

戦略的イノベーション創造プログラム（SIP）
統合型材料開発システムによるマテリアル革命
研究開発計画（案）

2019年8月22日

内閣府

政策統括官(科学技術・イノベーション担当)

目次

研究開発計画の概要.....	1
1. 意義・目標等	1
2. 研究内容.....	1
3. 実施体制.....	1
4. 知財管理.....	2
5. 評価	2
6. 出口戦略.....	2
(1) MI システムを企業の研究開発に利用 (A 領域)	2
(2) MI システムで開発される材料を実用化・事業化 (B・C 領域)	2
1. 意義・目標等	3
(1) 背景・国内外の状況.....	3
(2) 意義・政策的な重要性	3
(3) 目標・狙い.....	4
Society5.0 実現に向けて	4
社会面の目標	4
産業的目標.....	5
技術的目標.....	5
制度面等での目標	5
国際ベンチマーク	5
自治体等との連携.....	5
2. 研究開発の内容	6
(A) 逆問題 MI 基盤技術開発	8
(A-1) 逆問題解析.....	11
(A-2) プロセスデザイン.....	14
(A-3) 原子(分子)・構造体デザイン.....	17
(A-4) MI 統合システム.....	20
(A-5) 構造材料データベース	24
(B) 炭素繊維強化プラスチック (CFRP)	26
(B-1) 多機能 CFRP の開発による高付加価値化.....	27
(B-2) AI 援用積層最適化による CFRP 設計・製造自動化技術の開発	29
(B-3) 薄層材自動積層による CFRP の 3D 高自由度設計技術の開発	32
(C) 粉末・3D 積層.....	34
(C-1) Ni 基合金の 3D 積層造形プロセスの開発.....	35
(C-2) 高性能化のための Ni 粉末鍛造プロセスの開発.....	37
(C-3) Ti 合金の粉末・3D 積層造形プロセスの開発.....	39
(C-4) 高性能 TiAl 基合金動翼の粉末造形プロセス基盤技術構築と開発.....	41

(C-5) セラミックス基複合材料の航空機エンジン部材化技術の開発	43
3. 実施体制.....	45
(1) PD・サブ PD・管理法人	45
(2) 研究責任者の選定.....	45
(3) 研究体制を最適化する工夫	45
(4) 府省連携	46
(5) 産業界からのコミットメント.....	46
4. 知財に関する事項.....	46
(1) 知財委員会と知財部会	46
(2) 知財権に関する取り決め	46
(3) バックグラウンド知財権の実施許諾.....	46
(4) フォアグラウンド知財権の取扱い.....	47
(5) フォアグラウンド知財権の実施許諾.....	47
(6) フォアグラウンド知財権の移転、専用実施権の設定・移転の承諾について.....	47
(7) 終了時の知財権取扱いについて.....	47
(8) 国外機関等(外国籍の企業、大学、研究者等)の参加について	47
5. 評価に関する事項.....	48
(1) 評価主体	48
(2) 実施時期	48
(3) 評価項目・評価基準.....	48
(4) 評価結果の反映方法.....	48
(5) 結果の公開.....	48
(6) 自己点検	49
研究責任者による自己点検	49
PD による自己点検	49
管理法人による自己点検	49
6. 出口戦略.....	49
(1) MI システムを企業の研究開発に利用	49
(2) MI システムで開発される材料を実用化・事業化	50
7. その他の重要事項	50
(1) 根拠法令等.....	50
(2) 弾力的な計画変更.....	50
(3) PD、サブ PD 及び担当の履歴.....	51
別紙	52
添付資料 資金計画及び積算	53

研究開発計画の概要

1. 意義・目標等

我が国が高い競争力を有してきた材料分野において、AIを駆使した材料開発手法の刷新に向けて諸外国で集中投資が行われ、ものづくりが大変革を迎えている。こうした手法が海外で先行して確立されると、我が国がそのための材料提供の役割に甘んじ、プレゼンスを急速に損なう事が危惧される。諸外国との競争を勝ち抜くために、産学官が協働して研究開発を加速することが必要不可欠である。

我が国が開発してきたマテリアルズインテグレーション(MI)の素地を活かし、欲しい性能から材料・プロセスをデザインする「逆問題」に対応した次世代型MIシステムを世界に先駆けて開発するとともに、MIを活用して、競争力ある革新的な高信頼性材料の開発や設計・製造・評価技術の確立に取り組み、発電プラント用材料や航空用材料等を出口に先端的な構造材料・プロセスの事業化を目指す。さらに我が国が蓄積してきた材料データベースの活用や新たなプロセス・評価技術に対応したデータベースの充実を図るなど、サイバーとフィジカルが融合した新たな材料開発による「マテリアル革命」を加速する。

2. 研究内容

逆問題に対応したMI基盤技術を確立するとともに、実用材料の開発に対する効果を実証するため、我が国が強みを有し国際的な要求が高まっている最先端の構造材料・プロセス開発にMIを適用する。

A 領域:逆問題 MI 基盤

Society5.0 の具現化として、欲しい性能から、必要となる材料の構造・特性を提案し、さらに、それを実現するプロセスを提案できる、材料科学・工学とデータ科学を融合した新しい統合型材料開発システムを構築する。これが我が国の企業に利用されることを社会実装とし、特に今後より一層厳しい国際競争に曝される先端構造材料・プロセスを扱う企業に利用されることを目標とする。

B 領域:CFRP

軽量構造用材料として普及が進む炭素繊維プラスチック(CFRP)の特性・生産性向上に関する技術を、統合型材料開発システムを活用して開発する。その成果をもとに、航空機等の輸送機器開発において世界をリードする。

C 領域:粉末・3D 積層

開発競争の激しい耐熱合金粉末プロセスと、次世代輸送・エネルギー機器用超高温耐熱材料であるセラミックス複合材料(CMC)について、統合型材料開発システムを活用した革新的な材料・プロセスを実現し、我が国の産業競争力強化を図る。

3. 実施体制

三島 良直プログラムディレクター(以下「PD」という)は、研究開発計画の策定及び推進を担い、毛利 哲夫サブプログラムディレクター(以下「サブ PD」という)は PD を補佐する。PD が議長、内閣府が事務局を務め、関係省庁や専門家で構成する推進委員会が総合調整を行う。国立研究開発法人科学技術振興機構運営費交付金を活用して公募を実施する。同法人内に選考委員会を設置し、適切な評価のうえ、推進委員会と連携しながら、研究開発計画に基づき最適な研究課題を臨機応変に選定し、大学、国立研究開発

法人、民間企業等によって構成される研究チームを構成し、研究課題を実施する。同法人のマネジメントにより、各課題の進捗を管理する。研究体制は逆問題 MI の有効性を産業界が認知し社会実装につなげることを狙って、逆問題 MI システムを A 領域で開発しながら、B 領域及び C 領域で先端構造材料・プロセスに対して適用するという課題全体として一体感を持つ構成にした。

4. 知財管理

各課題とも事業化を見据えた知財戦略を立てて研究開発に取り組むこととする。知財委員会を国立研究開発法人科学技術振興機構に置き、各受託機関で出願される知的財産の動向を把握・管理するとともに、産業利用の際の利便性向上につながるよう各受託機関と調整を行う。

5. 評価

ガバナリングボードによる毎年度末の評価前に、PD 及び研究主体による自己点検を実施する。研究の推進にはTRL管理を徹底するとともに、3年を目途に研究課題の評価を実施し、必要に応じて研究チームを再編する等により、高い研究開発レベルが維持できるようにする。加えて、情報流出に細心の注意を払いつつ国内外の専門家によるピアレビューを実施する。

6. 出口戦略

(1) MI システムを企業の研究開発に利用(A 領域)

潜在ユーザーである参画企業自らが必要とする目標性能の数値を逆問題の起点として設定し、そのサイバーでの解決およびフィジカルでの実証を通して、MI システムの有効性を確認する。中央の MI 拠点が運用するシステムと企業内のローカル環境での計算とを、インターネットを通してシームレスに接続できる分散型の計算制御技術を開発する。企業保有データの利活用のために、標準となるデータ記述様式を設計し、(データ自体は無理でも)データ記述様式は広く共有化する。これにより、企業内で埋もれているデータの利活用の促進が期待される。

(2) MI システムで開発される材料を実用化・事業化(B・C 領域)

MI の適用例として航空機機体・エンジン、産業用発電プラント、等の最先端材料・プロセスを想定し、材料・重工メーカーと連携して成果を実用化・事業化する。長期的には民間航空機のグローバル市場での事業化を目指しつつ、より早期の社会実装として、自社製品への適用を推進する。

1. 意義・目標等

(1) 背景・国内外の状況

我が国が高い競争力を有してきた材料分野において、人工知能(AI)を駆使した材料開発手法の刷新に向けて諸外国で集中投資が行われ、ものづくりが大変革を迎えている。こうした手法が海外で先行して確立されると、我が国がそのための材料提供の役割に甘んじ、プレゼンスを急速に損なう事が危惧される。諸外国との競争を勝ち抜くために、産学官が協働して研究開発を加速することが必要不可欠である。

AIを活用した材料開発手法に関する米国・欧州の取り組みとして、例えば、米国 Northwestern 大 (QuesTek) やフィンランド技術研究センター(VTT)が、欧米企業に対するコンサルティングツールとして、実材料に対応したマルチスケール・マルチフィジックス計算技術の開発でリードしている。他方これらは、一般の民間企業が自ら使える汎用性に乏しく、企業が自ら活用して材料開発に取り組む技術とはなっていない。

我が国では、これまで、国内メーカー各社とともにマテリアルズインテグレーション(以下、MIという)に取り組み、材料分野に強みやノウハウを有するメーカー各社が課題に応じて自ら使える汎用開発支援ツールとして開発を進め、世界に先駆けてプロセスから性能を一貫予測するためのシステムを構築してきた。この素地を活かし、世界で初めての取り組みとして、欲しい性能から実際の材料・プロセスをデザインする逆問題対応型MIの開発に取り組み、それを実際の先端材料・プロセスに適用し開発効率化を実現する。

具体的には、逆問題MIシステムを開発・実装し、産業界による利用につなげるとともに、我が国が強みを有する先端的な構造材料やプロセスの開発に活用する。例えば、先端的な構造材料としては、鉄鋼材料、アルミニウム合金、耐熱合金・金属間化合物などの金属系材料に加え、構造材料としての利用が広がっているセラミックス・高分子系材料、特に、これらの複合材料を想定する。また、先端的なプロセスとしては、3D 積層造形を中心とした金属粉末を原料とする 3D プロセス技術、複合材料の 3D 成形技術など、対象分野において刷新が起こりつつあるプロセス技術を想定する。

(2) 意義・政策的な重要性

MIを活用し、従来より国際的に高いレベルにある日本の材料科学技術及び素材産業のポテンシャルを最大限に活かした先進材料・プロセス開発を行っていくことが必要である。図1に本課題の全体構想を示す。例えば航空機産業は、構造材料が目指す比強度、耐熱性、信頼性のいずれも最高レベルが要求される産業分野であり、産業発電用ガスタービン等の環境・エネルギー分野など他産業への波及効果も大きい。特に昨今は、将来の中小型機をはじめとした需要拡大や次世代機の開発も見据え、機体軽量化を実現する炭素繊維強化プラスチック(以下、CFRP という)に対し難燃性などの新たな機能や高い設計自由度といった新たな付加価値が国際的に希求されている。さらに、3D 積層造形をはじめとした新たな粉末プロセス技術は、産業用発電プラント等の複雑形状部材などへの波及効果やさらなる用途拡大が期待できる。

こうした多様な先端的な構造材料・プロセスの開発にMIを導入して開発・製作期間の大幅短縮、コスト大幅削減を実現することで、我が国の素材産業の更なる国際競争力強化に貢献する。



図1. 課題の全体構想

(3) 目標・狙い

Society5.0 実現に向けて

- ・第5期科学技術基本計画における Society5.0 実現に向けた 11 のシステムの1つである「統合型材料開発システム」は MI システムそのものであり、これまで構築してきた MI の成果を活かし、材料科学(フィジカル)と情報科学(サイバー)の本格的な融合を実現する。
- ・材料開発コストを 50%以下、材料開発期間を 50%以下に低減するとともに、材料の新しい機能を引き出す逆問題 MI を開発し、11 テーマの欲しい性能に対する逆問題を解決することにより、その有効性を実証するとともに、民間企業や研究機関等に広く活用される体制を構築する。
- ・逆問題 MI を活用しつつ、設計自由度の高い複合材料や耐熱合金の最先端プロセスの開発を行い、発電プラント等の環境・エネルギー産業や航空機産業等で実部材として活用される目途をつける。

社会面の目標

- ・ MI を活用した先端的な材料・造形プロセス開発に係る研究拠点・ネットワークを構築し、イノベーションのための国際連携、人材育成を推進する。
- ・ MI システムにより開発される高比強度・耐熱材料の利用により、エネルギー・輸送機器などの燃費向上、温室効果ガス排出低減を促進する。

産業的目標

- ・ 産業界が活用できる逆問題対応型MI利活用のための拠点を構築し、材料開発時間の大幅短縮・効率化・コスト削減を実現する。
- ・ MIを活用した新たな材料・プロセスによる国産部品の供給により、航空機向け部材や産業用発電プラント等の受注シェア拡大及び産業規模拡大を実現する。

技術的目標

- ・ 欲しい性能から必要となる材料の構造・特性を提案し、かつその実現可能プロセスの提示を可能とする、Society5.0の実現を目指した統合型材料開発システムを構築する。
- ・ 軽量構造用材料として普及が進む CFRP の特性・生産性向上に関する技術を、統合型材料開発システムを活用して開発する。
- ・ 開発競争の激しい耐熱合金粉末プロセスと、次世代輸送・エネルギー機器用超高温耐熱材料であるセラミックス基複合材料について、統合型材料開発システムを活用した革新的な材料・プロセスを実現する。

制度面等での目標

- ・ 材料・プロセス開発に関するMIを用いた新たな試験・評価方法の確立およびその標準化を目指す。
- ・ 共用データベース基盤の利用やセキュリティに関する制度化を促進する。
- ・ MIの知的財産に関する提言を行う。

国際ベンチマーク

- ・ 我が国が強みを有している材料技術について、昨今、海外の主要国、特にアジア諸国からの追い上げが顕著である。また、AIを活用した材料開発手法について、米国・欧州等で集中投資が行われている。
- ・ 我が国では、高品質な材料データの蓄積を有する強みを活かし、これまで国内メーカー各社とともにMIに取り組み、材料開発に強みやノウハウを有するメーカー各社が、課題に応じて自ら使える汎用開発支援ツールとして開発を進め、世界に先駆けてプロセスから性能を一貫予測するためのシステムを構築してきた。この素地を活かし、世界で初めての取り組みとして、欲しい性能から実際の材料・プロセスをデザインする逆問題対応型MIの開発に取り組み、それを実際の先端材料・プロセスに適用し開発効率化を実現する。
- ・ MIと我が国が強みを有する材料技術を統合し、我が国が強みを有する先端的な材料・プロセスの開発に取り組みこととするが、今後さらに詳細な国際ベンチマーク調査を実施し、戦略的に研究開発を進めていく。

自治体等との連携

- ・ 特定の技術に強みを有する地方大学や、高度な技術の蓄積を有する公設試験研究機関等の最先端技術を結集し、MIを用いた先端材料開発をオールジャパンで推進する。
- ・ 地域自治体と連携した成果発信等を行うとともに、産業振興・人材育成に貢献する。

2. 研究開発の内容

逆問題に対応したMI基盤技術を確立するとともに、実用材料の開発に対する効果を実証するため、我が国が強みを有し国際的な要求が高まっている最先端の構造材料・プロセス開発にMIを適用する。三島良直プログラムディレクター(以下「PD」という)、毛利哲夫サブプログラムディレクター(以下「サブPD」という)はPDの指揮の下に3領域、すなわちA領域(逆問題 MI 基盤)、B領域(CFRP)、C領域(粉末・3D 積層)を設置する。各領域の目標は次の通りである。

A 領域:逆問題 MI 基盤

Society5.0 の具現化として、欲しい性能から、必要となる材料の構造・特性を提案し、さらに、それを実現するプロセスを提案できる、材料科学・工学とデータ科学を融合した新しい統合型材料開発システムを構築する。これが我が国の企業に利用されることを社会実装とし、特に今後より一層厳しい国際競争に曝される先端構造材料・プロセスを扱う企業に利用されることを目標とする。

B 領域:CFRP

軽量構造用材料として普及が進む炭素繊維プラス地区(CFRP)の特性・生産性向上に関する技術を、統合型材料開発システムを活用して開発する。その成果をもとに、航空機等の輸送機器開発において世界をリードする。

C 領域:粉末・3D 積層

開発競争の激しい耐熱合金粉末プロセスと、次世代輸送・エネルギー機器用超高温耐熱材料であるセラミックス複合材料(CMC)について、統合型材料開発システムを活用した革新的な材料・プロセスを実現し、我が国の産業競争力強化を図る。

各領域はA:5チーム、B:3チーム、C:5チームから構成される(図2)。さらに、A-B領域連携、A-C領域連携を、A3(プロセスデザイン)チーム、A2(原子(分子)・構造体デザイン)チームを通して促進する(図3)。A領域で開発された術がスムーズにB・C領域で利用されるよう、これら2チームにはB・C領域を兼任する研究者を置く。

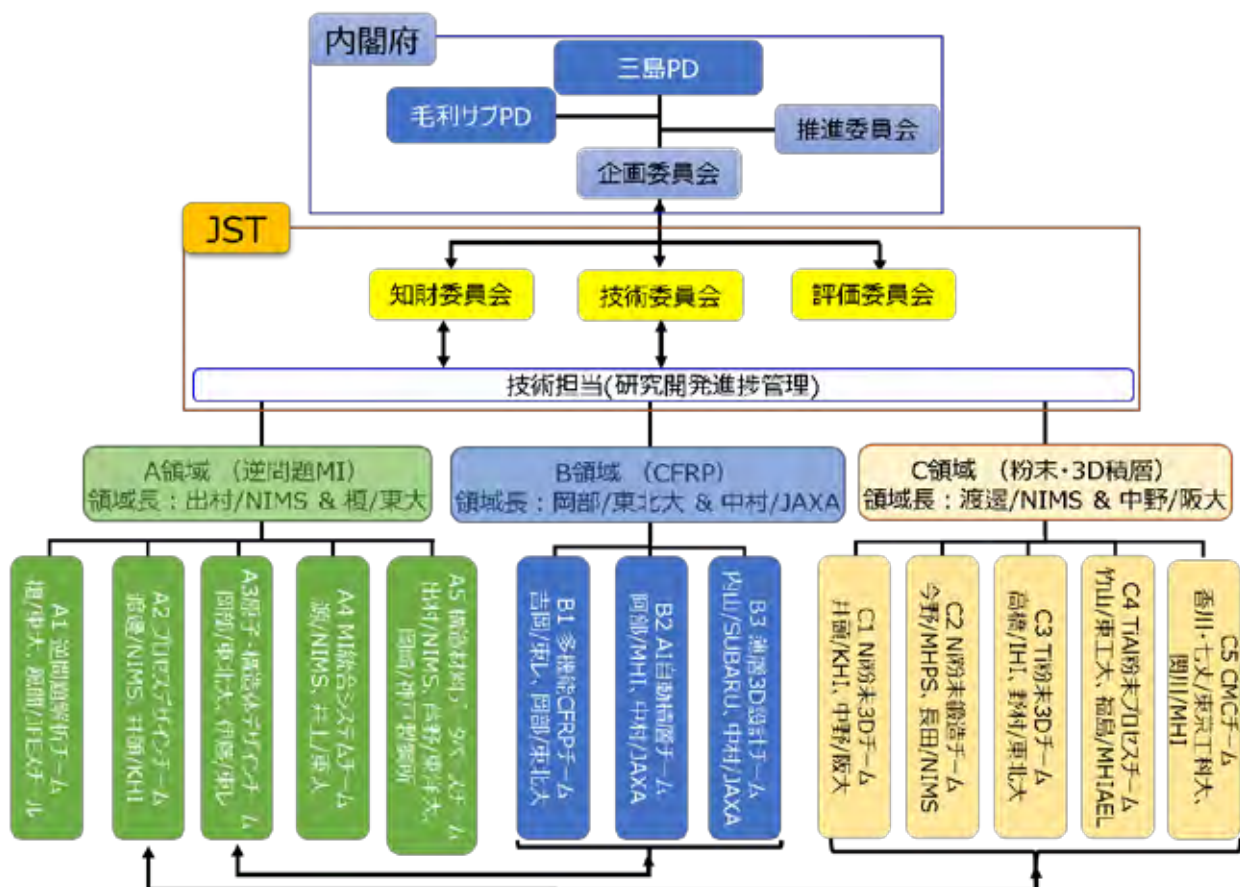


図2. 本課題の研究開発体制



図3. 本課題の領域間連携

(A) 逆問題 MI 基盤技術開発

領域長 出村 雅彦(国立研究開発法人 物質・材料研究機構)

榎 学 (国立大学法人東京大学)

概要

MI(マテリアルズインテグレーション)は、材料科学の理論および経験則、材料の実験データおよび様々なデータベースを、計算科学とデータ科学の融合により組合せ、計算機上で材料のプロセス、構造、特性、性能の連関を予測するシステムを実現して、効率的な材料の開発やプロセスの革新を可能にする統合型の材料工学と定義される。我が国ではこれまで、世界に先駆けて MI を具現化すべく、SIP「革新的構造材料」(以下、「第 1 期」という。)において、鉄鋼材料の溶接部を例題として、開発されたモジュールは 162 件、それらを組み合わせたワークフローは 101 個など MI システムを MI 1.0 として開発を行ってきた。その結果、疲労、クリープ、水素脆化、脆性破壊といった構造材料にとって重要な性能について、溶接プロセスから一貫して予測するための、各種計算モジュール及び材料工学的に計算モジュールを連関させたワークフロー、さらに、ワークフローに沿って逐次計算を実行していく統合システムの開発に成功しつつある。

新素材が社会の革新を引き起こすマテリアル革命を推進していく上で、MI の高度化と重要な材料領域への応用展開が喫緊の課題となる。Society5.0 を支える革新的な材料をいち早く開発し社会に実装していくことが重要であるとともに、材料開発の仕組みそのものを、Society5.0 の考え方、すなわち、サイバー(MI)とフィジカル(ものづくり)の融合によって、飛躍的に効率化していく必要がある。

世界を見ると、AI を活用した材料開発に投資が加速している。複雑な構造を有する材料を AI が開発できるのか、特に、長期間の信頼性を求められる構造材料において、AI が開発した材料が受容されるのか等、議論が分かれるところである。しかし、実現すると、我が国が強みを有する材料分野において、破壊的な技術革新をもたらすことになる予想される。

従来の材料工学に、近年、発展著しい情報工学を活用していくことが重要である。我が国は、材料分野において、材料工学の知見、ものづくり技術、高品質なデータの蓄積において、世界的に優位にある。情報工学によって、これらの蓄積を最大限に活用するとともに、さらに、効率的にこれらの蓄積を拡大していくことを企図する必要がある。

以上の認識に基づき、MI 基盤領域においては、これまでに開発してきた MI を素地とし、材料工学と情報工学を融合して、材料開発手法の刷新を目指す。我が国の材料分野での強みを生かし、世界に先駆けて、破壊的なイノベーションを起こす。具体的には、重要な材料分野への応用を念頭におきながら、MI の高度化、特に、欲しい性能から材料・プロセスを最適化する逆問題に対応した新しい MI 基盤の確立に取り組む。

ここで逆問題 MI 基盤とは逆問題に対応した MI システム及びツール群というコンピュータプログラム、並びに、これを運用するためのハードウェア(以下、「逆問題 MI システム」という)と、これらを企業で使用し持続的に維持・発展するための仕組み・体制を指す。従来は実験・試作で行っていた試行錯誤を、逆問題 MI システム等上で効率的、かつ、網羅的に行うことで、従来の研究開発手法に比べ、高コストな実験・試作の回数を減らしつつ、より広範囲の空間上で最適な材料・プロセスを設計できるようにする。具体的な利用方法として、ユーザは逆問題 MI システムにインターネット回線を通して接続し、材料開発課題を解決するための解析を行う。自社データを加えた解析も可能なように、ユーザのローカル環境での計算とシームレスに接続して利用できるような仕組みを構築する。

逆問題 MI の具体的なアプローチ

逆問題 MI の手法は課題ごとに異なるが、典型的には、材料・プロセスから性能を予測するための順方向の計算技術(モジュール及びワークフロー)を開発し、これを用いて計算機上で効率的に材料・プロセスの最適化を図るというものである。SIP 第 1 期成果や参画機関の有するシーズを活用することで必要な順問題の計算・解析技術の活用、AI 技術を組み合わせ、逆問題を効率的に解くために必要な情報工学の専門家が参画すること等により、逆問題 MI を開発する。各逆問題課題を解く中で開発・蓄積されるモジュール、ワークフロー、逆問題解析のためのデータ科学手法、及び、これらが統合的に実装される MI システムが開発の成果物となる。開発を効率的に進めるために、順方向の計算技術の高度化を進めつつ、並行して、できるところから逆問題解析を進める。

AI 等を駆使して妥当な解を算出するためにはデータの蓄積が重要である。逆問題課題を設定した企業は、基礎となるデータを相当程度有しており、これらのデータを活用して本課題に取り組む。加えて、モジュールを作成する大学や国研では、長年の研究で蓄積したデータや知見に基づいて開発を行う。さらに、補完するために必要な実験データについても、プロセスモニタリング、3 次元構造解析等の技術によって、効率的に収集する。このように、必要なデータ(及び知見)は十分に確保して設定した逆問題を解く。

本 A 領域において(A-1)逆問題解析技術の先行的開発、(A-2)様々な先端的なプロセスに逆問題を適用するための新たな計算モジュールの開発、(A-3)原子から構造体をデザインする技術の開発、(A-4)これらを統合して逆問題開発を可能とする統合システム、及び、(A-5)構造材料開発の基盤となるデータベースの開発も行い、これを合わせて、逆問題 MI 基盤の確立を目指す(図4)。

まず、(A-1)逆問題解析技術の先行的開発においては、第 1 期で開発した計算モジュール・ワークフローを直接的に活用できる材料・プロセスを対象に、AI 技術と組み合わせ逆問題を解析する手法について研究開発を行う。加えて、必ずしも計算モジュール化になじまないプロセスに対しても、効率的な逆問題解析手法を検討する。

並行して、(A-2)において、C 領域で取り扱う先端的な材料・プロセスに逆問題を適用していくために、様々なプロセスに対応可能な計算モジュール群の開発を進める。ここで開発される計算モジュール群を活用し、(A-1)で開発した逆問題手法を取り込みながら、先端材料・プロセスにおける具体的な適用例において逆問題アプローチによる開発効率化に取り組むことになる。

さらに、B 領域で取り扱う構造体レベルでの逆問題適用のために、(A-3)では、原子レベルから構造体をデザインするために必要な解析技術を開発する。機体やエンジン部品などの構造体レベルで要求される性能は、複数の特性を満足する必要がある、また、これらの特性が、原子・分子から構造体レベルの様々なスケールでの内部構造に依存する。ここでは、複数の物理現象を同時に扱いながら、それらの異なるスケールを接続するという高度な技術の開発が必要となる。

これらの要素技術を統合する(A-4)逆問題対応 MI 統合システムの開発では、新たに開発される逆問題技術や先端的な材料・プロセスに対応した計算モジュール等を実装し、これらによって逆問題解析ができるように統合システムの大幅な機能強化が求められる。さらには、使い勝手やセキュリティの強化等、MI の社会実装を進めていくために必要な改善も同時に行っていく必要がある。

最後に、構造材料の開発の基盤となる(A-5)構造材料データベースの開発では、構造材料特有のデータベース構造を研究開発し、実験及び計算データを効率的に蓄積して逆問題に活用できる構造材料データベースを構築する。

なお、MI 統合システムと構造材料データベースは密接に連携し、材料データ、計算モジュール、ワークフローという計算道具を有機的に活用して、逆問題で構造材料を開発して行くことになる。

以上の取り組みにより、金属・セラミックスから高分子、さらに、これらをマトリックスとした複合材料までをカバーし、求められる性能から材料・プロセスを最適化するための次世代型 MI 基盤の確立を目指す。

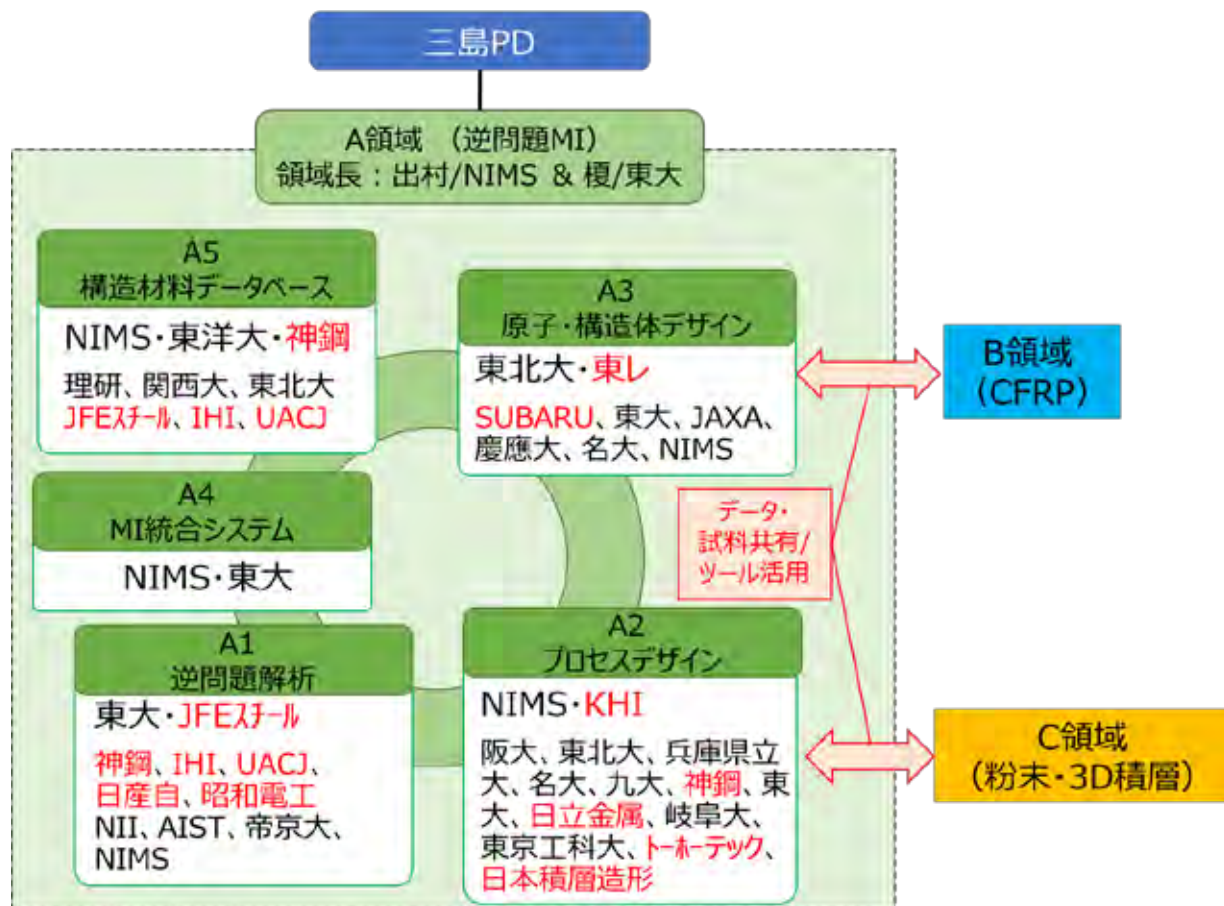


図4. A領域 逆問題 MI 基盤の研究体制
(赤字は民間企業)

(A-1)逆問題解析

チームリーダー： 榎 学(国立大学法人東京大学)

風間 彰 (JFE スチール株式会社)

参画機関： 国立大学法人東京大学、JFE スチール株式会社、学校法人帝京大学、大学共同利用機関法人情報・システム研究機構国立情報学研究所、国立研究開発法人物質・材料研究機構、株式会社 IHI、株式会社 UACJ、株式会社神戸製鋼所、日産自動車株式会社、昭和電工株式会社

これまで我が国では、理論、経験則、数値計算、データベースなどを融合することにより、構造材料の構造や性能を予測するための計算モジュール群やデータベース群から成るシステムを、鉄鋼材料溶接部を例題として開発してきた。溶接過程は、凝固、変態、粒成長、析出など、鉄鋼材料の構造を決定する多くの現象が同時に発生する複雑なプロセスであるため、ここで培われた構造予測モジュールは、溶接以外の金属材料製造プロセスにも拡張可能であり汎用性が高い。また、溶接部での複雑な微視構造を持つ材料や構造体が、負荷応力や温度などの使用条件に対してどのような時間依存の性能を発揮するかに関して、疲労、クリープ、水素脆化、破壊靱性の各性能を対象として性能予測モジュールの開発を行った。これらの計算モジュール群がフレキシブルに接続可能なシステムの開発により、性能の一貫予測が可能となってきた。また、データ同化手法により計測困難な材料パラメータの推定も可能となっている。

しかしこれまでの予測システムは、基本的には組成などの材料条件、製造や利用加工などの材料プロセス条件から性能を予測する順問題を取り扱うシステムであった。一方、鉄鋼材料においては1.5GPa級の次世代超高張力鋼、アルミニウム合金においては750MPa級の高強度材料の開発が進められている。しかし、強度は破壊靱性、耐環境性、溶接性とのトレードオフの関係にあり、これら材料の実用化にあたっては性能バランスの最適化が不可欠である。したがって、材料開発の時間の短縮を図るためには、これまで個別に開発してきた各性能予測モジュールを連携させて最適化を図るための新たなアプローチが必要となる。また、先端的な3D積層造形用の粉末製造技術など、全ての個別プロセスの物理モデルの構築が困難である課題については、研究開発における試行回数の飛躍的な削減や効率的なプロセス探索技術が求められている。

そこで本研究開発においては、これまで開発を行ってきた鉄鋼材料やアルミニウム合金等を主な対象とした性能予測の順問題のシステムをベースとして、スパースモデリングやデータ駆動等の情報科学・データ科学の手法を駆使することにより、性能バランスの最適化および逆問題解析が可能な枠組みについての研究開発を進める(図5)。さらに、この逆問題解析手法を適用することにより、自動車・航空機をはじめとする輸送機器において今後ますます必要とされる先端的な性能を有する鉄鋼材料、アルミニウム合金、耐熱合金などについて、材料開発の一層の加速を図ることを目的とする。

中間目標(2020年度末時点の達成目標)

【次世代高強度鋼 MI】

高強度鋼のベースとなるマルテンサイト組織に注目して、主にこれまで得られているプロセス条件、ミクロ組織、特性・性能に関するデータを用いて、逆問題 MI の手法を高強度鋼に対して適用する際の課題を明確にする。

【次世代高強度 AI 合金 MI】

これまでに蓄積された諸性質とマイクロ組織等に関するデータから、MI を用いて新たな高強度 AI 合金の熱加工プロセス条件の探求を試みる。

【高強度鋼の接合プロセス最適化 MI】

特に高強度鋼の破壊靱性に及ぼす溶接プロセスに注目して、これまで開発を進めてきた破壊靱性の性能予測システムに加えて、逆問題 MI の手法により高張力鋼における破壊靱性の向上を実現するためのプロセス条件を探求する。

【耐熱鋼の接合プロセス最適化 MI】

特に耐熱鋼のクリープ性能に及ぼす溶接プロセスに注目して、これまで開発を進めてきたクリープの性能予測システムに加えて、逆問題 MI の手法により耐熱鋼におけるクリープ性能の向上を実現するためのプロセス条件を探求する。

【製品応用 MI】

本研究では MI を活用することで、企業によって蓄積されたノウハウの形式知化を実現するために、加工プロセスに関するデータベースの整備を行う。

最終目標(2022 年度末時点)

【次世代高強度鋼 MI】

高強度鋼のベースとなるマルテンサイト組織に注目して、主にこれまで得られているプロセス条件、マイクロ組織、特性・性能に関するデータを用いて、逆問題 MI の手法により高強度鋼に対して新たな材料開発指針を見出すスキームを確立する。

【次世代高強度 AI 合金 MI】

これまでに蓄積された諸性質とマイクロ組織等に関するデータから、MI を用いて新たな高強度アルミニウム合金の熱加工プロセス条件を見出す基盤を構築する。

【高強度鋼の接合プロセス最適化 MI】

特に高強度鋼の破壊靱性に及ぼす溶接プロセスに注目して、これまで開発を進めてきた破壊靱性の性能予測システムに加えて、逆問題 MI の手法により高張力鋼における良好な破壊靱性を実現するためのプロセス最適化を見出す。

【耐熱鋼の接合プロセス最適化 MI】

特に耐熱鋼のクリープ性能に及ぼす溶接プロセスに注目して、これまで開発を進めてきたクリープの性能予測システムに加えて、逆問題 MI の手法により耐熱鋼における良好なクリープ性能を実現するためのプロセス最適化を見出す。

【製品応用 MI】

本研究では MI を活用することで、企業によって蓄積されたノウハウの形式知化を実現し、新たな加工プロセスを見出す基盤を構築する。

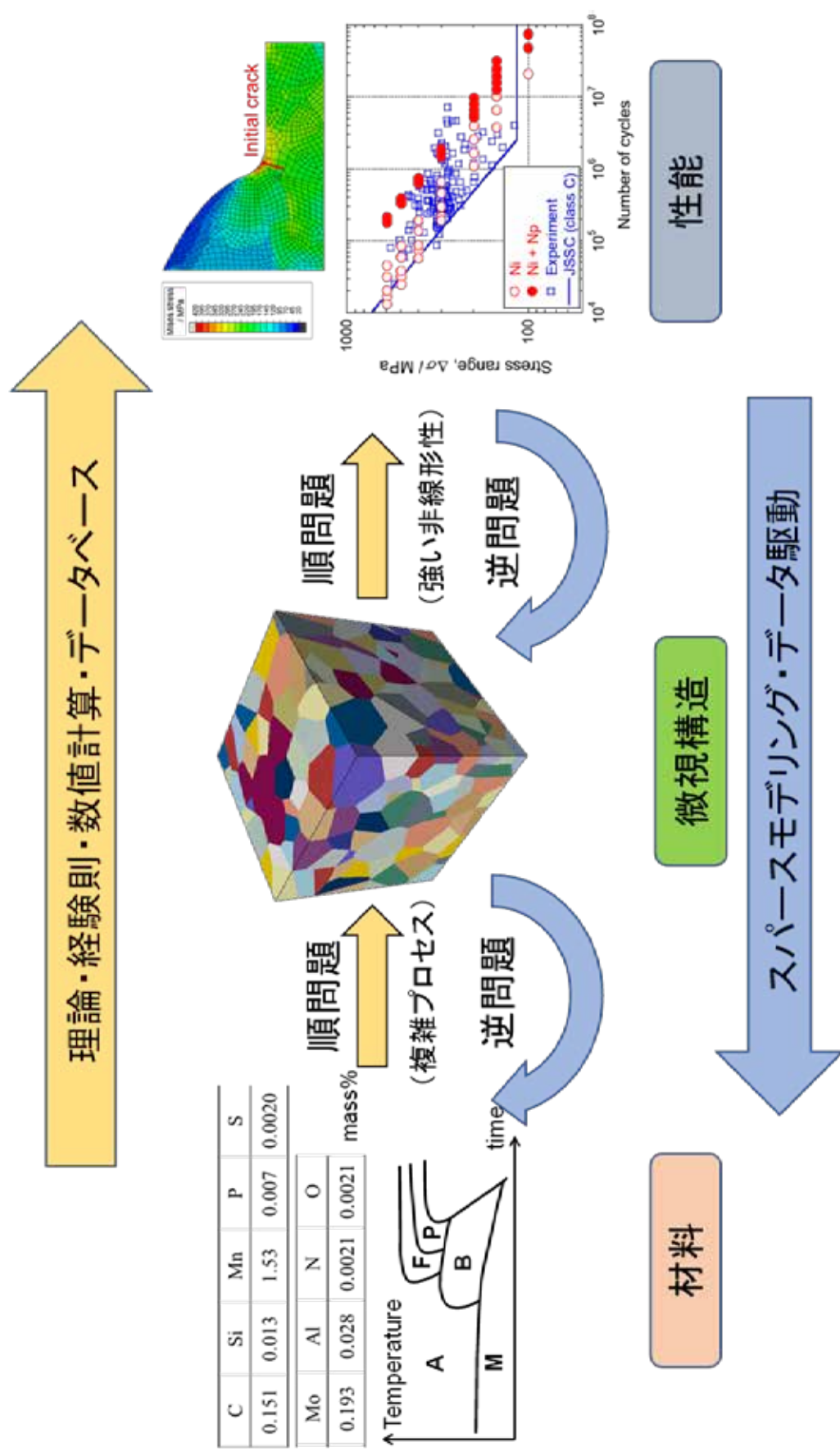


図5. 逆問題解析研究開発概念図

(A-2)プロセスデザイン

チームリーダー： 渡邊 誠 (国立研究開発法人物質・材料研究機構)

井頭 賢一郎 (川崎重工株式会社)

参画機関： 国立研究開発法人物質・材料研究機構、川崎重工業株式会社、国立大学法人大阪大学、国立大学法人東北大学、公立大学法人兵庫県立大学、国立大学法人名古屋大学、国立大学法人九州大学、株式会社神戸製鋼所、日立金属株式会社、国立大学法人岐阜大学、国立大学法人東京大学、学校法人片柳学園東京工科大学、トーホーテック株式会社、日本積層造形株式会社

プロセス、構造、特性、性能は、材料工学の四大要素であり、これらの連関を解明し、つなぐことが材料開発の本質である。従って、先端的な材料・プロセスに逆問題を適用するためには、これら材料工学四大要素をつなぐための計算モジュールの開発が不可欠である。ここでは、先端プロセスとして、特に、金属粉末を原料とする 3D 造形技術を取り上げ、これを先端的な耐熱材料開発に適用していくために必要な計算モジュールの開発に取り組む(図6)。具体的には、共通する物理現象についての解析モジュールや、個々の材料に応じた予測モジュールを開発し、先端的な材料・プロセスに逆問題を適用するための計算モジュール基盤を構築する。

ここで開発した様々なプロセスに関する計算モジュール及び3D 構造解析技術は、C 領域で取り扱う先端的材料・プロセスに逆問題を適用し、材料やプロセスをデザインするために活用していく。具体的な開発項目を以下にまとめる。

㊦ 材料開発のための共通的基盤モジュール

金属粉末の熔融凝固過程や焼結過程など共通する物理現象に関するモジュールを開発する。

㊦ 3D 積層造形構造制御モジュール

3D 積層造形を対象に、非平衡プロセスを積極的に活用した合金設計技術を開発し、耐熱性と造形性などを両立させた新合金提案技術を確立する。インラインモニタリング技術の開発とデータ蓄積、予測結果との比較検証を通じて、モジュールの完成度向上を図る。

㊦ 3D 粉末鍛造構造・性能連関解析モジュール

粉末焼結及びピレットリングによって得られた一次素材は、ニアネット鍛造及び熱処理によって、3D 形状と構造が制御され、クリープ、疲労等の性能が決まってくる。ここでは特に、耐熱部材で重要となるクリープと疲労が重畳したクリープ疲労について、性能から最適な 3D 粉末鍛造条件を決定するための基盤となる、構造と性能を連関させる技術を確立する。

㊦ CMC 性能予測モジュール

CMC の使用環境模擬条件での性能劣化に関する既存の知見を体系化・集約し、CMC 部材信頼性評価への適用を図る。

中間目標(2020 年度末時点の達成目標)

【粉末 3D 造形】

耐熱合金の 3D 積層造形プロセスを対象とし、急冷過程による組織形成や割れの予測、力学特性を予測可能とする順方向の解析技術を開発する。

【粉末製造】

耐熱合金粉末の製造プロセスを対象とし、製造条件と粉末粒度分布など粉末性状に関するデータを蓄積する。蓄積データに対し機械学習アルゴリズムを適用し、最適化における課題を抽出する。PREP 法を対象に高荷重保持高速回転軸受けに関する検討を行い、粉末平均粒径を微細制御可能とするための非移送式プラズマガンの効果について検討する。

【粉末鍛造(粉末冶金)】

NIMS 超合金特性予測プログラムの改良、クリープ、疲労性能データの蓄積と予測における課題の明確化、粉末特性や初期密度、荷重等と焼結特性、微細構造の相関データベースを構築する。

【粉末焼結】

粉末特性や初期密度、荷重等と焼結特性、微細構造の相関データベースを構築する。添加元素について、拡散機構を明らかにし、熱間塑性加工の温度条件が組織構造変化に及ぼす影響を調査する。

【先端鍛造】

固溶強化型及び析出強化型合金の恒温鍛造データの蓄積と小型試験での解析モデルを検証し、課題を抽出する。

【CMC】

CMC の高温力学負荷条件下での劣化メカニズムについて既存の知見を体系化・集約化しシミュレーション可能とする。

最終目標(2022 年度末時点)

【粉末 3D 造形】

耐熱合金の 3D 積層造形プロセスを対象とし、急熱急冷過程による組織・欠陥の予測、熱処理後の組織や性能予測を可能とする技術を実現する。非平衡プロセスを活用した合金設計技術を確立する。

【粉末製造】

耐熱合金粉末の製造プロセスを対象とし、従来、多くの実験と時間、費用が必要となっている製造条件最適化を加速するための MI 技術を構築する。3D 造形におけるサイバーとフィジカルの親和性を高める新規 PREP 装置を開発する。

【粉末鍛造(粉末冶金)】

粉末原料による耐熱合金鍛造プロセスを対象とし、金属粉末焼結・鍛造・熱処理プロセスの解析技術を開発、組織及びマクロ特性の予測技術実現を図る。

【粉末焼結】

高温での粉末成形体の収縮変形挙動および微細構造変化を系統的に計測し、焼結工程の材料 DB を構築、これを用いた焼結解析システムを確立する。実験解析と計算科学の融合した逆問題 MI により、合金設計と加工プロセス条件に係る最適解の予測手法を構築する。

【先端鍛造】

インゴットを原料とする先端鍛造プロセスを対象とし、高精度な鍛造解析技術を開発し、プロセス設計技術を確立する。

【CMC】

CMC の使用環境模擬条件での性能予測技術を開発し、バーチャルテストを実現する。

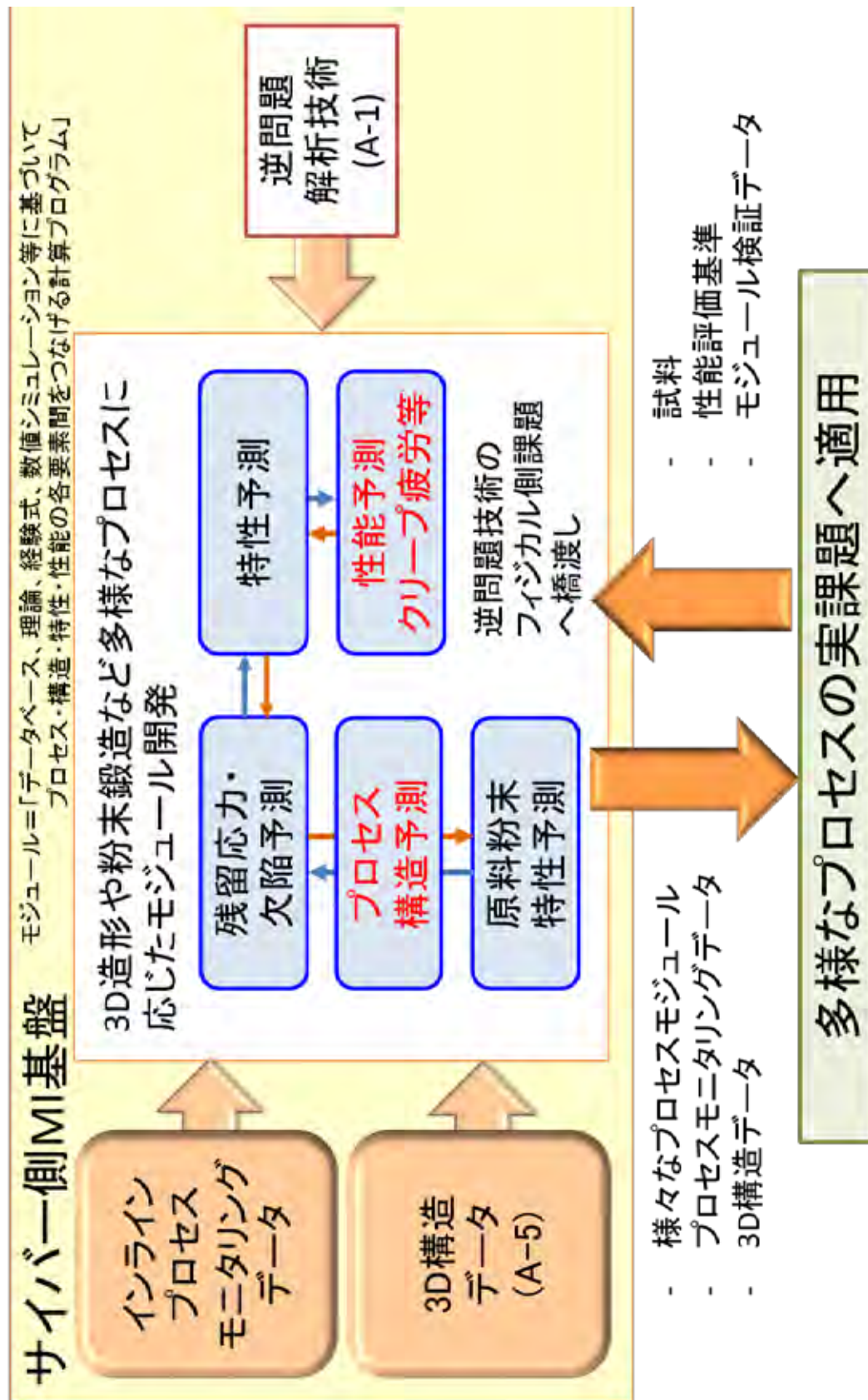


図6. プロセスデザイン研究開発概念図

(A-3)原子(分子)・構造体デザイン

チームリーダー： 岡部 朋永 (国立大学法人東北大学)

伊藤 明彦 (東レ株式会社)

参画機関： 国立大学法人東北大学、東レ株式会社、株式会社 SUBARU、国立大学法人東京大学、国立研究開発法人宇宙航空研究開発機構、国立大学法人名古屋大学、国立研究開発法人物質・材料研究機構、学校法人慶應義塾慶應義塾大学

逆問題を適用して、原子レベルから構造体をデザインしていくためには、複数の物理現象(マルチフィジックス)を同時に扱いながら、原子・分子から構造体までのスケール(マルチスケール)を繋いで行く技術が必要となる。ここでは、このマルチフィジックス・マルチスケールの問題が先鋭化される航空機用高分子系複合材料を適用例として、機体(構造体)レベルで逆問題を適用するための基盤技術を取り上げる。これまで我が国では、量子化学計算に基づく架橋反応を含む分子スケールから簡易機体設計まで扱えるマルチフィジックス/マルチスケールシミュレーション技術を開発してきた(図7 上図)。このような取り組みをボーイングは”Atoms to Aircraft”と名付けている。SIP 第1期「革新的構造材料」において、CFRP は量子化学計算(モジュール数:3)、分子シミュレーション(モジュール数:4)、マイクロ(モジュール数:3)、メゾ(モジュール数:3)、マクロスケール(モジュール数:6)を網羅し、構造設計(モジュール数:3)にまで適用が可能となっており、社会実装に適用可能なレベルの順解析ツールを構築している。実際に、汎用コード(Materials Studio、J-OCTA 等)への実装や企業での材料開発に活かされるなど、既に社会実装が始まっている。

ここでは、SIP 第1期の成果を活用しつつ、高分子系複合材料の機体適用を具体的な適用対象として、より開発現場での適用を可能とすべく、シミュレーションツールをさらに発展させる。具体的には、多成分系ネットワークポリマーの開発研究から構造部材設計、マニファクチャリングに至るまでを一気通貫に扱い、かつ逆解析に基づき最適化までを扱えるマルチフィジックス/マルチスケール(MP/MS)シミュレーターを開発し(図7 下図)、それをもとに多機能複合材料あるいは最適構造部材を提案する。その実現に向けた開発項目は次のようなものである。

- ・ネットワークポリマーを対象とした散逸分子動力学法(DPD)の構築
- ・DPD あるいは全原子 MD を利用したマルチフィジックス解析
- ・繊維間干渉を考慮に入れた自己無撞着場理論(SCF)の構築
- ・エポキシ樹脂系ネットワークポリマーの組成設計・実験との比較
- ・実験とマルチフィジックス解析の両方を教師データとした新規材料提案
- ・連続体スケールまでを取り込んだマルチスケールモデリングの構築
- ・複合材料の自動積層における成形モデリングとそれに基づくモニタリング提案
- ・応力集中軽減を考慮した自動積層構造部材に対するマルチスケール最適設計

中でも、ナノ～ミクロンスケールの相分離構造を有する複合材料向け多成分ネットワークポリマーの特性評価、特にエポキシ樹脂の反応過程で生じる相分離構造形成をシミュレーションによりモデル化し、それを実構造部材にまでスケールアップする取り組みは、ボーイングにも先んじた世界で初めての試みである。日本の戦略物資である炭素繊維あるいは複合材料の優位性を保つためには、ソフト面での技術確立が必要不可欠である。

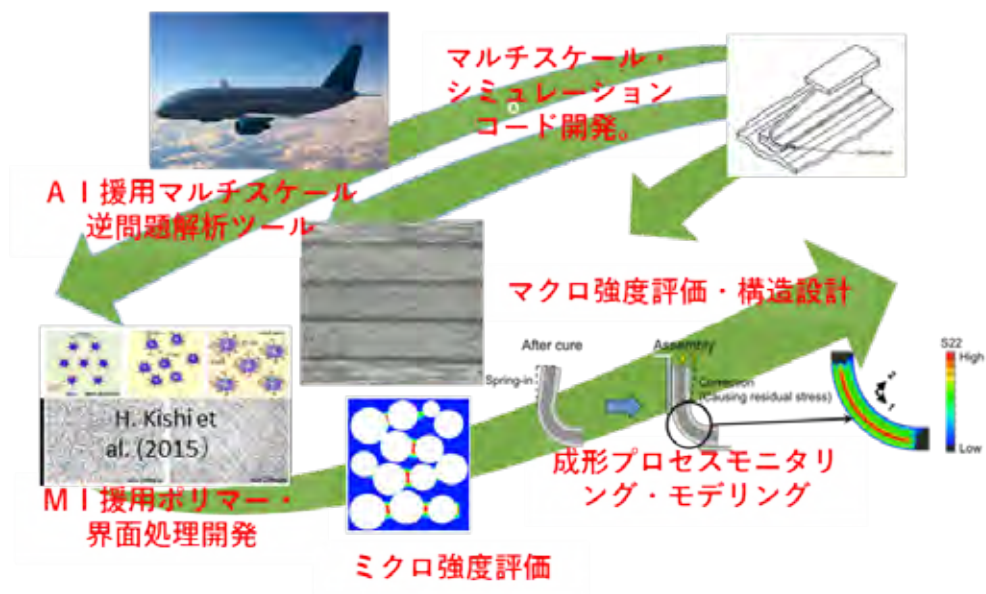
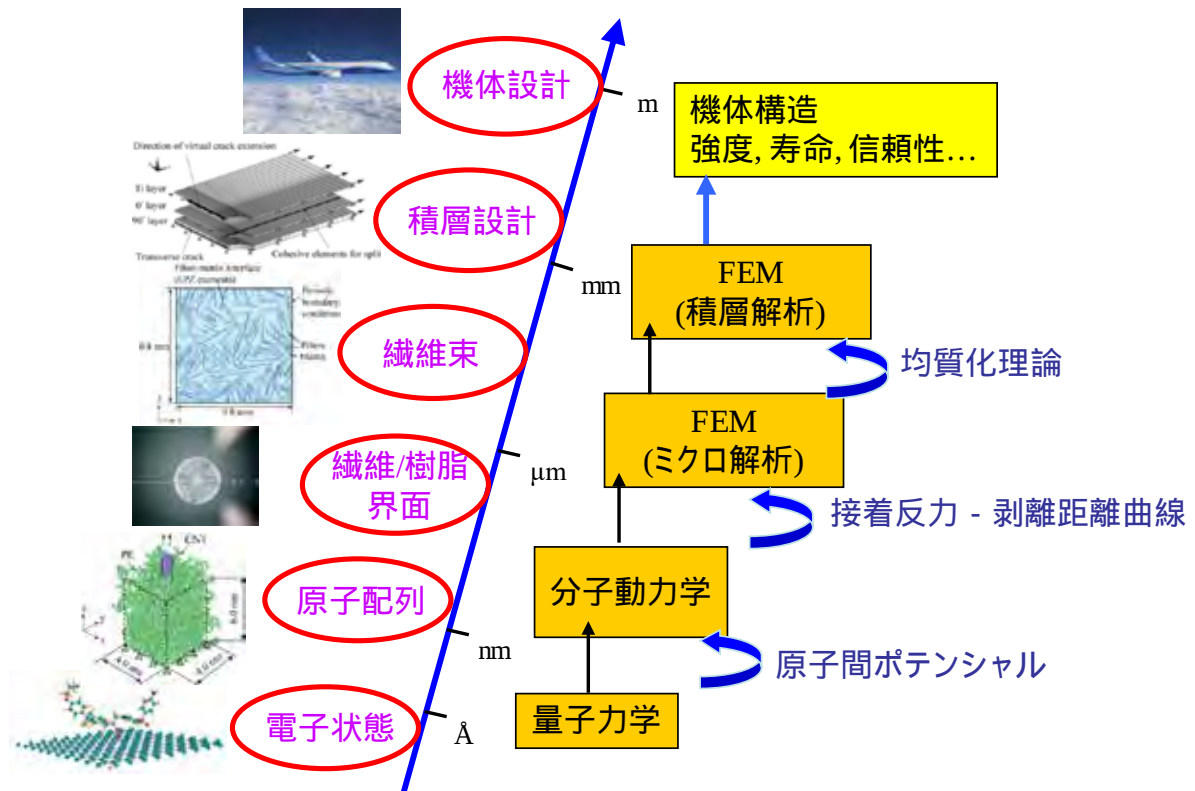


図7. 原子・構造物デザイン研究開発概念図

中間目標(2020 年度末時点の達成目標)

【航空機用先進複合材料ネットワークポリマーの架橋反応プロセスモデリング】

ネットワークポリマーの架橋反応プロセスにおける量子化学計算を Gaussian ベースにて構築し、それを高分子材料の硬化反応に組み込むことで架橋ネットワーク形成に関する反応散逸粒子動力学シミュレーションを構築する。

【航空機用先進複合材料マトリックス樹脂のメゾ・マイクロスケールモデリング】

自己無撞着場理論及び密度汎関数理論を用いた反応誘起相分離に関する高分子シミュレーションを開発し、反応散逸粒子動力学シミュレーション及び実験の両方の結果を再現可能とする。

【マルチフィジックス/マルチスケールシミュレーション(MP/MS)統合解析ツール開発】

航空機用先進複合材料におけるマルチフィジックス/マルチスケールシミュレーション(MP/MS)統合解析ツールを開発し、B 領域にて行う各種実験結果を再現可能とする。

【機械学習を援用した逆問題 MI ツールの開発】

機械学習を援用し、マルチスケール解析と材料物性について階層的スクリーニングが可能な解析ツールを開発する。

最終目標(2022 年度末時点)

【航空機用先進複合材料ネットワークポリマーの架橋反応プロセスモデリング】

航空機用先進複合材料におけるマトリックス樹脂を対象とした原子あるいは分子スケールでのモデリングツールを構築する。特に、ネットワークポリマーの架橋反応プロセスにおける量子化学計算を構築し、それを高分子材料の硬化反応に組み込むことで架橋ネットワーク形成に関する反応散逸粒子動力学シミュレーションを構築する。また、実験結果の再現を行い、材料開発現場での利用を可能とする。

【航空機用先進複合材料マトリックス樹脂のメゾ・マイクロスケールモデリング】

マトリックス樹脂の巨視的特性を、高分子の化学組成より議論することが可能となるモデリングツールを構築する。繊維周りの相分離を再現すべく自己無撞着場理論及び密度汎関数理論を用いた高分子の粗視化シミュレーションを開発し、反応散逸粒子動力学シミュレーション及び実験の両方の結果を再現可能とする。また、微視スケールから立脚したマイクロメカニクスモデルを構築し、マルチファンクショナル CFRP、結晶性熱可塑性樹脂マトリックスからなる CFRTP あるいは薄層 CFRP の実用化にむけた複合材料解析技術確立する。

【マルチフィジックス/マルチスケールシミュレーション(MP/MS)統合解析ツール開発】

航空機用先進複合材料におけるマルチフィジックス/マルチスケールシミュレーション(MP/MS)統合解析ツールを開発する。開発した MP/MS 解析ツールは B 領域とも連携し、参加企業における材料開発あるいは製造技術に実装する。また、解析ツールの MI 全体における統合化ツールへの実装を進める。さらに、高速成形熱可塑 CFRP のマルチスケールモデリングを構築し、AFP 積層製造技術へ展開する。

【機械学習を援用した逆問題 MI ツールの開発】

機械学習を援用したマルチスケール解析と物性の階層的スクリーニング手法を確立し、逆問題解析によるマルチスケール最適材料設計及び製造技術開発に貢献する。

(A-4)MI 統合システム

チームリーダー： 源 聡 (国立研究開発法人物質・材料研究機構)

井上 純哉 (国立大学法人東京大学)

参画機関： 国立研究開発法人物質・材料研究機構、国立大学法人東京大学

逆問題 MI システムを材料開発に活用していくためには、逆問題に対応できる統合システム基盤の開発に加え、ユーザビリティの向上が必須となる。さらに様々な実問題に適用するためには、(A-1)、(A-2)、(A-3)と連携して、新たに開発されたワークフローやモジュールを統合システムに実装し、材料開発のための計算が円滑に行われるための支援が必要となる。

そこで、統合システムの開発は、「逆問題対応統合システム基盤の開発」、「ユーザビリティの改良・開発」、「実問題への適用」の 3 項目について、以下に示す開発を行い、逆問題に対応できる MI システム基盤の構築を目指す(図8)。

・逆問題対応統合システム基盤の開発

様々な階層の不均一を伴う材料に対して逆問題を適用するためには、プロセスから性能という方向の順問題を解く要素技術において、物理現象が緻密に記述され、かつ、それに基づいた計算を発散や停止といった不安定さを抱えることなくロバストに実行できることが、必須となる。さらに現実の課題では様々なスケールや物理現象を複合的に解くためのワークフローが必要である。

そのために、第 1 期で開発した MI システムの基盤を大幅に強化する。具体的には、まず、個々のプログラムの高度化、これまでに構築された様々な API(アプリケーションプログラムインタフェース:MI-API(接続に関する API)、DB-API(計算データベース操作に関する API)、語彙-API(語彙情報に関する API)など)、および、データベース機能について、逆問題に対応できるように大幅に機能強化を図る必要がある。

この緻密な物理記述に裏付けされたロバストな順方向の計算技術を、AI が自在に制御することで、逆問題を解くことができる。したがって、逆問題に対応できる基盤システムとして拡張していくためには、逆問題を解くためのアルゴリズムの実装と、AI が順方向計算を自在に制御するための新技術の開発が必須となる。ここでは、最新の AI 技術に基づいた逆問題アルゴリズムと WF-API(ワークフロー操作のための API)を開発し、MI システムに実装することによって、逆問題に対応した基盤システムの拡張を達成する。

ワークフローは材料工学における問題の解き方そのものとみなすことができる。従って、これらをデジタル的に蓄積してネットワーク化することで、機械学習可能な形で材料分野における専門知識を構造化できることになる。このいわばデジタル教科書を用いると、類似の問題について素早く解き方を調べたり、思いもかけない解決のルートを発見することが可能となる。ワークフローのネットワーク化をいかに達成するかが課題である。ワークフローは、それ自体が概念と概念の接続そのものであり、概念は語彙(専門用語)によって表現される。従って、語彙と語彙との関係を構造化できれば、ワークフローのネットワーク化が可能となると考えられる。以上のアイデアに基づき、第 1 期で開発した語彙管理の機能を、材料工学の知識ネットワーク化を企図として、大幅に機能強化する。異なる材料、異なるプロセス技術の技術者間の知見をつなげることができるように、概念の関係性を記述する仕組みを実装することで、知見

のネットワーク化を図る。このためには語彙解析システムや語彙可視化システムが、登録される語彙群や実験・計算データを参照しながら、人間の思考と同期しながら知見を引き出す工夫が必要となる。具体的には、語彙や材料のデータベースにおける検索について、容易性、高速性、および、スケーラビリティを確保したシステムの開発が求められる。

・ユーザビリティの改良・開発

幅広い分野の MI システムユーザ層を獲得することが重要であることから、課題を持つ各ユーザが直感的に扱えるグラフィカルユーザインタフェース(以下、「GUI」という)を、ユーザの意見を集約しながら実現していくことが重要である。また様々な API を開発することから、個別の問題に応じた機能開発やデータ収集を可能とする枠組みの開発も想定される。ユーザの直感を引き出すインタラクティブな GUI を実現するために、AI 技術を活用したデータ解析機能(エラー処理、ログ収集、可視化機能も含む)の開発も必要となる。さらに遠隔からのアクセス機能の強化、さらに、セキュリティに関する技術を含めてシステム拡張を行う。

・実問題への適用

実際の問題に適用するためのフェーズでは、(A-1)、(A-2)、(A-3)で開発されたワークフロー、モジュール、逆問題アルゴリズムなどの研究成果をシステムに実装し、逆問題で材料を開発するツールとして仕上げていく必要がある。実装する開発物の入出力の理解や整理、汎用化、大規模化、ロバスト性確保などプログラムの高度化を協働して行い、これらの成果をシステム側に実装をする。

中間目標(2020 年度末時点の達成目標)

【逆問題解析の数理的手法のシステム実装】

(A-1)で開発した逆問題解析の数理的手法をシステム上で柔軟に動作させるための汎用化の検討を数ケース実施し、システムへの実装検証を行う。

【逆問題解析ワークフローの繰り返し計算に関わる柔軟な制御技術】

後述するアプリケーションプログラミングインターフェースを活用することで、逆問題解析に必要なワークフローの繰り返し計算の制御技術や、類似ワークフローの検索などに関する柔軟な仕組みを確立する。

【先端材料・プロセス向け新規開発モジュールの実装】

先端材料・プロセス向けの新規開発モジュールが多数開発されると考えられるため、これらの実装を迅速に進める必要がある。現在では、語彙インベントリの情報などの登録が煩雑であるために、MI システムにモジュールを実装するための作業を簡素化するための手法を確立する。

【ユーザ・インターフェース】

初年度、次年度にユーザにユーザビリティに関するヒアリングを行う。セキュリティを確保しながら、優先される項目について検討し、実装を行う。

【アプリケーションプログラミングインターフェース(API)群】

モジュール間の入出力を規定する API や、ワークフローそのものを操作するための API などの API 群を整備し、それらを活用したモジュール設計をユーザが柔軟にできる仕組みを実現する。

【リモートアクセス制御】

遠隔利用を可能にするためのリモートアクセスに対応できるインフラの整備を行う。また、ワークフローや計算データを、ローカルに存在するシステムと統一的に管理できるように環境を構築する。

最終目標(2022 年度末時点)

【逆問題解析の数理的手法のシステム実装】

A-1 で開発した逆問題解析の数理的手法をシステム上で柔軟に動作させるために汎用化し、システムへ実装する。

【逆問題解析ワークフローの繰り返し計算に関わる柔軟な制御技術】

逆問題解析に必要なワークフローの繰り返し計算に関わる柔軟な制御技術を確立する。

【先端材料・プロセス向け新規開発モジュールの実装】

先端材料・プロセス向けの新規開発モジュールの実装を進め、同時に、この作業を簡易化するシステム手法を確立する。

【ユーザ・インターフェース】

ユーザビリティ及びセキュリティ対策が向上したユーザ・インターフェースを完成させる。

【アプリケーションプログラミングインターフェース(API)群】

モジュール間の入出力を規定する API 群を整備し、API を活用したモジュール設計をユーザが柔軟にできる仕組みを実現する。

【リモートアクセス制御】

研究所や企業に分散している計算機資源を有効に活用しつつ、ワークフロー制御の一元性を両立できるようにリモートアクセス制御に関する技術を確立する。

【構造材料記述のためのデータ構造のシステム反映】

(A-5)で開発する構造材料を記述するためのデータ構造をシステムに反映し、データの関連を調べられるような仕組みを実装する。

(A-5)構造材料データベース

チームリーダー： 出村 雅彦 (国立研究開発法人物質・材料研究機構)

芦野 俊宏 (東洋大学)

岡崎 喜臣 (株式会社 神戸製鋼所)

参画機関： 国立研究開発法人物質・材料研究機構、学校法人東洋大学、株式会社神戸製鋼所、国立研究開発法人理化学研究所、学校法人関西大学、国立大学法人東北大学、JFE スチール株式会社、株式会社 IHI、株式会社 UACJ

構造材料は原子から構造体までの幅広い範囲で様々なサイズにおいて階層的な不均一を有しており、これを構造と呼ぶ。構造は、プロセスと特性を結びつける結び目に位置しており、プロセスが構造を支配し、構造が特性を支配する。さらに、これに加えて、使用環境までを考慮することで、性能を考えることができることになる。構造材料開発のために材料データを高度に活用していくためには、階層的な不均一構造の記述方法が鍵となる。さらに、階層的な不均一構造情報をデジタル化することに、大きなボトルネックが存在する。材料の構造は、様々な顕微鏡技術で画像として蓄積されるが、これを階層化した形で分類し、定量化してデジタル情報化していく作業は、構造画像についての豊かな知見を有した専門家に頼るしかなく、時間とコストが非常にかかっている。加えて、従来の材料工学では、技術的な制約のため、構造の二次元的な情報に基づくモデルの構築がなされてきたことにも留意する必要がある。本来、三次元的に特徴付けられる材料の構造情報をそのまま活かすことで、プロセス、構造、特性、性能のつながりをより本質に基づいて理解できるようになることが期待される。

以上の認識に基づき、プロセス、構造、特性、性能のつながりを記述し、逆問題に対応するための構造材料特有のデータベース構造について研究開発を行う。具体的には、構造材料の特性、性能を支配する材料の内部構造に着目し、格子欠陥から析出物、結晶粒構造などの、階層的に構成される材料の内部構造を、階層間で関係付けながら記述するための手法を開発し、プロセス、特性、性能と紐づけるためのデータベースを構築する。さらに、材料工学四大要素の中で、プロセスと特性を結びつける「構造」に関して、3D 情報を効率的にデータベース化するための技術を開発する。材料の性能や特性は、ナノスケールから数百 μm スケールまで、非常に幅広いスケール範囲に及ぶ階層的で 3D 的な幾何特徴を有する構造に大きく左右され、この構造はプロセスによって大きく変化する。従って、逆問題的に欲しい性能から最適なプロセスを決定していくためには、性能とプロセスを結びつける材料の構造に関して、定量的な 3D 情報をデータベース化しておく必要がある。ここでは、様々なプロセス条件下で形成された構造に関するマルチスケールな 3D 情報を、効率的に蓄積する手法を開発する。

・構造材料データベース構造の開発

鉄鋼溶接部、アルミ合金溶接部に関する材料データを活用し、先行して、これらの材料について、産学官でデータベース構造について検討を進める。その際、材料オントロジーなどの階層連関を記述するための情報工学的な枠組みを最大限活用し、構造材料におけるデータ活用に資するデータベース構造を構築する。逆問題 MI を適用する先進的な材料・プロセスについても、適用例においてデータが蓄積され次第、同様に検討を開始する。検討作業及び実装には、国際的な連携が欠かせないので、Granta MI など構造材料データベース事業を展開している機関と協力し、事実上の標準化が進むように展開を図る。

・マルチスケール 3D 構造解析技術開発

従来、一断面の画像からだけでは、その 3D 形態を想像することは難しく、判別には卓越した専門家の支援が不可欠となっている。構造のマルチスケールな 3D 情報を効率的に蓄積するためには、断面画像から構造を自動判別しセグメンテーションする機械学習モデルの確立が望まれている。ここでは、任意の二次元画像における構造判別並びに構造因子の自動抽出を可能とするシステムの構築を行う。並行して、現状の 3D 構造観察技術に存在するスケールギャップを解消し、マルチスケール 3D 構造解析を可能にする技術を開発する。特に、構造材料として最も重要なマイクロ～サブミリ領域における 3D 構造観察技術を対象とする。

中間目標(2020 年度末時点の達成目標)

【構造材料向け材料データ記述方式の設計・公開】

3 種類以上の逆問題課題についてデータ設計方式を提案する。

【nm から cm までをカバーするマルチスケールな 3D 構造情報取得技術】

走査電子顕微鏡による広範囲な 3D 観察を可能とする手法、及び、光学顕微鏡による効率的な 3D 観察手法を確立する。

【光学/電子顕微鏡 2 次元画像から、材料組織の定量情報を自動抽出する技術】

ラベリングした 3D 画像から 2 次元教師付き画像を生成し、組織の定量化のための機械学習モデルを作成する一連の方法論を確立する。

【数理科学手法による構造材料の性能と高い相関性のある新たな記述子の提案】

数理科学手法により、材料組織における新たな記述子を提案する。

最終目標(2022 年度末時点)

【構造材料向け材料データ記述方式の設計・公開】

以下の特徴を有する構造材料向けの材料データ記述方式を設計し、事実上の標準化を企図して利用可能な形で公開する。

・構造の階層性・相互の関係などを表現し、3D 構造情報解析技術とリンク可能であること

・新規の測定方法、材料系について随時拡張可能であること

・実験・数値計算・経験式など異なった種類の情報源を SIP-MI1.0 で開発された記述子とも連携して統合的に記述することが可能であること

・事実上標準化に向け、可能な限りインターネット上の標準技術を用いて記述されていること

【nm から cm までをカバーするマルチスケールな 3D 構造情報取得技術】

先端材料・プロセスの階層的不均一構造に対応できるよう、複数の観察手法を連携させることで、nm から cm までをカバーするマルチスケールな 3D 構造情報取得技術を確立する。

【光学/電子顕微鏡 2 次元画像から、材料組織の定量情報を自動抽出する技術】

光学/電子顕微鏡の 2 次元画像から、材料組織の定量情報を自動抽出する技術を確立する。

【数理科学手法による構造材料の性能と高い相関性のある新たな記述子の提案】

数理科学手法により、構造材料の性能と高い相関性のある新たな記述子を提案する。

(B) 炭素繊維強化プラスチック (CFRP)

領域長 岡部朋永 (国立大学法人東北大学)

中村 俊哉 (国立研究開発法人宇宙航空研究開発機構)

B 領域では、A 領域で開発される逆問題 MI 基盤技術を実際の CFRP 素材・構造体開発に適用し、設定された目標性能を達成する材料構造・プロセスをサイバー空間(MI システム)で導き出し、それをフィジカル空間(試作・試験)で実証し、さらに開発時間・コストの低減も実証する。逆問題 MI 基盤で開発される計算モジュール、ワークフロー、データ科学手法に関する技術をベースにして、対象材料・プロセスに合わせた技術を開発する。適用対象には、逆問題 MI 適用の好例となることが期待され、我が国が強みを有し、グローバルにも要求が高まっている先端的な実用構造材料・プロセスを選定した。具体的には、複合材料の 3D 成形技術等である。

SIP の趣旨から、材料・プロセス開発における逆問題 MI の効果の実証は、参画する素材・重工メーカー等による実用化・事業化ロードマップ上で行われることが不可欠である。それを官学が逆問題 MI を通じてサポートする産官学オールジャパン体制である。このような体制で取り組む必然性として、CFRP に関連する技術開発スピードが産業の要求性能に追いついていないという現状がある。研究開発の主な出口は航空機産業とするが、来るべき中型機、小型機では現状の生産レートでは間に合わず、一層の生産技術向上が必要であり、官学が有する計算技術・学術基盤を援用した新たな切り口が必要不可欠である。

構造材料開発の歴史は高比強度と耐熱性の追求に依るところが大きく、各種機器が高効率・省資源・環境負荷低減を追求し続ける限り、将来も続く。特に航空機材料には、この2つの性能が信頼性ととも最も厳しく要求されるので、構造材料研究開発の出口として最もふさわしい。

以下、3 チームの研究開発について述べる。これらは全て(A-3)チームの当該サブチームとの連携の下で推進される(図 9)。なお、開発された計算モジュール、データベース等は、事業化の妨げにならないよう留意しつつ、逆問題 MI 基盤に蓄積され、我が国全体の材料開発競争力向上のために活用されるものとする。

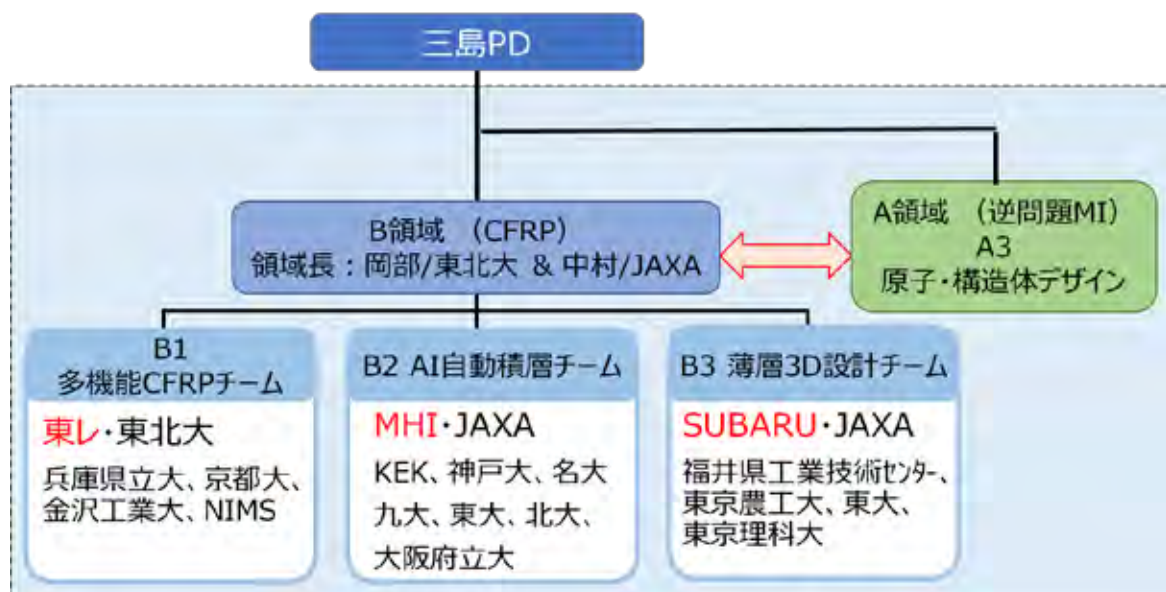


図9. CFRP の研究開発体制 (赤字は民間企業)

(B-1)多機能 CFRP の開発による高付加価値化

チームリーダー： 吉岡 健一（東レ株式会社）

岡部 朋永（国立大学法人東北大学）

参画機関： 国立大学法人東北大学、東レ株式会社、公立大学法人兵庫県立大学、国立大学法人京都大学、学校法人金沢工業大学、国立研究開発法人物質・材料研究機構

力学特性向上による軽量化を目的に採用されてきた炭素繊維複合材料について、近年は、難燃性・熱伝導性・制振性などの機能性を付与することによるトータル軽量化・低コスト化が注目されており、航空機構造材等に実装可能な機能性付与技術の開発が重要となっている。一方、航空機システムの開発は、その複雑度が増すにつれて開発期間が90年代の倍以上に長期化しており、これを短縮する技術的アプローチが必要となっている。また、鉄道内装構造、自動車、パソコンなどの電化製品などにも複合材料の多機能化は広く課題となっている。

上記のとおり材料開発の要素として機能性が加わるなか、MI技術を初期段階から活用して複合材料への機能性付与をポリマー設計およびプリプレグ設計の観点から実施し、早期に実装可能な技術として確立し、部材の要素試験により実証する。

従来の、力学特性を目的性能とするプリプレグは、剛性と靱性の機能分離を行うポリマーもしくはプリプレグとして設計され、成功を収めてきた。本開発では、これまでの力学特性向上を追求した従来型の力学ドメイン設計に加えて、新たに難燃性、熱伝導性、制振性などの機能性を付与するため、プリプレグへの機能性粒子やポリマーの配合により、最終的な複合材料として少なくとも1つの機能性ドメインを有する構造を目標とする。これを実現するプリプレグの設計をMIを援用して実施し、基礎的な力学的および機能性データを取得する。機能性ドメインの実装のために、機能性粒子やポリマーの最適な構造を特定し構造設計を実施、構造形成にかかわる反応中のパラメータ取得、実際のドメインの特性と燃焼性や熱伝導性に関わる現象との相関を確認する。これらの実験データと機能ポリマー・プリプレグに関する階層的スクリーニングに基づき、深層学習を利用した材料設計ツールを構築する。

最終的には構造材に必要な力学特性をもつ力学ドメインと、複数の機能ドメインからなるポリマー系、プリプレグ系の設計データベースを構築し、力学特性を維持／向上させつつ複数の機能性を付与した材料を設計し、また、MIを活用した多機能ポリマー・プリプレグに関する階層的スクリーニングに基づく設計ツールを構築し、材料特性を高精度に予測する手法を確立する。設計したプリプレグは、複合材料部材を模擬した小スケールの要素試験により、効果の実証を行う。

MI技術により、最終製品すなわち機体構造からの逆解析と、材料の分子設計からの順解析のサイクルを回すことで、樹脂、炭素繊維、樹脂—繊維界面の特性から部材（製品）までの特性を予測し、開発期間を短縮する技術を確立する。具体的には、多成分系ネットワークポリマーの開発研究から構造部材設計、マニユファクチャリングに至るまでを一気通貫に扱え、かつ逆解析に基づき最適化までを扱えるマルチフィジックス/マルチスケール(MP/MS)シミュレーターを開発し、それをもとに多機能複合材料あるいは最適構造部材を提案し、開発期間を短縮できる技術開発を行う。

中間目標(2020年度末時点の達成目標)

CFRPとして少なくとも1つの機能性ドメインを有するCFRPを設計することを目指す。具体的には、航空

機構造として一般的な CFRP の有孔板引張強度、有孔板圧縮強度をそれぞれ 480MPa および 310MPa とし、これらの低下率を 5% 以内に抑えながら、難燃性の指標として今回導入する実用的に燃焼性評価法における燃焼長さの 35% 抑制を目標とする。を目標とする。これを実現するために、CFRP 構造、その材料となるプリプレグ設計、樹脂組成設計について、まず基礎的な力学および機能性データを取得し、力学・機能特性データベースを構築する。達成目標レベルは [TRL-3] である。

最終目標 (2022 年度末時点)

構造材に必要な力学特性をもつ力学ドメインと、複数の機能ドメインからなるポリマー系、プリプレグ系の設計データベースを構築する。特に構造材向けに必要な力学特性を付与したうえで、複数の機能性 (難燃性、高熱伝導性、制振性等) をあわせて付与した材料を設計する。具体的には、航空機構造として一般的な CFRP の有孔板引張強度、有孔板圧縮強度をそれぞれ 480MPa および 310MPa とし、これらの低下率を 5% 以内に抑えながら、熱伝導率については CFRP 厚さ方向で 10% の向上、制振性については CFRP 振動測定における減衰率 10% 向上を目標とする。

一方で、上記の MI を活用した多機能ポリマー・プリプレグに関するマルチフィジックス・マルチスケールモデリングに基づく構造材の設計ツールを構築し、最終的な構造材での材料特性を高精度に予測する手法を確立する。設計したプリプレグは、CFRP 部材を模擬した小スケールの要素試験により、効果の実証を行い検証する。達成目標としては [TRL-5] とする。

また、成果を実証するため、上記の特性を発現するプリプレグを作製し、製品の品質保証試験と同様の評価 (繊維含有率、目付など) を行う。また、このプリプレグから CFRP パネルを成形し、実成形条件で十分な品位のパネルが製造可能であることを確認し、力学特性に加えて、上記の難燃性、熱伝導率、制振性の詳細評価を行う。難燃性については本研究開発において導入する燃焼性評価法を、熱伝導率については一般的な公的測定規格を、制振性についてはスポーツ用途部材などで従来実績のある CFRP 振動測定法を適用する。

(B-2)AI 援用積層最適化による CFRP 設計・製造自動化技術の開発

チームリーダー： 阿部 俊夫 (三菱重工業株式会社)

中村 俊哉 (国立研究開発法人宇宙航空研究開発機構)

参画機関： 三菱重工業株式会社、国立研究開発法人宇宙航空研究開発機構、大学共同利用機関法人高エネルギー加速器研究機構、国立大学法人神戸大学、国立大学法人名古屋大学、国立大学法人九州大学、国立大学法人東京大学、国立大学法人北海道大学、公立大学法人大阪府立大学

炭素繊維複合材料を積極的に多用するBoeing787登場を契機に近年、航空機における複合材料の構造において自動製造装置の発達・導入が急速に進展している。この傾向は、炭素繊維複合材料による軽量化が期待される、風力発電用大型風車を筆頭に高速鉄道、高速船舶などにおいても顕在化しつつある。「ロボット積層」と言われる高速、高自由度積層を可能としたAFP(= Automated Fiber Placement)装置が欧州製を中心に進歩が著しい。こういった装置を導入すれば誰でも構造が容易に製造できるようになってきており、過去、日本が蓄積してきた複合材技術の国際競争力が急速に低下しつつある。再び日本が複合材技術で世界をリードするためには、ロボット積層に相応しい設計、製造手法の革新、標準化が必要である。当該素材では炭素繊維を始め日本メーカーが世界をリードしており、この素材での競争力を活かしながら、欠点や課題をMIとの連携にて改善・改質を進めていく。具体的には、高分子系材料である当該材料の課題である樹脂硬化収縮挙動は部品製造時の形状精度不良に直結し、航空機構造組立ての大きな障害、製造コスト増大要因となっている。また、ロボット積層では生産性は向上するが、熟練者による手積層品に比べ、積層精度悪化等によって内部品質が劣化し、製品の強度・剛性等、性能悪化に繋がっている。また、ロボット積層では、直線だけでなく、曲線に沿った積層をはじめ、炭素繊維の強さ等を活かした最適設計を実施できる機能を有するが、テープ間の隙間、干渉に伴う構造内部の品質欠陥を多数発生させてしまうことで品質、強度・剛性低下への悪影響があり、その利点である生産性向上が充分に実現できていない。

一方、ロボット積層のためのAFP装置は欧米が独占状態であり、日本独自の最高性能の複合材料や中間基材であるプリプレグがあっても、既存のAFP装置に適した材料設計、成形方法を獲得できていないために、欧米メーカーの要求に沿うことができなくなりつつある。中国を始めとする新興勢力はいち早く欧米のAFP装置を導入し、当該材料の製造研究に着手し始めている。

このような現状を踏まえ、汎用AFP装置を用い、日本でこれまで開発してきたプリプレグを用いて成形高精度化、AI援用の最適積層設計などを行うことにより、次期航空機ビジネスにすぐに参入することを目指すものである。

AFPなどの製造自動化における、日本における欠点を克服するべく、欧米で実用化が進められている汎用AFP装置を導入し、日本でこれまで開発してきたプリプレグを用いて成形高精度化、AI援用の最適積層設計などを行うことにより、日本独自の材料技術・高精度成形を実現し、次期航空機ビジネスにすぐに参入することを目指す。このため、製品そのもの、あるいは製品製造のコスト競争力に繋がる技術マルチフィジックス/マルチスケール(MP/MS)解析を核にしたMI技術との連携により、材料改善、改質を起点に逆に製品競争力、引いては日本の航空宇宙産業の力にしていく活動を進めていく。同時に複合材構造最適化・自動化の研究成果をAIを援用した自動設計、養生(成形中に不整などを修正していく)システム化に繋げていく。

技術的にも市場的に急速に存在感を増している中国を含め、激しい競争が予想される将来航空機開発

等にて圧倒的な技術リードを獲得するためには、複合材の良さを活かしながら現行アルミ構造に負けない圧倒的な生産性を複合材製造にもたらす革新技術が必要である。硬化収縮挙動等高分子系材料特有の課題、あるいはロボット積層の適用に依る積層精度悪化等、従来の手積層に比べ、圧倒的な生産性向上の引き換えに失った品質上の課題を、高生産性を阻害させないで解決させ、複合材の良さである軽量・高強度、高剛性を活かすためには MI 技術を活用した材料改善・改質が必要である。マルチフィジックス/マルチスケール(MP/MS)解析を核にした MI 技術の活用により、ナノスケールでの素材、あるいは破壊経路の観察から始め、メートルサイズで現れる構造破壊現象、特に当該材料特有の破壊現象である剥離、層間に渡るクラック進展挙動の抑制を狙った当該材料の適用構造に相応しい新構造様式開発に至るまでの広範囲の課題に対し、マルチスケールの材料改善・改質研究を進め、最終的には炭素繊維複合材料を適用する製品の設計、構造、あるいは製品そのものを変革し、日本の高効率・高生産性ものづくり産業の力にしていく材料発の革新に繋がる研究開発を進めていく。

中間目標(2020 年度末時点の達成目標)

それまでの研究成果を盛り込んだ孔等の応力集中のある航空機構造 模擬パネル構造を製作し、強度試験を実施する。

< 評価項目 >

- ・積層速度、高速化
- ・積層品の内部品質評価、形状測定による品質評価(航空機標準品質との対比)
- ・強度試験を実施し、手積層、一般的な積層品に比べての強度向上効果

< 具体的目標値 >

航空産業界で一般的なエポキシ複合材に関して炭素繊維の強さ、良さを活かす曲面積層構造製造に際し、人の積層(平均 0.5 kg/時間)の 5 倍以上の高速積層が可能で、かつ強度的に一般的な手積層品同等以上を目標とする。

なお、各研究課題における中間時点における具体的な達成目標は以下の通りである。

- ・自動積層装置 AFP の動作性確認と材料改善に向けた装置側改善課題整理
- ・自動積層装置での大型、複雑形状 航空機構造部品製造に向けた課題と改善課題の整理
- ・マルチ複合材(エポキシ、熱可塑)と自動積層装置のマッチング条件明確化
- ・熱可塑複合材(CFRTP = Carbon Fiber Reinforced Thermo-Plastic)の成形・硬化課題洗い出し(昇温・降度条件と樹脂結晶化度の影響等)
- ・AFP での自動積層、同時硬化(In-Situ Consolidation)技術確立に向けた課題整理と成形手法基礎確立
- ・熱可塑複合材の積層同時硬化(In-Situ Consolidation)に向けた材料改質検討と MI を活用した材料改善手法の方針設定
- ・CFRP、特に自動積層での複合材構造内部組織に着目した破壊様相観察とそれを元にした破壊強度向上に向けた積層最適化、新構造様式目処出し

中間評価時(2020 年 3 月末)到達レベル TRL=3

最終目標(2022 年度末時点)

本研究の研究要素(材料改善、AI システム化等)の成果・課題を明確化させるため、実証試験を製作し、

強度試験を実施する。

< 評価項目 >

評価は中間年と基本的に同じ項目となるが、より航空機に近い組み立て構造でのパネル製造から それらを組み合わせた組み立て工程での製品製造 効率化を 総合的に評価する。

< 具体的目標値 >

現状のエポキシ複合材構造製造に比べ、複雑形状の翼形状 構造部品に対し、手積層の 5 倍以上の高速積層、かつ強度向上を実現。また、熱可塑複合材に向けて「脱オートクレーブ」積層、同時硬化の目途付けをさせる。

なお、各研究課題における研究終了時の具体的な達成目標は以下の通りである。

- ・複合材自動積層装置を活用した最適積層設計、製造手法の基礎確立
 - ・複合材自動積層、及び複合材適用構造の製品品質、製造性に拘る課題洗い出し結果を基に MI を活用した材料改善スキーム明確化
 - ・多目的最適化手法とデータマイニングの融合による多変量パラメータを最適化する設計・製造自動化手法の基礎確立
 - ・複合材自動積層に適した複合材積層最適化、自動化設計・製造手法の基礎確立、その効果検証のための実証試験の実施と評価
 - ・熱可塑複合材の AFP 自動積層、同時硬化に向けた手法基礎確立
 - ・実証試験評価を基にした構造軽量化、高生産性による製造コスト試算、ビジネスモデル検討実施
- SIP 終了時(2023 年 3 月末)目標レベルTRL=4

(B-3)薄層材自動積層による CFRP の3D 高自由度設計技術の開発

チームリーダー： 内山 重和 (株式会社 SUBARU)

中村 俊哉 (国立研究開発法人宇宙航空研究開発機構)

参画機関： 株式会社 SUBARU、国立研究開発法人宇宙航空研究開発機構、福井県工業技術センター、国立大学法人東京農工大学、国立大学法人東京大学、学校法人東京理科大学

世界中で航空機部品等の複合材化が拡大している中、汎用の自動化装置/使いやすい材料の普及により、誰でも一定の性能・品質の製品を製造できる時代になりつつある。また Low Cost Country(LCC)の台頭等で低コスト化が進み、同じ土俵では我が国はコスト競争に勝つことが困難になってきている。そこで、これまでの常識・基準にとらわれない材料/設計/製造技術の開発により、高性能/低コスト製造を達成する技術確立を行い、我が国の複合材技術の優位性を確保する必要がある。

従前の航空機部品等の複合材化では、材料面、設計面、製造面の制約があり、真のパフォーマンスを発揮できていなかった。これに対して、本研究では、これらの制約を取り払い、設計・製造面の自由度を高め、複合材の特性を真のパフォーマンスに近づけて高性能化することを目指す。

具体的には MI 手法を取り入れつつ、複合材料の幅を自由に变化させる可変開織技術、材料幅・板厚が連続的に変化するような複雑な構成を持つ複合材の最適設計技術、これらを自動化する製造技術などを確立し統合することで、過去に前例のない構造最適化と低コスト製造により、他国を凌駕し我が国の複合材技術の優位性を確保する。

「材料技術」、「設計・解析技術」、「製造技術」の三本柱を産・学・官の連携により推進し、国際競争力のある軽量複合材設計・製造を目指す。また、軽量化による材料費低減、装置開発を含めた短時間製造により、低コスト化に対しても、優位性を狙うものとする。

複合材開発には、素材に適した装置や設計が必要となるため、材料、装置、機体メーカーの連携が必要である。海外メーカーに先行されている川中(装置)産業を育成し、川上から川下までを一気通貫することで、開発スピードを向上させ、我が国の複合材の国際競争力を強化し、ゲームチェンジを狙う。

さらに、社会実装の早期実現を狙って開発期間を短縮し、薄層 CFRP を 2025 年に適用開始するため、積層装置を実用的な部材製造が可能な規模に前倒して拡大する。

また、薄層 CFRP のメリットを引き出し、複合材構造を更に軽量化する高自由度設計技術開発の加速が必須となることから、当初想定を超えてステアリング技術を活用するためのクーポン試験 (2019 年度)を実施する。

材料・設計・製造を繋ぐ MI 技術(マルチスケール計算・最適設計技術)を活用し、複合材の最適設計・製造を目指す。材料製造、部材製造、部材性能評価の開発段階でフィジカルとサイバーの突合せを行い、技術的なスパイラルアップを行う。また必要となる部材性能をどういった材料・設計・製造で達成するかを解く逆問題解析アルゴリズムを構築する。

中間目標(2020 年度末時点の達成目標)

達成 TRL:TRL3 「薄層プリプレグ」、「装置」、「設計製造」の基本開発を完了

薄層 CFRP の開発

- ・20m/min 以上の層間強化薄層プリプレグシート加工条件の確立
 - 高自由度 AFP(自動積層機)開発
- ・実大部品製造を見据えた自動積層装置の導入、および製造検証
- ・自動積層装置による幅・厚み可変およびステアリング積層技術の確立
 - 設計・解析技術
- ・薄層 CFRP の強度及び破壊特性を反映した許容値データベースに基づいた、繊維配向及び層厚の設計最適化手法の基本開発完了、および試用開始
- ・航空機翼構造を想定した、薄層 CFRP の可変幅・厚み、およびステアリングを考慮した積層方法と従来 CFRP の直線的な積層方法との比較の実施による有効性の検証

最終目標(2022 年度末時点)

- 達成 TRL:TRL4 航空機翼構造要素を例に要素技術開発を完了
 - 薄層 CFRP の開発
- ・高自由度設計用 AFP 装置に適合した層間強化薄層プリプレグシート加工条件の確立
- ・航空機部材として①強度についてこれまで以上に向上、かつ高自由度積層設計技術を実現するために AFP 装置に適合した 層間強化薄層プリプレグシートの作製
 - 高自由度 AFP(自動積層機)開発
- ・自動積層装置による複数本テープでの幅・厚み可変およびステアリング積層技術の確立
 - 設計・解析技術
- ・構築された設計最適化手法を用いた、強度・剛性を確保した上で、10%の軽量化目標を達成した航空機翼構造要素レベルの供試体の設計
 - 成形品
- ・AFP を用いた薄層テープのステアリング積層による、最適化された航空機翼構造要素の実大部品の製造
- ・製造した翼構造要素の実大部品に対して荷重の負荷を行い、強度および剛性について解析結果と同等であることを確認

(C) 粉末・3D 積層

領域長： 中野 貴由（国立大学法人大阪大学）

渡邊 誠（国立研究開発法人物質・材料研究機構）

C 領域では、A 領域で開発される逆問題 MI 基盤技術を実際の金属・セラミックス系素材・構造体開発に適用し、設定された目標性能を達成する材料構造・プロセスをサイバー空間(MI システム)で導き出し、それをフィジカル空間(試作・試験)で実証し、さらに開発時間・コストの低減も実証する。逆問題 MI 基盤で開発される計算モジュール、ワークフロー、データ科学手法に関する技術をベースにして、対象材料・プロセスに合わせた技術を開発する。適用対象には、逆問題 MI 適用の好例となることが期待され、我が国が強みを有し、グローバルにも要求が高まっている先端的な実用構造材料・プロセスを選定した。具体的には、積層造形を中心とする 3D 粉末冶金プロセス技術である。

SIP の趣旨から、材料・プロセス開発における逆問題 MI の効果の実証は、参画する素材・重工メーカー等による実用化・事業化ロードマップ上で行われることが不可欠である。その出口は、主に航空機産業とする。その理由は、航空機材料が最も過酷な条件で使用され、かつ最も高い信頼性が求められるからである。もちろん、環境・エネルギー産業等への波及効果も大きい。

以下、5 チームの研究開発について述べる。これらは全て(A-2)チームの当該サブチームとの連携の下で推進される。なお、開発された計算モジュール、データベース等は、事業化の妨げにならないよう留意しつつ、逆問題 MI 基盤に蓄積され、我が国全体の材料開発競争力向上のために活用されるものとする(図 10)。

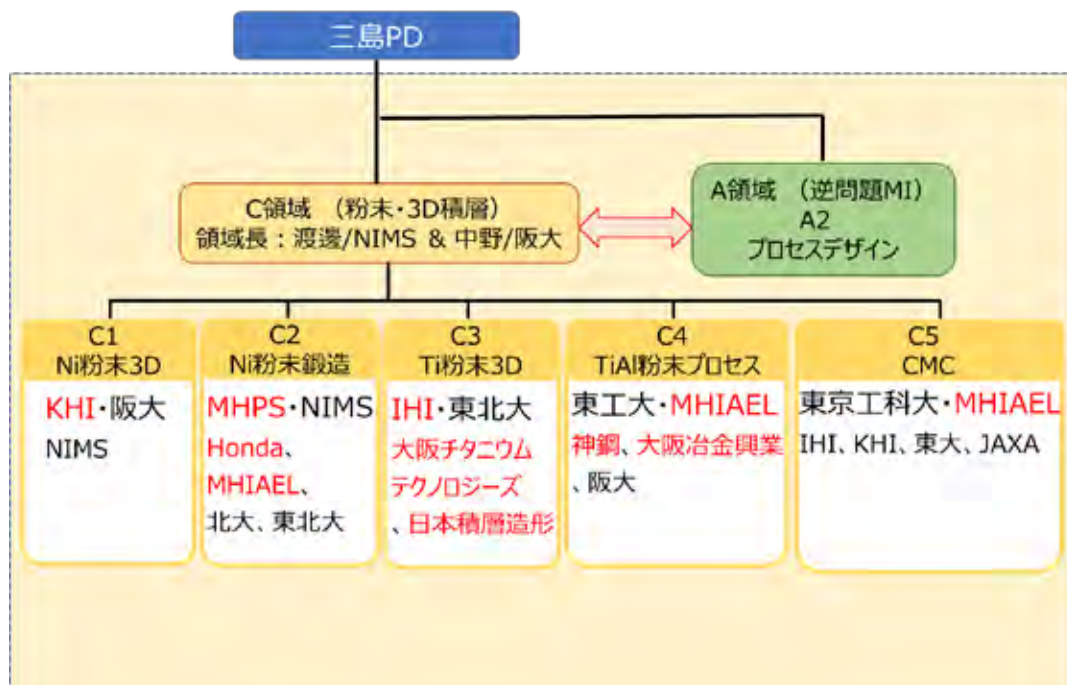


図10. 粉末・3D 積層の研究開発体制

(C-1) Ni 基合金の 3D 積層造形プロセスの開発

チームリーダー： 井頭 賢一郎（川崎重工業株式会社）

中野 貴由（国立大学法人大阪大学）

参画機関： 川崎重工業株式会社、国立大学法人大阪大学、国立研究開発法人物質・材料研究機構

3D 積層プロセス技術は、従来製法では製造できなかった三次元・複雑・精緻に設計された部品の製造を可能にする先端プロセスの一つである。3D 積層プロセスがもたらすのは設計の革新だけでなく、材料物性についても 3D 積層プロセス特有の物性を示すことが知られており、その有効活用が期待されている。しかしながら、3D 積層プロセス向けの材料探求、プロセス探求について、明確な手段は確立されていない。また、Society 5.0 実現のため、温室効果ガス排出削減への要求が高まっており、発電用プラント、特に発電用のガスタービンにおいては、用いる燃料の多様化が検討されている。例えば、水素ガスを燃料として用いる場合には、ニッケル基耐熱合金からなる燃焼バーナーが、水素ガス特有の燃焼速度の速さ、燃焼温度の高さに対応する必要がある、設計の複雑化、材料の高耐久化が今後益々求められる。これらの要求に応える技術として、ニッケル基合金粉末を用いた 3D 積層プロセスは最適な技術であり、材料探求、プロセス探求の指針となる MI 技術を確立することは、我が国の競争力の源泉になるものと考えられる。

これらの状況に鑑み、MI 基盤にて共通技術として開発する一貫予測技術を当該開発に活用し、3D 積層プロセスにて造形されたニッケル基耐熱合金の材料物性に関する予測技術の確立を目指す。これら予測技術を基に、MI 基盤で開発する逆問題解析技術等を活用することで、必要とする部品の性能から、これに適合する合金やプロセス条件を設計できる技術の確立を目指す。

さらに、我が国が有するニッケル基耐熱合金に関するバックグラウンドを活用しつつ、3D 積層プロセスにおける急冷凝固に対応した非平衡状態図予測技術を新規に開発することで、3D 積層プロセス特有の非平衡合金設計 MI 技術を確立する。非平衡合金設計 MI 技術を当該開発における合金提案・プロセス決定に活用するとともに、SIP 終了後は当該分野における我が国の差別化技術とする。

これらのサイバー空間における MI 予測技術は、フィジカル空間での材料選定、製造プロセス開発へと応用される。大学等がサイバー / フィジカルをつなぎの役目を担い、企業における部品製造へと橋渡しする。参画企業には 3D 積層プロセス装置等を設置し、燃焼バーナー部品の要求特性にマッチした材料選定を行うとともに、部品としての製造プロセス、部材評価技術の確立に注力する。そして、当該開発の最終目標として、燃焼バーナーの高性能化を実証する。

中間目標 (2020 年度末時点の達成目標)

【研究開発全体の達成目標・TRL】

- ・3D 積層造形された燃焼バーナーの実圧燃焼試験への搭載
- ・TRL4 への到達

【項目ごとの達成目標】

(イ) MI を活用した新規 Ni 基合金の製造実証

- ・既存 Ni 基合金での MI 基盤実装用実験データの蓄積 (フィジカル空間)

・既存 Ni 基合金での順問題解析シミュレーションデータと上記実験データの整合性確認(サイバー空間
フィジカル空間の連携)

(ロ) 燃焼バーナー高耐久化の実証

・カタログ材(もしくはその改良品)により 3D 積層造形された燃焼バーナーの製造技術確立

・3D 積層造形材用の適切な材料物性評価技術の確立

最終目標(2022 年度末時点)

【研究開発全体の達成目標・TRL】

・3D 積層造形された燃焼バーナーが実圧環境での燃焼試験において 4 時間以上の連続燃焼を完遂

・TRL5 への到達

【項目ごとの達成目標】

(イ) MI を活用した新規 Ni 基合金の製造実証

・新規 Ni 基合金での実験データの蓄積(フィジカル空間)

・新規 Ni 基合金での順問題解析シミュレーションデータと上記実験データの整合性確認(サイバー空間
フィジカル空間の連携)

・3D 積層造形材として、必要な力学特性を有する新規 Ni 基合金の製造実証

(ロ) 燃焼バーナー高耐久化の実証

・新規 Ni 基合金により 3D 積層造形された燃焼バーナーの製造技術確立

・3D 積層造形用の材料評価技術による新規 Ni 基合金の高耐久性の確認

(C-2) 高性能化のための Ni 粉末鍛造プロセスの開発

チームリーダー： 今野 晋也（三菱日立パワーシステムズ株式会社）

長田 俊郎（国立研究開発法人物質・材料研究機構）

参画機関： 三菱日立パワーシステムズ株式会社、国立研究開発法人物質・材料研究機構、株式会社本田技術研究所、三菱重工航空エンジン株式会社、国立大学法人北海道大学、国立大学法人東北大学

民間用航空機エンジンのディスク材には、高温強度と製造性および信頼性に優れた IN718 や Waspaloy などの高強度ニッケル基合金鍛造材が用いられてきたが、燃焼温度の向上に対応するため特に使用環境が厳しい高圧タービンのディスク材には粉末を原料としたニッケル基合金ディスク材（以下 PM ディスク材と称す）が適用されており、今後も適用拡大が進むと予想される。PM ディスク材は、高真空中および不活性ガス中で製造される高品質な粉末を圧力下での焼結や高温での超塑性加工によってディスク形状に加工するものであり、ニッケル基合金粉末を用いた焼結部材がその他の部品や金型にも使われている。また、近年は、高温強度に優れた PM ディスク材は高性能な航空機エンジンでは不可欠なものとなりつつあるが、特殊かつ高度な技術を必要とするため、コストが高く欧米の限られたメーカ以外での製造は困難である。本研究では、国内に潜在する粉末製造技術と高強度ニッケル基合金の鍛造技術を融合し高度化することで欧米プロセスを凌駕する低コストな純国産プロセスを開発し実機適用を目指す。

本研究では、PM ディスク材の主要プロセスである粉末製造、ビレットングおよびニアネット鍛造プロセスについて、国内の既存設備を用いた低コストプロセスを MI を活用して開発する。プロセスの低コスト化に加えて粉末製造プロセスでの副生粉末を金型、航空機エンジンや産業用ガスタービンの静止部材等に適用することによる低コスト化も検討する。これにより、製造コストを 2/3 以下としながら、従来プロセス材と同等以上の性能を確保することを目標とする。

前期3年間(2018～2020)は以下の ～ を実施することで模擬部材による技術の確立と実証を完了させる。対象材料は、最新の中型民間エンジンに適用されている材料および国産材料とする。その他、比較材として必要に応じて軍用エンジン用 PM ディスク材や PM ディスク材と同等レベルの溶解鍛造材の試作評価も実施する。後期の2年間で下記の ～ を実施し実機形状部品の製造および評価を進め、実用化を目指す。

【実施項目】

粉末製造・分級技術確立	キャニング & HIP 技術確立	ビレット鍛造技術の確立
ニアネット鍛造成形技術の確立	評価手法の調査・検討	金型材の開発・補修技術確立
実機模擬材試作・評価	中小型民間機高圧ディスク等試作	認証取得データ採取開始、MI 高度化
小型機高圧ディスク等試作	認証取得データ採取開始、MI 高度化	次世代民間機等適用検討

本研究では、当該プロセスの基礎技術を有する民間企業がフィジカル面を、MI 技術の研究で実績のある大学あるいは国研がサイバー面を取り纏める。フィジカル面に複数の航空機エンジンメーカが参画し、開発目標の設定および開発技術の評価を行う。

多岐にわたる製造工程を対象としているが、粉末プロセスの重要課題である旧粒子界面組織の効率的な

除去のための MI 技術を新規開発の対象とする。ここでは、ブレッティングにおける高温変形中の組織変化の予測技術が鍵となり、初期は、従来同様、実験をベースにしたブレッティング条件の探索を行いつつ、ここで得られるデータを基に、MI 技術を確立していく。後半では、確立した MI 技術を活用し、MI 基盤で開発した逆問題解析技術を導入することで、ブレッティング条件のさらなる最適化を行い、逆問題に対応したブレッティングプロセス MI 技術を確立し、SIP 後の開発に活用できるようにする。加えて、他の工程についても、MI 基盤で開発される共通的な MI 技術の適用を積極的に行い、効率的な開発プロセスの確立を目指す。具体的には、粉末焼結プロセス、ニアネット鍛造において、MI 基盤の開発成果を活用し、複数の開発工程をつなげるためのワークフロー技術を開発する。その上で、MI を活用した開発時間の効率化を検討する。

中間目標(2020 年度末時点の達成目標)

国産 PM 鍛造ディスク材及び海外産 PM 鍛造ディスク材について中型民間機エンジン模擬部品の試作を完了する。上記国産 PM 鍛造ディスク材による模擬部品の破壊調査において航空機エンジンメーカーが決定する力学特性目標以上の特性を獲得する。

- ・力学特性目標は欧米プロセス材の 95%とする。
- ・TRL4(素材として)を目標とする。
- ・PM 鍛造ディスクの製造プロセスに係わるデータを随時 MI 側に提供するとともに、MI 側の途中成果を製造プロセスに反映して最適化に活用する。

最終目標(2022 年度末時点)

小型機エンジン部品について国産 PM ディスク材を用いた試作を完了する。上記国産 PM ディスク材による試作材の破壊調査において航空機エンジンメーカーが設定する力学特性目標およびコスト目標を達成し、国産プロセスによる国産材の次世代航空機エンジンへの適用検討を開始する。また、国産開発プロセスにより海外産中型民間機高圧タービンディスク模擬品の試作を完了する。

- ・国産 PM ディスク材の力学特性目標は欧米プロセス材の 95%以上、コスト目標は欧米プロセスの 66%以下とする。
- ・TRL5(素材として)を目標とする。
- ・破壊調査に関するデータを MI 基盤側と共有し、MI 基盤で開発した予測ツールによる予測との整合性を検討する。予測ツールの高精度化に当該データを活用する。

(C-3) Ti 合金の粉末・3D 積層造形プロセスの開発

チームリーダー： 高橋 聡 (株式会社 IHI)

野村 直之 (国立大学法人東北大学)

参画機関： 株式会社 IHI、国立大学法人東北大学、株式会社大阪チタニウムテクノロジーズ、日本積層造形株式会社

金属粉末メーカー、造形メーカー、重工メーカー及び大学が粉末素材製造、積層造形、部材性能評価まで連携し研究開発を行い、国内での一貫生産が可能で世界的に競争力を持ったチタン合金部材積層造形部品の製造体制を築き、航空機部材や医療用材料等の用途も見据えたサプライチェーンの構築につなげることを目標に、以下の内容について、MI を活用した研究開発を実施する。

経済型 Ti 粉末製造技術の開発

素材製造プロセスの低コスト化のため、チタン合金粉末製造プロセスについて、最大の高コスト要因となっている原料コストの低減を目指す。本研究では原料製造の段階に新規のプロセスの導入や最適化を検討し、チタン合金粉末製造プロセスの構築を行う。

積層造形プロセス開発

新規の粉末は現状の高コストな粉末に比べ粉末特性が異なる可能性がある。そのため積層造形プロセスにおいて、その特性に応じた造形プロセス構築の為の研究を実施し、新規粉末へのフィードバックを図りながら、競争力のあるチタン合金積層造形プロセスの構築を行う。

積層造形に用いる粉末の評価方法・指針構築

新規に開発する粉末は、現行の高コストな粉末と粉末特性が異なるため、粉末床積層造形プロセスにおけるリコーティング挙動および粉末床状態が変化し、造形体特性に影響を及ぼす。本研究では、リコーティング挙動を実験およびシミュレーションから検討することにより粉末床状態におよぼす影響因子を抽出し、新規粉末に必要な特性を把握し効率的な開発に繋げる。

造形部材特性評価 / 適用検証

AM 部品は表面粗度、材料特性、製品形状などが現状の製造方法(鋳造、鍛造)から大きく異なってくる。そのため実機に適用するためには異なる特性について把握をし、設計に反映する必要がある。本研究では AM 部材の機械的特性の評価を行い、簡易的なデータベースを取得する。また、組織観察等も実施し、Ti 粉性状、造形条件、金属組織の関連性の評価を実施する。

の項目については新規粉末設計 MI 技術と連携を図ることにより、低コスト化粉末の特性評価を加速し、3D 積層造形プロセスへの反映を図っていく。

本研究では、積層造形(AM : Additive Manufacturing)プロセスにおける国内サプライチェーンである各機関と協同で粉末製造、粉末特性評価、積層造形性評価、造形部材特性評価を行い、上流から下流まで一

貫した AM プロセスの競争力向上を狙う。特に、造形プロセスにおけるリコーティングシミュレーション技術 (MI 技術) の確立は、積層造形に用いる Ti 合金粉末の評価手法・指針の構築に繋がり、粉末～造形プロセスを通した画一的な評価が可能となる。

中間目標 (2020 年度末時点の達成目標)

- ・経済型 Ti 合金粉末製造プロセスの概念構築し、設備設置、当該設備での粉末試作開始および提供 (TRL2)
- ・IHI 提案の模擬形状部品を従来手法 Ti 合金粉末にて造形できる造形条件を開発し、実部材の造形まで完了させる。(TRL2)
- ・現行および経済型粉末の粉体特性評価
- ・経済型粉末に必要な粉末特性の把握
従来手法 Ti 合金粉末における造形部材の特性データ取得とその評価・整理を行う。

最終目標 (2022 年度末時点)

- ・経済型 Ti 合金粉末製造プロセスを実証する。原材料費の 20% のコスト削減を目標とする。(TRL2)
- ・経済型 Ti 合金粉末における材料レシピおよび造形レシピを開発し、実部材の製造を行う。(TRL3)
- ・経済型粉末の設計指針を構築する。(TRL3)
- ・従来手法 Ti 合金粉末および経済型 Ti 合金粉末によって造形された部材の特性を評価し、それをもとにデータベースを構築する。(TRL2)

(C-4) 高性能 TiAl 基合金動翼の粉末造形プロセス基盤技術構築と開発

チームリーダー： 竹山 雅夫 (国立大学法人東京工業大学)

福島 明 (三菱重工航空エンジン株式会社)

参画機関： 国立大学法人東京工業大学、三菱重工航空エンジン株式会社、株式会社神戸製鋼所、大阪冶金興業株式会社、国立大学法人大阪大学

比強度と耐熱性に優れた金属間化合物チタンアルミ合金は航空エンジンの低圧タービンブレード材料として期待されており、B787 用エンジンの GEnx、A320neo 用エンジン PW1100G で実用化段階にある。それらの製造は、鋳造材もしくは鍛造材の削り出しであり、歩留まりの低さと削り出し工程の存在がブレード部品高コストの要因の一つと言われ、問題視されている。

一方、金属射出成形(MIM: Metal Injection Molding)は小型金属部品の量産において、低コスト製造方法として注目を集めている。MIM の特徴は、ネットシェイプによる部品製造であり、これをブレード部品の製造に応用すれば翼面削り出し工程を省いた低コスト製造の可能性がある。

そこで、MIM 技術を活用しての低コストチタンアルミ合金ブレード製造が考えられた。しかしながら、チタンアルミ合金は本質的に脆性材料であり、低い破壊靱性値の克服が課題の一つである。さらに、MIM プロセスを経ることにより、材料中の酸素等成分の増加により、さらに破壊靱性値が低下することが危惧される。これらの課題・危惧に対して、酸素等の成分が存在しても破壊靱性値を高く保つことが出来る材料組成・相構成、組織形態の決定、高品位/低コストの MIM 用チタンアルミ合金鋳塊製造、MIM プロセス中の酸素等混入を低減する製造パラメータの設定が必要となる。

本研究開発は、これらの課題解決のために、従来の実験手法中心の材料開発とは異なり、MI 技術を活用して、合金設計・性能予測シミュレーション、プロセスパラメータの最適化を目指すものである。

実際の低圧タービンブレードは、長手方向に 200mm 以上あり、従来の MIM 技術では製造が困難とされている大型部材である。ここで課題となるのは、MIM 大型構造物の変形制御である、この課題解決のために、MI 技術を活用した射出・焼結のシミュレーション技術を活用したプロセスの設定を行う。

チタンアルミ合金の材料開発としては、エンジンの性能向上/耐熱性向上に応じた、より耐熱性に優れた材料組成の探求が志向されている。粉末由来の MIM では鍛造・鋳造と比べ組成制約が無く、自由な組成設計が可能である。その利点を生かし、MI 技術を活用して高温特性の優れた MIM 用チタンアルミ合金の設計を行う。

【MI 技術の活用】

本研究開発の課題は以下の4点である。これらの解決に MI を活用する。

靱性向上のための MIM 用材料組成・相構成・組織形態の決定

高品位/低コストの MIM 用チタンアルミ合金鋳塊製造技術の開発

靱性向上のための MIM プロセス最適化

MIM 大型構造物の変形制御

高温特性向上のための MIM 用材料組成・相構成・組織形態の決定

、 の課題解決には、合金設計及び性能予測技術を活用、 、 のプロセス最適化には AI 等を活用

したデータ科学の活用、 の変形制御には各種シミュレーション技術を活用する。このうち、チタンアルミ合金固有の技術として、合金設計・性能予測について、当該分野において世界的な強みを有する大学のノウハウをさらに高度化し、これを活用することで開発を加速する。

加えて、MIM プロセスについて、MI 基盤で共通技術として開発されるデータ科学に基づく逆問題解析技術を活用して、プロセス最適化を試みるとともに、当該技術を MIM メーカー自身が使いこなすことができるように技術移転を進める。さらに、MIM 変形制御については、MI 基盤で開発する粉末焼結プロセス MI 技術を活用して、変形制御のための焼結プロセス最適化技術を確立し、実部材開発に応用する。

中間目標(2020 年度末時点の達成目標)

MIM: ブレードへの適用に十分な破壊靱性および引張強さを達成する粉末プロセス用合金の MI 基盤 (prototype) を用いた設計と検証 (TRL3)

3D 積層造形 (電子線ビーム式) : 造形条件・組織・力学特性をつなぐプロセスマップの MI 基盤を活用した構築 (TRL3)

最終目標(2022 年度末時点)

MIM: ニアネット成形を可能にする翼型輪郭度を満たす大型翼製造プロセスの MI 基盤に基づく設計と試作翼を用いた実翼強度成立性の確認 (TRL4 ~ 5)

3D 積層造形 (電子線ビーム式) : MI 基盤を活用した 3D 積層造形プロセス最適化とタービン翼の試作 (TRL4)

(C-5) セラミックス基複合材料の航空機エンジン部材化技術の開発

チームリーダー： 香川 豊 (学校法人片柳学園東京工科大学)

七丈 直弘 (学校法人片柳学園東京工科大学)

関川 貴洋 (三菱重工航空エンジン株式会社)

参画機関： 学校法人片柳学園東京工科大学、三菱重工航空エンジン株式会社、株式会社IHI、川崎重工業株式会社、国立大学法人東京大学、国立研究開発法人宇宙航空研究開発機構

セラミックス基複合材料(CMC: Ceramic Matrix Composites)は軽量・耐熱性に優れている。そのため、航空機用エンジン部材として、近い将来に現行高温構造材料(超合金)に替わって利用されることが期待されている。CMCの中でも連続 SiC 繊維を SiC マトリックスと複合化した複合材料(以後、SiC/SiC と記述する)は特に優れた特性を持つことから、研究開発が世界的に活発化している。

航空機用エンジン部材としての CMC の実用化時に最も重要な課題として「高温・長時間使用時の性能と安全性の保証」がある。近年、材料開発ではシミュレーション技術が多く活用されており、CMC の航空機用エンジン部材開発においても活用が期待される。だが、CMC はモノリシックセラミックスや金属材料と比較して極めて複雑な複合化組織であり、その変形や破壊現象は数え切れないほどの多くの因子に支配されていることから、現状のシミュレーション技術は不十分である。だが、MI によりサイバー空間上で材料試験が可能となり、その逆問題として部材設計が可能となれば、大幅に国際競争力が強化されと考えられる。

そこで、本研究では、MI を CMC の部材開発に利用するための基礎・基盤となるモジュールを開発し、その組み合わせによってサイバー空間上で CMC の使用環境における振る舞いを予測する「バーチャルテスト」を構築し、航空機用エンジン部材としての CMC 開発を牽引する。最終的にはバーチャルテストの最適部材設計への適用、CMC の検査手法の開発を目指す。

具体的な研究開発項目としては以下の 4 つを対象とする。

基盤技術・統合プラットフォーム

CMC の部材開発での具体的な課題を解くために必要な要素技術の研究開発を行う。具体的には、機械学習による CMC 組織の構造可視化および認識技術、CMC の特性予測技術、CMC 用高温試験技術、信頼性保証技術が含まれる。

CMC の性能保証のための部材プロセス条件

CMC を作製するための製造プロセス条件設定に役立つシミュレーションシステムを開発する。

CMC の性能保証のための危険欠陥分布の評価

CMC の製造時欠陥分布の認識と評価を行うための手法を開発する。

CMC の性能保証のための劣化予測と危険性評価

CMC の使用環境模擬条件での性能劣化予測モデルを構築し、部材使用時の危険性の評価手法を開発する。

中間目標(2020 年度末時点の達成目標)

基盤技術・統合プラットフォーム

CMC 組織の構造可視化および認識技術、CMC の特性取得技術、CMC 用高温試験技術、CMC 用加速試験技術、研究項目 ~ の研究開発に供する。

CMC 部材の性能を保証する部材プロセス条件

反応溶融合侵(RMI : Reactive Melt Infiltration)法による CMC マトリックス製造の基礎過程の理解に基づき、RMI 法による CMC マトリックス製造プロセスのマルチフィジックスシミュレーションを実現する。

CMC 性能を保証するための危険欠陥分布の抽出

機械学習に基づき、X 線 CT によって取得した CMC 材料の組織データから CMC 材料の組織構造の自動認識を実現する。

CMC 部材の性能劣化の予測と危険性判定

CMC 材料の高温での力学特性劣化予測モデルを構築し、同条件での材料試験を実施することでその評価を行う。

最終目標(2022 年度末時点)

基盤技術・統合プラットフォーム

研究項目 ~ の成果を統合し、CMC 部材設計の安全性確保を実現する。

CMC 部材の性能を保証する部材プロセス条件

部材としての利用を想定した形状を有するプリフォーム体に対し、RMI 法による CMC マトリックス製造プロセスのシミュレーションを行うことを可能とする。

CMC 性能を保証するための危険欠陥分布の抽出

製造時および力学負荷付与後に X 線 CT によって CMC 組織データを取得し、機械学習によって認識した構造の変化に基づき、欠陥拡大に影響する欠陥分布の自動認識を実現する。

CMC 部材の性能劣化の予測と危険性判定

CMC 材料の高温力学負荷下での寿命予測モデルを構築し、実際に利用される形状を伴った材料に対して適用可能とする。

3. 実施体制

(1) PD・サブPD・管理法人

三島 良直 PD は、研究開発計画の策定及び推進を担い、毛利 哲夫サブ PD は PD を補佐する。PD が議長、内閣府が事務局を務め、関係省庁や専門家で構成する推進委員会が総合調整を行う。本課題は、国立研究開発法人科学技術振興機構(以下、「JST」という)への交付金を活用して実施する。JST は管理法人として、PD、サブPD、推進委員会を補佐し、研究開発計画に沿って、研究責任者の公募、契約の締結、資金の管理、研究開発の進捗管理、専門的観点からの技術評価(Peer Review)を用いた自己点検の実施、PD 等への自己点検結果の報告、関連する調査・分析などを行う。

(2) 研究責任者の選定

JST は、本計画に基づき、研究課題、および研究課題を実施する研究責任者を公募により選定する。ただし、合理的な理由がある場合、その旨を研究開発計画に明記し、公募等によらないことも可能とする。

選考に当たっての審査基準や審査員等の審査の進め方は、JST が PD 及び内閣府及び推進委員会と相談したうえで、決定する。審査には原則として PD 及び内閣府の担当官、外部有識者が参加する。応募課題に参加する研究者の利害関係者は当該課題の審査には参加しない。利害関係者の定義は JST が定める公募要領に明記するものとする。選考により研究課題が決まった後、本計画に研究課題、および研究主体、研究参加者を記載する。

(3) 研究体制を最適化する工夫

本課題「統合型材料開発システムによるマテリアル革命」の各チームには航空機産業の Tier1 や Tier2 に該当する企業や OEM (Original Equipment Manufacturer)に直接素材を供給する企業が参加しており、各チームは航空機材料を出口とした垂直統合体制になっている。航空機部材の最先端材料のデータが蓄積し、逆問題 MI デザインによって要求性能に対する材料やプロセスが社会実装に向かうことにより MI の企業による利活用(MI の社会実装)が加速するように、逆問題 MI システムを A 領域で開発しながら、B 領域及び C 領域で先端構造材料・プロセスに対して適用するという体制になっており、逆問題 MI を頂点とした垂直統合体制にもなっている。

(注意)

Tier1……完成した航空機またはエンジンを製造するメーカーに直接部品を供給するメーカーを指す。

Tier2……Tier1 に部品を供給するメーカーを指す。

内閣府は、研究課題の進捗状況、および関係機関等で実施する技術調査等の調査結果や、社会情勢の変化に応じ、PD の判断で柔軟に研究体制を変化、対応させていく。具体的には、研究課題の変更、追加、研究責任者の入れ替え、追加等を検討していく。人事交流、設備共有の活発化、人材育成、持続的研究の推進を図るために、大学、国立研究開発法人、企業等が連携するための研究開発拠点を構築する。

サブ PD は、出口・知財戦略、材料科学、府省・産学官連携について PD を補佐するとともに、担当研究開発項目領域における研究開発の推進につき PD を補佐する。

各研究開発領域に産学双方からコリーダーを設置し、産学の緊密な協力のもと領域内外の連携を図り、シンポジウム開催等を通じて、領域の活動を発信する。JST は、領域長の活動を支援するとともに、参画機

関のネットワーク構築を図る。

(4) 府省連携

逆問題 MI を支えるデータ基盤の整備、多岐にわたる材料への展開のために、府省連携が必須である。SIP が先導しつつ、推進委員会、プロジェクト推進会議等を通して、文部科学省が材料データ基盤を、経済産業省が出口領域の拡大をそれぞれ担当することで、全体として Society 5.0 を支える統合型材料開発システムが実現するように推進する。

(5) 産業界からのコミットメント

本プロジェクトでは、産業界からの貢献(人的、物的貢献を含む。)を期待する。とくに、(B) 逆問題 MI の実構造材料への適用に係る材料開発においては、初年度から3年度目については研究開発費の総額(国と産業界からの貢献との合計)の 20%、4年度目及び最終年度については総額の 30%程度の貢献を期待する。また内閣府の SIP マッチングファンド方式に従い、マッチングファンドの見直しを行う。

4. 知財に関する事項

(1) 知財委員会と知財部会

- 管理法人に知財委員会を設置し、課題または課題を構成する共同研究項目ごとに、知財部会を研究責任者の所属機関(委託先)等に置く。
- 知財部会は、それを設置した機関が担った研究開発成果に関する論文発表及び特許等(以下「知財権」という。)の出願・維持等の方針決定等のほか、必要に応じ知財権の実施許諾に関する調整等を行う。知財部会は当該論文発表及び知財権に関する報告書を知財委員会に提出する。
- 知財委員会は、原則として PD または PD の代理人、主要な関係者、専門家等から構成する。知財部会は当該研究課題の参画機関から構成する。
- 知財委員会及び知財部会の詳細な運営方法等は、管理法人または知財部会を設置する機関において定める。

(2) 知財権に関する取り決め

- 管理法人等は、秘密保持、バックグラウンド知財権(研究責任者やその所属機関等が、プログラム参加前から保有していた知財権及びプログラム参加後に SIP の事業費によらず取得した知財権)、フォアグラウンド知財権(プログラムの中で SIP の事業費により発生した知財権)の扱い等について、予め委託先との契約等により定めておく。

(3) バックグラウンド知財権の実施許諾

- 他のプログラム参加者へのバックグラウンド知財権の実施許諾は、知財権者が定める条件に従い(あるいは、「プログラム参加者間の合意に従い」)、知財権者が許諾可能とする。
- 当該条件などの知財権者の対応が、SIP の推進(研究開発のみならず、成果の実用化・事業化を含む)に支障を及ぼすおそれがある場合、知財委員会において調整し、合理的な解決策を得る。

(4) フォアグラウンド知財権の取扱い

- フォアグラウンド知財権は、原則として産業技術力強化法第 17 条第 1 項を適用し、発明者である研究責任者の所属機関(委託先)に帰属させる。
- 再委託先等が発明し、再委託先等に知財権を帰属させる時は、知財委員会による承諾を必要とする。その際、知財委員会は条件を付することができる。
- 知財権者に事業化の意志が乏しい場合、知財委員会は、積極的に事業化を目指す者による知財権の保有、積極的に事業化を目指す者への実施権の設定を推奨する。
- 参加期間中に脱退する者に対しては、当該参加期間中に SIP の事業費により得た成果(複数年度参加の場合は、参加当初からの全ての成果)の全部または一部に関して、脱退時に管理法人等が無償譲渡させること及び実施権を設定できることとする。
- 知財権の出願・維持等にかかる費用は、原則として知財権者による負担とする。共同出願の場合は、持ち分比率、費用負担は、共同出願者による協議によって定める。

(5) フォアグラウンド知財権の実施許諾

- 他のプログラム参加者へのフォアグラウンド知財権の実施許諾は、知財権者が定める条件に従い(あるいは、「プログラム参加者間の合意に従い」、知財権者が許諾可能とする。
- 第三者へのフォアグラウンド知財権の実施許諾は、プログラム参加者よりも有利な条件にはしない範囲で知財権者が定める条件に従い、知財権者が許諾可能とする。
- 当該条件などの知財権者の対応が SIP の推進(研究開発のみならず、成果の実用化・事業化を含む)に支障を及ぼすおそれがある場合、知財委員会において調整し、合理的な解決策を得る。

(6) フォアグラウンド知財権の移転、専用実施権の設定・移転の承諾について

- 産業技術力強化法第 17 条第 1 項第 4 号に基づき、フォアグラウンド知財権の移転、専用実施権の設定・移転には、合併・分割による移転の場合や子会社・親会社への知財権の移転、専用実施権の設定・移転の場合等(以下、「合併等に伴う知財権の移転等の場合等」という。)を除き、管理法人等の承認を必要とする。
- 合併等に伴う知財権の移転等の場合等には、知財権者は管理法人等との契約に基づき、管理法人等の承認を必要とする。
- 合併等に伴う知財権の移転等の後であっても管理法人は当該知財権にかかる再実施権付実施権を保有可能とする。当該条件を受け入れられない場合、移転を認めない。

(7) 終了時の知財権取扱いについて

- 研究開発終了時に、保有希望者がいない知財権等については、知財委員会において対応(放棄、あるいは、管理法人等による承継)を協議する。

(8) 国外機関等(外国籍の企業、大学、研究者等)の参加について

- 当該国外機関等の参加が課題推進上必要な場合、参加を可能とする。
- 適切な執行管理の観点から、研究開発の受託等にかかる事務処理が可能な窓口または代理人が国

内に存在することを原則とする。

- 国外機関等については、知財権は管理法人等と国外機関等の共有とする。

5. 評価に関する事項

(1) 評価主体

PD と JST 等が国内外からのピアレビューも踏まえて行う自己点検結果の報告を参考に、ガバニングボードが外部の専門家等を招いて行う。この際、ガバニングボードは分野または課題ごとに開催することもできる。なお、外部からの評価等を受ける際は、情報流出等に細心の注意を払う。

(2) 実施時期

- 事前評価、毎年度末の評価、最終評価とする。
- 終了後、一定の時間(原則として3年)が経過した後、必要に応じて追跡評価を行う。
- 上記のほか、必要に応じて年度途中等に評価を行うことも可能とする。

(3) 評価項目・評価基準

「国の研究開発評価に関する大綱的指針(平成28年12月21日、内閣総理大臣決定)」を踏まえ、必要性、効率性、有効性等を評価する観点から、評価項目・評価基準は以下のとおりとする。評価は、達成・未達の判定のみに終わらず、その原因・要因等の分析や改善方策の提案等も行う。

意義の重要性、SIPの制度の目的との整合性。

目標(特にアウトカム目標)の妥当性、目標達成に向けた工程表の達成度合い。

適切なマネジメントがなされているか。特に府省連携の効果がどのように発揮されているか。

実用化・事業化への戦略性、達成度合い。

最終評価の際には、見込まれる効果あるいは波及効果。終了後のフォローアップの方法等が適切かつ明確に設定されているか。

別紙要件の達成状況

研究テーマ毎におけるTRL(Technology Readiness Levels)の達成状況

(4) 評価結果の反映方法

- 事前評価は、課題開始次年度以降の計画に関し行い、課題開始次年度以降の計画等に反映させる。
- 各年度の年度末評価では、必要に応じ課題や研究テーマの絞り込みや追加を行う。
- 年度末の評価は、当該年度までの実績と次年度以降の計画等に関し行い、次年度以降の計画等に反映させる。
- 最終評価は、最終年度までの実績に関し行い、終了後のフォローアップ等に反映させる。
- 追跡評価は、各課題の成果の実用化・事業化の進捗に関し行い、改善方策の提案等を行う。

(5) 結果の公開

- 評価結果は原則として公開する。
- 評価を行うガバニングボードは、非公開の研究開発情報等も扱うため、非公開とする。

(6) 自己点検

研究責任者による自己点検

PD が自己点検を行う研究責任者を選定する(原則として、各研究項目の主要な研究者・研究機関を選定)。選定された研究責任者による自己点検は、研究開発や実用化・事業化への取組の進捗状況について行う。

PD による自己点検

PD が研究責任者による自己点検の結果を見ながら、かつ、必要に応じて第三者の意見や国内外の専門家によるピアレビュー等を参考にしつつ、5.(3)の評価項目・評価基準を準用し、PD 自身、科学技術振興機構及び各研究責任者の実績及び今後の計画の双方に関して点検を行い、達成・未達の判定のみならず、その原因・要因等の分析や改善方策等を取りまとめる。その結果をもって各研究主体等の研究継続の是非等を決めるとともに、研究責任者等に対して必要な助言を与える。これにより、自律的にも改善可能な体制とする。外部からの評価等を受ける際は、情報流出等に細心の注意を払う。

これらの結果を基に、PD は科学技術振興機構の支援を得て、ガバニングボードに向けた資料を作成する。

管理法人による自己点検

科学技術振興機構による自己点検は、予算執行上の事務手続を適正に実施しているかどうか等について行う。

6. 出口戦略

本課題が目指す社会実装は次の2つに大別される。

- (1) MI システムを企業の研究開発に利用(A 領域)
- (2) MI システムで開発される材料を実用化・事業化(B・C 領域)

これらの実現のために、下記の戦略をもって研究開発を推進する。

(1) MI システムを企業の研究開発に利用

- 潜在ユーザーである参画企業自らが必要とする目標性能の数値を逆問題の起点として設定し、そのサイバーでの解決およびフィジカルでの実証を通して、MI システムの有効性を確認する。その際、得られた解を客観的に評価する指標を設定し、成否を明確化する。
- 中央の MI 拠点が運用するシステムと企業内のローカル環境にでの計算とを、インターネットを通してシームレスに接続できる分散型の計算制御技術を開発する。情報セキュリティの確保も最重要課題の一つである。この分散型計算制御により、機密データを用いた計算を企業内部で行うことができ、企業保有データの利活用が可能になる。その促進のために、標準となるデータ記述様式を設計し、(データ自体は無理でも)データ記述様式は広く共有化する。これにより、企業内で埋もれているデータの利活用の促進が期待される。
- 企業による MI 利用の促進のために、コンソーシアム、ベンチャー等の設立を検討・実践する(ベンチャ

ーに関しては、海外機関が顧客になる可能性があるため、我が国の産業競争力強化との整合性に十分留意する)。MI 拠点はその運営の中核を担い、上記活動に加え、人材育成、広報・アウトリーチ活動等、MI の普及にも尽力する。

(2) MI システムで開発される材料を実用化・事業化

- MI の適用例として飛行機機体・エンジン、産業用発電プラント、等の最先端材料・プロセスを想定し、材料・重工メーカーと連携して成果を実用化・事業化する。
- 非公開ではあるが、表1に各参画企業が設定した最終目標値が示されており、これを達成できれば目標 TRL も達成できるはずであり、SIP 終了後の実用化・事業化に向けた開発・実証の段階にスムーズに移行できる。
- 航空機に関しては、参画する Tier1、Tier2 と OEM (Original Equipment Manufacturer) との密接な関係を活用し、標準化・企画化・評価手法やその認定手法の策定、認証取得等を推進する。一方、産業用発電プラントに関しては、参画企業自らが OEM であり、自社規格を満たせば実機適用が可能である。長期的には民間航空機のグローバル市場での事業化を目指しつつ、より早期の社会実装として、自社製品への適用を推進する。

7. その他の重要事項

(1) 根拠法令等

本件は、内閣府設置法(平成 11 年法律第 89 号)第 4 条第 3 項第 7 号の 3、科学技術イノベーション創造推進費に関する基本方針(平成 26 年 5 月 23 日、総合科学技術・イノベーション会議)、科学技術イノベーション創造推進費に関する実施方針(平成 26 年 5 月 23 日、総合科学技術・イノベーション会議)、戦略的イノベーション創造プログラム運用指針(平成 26 年 5 月 23 日、総合科学技術・イノベーション会議ガバニングボード)に基づき実施する。

(2) 弾力的な計画変更

本計画は、成果を最速かつ最大化させる観点から、臨機応変に見直すこととする。これまでの変更の履歴(変更日時と主な変更内容)は以下のとおり。

2018 年 12 月 13 日 総合科学技術・イノベーション会議ガバニングボードにおいて研究開発計画を承認。
内閣府政策統括官(科学技術・イノベーション担当)において決定。

(3) PD、サブPD 及び担当の履歴

PD



岸 輝雄
(2018 年 4 月～2019 年 3 月)



三島 良直
(2019 年 5 月～)

サブPD



三島 良直
(2018 年 4 月～2019 年 5 月)



毛利 哲夫
(2019 年 5 月～)

担当参事官(企画官)



千嶋 博
(2018 年 4 月～9 月)



登内 敏夫
(2018 年 10 月～)

担当

2018 年 3 月～2018 年 6 月 細田奈麻絵

2018 年 7 月～2019 年 6 月 柳田真利

2019 年 7 月～ 佐原亮二

別紙

平成 29 年度補正予算により開始した課題の要件

Society5.0 の実現を目指すもの。

生産性革命が必要な分野に重点を置いていること。

単なる研究開発だけではなく社会変革をもたらすものであること。

社会的課題の解決や日本経済・産業競争力にとって重要な分野

事業化、実用化、社会実装に向けた出口戦略が明確（5年後の事業化等の内容が明確）

知財戦略、国際標準化、規制改革等の制度面の出口戦略を有していること。

府省連携が不可欠な分野横断的な取り組みであること。

基礎研究から事業化・実用化までを見据えた一貫通貫の研究開発

「協調領域」を設定し「競争領域」と峻別して推進（オープン・クローズ戦略を有していること。）

産学官連携体制の構築、研究開発の成果を参加企業が実用化・事業化につなげる仕組みや
マッチングファンドの要素をビルトイン

添付資料 資金計画及び積算

(単位:千円)

2018 年度 合計 2,500,000

(内訳)

1. 研究費等 (一般管理費・間接経費を含む) 2,400,000

(研究開発項目毎内訳)

(A) 逆問題M I 基盤技術開発領域 (関係省庁 = 文部科学省、経済産業省)

(B) 逆問題M I の実構造材料への適用 (関係省庁 = 文部科学省、経済産業省)

2. 事業推進費 (人件費、評価費、会議費等) 100,000

計 2,500,000

2019 年度 合計 2,080,000

(内訳)

1. 研究費等 (一般管理費・間接経費を含む) 1,953,000

(研究開発項目毎内訳)

(A) 逆問題M I 基盤技術開発領域 (関係省庁 = 文部科学省、経済産業省)

(B) 逆問題M I の実構造材料への適用 (CFRP) (関係省庁 = 文部科学省、経済産業省)

(C) 逆問題M I の実構造材料への適用 (粉末 3 D 積層) (関係省庁 = 文部科学省、経済産業省)

2. 事業推進費 (人件費、評価費、会議費等) 127,000

計 2,080,000