

# 材料・プロセス開発における科学技術計算の高度利用

## Advanced Utilization of Scientific Computation in Materials and Process Developments

松 宮 徹<sup>\*(1)</sup>  
Tooru MATSUMIYA

### 抄 録

計算機の高速度化と大容量化に加えてコストパフォーマンスの向上を背景に、科学技術計算で素材製造プロセスの挙動を解析し、これを制御するための実用が盛んである。一方、材料機能の予測についても、純粋系から、より複雑な実用材料へと次第にシミュレーションの適用範囲が広がっている。実用経験の蓄積と、計算の高速度化のための計算モデルの改良、数値計算手法の開発、並列計算に対応できる言語等のインフラの開発により、経験的知見を体系化してより有効に活用する手だてとして、また、実験に置き変わる仮想実験手法として、材料、プロセス設計において、現象の説明に留まらず予測のできる科学技術計算の高度利用の推進が望まれる。

### Abstract

Backed by an improvement in cost performance in addition to the fast-execution and mass storage of computer, utilization of scientific computation for material manufacturing processes to analyze and control their evolvment is now being actively put to practical use. On the other hand, the application range of computer simulation to predict the function of materials is gradually expanding to the practical materials of more complex rather than those of pure state system. It is hoped that scientific computation is advancedly utilized as the measure to make efficient use of it through systematization of empirical knowledge and further, as the measure of virtual experiment, which substitutes experiments, not only to explain phenomena but to be able to predict these in materials and process designing by accumulating experience of practical applications, and improving models of computation developing numerical calculation method, and developing infrastructure such as computer languages etc. to be able to cope with parallel computation for faster execution.

## 1. 緒 言

電算機の暦年の性能向上を見ると、1970年から90年代前半にかけて、ミニコン、メインフレーム、スーパーコンピュータともに100倍向上している<sup>1)</sup>。また、マイクロプロセッサの1985年以降の性能向上は群を抜いており、4年に10倍のペースで伸びている<sup>2)</sup>。近年では、スーパーコンピュータの性能も演算機を複数で構成させることによって、ほぼこれに近い割合で伸びている。加えて、1985年に数100 MFLOPS のスーパーコンピュータが数10億円であったものが、1995年では2GFLOPS の EWS が1億円を切る状況から考えると、電子計算機のコストパフォーマンスは5年に10倍向上することが読み取れる。

一方、上述した計算機の高速度化、大容量化及びコストパフォーマンスの向上を背景に、コンピュータ言語、計算手法等のソフト面においても、計算機能力を最大限に引き出す努力に拍車がかかり、数々の進展をみている。中でも、米ソ冷戦が終結し、軍事的目的に開発されてきたソフトが一般に解放され、また、軍事的目的の計算に

従事してきたソフト開発者の多くの力が一般課題の計算に投入されてきたのは、注目される動きである。表1に1993年5月に米物理学会が開催した1993 Physics Computing Conferenceにおいて共催されたチュートリアル・セミナーのなかで着目すべきものを挙げる。米国国立研究所が主催した革新的な数値計算手法、並列計算手法のセミナーが多い。

このようにして、連続体力学に立脚した構造物の強度設計や数値風洞実験、連続体力学モデルに多くの現象論的モデルを組み合わせた素材製造プロセス挙動のマクロスコピックな解析、現象、プロセス、材料を原子の動きや配列のレベルでシミュレーションし、機構や性質を調べる微視的解析、更に、電子・スピンの空間分布やエネルギー構造に基づく磁氣的、電氣的、光学的性質、反応性あるいは原子間結合強度の予測などが広範に展開されるようになって、計算科学は理論、実験に次ぐ第3の科学的手法と目されるに至った。そこで、科学技術計算の高度利用の意義と現状及び将来展望について考えを述べたい。

<sup>\*(1)</sup> 技術開発本部 先端技術研究所 解析科学研究部  
部長 Sc.D.

## 2. 科学技術計算の意義

材料、プロセス、及び装置の開発に当たっての科学技術計算の意義を図1に整理する。まず、計算を実験、実機試験の代替として用い、試験条件を敏速に経済的に絞り込むことにより、開発期間を短縮し開発経費を削減することができる。次に、超高温、超高压、超強磁場、放射線被爆などの極限環境下あるいは実験困難な条件下においても計算は可能であり、幅広くプロセス、材料、及び装置の挙動を調べ、従来の延長線上にない最適解を見出すことができる。更に、実験では観察できない現象や材料・プロセス挙動、状態を計算によって擬似観察することにより、機構を解明し機構に立脚した制御あるいは最適化を実現し、ひいては革新的技術開発のシーズを発掘するチャンスを広げることができる。例えば、電子の空間分布及びエネルギー構造やその時間変化、並びに原子構造やその変化などは実験では極めて限られた部分のみしか観察することができない。しかし、第一原理計算によるバンド計算、分子軌道計算や、分子動力学法、モンテカルロ法によるシミュレーションでそれらの詳細を見ることが可能であり、前述したように物性の予測や現象の本質を理解する上に奏効している。最後に、計算機で想定したモデルを組み合わせて全体のシミュレーションをやり切ることによって、いろいろな条件で実験や実機試験による結果と対比し、両者の結果が矛盾なくなるまでモデルを改良して、一般性のあるモデルの構築と検証を行うことにより、経験的知見をトランスファーラビリティの高い技術データとして活用し、将来にわたって蓄積していくことがで

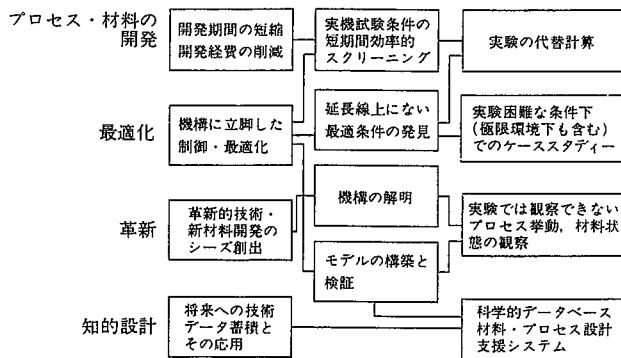


図1 科学技術計算の目的

きる。

言葉を換えて整理すると、科学技術計算は材料の性質やプロセスの挙動を経験的知見が全くなくても予測することを可能にし、あるいは、既に得ている経験的知見を内挿、外挿して経験のない領域で予測する合理的な方法を与えるものでなければならない。

## 3. 科学技術計算の利用現況

図2に新日本製鐵における科学技術計算の応用事例の一覧を示す。適用の対象としては、連続鋳造プロセス、塑性加工・成形プロセスが中心であり、手法としては連続体力学に立脚する流体力学解析、構造力学解析の適用が圧倒的に多い。次いで、電磁場解析、伝熱・拡散解析や熱力学モデルを用いた熱力学解析が適用されている。本号でもこれらを以下に取り上げている。材料分野では、状態図のシミュレーションと輸送現象を組み合わせた相変態のシミュレーション、変態・再結晶組織形成過程のモンテカルロシミュレーションや、原子・電子レベルの解析で、相安定性、粒界、欠陥の性質、磁性、機械的性質予測が試行されている。しかしそれらの適用はまだ限られており、本号では取り上げなかった。

連続鋳造プロセスで課題となるのは非金属介在物の制御、割れ性欠陥の発生抑制、及び中心偏析の制御である。例えば、前者2について、関わる諸現象とそれらの素過程のモデル化、及び、それを支配する基礎方程式は図3にまとめられる。諸現象はおおむね溶鋼流動、応力の釣合、エネルギー、溶質等の輸送現象、電磁誘導、化学反応の素過程に分解され、連続の式、ナビエ・ストークスの式、輸送方程式、マクスウェル方程式、機械的平衡式、熱力学平衡式、化学反応速度式によって解かれている。操作条件の違いによって代表的な薄片欠陥レベルがどうなるかを予測し、適正な操作条件を検討するのに応用されている。塑性加工・成形プロセスのシミュレーションでは成形寸法精度の確保、成形加工時の割れ発生等の欠陥発生を防止できる操作条件の検討がなされている。

## 4. 将来の展望

前節で述べたように現状では科学技術計算の適用の中心はプロセスにおける材料挙動のシミュレーションである。そしてその中身は、欠陥落ちにならないための品質と寸法形状を確保するための条件設定のために限られている場合が多い。しかしながら、将来のターゲットとしては材料を創成するための仮想実験バーチャルラボラトリ

表1 1993 Physics Computing Conference の教育セミナー

1. 数値計算手法		主催元
1) 数値流体力学手法 Moving Finite Elements	計算に応じてメッシュの切り方を自在に変更	ロスアラモス研
2) 数値流体力学手法 Flux-Corrected Transport Algorithm	圧縮流体、反応性流体、多相流、乱流一層流遷移、複雑形状流れ、パラレル計算向き	海軍研究所
3) 粒子系のシミュレーション法	分子動力学法	英AEA
4) 量子力学への有限要素法の適用	波動方程式をFEMで解く	ウォーセスター工科大
5) 共役勾配法	最適化、最小/最大値問題の解法	ローレンス・リバモア研
2. 並列計算		主催元
1) 並列計算機用 FORTRAN High Performance FORTRAN		ライス大
2) 超並列計算法 Massive Paralell		ローレンス・リバモア研
3) 並列計算機用 FORTRAN Modular FORTRAN	C言語相当の機能も有し、データベースにも使用可能	アルゴンヌ研
3. その他		主催元
1) 異機種による分散型科学計算		ローレンス・リバモア研
2) 物理・科学・工学・数学分野の入手可能プログラム		ローレンス・リバモア研

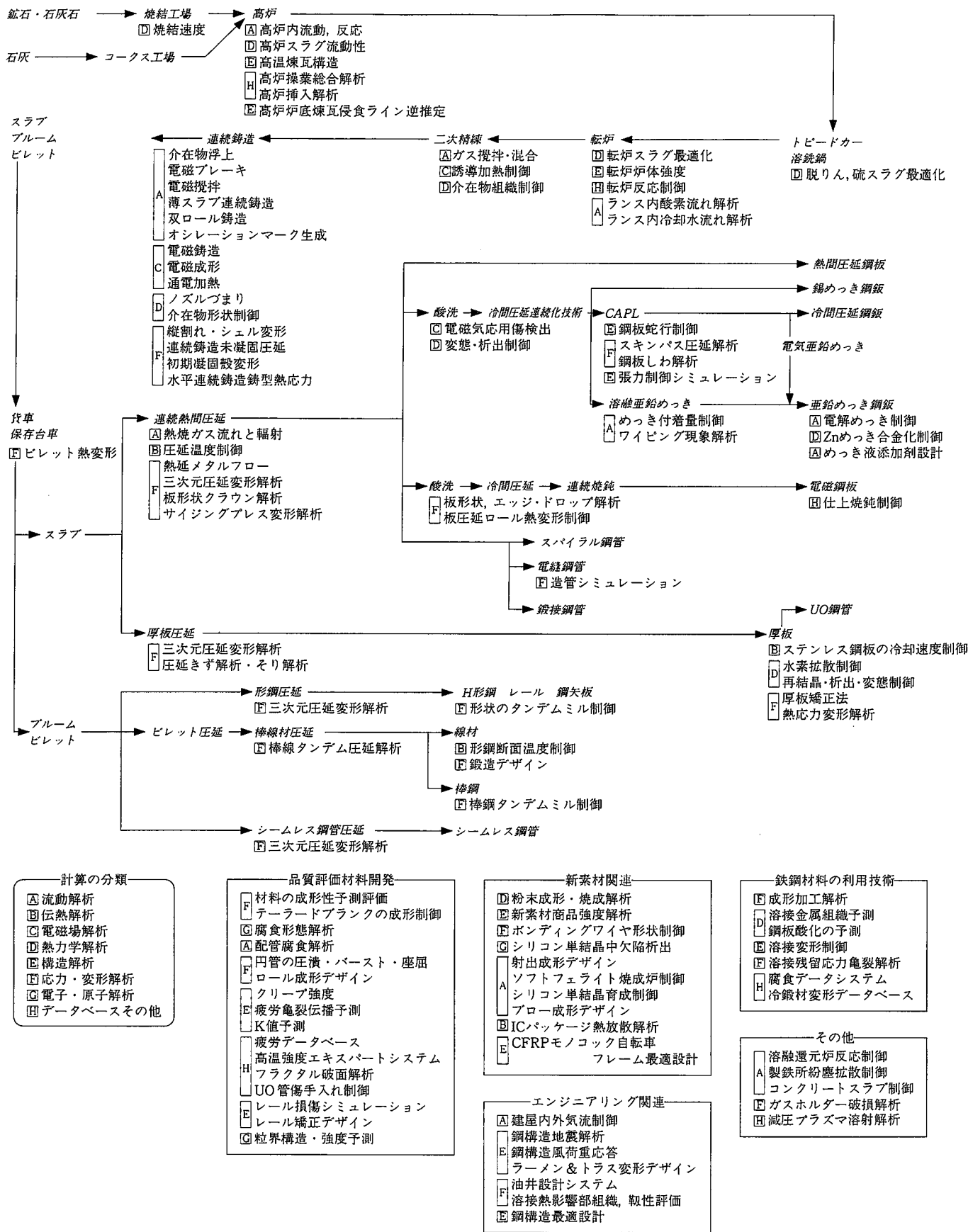


図2 科学技術計算の応用事例マップ

一、バーチャルファクトリーの構築を考えたい(図4参照)。そのためには、1)物質の基本物性に関するデータベースあるいはそれを予測できる科学計算技術の開発、2)基本物性と材料組織、高次構造とから材料機能を関係づけるシミュレーション技術の開発、あるいは、知識データベースの構築、3)生産される材料組織、高次構造を予測できるプロセスシミュレーション技術の開発、あるいは、プロセス条件から材料組織、高次構造、又は、材料機能を直接関係づける知識データベースの構築が不可欠である。

1)の科学計算技術の中身は電子構造解析、分子動力学法・モンテカルロ法による原子レベルでの材料挙動シミュレーション技術である。2)や3)のシミュレーションに比べてそれほど困難ではないように考えている。2)については計算機能力がかなり向上したとしても、全てを電子・原子レベルのシミュレーション手法で解析できる日は遠く、微視的レベルでの連続体力学の適用、モンテカルロ法の利用などでのメソスコピックレベルのシミュレーション手法の開発、あるいは、連続体力学と原子レベルシミュレーションとを連携させたハイブリッドシミュレーション技術の開発が必要である。一方、成分、組織、構造を明確に押さえた材料の機能に関する経験的データ

ベースを構築すればそのまま材料の選択、設計の支援に供することができる。腐食データベース、材料強度データベース、クリープ・データベース等はその例である。3)のプロセスシミュレーションでは、例えば、薄板の材質予測において粒度を予測したように、材料構造、材料組織を創り出すプロセス条件を明らかにするシミュレーションが必要である。

従来の材質予測では加工熱履歴を計算で求め、ある成分系の鋼種にこのような加工熱履歴が加わった場合の粒度はどうなるのか、また、その粒度での引張強度はいくらになるかについては、実験によって構築された経験的データベースからその情報を得て製品強度を予測するものである。これらの実験を鋼種ごとに繰り返すことなく、材質予測技術を汎用化するには、粒度を計算するシミュレーション技術、また粒度から引張強度を計算するシミュレーション技術に匹敵する計算手法の開発が望まれる。材料物性の予測、材料性状、基本物性からの材料機能の予測、プロセス条件からの材料性状の予測において、経験的データベースを補完し、より一般化して汎用性を持たせるために、2章で述べたように計算科学を有効に活用できれば、社会ニーズに対して、新製品の開発、プロセスの開発に合理

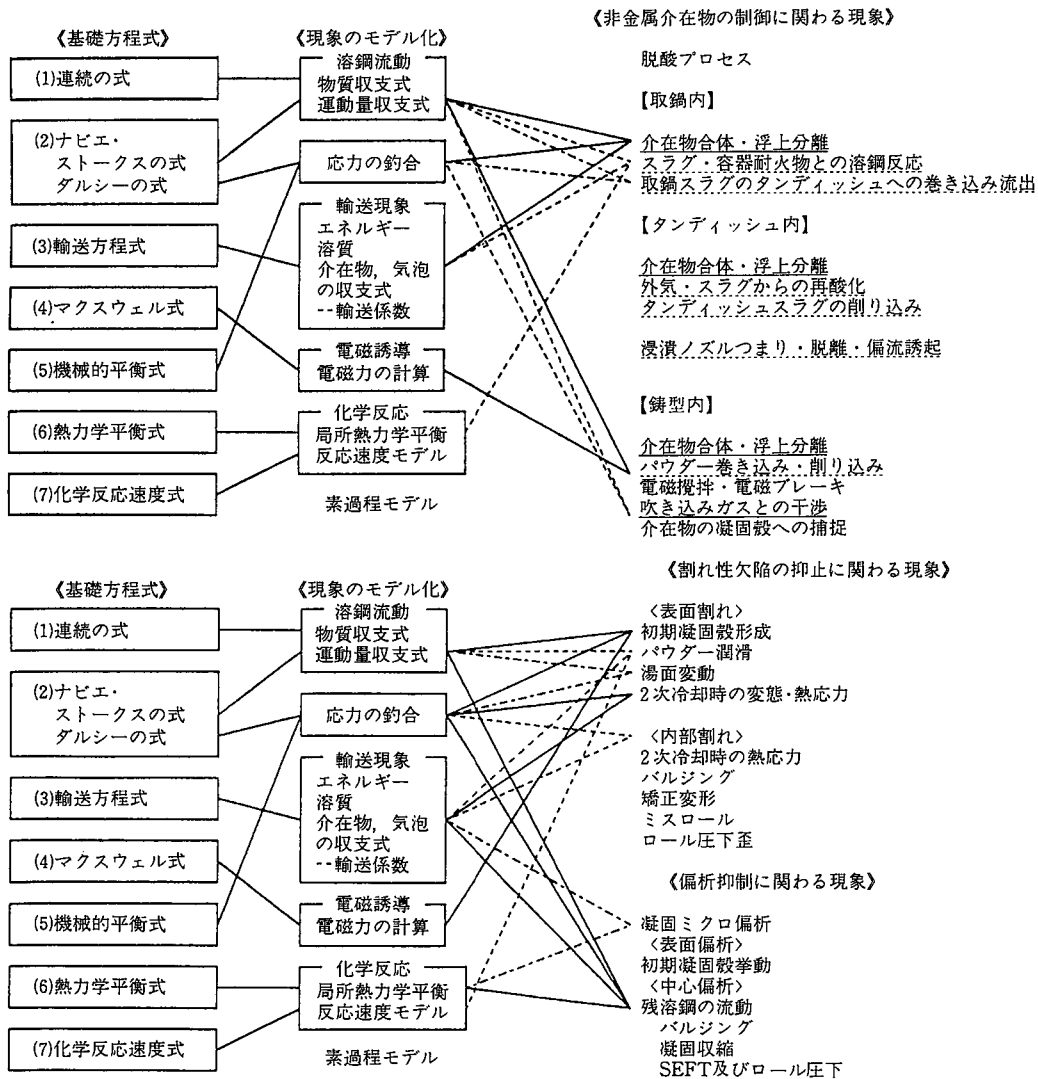
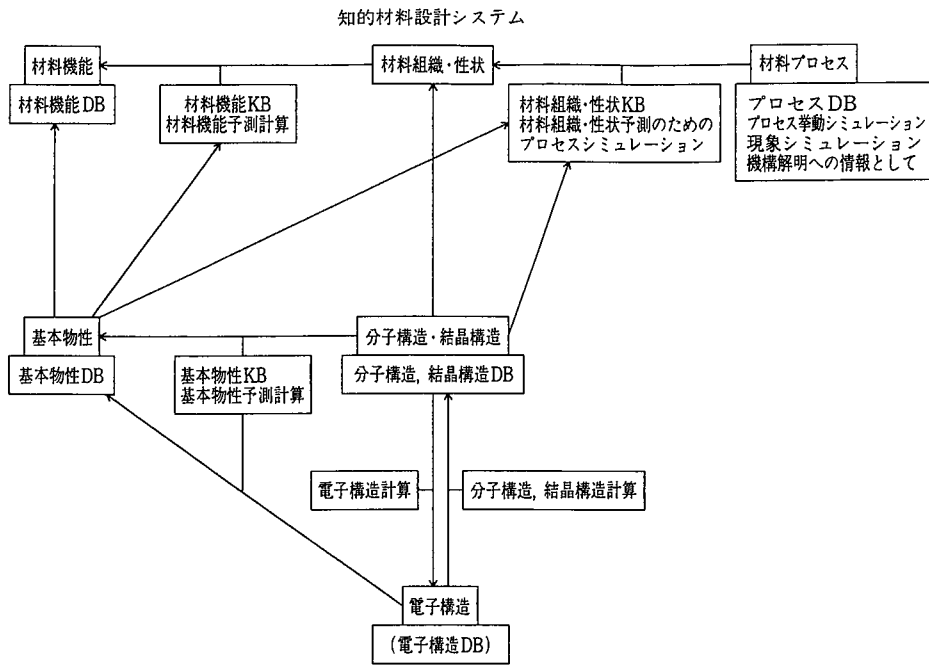
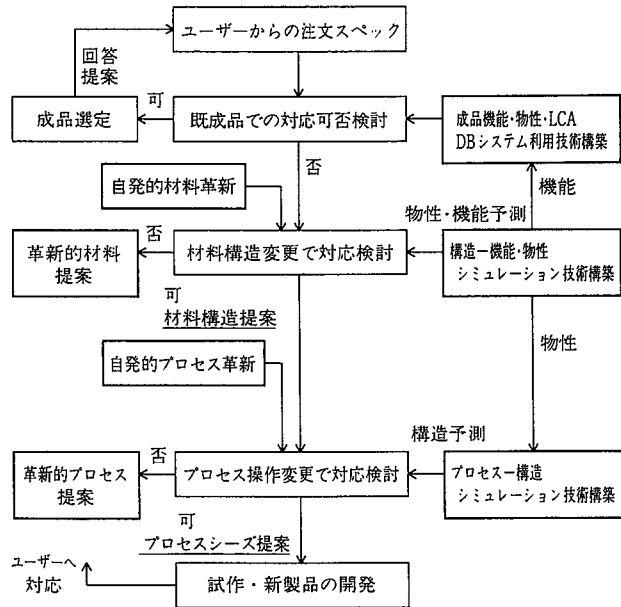


図3 連続鋳造における諸現象とそのモデル化と基礎方程式



(a)



(b)

図4 知的材料設計の構成における計算科学の位置づけ (a) と社会的ニーズ対応のシステム模式図 (b)

的対応が可能になると考える (図4 参照)。

最後に、科学技術計算によって得た新たな情報をもって物性の発現機構、現象の支配機構を解釈する上で、一つの計算結果を共有の情報として、多くの研究者が直接利用することが望まれる。コンピューターネットワークを通じての論文投稿が可能になった今日においては、計算結果に関する多くの情報も併せて付録につけて投稿す

るようにすれば、多くの人の頭脳を活用することが可能となり、知的材料設計の進展が速まるのではないかと期待している。

なお、図2の科学技術計算の応用事例マップは新日本製鐵の高度科学技術計算研究会議メンバーの協力で作成されたものである。

参考文献

- 1) 日経エレクトロニクス, (546), 250 (1992)