

戦略的イノベーション創造プログラム(SIP)

2020年度 研究開発成果等報告書

課題名：統合型材料開発システムによるマテリアル革命

チーム番号：A領域

研究開発課題名：先端的構造材料・プロセスに対応した
逆問題MI基盤の構築

研究期間：2020年4月1日 ～ 2021年3月31日

研究 責任者	氏名	出村 雅彦
	所属機関	国立研究開発法人物質・材料研究機構
	部署	統合型材料開発・情報基盤部門
	役職	部門長

研究開発成果等の概要

我が国の輸出を支える素材産業の産業競争力をさらに強化するために、研究開発手法の刷新に向け、先端構造材料・プロセスに対応した逆問題マテリアルズインテグレーション（逆問題 MI）基盤の開発を行っている。中間評価までに、各テーマにおいて中間目標を達成し、研究開発が順調に進捗している。社会実装に向けて、金属材料を主な対象とする MIInt システムについて、当該システムを利活用していくための「マテリアルズインテグレーションコンソーシアム」を NIMS に設置し、SIP 終了後にも維持・発展していくための仕組みを構築した。

以下、各テーマの研究開発成果を詳述する。

A1「逆問題解析」：榎/東京大学、風間/JFE スチール（株）

構造部材の軽量化を実現するために高強度鋼の開発が求められており、単に高強度だけでなく十分な延性を実現するための組織制御及びそのための加工熱処理条件について、これまで精力的に研究が進められてきた。一方、高強度鋼の実際の構造部材への適用にあたっては、種々の手法により接合することが必要であり、特に溶接プロセスは非常に一般的かつ重要なプロセスである。しかし、このような研究で得られたデータは多岐にわたり、全てのデータを人間が網羅的に解析し、データに秘められた未知の物理や最適なプロセス条件を見出すことは極めて困難である。そこで、材料開発及びその応用を加速するためには、計算科学及びデータ科学を援用した組織予測、性能予測の仕組みを、さらに展開・発展させた逆問題解析技術の開発が求められている。本研究テーマでは、「材料開発」「プロセス最適化」「製品応用」の各課題に関して、下記のサブテーマについて具体的に逆問題のアプローチを実現することを目指した。

構造材料の性能を考える上で、全体をプロセス－組織－特性－性能の要素に分割してそのリンクを解析する手法が提案され、重要な概念としてその有用性が広く認識されている。個々の課題に応じた適切なリンクに注目して解析を行うことが重要である。本研究では、データ同化手法等の情報科学的手法を用いて、課題ごとに材料設計・プロセス最適化に関する逆問題解析アルゴリズムについて検討した。

(1) 次世代高強度鋼 MI :

高強度鋼のベースとなるマルテンサイト組織に注目して、主にこれまで得られているプロセス条件、マイクロ組織、特性・性能に関するデータを用いて、逆問題 MI の手法を高強度鋼に対して適用する際の課題を明確にすることを目指した（模式図を図 1 に示す）。

(2) 次世代高強度 AI 合金 MI :

これまでに蓄積された諸性質とマイクロ組織等に関するデータから、MI を用いて新たな高強度 AI 合金の熱加工プロセス条件を導出した。

(3) 高強度鋼の接合プロセス最適化 MI :

特に高強度鋼の破壊靱性に及ぼす溶接プロセスに注目して、逆問題 MI の手法により高張力鋼における破壊靱性の向上を実現するためのプロセス条件を導出した。

(4) 耐熱鋼の接合プロセス最適化 MI :

耐熱鋼のクリープ性能に及ぼす溶接プロセスに注目して、逆問題 MI の手法により耐熱鋼

におけるクリープ性能の向上を実現するためのプロセス条件を導出した。

(5) 製品応用 MI :

MI を活用することで、企業によって蓄積されたノウハウの形式知化を実現するために、加工プロセスに関するデータベースの整備を行い、MI による材料プロセス条件の導出を行った。

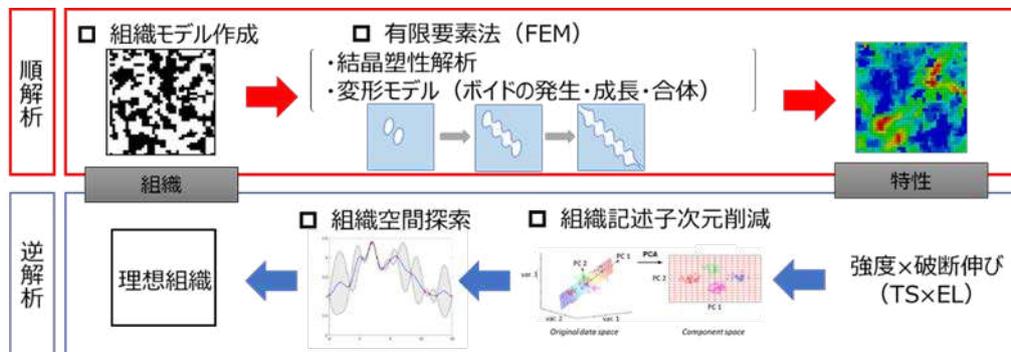


図 1 逆問題 MI の手法の模式図

A2 「プロセスデザイン」: 渡邊/NIMS、井頭/KHI (株)

プロセスデザインでは、マテリアルズインテグレーション (MI) 技術を、航空宇宙分野において重要なニッケル基合金あるいはチタン合金といった耐熱合金、及び、超耐熱セラミックス複合材料 (CMC) の開発に展開することを大きな柱としている。材料プロセスとして、航空機での適用が始まりつつあり、世界中で激しい開発競争が展開されている 3D 積層造形や粉末冶金、鍛造プロセスを対象とし、求められる性能予測に対して、必要なモジュールの開発と、それらをつなぎ合わせたワークフロー構築を進めていく。構築した順問題解析のワークフローを基盤として、最適なプロセス条件や材料組成範囲などを、効率良く導き出す逆問題 MI 技術の開発を進め、MI による材料開発の革新を図る。9つのサブテーマ (3D 積層プロセス MI、急冷非平衡合金設計 MI、粉末製造プロセス最適化 MI、熱処理・特性予測 MI、粉末焼結 MI、鍛造性能 MI、CMC MI、チタン合金設計 MI、高機能金属粉末製造プロセス MI) で構成されており、2020 年度は、対象材料において解析モジュールやワークフローの開発を進めた。また、それらにおいて必要となるデータの蓄積とそのための評価手法の構築を行った。以下、それぞれの成果についてまとめる。

- (1) 3D 積層 MI : 3D 造形中の凝固割れを抑制し、熱処理後の γ' 体積率 30%以上を実現可能な合金組成の探索と試作を行った。析出強化型 Ni 基合金での、溶質偏析を考慮した γ' 析出予測技術を構築した。MIInt へのレーザ照射に対する温度場解析と弾塑性解析の実装を進めた。
- (2) 急冷非平衡合金設計 MI: エネルギー論を用いて、数少ない入力パラメータで迅速に γ' 相の析出を予測するプログラムを開発し、9 元系合金について比較的高い精度で析出開始線を計算可能となった。
- (3) 粉末製造プロセス最適化 MI : 粒径 $53 \mu\text{m}$ 以下の粉末の収率が最大となる熔融温度、ガス圧力、溶湯ノズル径、ノズル長さを、効率良く予測することが可能となった。成果を

プレス発表し、広く周知した。

- (4) 熱処理・特性予測 MI：MInt システムへ強度予測モデルを実装し、Ni-Al 二元系合金において等温時効熱処理-引張試験のバーチャルテストを実施した。幅広い温度・時間空間において、固溶強化・析出強化を含む高温 0.2%耐力の予測が可能となった。
- (5) 粉末焼結 MI：雰囲気制御焼結—圧縮試験機を用いて、焼結特性データを系統的に収集する本実験を開始した。焼結解析プログラムを、HIP 工程（粘塑性応答）に対応できるように改良し、解析手法の有効性を確認した。
- (6) 鍛造性能 MI：Ti 合金の 1500tonf 鍛造シミュレータ試験での採取データと、各機関にて構築したモデルを鍛造解析に適用し、解析精度の検証を進めた。プロセスと組織の対応付け、疲労き裂発生・結晶塑性解析のモデル化を進めた。
- (7) CMC MI：CMC に関連する知見データベースの中で、主要なもののメタアナリシスを行い、MI モジュールとして逆問題 MI 基盤内で利用可能な状態とした。
- (8) チタン合金設計 MI：置換型固溶元素（Zr, Si）に関して、実験解析および第一原理計算データベースを作成し、それらに基づく α -Ti 単相材での固溶強化量予測モデルを構築した。
- (9) 高機能金属粉末製造プロセス MI：溶融速度 Q 一定条件における、粒形 d 、電極棒径 D と電極棒回転速度 ω との関係、溶融速度 Q とプラズマ出力 P の関係などを定量化した。新規 PREP 装置の設計指針の策定と事業化の検討を進め、ベンチャー企業を設立した。

A3「原子（分子）・構造体デザイン」：岡部/東北大学、伊藤/東レ（株）

全体計画に記載した主な研究テーマに基づき、主要 12 ツールの開発を完了させ、分子スケールから航空機機体の構造解析まで取り扱える統合解析ツールを構築した。このツールを CFRP 用 MI システムの第 1 階層「航空機用熱硬化 CFRP 解析用ツール群」としてシステムへの実装を B 領域と連携しながら開始した。また、個別の解析ツールに関しては B 領域の企業・研究者に積極的に利用してもらいながら議論・改良を進めている。

【第 1 階層：航空機用熱硬化 CFRP 解析用ツール群】

1. 反応硬化分子動力学シミュレーション
2. 反応硬化散逸粒子動力学シミュレーション
3. 化学反応経路自動探索 GRRM
4. 架橋性を有するメゾ有限差分法 (GL) シミュレーション
5. マルチスケール残留変形シミュレーション
6. 自己組織化マップ
7. テーリング設計支援のための有孔破壊シミュレーション
8. AFP 時のギャップ成型を考慮に入れた複合材積層板の有限要素解析ツール
9. ばね要素モデル
10. マルチスケール破壊シミュレーション
11. 等価剛性モデル（森・田中、均質化法、理論解）
12. 複合材主翼の多目的最適設計シミュレーター

さらに、上記第1階層に加え、本システムの航空機産業以外への活用を見据え、CFRPの各種基本解析が可能な汎用インハウスコードによる解析ツール群（第2階層）および商用・汎用ソルバー上で動くユーザーサブルーチン群（第3階層）のMIシステムへの追加実装を開始した。

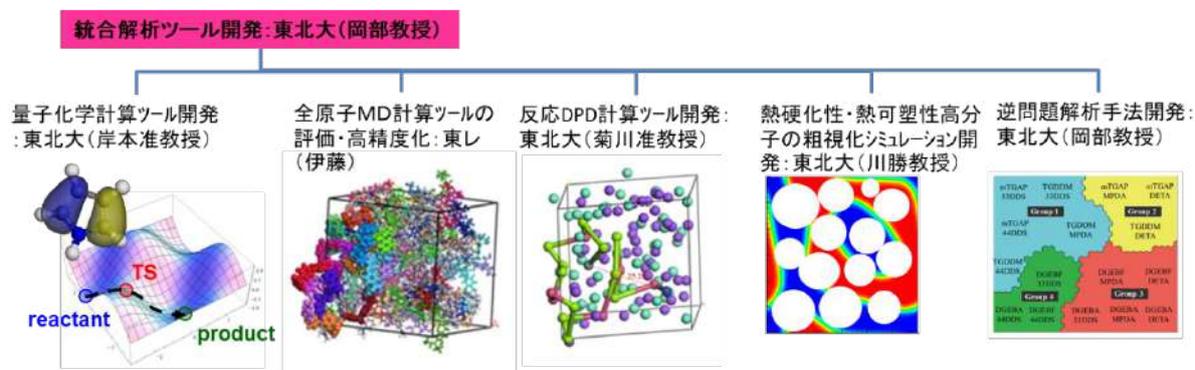


図2 総合解析ツール開発の体制図

A4 「MI 統合システム」: 源/NIMS、井上/東京大学

2020年度は、MIntシステムの(1)MInt-APIの検証と活用、(2)セキュリティ対策、(3)インフラ強化を行うとともにA1, A2との連携を強化した。

A1班で取り組まれる全課題のワークフローの構築をA1班と共同で行い、構造材料開発の現場で必要となる逆問題の類型化を行った。A2班連携としてのAPI活用として、Ni基合の最適組成探索を行うための計算データベースの構築、WFAS(溶接部疲労寿命解析ソフト(SIP1期にて独自開発))に関しては、SLM(Selected Laser Mating)用の熱伝導解析モデルを追加開発した。利用可能な解析ツールとしてOSS(Code_Aster(仏EDF)など)を利用可能としている。さらにWFASをMInt-APIを経由して駆動させることで、ユーザは従来のGUIの利用感覚を損ねることなく、MIntシステムと連携してデータ蓄積・抽出、再計算をすることが容易となった。Ni-Al二元系合金のPhase Field法計算、画像解析、強度評価式、による熱処理条件の最適化に関するシステム実装を行った。その他、予測モジュールのサジェスタ機能に関する技術開発や、メソ領域の情報量強化を行った。

セキュリティ対策としては、一般的な脆弱性評価システムであるCVSS(Common Vulnerability Scoring System)に準拠し、MIntシステムで利用されているカーネルやミドルウェア、ライブラリに対して深刻度スコアから問題となりうる箇所のバージョンアップを実施した。その結果、脆弱性のないシステムへの実現・公開に向けての足掛かりができたと考えられる。

加えてシステムの管理コストの削減、計算機の負荷変動への追従、研究環境の迅速構築の3点を目的としてインフラ強化を行った。これまでMIntシステムの構築に大きな工数(約2人月)を要していたものを、最新のインフラ構築技術を導入することにより、数日の工数で稼働をさせることが実現できる目途がついた。これは新規でシステムを立ち上げる場合や、複

数箇所でのシステムの同期をとる場合に非常に効率的になる。外部に存在する計算機の活用として、MInt システムの設置拠点外からログインして実行したワークフローを通じて、拠点外に存在する高性能計算機上のソフトウェアによる数値シミュレーションが実行できることを検証した。

以上、MInt システムを有効に活用するうえで、MInt-API の検証・活用を通じて、ユーザの意図を反映した個別のアプリケーションの構築の可能性について示し、MInt システムとは別に行う処理(可視化など)と組み合わせたアプリケーションの構築を実現した。またセキュリティ強化のためのできる限りの対策を施した結果、安全に利用できる準備が整ったと考える。さらに、インフラ強化に伴う計算資源の利便性向上も検証でき、安定稼働に向けた準備が整ったと考えている。

A5「構造材料データベース」：出村/NIMS、芦野/東洋大学

当該テーマの目標は全体として構造材料に特有の組織（構造）に着目しながら、データを利活用するための仕組みを構築することであり、データ記述方式の設計と組織情報の定量化技術の開発を担う。2020 年度までは要素技術の研究開発を推進した。その際には、他テーマとの連携によって、できるだけ本プロジェクト全体の目標達成に資するように、対象を設定している。

具体的には、データ設計については、昨年度までに設計したクリープデータに関するデータ設計をもとに、機械学習向けのデータセットを抽出するための仕組みを構築し、実際に機能することを確認した。さらに、追加のデータ設計として、鉄鋼材料の疲労データに関するデータ設計を進め、すでに設計済みのクリープデータ設計を改修しつつ、新たに疲労データを記述するためのデータ構造を設計した。加えて、ニッケル超合金熱処理最適化逆問題について、A2-4 と連携してワークフローを構築し、次年度以降の熱処理スケジュール最適化のために熱処理スケジュールを表現するためのデータ設計について考え方を整理した。

3次元構造情報解析技術では、2020年度は、複合材対応3D内部構造顕微鏡システムを用いて、構造材料の3D計測を本格化させた。得られた3D情報（連続断面画像情報）からMAが2D観察で得られた従来の想定よりも高いアスペクト比を持つことを示唆する結果が取得できるなど、3D観察の優位性を示すような結果が得られている。硬さ計測との連携に向けての要素技術の開発も順調に進捗している。更に、観察画像を格納、解析するためのクラウドシステムを運用するとともに材料DBの構築を開始した。

数理的アプローチに関しては、以下の進捗を見ている。21種類の鉄鋼材料の顕微画像に含まれる構造情報を幾何学的特徴（パーシステントホモロジー）に基づいて定量化し、機械学習の手法と組み合わせで引張強度や全伸びの測定値と相関の強い成分を抽出することに成功した。それらの成分は微細構造や海島構造といった異なる階層に跨って存在することが分かった。また、3次元画像に対しても実用的な速度で解析が行えるよう、ソフトウェア基盤「HomCloud」を高度化した。さらに、トポロジカルデータ解析コミュニティを設立して「HomCloud」を活用した社会実装への取り組みも始めた。