



統合型材料開発システム によるマテリアル革命

マテリアルズインテグレーション(MI)によって構造材料開発におけるコストと時間を大幅に低減

人工知能(AI)を駆使した材料開発に欧米、中国など諸外国が集中投資し、ものづくりが大変革期を迎えている。日本の材料開発分野での強みを維持・発展させるためには、材料開発コストの大幅低減、開発期間の大幅短縮を目指す必要がある。日本の材料分野における質の高いデータを利用し、世界にさきがけて取り組んできたマテリアルズインテグレーション(MI)を発展させ、世界最先端の逆問題マテリアルズインテグレーション(希望性能から最適材料・プロセス・構造を予測)を実現し、社会実装することによって、超高性能材料の開発につなげるとともに信頼性評価技術を確立する。



プログラムディレクター

三島 良直

国立研究開発法人
日本医療研究開発機構 理事長
東京工業大学 名誉教授・前学長

Profile

1975年東京工業大学大学院理工学研究科修士課程修了、1979年米国U.C. Berkeley 博士課程修了(Ph. D)、同校 Assistant Research Engineerを経て、1981年東京工業大学精密工学研究所助手、助教授、1997年同大学大学院総合理工学研究科教授。同総合理工学研究科長、同フロンティア研究機構長、同大学理事・副学長を経て、2012年同大学学長。2019年より内閣府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」PD、2020年4月より国立研究開発法人日本医療研究開発機構理事長。文部科学省科学技術学術審議会委員、経済産業省産業構造審議会委員等多数の政府委員会要職を歴任。

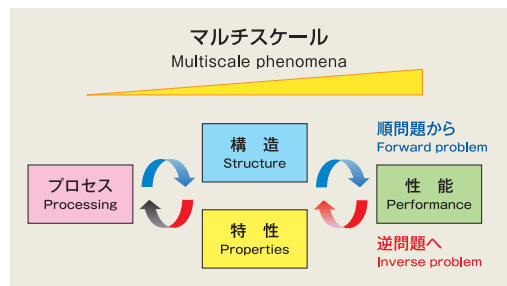
研究開発テーマ

開発する逆問題MI基盤技術を、素材製造から構造体まで作り込む一連のプロセスに適用し、実用的な構造材料の開発において期間、コスト等が低減される事を実証し、逆問題MIを社会実装していくための先行事例を創出する。

(A) 逆問題 MI 基盤技術開発領域

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。順問題の解析技術にAI技術を組み合わせて効率的に情報探索を行うことで逆問題にアプローチする。逆問題解析技術の先行開発、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、原子から構造体をデザインする技術の開発、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、及び構造材料開発の基盤となるデータベースの開発を行い、これを合わせて、逆問題MI基盤の確立を目指す。

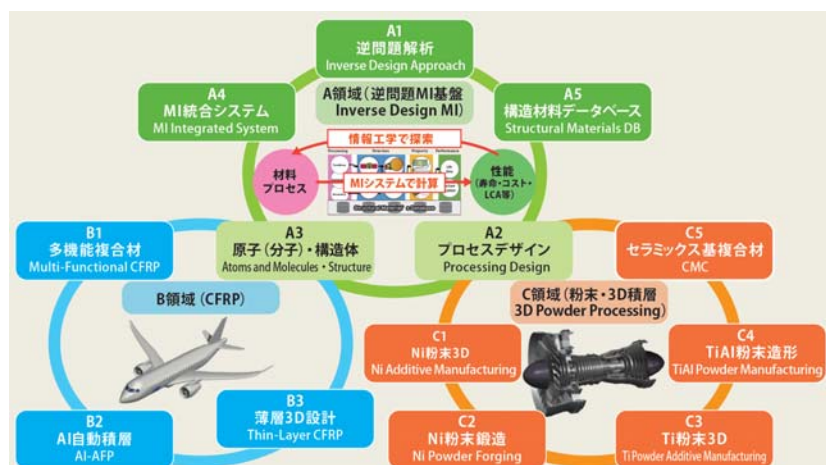
- ・計算機上でプロセス・構造・特性・パフォーマンスの連関をつける
In-Silico Linking among processing, structure, properties, and performance
- ・実験、データベース、理論、経験則、数値シミュレーションをデータ科学で融合
Data-scientific approach to integrate experimental data, database, theoretical & empirical rule, numerical simulation with data science



● マテリアルズインテグレーション

(B) 逆問題 MI の実構造材料への適用

我が国の強みを有し、国際的な要求が高まっている先端的な材料である鉄鋼材料、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、炭素繊維強化プラスチック(CFRP)、セラミックス、高分子材料、さらに、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、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造形技術など、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。逆問題MIが実用材料の開発に効果があることを実証するために、開発した材料・プロセスは、参画する材料メーカー・重工メーカー等により、発電プラント用材料や航空機用材料等として実用化へ展開していく。



● 研究開発全体像(領域・チーム構成構成)

実施体制

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う。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の運営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することにより、研究課題を実施する。また、研究チームには産学連携を推進するため企業・大学(国研)双方のコリダー制を敷く。国際競争力確保(特許戦略)のため知財委員会を設置。また海外情勢把握のため国際連携チームも設置する。同法人のマネジメントにより、各課題の進捗を管理する。

出口戦略

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。

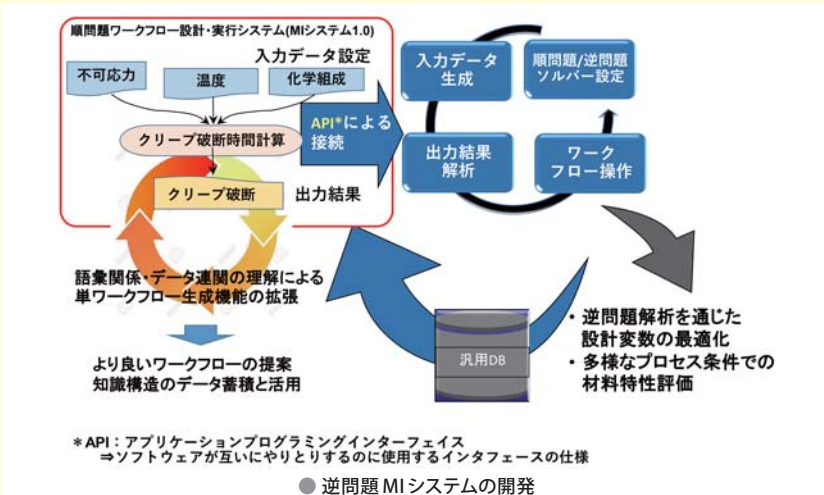
- 逆問題に対応する次世代MIシステムの実装・産業界による利用。
- MIの適用例として産業用発電プラントや航空機機体・エンジン等の最先端材料・プロセスを想定し、材料/重工メーカーと連携して成果を実装。



● MIの適応対象: 構造材料(活用事例と使用期間)

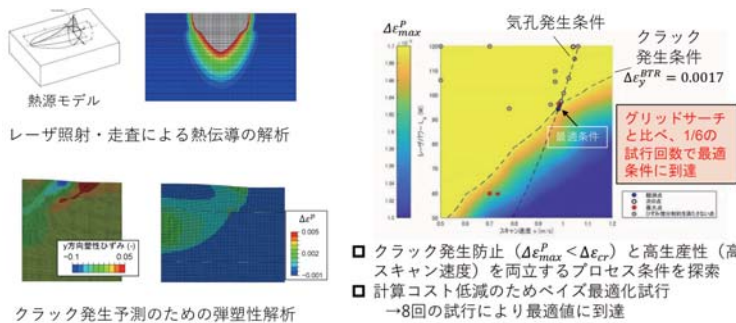
これまでの成果・期待される成果

(A) 逆問題MIでは、複数の計算プログラムとデータベースを組み合わせたワークフローにより、材料のプロセス→構造→特性→性能という順方向解析を、入力パラメータを変えて要求性能に到達するまで繰り返し、その時の入力、すなわち材料・プロセス条件が求める解となる。その際、できるだけ短い計算時間で要求性能に到達することが肝要であり、そのための入力パラメータの設定、ワークフロー最適化にAI手法を活用する。疲労、クリープ、脆性破壊などに関するSIP第1期「革新的構造材料」での開発成果も活用し、まず鉄鋼、アルミニウム合金について定量的な解析事例を生み出した。続いて、ニッケル合金、チタン合金などに展開していく。併せて、社会実装促進のための産学官コンソーシアム設立の準備を進めている。



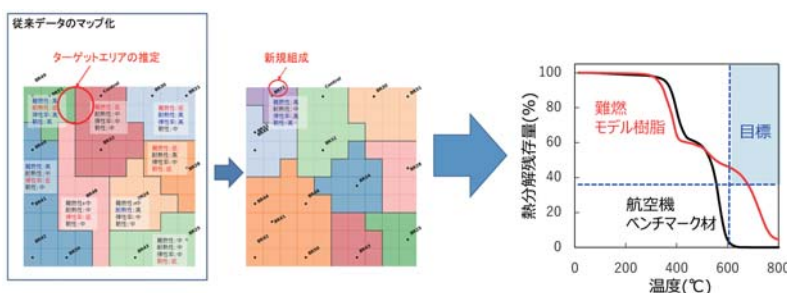
(B) 逆問題MIの先端材料・プロセスに適用した事例を2件紹介する。

1) ニッケル合金の積層造形
造形過程での合金粉末の溶解、凝固の繰り返しに起因するクラック発生を防止するための、プロセス条件、すなわち熱源(レーザ)の出力とスキャン速度を導出した。その際、ベイズ最適化の適用により、所要計算時間を大幅に減らした。



● ニッケル合金の積層造形: プロセス条件の最適化

2) 難燃性CFRP用樹脂の開発
航空機火災の観点からCFRPの難燃性を高めることが求められている。力学特性を損なうことなく樹脂の難燃性を高めるために、自己組織化マップを作成し、より高性能の樹脂組成を見出した。



● 難燃性CFRP用樹脂開発: 自己組織化マップによる組成探索