

## 第1章 はじめに

### 1-1 材料設計における計算工学的手法について

「計算機の有効利用による材料の組織と特性予測の実現」はこれまでもしばしば取り上げられている計算材料科学の重要テーマの1つであるが、従来、アカデミックな基礎研究に主に力点が置かれてきたように思われる。基礎研究は非常に大切であるが、持続可能社会に貢献するテーマ、すなわち短期的にいかにも有効に学術研究を実用に結びつけるかに力点を置く研究も、これからの時代、これまで以上に優先順位が高くなると思われる。そこで、以下では、実用に力点を置く計算工学的な手法を"計算工学的手法"と記し、著者の考える材料設計における計算工学的手法の内容について説明する。

具体的な柱は4つあり、それぞれ、(1)相安定性、(2)物質定数の解析、(3)組織形成の解析、および(4)特性の解析である。(1)は従来の平衡状態図データベース構築に加え、第一原理計算とCALPHAD法の融合による合金状態図の更なる詳細データの蓄積を意図している<sup>(1)</sup>。(2)は、第一原理計算および原子・分子シミュレーションを利用した、純物質もしくは単相における物質定数(格子定数、弾性定数、および界面エネルギー密度など)の解析およびそのデータベース化である。(3)は、Phase-field法<sup>(2-5)</sup>を軸足に材料における各種の内部組織形成の定量的モデル化である(ここでは、"組織"という言葉は、相変態組織、結晶粒組織、欠陥組織など広い意味で用いている)。(4)は(1)~(3)にて得られる、相および組織の情報を境界条件とした特性計算である。力学特性では均質化法<sup>(6)</sup>、また磁気特性ではマイクロマグネティクス<sup>(7)</sup>などが該当する。

上記(1)~(4)は現在それぞれの学術分野で個別に進展している傾向が強いが、これらを連携させることが近未来的な次のステップであろう。学術的な観点からは、すぐにマルチスケールにおける練成解析を提唱し、上記(1)~(4)を有機的に統合することを考えがちであるが、あえてこの立場はとらない。数年以内のスパンにおいて目に見える実用的成果が期待できるのは、"有機的統合"ではなく"ブリッジ的連携"である。すなわち上記(1)~(4)はすでに個別の分野を確立しているので、それぞれの手法のインプットおよびアウトプット部分のみの連携を目指すことが技術者の義務として近未来的に大切である(この形式ならば(1)~(4)の分野における体系を変更することなく活用できる)。有機的な統合は、ブリッジ的連携が進んだ後、必然的に出現すると思われるが、100年スパンの研究期間を要すると思われる(1)~(4)の有機的統合に対する大きな問題点は、現象支配している緩和時間の相違である。空間スケールの相違も問題であるが、緩和時間の相違の方がはるかに深刻で、これは計算機の処理速度向上を考慮しても近未来的には実現しないであろう)。

### 1-2 ブリッジ的連携の概念

ブリッジ的連携の具体的な流れを、図1を用いて説明する<sup>(2)</sup>。まず(a)において、熱力学的データベースおよび原子・分子シミュレーションによって、物質パラメータ(平衡状態図の熱力学的パラメータ、単相の格子定数、弾性定数、界面エネルギー密度等)を得る。つまり相安定性解析および原子・分子シミュレーションによって単相の物質定数や界面の物理定数を計算する。次にこれを入力定数として、(b)Phase-field法にて組織形成過程の計算を行う。(b)の計算から組織形態が得られるので、計算された秩序変数の時間および空間変化を粗視化し、組織を定量化することによって、内部変数<sup>(8)</sup>の時間および位置依存性に関する関係式(内部変数の構成式)を導出する(c)。例えば、内部変数が第2相や再結晶粒の体積分率である場合には、組織形成シミュレーションの結果から相変態速度式を定量的に定めることも可能である。また結晶成長や析出粒子の粗大化等の場合には、平均粒サイズの時間変化式が導かれる。最後に(d)では、以上のようにして決定された内部状態変数<sup>(8)</sup>の構成式や、(b)の組織形態を直接利用する均

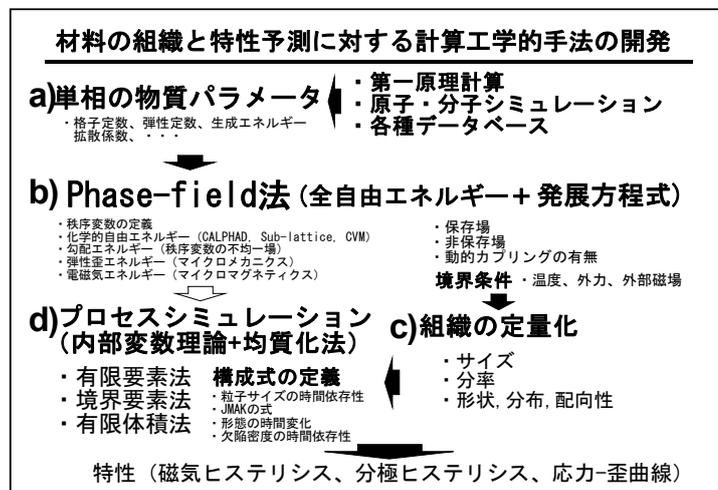


図1 マルチスケールのブリッジシステム

質化法<sup>6)</sup>などを用いて、設計プロセスシミュレーションを行い諸特性（磁気ヒステリシス、分極ヒステリシス、応力-歪曲線など）と結びつける。なおインプットやアウトプットの情報は実験からも得られるので、必要に応じて計算データと実験データを併用していくことが効率的であろう。さらに上記の個々の段階で得られるアウトプット情報を系統的にデータベース化していくことも大切である。

### 1-3 材料組織形成シミュレーションに対する注意点

従来、あまり議論されてこなかった注意点が組織形成の計算機シミュレーションに存在する。これは予測の信頼性の問題で、精度保証することが原理的に不可能である点である（ここで精度保証とは、計算と実験の一致を保証することを意味している）。平衡状態を対象とした計算や線形現象を対象とした解析は精度保証の計算が比較的可能な分野である（可能であるが必ずしも容易ではない場合が多い）。しかし近年、複雑系の理論が示すように、多様性の大きな非線形現象については精度保証の計算は原理的に不可能である。例えば流体の分野で、天候の予測に対してナビエ・ストークスの流体方程式を解いて予報を行う際に、初期条件の微小変化が非線形の正のフィードバックによって、短時間に無限大まで発散する現象が知られており、これは原理的な現象の予測不可能性を示す結果である。これに対処するために、初期条件の微小変化を種々変化させて、得られる結果の変動を統計処理して、アンサンブルとして予測する手法などが必要に応じて採用されている。つまり確率論的な予測である。材料に目を向けて通常の拡散相分解を、非線形拡散方程式を用いて直接計算する場合を例に取れば、線形スピノーダル理論のような線形近似が成立する範囲内であるならば精度良く結果を予測することができるが、非線形性が大きい核形成-成長領域などでは決定論的な予測は難しく、現実には確率論的な予測にならざるを得ない。従来の核形成理論や相変態速度論では、もともとの関係式が平均場近似の下に、初めから統計的に表現されている場合が多く、結果的にアンサンブルとしての表記になっているので、これまで以上のような問題が顕在化することがほとんどなかった。しかし、Phase-field 法やセルラーオートマトン等のシミュレーションに見られるように、実際の組織形成に対する直接計算の試みが始まった現在、以上の問題認識は重要である。実際の組織形成では、複数の析出・変態の存在、粒界や転位などの欠陥の効果など、非線形で多様な複雑現象が多数含まれる場合がほとんどである。したがって、計算結果を決定論的に理解してよいか、確率論的に理解するべきか、確率論であるならば期待できる精度はどの程度なのか、精度を上げる計算が可能としてもそれに関するコストパフォーマンスは妥当であるか、などを常に考慮して材料開発に対処する必要がある。これは計算理論や計算機の処理能力の不備ではなく、自然現象自体がそのような性質を有していることに起因しているので問題はより本質的である。

### 1-4 各論のデータベース化を通じて一般論へ

材料設計の計算機によるアプローチにおいて、困難な課題に挑戦することは大切であるが、実現までの期間を考慮して、同時に今できる事を着実に積み上げていくことも重要である。1つの同じ課題に対しても、100年以上のスパンで研究するようなアプローチと、数年以内に実現できるアプローチを併用することが肝要である。特に現実の組織形成は非常に多様であり、高機能な材料ほどそれに利用される組織形成は複雑・多様となる傾向にある。したがって、現時点で計算対象の組織形成がいかにも複雑で正攻法では解析不可能としても、多くの仮定を許容し可能な範囲で定量的に組織形成をモデル化し、そのモデル自体をいつでも再利用できる部品に整理してデータベース化することが重要であろう。このモデルは確かに各論に過ぎないが、最低限、現在計算対象としている材料設計に何らかの定量的な解を与えてくれる。またこのモデルを部品化し、モデル自体をデータベース化することは、将来、類似の組織形成を解析する際に定量モデル作製にかかる時間を格段に短縮させるのに役立つ。さらに100年以上のスパンで研究する正攻法的シミュレーションにも、ここで作製した仮定を多く含むモデルは有用である。なぜならば正攻法的シミュレーションの成果を活用することによって、設定した仮定が仮定でなくなるだけで、組織形成モデル自体の有用性は増すことはあれ、損なわれることはないからである。つまり、複雑多様な現象を定量的に扱おうとする場合は、一般論に還元する手法はあまり有益でない場合が多い。それよりも、各論として個々の現象をそれぞれ定量化し、個々の各論をデータベース化する方法論こそが真に役に立つ論理である（各論でも10000のモデルが集まれば一般論となる）。

最後に、いかに計算機の処理能力が拡大しても、おそらく非線形現象が支配する材料設計に近道

は無いだろう。しかし、材料設計のツールの整備は研究者・技術者のスキル向上に大きく貢献する。材料設計の本質が非線形現象の制御にあるならば、優れた汎用計算システムの構築を目指すのではなく、問題ごとに妥当な精度を有する計算システムを、必要に応じていつでもスクラップ&ビルドできる方法論こそが最終的に真に必要な材料設計法となると考えられる。

### 1-5 本書の目的

本書は、以上の概念の下に材料設計を実現するための学問的基礎について説明する。本書の直接の目的としては、Phase-field 法およびその周辺の学問体系の理解であるが、最終的には以上の実現を意図している点を理解していただきたい。

(なお本書は内容的には昨年までの内容とほぼ等しい。しかし今回、プログラムの部分を全面的に C 言語から Java 言語に書き換えた。またこれに伴い、付録におけるプログラム実行環境の説明の部分を全て改定した。)

### 参考文献

- (1) 大谷博司、長谷部光弘：まてりあ、**44**(2005), 395.
- (2) 小山敏幸:ふえらむ, **9**(2004), 240, 301, 376, 497, 905.
- (3) 小山敏幸:日本金属学会会報"まてりあ", **42**(2003), 397, 470.
- (4) 大出真知子,鈴木俊夫: 鑄造工学,**73**(2001),335.
- (5) 鈴木俊夫,金聖均,金元泰:日本マイクログラフィティ応用学会誌,**19**(2002), 2.
- (6) 寺田賢二郎, 菊池 昇: 「均質化法入門 - 計算力学レクチャーシリーズ-」, 丸善, (2003).
- (7) H.Kronmüller and M.Fähle: *Micromagnetism and the Microstructure of Ferromagnetic Solids*, Cambridge Univ. Press, (2003).
- (8) 井上達雄,田中喜久昭,長岐滋: 「固体力学と相変態の解析」,大河出版,(1995).