

戦略的イノベーション創造プログラム (SIP)

2021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：2021年4月1日 ～ 2022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。今年度は社会実装に向けて研究開発を進めると共に、MInt セミナーや MIntMedia のコンテンツ開発を進め、オープンな PR と「マテリアルズインテグレーションコンソーシアム」会員向けの学習手法の拡充を図った。

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フェライト/マルテンサイト組織からなる DP 鋼に注目して、これまで得られているプロセス条件、ミクロ組織、特性・性能に関するデータを用いて、高強度・高延性鋼の微視組織を設計するための逆問題 MI の手法の開発を目指した（模式図を図 1 に示す）。

(2) 次世代高強度 Al 合金 MI :

これまでに蓄積された諸性質とミクロ組織等に関するデータから、モデル駆動の MI 手法を用いて新たな 7000 系高強度 Al 合金のプロセス条件（組成、熱処理条件）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（780MPa 級、980MPa 級）における低温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溶接組織形態および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。具体的には、中高炭素鋼におけるスポット溶接条件の最適化、2000 系 Al 合金の高温強度を向上させるプロセス条件の提案を行った。

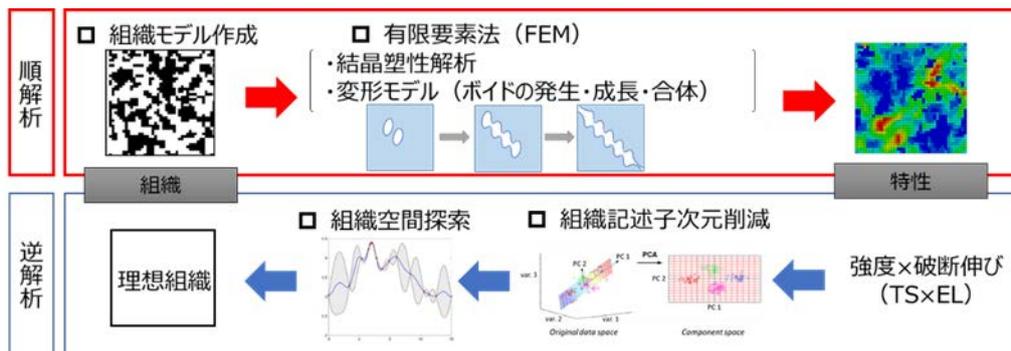


図 1 逆問題 MI の手法の模式図

A2 「プロセスデザイン」: 渡邊/NIMS、岩崎 (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。8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、チタン合金設計 MI、経済型チタン合金粉末製造プロセス MI) で構成されており、2021 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 : レーザスキャンに伴う温度場予測技術の確立、流体解析に基づく熔融凝固解析、凝固過程におけるセル組織および偏析予測技術、結晶塑性解析による応力-ひずみ曲線の予測技術を構築した。また、C1 と連携し、造形中の割れ発生を抑制可能な新規 Ni 基合

金を MI により開発することに成功した。

- (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自作し、比較的高い精度で析出開始線を計算可能となった。7 元系の組成空間からモンテカルロ木探索により、 γ' 相析出ノーズが長時間側かつ γ' 相の平衡モル体積が大きくなる合金組成を探索し、選定し、試作に成功した。
- (3) 粉末製造プロセス最適化 MI: 溶融温度、ガス圧力、溶湯ノズル径、溶湯ノズル長さを製造パラメータとして、粒径 $53\mu\text{m}$ 以下の粉末の収率が最大となる条件をベイズ最適化により見出した。さらに、得られる粉末の粒度分布を対象として、ベイズ最適化により、目標粒度分布を得ることのできる製造パラメータを予測する技術を開発した。
- (4) 熱処理・特性予測 MI: 特性予測に関して、組織（入力）から疲労特性（出力）の高速な計算を可能とする NIMS 超合金特性予測プログラム 2.0 の提案に成功した。更に、特性予測範囲の拡張を目指し、二元系、三元系固溶強化の文献調査および、多元系実用固溶強化合金の高温強度等の DB 拡張を実施した。
- (5) 粉末焼結 MI: ・焼結一圧縮試験を継続し、データ量を増やすことで、焼結構成モデルのパラメータの精度を高めた。また、粒度の異なる 3 種類の粉末を用いて HIP 工程の実験を行い、粉末特性が焼結体の形状変化、微細構造変化へ与える影響を確認した。
- (6) 鍛造性能 MI: 大気恒温鍛造プロセスによる Ni 基合金の長柱据え込みの実証が完了し、Ti 合金の大変形を伴う円柱圧縮試験のデータを採取してモデル検証に活用した。また、ミクロ組織での微小き裂進展を予測する数値解析手法を提案し、Ti-6Al-4V 鍛造材の疲労試験に対する、結晶塑性有限要素解析を用いた疲労特性を予測する手法を開発した。
- (7) チタン合金設計 MI: α -Ti 合金（焼結材および積層造形材）について実験解析データベースと第一原理計算データベースの融合のもと、Labusch モデルに基づいて固溶強化量を高い精度で予測でき、順問題として α -Ti 単相合金の固溶強化に資する組成設計が可能であることを示した。
- (8) 経済型チタン合金粉末製造プロセス MI: ベンチマーク粉末と同等の粉末特性を持つ経済型チタン粉末の製造に成功し、性能と低コスト化との両立へ目途を得た。また、DEM シミュレーションにより得られる 1 から 3 層までの粉末床充填率を、実験値と近接させることに成功した。

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 (CoSMIC) の第 1 階層「航空機用熱硬化 CFRP 解析用ツール群」として実装した。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. テーラ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。

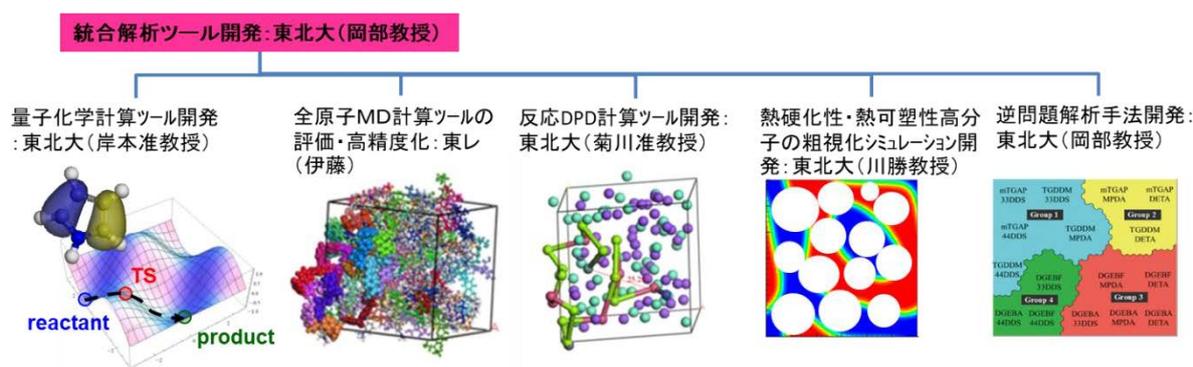


図2 総合解析ツール開発の体制図

A4 「MI 統合システム」: 源/NIMS、井上/東京大学

2021年度は、A1, A2との連携を強化して予測モジュールの実装を加速するとともに、(1)MIInt-APIの活用と逆解析基盤の開発、(2)インフラ強化(セキュリティ対策や計算能力強化)を行った。

2021年度はA1班との連携による逆解析手法のシステムへの実装(「変形・延性破壊予測モジュール」、「スポット溶接破壊予測WF」)や、A2班が開発した予測モジュール(「凝固割れ予測」「レーザ照射熱伝導解析」「粉末製造プロセス最適化」「 γ 相析出時間の予測」)のMIIntへの実装を行った。API活用事例としては、ワークフローの制御やデータの活用を推進するために、より簡便に多様なアプリケーションが作成できるような枠組みを構築し、下記のようなアプリケーションを作成した。

- (1) WFAS(溶接部解析統合環境)の機能拡張
- (2) Ni基合金用熱力学計算データ可視化ツール

(3) MInt 用逆解析基盤 (MIOpt)

(4) CGT 線図予測のためのアプリケーション

API 活用検証例題としては、(1)の WFAS のように溶接部の一気通貫な解析を可能にするものや、(2)の大量データの可視化の構築を進めてきた。このようなアプリケーション構築技術により、ユーザは MInt の外形を意識することなく MInt の枠組みを活用でき、かつユーザごとに異なる必要な機能を実装できるため、非常に重要な技術と考える。なかでも(3)の MIOpt は、MInt に登録されたワークフローのうち API 対応を済ませたものに対して、汎用的に逆解析を行うための基盤で、本プロジェクトの目的に特に沿うものであると考える。本年度の検証例題としては、溶接部におけるクリープ破断時間に対する入熱条件の最適化問題に適用し、Bayes 最適化により破断時間を長時間にする条件を得ることができた。さらに A1「破壊靱性予測 WF」にも対応させたので今後検証を進めていく。今後もワークフローの API 対応と MIOpt への実証を進め、最適化のアルゴリズムを追加していくことで汎用性の確認を行っていく。

インフラの面では、各課題で開発されたモジュール・ワークフローなどの実装が本格化することにもなって、今後予想される計算能力の増加の要求に応えるため、計算ノードの台数を 3~4 倍に増強した。また、特殊な計算環境や計算負荷のピーク需要に対応するための外部計算資源活用も企業・大学・NIMS 内プライベートクラウド・パブリッククラウドの各環境において実用段階の検証を済ませた。統合サーバについても、今後の長期運用における可用性の向上、ならびにシステム更新に円滑に対応するため、台数を増強した。セキュリティ対策に関しては、2020 年度の大掛かりなアップデートの後には、定期的にシステムに対して診断を受けることと、継続的にかつ迅速に脆弱性に対応できるような体制を整えた。さらに障害発生時の対応プロトコルも策定を行い、こちらも迅速に対応できるようにした。

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。中間評価までに開発した要素技術を展開し、社会実装の取り組みを強化した。特に、他テーマと連携して本プロジェクト全体の目標達成を目指している。

データ設計に関しては、中間評価までに設計した鉄鋼材料に関するデータ構造を用いて、社会実装に向けた取り組みを実施した。具体的には SIP 参画企業にデータ構造を提供し、企業内データのデジタル化に取り組んでもらっている。加えて、NIMS で運営している MatNavi 中の金属データベース KINZOKU に対して SIP データ構造を提供し、全面的な改修に貢献した。これらの取り組みの中で新たに明確になったデータ構造の不備に対応して改修を実施した。さらに、秘匿機械学習技術の一つである連合学習システムを開発し、十分な性能を有することを確認した。これを用いることで、データを秘匿したまま、データを統合したのと同等の効果を得ることができることになる。逆問題に関しては、人工 SEM 画像の生成技術の開発、3D 積層造形向けニッケル基超合金の提案、ニッケル基超合金時効熱処理について等温時効の場合のプロセスマップの作成を実施した。

材料のミクロ組織とその空間配置は性能に大きく影響するものであり、これを記述し、データと知識を共有するためのオントロジー開発を行った。今後、A1, A5-2 と連携して試験データへの適用を行う。

3次元構造情報解析技術では、電子顕微鏡(FIB-SEM)と光学顕微鏡(光顕)のそれぞれをベースにした3次元組織解析技術を構築し、それらを連携してマルチスケール3D組織解析を実現した。FIB-SEMについては、導入したPFIB-SEM装置を用いて従来比千倍以上の大体積の3D観察に成功し、これまでの3D組織観察の手法間に存在したスケールギャップを解消した。また、光顕については、開発した複合材対応3D内部構造顕微鏡システムを用いた構造材料の3D計測を推進するとともに、M-A抽出など逆問題解析に資するデータ解析を実施した。また、同一箇所を撮影したFIB-SEM画像と光顕画像の位置合わせ技術を開発し、分解能および計測原理が異なる2つの観察画像を連携する基盤を構築した。

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パーシステントホモロジーに基づいて定量化し、従来鋼と20GPa%鋼の2次元SEM画像に含まれる幾何学的特徴を両方バランスよく扱うための工夫を施すことで、少数の記述子を用いて引張強度や全伸びの測定値を良好に線形回帰することに成功した。3次元画像も活用しつつ、引張強度の予測のカギとなる2相の入り組み方に物理的な解釈を与える取り組みも進めた。