

材料開発におけるコンピュータ利用技術

福島 敏 夫*

1. はじめに

材料開発を行ううえでコンピュータがどのように利用されるかというテーマについての執筆を仰せつかり、ミスキャストではないかといういささかの戸惑いとともに、考えを整理する良い機会だと思い、非才を顧みず、敢えて引き受けることにした。ここでは、環境にも配慮したコンクリート系複合材料を建設新材料として開発する場合における製造・選定・評価のためのシステムとしての環境調和型材料設計（エコマテリアル・デザイン）におけるコンピュータ利用の可能性（データベースとエキスパートシステムおよびLCA的評価）に焦点を当てて概略的に述べるとともに、耐久性評価の一環として日頃から行っている、寿命予測法に関する研究の方法論としてのコンピュータ・シミュレーションの一端を紹介してみたいと思う。

2. 材料開発におけるコンピュータ利用の必要性

2.1 コンピュータ・エクスペリメント (Computer experiment)

新材料およびその有効利用技術の開発は、建設構造物の高性能・高機能化のための“鍵”となることは、歴史的に見ても異論は少ないと考えられる。この時、新しい特性を持った材料が出来上がってから、その有効な用途を探るといって“シーズ対応型の材料開発”とともに、あらかじめ要求性能・機能を考えて、それを満足する特性を持った材料を開発するという“ニーズ対応型の材料開発”の二つの流れが考えられる。1990年代初期の“新素材・新材料”ブームは、前者の形が多かったが、最近の環境調和型材料（エコマテリアル）などの開発では、後者の形のものが多い。この際、目標とする材料特性を持った新材料を開発したり、建設材料としての選定・評価を行ううえでの材料設計において、コンピュータの利用が有効であると考えられる。

従来の新素材の開発では、最初にパイオニア的に行う人は、絨毯爆撃的にトライ・アンド・エラーの形で風潰しに実験に取り組みざるを得ないので、10のうち9つ

までは失敗続きで、その中で1つ成功すれば、御の字というのが実状であった（後発で行う人は、この点ではリスクが少ない）。特に、新しい三元合金やガラスの開発にあたっては、その組み合わせは数十万通りにもなり、相図の作成に、血の滲むような膨大で煩雑な実験を必要とし、その意味では、長年の経験と勘がものを言う状態であった（このことは、短繊維補強コンクリート系の新材料の開発でも言えることであった）。しかし、コンピュータが高速化、大容量化し、その性能が昔に比べて格段に進歩した現在では、開発すべき材料特性を格子定数やイオン半径およびその組成に基づいて、コンピュータ・シミュレーションにより理論的に推定・予測することが可能となり、ある程度目測を付けてから実験的な材料開発に入るということで、実験計画法上も、投資効率においても、その無駄とリスクがかなり改善されつつある。最先端の新素材開発では、コンピュータ・エクスペリメントと称されるこの手法が有力となってきている。この意味で、今後新しい特性を持った材料開発を効率よく行ううえでは、コンピュータの利用は、ある程度必要不可欠でもある。地球環境問題との関連でその重要性が叫ばれつつある、リサイクル性を配慮したエコマテリアル開発の一環として、鉄鋼における合金元素を出来るだけ減らし、フェライトとベイナイトとマルテンサイトの3つの相の有効な組み合わせで、強度とじん性の両方の向上を実現しようとする場合の友田ら¹⁾によるコンピュータ・エクスペリメントの一例を図-1に示す。

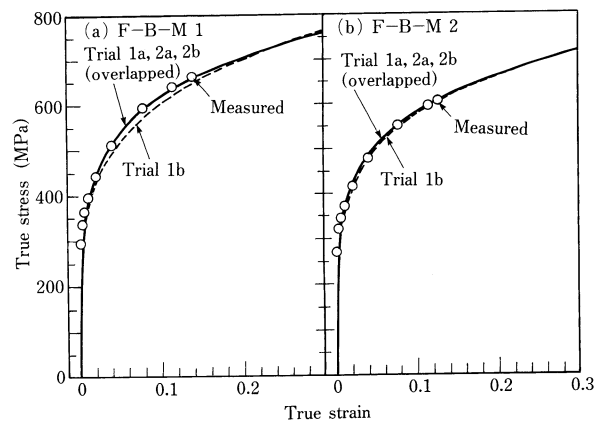


図-1 コンピュータ・エクスペリメントの一例
(エコマテリアル型鉄鋼の設計例)¹⁾

* ふくしま・としお／建設省建築研究所 第二研究部 複合材料研究官（正会員）

2.2 材料開発におけるコンピュータによるエキスパートシステム

他分野で開発された新素材・新材料を建設分野に導入したり、建設新材料を開発し、その選定・評価を行うにあたっては、どういうデータベースをもとに、要求性能の設定と性能評価の組み合わせで総合的に判断するかの判断システムを構築する必要がある。このシステムをコンピュータ・ソフトウェアに乗せる一連の手続きは、「新素材・新材料の建設材料としての利用のための材料設計とエキスパートシステム」と呼ぶべきものであり、この体系が完成されれば、新素材・新材料の建設分野への有効利用あるいは建設固有の新材料の開発に大いに役立つと考えられる²⁾。図-2および図-3にこのような材料開発に関連したエキスパートシステムの考え方を示す²⁾。これまでも、ガラスの材料設計のエキスパートシステム (VitrES)³⁾や、事例ベースを用いたポリマー加工工程設計支援システムなどいくつかの材料開発に関連したエキスパートシステムが開発されている。仕様規定から性能指向の世の中に向かう趨勢の中で、性能に対応した、目標とする材料特性を持った材料の製造・選択・評価のための材料設計は、今後必要不可欠なツールになるといえる。その際、コンピュータとの対話型のやりとりが有効になる。筆者らは、繊維補強コンクリートを中心として、建設新素材の設計システムとその応用のために、このコンピュータ利用によるエキスパートシステムの構築を図り、特に、短繊維補強コンクリートについては、力学的特性を主として、そのデータベースの整備とともに、その体系をほぼ整備した²⁾。このシステムは、建設、新素材、コンピュータの各分野の専門家の相互協力で出来上がったものであるが、今後、その完成に向けての粘り強い努力と協力が必要である。

2.3 耐久性評価・予測におけるコンピュータ利用

建築用高分子仕上塗材にも見られるように、新素材・新材料の中には、高耐久性を謳ったものの、それが既存の材料と比較して、どの程度の長寿命性を保証するのか不明なものが多い。また、他の性能・機能の大幅な改善を謳ったものの、ある想定される条件でその性能・機能が発揮されるための前提であるところの持続性とも言うべき耐久性が不明なものも多い。このような時、その耐久性が分かるまで屋外暴露試験を行うとなると、あまりにも長年月を必要とし、その耐久性が分からないために、あるいは、その間により優れた特性を持つ新材料が出現し、対象としていたその新材料は、結局のところ使われないまま放置されることになってしまう。また、過去の屋外暴露試験のデータや既存建築物に対する実態調査結果からは、今後の耐久設計上、有用な知見が得られるとしても、今後、地球環境条件や資源状況の変化も予想されることから、それが、未来の耐久性を推定するのにそのまま利用できるとは限らない。このことは、コンクリー

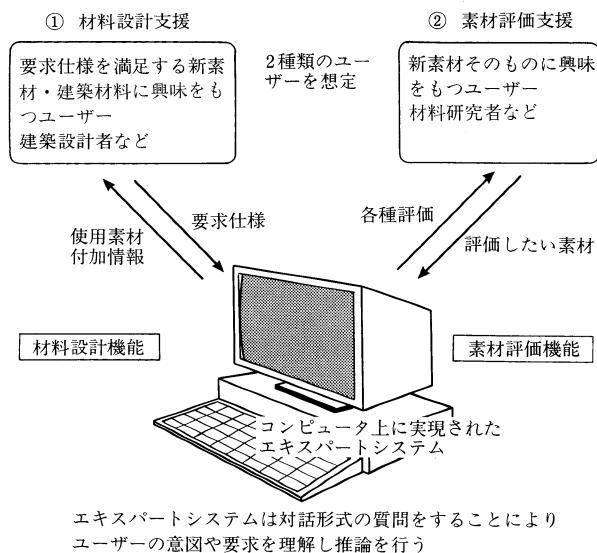


図-2 材料開発でのエキスパートシステムの考え方 (その1)²⁾

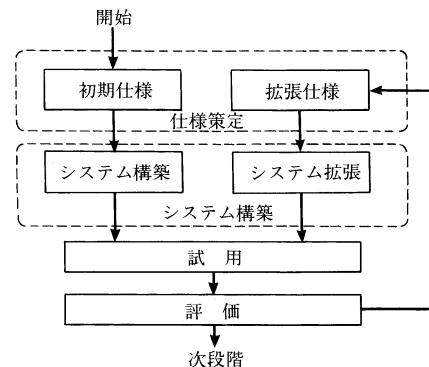


図-3 材料開発でのエキスパートシステムの考え方 (その2)²⁾

ト系新材料、高分子系新材料、金属系新材料、複合材料系新材料いずれの場合も実状は変わらない。

このために、基本的原理に基づいて劣化現象のモデル化を行い、理論的解析によって、劣化進行式を導き、また、それに基づいた新材料の劣化進行状況のコンピュータ・シミュレーションを行い、耐久性の評価・予測を行う必要も生じる。劣化現象の理論的解析は、適当な初期条件と境界条件のもとで連立偏微分方程式を解くことになる。劣化現象は、大概の場合、化学反応を伴う拡散方

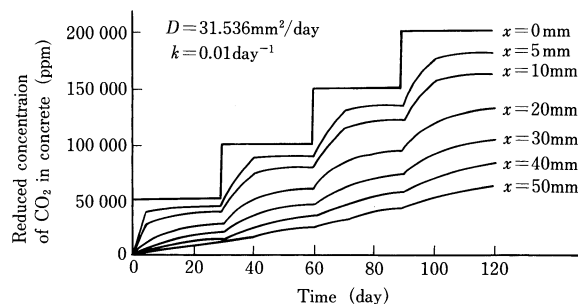


図-4 大気中の二酸化炭素濃度の増大傾向を模擬したステップ応答下でのコンクリートの中性化進行のコンピュータ・シミュレーション結果の一例¹⁾
(ステップ幅 T_S ; 30日, ステップ濃度 C_S ; 5000 ppm, 拡散係数 D ; 31.56 mm²/day, 炭酸化反応速度定数 k ; 0.01 day⁻¹, 温湿度条件 20°C, 60%RH)

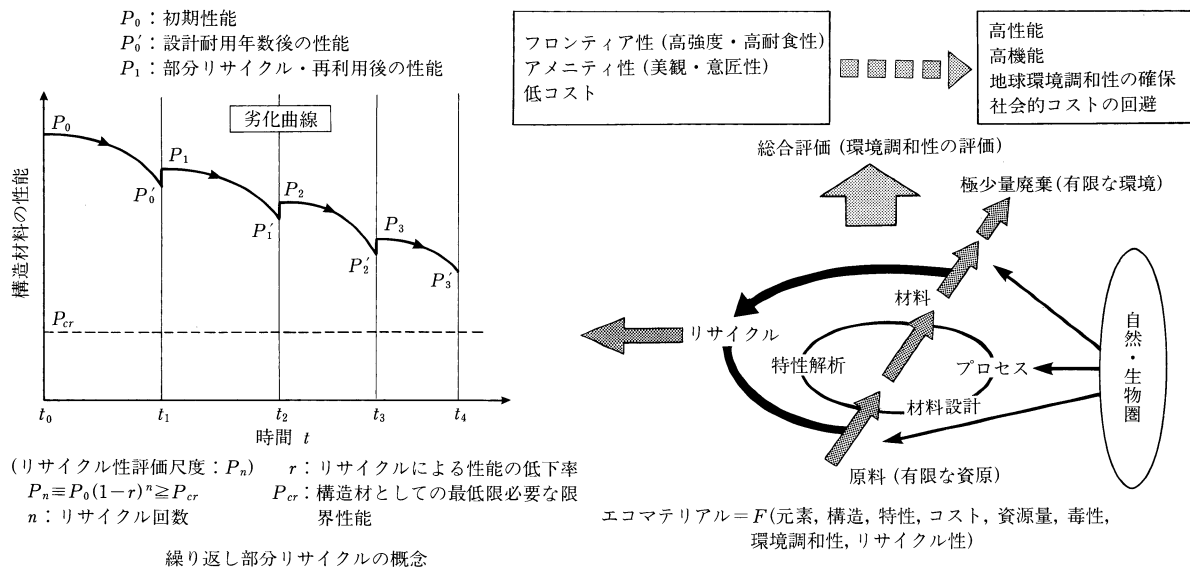


図-5 エコマテリアルの概念⁹⁾

程式の組み合わせになるが、Laplace 変換法でもって解析解を求める場合、誤差関数と指数関数の組み合わせの複雑な関数の積分を含む。このため、コンピュータ・シミュレーションを行うには、昔は、大型コンピュータを使っても数日以上も要した複雑な計算になるが、昨今のパーソナルコンピュータの性能・機能の充実と便利な数学演算ソフト「Mathematica」の開発で、少なくとも数時間位で計算を済ませることが可能となった。また、通常劣化外力を一定とする場合でのコンピュータ・シミュレーションだけでなく、最近では、地球環境条件の変化に対応した劣化外力の時間変化をも取り入れた理論的解析の結果に基づくコンピュータ・シミュレーションおよび、劣化外力の時間変化をモデル化した新しい促進劣化試験での劣化進行状況の推定もある程度可能となった。図-4に、大気中の二酸化炭素濃度の増大傾向を模擬したステップ応答下でのコンクリートの中酸化進行のコンピュータ・シミュレーションの結果の一例⁹⁾を示す。

このように、新材料の、新しい環境条件や資源状況の変化に合わせた未来の耐久性評価・予測には、コンピュータの利用は非常に有効であると思われる。

2.4 環境調和型材料 (エコマテリアル) の開発と環境調和型材料設計 (エコマテリアル・デザイン) および環境調和型生涯設計 (エコライフサイクル・デザイン) とコンピュータ利用

コンクリートを始めとする建設分野は、他産業の廃棄物の再利用にはかなり貢献しているが、建設材料自身のリサイクルやエコマテリアルへの転換は必ずしも十分ではない。その材料設計でも、力学的特性、耐久性、防・耐火性の3大要求性能評価項目については考慮されてきたが、リサイクル性や環境負荷低減性などの環境調和性 (エコバランス) は、配慮されてこなかったと考えられる。しかし、今後、環境に十分に配慮した持続的発展可能な建設を可能ならしめるためには、この4つの性能評

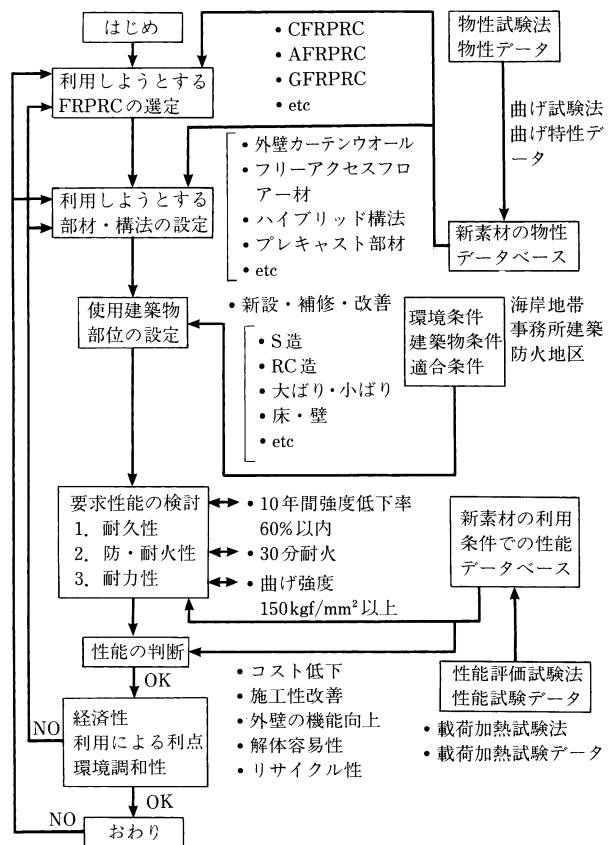


図-6 FRPRC のエコマテリアル・デザイン⁹⁾

価項目のバランスを取ったエコマテリアルの開発も必要であり、またそのためには、エコマテリアル・デザインおよびエコライフサイクル・デザインの視点が必要である。図-5にエコマテリアルの概念を、図-6、図-7に、新しい建設複合部材となりつつある連続繊維補強コンクリート (FRPRC) についてのエコマテリアル・デザインおよびエコライフサイクル・デザインの考え方を示す。図-5に示されるエコマテリアルの開発でのリサイクル性の評価や、図-6における各種の性能の評価・計算、図-7での寿命予測 (PSL)、ライフサイクルコスト分析

＜目的＞	＜生産＞	＜建設＞	＜使用時＞	＜解体・リサイクル・再利用＞
超寿命性とリサイクル性の両立を配慮した環境調和型材料設計	<p>あらかじめリサイクル性を配慮した材料設計</p> <p>FRP</p> <p>化学的分解性繊維 + 化学的分解性樹脂</p> <p>• 軽量・高強度プレキャストコンクリート</p> <p>1) あらかじめセメントの再生を考慮して石灰石を粗・細骨材として使用する完全リサイクルコンクリート cf. 友澤史紀 東京大学教授</p> <p>2) 廃棄された軽量コンクリートを破碎して軽量粗骨材を再生することによる部分リサイクルコンクリート cf. 笠井芳夫 日本大学教授</p> <p>生産時のLCA (CO₂発生量) (エネルギー消費量)</p>	<p>ハイブリッド構造</p> <p>↑</p> <p>解体が容易な設計</p> <p>柱：鉄筋コンクリートはり：FRP補強筋で補強された新補強コンクリート</p> <p>接合部：鋼製金具</p> <p>建設時のLCA</p> <p>* 特定の部位の建築材料・部材としてFRPRCの選定・評価のための材料設計</p> <p>LCD (生涯設計)</p>	<p>• 長寿命設計</p> <p>• 地球環境問題に対応した新寿命予測法</p> <p>• 使用時のライフサイクルコスト分析</p> <p>• 使用時のLCA</p> <p>PSL (寿命予測) LCC (ライフサイクルコスト分析) LCA (ライフサイクルアセスメント)</p>	<p>FRP</p> <p>1) 熱硬化性樹脂</p> <p>2) 熱可塑性樹脂</p> <p>3) 光分解性樹脂</p> <p>4) 生分解性樹脂</p> <p>化学処理・紫外線照射 モノマーおよびオリゴマーへの転換 → 土壌中での分解</p> <p>* 熱硬化性FRPの微粉末化</p> <p>↓</p> <p>軽量モルタルおよびコンクリートの細骨材およびセメント置換材としての繰り返し部分リサイクル (カスケード・リサイクル)</p> <p>プレキャスト軽量・高強度コンクリート</p> <p>↓</p> <p>人工軽量粗・細骨材の再生産</p> <p>↑</p> <p>軽量・高強度コンクリートの再生産</p> <p>• リサイクル時のLCA (CO₂発生量) (エネルギー消費量)</p>

図-7 FRPRCのエコライフサイクル・デザイン⁵⁾

(LCC), ライフサイクルアセスメント (LCA; ライフサイクルインヴェントリー (LCI), 地球環境影響度評価 (LCIA), リサイクル性 (RI), 廃棄物非占有率 (RUW) などの評価尺度による総合評価として) を行ううえでは, 各種の性能のデータやコンピュータ解析用バックデータのデータベース化とともに, 定量的評価尺度に基づく具体的な計算には, コンピュータの利用は非常に有効であり, また必要不可欠になるのは言うまでもない。

3. 材料開発におけるコンピュータ利用における落とし穴と留意点

材料開発におけるコンピュータの利用は, ある意味では非常に有効であり, 計画的に, かつリスクを最小限に抑えて新材料を開発するうえでは必要不可欠であるが, コンピュータ・シミュレーションは, あくまで, 材料特性等の推定・予測であり, その意味では, 仮想現実 (バーチャル・リアリティ) の域を出ない。したがって, コンピュータ・シミュレーションだけですべてが終わるわけではなく, 最後には実験的な検証により, 具体的な材料を“物”として生産しなければならない。材料開発において, コンピュータはあくまで手段であり, 目標は具体的な“物”であることを認識しなければならない。ともすれば, コンピュータを過信し, 仮想現実の世界に遊ぶという“落とし穴”に陥る恐れもある。また, 「コンピュータ 2000 年問題」もあるように, コンピュータは, “ブラック・ボックス”に近いために, 数学演算の意味を良く理解しないで使うと, 結果の可否の適正な判断をしないで, 鵜呑みにしてしまうという“落とし穴”も考えられる。ただ, 材料開発にともなう, 様々な性能の評

価のための計算, 寿命予測の計算, LCA 的評価のための計算, 理想的な欠陥のないコンクリートの熱・水分同時移動特性の予測のための膨大な数値計算などには, コンピュータは重要な役割を果たすと考えられる。また, 実験結果をコンピュータ・シミュレーションにフィードバックすると良い結果が得られることも知られている。材料開発でコンピュータを利用する意味を良く認識する必要があると思われる。

4. おわりに

材料開発におけるコンピュータ利用について, 過去・現在・未来にわたって, 概略的に説明を加えた。今後, その意味を良く認識して, コンピュータの有効利用を図れば, 材料開発に大きな貢献をされると考えられる。

最後に, コンピュータと実験とのフィードバックの重要性を強調して本稿を終えたいと思う。

参考文献

- 1) 科学技術振興調整費「材料のエコマテリアル化のための評価・設計技術の確立に関する研究」(第Ⅱ期 平成 8~9 年度) 成果報告書, pp. 157~170, 科学技術研究開発局, 1999. 3
- 2) 建設省建築研究所・(社) 建築研究振興協会共同監修, 仕入豊和・上野晴樹・福島敏夫・笠井哲郎編: 建設新素材の設計システムとその応用—繊維補強コンクリートを中心として, 167 p., 技術書院, 1999. 3
- 3) 牧島亮男: ニューガラス材料設計支援のエキスパートシステム, 富士通ジャーナル, No. 148, pp. 58~61, 1988
- 4) 福島敏夫: ステップ応答解析によるコンクリートの中性化進行予測法, セメント・コンクリート論文集, No. 48, pp. 554~559, (社)セメント協会, 1994. 12
- 5) 特集「建築材料のリサイクル—環境調和型社会を目指して—」, えびすとら, Vol. 20, 建設省建築研究所, 1998. 4
- 6) 福島敏夫ほか 5 名: 連続繊維補強コンクリートの環境調和型生涯設計とその材料要素技術, 連続繊維補強コンクリートに関するシンポジウム論文集, pp. 175~182, (社)日本コンクリート工学会, 1998. 5