

第4回

# ハイスループット材料開発に向けた 材料インフォマティクス

講師：足立 吉隆 教授

(鹿児島大学大学院理工学研究科)

日時： 2014年6月11日(水) 13:30 – 15:30

場所： 並木地区共同研究棟4階

大ゼミナール室

主催： (独)物質・材料研究機構



マテリアルズ・インフォマティクスの第4回勉強会は、プロセス-組織-特性(-性能)を効率的に関連付ける「組織材質予測・解析・理解の総合モデル」の構築を目指して、学術会議や日本鉄鋼協会をはじめとする我が国における関連施策を広く取りまとめ、研究を精力的に進められている足立先生を講師にお招きいたします。ご講演では、ハイスループット材料開発に向けて、実験と計算の両面でデジタル化が進む材料情報を統合的に活用する「3D4D材料組織ベースのモデリング技術」について、基礎から応用までをご紹介頂きます。

内外の皆様の積極的なご参加をお待ちしております。



理事長 潮田資勝

世話人

門平卓也  
寺倉清之

調査分析室 (ex.2125)  
リサーチアドバイザー

ハイスループット材料開発に向けた材料インフォマティクス  
鹿児島大学大学院理工学研究科  
教授 足立吉隆

最先端的な分析手法を駆使して得た実験情報をより効率よく活用し、ハイスループット材料開発につなげるには、実験とモデリングの融合が重要ということが長年認識されてきたが、いまだそのギャップが大きいのも事実である。当該分野における最近の潮流として、材料組織観察が三次元(3D)化されたことや、幅広いスケールの組織中の弾性ひずみ・塑性ひずみを測定する手法が普及し始め、これは材料内部の各種不均一情報がデジタル化されたことを意味しており、実験とモデリングとのマッチングは近年飛躍的に向上し始めている。



直近では、フェーズフィールド法と微視的弾性論を連携させたモデリング手法において、組織形成過程から応力-ひずみ曲線の予測まで可能になりつつあり、実験で得た材料組織のデジタル情報と組み合わせれば、実験とモデリングの融合が現実的に可能になる状況にある。

このような環境の中、3D 材料組織可視化手法(3D 顕微鏡の独自開発を含む)、位相・微分幾何学に基づく 3D 像の定量解析手法、各スケールでのひずみ測定的手法(中性子線、電子線利用)の構築が精力的に進められ、同時にフェーズフィールド法を中心とした組織形成モデリングとマイクロメカニクス(微視的弾性論)による機械的特性予測モデリングにより組織形成から応力ひずみ曲線までのモデリング法構築が進められた。これら先端的 3D 形態解析・モデリング手法の開発が同時進行したことにより、定量評価された 3D 材料組織、組織内ひずみ測定の実験結果と、プロセス・特性をモデリング(フェーズフィールド、(結晶塑性)有限要素法、マイクロメカニクス(微視的弾性論)など)により結び付け、プロセス-組織-特性(-性能)の関係を効率的に関連付ける「組織材質予測・解析・理解の総合モデルの構築」が現実的なものとなってきている。

しかし、以上の個々の分析・解析・計算手法の進展は大きいものの、実際に力学特性と組織情報の関連性を真に定量的に検証するには、実験と計算の両面からの、種々の材料における組織形態情報と力学特性情報の集積が必要であるという新たな課題が浮上した。これを受けて、現在、3D 材料組織のデジタル(数値)化技術の普及と階層的ひずみ測定技術の拡大、および組織形態情報と力学特性情報の集積を実現すべく、日本学術振興会第 176 委員会内の「材料ゲノムアーカイブ化 WG」において、3D 組織のデータベース化(拠点:鹿児島大学)の受け皿づくりが開始されている。また、日本鉄鋼協会研究会「鉄鋼インフォマティクス」(主査:足立)も今年度から開始されている。その他にも、種々の機関で同様な取り組みが始まっている。

本講演は、この流れに密接に連携し、「3D4D 材料組織ベースのモデリング技術の基礎と応用」について、広く情報を共有することを意図したものであり、当該分野における 3D 材料組織解析法および不均一な 3D 材料組織形態情報を直接考慮したイメージベースの材料特性解析に関して議論したい。