



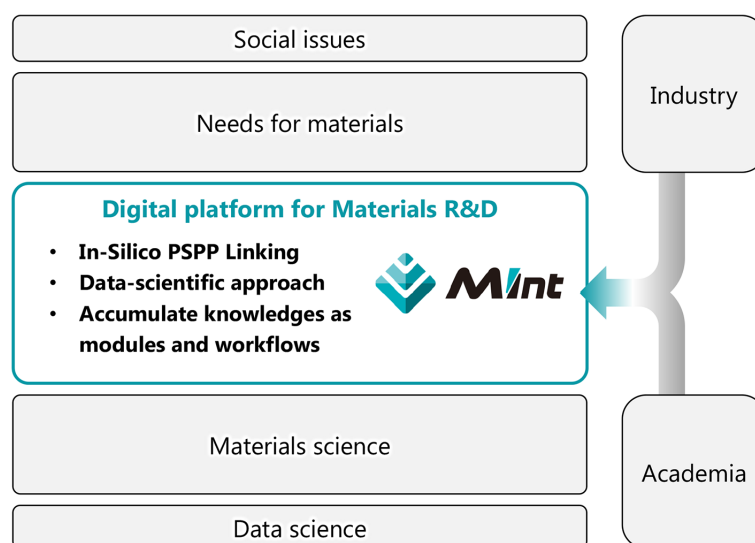
Challenges in Materials Integration

Masahiko DEMURA^{1)*}

1) Research and Services Division of Materials Data and Integrated System, National Institute for Materials Science

Abstract: Materials Integration is the concept of accelerating materials development by linking processing, structure, property, and performance (PSPP) on a computer using any types of models such as theoretical, empirical, numerical-simulation, and machine learning models. In the first and second phases of Cross-ministerial Strategic Innovation Promotion Program in Cabinet Office, Japan, we have developed a system called MInt (Materials Integration for Network Technology), which links PSPP with computational workflows that combine modules implemented, in order to realize the concept of Materials Integration. MInt is equipped with an application programming interface (API) that can be called from various algorithms in the artificial intelligence (AI) field and one can use MInt-API together with the AI algorithms to inversely design materials and processes from desired performance. The target material systems have expanded to steel, aluminum alloys, nickel alloys, and titanium alloys, and the target processes have also expanded to welding, heat treatment, 3D additive manufacturing, and powder metallurgy. MInt is more than just software for materials design; it is designed to serve as a digital platform for industry-academia collaboration. The Materials Integration Consortium has been established with MInt as its core technology, based on the philosophy of sharing tools such as modules and workflows, while competing on how to use them. In materials research and development, which has traditionally been regarded as a competitive area, we hope that a digital collaborative area will be formed and that investment efficiency will be drastically improved.

Keywords: materials integration; processing-structure-property-performance linkage; integrated computational materials engineering; inverse design problem; digital platform for industry-academia collaboration; structural materials.



Received on Nov. 16, 2022; Accepted on Jan. 16, 2023; J-STAGE Advance published on Jan. 25, 2023

* Corresponding author. E-mail: DEMURA.Masahiko@nims.go.jp, Address: National Institute for Materials Science, 1-1 Namiki Tsukuba Ibaraki 305-0044



© 2023 The Iron and Steel Institute of Japan. This is an open access article under the terms of the Creative Commons Attribution-NonCommercial-NoDerivatives license (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/>).



鉄鋼材料・製造プロセスにおけるデータサイエンス活用の新展開

マテリアルズインテグレーションの挑戦

出村 雅彦¹⁾*

Challenges in Materials Integration

Masahiko DEMURA

1. はじめに

材料においてはプロセス、構造、特性、性能の4要素が重要で、これらの間の連関を明らかにしながら材料開発が進んでいく。マテリアルズインテグレーションは、この4要素の連関を計算機上で明らかにして、材料開発を加速しようというコンセプトである (Fig.1)¹⁾。計算機上で材料やプロセスを設計できれば、実験による試行錯誤を軽減でき、材料開発の時間とコストを大幅に短縮できる。さらには、様々な研究者の知恵をデジタル化して蓄積することで再発明の無駄を避け、日本全体として研究開発の投資効率を上げたい。このようなコンセプトが内閣府の戦略的イノベーション創造プログラム (SIP) において提案され、2014年から取り組まれてきた。本稿では、SIP第二期の最終年度に

当たって、これまでの取り組みを俯瞰しながら、産学連携プラットフォームとしてのマテリアルズインテグレーションの考え方、開発してきたシステム、MIntの中身、逆問題への挑戦、社会実装に向けた取り組みについて概説する。これまでにマテリアルズインテグレーションに関して報告された解説²⁻¹⁰⁾と合わせて、参考にしていただければ幸甚である。

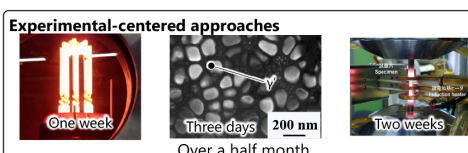
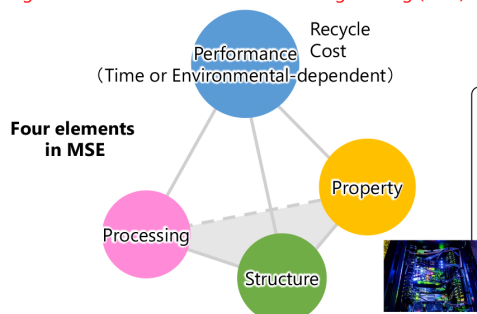
2. マテリアルズインテグレーションの発展の流れ

マテリアルズインテグレーションは、内閣府SIP第1期「革新的構造材料」において提案され、概念検証が実施された。その実績を元に、SIP第2期「統合型材料開発システムによるマテリアル革命」において、中心テーマとして開発

Materials Integration & Its implementation, MInt system

- **In-Silico Linking** among processing, structure, property, and performance
- **Use data-science** to integrate experimental data, database, theoretical & empirical rule, numerical simulation

Digital version of Materials Science & Engineering (MSE)



Digitalize as modules and workflows

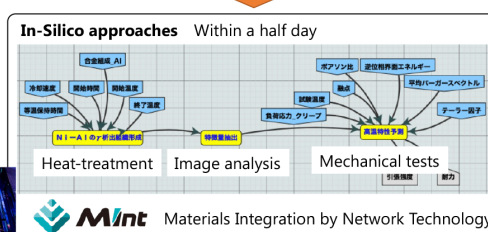


Fig. 1. Concept of Materials Integration and its implementation, MInt. The Japanese version of the figure was originally published in the author's previous report¹⁾. After translated into English, the figure has been modified with the additional description on the Materials Integration.

2022年11月16日受付 2023年1月16日受理 2023年1月25日J-STAGE早期公開 (Received on Nov. 16, 2022; Accepted on Jan. 16, 2023; J-STAGE Advance published on Jan. 25, 2023)

1) (国研) 物質・材料研究機構統合型材料開発・情報基盤部門 (Research and Services Division of Materials Data and Integrated System, National Institute for Materials Science)

* Corresponding author. E-mail: DEMURA.Masahiko@nims.go.jp, Address: National Institute for Materials Science, 1-1 Namiki Tsukuba Ibaraki 305-0044



© 2023 The Iron and Steel Institute of Japan. This is an open access article under the terms of the Creative Commons Attribution-NonCommercial-NoDerivatives license (https://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/deed.ja).

が続けられてきた。Fig.2に発展の流れを時間軸に沿って図解している。以下では、第1期、第2期での開発の概要をまとめる。

2・1 SIP第1期における開発の概要

SIP第1期「革新的構造材料」は耐熱材料を対象に航空・発電向けの材料開発が中心なテーマであったが、岸輝雄プロジェクトディレクター（PD）の強いリーダーシップの元、計算機上で材料を開発するマテリアルズインテグレーションの開発が研究項目の一つとして加わった。当該研究項目では、プロセスから組織（構造）、特性、性能を一気通貫に予測するという概念を実証することを目的としてプロジェクトが組成された。例題として鉄鋼溶接部が選ばれたが、それは、溶接が、凝固・固相変態など幅広い組織形成過程を含むとともに、疲労、クリープ等の性能を律速することに加え、構造材料における実用的な重要性の高いプロセスであることによる。特に、極めて複雑な組織変化が起こる鉄鋼材料について概念検証ができれば、他の金属材料への展開が期待できる。鉄鋼材料に関しては、金属学の知見が豊富に蓄積されており、これらを活用できることも、マテリアルズインテグレーションを検証していく対象として有利な点であった。第1期開発については、既報の解説に詳しい²⁻⁷⁾。

このプロジェクトの中では、まず、マテリアルズインテグレーションを具現化する計算機システムについて集中的に検討がなされた。その結果、材料4要素の連関を結ぶ予測モデルをモジュールとすること、その上で、モジュールを連結して大きなワークフローを構築して、複雑な材料課題に対応するという基盤となるワークフローシステムの概念が確立された⁷⁾。

ワークフローシステムの開発と並行して、鉄鋼溶接部を例題として、組織予測システム、性能予測システムの開発

が実施された。組織予測システムの開発では、溶接金属部の冷却過程を想定して、フェーズフィールド法によって凝固から拡散変態、無拡散変態を順番に予測するシステムを構築した⁴⁾。性能予測システムの開発では、疲労、クリープ、水素脆化、低温脆性を対象として、時間依存の性能を予測するワークフローの開発を進めてきた。開発されたワークフローは、それぞれ、有限要素解析を主体としつつ、対象とする特性、性能に応じて、結晶塑性解析、経験則による応力-ひずみ曲線予測、損傷解析、応力下水素拡散などを組み込みながら寿命予測を行う、かなり高度なものとなっている⁵⁾。

もう一つの重要な特徴は、データ科学的な考え方を導入した点である。2014年当時は、データ駆動型の材料研究はまだ一般的ではなかったことを考えると、構造材料分野におけるデータ駆動研究を先導する取り組みであったと位置づけることができるだろう。ここでは予測における不確かさ評価の重要性を強調し、ベイズ統計に基づく確率論的な取扱の導入を進めた。特に、モデル選択やデータ同化が重要である。詳しくはInoueらの解説⁶⁾に譲るが、データとモデルに基づいて予測の不確定性を評価できるベイズ統計の枠組みが有効であることが、線膨張測定からの相変態挙動の解析¹¹⁾、クリープ構成式における定常項の要否^{12,13)}などの例で示されている。これらのベイズ統計を基盤とするアプローチは、第2期で逆問題を対象とする上でより重要性を増す。

2・2 SIP第2期における開発の概要

第1期で概念検証がなされ、プロセスから構造、特性、性能を一気通貫に予測するためのシステムの形が確立したことを受けて、マテリアルズインテグレーションを中心とした新しい課題としてSIP第2期「統合型材料開発システムによるマテリアル革命」（以下、「マテリアル革命」という。）

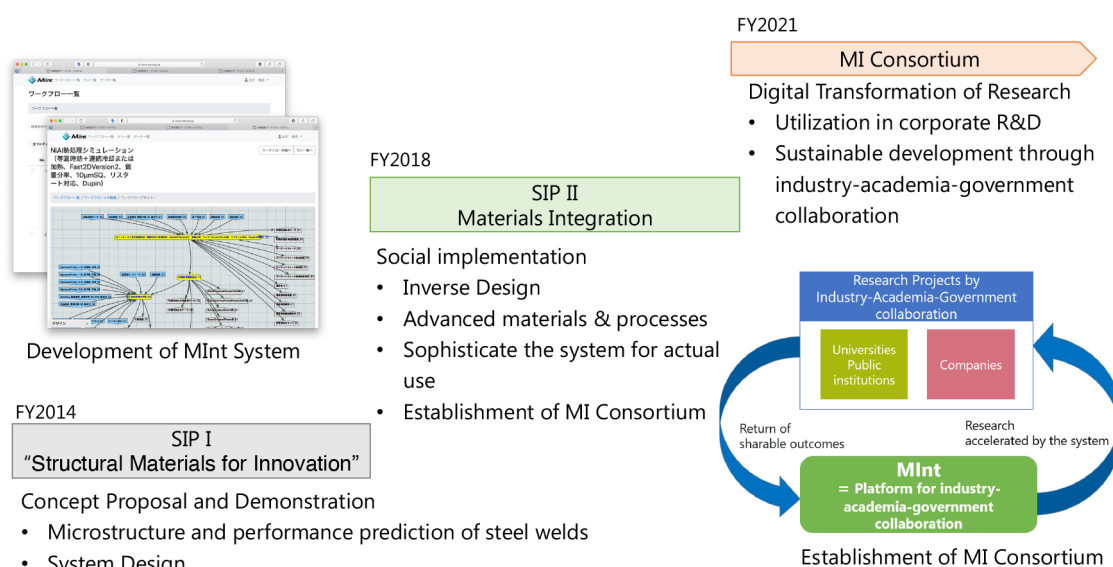


Fig. 2. History of Materials Integration's development.

が設定された。ここでは、企業の研究開発で使用されることを想定して、欲しい性能から最適な材料・プロセスを設計できる逆問題に対応した手法開発を目指すこととなった。さらに、適用できる材料分野を拡大する目的で、先端的な構造材料・プロセスを取り扱えるようにモジュール、ワークフローを開発することも重要な課題として取り上げられた。Fig.3に「マテリアル革命」の体制図を示す。先端的な材料・プロセスに対応した逆問題マテリアルズインテグレーションの基盤を開発するA領域、これを実問題に適用していくB領域（炭素繊維強化プラスチック）、C領域（粉末・3D積層）で構成されている。A領域は、逆問題解析、先端材料・プロセスへの展開（CFRP、粉末・3D積層）、データベース、統合システムを担当する5つのテーマによって構成されている。

産学がともにリーダーを務めるマネジメント体制をとり、実際の課題（逆問題）を取り扱う中で道具を鍛えていくという考え方で研究開発を進めてきた。これは同時に、次の章で詳述する産学連携プラットフォームを形成することにつながっている。特に、社会実装を進めることが計画当初から目標化されており、そのための体制作り、早期から産学での議論を重ねてきた。その結果、SIP終了後の自律的な運営を目指して、2020年12月にマテリアルズインテグレーションコンソーシを設立したが、これについては、6章で述べる。

3. 産学連携プラットフォームとしてのMInt

前章では材料開発を加速するための道具としてMIntが構想され、開発されてきた過程をたどってきた。ここでは、

視点を変えて、産学連携プラットフォームとしての側面を俯瞰したい。

社会課題は複雑化し、新しい材料への期待も高まっている。Fig.4に、社会課題、材料に要求される性能、材料開発、材料学の関係を層構造として整理した。まず、社会課題を解決するために必要な材料性能が特定され（図の「Needs for materials」）、求められる材料性能を実現する材料の組成やプロセスを最適化する。これが材料開発（図の「Materials R&D」）のレイヤーとなる。社会課題解決と材料開発を結びつけるのは産業界の役割といえる。さて、材料開発は材料学の基盤（図の「Material Science」）によって支えられるが、材料学を構築し、深めるのがアカデミアの役割である。材料開発を支える学問基盤として、最近では、データ科学の役割も大きくなっている。産業界とアカデミアの関係は、材料学が材料開発を支えるという一方向の関係だけではない。産業界の課題から材料学に対して新しい問題が提示され、これが新しい材料学を構築するきっかけになる。このように産業界が担う社会課題解決とアカデミアが担う学問は、材料開発というレイヤーを通して、相補的な関係で結びつく。これを端的に言い表したのが、本多光太郎博士の「産業は学問の道場」であろう。

社会課題と材料学のギャップは大きく、これを結ぶ材料開発という工学的なレイヤーは、複雑で多岐にわたる知識と経験が求められる。社会課題の要請に応えるには、複数の性能を同時に満たすことが求められる。例えば、強さと軽さを高いレベルで両立することに加えて、溶接性やリサイクル性の良さ、さらにコスト面の要請を満たすことを求められる・・・といった具合である。これら多岐にわたる要求性能について強固な材料学の基盤に立って理解して解

SIP-II

Materials Integration for Revolutionary Design System of Structural Materials

- PD: Prof. Mishima, Sub-PD: Prof. Mohri
- From 2018 (5 years)
- Halve R&D cost

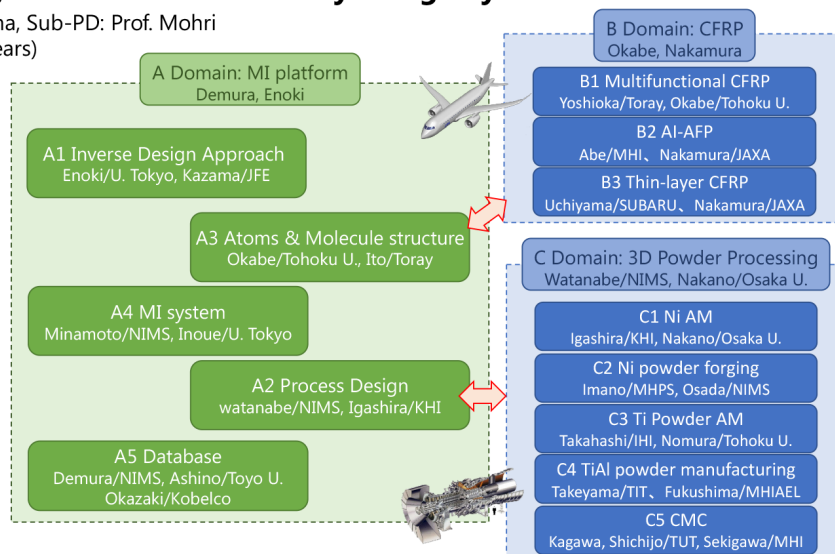


Fig. 3. Project formation of “Materials Integration for Revolutionary Design System of Structural Materials” in Cross-ministerial Strategic Innovation Promotion Program (SIP) phase 2nd, the Cabinet Office, Japan.

決したいわけであるが、それは容易ではない。さらに、一つの特性に限ったとしても、現象は複雑で、多くの材料学的な知見が必要となる。例えば、引張強度を取り上げたとしても、降伏、加工硬化、塑性不安定、損傷蓄積などが関わり、これらには、弾塑性力学、転位論、結晶塑性、損傷力学、変形中に変態する場合には熱力学などが関わってくる。

このように材料開発のレイヤーは、一人の研究者、一つの研究室が取り扱える範囲を大きく超えているにも関わらず、研究開発の現場は個社で閉じているのが通常である。これは個々の企業の経営面からみれば合理的といえる。部素材企業にとって材料およびプロセスに関する発明は差別化の源泉であり、材料開発は競争領域と見なされるからである。一方で、社会課題からの要求が苛烈になっている現代において、個社単位では、材料学の基盤に立脚した材料開発を迅速に行うことが、次第に難しくなっている。国際競争が激化する中、類似の苦労を各社個別にやる余裕が我が国に残されているのか、強い危機感が産業界で共有されつつあるように感じる。

さらに、個別的に閉じた研究開発は、産と学との連携を限定的な形にしている面もある。前述の通り、材料開発は材料学の様々な専門知識を組み合わせる必要があるが、理想的には、様々な専門家が集まって問題解決に当たることが望ましい。しかし、アカデミアの複数の専門家が集まって、個別の企業の課題に取り組むことは実際上、かなり難しい。現実に行われている産学共同研究は、参画するアカデミア研究者の専門領域に合致する部分について、局所的な形で行われる傾向にある。課題全体、すなわち、プロセス、構造、特性、性能の流れで見たときに、どこがどの程度、最終性能に寄与しているかわからない中で、一部を

取り上げて共同研究を進めざるを得ない状況になっている。アカデミアの側からみると、切り取られた部分的な課題に対処することとなって、大きな学問上の問題に昇華させることが難しい。部分最適にとどまる共同研究では、「学問の道場」としての機能は限定的にならざるを得ない。

社会課題が高度化し、国際競争が厳しくなる中で、研究開発投資を効率化し、また、真に有機的な形で産学連携を進めるにはどうしたらよいか。ここで、一つの仮説を置きたい。それは、材料課題が個別的であったとしても、それを分節していくことで、共通性の高い課題に還元できると言うものである。そして、分節化した一つ一つの共通性の高い課題を解く知恵をモジュールという形で蓄積し、これを縦横無尽に組み合わせることで、実践的な課題に対応できるワークフローを構築する。この仮説に基づいてデザインされたものがMIIntである。Fig.5は、これまで述べてきたことをレイヤー構造という形で粗視化して、MIIntの位置づけを明確化したものである。材料開発レイヤーにMIIntを配置し、社会課題の要請と材料学を結びつけるとともに、「学問の道場」としての産学連携プラットフォームにしていこうという構想である。MIIntは、(1) 計算機上でPSPPの連関をつけること、(2) 実験データの統合のためにデータ科学アプローチを導入すること、(3) 課題解決に必要な専門家の知恵をモジュール、ワークフローの形で蓄積することを特徴としている。研究開発の投資効率向上の観点からは、共通性の高いモジュールを共用化することで再発明の無駄を排することが重要となるだろう。同時に、差別化の源泉となる個別課題の具体的な解決方法は、入力するパラメータと計算結果と言う形で個別性を確保していく。さらには、モジュールの組み合わせ方、すなわち、ワークフロー

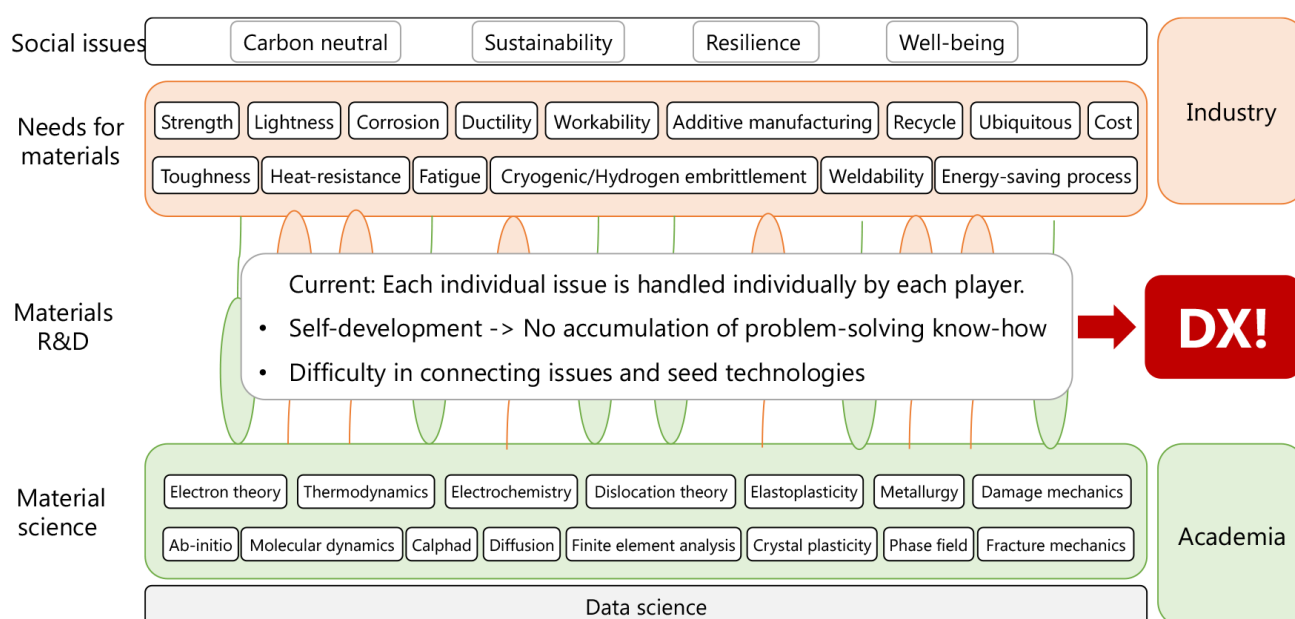


Fig. 4. Gap between the needs for materials from social issues and the materials science and current situation of materials research and development.

の構成をノウハウ化するということも十分考えられるであろう。すなわち、道具づくりは協調して行い、その使いこなしで差別化するという図式である。産学連携の観点で見ると、モジュールは様々な研究者、研究室が生み出したものであり、いわばアカデミアの集合知をデジタル化したものとみることができる。さらに、個別の産学協同研究においても、PSPPをつなぐワークフロー全体を評価しながら進めることで、影響因子の取り込みが不十分な箇所や物理的な描像に改善が必要な箇所が定量化されることになる。その結果として、実際の問題に即して学問を深めていく契機となることが期待される。

具体的な事例で考えてみよう。例えば、省エネルギーの観点からニッケル基超合金の時効熱処理を最適化する課題が産業側のニーズとして持ち上がった場合にどうするか。マテリアルズインテグレーションではこの課題を解決する手法として、実験を計算モジュールに置き換え、熱処理から高温特性を予測する方法を考案することになる。具体的には3つのモジュールに分解して、これを直列でつなぐことを考える。まず、熱処理をフェーズフィールド法で模擬して、強化相 γ' とマトリックス相 γ からなる二相組織を計算する。次に、得られた二相組織を画像処理で解析して、 γ' の平均サイズ、体積率、平均合金成分等の統計情報を抽出する。最後に、抽出した統計情報を用いて、析出強化理論や固溶強化理論に基づいて高温強度を推定する。このような3つのモジュールを連結したワークフローによって、プロセス（熱処理）、構造（ γ/γ' マイクロ組織）、特性（高温強度）を結びつけることができる。熱処理を模擬するモジュールはフェーズフィールド法の専門家である小山敏幸博士（名古屋大学）が、画像解析のモジュールはマイクロ組織の機械学習の実績があるDmitry Bulgarevich博士（NIMS）が、そし

て、高温強度予測のモジュールは当該材料の力学特性予測の専門家である長田俊郎博士（NIMS）が開発すると言う具合に、各分野の専門家が集まって、この課題を解くための道具を作っていく。こうやって開発したモジュールをMIntシステムに実装し、ワークフローを構築することで、自動計算が可能になり、例えば、等温時効のプロセスマップを容易に作成することができる。これを使って、それぞれの企業における制約条件や狙いに応じて最適な熱処理条件を決めていくことになる。さらに、従来の等温時効を凌駕する先進的な熱処理方法を探索すると言ったことも、人工知能による探索アルゴリズムと組み合わせることで可能となる。ここではモンテカルロ木探索に詳しいDieb 博士が活躍することになる。このように、PSPPに沿った全体像をモジュールに分解することで多くの専門家の知恵をデジタル化して蓄積するとともに、逆問題の観点ではデータ科学の専門家の知識も活用できるようになる。

すなわちMIntは、単なるサイエンティフィックワークフローに関するアプリケーションソフトウェアであることを超えて、産学連携のデジタルプラットフォームとして機能するようにデザインされている。産学共同研究で生まれた道具をデジタルとして蓄積し、それを再利用していくことで、孤立化、局所化している材料開発のレイヤーに協調領域を形成していくことを、目指していくことになる。

4. MIntのシステムとしての特徴

これまでに述べてきたようにMIntはモジュール、ワークフローを共用化していく機能を有している。一方で、材料開発という競争領域の道具として機能するように、専用領域を設定できる。まず、計算データは他のユーザーから秘

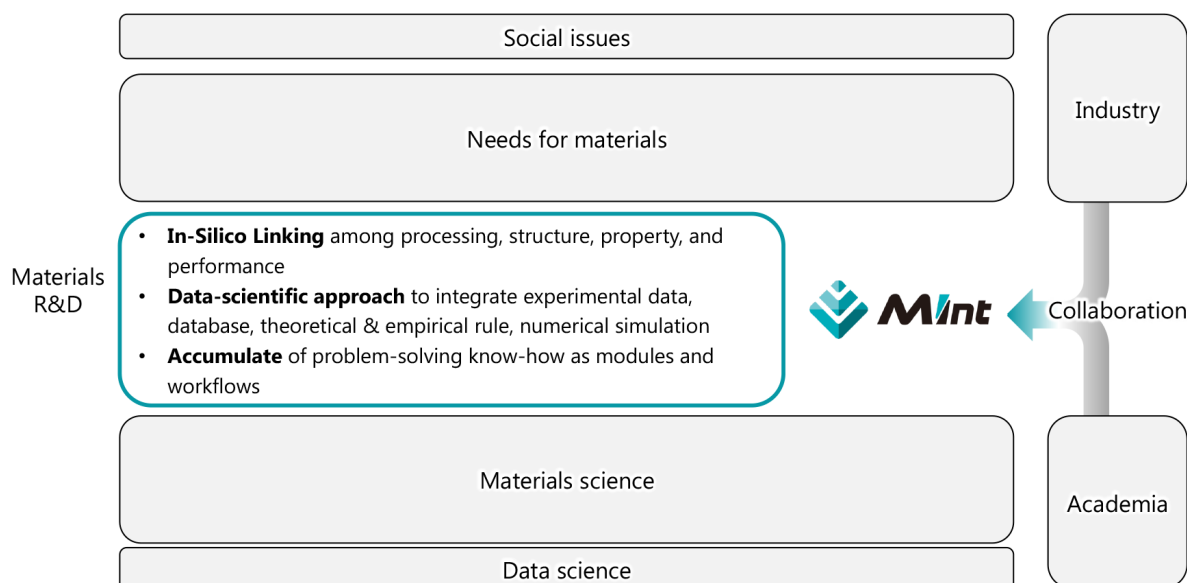


Fig. 5. Role of materials integration and its implementation, MInt (Materials Integration by Network Technology), for the digital transformation of the industry-academia collaboration in materials research and development.

匿されるようになっている。さらに、個人とグループの単位でモジュール、ワークフローを管理できるようになっているので、ユーザーが独自に調整・構築したモジュールやワークフローを秘匿することができる。道具はできるだけ協調領域で開発し、それをどう使っていくかが競争領域と言うのが基本的な考え方ではあるものの、実際の必要に即して、秘匿性と共用性を自在に設定できる仕組みとなっている。

計算の一部を外部で行う機能も重要である。これは、2つのケースへの対応のために実装した。1つはモジュールに含まれるモデルの秘匿性が高く外に置けない場合、もう一つはモジュールに商用ライセンスが含まれる場合である。いずれの場合も、各機関のローカル環境で計算を実施する必要がある。これらのケースに対応するために、MIntは外部計算機と安全な方法で通信しながら、ワークフロー計算を実行する仕組みを実装している。この仕組みによって、ユーザーは通常のワークフローと同じように計算を実行し、データを一貫した形で蓄積することができる。

さらに、逆問題に対応するために、アプリケーション・プログラミング・インターフェース (API) を実装した。既報⁷⁾で述べたように、MIntはwebベースのシステムであり、ユーザーはwebブラウザからグラフィカルユーザインターフェースを通して、ワークフローのデザイン・計算実行、計算データのダウンロード等を実施する。APIを使用する

ことで、これをコマンドラインから実施することが可能となり、Python等のプログラムから操作することができるようになる。5章で述べるように、逆問題を解く際には、順方向の計算を逐次実行する必要がある、APIの実装は必須であったといえる。

5. SIP 第2期で取り扱ってきた材料課題と逆問題事例

5・1 取り扱っている材料課題の範囲と特徴

Table 1にSIP第2期で取り扱っている材料課題をまとめた。材料は第1期でも扱ってきた鉄鋼、アルミニウム合金に加え、ニッケル合金、チタン合金などの耐熱合金が加わっている。鉄鋼については第1期でも扱ってきた溶接が中心である (テーマ番号A1-3, 4, 51)。加えて、高強度鋼について強度と延性を両立するミクロ組織を設計する技術を確立する観点から、第2期で新たにDual phase組織を対象に加えている (A1-1)。アルミニウム合金については析出強化材料に加え、それに伴って、プロセスに時効のための熱処理を加えている (A1-2, 52)。ニッケル合金においても、同様に、時効熱処理を取り扱っている (A2-2, 4) 他、さらに、耐熱合金において最近注目度が上がっている3次元積層造形 (アディティブ・マニュファクチャリング) (A2-1)、粉末冶金プロセスを取り上げている (A2-4, 5)。粉末製造プロ

Table 1. Materials issues treated in the project “Materials Integration for Revolutionary Design System of Structural Materials” in SIP-II, the Cabinet Office, Japan.

Thema #	Materials	Process	Microstructures	Property / Performance	Teams	Major publications
A1-1	Steel	Welding	Dual-phase	Tensile strength, Elongation	JFE steel, U. Tokyo, NII	14-16)
A1-3			Ferrite, Pearlite, Bainite, Martensite, Martensite-Austenite constituent	Charpy absorbed energy, Tensile strength	KOBELCO, U. Tokyo	17-19)
A1-4			Ferrite, Bainite, Precipitated	Creep rupture time	IHI, U. Tokyo, NIMS, Teikyo U.	20-12)
A1-51			Dual-phase	Hardness, Tensile strength, Toughness	NISSAN, U. Tokyo	
A1-2	Aluminum alloy	Heat treatment	Precipitated	Tensile strength, Elongation	UACJ, U. Tokyo, NIMS	
A1-52			Solid solution, Precipitated	Yield strength, Tensile strength, Elongation	Showa Denko, U. Tokyo	22, 23)
A2-1	Nickel alloys	Additive manufacturing		Stress-strain curve, Cracking behavior	NIMS, Osaka U., Tohoku U., Hyogo Pref. U., KHI	24-27)
A2-2		Heat treatment		(TTT diagram)	NIMS	
A2-3		Gas atomize	γ/γ' two-phase	(Powder diameter distribution)	NIMS	28)
A2-4		Powder metallurgy, Heat treatment		Yield strength, Creep rupture time, High-temperature fatigue	NIMS, Nagoya U.	29, 30)
A2-5		Sintering		(Sintering behavior)	Kyushu U.	
A2-6	Ti alloys	Forging	α/β two-phase	Fatigue	KOBELCO, Osaka U., Gifu U., NIMS, U. Tokyo	31, 32)
A2-8		Powder processes	Near α	Tensile strength	Osaka U.	33)

セスについて粒度分布を予測するモジュール作成に取り組んでいる点も特徴的であろう (A2-3)。チタン合金では、粉末冶金 (A2-8) に加え、大変形鍛造プロセス (A2-6) も対象にしている。金属材料分野としては、実用上、重要性の高い材料・プロセスを網羅しているといえる。実際には、材料種別とプロセス種別を独立にモジュール化できるわけではないので、例えば、ニッケル合金用に開発してきた3次元積層造形の模擬モジュールを、鉄鋼、アルミニウム合金、チタン合金にそのまま適用できるわけではない。しかし、当該モジュールがあることで、材料固有の物性値、相変態に関する情報を取り込むことで、様々な材料に展開できることになる。第2期の開発においても、第1期に開発してきた溶接模擬モジュールを活用することで、ニッケル合金における3次元積層造形を模擬するモジュールの開発を効率化することができている。

対象とする特性、性能については、高温強度、クリープ寿命、疲労など単独の特性・性能を予測する課題の他、強度と延性、応力-ひずみ曲線と割れ挙動など、複数の特性・性能を予測する課題もある。特に、トレードオフの関係にある強度・延性については、実際の材料開発において同時に調整することが求められるものであり、どちらも予測できるワークフローを構築することは、実用上重要となる。

Table 1には各課題を担当する機関も列記している。テーマ番号A1-Xは、第1期の活用資産を活用しつつ、欲しい特性・性能から材料・プロセス・構造を最適化する逆問題にいち早く取り組むこととした。企業での利活用を想定して、逆問題の目標を産業界中心に設定し、その課題解決には、産学のチームで臨むという体制になっている。作成されたツールは、全体で共用化することになっており、3

章で議論してきた産学連携の先導事例といえる。一方で、テーマ番号A2-Xについては、最近の先進的なプロセスに対応していくために、アカデミア中心に、まずは順方向の計算技術を研究開発している。特に、3次元積層造形の計算技術は、世界的にも基盤技術の開発段階にあり、アカデミアが中心となるステージであったと判断している。ただし、このような基盤技術開発のステージであっても、産業界で把握している材料課題を解決するものでなければいけないので、Fig.3にあるように、産学のチームで課題解決を進めているC領域との連携が重要となる。

各テーマからはすでに成果が出始めており、論文として報告されている。その一部を主要な論文¹⁴⁻³³⁾として抽出し、Table 1に参考文献番号を記した。各テーマにおける詳細な研究内容については、これらの論文を参考にしていたけると幸甚である。

5・2 逆問題の挑戦

材料開発は欲しい性能から材料・プロセスを特定していくものであり、これは因果の流れを逆にたどるという意味で典型的な逆問題といえる。MIntが材料開発の現場で役に立つためには、逆問題に対応できる必要がある。Fig.6にMIntと人工知能 (AI) を組み合わせた逆問題の解き方の典型的な形を模式的に示す。一般に材料の多くの課題では、順方向の応答関数を解析的な形で示すことができず、また、全探索空間についてワークフローの計算をすることも現実的ではない。そのため、ここでは、機械学習、ベイズ統計を含むAIの探索アルゴリズムによる逐次最適化手法の活用を考えることとした。例えば、ベイズ最適化のアルゴリズムでは、まず、探索空間の何点かについてMIntを用いて順方向の計算を行い、初期データとする。これに基づ

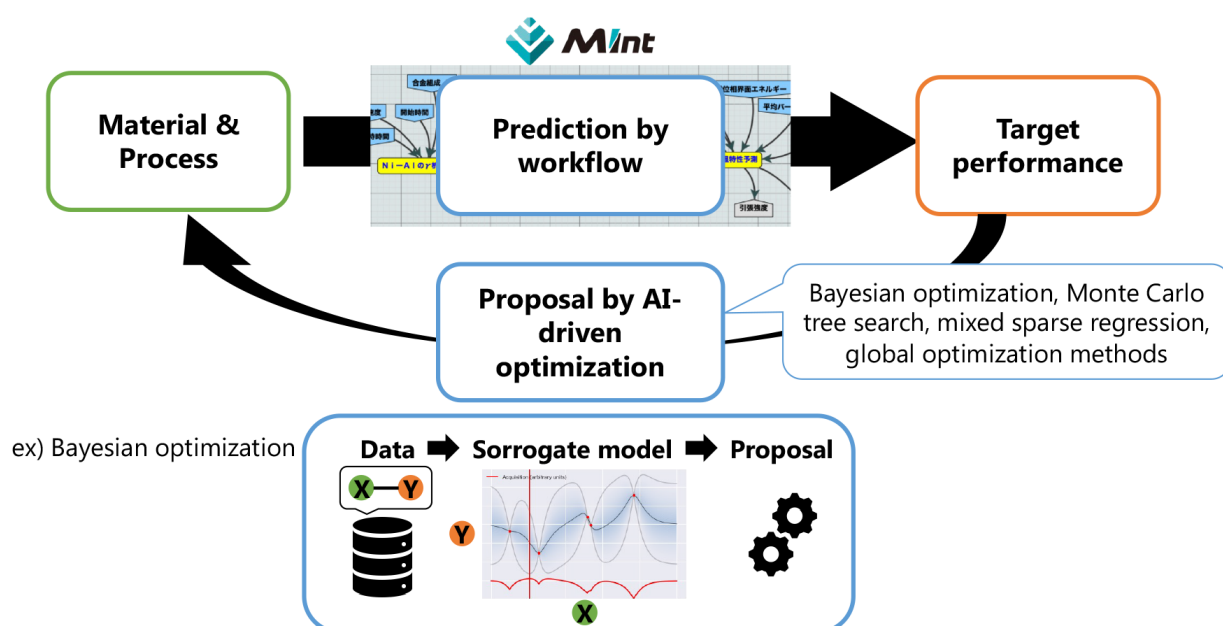


Fig. 6. Schematic illustration of the method to inversely design materials and process from desired property/performance by the sequential optimization loop combined with the forward prediction in MInt and the artificial intelligence algorithms.

いて、ベイズ推定による代理モデルを構築する。この代理モデルはワークフロー計算に比べると迅速に計算できるため、探索空間全体について推定値や推定誤差を計算することや、特定の評価関数を最大とする探索点を同定することは、比較的、現実的な計算時間の中で実施できる場合が多い。評価関数としては、例えば、これまでの最良値を更新できる期待値などを設定することができる。その上で、最も更新期待値が高い候補点を抽出する。代理モデルの作成から候補点抽出までは、MIntの外側で、例えばPython等のプログラムで実施する。次に、候補点について、実際にこれまでの最良値を更新できているかをMIntで計算して確認する。その結果が、今回の目標に達していれば探索を終了し、目標に達していないようであれば、この新しい計算結果をデータとして加えて代理モデルの作成からやり直す。このように、順方向計算データ生成、代理モデル作成、候補点抽出を繰り返すのが、逐次最適化の基本的な形である。この逐次最適化の過程を自動で進めていくために、MIntのワークフロー計算と計算データの取り出しをAPIから実施できることが必須となったことは、4章で述べたとおりである。

以下では、筆者が関わった2つ具体的な逆問題事例から、MIntとAIを組み合わせていく方法について、概説する。なお、紙面の都合上、詳細については、現在、論文投稿中の別報に譲ることとしたい。

(1) ニッケル基超合金の高温強度を向上するための時効熱処理条件のデザイン

等温時効に限らず、昇温や降温を組み合わせると、相当な探索空間になる。例えば、時間軸を10分割、温度領域を9分割すると 9^{10} ($=3,486,784,401$) の膨大なパターンの組み合わせが存在する。3章で触れたようにMInt上にワークフローを構築して順方向の解析を実験と比して飛躍的に短時間にできたとしても、現状、1パターンの計算に数時間はかかるので、全てのパターンを網羅的に計算するのは現実的ではない。そこで、AI探索アルゴリズムによる効率的な探索を進めることになる。ここでは、逐次最適化法の一つのモンテカルロ木探索^{34,35)} という囲碁や将棋で用いられている探索手法を適用した。当該手法で提案と検証を計1620回試した結果、従来の等温時効で得られる高温強度を凌駕する110組のパターンが見つかった。探索空間の広さから考えると、効率の良い探し方であったといえるだろう。ただし、ここで見つかったパターンが最も高温強度を上げるものであるかは自明ではない。

さて、AIによって発見された110組のパターンのトップ5について、強化相である γ' の体積率、平均サイズ等の時間発展を詳細に分析してみた。すると、これら優れたパターンに共通する「戦略」があることに気がついた。具体的には、初期に比較的高温で短時間に最適な γ' サイズにまで成長させ、後半は低温・長時間の時効で γ' 体積率をあげ

て高温強度を引き上げていくと言うものである。高温で拡散が早く、低温で γ' の熱力学的安定性が高まることを考えると、合理的な戦略に見える。この戦略に沿って考えると、2段時効、すなわち、高温短時間+低温長時間という2つの等温時効ステップを組み合わせたものが、最適ということになる。その考え方に従って、特に、後段の低温時効の温度を最適化したところ、AIが発見した最も優れたパターンを凌駕する熱処理パターンを設計することができた。

このように、AIによって効率的に良い解を発見し、そこから詳細な分析によって新しい戦略を見いだすことも可能になってくる。特に、MIntで計算のワークフローを確立しておく、詳細な分析が容易になる点を協調しておきたい。

(2) 耐熱鋼溶接継手のクリープ寿命低下を抑制する溶接条件のデザイン

耐熱鋼の溶接継手のクリープにおいては熱影響部で損傷が早期に蓄積して破断に至るいわゆるType IV破壊が支配的である。溶接模擬によって熱影響部の形状を推定し、これをもとにクリープ損傷モデルを組み込んだ有限要素解析によって、溶接継手全体のクリープ寿命を推定することができる^{21,36)}。すなわち、溶接条件(プロセス)から熱影響部形状(構造)を経て、クリープ寿命(性能)を予測するというワークフローとなる。これをMIntに実装することで、様々なAI探索手法と組み合わせて溶接条件を最適化することは可能であり、実際に、ベイズ最適化等の方法で、クリープ寿命をできるだけ低下させない溶接条件を提案することが可能であることを確認している。

さらに、この事例では、プロセス、構造、性能という形で、構造を間に挟んでいることを使って、複数代理モデルを接続したタンデム型最適化手法と名付けた方法を考案している。端的には、非線形性の強いプロセスと構造の間はガウス過程モデルで、線形関係を期待できる構造と性能(特性でも良い)との間はベイズ線形モデルで、それぞれ代理モデルを作成し、これらを確率論的に接続して、溶接条件からクリープ寿命を予測する確率モデルを作成するという方法である。この際にポイントとなるのは、構造を表現する因子を上手く設計して、後段の線形性をあげる点にある。

さて、このように代理モデルを2段階にするという面倒な方法をとることの効能として、2つ挙げることができる。第一はメカニズムに基づく理解の促進である。一般に、プロセスと構造/特性/性能との関係は非線形性が強いが、構造と特性/性能との関係は、構造を記述する因子を上手く抽出すると、線形関係で記述できる場合がある。そして、このように線形関係で記述できる構造因子を見つけることができると現象の理解にも役立つ。例えば、粒径の逆数の平方根というマイクロ組織の因子は硬さや降伏強度と線形関係にあることが、Hall-Petch関係として知られている。このような関係を経験的に見いだすことができると、そこから様々な粒界強化機構の議論につながっていく。実際に、こ

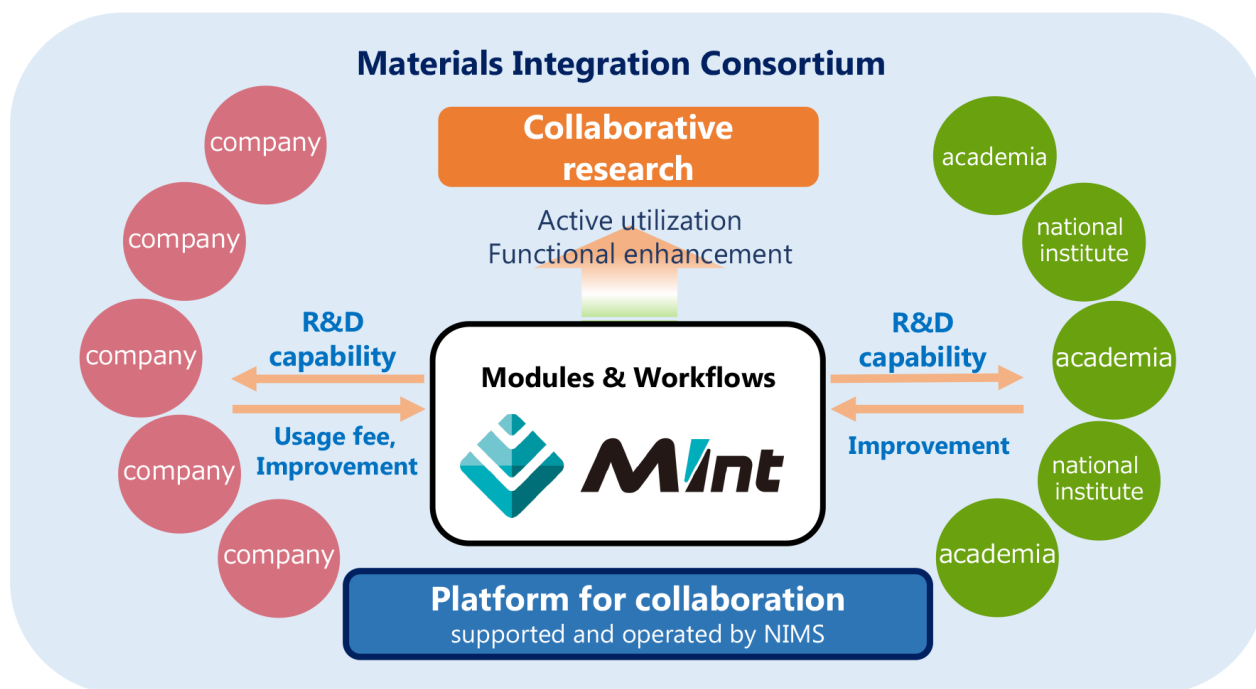


Fig. 7. Concept of Materials Integration Consortium in which the industry and the academia performs collaborative research and development using MInt. At the mase time, they contribute the development of MInt by sharing modules and workflows.

の事例では、溶接継手のクリープ寿命を線形関係で表現できる熱影響部の幾何学因子を考案できている、クリープ寿命低下を防止するための指針を議論できるようになっている。もう一つの効能は、当該代理モデルの汎用性をあげることができるというものである。具体的には、構造-性能連関を表現する代理モデルについては、プロセスの種類に依存せずに使用できることになる。例えば、アーク溶接を想定して最適化を行った際に作り上げた構造-性能連関の代理モデルは、そのままレーザー溶接でも使用できる。新たに作るべき代理モデルは、プロセス-構造の部分だけです。つまり、熱影響部形状とクリープ寿命との関係に関するデータは、溶接方法を横断して使えることになり、データの有効利用を図る点で有利といえよう。

本事例のように、構造に関する情報を潜在因子としてプロセスと特性/性能の間に配置した上で代理モデルをタンデム型で接続する方法論は、PSPPでワークフローを構成するマテリアルズインテグレーションの考え方が適用できる多くの材料課題において、このタンデム型最適化手法は有効であると期待される。

6. 社会実装に向けて

MIntを産学連携のプラットフォームとして機能させるには、これまで述べてきたシステム、モジュール、ワークフロー、逆問題事例創出に加えて、MIntを中心とした産学連携のための体制作りが肝要である。SIP第2期では、開始

当初から社会実装を強く意識し、参画機関を中心として、体制作りについて議論を重ねてきた。3章で述べた基本的な考え方を共有しながら、コンソーシアムという運営体制がのぞましいということになってきた。産業界が課題を提供し、アカデミアが解決手法を提供するという基本的な形を確認しつつ、維持・発展するための費用負担についても突っ込んだ議論を行ってきた。その結果、Fig.7に模式的に示すような産学連携の考え方を作り上げて、これに賛同する機関とともに2020年12月にマテリアルズインテグレーションコンソーシアム(MIコンソ)を発足させた。2年たった現在、企業会員9社、アカデミア会員17機関へと成長している。コンソーシアムとMIntの管理・運営は、NIMSが担うことになっている。さらに、SIP終了後のさらなる発展に向けて、NIMSの協調領域形成型の産学連携の仕組みであるマテリアルズオープンプラットフォーム(MOP)へ移行していくことを、関係機関と協議しながら進めているところである。

7. おわりに

本稿では、マテリアルズインテグレーションの発展過程について、特に、MIntを中心として、解説を試みた。3.で詳しく述べたように、MIntは産学連携のデジタルプラットフォームとして構想されたものであり、材料開発をデジタルトランスフォーメーションしていく鍵になると期待している。SIP第2期開発で取り扱っている材料課題や逆問題の考え方については、紙面の関係で概略だけに留めた。

MIntに搭載されていく様々なワークフロー、これらを活用した逆問題事例のそれぞれの紹介は、今後、報告されることになるSIP第2期の最終成果報告書に譲ることとしたい。社会実装の体制についてはSIP終了後に向けて議論を重ねているところであるが、基本的には、すでに立ち上げたMIコンソの考え方に沿ったものに落ち着くと見込んでいる。今後は、構造材料以外への展開、スタートアップへの対応など、さらに幅広い分野・対象への貢献のあり方が、議論の俎上に載せられることになるだろう。拙稿が、マテリアルズインテグレーションの考え方、SIP第2期のねらいをご理解いただく一助となれば、幸甚である。

謝辞

本研究で紹介した一部の研究は、内閣府総合科学技術・イノベーション会議の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」および「統合型材料開発システムによるマテリアル革命」(管理法人: JST)によって実施された。ここに記して感謝する。

文 献

- 1) M.Demura: *J. Smart Process.*, **10**(2021), 78 (in Japanese). <https://doi.org/10.7791/jspmee.10.78>
- 2) T.Koseki: *J. Inf. Process. Manag.*, **59**(2016), 165 (in Japanese). <https://doi.org/10.1241/johokanri.59.165>
- 3) M.Demura and T.Koseki: *Mater. Trans.*, **61**(2020), 2041. <https://doi.org/10.2320/matertrans.MT-MA2020003>
- 4) T.Koyama, M.Ohno, A.Yamanaka, T.Kasuya and S.Tsukamoto: *Mater. Trans.*, **61**(2020), 2047. <https://doi.org/10.2320/matertrans.MT-MA2020001>
- 5) M.Enoki: *Mater. Trans.*, **61**(2020), 2052. <https://doi.org/10.2320/matertrans.MT-MA2020007>
- 6) J.Inoue, M.Okada, H.Nagao, H.Yokota and Y.Adachi: *Mater. Trans.*, **61**(2020), 2058. <https://doi.org/10.2320/matertrans.MT-MA2020006>
- 7) S.Minamoto, T.Kadohira, K.Ito and M.Watanabe: *Mater. Trans.*, **61**(2020), 2067. <https://doi.org/10.2320/matertrans.MT-MA2020002>
- 8) M.Demura: *J. Inf. Sci. Technol. Assoc.*, **71**(2021), 252 (in Japanese). https://doi.org/10.18919/jkg.71.6_252
- 9) M.Demura: *Plastos (Bull. Jpn. Soc. Technol. Plast.)*, **5**(2022), 193 (in Japanese). https://doi.org/10.3227/plastos.5.52_193
- 10) M.Demura: *Mater. Trans.*, **62**(2021), 1669. <https://doi.org/10.2320/matertrans.MT-M2021135>
- 11) H.Kim, J.Inoue, T.Kasuya, M.Okada and K.Nagata: *Comput. Mater. Sci.*, **184**(2020), 109837. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2020.109837>
- 12) H.Izuno, M.Demura, M.Tabuchi, Y.Mototake and M.Okada: *Sci. Technol. Adv. Mater.*, **21**(2020), 219. <https://doi.org/10.1080/14686996.2020.1738268>
- 13) Y.Mototake, H.Izuno, K.Nagata, M.Demura and M.Okada: *Sci. Rep.*, **10**(2020), 10437. <https://doi.org/10.1038/s41598-020-65945-7>
- 14) T.Shiraiwa, S.Kato, F.Briffod and M.Enoki: *Sci. Technol. Adv. Mater.-Methods*, **2**(2022), 175. <https://doi.org/10.1080/27660400.2022.2080483>
- 15) F.Briffod, T.Shiraiwa and M.Enoki: *Mater. Sci. Eng. A*, **826**(2021), 141933. <https://doi.org/10.1016/j.msea.2021.141933>
- 16) H.Kim, T.Yamamoto, Y.Sato and J.Inoue: *Acta Mater.*, **176**(2019), 264. <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2019.07.006>
- 17) T.Kasuya, M.Inomoto, Y.Okazaki, S.Aihara and M.Enoki: *Weld. World*, **65**(2021), 1609. <https://doi.org/10.1007/s40194-021-01111-5>
- 18) M.Kunigita, S.Aihara, T.Kawabata, T.Kasuya, Y.Okazaki and M.Inomoto: *Eng. Fract. Mech.*, **230**(2020), 106965. <https://doi.org/10.1016/j.engfracmech.2020.106965>
- 19) M.Kunigita, S.Aihara, T.Kawabata, T.Kasuya, Y.Okazaki and M.Inomoto: *Eng. Fract. Mech.*, **230**(2020), 106966. <https://doi.org/10.1016/j.engfracmech.2020.106966>
- 20) A.T.Yokobori, Jr, H.Ishikawa, R.Sugiura, T.Ohmi and M.Tabuchi: *Strength Fract. Complex.*, **15**(2022), 141. <https://doi.org/10.3233/SFC-228010>
- 21) H.Izuno, M.Demura, M.Yamazaki, M.Tabuchi, D.Abe and K.Torigata: *Mater. Trans.*, **62**(2021), 1013. <https://doi.org/10.2320/matertrans.MT-MA2020004>
- 22) S.Takemoto, T.Kaneshita, K.Nagata, Y.Okuno, J.Inoue and M.Enoki: *MRS Adv.*, **7**(2022), 213. <https://doi.org/10.1557/s43580-022-00209-2>
- 23) S.Takemoto, K.Nagata, T.Kaneshita, Y.Okuno, K.Okuno, M.Kitano, J.Inoue and M.Enoki: TMS 2021 150th Annual Meeting & Exhibition Supplemental Proceedings, The Minerals, Metals & Materials Society, Springer Cham, (2021), 473. https://doi.org/10.1007/978-3-030-65261-6_43
- 24) S.Nomoto, M.Segawa and M.Watanabe: *Metals*, **11**(2021), 626. <https://doi.org/10.3390/met11040626>
- 25) M.Kusano and M.Watanabe: *Mater. Des.*, **222**(2022) 111016. <https://doi.org/10.1016/j.matdes.2022.111016>
- 26) M.Okugawa, D.Izumikawa and Y.Koizumi: *Mater. Trans.*, **61**(2020), 2072. <https://doi.org/10.2320/matertrans.MT-MA2020005>
- 27) K.Ito, M.Kusano, M.Demura and M.Watanabe: *Addit. Manuf.*, **40**(2021), 101915. <https://doi.org/10.1016/j.addma.2021.101915>
- 28) R.Tamura, T.Osada, K.Minagawa, T.Kohata, M.Hirosawa, K.Tsuda and K.Kawagishi: *Mater. Des.*, **198**(2021), 109290. <https://doi.org/10.1016/j.matdes.2020.109290>
- 29) Y.Matsuura, Y.Tsukada and T.Koyama: *Phys. Rev. Mater.*, **5**(2021), 113801. <https://doi.org/10.1103/PhysRevMaterials.5.113801>
- 30) H.Nishikawa, Y.Furuya, T.Osada, K.Kawagishi and T.Hara: *Scr. Mater.*, **222**(2023), 115026. <https://doi.org/10.1016/j.scriptamat.2022.115026>
- 31) F.Briffod, T.Shiraiwa and M.Enoki: *Mater. Sci. Eng. A*, **790**(2020), 139710. <https://doi.org/10.1016/j.msea.2020.139710>
- 32) F.Briffod, A.Bleuset, T.Shiraiwa and M.Enoki: *Acta Mater.*, **177**(2019), 56. <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2019.07.025>
- 33) A.Issariyapat, S.Kariya, K.Shitara, J.Umeda and K.Kondoh: *Addit. Manuf.*, **56**(2022), 102907. <https://doi.org/10.1016/j.addma.2022.102907>
- 34) C.B.Browne, E.Powley, D.Whitehouse, S.M.Lucas, P.I.Cowling, P.Rohlfshagen, S.Tavener, D.Perez, S.Samothrakakis and S.Colton: *IEEE Trans. Comput. Intell. AI Games*, **4**(2012), 1. <https://doi.org/10.1109/TCIAIG.2012.2186810>
- 35) T.M.Dieb, S.Ju, J.Shiomi and K.Tsuda: *MRS Commun.*, **9**(2019), 532. <https://doi.org/10.1557/MRC.2019.40>
- 36) K.Koiwa, M.Tabuchi, M.Demura, M.Yamazaki and M.Watanabe: *Mater. Trans.*, **60**(2019), 213. <https://doi.org/10.2320/matertrans.ME201703>