

計算科学 の現在地

「再現」から、「予測」の時代へ



計算科学 の現在地

「再現」から、「予測」の時代へ

原子の組み合わせや温度など希望の条件を設定して
コンピュータ上での模擬実験を可能にする「計算科学」。

しかし、そう簡単に現実世界の再現はできない。
例えば実験ではちょっとした化学反応でも、
何万・何億という原子の動きを、
同時に何万・何億ステップと計算しなければならないからだ。

それでも、近年、コンピュータの発達にともなって
計算科学は現実世界に急速に近づきつつある。
目指すは、計算科学で新機能を持つ材料を予測して、実験で再現すること。

単なる実験の「再現」ではなく、「提案型」を目指して進化をつづける
計算科学の今を追う。



西村 睦

物質・材料研究機構
環境・エネルギー材料部門
水素利用材料ユニット ユニット長

佐々木 泰造

物質・材料研究機構
先端的共通技術部門
理論計算科学ユニット ユニット長

特別対談

理論計算科学は どこまで来たか

今、計算科学は、科学の全分野で、理論と実験に並ぶ重要・最先端の研究手段となっている。材料研究の分野でも、これまでの「実験結果の説明」という役割から、画期的な新材料の「予測」に向けて、大いなる期待が寄せられている段階だ。材料科学における理論・計算科学が今どうなっていて、これからどうなるのか。理論計算科学と実験という異なる立場で研究を行なう二人が大いに語る。

理論、実験、計算科学の 連携の始まり

西村 現在、「計算科学」は第3の科学としての存在を確立していますね。私自身は実験側ですが、計算科学の存在感が増していくのを日々感じています。今後、理論・実験・計算がどのように融合していくのか興味のあるところですので、その現状とこれからの展望を、今日は佐々木さんからお伺いできるのを楽しみにしてきました。それでは、まず、計算科学のこれまでの流れを振り返りたいと思います。佐々木さんがNIMSの前身の金属材料技術研究所に入所した1988年当時の計算科学の状況を聞かせてください。

佐々木 当時、飛行機の設計に不可欠な流体力学など一部の学問分野では計算科学の導入が始まっていましたが、材料分野で導入しているところはほとんどありませんでした。私自身はもともと物理学の理論の研究者で、その頃、私にとってコンピュータは、理論を計算するためのいわば“電卓”代わりでした。スーパーコンピュータが研究所に初めて設置されたのは1995年のこと。計算科学が、理論、実験に次ぐ第3の研究手法として本格的に認知され始めたのは、2000年

代に入ってからではないでしょうか。

西村 理論側は材料の物性を原子レベルで研究しますが、一方で90年代には、高性能な電子顕微鏡は高額で、あまり普及していなかったこともあり、実験側が実験結果を原子レベルで観測したり、分析したりするということはほとんどありませんでした。そのため、理論側と実験側との間には溝があったように思います。両者が同じ土俵で議論するようになってきたのは、ナノテクノロジーに注目が集まり始めた頃ではないでしょうか。

佐々木 それによって実験的にもナノレベルの事が分かるようになってくる一方、京コンピュータ開発プロジェクトも着手され、コンピュータの性能も劇的に向上し始めました。それに伴い、有用な計算手法も確立しました。

西村 その結果、理論、計算、実験の3者が、材料の物性を原子レベルで議論する環境が整ったというわけですね。環境問題やエネルギー問題など多様化する社会問題の解決に向けて、この3者の連携が新しいステージへと進むことで、産業構造や生活様式を変革する新材料や革新的技術の開発が進むという期待があることも確かです。

佐々木 西村さんの専門は水素エネルギー

に感じています。次に、無限に想定できる実験条件の中から、有用なものをスクリーニングするためのツールという役割です。また、実験中の物質同士の反応や物質の形成過程をコンピュータシミュレーションによって可視化し、分かりやすく提示するというのも、計算科学の重要な役割のひとつとして期待しています。

一方で、計算科学では、超高温や超高压などパラメーターの値を自由に設定できますが、実験の場合、途中で予期せぬ現象が起こったりするので、実際の実験結果と計算結果が一致するとは限らないのではないかという懸念もあります。その辺りはどうでしょう。

佐々木 その通りですね。例えば、実験に使う試料の表面は、コンピュータシミュレーションのように、どこまでも平坦で整っているとは限りません。大抵はデコボコしていたり、孔が開いていたりして、それが材料の特性に大きく関わっている可能性もあります。計算科学は理論に基づき、数値モデルを作ることから始まりますから、実験と計算の双方がともに注意すべき点は、作成した数値モデルが、実験で確認したい要所をきちんとカバーしているかどうかをチェックするということだと思います。



我々の使命は、まさに「灯台の灯り」となること。

佐々木 泰造

ギーに関連する材料研究ですね。まさに、産業構造や生活様式の大きな変革につながる研究ですが、その中で、計算科学が果たしている役割については、実際に材料の実験を行なう研究者としてどのようにとらえていますか。

西村 一般論になりますが、まずは「理論と実験の間を補完するもの」という位置付けでしょうか。実験結果から得られた材料特性に関して、その背後にあるメカニズムを理論的に証明し、可視化して提示するという役割です。個人的にも、最近では論文を提出する際に、実験結果に対して、計算科学による裏付けが求められるケースが増え

課題設定を的確に行ない、実験結果と計算の結果をお互いにフィードバックして完成度の高いモデリングを実現することで、実験と理論計算の関係は今後さらに加速されていくのではないのでしょうか。

新たな計算手法の開発が、 革新的材料の実用化の鍵を握る

西村 では、現在、物質・材料分野において、計算科学が特に活躍しているのはどの分野だと思いますか。

佐々木 材料は、機能的な性質によって、構造材料と機能材料に大別できますが、そ

の点で言えば、圧倒的に機能材料ですね。それは、スパコンの性能が劇的に向上したことで、原子1個1個の挙動を、コンピュータシミュレーションによってかなり忠実に再現できるようになったことが大きいと思います。逆に、構造材料に関しては、ナノレベルでの現象の把握が難しく、計算科学にとっては苦手な分野であると言えます。

西村 そのようですね。ただ、そういった分野でも、今後はシミュレーションやデータ科学の統合による新材料の設計や、革

理論計算科学のさらなる飛躍とノーベル賞級の大発見に期待

西村 最近、PCの性能向上が目覚ましく、汎用ソフトも充実しているので、実験が中心の研究者でも、ちょっとした計算であれば、手元のPCを使って行なうというのが、普通になっていますよね。

佐々木 ですから、今後、計算側にとっては、単に計算をしていけばよいという時代ではなくなります。我々も、常にクリエイ



学際的な計算科学の発展により、新たなアイデアが生まれる。

西村 睦

新的材料の発見から実用化までの時間短縮に期待ができるでしょう。

材料分野において計算科学がより力を発揮するためには、やはりスパコンの性能の向上が鍵を握るのでしょうか。

佐々木 一概にそうとも言えません。もちろん、コンピュータの性能が高いことに越したことはないのですが、不均一あるいは不連続な構造を持つ材料の場合、扱うデータ量が膨大なため、たとえスパコンを使ったとしても従来の第一原理計算法では計算できません。その状況は、「京」の次世代が登場したとしてもあまり変わらないと思います。そこで我々は、「オーダー N (P06参照)」という計算手法の開発にも取り組んでいます。これにより、世界で初めて数万原子以上を含む系に対して、第一原理計算ができるようになりました。その結果、複雑な粒子を持つナノ構造物質やタンパク質など生体物質の計算が可能になったのです。

材料分野の場合、研究対象が非常に多岐にわたりますし、さまざまな条件を設定して、できるだけ多く計算したいというニーズも高いため、スパコンだけでなく、PCを複数台接続して処理する分散コンピューティングや、中小規模のコンピュータの役割も大変重要です。

タイプでなくてはならない。

ちなみに、現在、NIMSには、トータル1ペタフロップスのスパコンがあり、稼働率は約9割ですが、我々理論計算科学ユニットのメンバーが使っているのは、そのうちの約2割です。残りは、「国際ナノアーキテクトニクス研究拠点 (MANA)」や「ナノ材料科学環境拠点 (GREEN)」など理論計算科学以外の研究拠点が使用しています。私が研究所に入所した当時、約300人の研究者のうち、計算科学を扱う人は私を含めた4人でしたから、計算科学が活躍するに至った時代の流れを感じます。

西村 GREENでは、計算と実験の連携・融合により、地球環境問題を解決する新材料の開発を目指していますが、私は、GREENに限らず、もっと実験と計算が連携・融合できる機会があってもよいのではないかと感じています。学際的な計算科学が発展することで、計算科学自体が進化し、新たなアイデアが生まれるはずで、7年前、文科省の委託事業であるGREENの最終審査に立ち会った際、審査員の大先生の一人が「私は計算は役に立たないと思う」という厳しいコメントをしたことを鮮明に覚えています。当時と比べ状況はだいぶ変わりました。計算科学主導で画期的な材料開発に成功する日も近いのではないかな、と感じています。

佐々木さんは、今後、計算科学には、何が求められていくと思いますか。

佐々木 私の究極の目標は、材料の研究者に対して、計算科学に基づき、提言や進言ができるようになること。その結果、これまでの概念を打ち破るような、画期的な新材料の開発につながればうれしいですね。

西村 これまで理論の研究者が、独自の理論に基づき、「このような物質が必ず存在するはずだ」と予言して、それを実験側が実証してきたように、計算科学者も、独自の計算に基づき、新材料を予言するようになるかも知れないというわけですね。

佐々木 以前、大阪大学のある先生が面白いことを言っていました。「理論屋が画期的な理論を見出し予言することは、灯台の灯りをとめて、実験屋という船を進むべき方向に導く行為である。しかしながら、灯台の灯りになれる理論屋はごくひと握りの天才に限られ、大半の理論屋は、駕籠かきの足元を照らす提灯持ちに過ぎない」と。うまいことを言うものだと思います。確かに我々の使命は、まさに「灯台の灯り」となることです。

西村 近い将来、計算科学により、ノーベル賞級の大発見がなされ、想像もしなかったような新材料が開発されることを期待しています。(文・山田久美)

*第一原理計算法とは、原子レベルやナノレベルにおける物質の基本法則である「量子力学(第一原理)」に基づき、物理の解明や物性の予測を行なう計算手法のこと

計算科学と実験科学の融合で 夢のデバイス実現へ

3万原子という世界最大規模の計算を操り、
物質の原子や電子の振る舞いを解く宮崎剛グループリーダー。
シリコンのナノ構造体を用いて高機能デバイスの開発を目指す深田直樹グループリーダー。
二人のコラボレーションによって、革新的なデバイスが誕生しようとしている。

もっとたくさんの原子を計算したい

「計算科学の研究者と実験科学の研究者の議論が本当に噛み合うようになったのは、ほんの5年ほど前からです」。そう語るのは、量子物性シミュレーショングループの宮崎剛だ。その契機のひとつとなったのが、宮崎らが開発したオーダー N法第一原理計算プログラム「CONQUEST」である。

第一原理計算とは、ミクロの世界において最も基本的な原理である量子力学に基づいて、原子の間に働く力や電子の振る舞いを計算することである。電子の状態が分かれば、その物質の性質を知ることができる。しかし、その計算は非常に複雑で、原子の数をNとすると計算量はNの3乗に比例して急激に増加してしまう。原子数が2倍に

なれば、計算量は8倍だ。そのため扱える原子数が限られてしまうという問題がある。

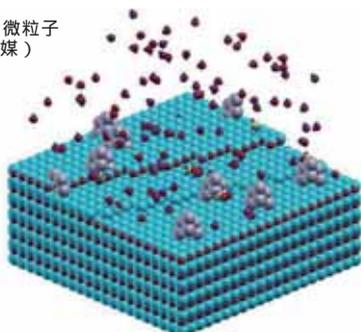
「第一原理計算で扱える原子数はわずか数百個でした。一辺に原子がたった10個並んだ立方体でも、原子の総数は1000個。そのサイズですら手に負えません。一方で、原子数百個というサイズは、実験で扱うには小さ過ぎます。計算科学でもっと大きな原子数を扱えるようにならないかと、実験科学の研究者からも言われていました。もちろん私たち自身もその必要性を認識し、大規模計算を可能にするために15年以上にわたって取り組んできました」

そして宮崎は、英国University College London, London Centre for NanotechnologyのDr. David Bowler博士(NIMS-MANA併任)と共に、オーダー N法という新しい計

算手法の開発に成功した。原子数が2倍になっても計算量は2倍と、計算量の増加をNの1乗のオーダーに抑えることができる画期的な手法である。従来の第一原理計算では電子1個1個の波動関数をすべて計算するのに対して、オーダー N法では全体を局所的な小さな単位に分けて密度行列を求めることで計算量を最小化している。

オーダー N法には複数の手法があり、世界でいくつものグループが競って開発している。CONQUESTは、計算が安定していて計算結果の精度が高い、超並列計算機を効率的に使えるという特徴がある。そのため、CONQUESTでは3万原子以上も簡単に計算することが可能であり、100万原子以上まで扱うことができる(図1)。これまでより2桁以上も増えたといえる。「3万原

ナノ微粒子
(触媒)



水溶液中の
DNA

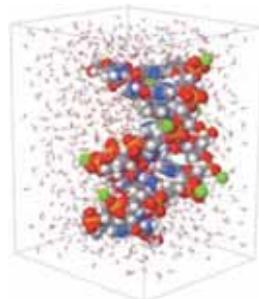


図1: オーダー N法第一原理計算プログラム「CONQUEST」の対象
CONQUEST は、3万原子以上の巨大系についても原子の間に働く力や電子の振る舞いを計算することが可能である。

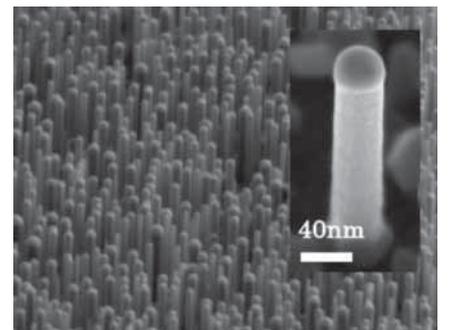


図2: Siナノワイヤの走査電子顕微鏡写真とその拡大図
直径がnmオーダーの細長い構造体をナノワイヤと呼ぶ。



宮崎 剛

物質・材料研究機構
先端的共同技術部門 理論計算科学ユニット
量子物性シミュレーショングループ
グループリーダー



深田直樹

物質・材料研究機構
国際ナノアーキテクニクス研究拠点 (MANA)
無機ナノ構造ユニット 半導体ナノ構造物質グループ
グループリーダー

子に対する第一原理シミュレーションというのは世界最大規模で、ほかの計算手法を圧倒しています」と宮崎は胸を張る。

機が熟し、 計算科学と実験科学が出会った

宮崎は、「計算手法というのは、開発して論文を書いて終わりではなく、実際の物質や材料に適用することが重要」と常々考えている。そこで、CONQUESTを適用するターゲット探しにかかった。「3万原子というと、物質のサイズは10nmほどです。ナノサイズの物質では、通常のサイズとは異なる新しい機能が現れることがあります。そんな面白そうなナノ構造体を世界中の論文から探していたら、これだ!というもの

がありました。シリコン (Si) /ゲルマニウム (Ge) コアシェルナノワイヤです。論文の著者を見ると、なんとNIMSの研究者。すぐに連絡を取って会いました」

その研究者が、半導体ナノ構造物質グループの深田直樹だ。「私に声がかかったのは、NIMS内で共同研究先を探していたからだと思っていました。世界の研究の中から、私の研究に注目してくださったというのは、今日初めて知りました。光栄です」と笑う。「私は、その少し前に計算科学の研究者と組みたいと思っていたのですが、お互いが扱えるサイズのミスマッチで実現しませんでした。宮崎さんから声がかかったのは、計算科学が計算できるサイズが大きくなる一方で、実験側も技術の進歩によって作製したり調べたりできるサイズが小さくなってき

て、扱えるサイズがちょうど合致するようになってきた絶妙のタイミングでした」

Si/Geコアシェルナノワイヤって何?

宮崎が注目したSi/Geコアシェルナノワイヤとは、どのようなものだろうか? 深田は、「ナノワイヤは直径10nmほどの細長い構造体で、次世代のトランジスタとして有力視されているものです」と解説する(図2)。トランジスタは、電子機器において信号の増幅や回路のオン/オフの働きをする半導体素子である。トランジスタは微細化によって集積と機能向上を進めてきたが、これ以上の微細化は難しい。そこで新たに提案されているのが、トランジスタの縦型立体構造化である。「都会ではビルを立てる土地がなくなり、ビルはどんどん高くなっているでしょう。その発想と同じで、ナノワイヤを立てて並べることでさらなる高集積化を実現しようとしているのです」。そう話す深田が有望視しているのが、Geのナノワイヤの周りをSiで覆った、コアシェルと呼ばれる特殊な構造のナノワイヤである(図3)。

ナノワイヤをトランジスタとして利用するには、ナノワイヤの中を移動する電荷を持ったキャリア、つまり電子や正孔(ホール)を制御する必要がある。キャリアを制御する方法のひとつが、不純物の添加だ。しかし、ナノワイヤの場合、不純物による散乱でキャリアの移

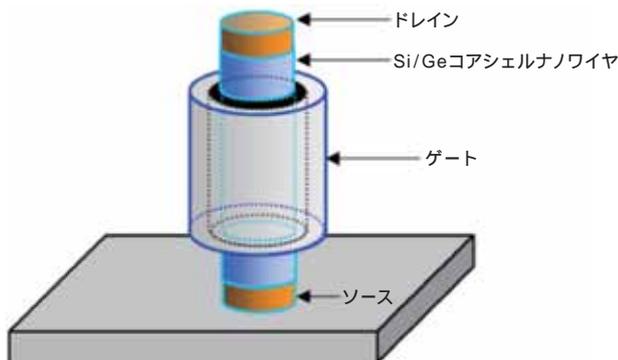


図3: Si/Geコアシェルナノワイヤを用いた次世代縦型トランジスタの模式図
トランジスタはゲート、ソース、ドレインから成る。ゲートに電圧をかけると、ソースとドレインの間のチャネルに電流が流れる。ソース、ドレイン、チャネルにナノワイヤを用いて縦型とすることで、高集積、高速・低消費電力、高い制御性を実現できる。

度が低下してしまうという問題がある。「Si/Geコアシェルナノワイヤならば、その問題をクリアできるのです」と深田は言う。外側のSiにボロン原子(B)を添加すると、ホールが中心のGeに移動して、ワイヤのコア層だけを流れる(図4)。不純物を添加する領域とキャリアの移動領域が完全に分離されているので、不純物散乱によるキャリア移動度の低下を抑制できるのだ。

計算科学が指針を提案し、実験を進める

「私たちは、ナノワイヤでの不純物の状態や挙動について分光技術を使って調べること、世界に先駆けて成功しました。さらに、不純物を添加したシェル層のSiからコア層のGeへホールが湧くように移動している様子も見えています。次は、SiとGeの界面で何が起きているのかを見たい。しかし、残念ながら分光では、そのスケールの現象を見ることはできません。計算科学の助けが必要です。実験だけの閉じた世界で研究ができるかという、もうそんな時代ではありません」と深田は言う。

そこで宮崎は、Si/GeコアシェルナノワイヤのSiとGeの界面における原子や電子の状態についてCONQUESTを用いて計算した(図5)。まだ詳細はお伝えできないが、驚くべき結果が出ている。深田は、「計算結果を見たとき、考えていた電子状態とまったく違ったので、スパークが走ったような衝

撃を受けました。計算科学は、実験では決して見ることができない世界を見せてくれる。とにかくすごいです」と声を弾ませる。

Si/Geコアシェルナノワイヤは次世代トランジスタとして有望視されているが、本当に使えるものを設計し制作するには、キャリアや熱の移動特性、安定な構造、制御方法など、理解しなければいけないことが山ほどある。

深田は、宮崎にこんな要望を出す。「コアシェルナノワイヤの中で何が起きているのか、また、目的の機能を出すにはどのような構造にすればよいかを知りたいのです。これまでは手当たり次第に条件を変えて実験を繰り返すしかありませんでしたが、時間も費用もかかります。計算科学から、こういう構造にすればいいという指針を出してくれば、私たちは安心して実験を進めることができ、時間も費用も大幅に節約できます」

それに宮崎が答える。「計算科学は理想化されたきれいな系で計算するので、実際の物質では予測通りにならないこともあります。そのときは実験データをもとにモデルや計算を補正する。あるいは新しい計算手法の開発が必要になることもあります。計算科学と実験科学が循環することによって、予測精度も高くなり、Si/Geコアシェルナノワイヤを用いたトランジスタが実現に大きく近づくことでしょう。そうした過程で、まったく知られていない新奇の機能をもつナノ構造体を発見できる可能性もあります」

計算科学と実験科学の融合に不可欠なものは「議論」

計算科学と実験科学が融合し成果を挙げるには、必要なことは何か? 二人の声が重なる。「議論です」。そして宮崎は続ける。「計算科学と実験科学では、使う用語も違い、相容れない部分もあります。でも、自分の計算を相手にもっと知ってほしいと言葉を尽くして説明していると楽しいものです。そして、相手の実験をもっと知りたいと思う。互いにそういう気持ちがあることが重要です」

深田は、「地球の地殻で2番目に多く含まれる安価でありふれた物質であるSiを使って、新しい機能を持つ材料やデバイスをつくりたいのです。例えば、Siナノワイヤを用いて、従来のSi太陽電池の性質を凌駕するような、太陽光エネルギーから電力への変換効率が高い太陽電池の開発を目指しています。ぜひ、Siナノワイヤ太陽電池の開発でも宮崎さんと組みたい」と言う。ラブコールに答えて、「ナノワイヤの構造や配置の最適化が発電効率に効いてきますよね。計算科学の得意とするところですよ」と宮崎。

計算科学と実験科学の融合は、科学技術の大きな進展に不可欠となってきている。今後、ますます融合が進み、それぞれ単独では得られなかったような画期的な成果が次々と出てくることだろう。

(文・鈴木志乃/フォトンクリエイト)

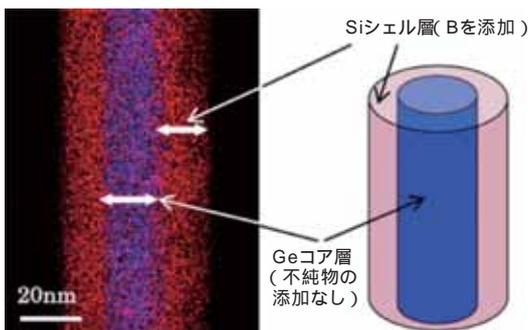


図4: Si/Geコアシェルナノワイヤの組成分析と模式図
Si/Geコアシェルナノワイヤは、Geのコア層とそれを覆うSiのシェル層から成る。シェル層にボロン原子(B)を添加すると、ホールがシェル層からコア層に移って、コア層を移動する。

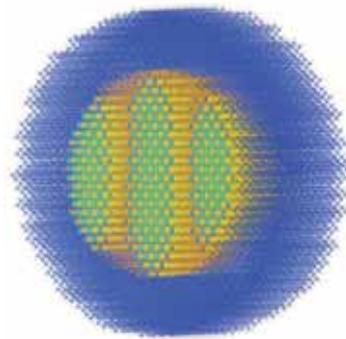


図5: オーダー N法第一原理計算で得られたSi/Geコアシェルナノワイヤの電子状態
Si/Geコアシェルナノワイヤは、Ge原子(オレンジ)が並んだコア層と、その外側のSi原子(青)が並んだシェル層から成る。占有状態の電子(不純物を添加することによってホールになる)の波動関数のひとつを黄色で、その断面を水色で描いている。これは、ホールによる電流がGeのコア層に閉じ込められていることを示している。

計算科学で 強い鋼をつくる

「その5mm左をたたいて」
「ここでいいかい？」
「OK。プレス機の圧力を上げられない？」
「いやぁ、駄目だね。さっきからエラー音が鳴りっぱなしだよ」
「この数値だと、中までひずみが入らない。」

「圧力を限界まで上げてほしいんだ」
「無茶言うねえ。ちょっとやってみるよ」

日本製鋼所 JSW 室蘭製作所、
3000トンプレス機のおペレーター室。
強い鋼をつくる その夢の実現ため、
高精度の数値解析シミュレーションを携えた
井上忠信グループリーダーと、精緻な加工技術を有する
職人たちとの共闘が繰り広げられた。

日本製鋼所室蘭製作所 3000トンプレス機

超微細化によって 強度2倍の鋼をつくる

井上忠信がNIMSの前身である金属材料技術研究所に入ったのは、1998年2月。1997年度から始まっていた「新世紀構造材料プロジェクト」、通称「超鉄鋼プロジェクト」に加わるようになった。それは、従来の

2倍の強さの超鉄鋼材料開発を目指した10年プロジェクトだった。

鋼の強度を高めるには、モリブデンやクロムなどを混ぜる合金化設計が主流だった。しかし、それらは希少元素であり安定的な供給が危惧されていることから、希少元素を使わずに強度を高める方法の実現が切望されていた。そこで注目されたのが、

結晶粒の超微細化である。

鋼は、小さな結晶の粒の集合体である。その結晶粒が小さくなるほど強度が高くなることは、以前から知られている。一般に使用されている鋼の結晶粒は直径 $10\mu\text{m}$ ほどだ。「超鉄鋼プロジェクト」では、結晶粒を従来の10分の1、つまり $1\mu\text{m}$ 以下に超微細化することで、強度を従来の約2倍

に当たる800MPaにすることを目標として掲げた。800MPaとは、1mm²当たり800N(約82kg)の負荷をかけるまで永久変形しないことを示す。

結晶粒を1μmにする プロセスパラメータを突き止める

井上の専門は理論科学と計算科学であり、主に異種材料の接合体や複合材料の研究を行っていた。「鋼を相手にするのは初めてで、大型構造材料の製造現場を見たこともない。素人同然でしたから、鋼の結晶粒の微細化に関する文献を片端から読み、主要鉄鋼メーカーから集まったプロジェクトメンバーに話を聞いてまわりました。そして、実験のデータに普遍性がないことが問題だと気が付いたのです」

鋼に大きな力を加えると内部にひずみエネルギーが蓄積して結晶粒が微細化し、強度が高くなることは、数多くの実験で確かめられ、論文もたくさん出ている。論文にはそれぞれ、加工率(圧下率)が何%の場合、つまり鋼の厚みを何%減少させると結晶粒径はいくつになり、強度がいくつ向上した、と書かれている。「実験のデータに普遍性がない」とは、どういうことだろうか。

「鋼に力を加える方法には、回転するロールの間に通して加工する圧延と、金型でたたくあるいはつぶして加工する鍛造(たんぞう)があります。圧延と鍛造では同じ加工率でも鋼に加わる力は違い、その結果、ひずみの入り方も変わります。さらに、加工の速度が違えば、発熱や抜熱もあり、鋼の温度も一定ではなくなります。加工率ではなく、加工に付随したさまざまなプロセスパラメータと組織の関係を定量的に理解しなければいけないのです。それができれば、圧延でも鍛造でも、さらには鋼の大きさにかかわらず、結晶粒を1μmにするにはこういう条件のもとで加工をすればいいと言えるはずです」

そこで井上は、微小試験片を用いて温度、ひずみ速度、ひずみ、冷却速度など主要なプロセスのパラメータを計測し、形成された組織との関係を記録していった(図1)。当時国内外では、強加工のプロセスが提案され、繰り返し圧縮することで結晶粒を0.1μmにす

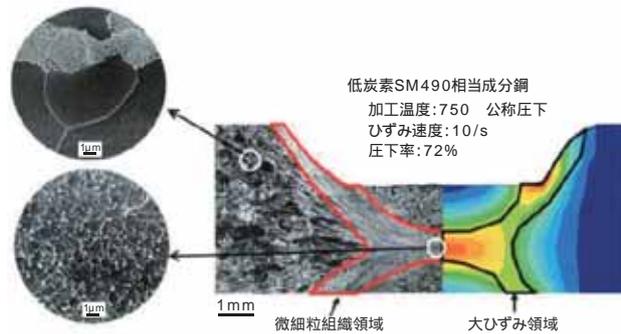


図1: 結晶粒の微細化の実験とシミュレーション
右は、鋼の小型試験片を圧縮した後の断面と、シミュレーションで予測されたひずみの分布を組み合わせたもの。赤色ほど大きなひずみが入っていることを示す。左の丸い写真の通り、鋼の結晶粒は直径10μmほど(左上)だが、圧縮によって大きなひずみが入ると1μmの超微細粒(左下)となる。

ることに成功し、強度が2ないし3倍になったと発表された。「そちらの方が華やかな成果で注目集まります。しかし、私たちは超微細化した鋼の製造を確実なものにするには、プロセスパラメータと組織の関係の定量化が絶対に必要だと考え、データを取り続けました」

そして、5年ほどかけてついに、結晶粒を1μmにするためのプロセスパラメータを明らかにした。

棒材、そして厚さ18mmの 鋼板製造にも成功

井上は、当初からもうひとつ問題を感じていた。「これまでの実験の多くが1cmにも満たない微小試験片を用いたものです。一方で、私たちがつくらなければいけないのは、ビルや橋梁、自動車、造船などに使われる構造材料ですから、その大きさのギャップを埋める必要があります」

その点については、「超鉄鋼プロジェクト」のほかのチームが着々と進めていた。井上らが微小試験片の基礎実験から得た知見などを元に、2000年には、表面から中心まで1μm以下の結晶粒で構成された断面が18mm角、長さ約20mの棒鋼の製造に成功。続いて2001年には、0.5~0.6μmの結晶粒から成る厚さ18mm、幅80mm、長さ約2m、重量約20kgの鋼板の製造に成功した。いずれもNIMSの圧延機で実験後、外部の大型の圧延機によってつくられた。鋼の圧延は鋼が真っ赤に見える800°C以上で行なうことが多いが、500~600°Cで圧延した点が大きいため特徴である。この温度の方が、ひずみが蓄積し、結晶粒が超微細化しやすいのだ。

次の目標は、厚さ25mm以上に設定された。土木や建築などの分野では18mmでは薄く、より厚い大型の鋼板が求められているのだ。圧延ではできないことがわかってきたため、新しい製造プロセスの開発が必須だった。いよいよ井上の計算科学の研究者としての本領発揮だ。

鉄鋼マンたちと実現した 35mmの厚鋼板

井上は、微小試験片の実験から得られたプロセスパラメータを元に、1μmの超微細結晶粒から成る大型厚鋼板の製造プロセスの数値解析シミュレーションを行なった。項目は3つ。組織の予測、鋼板形状の予測、装置負荷の予測である。「材料の特性を決める組織の予測にばかり目が行きがちですが、形がなければ構造材料になりません。材料の特性をつくりながら形状をつくる、つまり組織と形状の予測を両立して行なうことが重要です。そして、装置を壊すわけにはいきませんから、装置負荷の予測も欠かせません」と解説する。

シミュレーションで終わっては意味がない。新しい製造プロセスを実機に適用し、実際に鋼板を製造してみる必要がある。そこで、日本製鋼所に協力を依頼したところ、室蘭製作所の大型鍛造機のひとつ、3000トンプレス機を使わせてもらえることになった。

早速、井上はシミュレーションで得られた製造プロセスを携えて室蘭へ。「1回目は、まったく上手くいきませんでした。装置について一部の仕様しか分かっていなかったため、シミュレーションの精度がとても低かったのです」

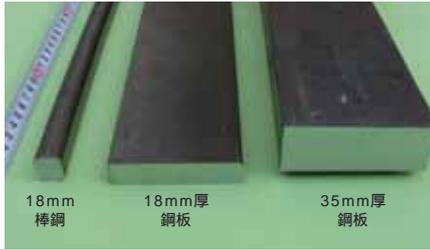


図2: NIMSが開発した超微細粒の厚鋼板
35mmの厚鋼板は、日本製鋼所室蘭製作所の3000トンプレス機で製造した。スクラップを利用していることから、省資源で環境負荷低減に優れている。

シミュレーションの精度を上げるには、鋼をたたく金敷の形状や圧下速度、加える圧力の変化、鋼板を掴んでいるマニピュレータへの荷重や動き……知りたいパラメータは山ほどある。しかし鍛造の現場は、機器の操作に経験と勘がものをいう職人の世界だ。「部外者はプレス機から離れた場所での見学しか許されませんでした。それでは何も分からないから、もっと近くで見たいと必死に訴えました。すると、なんと現場責任者の英断で、職人の聖域とも言えるオペレータールームに入れてもらえることになったんです。さらに、固定カメラによる加工中のビデオ撮影も許可されました。わずかな情報も見逃すまいと、鋼を加工する様子、プレス機、マニピュレータ、オペレーターの操作とモニターを見つめ続けていました」

実験が終わるとつぐばに飛んで帰り（道中では撮影したビデオを繰り返し見続け）、実験で明確になった情報や新たに提供してもらった装置の仕様などを反映させてシミュレーションを行なう。得られた製造プロセスを実機で試す。それを1年間で5回ほど繰り返した。そして2004年、板の表面から中心部まで1 μ m以下の超微細結晶粒から



「自由鍛造は不均一だからこそ内質(=内部組織)と外形の両立が出来るのです、の言葉通りの結果を得られた当時は勇気が湧いた記憶があります」(日本製鋼所室蘭製作所 落合朋之氏)

成る厚さ35mm、重量約90kgの厚鋼板の製造に世界で初めて成功した(図2)。「高精度な数値解析シミュレーションと、それを忠実に再現することができる精緻な加工技術が結合することによって可能になった成果です」と井上は言う。

強度と靱性、未踏の領域へ

「超鉄鋼プロジェクト」は、当初の目標を達成して2005年度で終了した。しかし、井上は製造した超微細結晶粒鋼板の特性試験をする中で、ひとつの疑問を感じていた。「微細化によって強度と靱性が上がると言われています。教科書にも書いてあります。確かに強度は上がるのですが、靱性が上がったというデータは出ていなかったのです」

強度とは力が加わっても変形しない性質であるのに対して、靱性とは粘さをいう。材料は、強度が上がるほどかたくなり、大きな力がかかると、パリンと割れる。構造材料がそのような破壊を起こすと、重大な事故につながってしまう。構造材料は、強いだけでなく、粘さを伴わないといけなないのだ。

「私たちは、単なる結晶粒の超微細化だけでは靱性は上げられないという、従来の説を覆す事実が気が付いてしまいました。では、強くてねばい鋼をつくるにはどうしたらいいか。それが次の課題です」

井上は靱性設計グループを立ち上げてこの問題に取り組み、2008年には、1800MPaと強度が非常に高く、かつ靱性の高い鋼の製造に成功。「この鋼は、大きな力が加わると微小な亀裂が無数に入っ竹が裂けたようになりますが、パリンと折れることはありません。結晶粒のサイズだけでなく、結晶の方向も制御して繊維状にすることで、強くなやかな鋼を実現しました」。この鋼を用いた高強度ボルトを開発するとともに、より強度が高く、より靱性が高い、究極の鋼の実現に挑んでいる。

計算科学の本質は予測すること

部外者が大型鍛造プレス機のオペレータールームに入ることは異例である。なぜ日

本製鋼所は許可したのだろうか。現場責任者の1人が、井上にこう語ったという。「鉄鋼の製造技術はすでに成熟し、新しいことはこの20年ほどありません。今はいかに効率よくつくるかだけで、夢がない。そうした中で、新しい製造プロセスを試せるチャンスというのは、ワクワクします。面白いことは、みんなやりたい。現場も活性化しますから、日本製鋼所にとってもプラスでした」

井上は結晶粒の超微細化の研究に携わるまで、実用化はほとんど意識していなかったという。しかし、今は違う。「研究成果を社会に役立てることは、工学の使命です。研究成果の実用化にあたっては、計算科学が非常に重要な働きをします。精緻なシミュレーションを用いることで、発想から実用化までの時間を飛躍的に短縮し、社会の要請に迅速に応えることができるからです」

井上は最後に、こう語った。「計算科学の本質は、予測です。実験の後追いで終わるのではなく、基礎実験で得られる情報を理解して、計算から新しい製造プロセスや実験方法を提案、予測し、実証する。それでこそ、計算科学と実験科学の結合です」

(文・鈴木志乃/フotonクリエイト)



井上忠信

物質・材料研究機構
元素戦略材料センター 構造材料ユニット
靱性設計グループ グループリーダー

Round-table talks

理論屋×計算屋×実験屋 それぞれの言い分を聞いてみよう

研究の世界には、日々装置と向き合って実験を行う「実験屋」、紙とペンを友に数式と向き合う「理論屋」、モニタに向き合いパソコンを駆使して研究を行う「計算屋」がいる。お互い少し距離を感じつつ、でもお互いの必要性も感じている、そんな微妙な関係。2015年6月22日、筑波大学で、材料研究における4人の科学者がそれぞれ、理論屋、計算屋、実験屋の立場から、お互いに対して抱いているイメージや、研究に対する想いなど本音を語り合う座談会が開催された。その模様をお届けしよう。



井上純一

物質・材料研究機構
先端の共通技術部門
理論計算科学ユニット
材料特性理論グループ
主任研究員

理論屋。専門は物質・材料に関する物性物理の理論研究。量子力学や統計力学等を使って物性に単純な描像を与えることに興味を持つ。



小野倫也

筑波大学
計算科学センター
准教授

計算屋。電子デバイスなどの高性能化を目的に、コンピュータシミュレーションで半導体材料の量子力学的性質を調べる研究をしている。



佐久間博

物質・材料研究機構
環境・エネルギー材料部門
環境再生材料ユニット
ジオ機能材料グループ
主任研究員

実験屋であり計算屋。環境やエネルギー関連で利用可能な鉱物について、実験と計算の両面から研究している。



相澤俊

物質・材料研究機構
先端の共通技術部門
表面構造・物性ユニット
電子顕微鏡グループ
主席研究員

実験屋。グラフェンなど単結晶の表面の物性を研究。大学で表面科学の研究室に入って以来、表面の物性研究一筋。



理論屋、実験屋、計算屋は意外と相思相愛

小野 さて今回は理論屋、計算屋、実験屋の立場から本音を語り合うということですが、一般に実験屋に関してはイメージしやすいと思います。一方で、理論屋と計算屋との違いは分かりづらいと思うのですが、皆さんはどう思われていますか。

井上 強いて言えば、ある現象に対して最も重要なコアの部分抽出してきて、できる限りシンプルに記述しようとするのが理論屋、実際の物質に寄り添い、現象をよりリアルに計算機を使って再現しようとするのが計算屋という区別が可能なと思います。

佐久間 同意見です。計算屋は、ある具体的な研究対象があり、その物性を知るために、計算機を使って計算する人。しかし、そのためには基となる理論が不可欠で、それを考えるのが理論屋だと思いますね。

相澤 私は、私の理解できないことをやっているのが理論屋(笑)、それを理解できるように、分かりやすく示してくれるのが計算屋だと思っています。理論屋と計算屋とは、研究のスタンスが異なるということでしょうか。

井上 研究スタンスの違いというのは、具

体的には、研究対象について、理論屋は相違点よりも共通点や普遍性に興味があり、計算屋は共通点よりも相違点や特異性に興味がある人、とも言えるのではないのでしょうか。

佐久間 確かに井上さんの言われる通り、計算屋としては、物質によって異なる特性が出てきたときの方がうれしいですね。

小野 私は恩師が素粒子理論の出身だったこともあり、理論屋と計算屋で研究のスタンスが異なるという感覚はありませんね。素粒子の研究では、皆が普遍的な法則を導き出したと考えて研究していますので。ある現象が理論的にうまく説明できたときに快感を覚えるという点では、理論屋と計算屋は似ているのではないかと思います。

相澤 では、実験屋については、皆さんはどう思われていますか。

小野 私にとって実験屋は、実験をガンガンやって、多くのデータを取得し、その中から現象を見つけ出して摂理を考える人ですね。その際に、データの解析を支援するのが、実験屋にとっての計算屋の役割であると解釈しています。

佐久間 実験の支援は計算屋の重要な役割であり、私にとって実験屋に必要とされる

ことは喜びです。また、実験によって、想像もしていなかった現象が発見されるという場合も数多くあるので、実験屋をうらやましくも思っています。その一方で、計算屋としては、計算結果から新たな物性や現象を予測したり、予言したりできないかいつも考えていて、実験屋に対して密かにライバル心も抱いています。また、理論屋が予測できないことを計算屋が計算によって予測するという場合もあるので、3者がお互いにうまく補い合うことが重要だと思います。

小野 私も計算屋として、新たな発見をしたいという気持ちを強く持っています。実験屋の予想を覆すような計算結果が得られて、それを実験によって確認してもらおうというのが目標です。一方で、実験屋が実際に行っている実験を、計算で忠実に再現するというのは、今の計算機の性能では困難です。そのため、影響の少ない要素をできる限りそぎ落とすわけですが、制約条件の中から、いかに意義のある結果を引き出してくるかが、計算屋の腕の見せどころであると考えています。

井上 ひと口に実験屋と言っても、色々なタイプがあると思います。極端に2分化すれば、まず測定をして、その結果から何かを主張しようとするタイプ、逆にまず主張したいことが

先にあつて、それをデータで裏付けできるように実験設計を綿密にするタイプです。前者は計算屋、後者は理論屋と馬が合いやすいという印象を持っています。

相澤 私自身は、前者に近いですね。実験屋として最も面白いと感じる瞬間は、想像もしなかった実験結果が出ることです。発見することに喜びを感じますね。

ところで、先ほど佐久間さんから、計算屋は理論屋の理論の上に成り立っているといったお話がありましたが、井上さんはその点についてどう思われますか。

井上 絶えず、社会への貢献を求められるこのご時世、今日のお題の3者のうちで理論屋ほど実社会からかい離している存在はないのではないかと感じていますね（笑）。計算屋にとって礎たりえる理論は、ほんのひと握りの天才が作り上げたもので、私を含む大半の理論屋も天才が作り上げた理論を弄っているだけなんです。文字通り現物に即している点で、実験屋や計算屋の方がより社会への貢献度は高いと思います。とはいえ、私も常に社会に役立つ理論を構築したいと、もちろん思っています。

小野 確かに、理論屋よりも計算屋の方が社会への還元を強く求められるということがありますよね。とはいえ、計算屋が社会に貢献できるのも理論屋のお陰であつて、社会にはもっと長期的な視野に立つて科学を見守っていただきたいですね。

共同研究が始まるきっかけは？

相澤 皆さんは、共同研究を進める上で、ど

のような点に留意していますか。私の場合、実験によって得られたデータからだけでは何も言えません。その中から新たな発見を得るためには、データ解析が不可欠です。従つて、計算屋との共同研究はもはや当たり前で、計算屋がいなければ、私の研究は進みません。そのため、私は、気心の知れた相性の良い計算屋をパートナーに選ぶようにしています。

一方で、理論屋との付き合いはほとんどありませんが、最近であれば、「トポロジカル絶縁体」など新たな物理現象が続々と発見されており、それに伴い、新たな理論の構築が求められています。このような現象を実験によって再現する場合、実験結果を解析するには、新たな理論が必要で、理論屋と共同研究を始めるきっかけになりますね。

井上 私の場合、実験屋から「一見すると整合性がとれていないように思える結果を論理的に説明できないか？」といった相談を受けたのを機に、共同研究を始めた経験があります。このように、「パズルを一緒に解く」といったケースの方が、共同研究は進めやすいですね。逆に、お堅いセミナーでの発表に代表されるような、発表者側が「既にできあがっている」と考えている話に対しては、なかなか食い込むのが難しいですね。

小野 私の場合は、最初、実験グループの中で、計算を担当するところから出発しています。その後、実験屋から個人的に相談を受け、共同研究に発展するケースが大半です。飲み会や懇親会がきっかけになる場合もあります。要するに、フォーマルな場ではないということです（笑）。

佐久間 少し前までは、「計算屋の言うことは信じない」という実験屋が多かったように思います。私自身、材料の表面構造をシミュレーションによって示したところ、「実際に見てきたような言い方をするな」と怒られたこともあります。しかし今は、互いに対する理解も深まってきているので共同研究はしやすくなっていますね。

さて、最後に、皆さんがどのような将来像を描いているか、伺いたいと思いますが、いかがでしょうか。私自身は、3者がより深い信頼関係を築き、補完し合いながら、材料科学に貢献していけるといいなと思っています。

小野 私はまずは、計算機を使って材料の物理を予言したり、材料を設計したりできる計算屋を目指したいですね。

相澤 実験によって面白い発見をして、それを理論屋や計算屋に理論的に証明してもらう、新たな理論を確立してもらうというのが私の目標ですが、逆に、計算屋に「こういった実験をやってみてほしい」といった提案をいただき、新たな材料開発につながられたらうれしいですね。

井上 私は、理論屋の真骨頂は「どのような問題を作るか」に現れると思っています。現在、ネット通販サイトなどではリコメンド機能がありますが、近い将来、例えば、論文を出版すると「あなたへの次のお勧めの研究テーマはこれです」と提示される時代が来ると勝手に想像しています。その中で、私はそういったリコメンド機能では決して提示されないような、オリジナルな研究テーマをやっていける理論屋になりたいですね。

（文・山田久美）



現代に住む私たちにとって、コンピュータはごくありふれたものです。ケイタイ、パソコン、家庭の電気製品、自動車のナビ、よく当たる天気予報など、コンピュータなしの日々は考えられません。

ところが今から100年前の人びとにとって、コンピュータの存在など夢にも考えられないことでした。計算といえば、紙に書いて筆算をするか、ソロバンをパチパチとはじくかが関の山で、科学者や、建築家のような専門家が、計算尺などを使って複雑な演算をこなしていたのです。

20世紀のはじめ、科学や技術の世界では新しい発見や開発がつぎつぎに行われ、世の中は大きく変わりました。人びとは、こうした科学技術が発達・普及することで、未来の生活がどのように変わっていくか、大いに関心をもつようになりました。そこで、世界中でいろいろな人がいわゆる“未来予測”を行いました。ジュール・ヴェルヌが未来を予言する小説を書いて注目されたのもこのころのことです。

日本でも、1901年1月2日と3日の報知新聞(現在の読売新聞)に「20世紀の予言」が掲載されました。予言は23項目について述べられています。20世紀の終わりまでに、どんな発明がなされて、私たちの生活がどのように変わるのか。

面白いのは、この予言が、「無線電や電話が発達して、世界のどこの国の人びとも自由に対話ができるようになる」や、「暑寒しらず。……空気を送り出す新しい機械が発明されて、部屋の中は快適になる」、「電気の世界が訪れる。……エネルギーの中心は電気になる」、「鉄道の発達。……東京、神戸間は2時間半で結べるようになるだろう」など、かなりの確に現在の私たちの暮らしを言い当てていることです。

こうした予言のなかで、一つ不思議なのが、コンピュータの出現をまったく予想していないことです。

計算のスピードをあげる機械ができることや、それにもなつて情報社会が訪れるであろうことには、ひとことも触れて

いないのです。

100年前の人びとには予想もつかなかったコンピュータの出現。しかし、現実の世の中では、1946年に世界最初のコンピュータが開発されてから、その進歩のスピードはまことにめざましく、いまや情報社会の担い手としてあらゆるところで使われるだけでなく、科学や技術の最前線で大活躍しています。

特に、コンピュータを使ったシミュレーションは、化合物や分子の中の原子のふるまいを可視化したり、宇宙の構造を調べたり、建築物の強度を測定するのになくてはならない手段になってきています。

たとえば、原子や分子からなる物質とエネルギーでつくられていると考えられてきた私たちの宇宙は、近年、そのほとんどが暗黒物質・暗黒エネルギー、つまり未知の物質やエネルギーでできているということがわかってきました。こうした宇宙の構造は、コンピュータ・シミュレーションによってどんどん解明されてきています。また、1920年頃にイギリスの気象学者リチャードソンが手計算で予報を試み、1950年に数学者フォン・ノイマンが初めてコンピュータを使った予報計算に成功して以来、気象予報の精度もコンピュータ・シミュレーションの進化とともに格段に向上しています。

コンピュータ・シミュレーションを中心にした計算科学は、20世紀の人間が生み出したもつとも高度な手法といってもいいでしょう。

コンピュータ・シミュレーション

文:えとりあきお

題字・イラスト:ヨシタケシンスケ



えとりあきお：1934年生まれ。科学ジャーナリスト。東京大学教養学部卒業後、日本教育テレビ(現テレビ朝日)、テレビ東京でプロデューサー・ディレクターとして主に科学番組の制作に携わったのち、『日経サイエンス』編集長に、日経サイエンス取締役、三田出版株式会社専務取締役、東京大学先端科学技術研究センター客員教授、日本科学技術振興財団理事等を歴任。

NIMS FORUM

10/7 Wed.

第15回

NIMSフォーラム

「超」のつく材料と技術 もってます

平成27年10月7日(水) [10:00~17:30(予定)]

東京国際フォーラム ホールB7

概要

特別講演者決定!

ボーイング・ジャパン社長 ジョージ・マフェオ氏

「Making Commercial Airplanes...with Japan」

東京工業大学教授 細野秀雄氏

「マテリアルズ・インフォマティクスがもたらす材料開発の新フェーズ」

その他、マテリアルズ・インフォマティクスをテーマとしたパネルディスカッションや、

NIMSの成果講演、精選されたポスター発表が50テーマ以上。

企業個別相談ブースも好評につき、今年は拡充いたします。

講演タイトルは変更になる場合があります。

入場無料