

メタマテリアルの逆問題デザイン

はじめに

材料の不均一性：革新的な材料創成の鍵

材料の不均一性は、ナノスケールの分子構造からマイクロスケールの材料微視構造まで、幅広い範囲にわたって存在する。物質の固有な特性は、原子・分子の組成や結合状態によって決定されるが、より大きなスケールの不均一性も、材料特性に大きな影響を与える。材料開発では、この材料不均一性を積極的に活用し、新たな材料創成の基盤と指導原理を構築しようとする試みが行われてきた⁽¹⁾。

メタマテリアル：自然を超える人工材料

不均一性を意図的に制御し、自然界には存在しない材料特性を実現した人工材料を、メタマテリアルと呼ぶ。メタマテリアルは、電磁場の分野をはじめ、力学特性を制御するメカニカル・メタマテリアルなど、幅広い分野で研究開発が進められている。メタマテリアルの設計においては、理論的な解析と数値シミュレーションに基づく計算アプローチが不可欠である。近年では、計算機性能の向上と最適化手法の発展により、所望の特性を持つ材料微視構造を計算機主導で探索する設計手法が注目されている。

本稿では、メカニカル・メタマテリアルに焦点を当て、材料微視構造を設計する手法について解説する。

材料微視構造からの材料特性評価

有限要素法を用いた数値材料試験

マイクロスケールにおける材料微視構造とマクロな力学特性の関係を結びつける理論は、力学における古典的な研究課題である。平均場理論に基づく解析的なアプローチから、Eshelby 介在物理理論を用いた Self-Consistent モデル、さらには有限要素法のような離散化数値解法を用いた数値解析的なアプローチへと発展してきた⁽²⁾。特に、有限要素法を用いたアプローチでは、材料微視構造の形態を詳細にモデル化できるため、マクロな力学特性に対する材料微視構造の影響を定量的に評価することが可能となった。

数値シミュレーションを用いて材料微視構造からマクロな特性を評価する場合、材料全体を代表する一部である代表体積要素 (RVE; Representative Volume Element) を評価対象とする。有限要素法を用いて RVE の力学的評価を行う数値材料試験の枠組みは確立されており⁽³⁾、多くの商用

ソフトウェアで利用可能である。この手法では、周期材料微視構造として RVE の有限要素モデルを作成し、マクロな応力またはひずみを境界条件として与えることで、数値シミュレーションを実行する。

数値材料試験によるメタマテリアル開発の加速

材料微視構造とマクロな特性の関係を実験的に解明するには、試料の作成、特性評価、および結果の解析という一連のプロセスを繰り返す必要があり、多大な労力を要する。数値材料試験は、このプロセスを計算機中で実施することで大幅に効率化するだけでなく、現実には実現が困難な理想的な材料微視構造を仮想的に構築し、そのマクロな特性を評価することを可能とする。この手法は、メタマテリアル開発の加速に大きく貢献している。

材料微視構造の逆問題デザイン

逆問題としての構造設計

計算機性能とソフトウェアの飛躍的な発展により、構造設計においては、計算機上で反復的な設計・評価プロセスを行うことが可能となり、物理的な試作・実験の回数を大幅に削減できるようになった。近年では、有限要素法と数理最適化法を組み合わせることで、計算機が自律的に最適な構造を探索するアプローチが利用可能となっている。この種のアプローチでは、従来の構造から性能を推定する順問題ではなく、要求性能から構造を決定する逆問題を解く。特に、設計領域内の材料配置を最適化するトポロジー最適化⁽⁴⁾において、日本は世界をリードしており、様々な産業分野への応用が広がっている。

一般的な構造設計のアプローチは材料微視構造の設計へも適用できる。例えば、トポロジー最適化を用いて、強度の異なる二相金属材料組織において高強度相の分布から強度や異方性を議論できる⁽⁵⁾ (図1)。

メカニカル・メタマテリアルの設計

材料微視構造の最適設計を行うことでメカニカル・メタマテリアルを開発できる。負のポアソン比を示すオーセティック (auxetic) 材料微視構造からなる材料は代表的なメカニカル・メタマテリアルであり、最適設計の例題としてよく用いられる。

一般に、自然界の材料は、ある方向に引張ると垂直な方向に縮む性質を持っている。この性質を表すのがポアソン比であり、通常は 0~0.5 の範囲の値を取る。例えば、コル

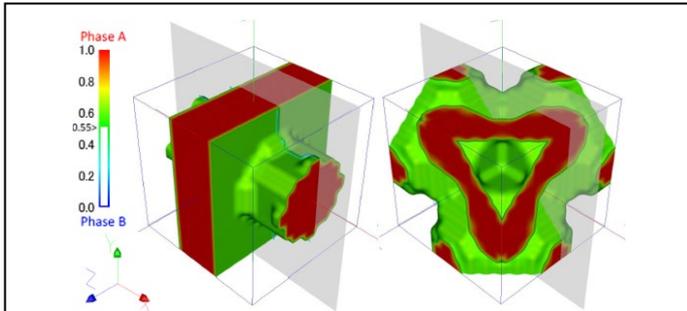


図1 二相金属材料組織のトポロジー最適化事例⁽⁵⁾：
 (左) 単軸方向のみ, (右) すべてのひずみモード
 に対して高強度な材料微視構造 (高強度相のみ表示)

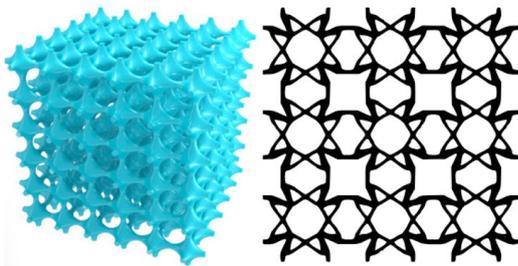


図2 オーセティック材料微視構造：
 (左) TPMS 関数⁽⁶⁾, (右)トポロジー最適化による設計

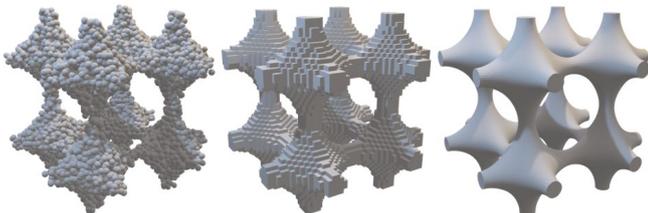


図3 幾何学的情報のデータ表現：
 (左)点群, (中)ボクセル, (右)メッシュ

クのような多孔質体ではポアソン比がゼロとなり、荷重負荷方向に垂直な方向には変形をしないことが知られている。一方、オーセティック材料微視構造は、ある方向へ引張ると垂直な方向にも伸びるといふ、直感に反する性質を持っている。これは、特殊な材料微視構造を持つことで実現される。

オーセティック材料微視構造は、1980年代後半から様々な構造が提案されてきた。中でも、幾何学的な周期関数である TPMS (Triply Periodic Minimal Surface) 関数を用いた設計は、その簡便さから広く用いられている⁽⁶⁾。TPMS 関数は空間を周期的に分割する曲面を表現し、その形状を特徴づけるパラメータを調整することで、マクロな材料特性を制御できる (図2左)。

トポロジー最適化において、オーセティック材料微視構造は手法開発の適用事例として注目されてきた(図2右)。

トポロジー最適化は設計領域の各物質点における材料の有無・種類が設計変数となる上、多数の繰り返し計算が必要となるため、三次元設計問題において、解像度を上げると計算コストが膨大になってしまう。さらに、実際のところ、シンプルで高性能な材料微視構造を設計するためには、最適化問題における目的関数や解法を工夫する必要があることが多く、現在でも研究開発が盛んに行われている。

深層学習による材料微視構造の設計

構造設計のための深層学習アルゴリズム

近年の飛躍的なアルゴリズムの発展によって、深層学習を用いて材料微視構造を設計するアプローチが開発されている。ここでは、変分オートエンコーダ (Variational AutoEncoder), 敵対的生成ネットワーク (GAN; Generative Adversarial Network), フロー型モデル, 拡散モデルといった画像生成アルゴリズムが利用される。一般に深層学習ではアルゴリズムを構成するニューラルネットワークを学習するために、多数のデータセットが必要となる。ここでは、材料微視構造とマクロな特性の関係を数千〜数万セット用意する必要があり、実験的に用意することは現実的でない。

材料微視構造の幾何学的な情報は TPMS 関数のパラメータのようにモデルとして抽象化・縮約化した形で表現できることが望ましいが、複雑な形状を表現できないという欠点がある。複雑な形状表現には、一般に、点群, ボクセル, メッシュなどの離散的なデータ形式が用いられる (図3)。点群データは、形状を点の集合で表現するもので、柔軟な形状表現が可能である。ボクセルデータは、空間を小さな立方体に分割し、各立方体に材料を割り当てる。メッシュデータは、点と面で形状を表現するもので、滑らかな表面を表現できる。それぞれ解像度を上げることで表現性能を高めることができ、点群やボクセルデータは使用時に表面を平滑化するなどして、解像度を補うことができる。これらのデータ形式は、それぞれ長所と短所があり、用途や計算コストなどに応じて適切な形式を選択する必要がある。例えば、有限要素解析と組み合わせる場合、データの取り扱いなどの効率を考えるとボクセルデータが望ましい⁽⁷⁾。

材料微視構造の設計 AI

著者らは、ボロノイ分割を用いた多孔質材料微視構造のランダム生成アルゴリズムと数値材料試験を用いて、構造形態と材料特性のデータセットを大量生成するとともに、

GANに特性を評価する機能を追加したアルゴリズムを開発することで、材料微視構造とマクロ特性を結びつけるAIを開発した(図4)^⑧。深層学習による構造生成では、事前に学習を行うため、短時間で入力から出力を得ることができ

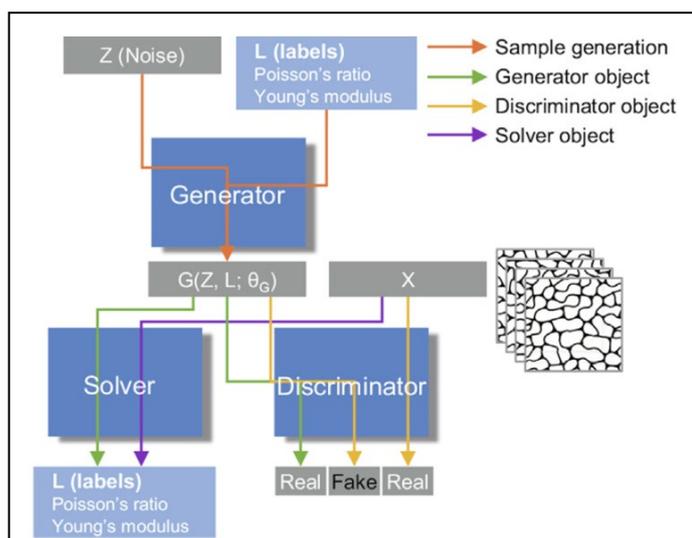


図4 開発した設計AIのアルゴリズム構造^⑧：一般的なGANの構造であるGeneratorとDiscriminatorにSolverを追加した

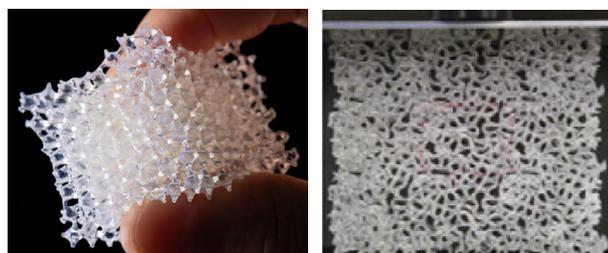


図5 3Dプリンターを用いたメタマテリアルの造形：(左)TPMS関数、(右)深層学習^⑧で設計したメタマテリアルの材料挙動を評価

る。また、材料微視構造とマクロ特性の関係を双方向で定義づけており、マクロ特性に対応する材料微視構造を生成するだけでなく、材料微視構造を入力として、対応するマクロな材料特性を評価することもできる。さらに、多様性を有することが特徴であり、複雑な材料微視構造が対象となる。この研究では、複雑な材料微視構造でありながら、負のポアソン比を示すメタマテリアルが生成された。加えて、大規模言語モデルと組み合わせることで、テキストプロンプトから材料微視構造を生成させることもできる^⑨。

著者らは、深層学習を用いたメカニカル・メタマテリアルの評価・設計に関する最新の研究動向を網羅的にレビューし、論文としてまとめた^⑩。詳細な手法やそれらの比較

については、論文を参照されたい。

3Dプリンターを用いた実験検証

複雑な構造を容易かつ高速に造形

トポロジー最適化など計算機主導で設計された複雑な構造を有する部材を忠実に制作するためには、切削加工や精密鋳造などが用いられ、特殊な装置や高度な技術が必要であった。これに対して、近年、目覚ましい発展を遂げている3Dプリンターは、比較的容易かつ高速に複雑な構造を造形できるため、逆問題デザインの研究を加速させた。

メタマテリアルの設計では、周期材料微視構造の単一ユニットを対象とするが、造形時にはユニットを多数並べる必要があり、解像度やプロセス制約を考慮する必要がある。産業利用のための微細な材料微視構造からなる大型部品の造形は容易ではないが、設計の実験検証のための試料程度であれば、ラボレベルの安価な3Dプリンターであっても作成できる。実際に試作し、材料挙動を実験検証することで、メカニカル・メタマテリアルの動作理解に役立つ(図5)。

鋳型による造形

3Dプリンターでの造形を想定すると、利用できる材料が限られてしまう。元来、メタマテリアルは構成材料に関わらず材料微視構造の設計によって機能を発現させるものであるが、構成材料の特性を有効に活用することで、より高度な機能を持つメタマテリアルを創成できる。例えば、3Dプリンターのライブラリにない材料であっても、3Dプリンターで鋳型を作成して、鋳造することで、複雑な形状を造形できる。著者らは、この方法を用いて、独自に開発した光反応形状記憶ポリマーからなるプログラマブル・メタマテリアルを創成した^⑪。プログラマブル・メタマテリアルは、光や熱などの外部刺激によって、その特性を動的に変えることのできるメタマテリアルであり、新たな機能性材料として注目を集めている。

将来展望

多目的最適化

メタマテリアルは材料微視構造を制御することで自然界には存在しない材料特性を引き出した人工材料である。オーセティック材料微視構造のように単一特性に特化した材料を想像するが、一般に工業材料の性能は単一の特性のみで決まらず、複数の特性の重なり合わせで定義される。したがって、単一の特性としては一般的な特性範囲であって

も、複数の材料特性を総合して考えた場合に、既存の材料を凌駕している材料もメタマテリアルといえ、研究開発の幅が飛躍的に広がる。多目的最適化問題を考えることで、例えば、熱伝導率が高く、剛性も高いといったような従来の特性を超える多孔質材料を設計できる⁽¹²⁾。

複相メタマテリアル

金属とプラスチックのように特性の大きく異なる複数の材料で材料微視構造を構成することで、設計領域が飛躍的に広がり、新奇な特性を示すメタマテリアルを創成可能となる。筆者らは3Dプリンターのポリマーレジンと低融点合金を組み合わせることで、10⁵オーダーで幅広く剛性を可変できるメタマテリアルを創成した⁽¹³⁾。

おわりに

本稿では、メカニカル・メタマテリアルの逆問題デザインに関して、現状と課題について筆者らの研究を基に概説した。今後、計算機性能や深層学習などのアルゴリズム開発の発展によって、よりユーザーが活用しやすい設計手法が確立され、材料微視構造の不均一性の高度な活用が進んでいくと考えられる。

執筆者プロフィール

<正会員>

氏名 鄭 銷陽

◎所属

東京大学大学院工学研究科
附属総合研究機構 特任助教

◎専門： メカニカル・メタマテリアル、深層学習、
3Dプリンター

〒113-8656

東京都文京区弥生 2丁目 11-16

xzheng@g.ecc.u-tokyo.ac.jp



<正会員>

氏名 渡邊 育夢

◎所属

国立研究開発法人 物質・材料研究機構

マテリアル基盤研究センター 材料設計分野
材料モデリンググループ 主幹研究員

◎専門： 計算機支援工学、計算力学、
マルチスケールモデリング

〒305-0047

茨城県つくば市千現 1-2-1

WATANABE.Ikumu@nims.go.jp



参考文献 (本文記載順)

- (1) 科学技術振興機構, 革新的構造用金属材料創製を目指したヘテロ構造制御に基づく新指導原理の構築, 2010-2019.
- (2) 渡邊, 上路, 複合組織鋼の非均質組織に基づく力学挙動モデリング手法, 鉄と鋼 Vol.98, No.6 (2012) pp.283-289.
- (3) Watanabe, Terada, A method of predicting macroscopic yield strength of polycrystalline metals subjected to plastic forming by micro-macro de-coupling scheme, International Journal of Mechanical Science, Vol.52, No.2 (2010) pp.343-355.
- (4) 西脇, 泉井, 菊池, トポロジー最適化(計算力学レクチャーコース), 日本計算工学会, 2013.
- (5) Watanabe, Nakamura, Yuge, Setoyama, Iwata, Maximization of strengthening effect of microscopic morphology in duplex steels, in "From Creep Damage Mechanics to Homogenization Methods", Springer, Ch.24 (2015) pp.541-555.
- (6) Zheng, Guo, Watanabe, A mathematically defined 3D auxetic metamaterial with tunable mechanical and conduction properties, Materials & Design, Vol.198 (2021) 109313.
- (7) Zheng, Chen, Jiang, Naito, Watanabe, Deep-learning-based inverse design of three-dimensional architected cellular materials with the target porosity and stiffness using voxelized Voronoi lattices, Science and Technology of Advanced Materials, Vol.24, No.1 (2023) 2157682.
- (8) Zheng, Chen, Guo, Samitsu, Watanabe, Controllable inverse design of auxetic metamaterials using deep learning, Materials & Design, Vol.211 (2021) 110178.
- (9) Zheng, Watanabe, Paik, Li, Guo, Naito, Text-to-Microstructure generation using generative deep learning, Small, Vol.20, No.37 (2024) 2402685.
- (10) Zheng, Zhang, Chen, Watanabe, Deep Learning in Mechanical Metamaterials: From Prediction and Generation to Inverse Design, Advanced Materials, Vol.35, No.45 (2023) 2302530.
- (11) Zheng, Uto, Hu, Chen, Naito, Watanabe, Reprogrammable flexible mechanical metamaterials, Applied Materials Today, Vol.29 (2022) 101662.

- (12) Zhou, Watanabe, Song, Kambayashi, Chen, Multi-objective topology optimization of porous microstructure in die-bonding layer of a semiconductor, *Science and Technology of Advanced Materials: Methods*, Vol.4, No.1 (2024) 2320691.
- (13) Zheng, Watanabe, Wang, Chen, Naito, Minimal-surface-based multiphase metamaterials with highly variable stiffness, *Materials & Design*, Vol.237 (2024) 112548.