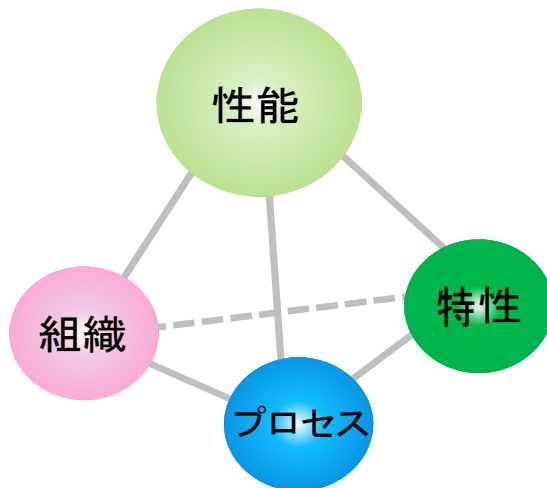


# SIP 革新的構造材料 マテリアルズ インテグレーション

サブPD: 東京大学 香川 豊

# SIPマテリアルズインテグレーション

製品開発に  
役立つ性能  
(パフォーマンス)を含む  
材料技術



マテリアルズ  
インテグレーション  
(MI)

「材料科学、計算科学、データ科学を融合し、(計算機上で)材料のプロセス、組織、特性、性能の連関を予測する統合型材料工学」

金属材料

MIシステム

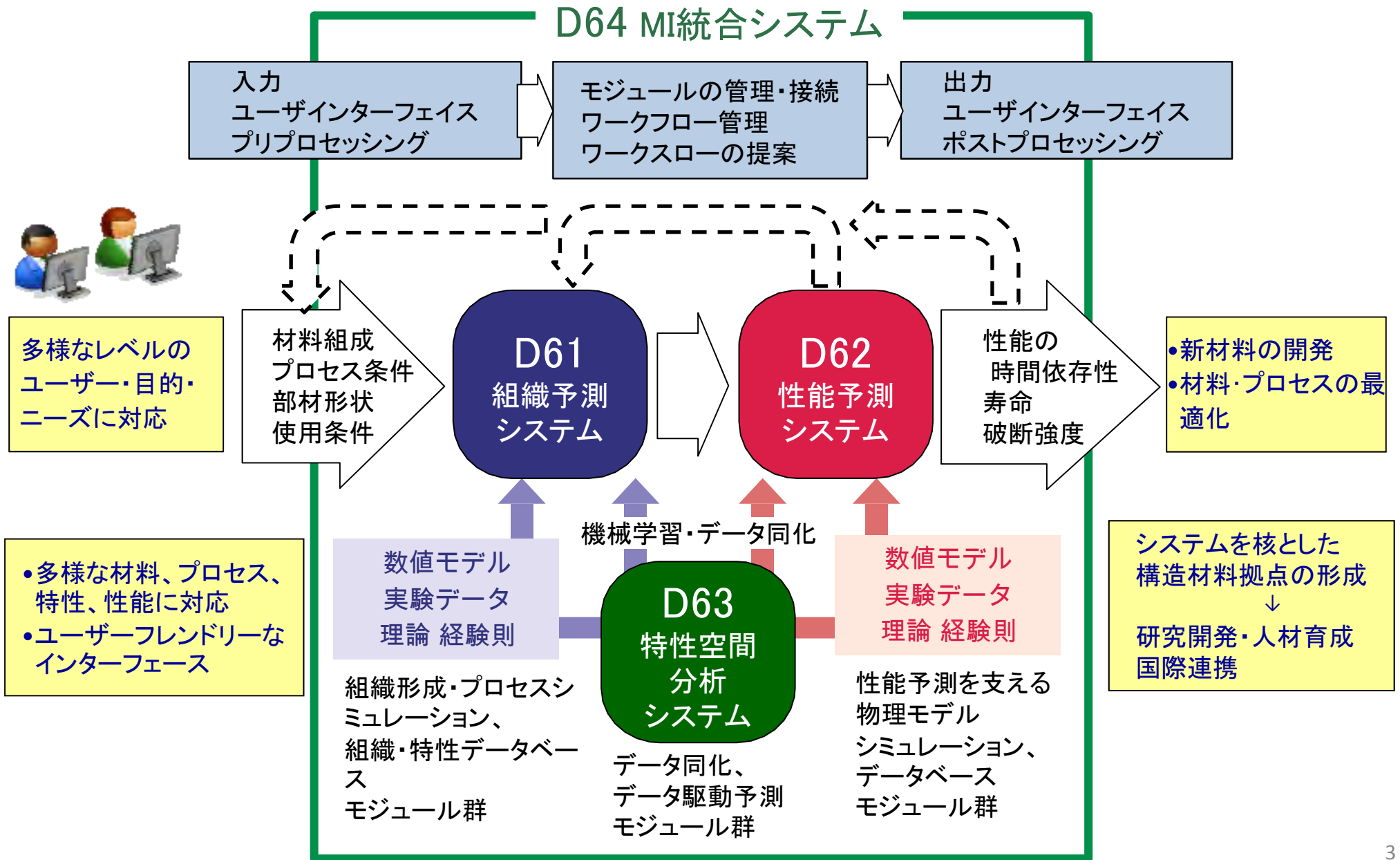
高分子材料

AIへの展開

セラミックス  
コーティング

国際共同

# 金属材料：マテリアルズインテグレーション



# プラットフォームの構築: (例題) 鋼溶接部 → 航空機用合金

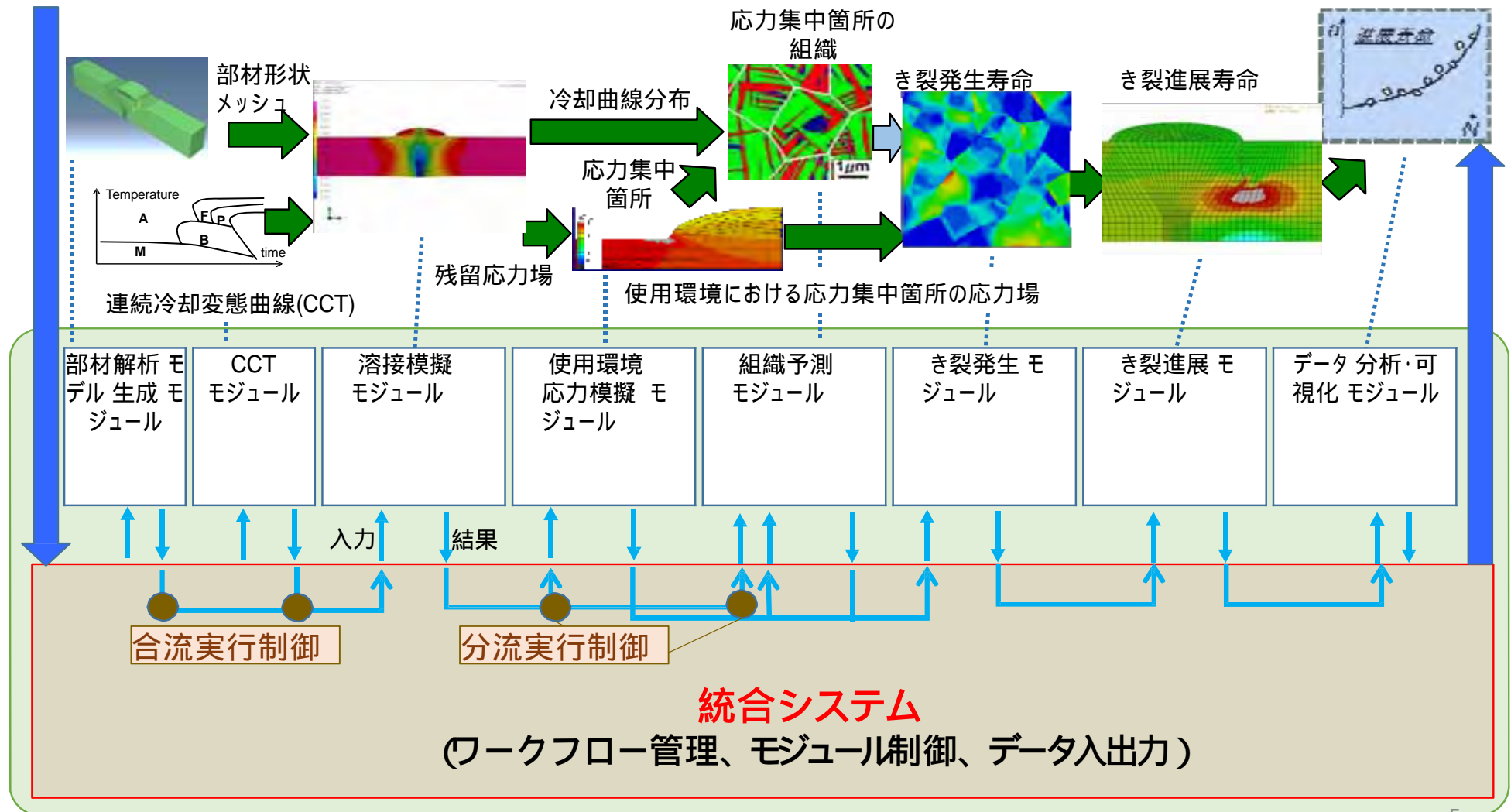
| 開発ユニット                   | 研究開発要素                    | 中間目標(2016年度)   | 最終目標(2018年度)   | 企業の役割  |
|--------------------------|---------------------------|--|--|--|
| D61<br>組織予測システム<br>の開発   | フェーズフィールド法による組織予測モジュールの開発 | <ul style="list-style-type: none"> <li>● 基本成分系の材料の組織予測プロトタイプ作成</li> <li>● 鋼溶接部組織データおよびCCTの蓄積、データによるCCT予測</li> </ul>                  | <ul style="list-style-type: none"> <li>● フェーズフィールド法を用いた実用鋼溶接部の組織予測システムの完成</li> <li>● 航空機用Ti、Ni、Al合金の組織予測への展開</li> </ul>        | <ul style="list-style-type: none"> <li>☆ JFEスチール: 共通鋼材作製、組織データ採取、疲労、水素脆化の性能評価、予測システム検証</li> <li>☆ 神戸製鋼所: 共通鋼材作製、組織データ採取、脆性破壊の性能評価、予測システム検証</li> <li>☆ IHI: 溶接部作製、組織データ採取、クリープ性能評価、予測システム検証</li> <li>☆ UACJ: Al溶接部作製、組織・性能データ採取、予測システム検証</li> </ul> |
|                          | 組織データの蓄積とデータによる組織形成予測     |  |  |  |
| D62<br>性能予測システム<br>の開発   | 性能予測計算モジュールの開発            | <ul style="list-style-type: none"> <li>● 疲労、クリープ、水素脆化、脆性破壊の予測モジュール作成</li> <li>● 鋼溶接部の疲労、クリープ、水素脆化、脆性破壊、およびAl合金溶接部の性能データ蓄積</li> </ul> | <ul style="list-style-type: none"> <li>● 鋼溶接部の組織から疲労、クリープ、水素脆化、脆性破壊を予測するモジュールの完成</li> <li>● 航空機用Ti、Ni、Al合金の性能予測への展開</li> </ul> |  |
|                          | 性能予測データベースモジュールの開発        |  |  |  |
|                          | 性能予測システムの検証               |  |  |  |
| D63<br>特性空間分析システム<br>の開発 | 3D/4D組織分析モジュールの開発         | <ul style="list-style-type: none"> <li>● 組織・性能・プロセスデータのデータベース化と可視化</li> <li>● データ駆動型手法に基づく組織・性能予測支援のプロトタイプ作成</li> </ul>              | <ul style="list-style-type: none"> <li>● 組織予測や性能予測の高精度化を可能にするデータ駆動型予測の枠組みを完成</li> </ul>  |  |
|                          | 多次元データ駆動型予測システムの開発        |  |  |  |
| D64<br>統合システムの<br>開発     | 組織・性能予測のワークフロー            | <ul style="list-style-type: none"> <li>● ワークフローデザイナーおよびプレーヤーの開発</li> <li>● インベントリ開発</li> <li>● ユーザーインターフェース開発</li> </ul>             | <ul style="list-style-type: none"> <li>● 組織・性能の一貫予測システムの完成</li> <li>● 鋼溶接部でのシステム検証および航空機用他材料への展開</li> </ul>                    |  |
|                          | データ管理・分析のためのインベントリ        |  |  |  |
|                          | 入出力インターフェース               |  |  |  |

# モジュールの連結によるパフォーマンス予測例

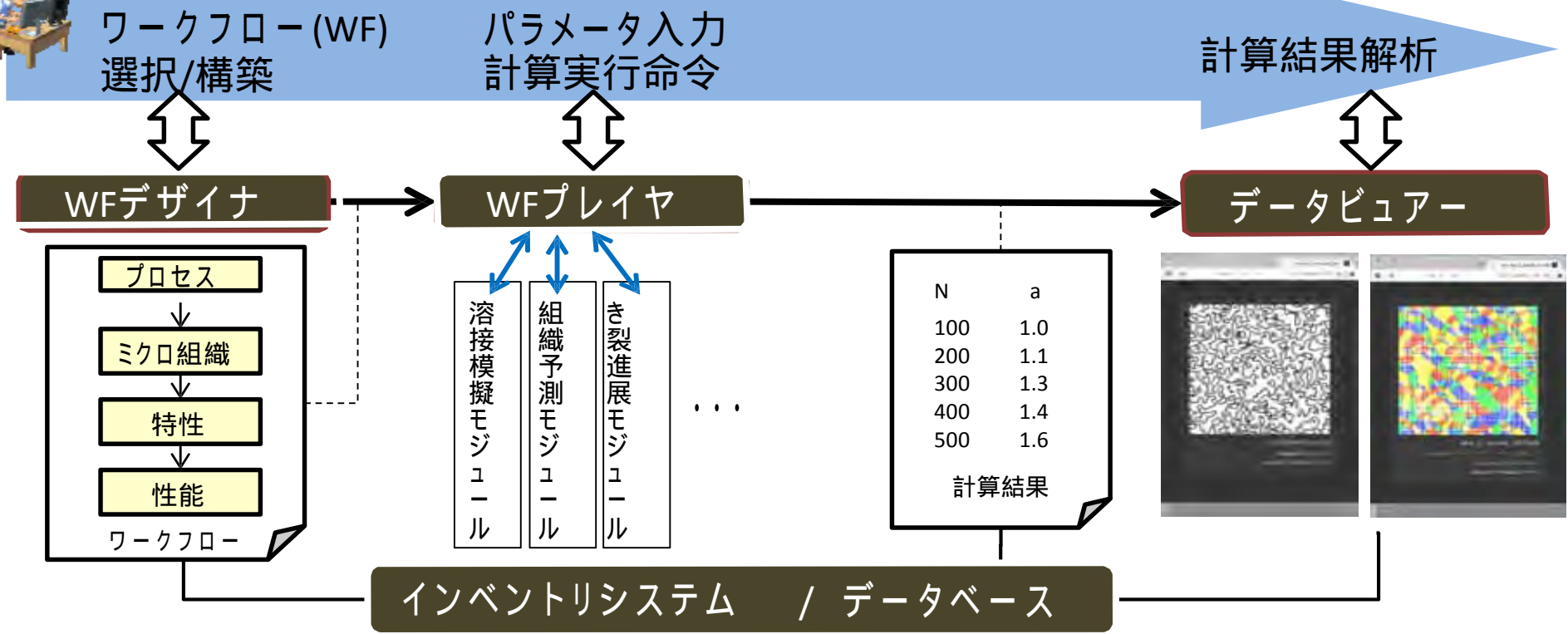
ユーザー入力：  
母材組成・組織、部材形状、溶接条件、使用環境

疲労性能予測のためのワークフロー例

システム出力：  
疲労寿命予測



# モジュールの連結のための計算機システム

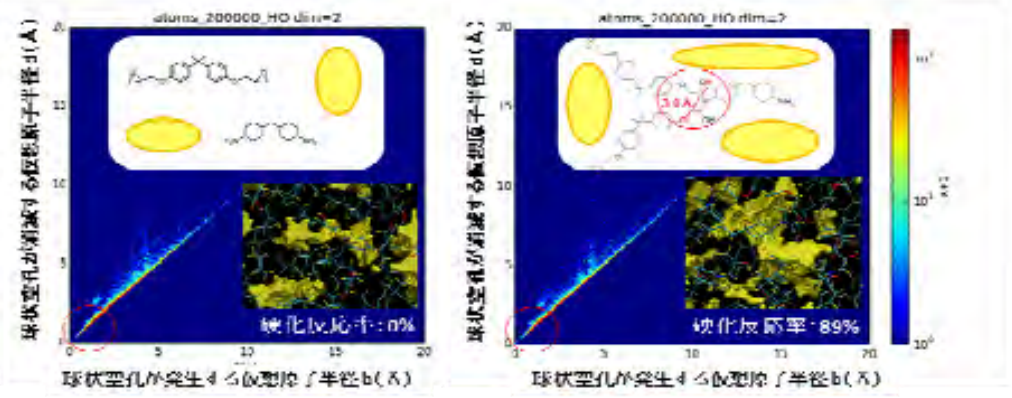
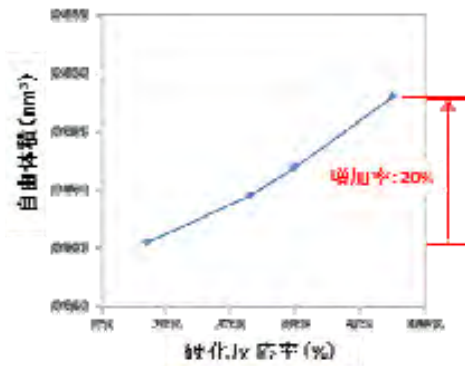
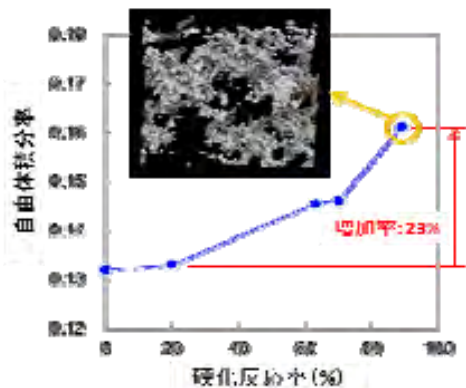


| 核となる機能   | 中間目標 α版 (2016年度) | 最終目標 MI1.0 (2018年度)   | 企業の役割  |
|----------|------------------|-----------------------|--|
| WFデザイナー  | モジュールを手動接続可能     | モジュールを自動接続可能 (同PID接続) | ・開発システム<br>の検証による課題抽出、必要機能の提言<br>・企業独自の抱えている問題を一般化して提供 |
| WFプレイヤー  | WFにそって実行可能       | 分岐・連成・ループ解析、リスタート可能   |  |
| インベントリ   | 語彙登録可能、PID管理可能   | ユーザ入力インターフェース改良、語彙拡充  |  |
| データベース   | データ蓄積・読出し・検索可能   | 非構造データベース化、データ拡充      |  |
| データビューアー | 結果/入力モデル表示可能     | 途中の結果表示、解析結果重畳表示      |  |



# 高分子系MIモジュール

## ミクروسケール(nm)コアモジュール



金属原子分子動力学シミュレーション結果

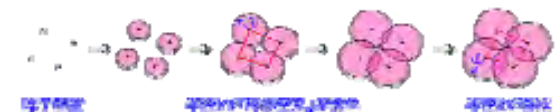
陽電子消滅法による計測結果

分子動力学シミュレーション原子位置データのパーンスタットホモロジー解析結果

【072】新日鉄住金化学高分子設計グループ  
【076】東京大学化学・創薬科学グループ

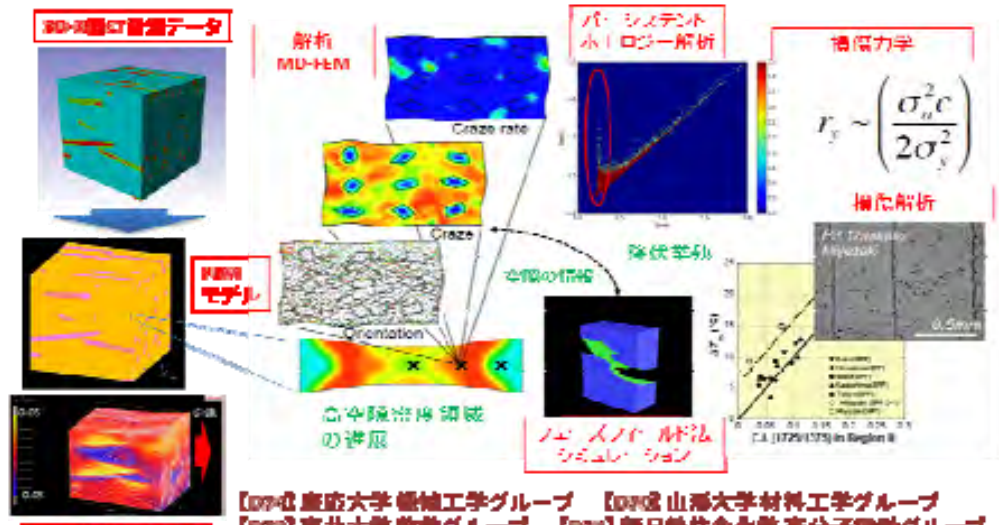
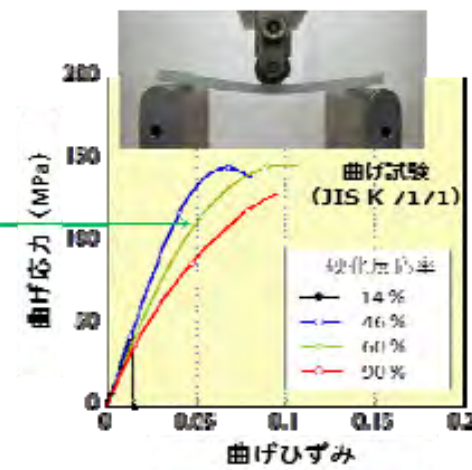
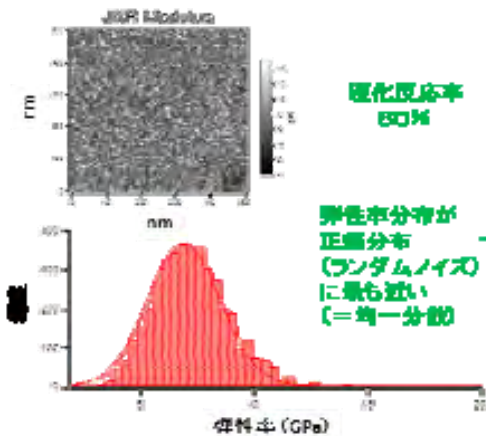
【076】産総研先端計測グループ

【072】東北大学数学グループ →  
【071】新日鉄住金化学高分子設計グループ  
【076】東京大学化学・創薬科学グループ



## メソスケール(μm)コアモジュール

## マクروسケール(mm)コアモジュール



ナノ触針AFM解析結果  
【072】東北大学数学グループ  
【072】新日鉄住金化学高分子設計グループ

【076】山形大学材料工学グループ

【076】産総研先端計測グループ  
【072】東北大学数学グループ  
【076】山形大学材料工学グループ  
【072】新日鉄住金化学高分子設計グループ

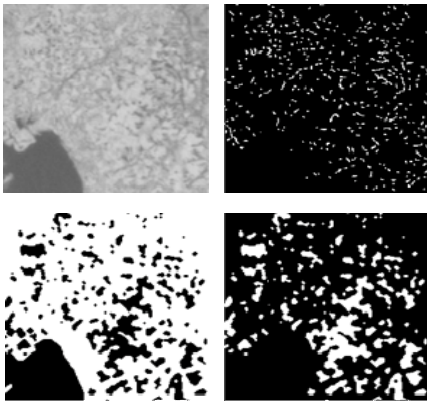
# SIP 高分子MIグループ の材料AI開発への取り組み

## 東北大D72グループによる材料画像へのトポロジカルAI手法の開発

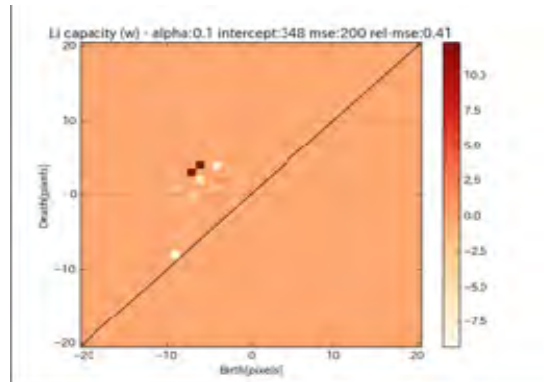
到達目標: 材料開発現場で得られる膨大な実験画像データを用いて制御したい材料特性と構造の関係を機械学習させ、未知材料開発や開発工程の大幅な短縮を可能にする数理的手法を構築する。

適用例: 鉄鉱石焼結過程で発生するマイクロクラックの発生位置の予測 (SIP D66, 木村氏との共同研究)

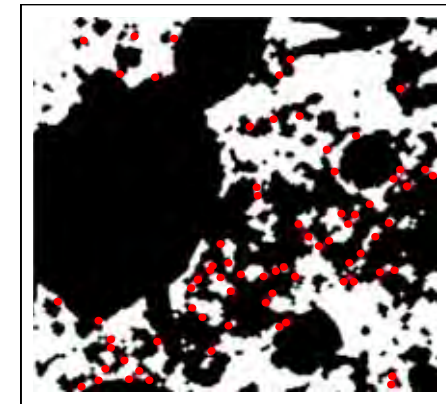
XCT image (iron ore sinter)



スパース・パーシステントホモロジー



トポロジカルAIによる学習結果  
(赤丸がクラック位置)



**本手法のアドバンテージ:** 材料物性値と膨大かつ複雑な画像データの相関関係を機械学習させることは極めて困難であったが、新たな数学的記述子(パーシステントホモロジー)を用いて情報を効率的に圧縮させることで高精度・高汎用性を実現する新たな材料AI手法を確立

### 本手法のポテンシャル・波及効果

- 画像データの種類によらず、極めて広い汎用性をもつ新たな材料幾何構造解析ツール
- エポキシ樹脂の密度揺らぎTEM画像から弾性率等の物性値を学習し材料開発へ応用(SIP 新日鉄住金化学との共同研究)
- 伝導率、ポアリティなどのTEM画像から学習を行い、高性能バッテリー材料開発へ応用



# ジェットエンジン用セラミックスコーティングの寿命予測



熱遮蔽コーティング (TBC) 膜の剥離

部品の交換 (再コーティング) が必要  
長寿命化が極めて重要

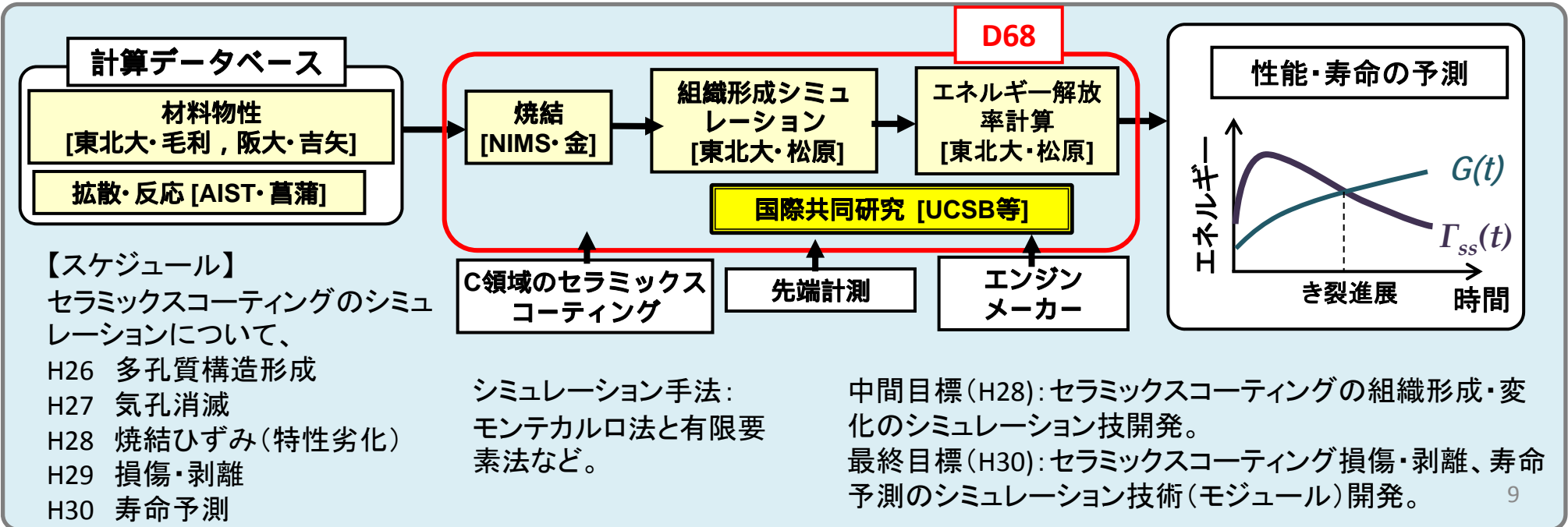
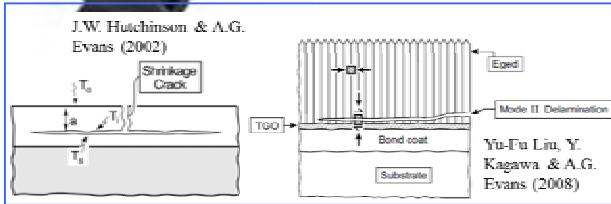
極めて多くの因子 (温度、時間、位置、物性、界面エネルギー、...) が影響するため、剥離 (寿命) の理論予測は不可能であった。



熱遮蔽コーティングの剥離 (寿命) を予測するシミュレーションが必要。

マテリアルインテグレーションのツールを駆使して、材料研究開発の時間短縮に貢献することを目指す: 試験数の減少

## 研究開発の方法: 国際連携



# 今後の検討課題

SIP: 航空機材料への展開と各領域(CFRP, 金属材料, セラミックスコーティングなど)との連携による研究開発の効率化とレベル向上

## 1. システムの持続と成長

- どのようにシステムを維持・管理、拡張するか(データベースを含む)
- 利用の自由度とセキュリティのバランス。公開ポリシーとアクセス権限

## 2. 拠点のあり方、拠点の運営

- モジュール・データベース・システムの継続更新・拡張
- 他の類似研究開発との共存・融合/方法の社会還元
- 国際的な協調と競合。その中でのプレゼンス確立

## 3. MIによる構造材料研究開発・人材育成の提案

- 計算、データ、実験、異分野融合による材料開発の革新
- 材料開発ワークフローの経験蓄積、育成