入門, 丸善, (2013)
- 10) 「鉄鋼ゲノムの解明」フォーラム編, シンポジウム講演集「組織・特性解析における三次元組織利用の展開」, 日本鉄鋼協会, (2014)
- 11) Y.Ikushima : J. Electron Microscopy, 60 (2011), S173.
- 12) 新家光雄 (編), 足立吉隆, 小山敏幸 (著) : 3D材料組織・特性解析の基礎と応用, 内田老鶴圃, (2014)
- 13) 階層的3D4D解析に基づく材料信頼性向上フォーラム編, シンポジウム講演集「材料研究に役立つ3D4D解析」, 日本鉄鋼協会, (2011)
- 14) シンクロ型LPSO構造の材料科学HP (<http://mg-lpso.org/>) (2014年5月現在)
- 15) 京都大学 構造材料元素戦略研究拠点HP (<http://esism.kyoto-u.ac.jp/index.html>), (2014年5月現在)
- 16) M.Drosback : JOM, 66 (2014) 3, 334.
- 17) K.Feldman and S.R.Agnew : JOM, 66 (2014) 3, 336.
- 18) 樋口知之 (編著) : データ同化入門 (予測と発見の科学), 朝倉書店, (2011)
- 19) The 3rd int., Symposium on Steel Science (ISSS 2012), 京都, 5/27-30, (2012)

(2014年5月14日受付)