



## 計算科学特集刊行にあたって — 計算科学の進歩と製鉄産業における 計算科学の位置づけ —

顧問 松宮 徹

2011年11月，“京”コンピュータで10万原子からなるシリコンナノワイヤーの電気伝導を第一原理計算して実効性能3.08ペタ・フロップスを記録したことに對して，ゴードン・ベル最高性能賞が授賞された。LIMPAC ベンチマークによる理論性能でも“京”は10テラ・フロップスを記録し，2011年6月の8テラ・フロップスで達した世界最速の地位を2期連続で維持した。我が国では2002年6月から5期（2年半）連続で世界最速に君臨した地球シミュレータを最後に遠のいていた世界最速が復活した。スーパーコンピュータの性能は1970年代前半の100メガ・フロップスから1990年代前半の10ギガ・フロップスまで20年で2桁性能が向上したが，1990年代前半以降加速し，2011年の10ペタ・フロップスまで20年で6桁の性能向上を達している。必ずしもスーパーコンピュータによるものではないが計算機の性能向上を背景として，また，計算科学の進展と相まって，製鉄産業における計算科学適用は進展してきた。

有限要素法による構造力学解析に続いて，ナビエ・ストークス方程式を解く計算流体力学が産業に適用できる計算科学として，製鉄産業にも取り入れられ，鉄鋼製造プロセスの操業制御・最適化を目的に活用され，進歩発展して今日に至る。構造力学解析は圧延加工プロセスにおいては成形精度を高めるための塑性変形，連続鑄造プロセスにおいては鑄片の割れ発生，マクロ偏析を抑制するための鑄片の変形，歪みの解析に適用されてきたが，その後，鉄鋼製品の2次加工プロセスの解析にも適用され，さらに，結晶方位を塑性・剛性マトリックスに反映させた結晶塑性有限要素法による材質予測を視野に入れた解析へと広がっている。

また，計算流体力学は精錬容器や連続鑄造機の中の精錬剤や非金属介在物の移流拡散の解析に活用され，吹き込んだ精錬剤の反応時間の確保，非金属介在物の浮上分離促進施策のケース・スタディーがなされている。この観点で，電磁力適用による溶鋼流動の制御についての解析も行われている。さらに，流動とスラグ／メタル間反応を組み合わせ

せた精錬反応のシミュレーション、気相、液相、固相、粉体の流動解析と諸反応を組み合わせた高炉反応トータルシミュレーションが実施されている。流動解析にあたっては、近年 DEM, SPH 等の粒子法も、高炉反応、鑄造、凝固、冷却水流等の解析に適用され始めた。プロセスにおける計算科学についての詳細は巻を改めて纏められる予定にあるので、以下には、鉄鋼材料開発に資する計算科学に重点をおいて述べたい。

材料開発を航海に例えるならば、その海図とも言うべきものは状態図である。この状態図の計算による予測を目指したのが計算熱力学であり、1970年代前半から相の持つ自由エネルギーを経験的データにより評価し、これを用いて熱力学平衡計算を繰り返すことにより、状態図を計算する CALPHAD 法が発展してきた。この分野の国際会議 CALPHAD は昨年第 40 回を迎えた。我が国においても 1986 年に合金状態図共同研究会が高村仁一委員長、西澤泰二副委員長の下に日本金属学会、日本鉄鋼協会などが支援して発足し、今日の学振合金状態図第 172 委員会に至っている。

計算熱力学では実験によるデータベースから状態図を計算する経験的アプローチに加えて、熱力学的性質を第一原理から求めて、状態図を予測する非経験的手法も発展してきており、実験と第一原理計算とが補完しあう場合も出現している。製鉄各社も積極的にこれを取り入れ、新日本製鐵はその積極活用を称えられて合金状態図国際協力機構 (Alloy Phase Diagram International Commission) から、第一回目の APDIC Industrial Award を 2003 年に受賞している。その後、JFE、宝鋼、ArcelorMittal、POSCO も受賞した。

しかしながら、平衡状態図は材料が平衡状態にある時の相の分率と組成を示すものである一方、実際の鉄鋼材料は非平衡状態で使用されている場合が多い。そこで、材料プロセスにおける相変態を、溶質の拡散と界面での計算熱力学を適用した局所熱力学平衡とで、解析するアプローチも取られてきたが、近年、フェイズ・フィールド (PF) 法により、相界面エネルギーの効果も取り入れて、相のモルフォロジーも予測することが盛んになってきた。我が国における先駆的な研究は 1990 年代初めに見ることができる。PF 法と同様の解析はモンテカルロ (MC) 法でも可能である。PF 法に比べて MC 法は、計算負荷は大きいですが、PF 法では取り込めない核形成過程を含めることが出来る。2 次再結晶はバーテックス法によっても解析される。

第一原理計算の適用進展の核となったのは Kohn-Sham 方程式である。Schrödinger の波動方程式を密度汎関数法に基いて解けるようになって、実用系の材料の電子構造、エネルギー計算に道が開かれた。Kohn は、量子化学計算プログラム Gaussian の開発者 Pople とともに 1998 年にノーベル化学賞を受賞している。この方法は、上に述べた状態図の第一原理計算に資する規則相の全エネルギー計算にも使用される。状態図の第一原理計算ではこの全エネルギーから、クラスター展開法で原子間ポテンシャルを求め、クラス

ター変分法やMC法でエントロピー項の考慮を加えて熱力学的平衡状態を求めることを繰り返す。一方、溶質を含んだ系の全エネルギー計算に基づき、活量係数および相互干渉母係数を求めることも可能である。

次に原子構造解析については分子動力学法が上げられる。最初は実験事実に基づいて作成された原子間ポテンシャルを使用して原子に掛る力を求めて、ニュートンの運動方程式を解いて、原子の動きをシミュレーションする古典的分子動力学法であったが、多体効果を考慮した原子挿入法 (EAM) ポテンシャルが考案され、続いて、1985年に画期的な Car-Parrinello 法が出現した。交換・相関エネルギーを密度汎関数法で近似して波動関数を原子の位置が変化する毎に更新して Hellmann-Feynman 力を求めて原子の動きをシミュレートする第一原理分子動力学法である。これにより、不規則相はじめ、原子構造の乱れる表面、界面、転位、点欠陥等の第一原理計算が簡便化され、反応、破壊亀裂の進展等の動的過程が原子レベルで第一原理計算されるようになった。

新日本製鐵は企業研究会 CAMM (Computer Aided Materials and Molecular Design) フォーラムの計算物理分科会で Car-Parrinello 法による第一原理分子動力学汎用プログラムの 14 社による共同開発に参画した。開発されたプログラム CAMP-Atami は 1994 年に JCPE (日本化学プログラム交換機構) に登録され、2001 年度 JCPE 優秀プログラム賞を受賞している。

計算機性能を競うばかりでなく、計算科学分野のソフトウェアの国産化を図るために、国家プロジェクトが生まれ、2002 年以来、“戦略的基盤ソフトウェアの開発”、“戦略的革新ソフトウェアの開発”等を通じて、また、“京” コンピューター開発事業と併行したグランドチャレンジプログラムにおける“次世代ナノ統合シミュレーション”および“次世代生命体統合シミュレーション”ソフトウェアの開発を通じて、以上に述べてきた流体力学、構造力学等の連続体力学系、計算物理、計算化学の量子系、粒子系、メゾレベル系のシミュレーションソフトウェアが充実されてきた。

“京” コンピューター活用を中心とした HPCI 戦略領域として、1) 予測する生命科学、医療および創薬基盤、2) 新物質・エネルギー創生、3) 防災、減災に資する地球変動予測、4) 次世代ものづくり、5) 物質と宇宙の起源と構造が取り上げられ、その中で製鉄産業にかかわる分野は 2) と 4) 分野である。2) 分野の戦略拠点として、東京大学物性研究所を中心として自然科学研究機構分子科学研究所、東北大学金属材料研究所が、それぞれ、物性、分子、材料を担うことになり、東北大学金属材料研究所は計算材料科学拠点 CMRI となっている。ここでは、鉄鋼材料開発に関わる計算科学の展開が図られる。

文部科学省の“元素戦略”プロジェクト、JST の産学共創基礎基盤研究プログラム“革新的構造用金属材料創製を目指したヘテロ構造制御に基づく指導原理の構築”において、

第一原理計算で得られる電子の空間的、エネルギー的構造情報も加えて、元素個々の機能発現機構の解明に迫り、ユビキタス元素に置換して元素（資源）問題が克服され、また、PF法やMC法のようなメゾレベル・シミュレーションをも活用して、ナノ・ヘテロ構造の形成過程の制御と機能発現機構が解明されて、革新的な材料機能の開発されることを大いに期待したい。

海外に目を向けると、鉄鋼材料開発への計算科学の活用は、連続体力学のみならず電子・原子レベル、メゾレベルも併せて、マルチスケール、マルチフィジックスのシミュレーションの活用が盛んである。著者の知る限りでも、ドイツのルール大学のICAMS (Interdisciplinary Centre for Advanced Materials Simulation)、マックスプランク研究所(デュセルドルフ)、スウェーデン王立工科大学のHero-Mプロジェクト (Multi-scale engineering design)、米国ノースウェスタン大学のMaterials Technology Lab / Steel Research Group、ペンシルバニア州立大学のCCMD (Center for Computational Materials Design)の動向が注目される。米国のMaterials Genome Initiative for Global Competitivenessでは材料開発のインフラストラクチャーとして、計算技術、実験技術、データマネージメントに力点が置かれ、計画中の我が国文部科学省の“新元素戦略”と軌を一にするプログラムであると考えられる。また、英国のインペリアル・カレッジDTC-TSM (Doctoral Training Center for Theory and Simulation of Materials)の計算材料科学人材育成プログラムも注目される。

我が国におけるHPCI (High Performance Computation Infra)においても、“京”に加えて、産学の大型計算機をネットで結び、どこからでも使用できる環境づくりと、上に述べた計算科学ソフトウェアの拡充に加えて、計算科学人材育成が進められようとしている。鉄鋼産業もこの機会を捉えて、HPCIを活用し、大いに飛躍したいと考える。材料の計算科学はマルチフィジックス・マルチスケール性を有するが、必ずしも全てのレベルを一気通貫にシミュレーションできなくても、各階層のフィジックス、スケールの解析のみによっても、また、例えば、原子レベルの計算による知見を連続体力学レベルの計算に繋ぐ情報伝達型のシミュレーション、あるいは、せいぜい2階層のハイブリッド・シミュレーションによっても、材料の挙動に関する素過程の機構解明に迫れる知見を獲得すべく、計算機の発展に沿ってその能力をフルに活用して行くことが大切であると考えられる。連続体力学による解析、計算熱力学を除いて、電子構造解析、分子動力学、MC法、PFシミュレーションについては、嘗ては、散発的、試行的な、モデル活用であったことを否めず、粒子法を併せて、今後は実用材料での本格的な活用が期待される。