

技術解説



Technical Review

計算材料科学・工学の最新動向

上島伸文*, 及川勝成*

Recent Trends in Computational Materials Science and Engineering

Nobufumi UESHIMA and Katsunari OIKAWA

Synopsis

Thanks to increases in computational power, computational materials science and engineering are one of the fastest growing disciplines in this field. Recently, the idea of integrating already established models with different length and time scales in order to predict materials' macroscopic properties and microstructures from materials' composition and processing conditions has emerged. This is called Integrated Computational Materials Engineering. In addition, they have developed the idea of the Materials Genome Initiative by including establishment of an accessible digital database and data-driven prediction approach using data analytics and data-mining techniques, known as Materials Informatics. They aim to double the pace of developing new innovative materials through establishing these new ideas. In this review, focusing on the above mentioned projects, recent trends in computational material science and engineering are described by summarizing governmental reports, related reviews and recent publications.

1. はじめに

スーパーコンピュータでみられるように、計算機の発達はとどまるところを知らず、年々規模の大きな計算が可能となってきている。計算材料科学・工学の分野でも、2011年にゴードンベル賞を受賞した、シリコンナノワイヤの第一原理計算¹⁾、デンドライトの大規模Phase-Field計算²⁾に代表されるように適用が広がっている。

近年では、このような大規模計算機シミュレーションとは異なる方向として、これまでの実験・計算で蓄積された膨大な基礎的データ、マルチスケール計算、データ解析手法を活用し、材料の最終的な性能を予測する試みがなされている。米国にて2011年にMaterial Genome Initiative (MGI)³⁾というプロジェクト名で始まり、日本ではマテリアルズインテグレーションと呼ばれるプロ

ジェクトで進められている⁴⁾ほか、欧州⁵⁾、中国⁶⁾でも類似のプロジェクトが始まっている。プロジェクトの詳細はMGIの最新の計画⁷⁾などに記述がある。この計画中には、経験や試行錯誤に基づく材料開発からシミュレーションによる予測に基づく材料開発への変革、実施体制の構築、計算の入力として用いられる基礎的なデータベースの共有化・オープン化、実験・計算・理論の統合などについて記述がある。計算という面に焦点を当てると、Integrated Computational Materials Engineering (ICME)⁸⁾およびMaterials Informatics⁹⁾の二項目が該当する。ICMEはMGIの前身であり、これまでに開発されてきた種々の時間・空間スケールの異なる計算機シミュレーション手法を統合し、電子スケールの計算から製品スケールの計算をつなげることで、材料の性能予測を実現する計画である。Materials Informaticsでは材料の組成、作製プロセスと対応する材料組織、特性のデータ

2016年7月15日 受付

* 東北大学大学院 工学研究科, 工博 (Dr. Eng., Dept. of Metallurgy, Tohoku University)

ベースから、人工知能や機械学習などを利用して組成、プロセスパラメータと組織、特性の関係性を見出すことで、データ駆動で材料の性能を予測するものである。MGIや類似のプロジェクトでは、計算を用いて材料の性能を予測することを可能とすることで、新規材料の開発速度をこれまでの試行錯誤的手法と比較して倍にすることが目標として掲げられている⁷⁾。

本稿では、これらの概要を解説するとともに、塑性加工に関連する計算手法を取り上げながら、最新の計算材料科学・工学の動向について、概説する。

2. Integrated Computational Materials Engineering (ICME)

2. 1 ICMEのコンセプト

機械工学などの分野では計算による設計が既に一般的となっているが、材料工学の分野ではまだまだであり、職人の勘など経験に頼る部分が多く残っている。これは、材料の性能を予測するために必要な現象が非常に多岐に渡るためである。個々の現象の予測モデルは確立されつつあることから、もしそれらを統合し、材料の組成、プロセス条件から材料の組織、性能の予測が可能となれば、材料の開発にかかる時間とコストを大幅に削減できると期待される。このモデルの統合がICMEの基本の考え方である⁸⁾。

ICMEプロジェクトで挙げられている⁸⁾アルミ合金の casting¹⁰⁾を例に説明すると、例えばnmスケールの析出物、 μm スケールのデンドライト、mmスケールのポロシティの形態が casting 材の機械的特性を決定する。特性予測のためには各要素を予測するための複数の空間スケール、時間スケールのモデルを統合する必要がある。Fig. 1に統合すべきスケールの模式図⁸⁾を示した。

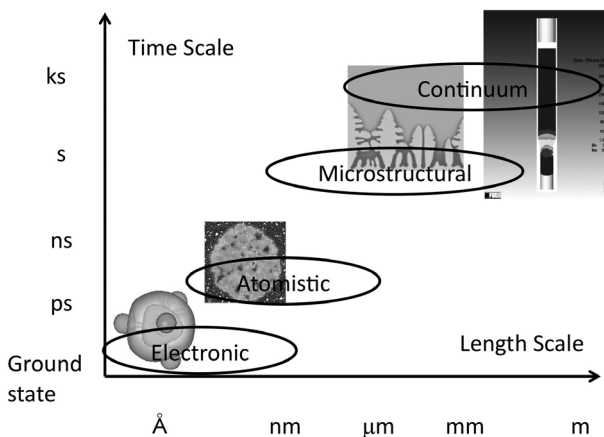


Fig. 1. Multiscale modeling for ICME.

析出物の結晶構造や析出する条件などを知るために用いられる手法としては、電子論計算や実験データベースに基づく熱力学計算がある。析出物の形態を予測するためには、原子スケール計算により析出物と母相間の界面エネルギーを知る必要がある。デンドライトの形態を予測するためには、界面エネルギー、自由エネルギー、プロセス条件などを入力として、 μm スケールの計算を行う必要がある。ポロシティの予測のためには熱伝導や収縮率などを入力として、部材スケールの casting 計算を行う必要がある。また、これらの計算の入力となるデータベースの整備も必要となる。引用されている例¹⁰⁾では自由エネルギーや界面エネルギーについてはデータベースや文献値を利用している。

2. 2 ICMEの構成要素

Table 1にICMEに用いられる計算手法とそれに必要な入力、期待される出力、用いられるソフトウェアの一例を示す⁸⁾。おおよそ上から順に空間・時間スケールの小さな計算手法となるように示している。紙面の都合上省略した部分があり、詳細は文献⁸⁾をご参照いただきたい。

組成と原子配置から、密度汎関数理論 (Density Functional Theory, DFT) に基づく第一原理計算や実験データに基づく熱力学計算 (CALCulation of PHase Diagrams, CALPHAD) により相の安定性が分かり、分子動力学 (Molecular Dynamics, MD) 計算や Monte Carlo (MC) 計算により界面エネルギーや移動度などが分かる。これらと材料作製プロセス条件を入力としてフェーズフィールドモデル (Phase Field Modeling, PFM) による計算やよりマクロなスケールの組織形成計算 (Scheilの式, LSWモデル, KWNモデルなど) を行い、材料の組織を予測する。材料の組織からマクロな特性をマイクロメカニクス、マイクロマグネティクス計算や、均質化法により予測、モデル化し、有限要素法 (Finite Element Method, FEM) などのマクロ計算によりマクロなひずみ分布などの情報を得ることで、マクロな特性の予測が可能となる。マクロ計算により得られた情報をミクロな計算の入力として利用し、連成する計算も提案されている¹¹⁾。これらの中でも第一原理計算の結果はより空間・時間スケールの大きな計算の入力として使われる場合が多いものの計算時間がかかる。そのためデータベースが整備されつつある。DFT計算結果のデータベースのリストの一部をTable 2に示す¹²⁾。紙面の都合上省略したが、他にも拡散係数や熱力学データベース、結晶構造のデータベースなども存在¹²⁾し、これらデータベースと、スケールの異なる各種計算手法を組み合わせることで材料の組織、特性を予測する。

前述の構成要素に加えて、これらを統合するオープンアクセスなプラットフォーム、統合されデジタルデータとして利用可能なオープンアクセスなデータベース¹³⁾の

構築が計画⁸⁾で挙げられている。これらは後継の MGI プロジェクトでも重要な要素として位置づけられている⁷⁾。

Table 1. Model or method, required input, expected output, and typical software for ICME.

| Computational Materials Model/ Method | Inputs | Outputs | Software Examples |
|---|--|--|--|
| First principles calculation | Atomic number, atomic arrangement | Electronic structure, elastic tensor, free energy | VASP, Wean2k, CASTEP, Gaussian, SIESTA, Quantum ESPRESSO |
| Molecular dynamics | Interatomic potentials, temperature and pressure control scheme | Point defect and dislocation, mobility, grain boundary energy | LAMMPS, DL_POLY |
| Thermodynamic methods (CALPHAD) | Free-energy data from electronic structure, calorimetry data, free energy functions fit to materials databases | Phase predominance diagrams, phase fractions, multicomponent phase diagram, free energies | Pandat, Thermo-Calc, Fact Sage, OpenCalphad, CaTCalc |
| Microstructural evolution methods (phase-field, front tracking) | Free-energy and kinetic databases (atom mobilities), interface and grain boundary energies, (anisotropic) interface mobilities, elastic tensor | Solidification and dendritic structure, microstructure during processing, deployment, and evolution in service | OpenPhase, MICRESS, DSICTRA |
| Mesoscale structure models (processing models) | Processing thermal and strain history | Microstructural characteristics (for example, grain size, texture, precipitate dimensions) | PrecipiCalc, JMat Pro |
| Part-level FEA, finite difference, and other continuum models | Part geometry, manufacturing processing parameters, component loads, materials properties | Distribution of temperatures, stresses and deformation, electrical currents, magnetic and optical behavior, etc. | ProCast, MagmaSoft, CAPCAST, DEFORM, LSDyna, Abaqus |

Table 2. DFT databases.

| Name | URL | Category |
|--|---|-------------------------|
| OQMD ¹⁴⁾ | http://oqmd.org/ | database of DFT outputs |
| Aflow ¹⁵⁾ | http://www.aflowlib.org/ | database of DFT outputs |
| Materials Project ¹⁶⁾ | https://www.materialsproject.org/ | database of DFT outputs |
| NIST interatomic potentials ¹⁷⁾ | http://www.ctcms.nist.gov/potentials/ | interatomic potentials |
| OpenKIM ^{18), 19)} | https://openkim.org/ | interatomic potentials |

2. 3 ICMEの最新動向

塑性加工関連のICMEの成果について具体例を示す。Krajewskiらは電子スケールから連続体スケールまでの計算手法を用いてAl-Mg板材の加工性を予測した²⁰⁾。まず、DFT計算とMD計算により転位芯構造、転位と溶質原子の相互作用を計算し、転位理論により固溶強化量を予測した。DFT計算によって得られたポテンシャルを用いてキネティックモンテカルロ(kinetic Monte Carlo, kMC)計算を行い、転位芯に沿った拡散係数がバルク拡散の106倍であること、それが加工硬化特性に影響およぼす影響を明らかにした。また、MD計算によって粒界すべりに必要な応力を計算し、それを入力として種々の粒径で結晶塑性有限要素法(Crystal Plasticity FEM, CPFEM)を用いた計算を行うことで、粒径と成形性の関係を予測可能とした。それぞれの計算結果について、実験による検証を行っており、いずれも良く一致した結果が得られている。この例では粒径をパラメータとして扱い、予測は行っていないが、近年では熱間鍛造時の動的再結晶後の粒径を予測するマルチスケールモデルも提案されている¹¹⁾。

前述のように現在でも各種計算ソフトウェア、材料データベースはある程度揃っており、電子計算から塑性加工性の予測までを計算することは可能である。しかし、それらをシームレスにつなぐソフトウェアが限られており、今後はそのような仕組みの開発が求められている。各国のプロジェクトでも、各スケールの予測モデル、データベースの開発・改良・確認と検証(Verification and Validation, V&V)はもちろんのこと、それらをつなぐプラットフォームの開発、計算へ利用が容易な形へのデータベースの改良が計画されている^{3)~7)}。

3. Materials Informatics

3. 1 Materials Informaticsのコンセプト

Materials Informaticsとはこれまでに蓄積された膨大な実験データや、計算能力の向上により算出可能となった膨大な計算データを入力として、統計学、パターン認識、人工知能などのデータ解析技法を用いてプロセス・特性間や異なる特性間に成り立つ法則性を見出し、予測を可能とすることで、新たな材料の開発を加速するという考え方である。ICMEは理論や経験則に基づいているが、Materials Informaticsではそれらを仮定しない点が異なっている²¹⁾。ただし、出てきたデータの妥当性

の確認は必要である。これらの考え方をFig. 2にまとめた。入力するデータとしては材料の組成、作製プロセス条件、結晶構造、材料特性などであり、それらの関係性を種々のデータマイニング方法で調べ、より良い特性を持つ材料を作製するための組成、プロセス条件を見つける。その後検証を行うという流れである²²⁾。

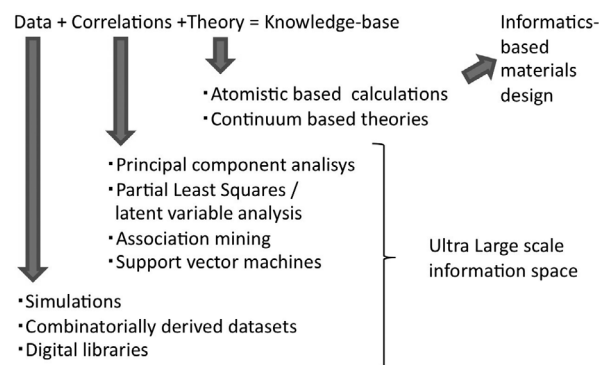


Fig. 2. Informatics-driven strategy for materials design.

3. 2 Materials Informaticsの最新動向

Agrawalら²³⁾はNIMSのデータベースであるMatNaviの疲労データシート²⁴⁾を用いて鉄鋼材料の疲労特性を組成・熱処理条件から予測するモデルを構築した。437種類の鋼の25種類の組成・熱処理条件・介在物密度などの情報から12種類の回帰分析手法を用いて予測式を作った結果、どの回帰分析手法を用いても相関係数が0.9以上と高い相関を示した。疲労特性と相関が大きいのは熱処理条件であると算出され、これは実態を反映していると言える。

前述の例ではデータベースから関係性を抽出することに成功しているが、データマイニングに用いるためにMatNaviの情報を加工している。このようにこれまでのデータベースはデータマイニングに用いるための設計とはなっておらず、データマイニング用のフォーマットに加工する必要がある。MGIのプロジェクトではXML形式でデータベースを作成し、データマイニングに活用しやすい形式とする計画であり、実際にそのようなデータベースの構築が進んでいる¹³⁾。ただし、引用先にも記載があるようにデータのフォーマットについてはまだ確定しておらず、データの正確性についても保証はされていない。これらについてはこれから検討が進んでいくものと思われる。

世古、東後、田中らのグループ²⁵⁾は第一原理計算とフォノン計算を用いて101種類の化合物の格子熱伝導度を計算し、ガウス過程による回帰分析を用いて他の54,779種の化合物の格子熱伝導度を予測した。その結

果、221種の化合物が低格子熱伝導度を持つと予想された。予測された化合物は調べた化合物空間の中でブロードに分布しており、ベイス推定を用いなければ予測が難しかった。格子熱伝導度が低いと予測された化合物について、バンド構造を調べ、バンドギャップが低いものが見つかれば、例外的に大きな性能指数を持つ熱電材料の発見につながるだろうと述べている。

データマイニングの手法を用いれば、前述の例のように、少ないデータ点から多くのデータを予測可能であり、材料開発に有用と考えられる。今後 ICME が発展して組成・プロセスから組織と特性が算出可能となれば、Materials Informatics と組み合わせる一部の組成・プロセスを計算すれば、他の条件での組織・特性を計算することが可能となることが予想され、材料開発の開発期間を大幅に短縮することにつながると考えられる。また、平行して逆問題を解く試みもなされている²⁶⁾。つまり必要な特性から組成・プロセスを計算する方法であり、この手法が確立されればさらなる材料開発期間の短縮が見込まれる。

4. おわりに

MGI および関連のプロジェクトは始まったばかりであり、現在でも活発に研究がなされている。筆者も日本の関連プロジェクトに参画しており、本稿に挙げた目標に少しでも近づくために微力を尽くしているところである。本稿は、そんな中、「計算工学の最新動向」に関して執筆依頼を受け、各種文献を調べまとめたものである。本稿の内容としては引用に挙げたようにさまざまなところに既に解説がある。さらなる詳細にご興味を持たれた方は、そちらを参照いただければ幸いである。

本稿を執筆するにあたって、NIST (National Institute of Standards and Technology: 米国国立標準技術研究所) の U. R. Kattner 博士、B. P. Burton 博士に東北大でご講演いただいた内容を参考としている。特に Kattner 博士には MGI 関連の Web ページ群をご教示いただいた。本稿の参考文献の大部分は Kattner 博士にご紹介いただいたものである。ここに記して謝意を示したい。

最後に、説明や参考文献の不十分さ、内容の偏りは著者の浅学非才によるものであり、ご容赦いただくとともに、ご教示いただければ幸いである。

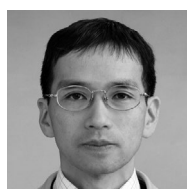
(文 献)

- 1) Y. Hasegawa, J. Iwata, M. Tsuji, D. Takahashi, A. Oshiyama, K. Minami, T. Boku, F. Shoji, A. Uno, M. Kurokawa, H. Inoue, I. Miyoshi and M. Yokokawa: SC'11 Proceedings of 2011 International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis, (2011), Article No. 1.
- 2) T. Shimokawabe, T. Aoki, T. Takaki, A. Yamanaka, A. Nukada, T. Endo, N. Maruyama and S. Matsuoka: SC'11 Proceedings of 2011 International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis, (2011), Article No. 3.
- 3) A. Jain, S. P. Ong, G. Hautier, W. Chen, W. D. Richards, S. Dacek, S. Cholia, D. Gunter, D. Skinner, G. Ceder and K. A. Persson: APL Mater., 1(2013), 011002.
- 4) 小関敏彦: 情報管理, 59(2016), 165.
- 5) A. F. de Baas: "Materials Modelling: Where do we want to go?", European Commission, (2014). doi: 10.2777/72001.
- 6) L. Chen: Engineering, 1(2015), 169.
- 7) Office of Science and Technology Policy, National Science and Technology Council, Committee on Technology, Subcommittee on the Materials Genome Initiative, "Materials Genome Initiative: Strategic Plan", CreateSpace Independent Publishing Platform, (2015).
- 8) National Research Council, "Integrated Computational Materials Engineering: A Transformational Discipline for Improved Competitiveness and National Security", (2008) Washington, D.C., The National Academies Press.
- 9) J. R. Rodgers and D. Cebon: MRS Bull., 31(2006), 975.
- 10) J. Allison, M. Li, C. Wolverton and X. M. Su: JOM, 8(2006), 28.
- 11) C. Yoshimoto and T. Takaki: ISIJ int., 54(2014), 452.
- 12) J. Hill, G. Mulholland, K. Persson, R. Seshadri, C. Wolverton and B. Meredig: MRS Bull., 41(2016), 399.
- 13) <https://github.com/usnistgov/MDCS>, Github repository for MDCS (Materials Data Curation System), accessed on July 11, 2016.
- 14) S. Kirklin, J. E. Saal, B. Meredig, A. Thompson, J. W. Doak, M. Aykol, S. Rühl and C. Wolverton: npj Computational Materials, 1(2015), 15010.
- 15) R. H. Taylor, F. Rose, C. Toher, O. Levy, K. Yang, M. B. Nardelli and S. Curtarolo: Comp. Mat. Sci., 93(2014), 178.

- 16) A. Jain, S. P. Ong, G. Hautier, W. Chen, W. D. Richards, S. Dacek, S. Cholia, D. Gunter, D. Skinner, G. Ceder and K. A. Persson: *APL Mater.*, **1**(2013), 011002.
- 17) C. A. Becker, F. Tavazza, Z. T. Trautt and R. A. Buarque de Macedo: *Curr. Opin. Solid State Mater. Sci.*, **17**(2013), 277.
- 18) E. B. Tadmor, R. S. Elliott, J. P. Sethna, R. E. Miller and C. A. Becker: *JOM*, **63**(2011), 17.
- 19) E. B. Tadmor, R. S. Elliott, S. R. Phillpot and S. B. Sinnott: *Curr. Opin. Solid State Mater. Sci.*, **17**(2013), 298.
- 20) P. E. Krajewski, L. G. Hector, Jr., Y. Qi, R. K. Mishra, A. K. Sachdev, A. F. Bower and W. A. Curtin: *JOM*, **63**(2011), 24.
- 21) K. Rajan: *Mater. Today*, **8**(2005), 38.
- 22) A. Agrawal and A. Choudhary: *APL Mater.*, **4**(2014), 053208.
- 23) A. Agrawal, P. D. Deshpande, A. Cecen, G. P. Basavarsu, A. N. Choudhary and S. R. Kalidindi: *Integr. Mater. Manuf. Innovation*, **3**(2014), 1.
- 24) <http://smids.nims.go.jp/fatigue/>, accessed on July 11, 2016.
- 25) A. Seko, A. Togo, H. Hayashi, K. Tsuda, L. Chaput and I. Tanaka: *Phys. Rev. Lett.*, **115**(2015), 205901.
- 26) L. Johnson and R. Arróyave: *Mater. Des.*, **107**(2016), 7.



上島伸文



及川勝成