

戦略的イノベーション創造プログラム (SIP)  
統合型材料開発システムによる  
マテリアル革命

研究開発中間成果報告集

2021年10月

国立研究開発法人 科学技術振興機構

 SIP 戦略的イノベーション創造プログラム  
Cross-ministerial Strategic Innovation Promotion Program



## はじめに

---

戦略的イノベーション創造プログラム (SIP) 第 2 期  
「統合型材料開発システムによるマテリアル革命」  
プログラムディレクター (PD)

### 三島 良直



「戦略的イノベーション創造プログラム (SIP)」は内閣府の科学技術・イノベーション会議 (CSTI) が司令塔機能を発揮して、ファンディングを行うプログラムであり、2014 年 4 月に第1期11課題がスタートしました。その趣旨は、社会的に不可欠で、日本の経済・産業競争力にとって重要なイノベーションを実現すべく、府省連携、産学官連携を以って、基礎研究から実用化・事業化までを見据えて一貫通貫で研究開発を推進することです。2018 年には SIP 第 2 期12課題がスタートし、その1課題が輸送機器や発電用タービンエンジン等の部材を構成する構造材料を対象とした「統合型材料開発システムによるマテリアル革命」です。

本課題では、素材関連産業のさらなるグローバル競争力強化のために、材料工学手法に実験及び理論計算に基づいたデータ科学を活用して、計算機上でプロセス・組織・特性・性能をつないで材料開発を加速する統合型材料開発システム、すなわちマテリアルズインテグレーション (MI) システムを世界に先駆けて開発してきました。構造金属材料向けの MIInt(Materials Integration by network technology) と軽量構造材料である繊維強化複合材料 CFRP 向けの CoSMIC(Comprehensive System for Materials Integration of CFRP) の 2 つを柱とし、さらに金属間化合物、セラミックス基複合材料という次世代材料にも対応する MI システムも構築中です。これらには逆問題解析手法も導入して、欲しい性能から材料・プロセスをデザインする機能も備えています。

本中間成果報告集は、SIP 第2期「統合型材料開発システムによるマテリアル革命」における上記取組について、中間時点の成果をとりまとめたものです。逆問題 MI 基盤を構築する A 領域 (A1 ~ A5 チーム) と CFRP 材料開発に取り組む B 領域 (B1 ~ B3 チーム)、及び、粉末・3D 積層造形に取り組む C 領域 (C1 ~ C5 チーム) の 3 領域、13 チーム (合計 47 機関) およびそのサブチームによる報告から成ります。

私たちは、MI システムが企業や大学・国研の研究開発で有効活用され材料開発が加速されることを、社会実装の目標としています。そのために、SIP に参画していない研究開発機関の皆様にも利用していただけるよう、コンソーシアムなどを設立しました。本報告集が MI システムの活用・コンソーシアムへの参加をご検討いただく上での一助となることを切に願いますとともに、皆様の研究開発のご参考になれば幸いです。MI システムを活用して開発された製品・技術が実用化・事業化されることを願い、これからも研究開発に邁進します。皆様のご指導、ご鞭撻を宜しくお願い申し上げます。

# 目次

はじめに	1
目次	2
研究開発体制図	4
マテリアルズインテグレーション (MI) システム	6
MInt (Materials Integration by network technology) の概要	7
CoSMIC(Comprehensive System for Materials Integration of CFRP) の概要	8

## 各領域・チームでの取り組みと成果

A 領域	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	11
A1	逆問題解析	13
A1-1	次世代高強度鋼 MI	15
A1-2	次世代高強度 Al 合金 MI	18
A1-3	高強度鋼の接合プロセス最適化 MI	21
A1-4	耐熱鋼の接合プロセス最適化 MI	24
A1-5-1	製品応用 MI (スポット溶接)	26
A1-5-2	製品応用 MI (2000 系アルミニウム合金)	28
A2	プロセスデザイン【A2-1 ~ A2-4 の成果概要】	30
A2-1	粉末3D 造形プロセス MI	31
A2-2	急冷非平衡合金設計 MI	33
A2-3	粉末製造プロセス最適化 MI	35
A2-4	熱処理組織・性能制御 MI	37
A2-5	粉末焼結 MI	39
A2-6	鍛造性能 MI	41
A2-8	チタン焼結合金設計 MI	44
A2-9	高機能粉末製造 MI	46
A3	原子 (分子)・構造体デザイン	48
A4	MI 統合システム	52
A5-1	構造材料データ記述方式設計	57
A5-2	3D 構造情報解析技術の開発	59
A5-3	高次元構造材料データへの数理的アプローチ	61

B 領域	CFRP	65
B1	多機能 CFRP の開発による高付加価値化	67
B2	AI 援用積層最適化による CFRP 設計・製造自動化技術の開発	73
B3	薄層材自動積層による CFRP の3D 高自由度設計技術の開発	78
C 領域	粉末・3D 積層	85
C1	Ni 基合金の 3D 積層造形プロセスの開発	87
C2-1	粉末鍛造ディスク材の製造プロセス開発	91
C2-2	航空機材料の国際標準化・認証のための材料データベースの構築	96
C3	Ti 合金の粉末・3D 積層造形プロセスの開発	98
C4	高性能 TiAl 基合金動翼の粉末造形プロセス基盤技術構築と開発	103
C5	セラミックス基複合材料の航空機エンジン部材化技術の開発	108

# 研究開発体制

Organization of R&D

「統合型材料開発システムによるマテリアル革命」

PD : 三島 良直 サブPD : 毛利 哲夫

2020年度



**“Materials Intergration” for Revolutionary Design**  
**System of Structural Materials**  
**Program Director : Yoshinao Mishima**  
**Deputy Program Director : Tetsuo Mohri**

**Domain B** (CFRP)

Co-Directors of Research Domain:  
 Tomonaga Okabe (Tohoku U.)  
 Toshiya Nakamura (JAXA)

**B2**

**AI自動積層**  
AI-AFP

**Co-Leaders**  
 阿部 俊夫 (三菱重工業)  
 中村 俊哉 (JAXA)

Abe (MHI)  
 Nakamura (JAXA)

**参画機関**  
 (10 機関)  
 三菱重工業  
 JAXA  
 高エネルギー加速器研究機構  
 神戸大学  
 名古屋大学  
 九州大学  
 東京大学  
 北海道大学  
 大阪府立大学  
 信州大学

(10 organizations)  
 MHI  
 JAXA  
 KEK  
 Kobe U.  
 Nagoya U.  
 Kyushu U.  
 UTokyo  
 Hokkaido U.  
 Osaka Pref. U.  
 Shinshu U.

**B3**

**薄層複合材**  
Thin-Layer CFRP

**Co-Leaders**  
 内山 重和 (SUBARU)  
 中村 俊哉 (JAXA)

Uchiyama (SUBARU)  
 Nakamura (JAXA)

**参画機関**  
 (6 機関)  
 SUBARU  
 JAXA  
 福井県工業技術センター  
 東京農工大学  
 東京大学  
 東京理科大学

(6 organizations)  
 SUBARU  
 JAXA  
 Industrial Tech. Center of Fukui Pref.  
 Tokyo U. of A&T  
 UTokyo  
 Tokyo U. of Science

**C1**

**Ni積層造形**  
Ni Additive Manufacturing

**Co-Leaders**  
 井頭 賢一郎 (KHI)  
 中野 貴由 (大阪大学)

Igashira (KHI)  
 Nakano (Osaka U.)

**参画機関**  
 (3 機関)  
 川崎重工業  
 大阪大学  
 NIMS

(3 organizations)  
 KHI  
 Osaka U.  
 NIMS

**C2**

**Ni粉末鍛造**  
Ni Powder Forging

**Co-Leaders**  
 今野 晋也 (MHPS)  
 長田 俊郎 (NIMS)

Imano (MHPS)  
 Osada (NIMS)

**参画機関**  
 (9 機関)  
 三菱日立パワーシステムズ  
 NIMS  
 本田技術研究所  
 三菱重工航空エンジン  
 北海道大学  
 東北大学  
 JAXA  
 IHI  
 川崎重工業

(9 organizations)  
 MHPS  
 NIMS  
 HONDA  
 MHI AEL  
 Hokkaido U.  
 Tohoku U.  
 JAXA  
 IHI  
 KHI

**C3**

**Ti粉末・積層造形**  
Ti Powder Additive Manufacturing

**Co-Leaders**  
 高橋 聰 (IHI)  
 野村 直之 (東北大学)

Takahashi (IHI)  
 Nomura (Tohoku U.)

**参画機関**  
 (4 機関)  
 IHI  
 東北大学  
 大阪チタニウムテクノロジーズ  
 日本積層造形

(4 organizations)  
 IHI  
 Tohoku U.  
 Osaka Titanium Tech.  
 JAMPT

**C4**

**TiAl粉末造形**  
TiAl Powder Manufacturing

**Co-Leaders**  
 竹山 雅夫 (東京工業大学)  
 福島 明 (MHI AEL)

Takeyama (TIT)  
 Fukushima (MHI AEL)

**参画機関**  
 (5 機関)  
 東京工業大学  
 三菱重工航空エンジン  
 神戸製鋼所  
 大阪冶金興業  
 大阪大学

(5 organizations)  
 TIT  
 MHI AEL  
 Kobe Steel  
 Osaka Yakin Kogyo  
 Osaka U.

**C5**

**セラミックス基複合材**  
CMC

**Co-Leaders**  
 香川 豊 (東京工科大)  
 七丈 直弘 (東京工科大)  
 関川 貴洋 (MHI AEL, MHI)

Kagawa (TUT)  
 Shichijo (TUT)  
 Sekigawa (MHI AEL, MHI)

**参画機関**  
 (6 機関)  
 東京工科大学  
 三菱重工航空エンジン  
 IHI  
 川崎重工業  
 東京大学  
 JAXA

(6 organizations)  
 TUT  
 MHI AEL  
 IHI  
 KHI  
 UTokyo  
 JAXA

**C領域** (粉末・3D積層)

領域長: 渡邊 誠 (NIMS)  
 中野 貴由 (大阪大学)

**Domain C** (3D Powder Processing)

Co-Directors of Research Domain:  
 Makoto Watanabe (NIMS)  
 Takayoshi Nakano (Osaka U.)

# マテリアルズインテグレーション (MI) システム

## Materials Integration System

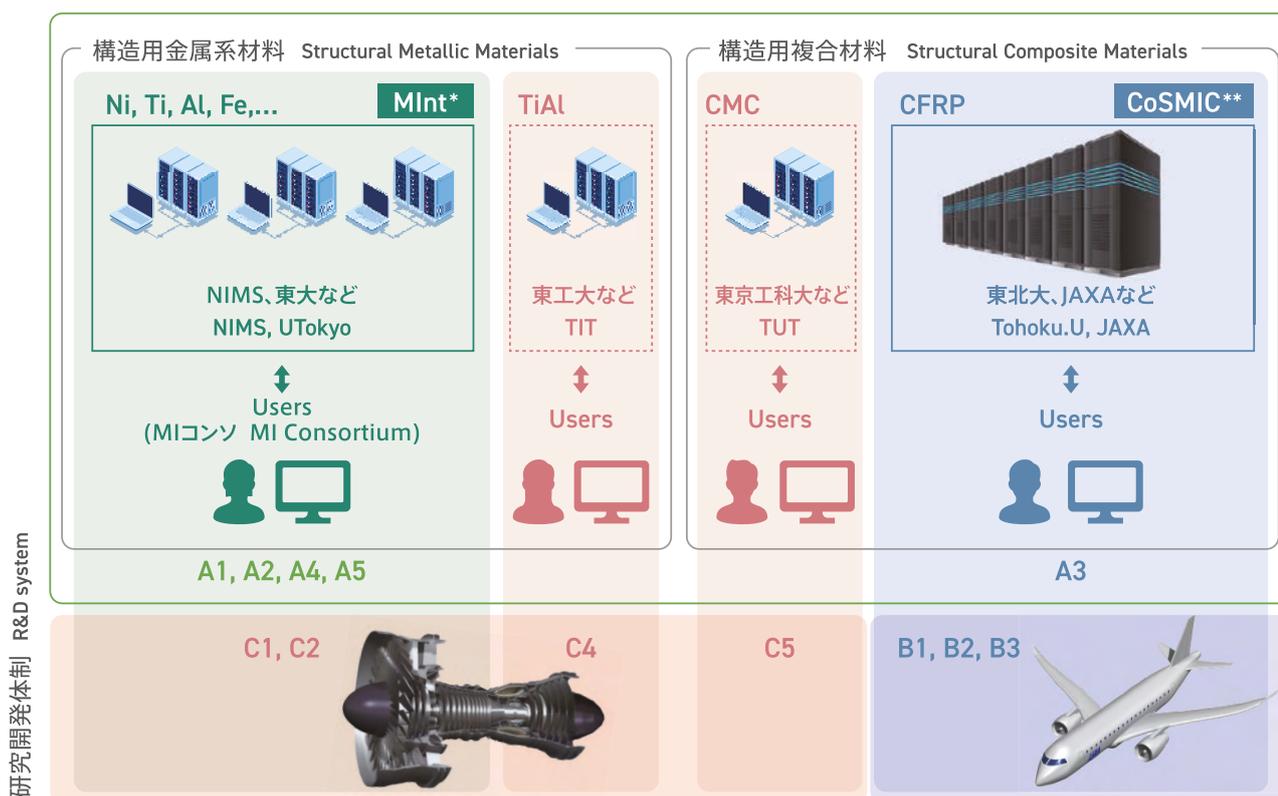
マテリアルズインテグレーション (MI) システムとは、材料工学手法に実験及び理論計算に基づいたデータ科学を活用して、計算機上でプロセス・組織・特性・性能をつないで材料開発を加速する統合型材料開発システムであり、計算機上で材料の諸事象をバーチャルに再現することで、材料開発の時間短縮・コスト低減を主目的としています。

ここで扱う対象は、最先端構造材料・プロセスです。構造材料を選択した主な理由は、その使用期間は長いものでは数十年にもなり、それに対応して開発にも多大な時間・コストを要し、MI システムによる開発の効果が期待できるからです。

研究開発の体制は、逆問題 MI 基盤を構築する A 領域 (A1 ~ A5 チーム) と CFRP 材料開発に取り組む B 領域 (B1 ~ B3 チーム)、及び、粉末・3D 積層造形に取り組む C 領域 (C1、C2、C4、C5) の 3 領域です。

B、C 領域は A 領域に実験データをフィードバックしながら A 領域で構築されたシステムを実際の材料・プロセスに適用し、その有効性を検証していきます。

＝ MI システム MI system ＝



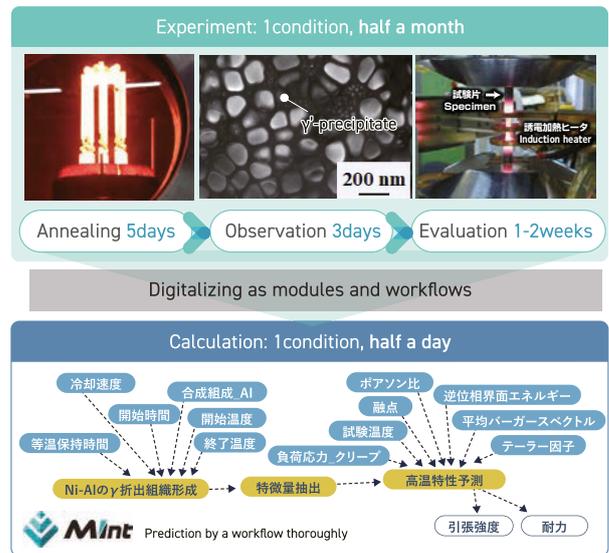
\* MInt : Materials Integration by network technology

\*\* CoSMIC : Comprehensive System for Materials Integration of CFRP

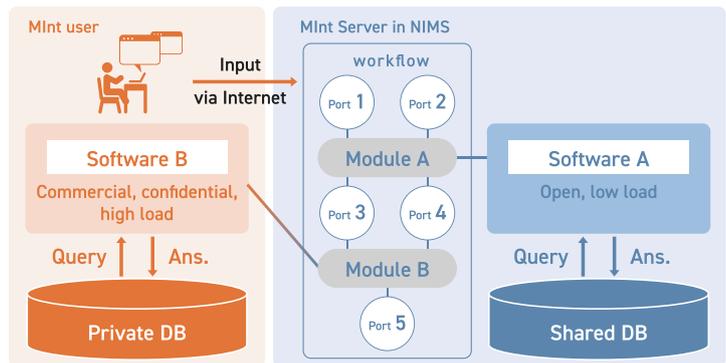
# MInt (Materials Integration by network technology) の概要

## Overview of MInt (Materials Integration by network technology)

構造用金属材料を対象としたサイバーシステム MInt は、物質・材料研究機構 (NIMS) を拠点として開発が進められています。MInt 上でモジュールと呼ばれる計算ツールを接続してワークフローを構成することで、プロセスから構造、特性、性能まで一気通貫に予測できます。一例では、半月かかる実験を、サイバー空間では半日に短縮できます。さらに、最適化手法と組み合わせることで、欲しい性能から最適なプロセスや構造を提案することも可能となります。



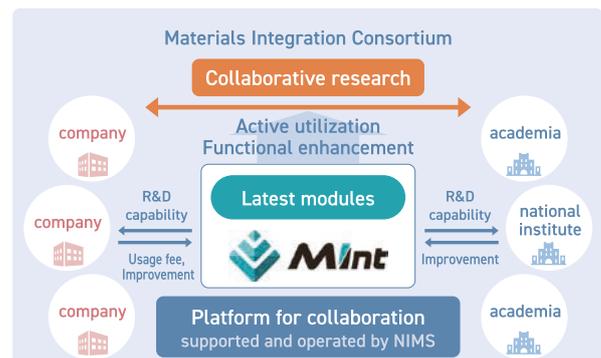
MInt は分散計算の仕組みを備えており、各企業が持っている秘匿性の高いデータを用いた計算は企業内の安全な計算環境で実行し、得られた結果のみをやり取りすることで、秘匿性を確保しながら、ワークフロー計算を完遂できます。また、インターネットを通じた遠方からの利用、音声や動画によるマルチメディア方式のチュートリアル提供など、使いやすいシステムを目指しています。



## — マテリアルズインテグレーションコンソーシアム (MI コンソ) の概要

### Overview of Materials Integration Consortium (MI Consortium)

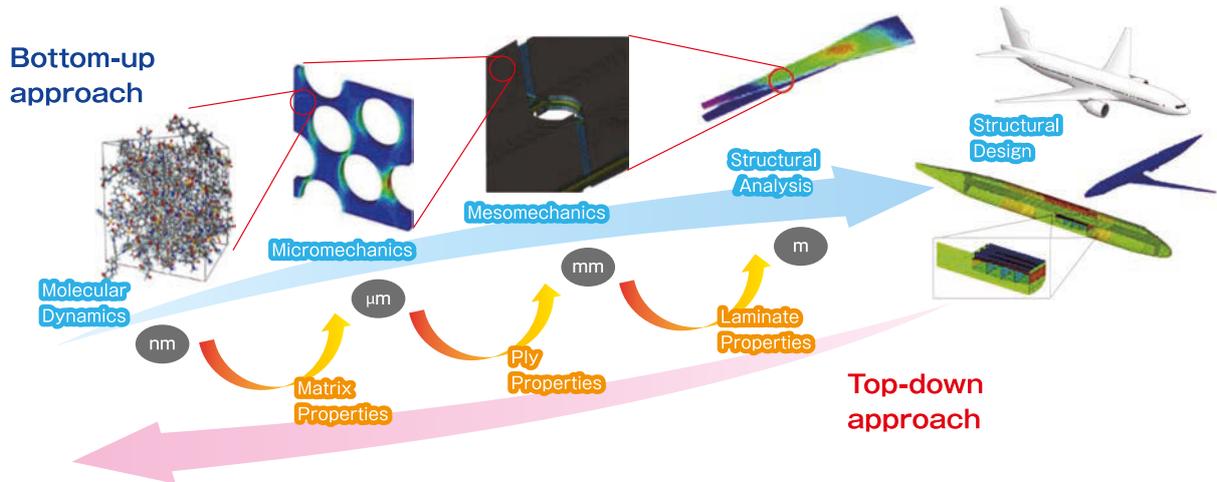
MInt を社会に役立てていくために、産学官連携組織「マテリアルズインテグレーションコンソーシアム (MI コンソ)」を設立しました。MI コンソの運営は NIMS が担っています。MInt を基盤として、産学官の共同研究により、材料イノベーションを促進していきます。同時に、共同研究から生まれた最新のモジュールなどを還元することで MInt を常に最新の材料研究成果が反映されたものとし、これを利用する産学官の研究開発力の向上を図っていきます。



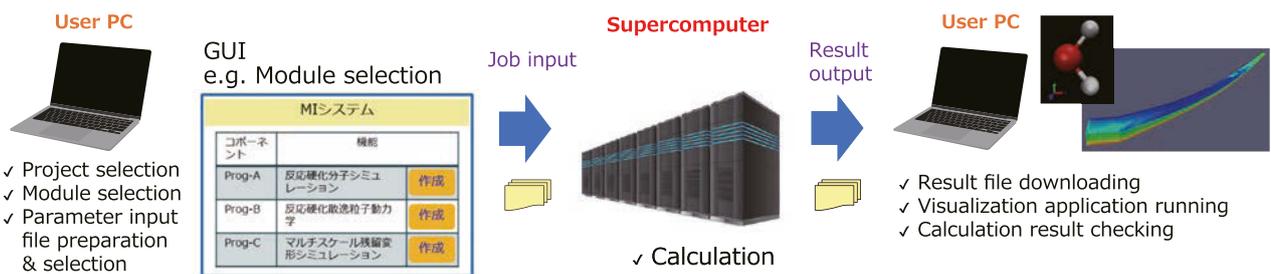
# CoSMIC(Comprehensive System for Materials Integration of CFRP)の概要

## Overview of CoSMIC (Comprehensive System for Materials Integration of CFRP)

炭素繊維強化プラスチック（CFRP）を取り扱う MI システムとして、CoSMIC の開発が東北大学を中心に進められています。これまでに航空機構造用の CFRP 設計をターゲットとした 12 個のモジュールを開発してきており、原子・分子スケールから機体構造までのマルチフィジックス / マルチスケールシミュレーションが可能です。今後はユーザーニーズの高まりに応え、航空機産業以外の製品開発を支援するためのモジュール開発も進めていきます。



ユーザーはリモートでシステムにアクセスでき、東北大学に設置されたスーパーコンピュータを利用して大規模な高速計算が可能です。システムを取り扱うユーザーインターフェースに GUI を搭載し、マニュアルと合わせてユーザーフレンドリーな使いやすさとなっています。



### — CoSMIC 利用促進委員会の概要

#### Overview of the utilization promotion committee for CoSMIC

MIInt と同様に、CoSMIC でも東北大学にコンソーシアムを設立して、多くの企業からの利活用を計画しています。まず、コンソーシアム設立の準備段階として、2020 年に CoSMIC 利用促進委員会を立ち上げました。ここでは SIP に参画していない企業も含めた、コンソーシアム参画予定の企業に向けて CoSMIC の利用方法についての説明や、コンソーシアムの運営方法・会則についての議論を実施しています。

## A 領域

# 「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」の取り組みと成果



## A 領域「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」

領域長： 出村 雅彦（NIMS）、榎 学（東京大学）

### 1. 背景、目的

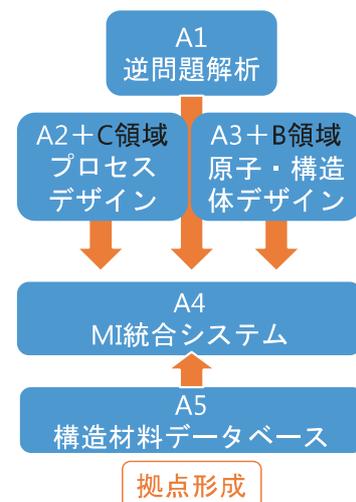
Society5.0はサイバーとフィジカルの融合によって人間中心の新たな社会を目指す。この実現にとって、マテリアルの果たす役割は大きい。新材料をいち早く開発して社会実装するためには、情報工学の発展を取り込んだ新たな材料開発手法の確立に加え、研究開発スタイルの抜本的な刷新が必要と考える。材料の研究開発は、プロセス、構造（材料マイクロ組織）、特性、性能の連関を明らかにしながら行われてきた。これらの連関は物理モデルに立脚した数値シミュレーションのほか、実験データや経験式、データベース等をつなぐ必要がある場合も多く、様々な手法を融合的に用いる必要がある。これら材料分野特有の難しさに対応しながら、計算を大胆に取り込む基盤を構築するために、第1期SIP「革新的構造材料」において、マテリアルズインテグレーション（MI）システムの開発が実施されてきた。

マテリアル革命への強い期待、我が国の材料分野の競争力の現状認識、及び、第1期SIPの成果に基づき、本研究開発では、MIの高度化と汎用化を推し進め、これを中核技術として、新しい形の産学官連携による日本型オープンイノベーションシステムの基盤を構築する。

MIの高度化では逆問題への対応を目指す。要求される性能から、構造・特性を提案し、これを実現する材料・プロセスを最適化する、いわゆる逆問題解析の手法を開発する。さらに、MIシステムの汎用化を進め、先進的な材料・プロセスへと適用先を拡大する。近年、航空機部材での適用が始まりつつある3D積層造形等の耐熱金属粉末プロセス、ますます要求が厳しくなる航空機用炭素繊維強化プラスチック（CFRP）への展開を図る。本研究開発の成果である先進的な材料開発手法を社会実装するために産学官連携のオープンイノベーションの場を形成する。

### 2. 実施概要と体制

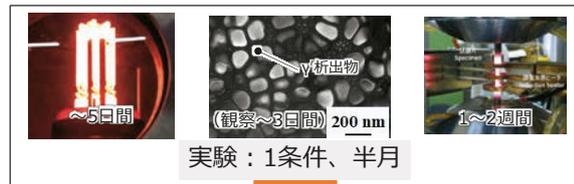
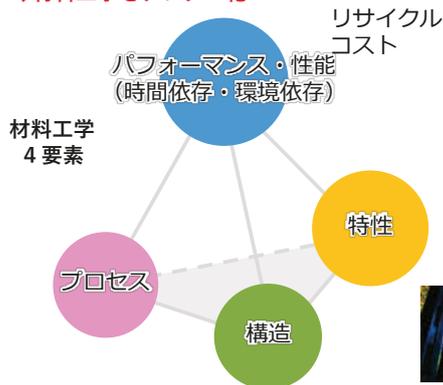
図A-（1）にテーマ構成を示す。A領域の課題は「逆問題への対応」、「先端材料・プロセスへの適用拡大」、「産学官連携の拠点形成」である。これらの課題について、A1 逆問題解析、A2 プロセスデザイン、A3 原子・構造体デザイン、A4 MI統合システム、及び、A5 構造材料データベースという5つのテーマを互いに連携させる形で取り組み、全体として先端材料・プロセスに対応した逆問題 MI 基盤を構築する。これに加えて、社会実装のための拠点形成を行う。



図A-（1）テーマ構成

材料工学手法にデータ科学を活用して、計算機上でプロセス・組織・特性・性能をつないで材料開発を加速する統合型材料開発システム

→材料工学をデジタル化



モジュール、ワークフローとしてデジタル化



図 A- (2) マテリアルズインテグレーションの考え方とシステム化による研究開発加速

### 3. これまでの取り組みと今後の社会実装に向けて

図 A- (2) に示すように、MI は、プロセス、構造、特性、性能という材料工学の 4 要素を計算機上でつなぎ、従来の実験中心の試行錯誤を計算に置き換えることで、材料開発を迅速化することを旨とする。具現化するシステムとして、MInt (Materials Integration by Network Technology) を開発してきた。MInt は材料工学に蓄積された経験式、理論式、また、これらに基づく計算機シミュレーション、実験データを用いた機械学習モデル等を、モジュールという形で実装することができる。さらに、モジュールを組み合わせたワークフローをシステム上で構成することで、プロセスから性能を一気通貫に予測することができる。MInt とデータ科学を組み合わせることで欲しい性能から材料・プロセスを最適化する逆問題を解くことが可能となる。また、モジュール・ワークフローを追加することで、先端材料・プロセスに対応できる。

2020 年 12 月に MInt を基盤とした産学官連携のプラットフォームとして MI コンソーシアムを設置した。さらに、CFRP 用の材料設計ツールとして開発してきた CoSMIC (Comprehensive System for Materials Integration of CFRP) の利活用に向けた企業連携も開始している。社会実装に向けて、MI システムの高度化とともに、利便性の向上に努めていく。



図 A- (3) MInt を社会実装するマテリアルズインテグレーションコンソーシアム

## A1「逆問題解析」

チームリーダー：榎学（東京大学）、風間 彰（JFE スチール）

参画機関：東京大学、JFE スチール(株)、帝京大学、国立情報学研究所、  
物質・材料研究機構、(株)IHI、(株)UACJ、(株)神戸製鋼所、  
日産自動車(株)、昭和電工(株)

### 1. 背景、目的

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。性能の設計および予測においてはリンクのフローの解析が必要であるが、そのためには個々の課題に応じた適切なリンクの順問題解析および逆問題解析が重要である。そこで本研究では、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ている。

### 2. 実施概要と体制

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、計算科学およびデータ科学を援用した組織予測、性能予測の仕組みを具体的に展開・発展させることにより逆問題解析アプローチを実現することを目指している。

(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、これまでに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、高強度鋼の強度・伸びに対する順問題解析および逆問題解析（図 A1-(1)、(2)）を行うことを目指す。

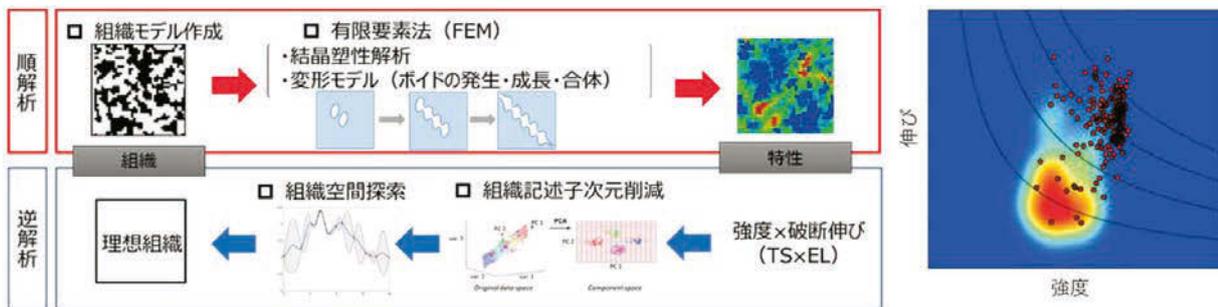


図 A1-(1) 順問題モデル構築および逆問題解析による材料設計 図 A1-(2) 強度・伸び探索例

(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マイクロ組織等に関するデータから、7000 系高強度 Al 合金の強度・伸びに関する合金組成および熱処理条件の最適解を導出することを目指す。

(3) 高強度鋼の接合プロセス最適化 MI：高強度鋼の破壊靱性に及ぼす溶接プロセスに注目し

て、これまで開発を進めてきた破壊靱性の性能予測システムに改良を加えて、破壊靱性の向上を実現するための合金組成および溶接条件を導出する。

(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、クリープの性能予測システムの高精度化を実現することより、クリープ性能の向上を実現するための溶接条件を導出する。

(5) 製品応用 MI : 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、スポット溶接強度および 2000 系 Al 合金の高温強度を対象として、MI による材料プロセス条件の導出を目指す。

<b>チーム名：A1-1 次世代高強度鋼 MI</b>
<b>チームリーダー：山崎 和彦（JFEスチール(株)）</b>
<b>参画機関：JFE スチール(株)、東京大学、国立情報学研究所</b>

## 1. 背景、目的など

### (1) 背景・目的

日本の鉄鋼業は世界最先端の技術力をもって数々の高付加価値鋼製品を開発し、社会の発展に貢献している。この地位は長年の地道で試行錯誤的な研究の蓄積により築いたものである。しかし、近年中国をはじめとする新興国の追い上げが著しくなっており、日本の鉄鋼業の国際的な競争力をいま以上に向上させるためには、これまでの延長線上にない技術を、より早く開発していくことが必要となる。次世代高強度鋼 MI では、実験科学・計算科学・データ科学を融合して鋼組織と特性を結ぶ順解析モデルと逆解析モデルを開発し、その実装による次世代高強度鋼の効率的な開発に貢献することを目的とする。

### (2) 目標

鋼板組織の特徴量や組織画像から特性を予測するデータ駆動型の順解析モデル、その順解析モデルを用いた逆解析による材料開発手法は世界初の試みである。本チームでは、優れた強度と伸びのバランスを有する複相組織鋼(DP 鋼)を例題として取り上げ、実験科学・計算科学・データ科学を融合したモジュールを開発し、トレードオフの関係にある引張強度 (TS) と全伸び (EI) をバランスさせて飛躍的に向上する組織設計指針を導出するための手法の探索を行なう。最終目標としては、これまでに鉄鋼構造材料として実現されている高延性高強度鋼板をはるかに凌駕する特性を示す候補組織を逆問題の解析により導出する。

## 2. 実施概要

### (1) 実施体制

図 A1-1-(1)に参画機関の役割および相互関係を示す。JFE スチールでは種々の組織、機械特性を有する DP 鋼の実サンプルを作製し、組織データベース (DB) を構築する。国立情報学研究所では、組織の特徴量を抽出するための組織解析モジュールを開発する。さらに組織 DB を機械学習させ、組織記述子から TS、EI などの材料特性を予測させるモジュールを開発する。東京大学では、延性破壊挙動を予測する結晶塑性有限要素法 (CPFEM) を基盤とした順解析モデルを開発し、組織 DB を用いて精度検証を行う。こうして得られた精度の良い順解析モデルを基にして、逆問題解析を行う。

### (2) 実施項目

#### 1) 組織 DB の構築 (JFE スチール)

- 種々の組織と機械特性を有する鋼板の実サンプルの作製。
  - 実サンプルの組織記述子の抽出と材料 DB の構築。
- 2) 組織解析モジュールの開発 (国立情報学研究所)
- 深層学習ベースの画像解析ツールの開発と、DP 鋼の組織写真中のフェライトとマルテンサイトの分類を自動化。
- 3) 変形・延性破壊順解析モジュールの開発 (東京大学)
- X 線 CT によるマイクロ損傷の測定を用いた DP 鋼の破壊過程の解析。
  - 延性破壊挙動を予測する CPFEM 順解析モデルの構築。
- 4) 変形・延性破壊逆解析モジュールの開発 (東京大学)
- Gaussian field モデルを用いた 3 次元モデル構築の高速化。
  - 組織探索手法 (ベイズ最適化、BLOX[1]、ランダム探索等) の比較検証とモジュールの開発。
- 5) 組織-特性機械学習モジュールの開発 (国立情報学研究所)
- 組織記述子から TS、EI 等の材料特性を導出する機械学習型予測モデルの構築。
  - 目標特性から組織記述子の候補を提案するデータ駆動型機械学習法を用いたモジュールの構築。

### (3) 主な成果

図 A1-1-(2)は組織解析モジュールのフロー図である。画像解析深層学習手法である Feature Pyramid Network[2]を用いて、DP 鋼の組織写真中のフェライトとマルテンサイトをあらかじめ分類した教師データを機械学習させることにより、未知の DP 鋼の組織写真を人間と同等の精度で組織が分類できる。このモジュールにより、実サンプルの組織記述子を高速で抽出が可能となった。

CPFEM をベースにした 2 次元の順解析モデルを提案した。図 A1-1-(3)に示すように、鋼の組織の構成相の内部や界面における破壊挙動を精度よく予測することが可能となった。さらに CPFEM モデルとベイズ最適化等の探索手法を組み合わせることで、材料特性から逆解析的アプローチにより組織候補の導出が可能となった。

### 3. 今後の計画、社会実装に向けて

これまで、2 次元の組織観察による実サンプルの組織記述子の抽出を行い、2 次元の CPFEM モデルによる順解析および逆解析を行ってきたが、解析のさらなる精度の向上のためには 3 次元での解析が必要と考えられる。今後は A5 チームと連携して実サンプルの 3 次元の組織記述子の抽出を進め、3 次元の CPFEM モデルの開発を行い、従来の特性の飛躍的向上が実現可能な候補組織を出力できるようにする。

社会実装については、開発したモジュール群 (組織解析モジュール、変形・延性破壊逆解析モジュール、組織-特性機械学習モジュール) の MInt システムへ実装を行い、材料開発での利活用が可能な環境を整える。さらに、社会的な認知と開発技術の普遍化のため複雑な組織を対象とした順問題解析・逆問題解析について論文発表を行い社会実装を促す。

[1] K. Terayama, et al., *Chemical Science*, 11 (2020), 5959-5968.

[2] T. Lin, et al., Proceedings of the IEEE conference on computer vision and pattern recognition, (2017), 2117-2125.

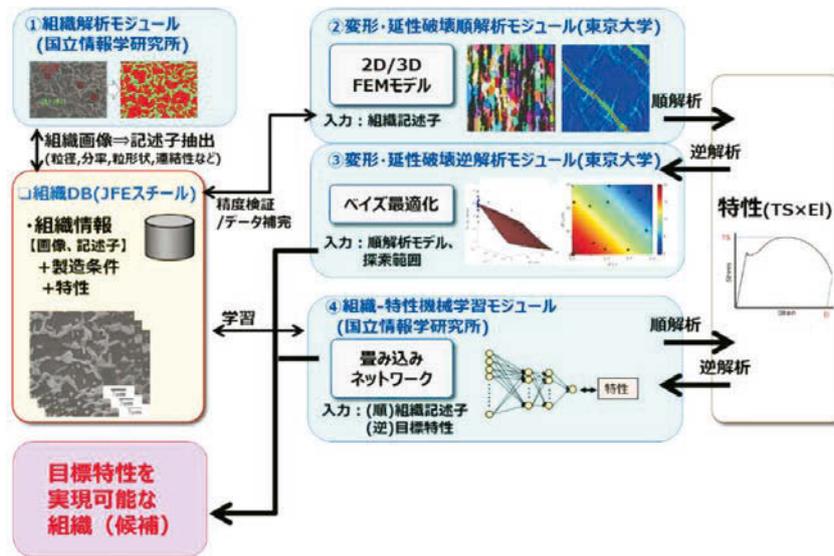


図 A1-1-(1) 参画機関の役割および相互関係

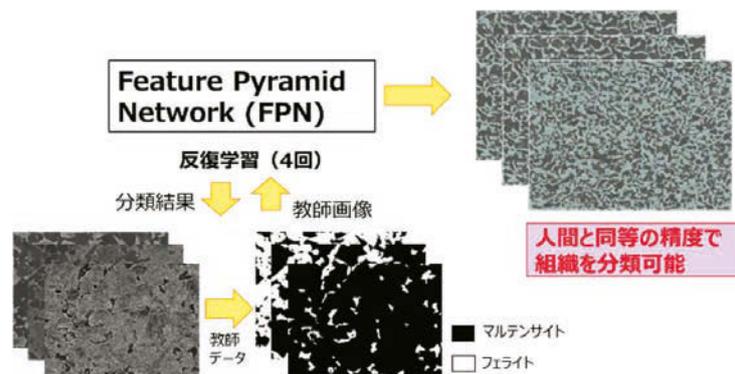


図 A1-1-(2) 組織解析モジュール

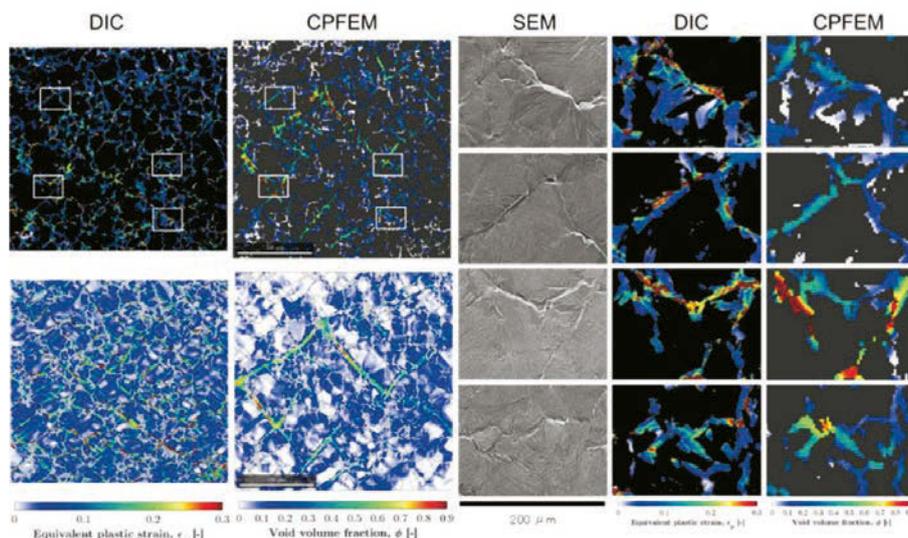


図 A1-1-(3) 引張試験中の DP 鋼実サンプルと順解析モデル(CPFEM)の比較

チーム名：A1-2 次世代高強度 AI 合金 MI

チームリーダー：一谷 幸司 ((株)UACJ)

参画機関：(株)UACJ、物質・材料研究機構、東京大学

## 1. 背景、目的など

### (1) 背景・目的

軽量かつ高強度であるアルミニウム合金は、環境負荷低減の観点から、輸送機（航空機、自動車、車両など）用の材料として採用されている。特に、超々ジュラルミンは、アルミニウム合金の中でも最も比強度が高く、輸送機への適用拡大が期待されている。一方で、実験による試行錯誤を主にした従来型の研究手法では、更なる特性改善（強度と伸びの特性バランス向上）に限界が来ている。アルミニウム合金の機械的性質には、合金組成や製造プロセス条件が複雑に影響するため、実験のみでは最適条件を選び難いことが一因である。そこで、データ駆動により超々ジュラルミンの最適な合金組成・製造プロセスを探索し、従来材よりも優れた特性バランスを得るための指針を提示することを目的とする。

### (2) 目標

開発合金の機械的特性について、2020 年度までの中間目標として TS750MPa・EL12%を設定し、2022 年度での最終目標として TS800MPa・EL12%を設定した。これらの目標値はいずれも、これまでに開発された超々ジュラルミン量産材の機械的特性（強度・伸び）の限界を超えるレベルに設定した。

## 2. 実施概要

### (1) 実施体制

図 A1-2-(1)に実施内容の概要と実施体制を示した。過去の文献等から超々ジュラルミンに関する合金組成・製造条件のデータベースを作成し、これらのデータを元に、「理論・データ融合モデル」と「混合スパース回帰モデル」の二つのモデルで順解析と逆解析を行う。逆解析の結果について、検証実験により、中間目標の達成可否を確認する。また最終的には、二つのモデルの結合を試みて、この結合モデルからの逆解析結果についても実証実験を行い、最終目標の達成の可否を確認する。

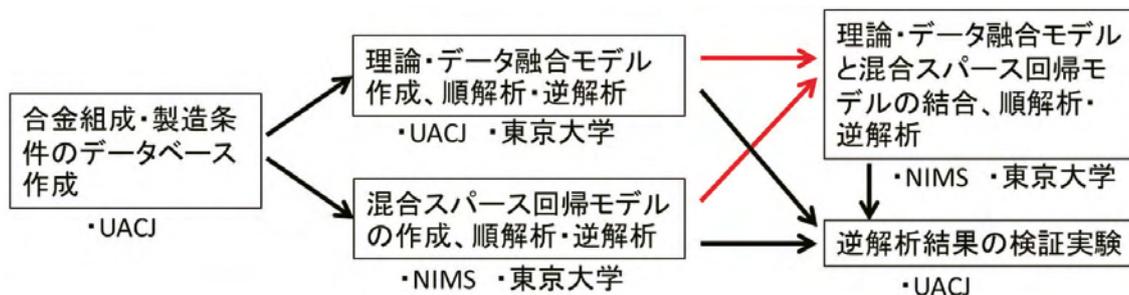


図 A1-2-(1) 実施体制の模式図

## (2) 実施項目

- 1) 逆問題解析による超々ジュラルミンの特性バランス最適化プロセスの探索 (UACJ)
  - 超々ジュラルミンに関する合金組成・製造条件のデータベース作成
  - 「理論・データ融合モデル」の作成および解析、逆解析結果の検証実験
- 2) 逆問題解析による超々ジュラルミンの特性バランス最適化プロセスの探索 (東京大学)
  - 解析モデルの作成
  - モデル全体の解析フロー確立
- 3) データ駆動的アプローチに基づく逆問題 MI 基盤の深化と応用 (NIMS)
  - 「混合スパース回帰モデル」の作成および解析
  - 「理論・データ融合モデル」と「混合スパース回帰モデル」の結合モデル作成および解析

## (3) 主な成果

作成した「理論・データ融合モデル」の逆解析により、中間目標達成の可能性がある 2 種類の製造条件 (合金組成 + 製造条件) を見出した。これらについて検証実験を行った結果、このうちの 1 条件において、引張強さ 752MPa、伸び 12% の特性を示し、中間目標 (TS750MPa、EL12%) を達成することを確認した。今回行った逆解析の結果と、その条件に基づくラボでの検証実験の結果を、図 A1-2-(2) にまとめた。

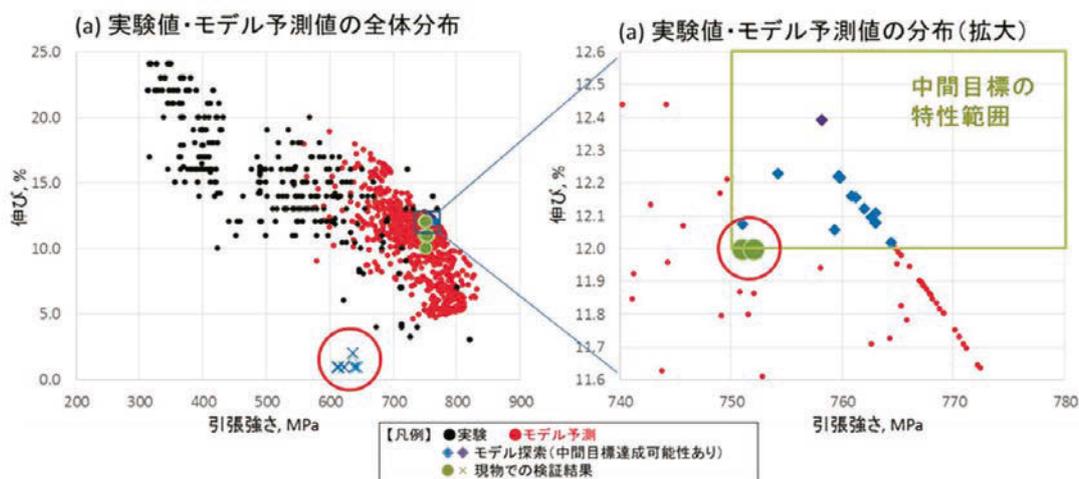


図 A1-2-(2) 「理論・データ融合モデル」による逆解析と検証実験の結果

一方、「混合スパース回帰モデル」についても検討を進めて、その逆解析結果を得た。本解析結果では、各条件 (合金組成 + 製造条件) に対して、TS・YS のそれぞれの目標達成の可能性と、両方を同時に目標達成する可能性を提示することができる。この逆解析結果については、本年度に検証実験を実施中である。

## 3. 今後の計画、社会実装に向けて

これまで別々に開発を進めてきた、「理論・データ融合モデル」と「混合スパース回帰モデル」を組み合わせ、さらに精度の高い結合モデルの構築を、本年度に開始した。本結合モデルについては、

2021 年度中に完成させ、これによる逆解析を実施して、目標達成に最適な条件を提示する。この条件に基づく検証実験を行って、最終目標（TS800MPa、EL12%）の達成可否についての検証実験と考察を行う予定である。

また、本研究で開発する結合モデルについて、MInt システムへの実装を、2021 年度中に行う計画である。

チーム名：A1-3 高強度鋼の接合プロセス最適化 MI

チームリーダー：井元 雅弘 ((株)神戸製鋼所)

参画機関：(株)神戸製鋼所、東京大学

## 1. 背景、目的など

### (1) 背景・目的

厚鋼板は様々な大型構造物に使用され、溶接施工により組み立てられることから、継手の特性確保が不可欠である。また、構造物の大型化や適用環境が厳しくなるに伴い、高強度、高靱性(低温対応)のニーズがある。狙いの継手特性を確保するための鋼材成分や溶接プロセス(入熱)の最適化技術により開発効率の向上が期待される。本研究では、溶接熱影響部(HAZ)組織・靱性(脆性破壊特性)を予測する順問題モジュールの整備と、鋼材成分と溶接プロセスを最適化できる逆問題モジュールの構築を目的とする。

### (2) 目標

中間目標(2020 年度末時点目標)

- ・780MPa 級溶接部-50℃靱性の設計指針の提案
- ・MInt システムへのプロトタイプモデル実装

最終目標(2022 年度末時点目標)

- ・980MPa 級溶接部-50℃靱性の設計指針の提案
- ・多パス溶接条件に対応した順問題モジュールの MInt システムへの実装
- ・自動設計(1 パス)が出来る逆問題モジュールの MInt システムへの実装

## 2. 実施概要

### (1) 実施体制

神戸製鋼所：材料試作・評価、組織・データ解析

東京大学：組織・データ解析、モデル構築

### (2) 実施項目

1)MI を活用した高信頼性溶接部の設計技術(神鋼)

- ・高強度鋼 HAZ 組織の破壊挙動明確化、溶接熱影響部の実験データベース整備
- ・逆問題解析の検証試験実施

2)材料開発及びプロセス最適化における逆問題解析(東大)

- ・溶接熱影響部靱性予測モデルと材料の自動設計システムの開発
- ・MI 逆問題解析に資するデータ同化手法の開発

### (3) 主な成果

(3)-1)MI を活用した高信頼性溶接部の設計技術(神鋼)

(3)-1)-1・高強度鋼の主要組織である下部ベイナイトの破壊挙動について計装化シャルピー試験機を用いて定量化した。図 A1-3-(1)に示すように、下部棚付近では、下部ベイナイトも上部ベイナイトと同様に急激な荷重低下までに吸収したエネルギー（き裂発生エネルギー）が主体であった。これにより、破壊発生までに蓄えたエネルギーをシャルピー吸収エネルギーとして計算する脆性破壊特性予測モデルを下部ベイナイト組織に適用することの妥当性を検証した。また、780MPa 級モデル鋼板を基に主要な合金元素(C、Mn、Ni、Cr、Mo)を変化させた際の1パス・多パス溶接再現 HAZ 組織・靱性のデータベースを拡充した。

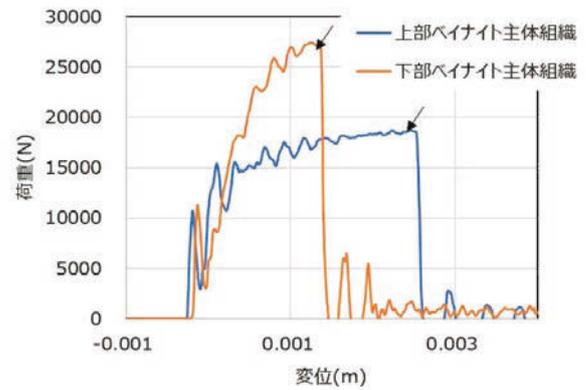


図 A1-3-(1) 上部ベイナイトと下部ベイナイトの荷重変位曲線例

(3)-1-2・780MPa 級溶接部の低温靱性 (-50℃) を確保するための成分・プロセス（溶接入熱）条件の逆問題解析検証試験を東大と連携して行い、人手の介入無しに上記目標特性を制約条件下（母材強度下限値、合金コスト上限値）で満足する化学成分の導出を行うことができた（検証条件：Fe-0.05C-0.4Si-1.6Mn-0.04Cu-1.4Ni-0.38Cr-0.26Mo-0.014Nb-0.04V-0.0012B-others(P、S、Al、O、N)-入熱 4.1~5.5kJ/mm 相当）。

(3)-2)材料開発及びプロセス最適化における逆問題解析(東大)

(3)-2)-1 ・1パス溶接 HAZ については、フェライトパーライト、MA を含む上部ベイナイト、下部ベイナイト、マルテンサイトなどの混合組織に対応できる脆性破壊特性予測モデルを構築した。Ti、B、Al、N など微量元素の影響もモデル化し、加えて焼入れ焼戻し鋼の母材強度モデルも構築した。

・母材強度と HAZ 靱性の物理モデルを機械学習して十分な精度がある近似関数を作成した。これら近似関数を用い、合金コストなどの制約条件を考慮した1パス溶接部の鋼材化学成分を自動設計できることを確認した。図 A1-3-(2)は最適化計算例であり、C、Ni、Mn と合金コスト、炭素当量(Ceq)、母材強度と、じん性の遷移温度の関係を示したものである。

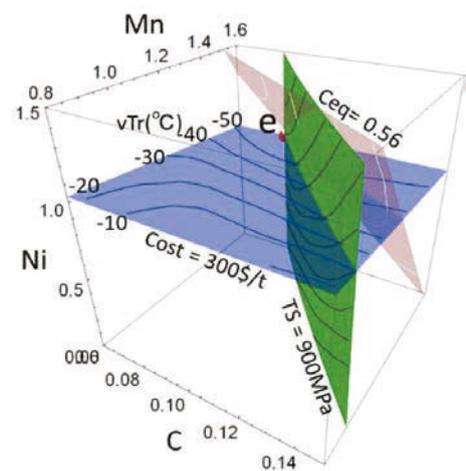


図 A1-3-(2) HAZ 靱性最適化の計算例(C、Ni、Mn のみ表示)

・多パス溶接 HAZ のうち、焼戻し熱サイクルを受けた部分の硬さ変化を考慮し、靱性変化も実験データを概ね説明できるようになった。 $\gamma$  逆変態した部分と焼戻し熱サイクルを受けた部分に関する HAZ 靱性予測モデルはほぼ構築完了した。(残課題：二相域再加熱 HAZ)

(3)-2)-2 順問題モジュールの高精度化の取り組みとして、相変態モデル中パラメータの事後分布

推定のため、マルコフ連鎖モンテカルロ法（MCMC 法）を実装し、フェライト、パーライト、ベイナイト変態が生じているデータセットから、CCT データを説明するパラメータの最適値ならびにその誤差評価を得ることに成功した。MCMC のイタレーション回数を 5000 回にしたところ、特にパーライトに関するパラメータは、従来よりも適正な値を得ることができた。

以上のように、A1-3 サブチームでは、逆問題解析により、中間目標の特性を満足する設計指針の導出・検証まで進展している。また、構築した計算モジュールのプロトタイプモデルは MInt システムへの実装が進んでいる。

### 3. 今後の計画、社会実装に向けて

これまでに構築した順問題・逆問題モジュールの高精度化と機能拡張の検討を継続し、980MPa 級鋼板の溶接熱影響部(-50℃対応)の設計指針提案に向けた検証試験を進めるとともに、多パス溶接に対応した順問題モジュールの構築を行い、MInt システムへのモジュール実装を進めていく予定である。

チーム名：A1-4 耐熱鋼の接合プロセス最適化 MI

チームリーダー：阿部 大輔 ((株)IHI)

参画機関：物質・材料研究機構、東京大学、帝京大学、(株)IHI

## 1. 背景、目的など

### (1) 背景・目的

2016年に発効したパリ協定や世界で頻発する異常気象を受けて、CO<sub>2</sub>排出削減に対する要求が高まっている。これに伴い社会インフラを構成する高温燃焼機器ではより効率的な運用が求められることから、構成材料の高温性能、特に溶接継手のクリープ性能の向上が急務である。そこで本研究では、逆解析を適用して溶接プロセスを最適化することにより、耐熱鋼溶接継手のクリープ寿命の劣化を最小限に抑える技術を開発することを目的とした。クリープ損傷解析はSIP第1期で開発したクリープ性能予測モジュールを用い、溶接プロセスから予測したHAZの幾何形状に基づくクリープ寿命予測に、マイクロ組織変化を考慮したクリープカーブ予測を加えたモデルとしている。このような溶接プロセスからHAZ性状まで含んだクリープ寿命の一貫予測は本研究の特徴である。

### (2) 目標

逆問題MIの手法を産学官で開発し、これを用いて継手クリープ寿命を既存継手より15%向上可能な溶接プロセス、HAZ性状を提案する。

## 2. 実施概要

### (1) 実施体制

順方向解析のベースとなるマクロルート（溶接プロセスからHAZの幾何形状を予測し、これに基づいて溶接継手のクリープ寿命を予測）およびその逆解析をNIMS、IHIが中心になって開発する。これに加わるマイクロルート（溶接プロセスおよびクリープ変形中のHAZ組織予測とこれに基づくクリープ寿命予測）は東京大学が開発し、逆解析ではNIMSと共同で行う。これら2つのアプローチに対して妥当性を示すため、IHIが継手サンプルを製作し、帝京大学がクリープ損傷評価を行う。

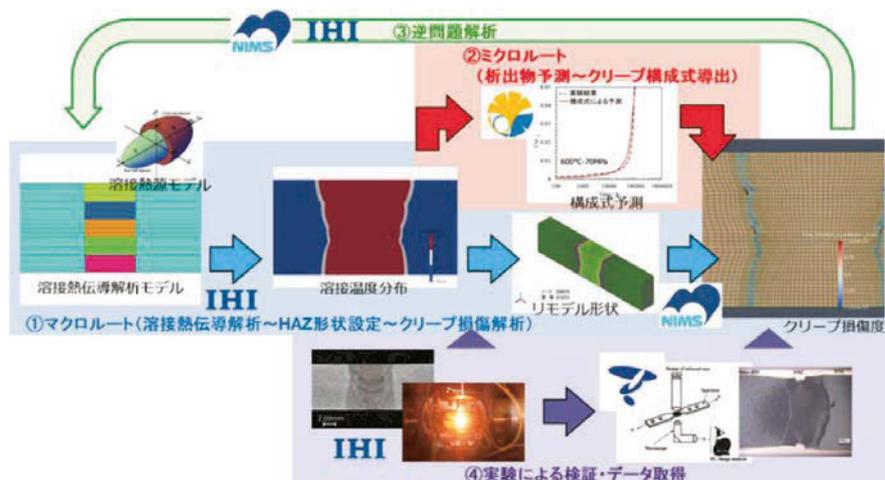


図 A1-4-(1) 各機関の役割と相関関係

### (2) 実施項目

#### 1) 耐熱鋼における溶接部のクリープ性能データベースの構築 (NIMS)

- 一貫予測ワークフロー (マクロルート) の構築と MInt システムへ実装

- 実験計画法とベイズ最適化を組み合わせた逆解析を実施
- 2) 構造材料における逆問題解析技術の開発とこれを中核とした拠点形成（東京大学）
    - 析出物、母材組織、転位密度などクリープ強度に影響する組織因子の評価
    - 組織評価に基づいたクリープ構成式の提案
  - 3) 溶接プロセスの影響に関する定量評価技術の構築（帝京大学）
    - In situ 観察クリープ試験の実施とクリープ損傷挙動の解明
    - クリープ寿命と負荷応力の関係式と定常クリープ速度と負荷応力の関係式の明示
  - 4) 所要クリープ性能を満たすための溶接プロセス最適化技術の開発（IHI）
    - マクロルート（順方向）解析データの蓄積と逆解析適用
    - 溶接継手データの取得、HAZ の幾何形状の自由度を上げるための溶接手法の開発

### (3) 主な成果

マクロルートでは、溶接プロセスから HAZ の幾何形状の予測を経てクリープ寿命を予測する一貫予測ワークフローを構築し MInt システムへ実装した。計算データを蓄積するとともに、実験計画法とベイズ最適化を組み合わせることで、クリープ寿命を向上させる HAZ の幾何形状の探索を効率よく行い、既存継手より寿命の良い溶接プロセス条件を見出した。（図 A1-4-(2)）ミクロルートでは再現 HAZ 材やクリープ途中止め試験とその評価結果を基に、組織に基づいたクリープ構成式を提案した。（図 A1-4-(3)）また、継手のクリープ試験のその場観察によりクリープ損傷挙動を明らかにし、換算応力から溶接プロセスの性能を定量的に評価する手法を構築した。

各機関とも中間目標を達成するとともに、サブチームの中間目標である「継手クリープ寿命を既存継手より 10% 向上可能な溶接プロセス、HAZ 性状を提案する。」を達成した。

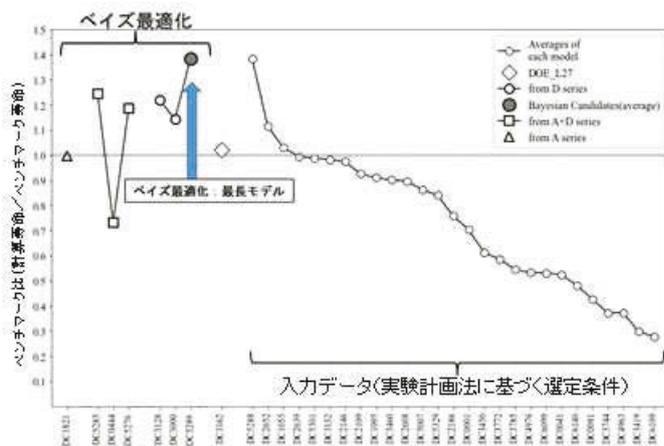


図 A1-4-(2) 逐次最適化の予測結果

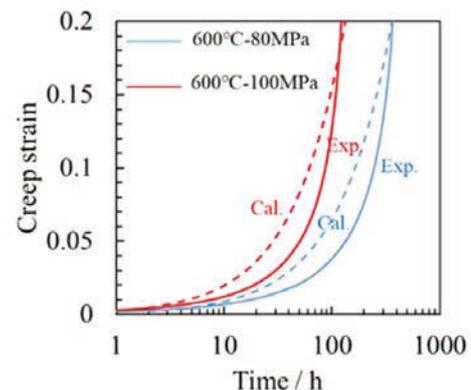


図 A1-4-(3) 提案式と実験値の比較

### 3. 今後の計画、社会実装に向けて

最終目標達成に向けて、現在個別に開発を進めているモジュールやワークフローを MInt システムに実装し、逆解析における逐次最適化手法を自動化することにより広範囲の溶接プロセス条件の探索を行うことで、より長寿命が期待できる溶接プロセス条件、HAZ 性状を提案できるようにする。探索する溶接プロセス条件と HAZ 性状、クリープ寿命が現実的な解となるように、クリープ寿命に影響を及ぼす HAZ 性状の因子を明確にし、合理的なクリープ損傷形成モデルの提案を行う。HAZ 劣化を抑制した溶接プロセス条件を実製作へ反映し、継手低減係数の合理化へとつなげる。

チーム名：A1-5-1 製品応用 MI（スポット溶接）

チームリーダー：近藤 隆明（日産自動車(株)）

参画機関：日産自動車(株)、東京大学

## 1. 背景、目的など

### (1) 背景・目的

地球温暖化の抑制のために、自動車から排出される二酸化炭素の削減が強く求められている。燃費向上が方策の一つとなるが、最近の衝突安全性能の向上と共に車両重量も重くなる傾向にあり、燃費への跳ね返りが懸念される。

車両重量を現モデル同等以下としつつ、これらの高い要求性能を満足する自動車の実現のために、成形性を確保しつつ強度を上げた高成形超ハイテン適用部品拡大による軽量化が必要である。

ただ、この高延性超ハイテンの強度・伸び性能を達成するためには、炭素含有量を増やさなければならず、それにより溶接性悪化、具体的には十字引張強度の低下が課題となる。今後、更なる軽量化を実現するために、ISMA 等で 1.5GPa 級の強度と伸び 20%を持つ材料の開発が進められているが、このような次世代ハイテンでは炭素含有量が更に多くなり、溶接性が大きな課題となることが想定される。

### (2) 目標

本研究では 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し、新たな加工プロセスを見出す基盤を構築する。具体的には、次世代超ハイテンを溶接可能な最適条件の探索を短期間で行うためのワークフロー(WF)の開発と、その活用による溶接条件最適化手法を確立することをゴールとする。

## 2. 実施概要

### (1) 実施体制

日産自動車(株)：溶接強度データ取得、強度-破断モード解析を含む順解析の構築

東京大学：溶接強度解析、逆解析手法の検討

### (2) 実施項目

#### 「逆解析を用いた中高炭素鋼における溶接条件最適化技術」

- ① 溶接部の温度履歴予測モジュール(日産自動車、東大)
  - ・Sorphas により溶接部ナゲット形状および溶接部の温度履歴の解析を行う(日産自動車)
  - ・Sysweld のデータでの解析についても並行して検討する(東大)
- ② 溶接部の硬さ分布予測モジュール(東大)
  - ・温度履歴より、MI システムにすでに搭載されている硬さ予測モジュールをスポット溶接向けに改良。
- ③ 硬さ⇔応力歪曲線変換モジュール(MI システム搭載済み)
  - ・予測された溶接各部の硬さより Swift の式により応力-ひずみ曲線に変換する。

#### ④ 溶接強度、破断モード予測モジュール(東大)

・溶接部形状、各要素の応力-歪曲線より Abaqus にて有限要素法解析を行い、溶接部強度および破断モードを予測する。破断モードについては、Cohesive モデルを導入し、溶接部の組織、硬さから適切な靱性値を設定し、界面破断方向とプラグ破断方向にいずれが優位かを判定する。

#### (3) 主な成果

1180MPa 級ハイテン、炭素含有量は $\sim 0.25\text{mass}\%$ までの材料を対象とし、ハイテンの場合に強度確保が難しい十字引張のモードで溶接強度、破断モード予測モデルの構築を実施した。

溶接強度判定、破断モードの判定には Cohesive モデルを導入することで 980MPa ハイテン、1180MPa ハイテン等複数の鋼種で精度の高い予測が可能となった。

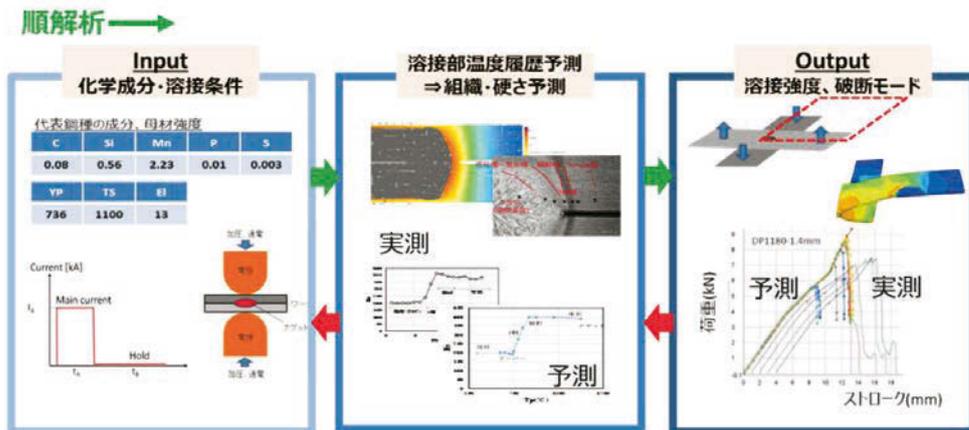


図 A-5-1-1) 溶接強度、破断モード予測 順解析モデル

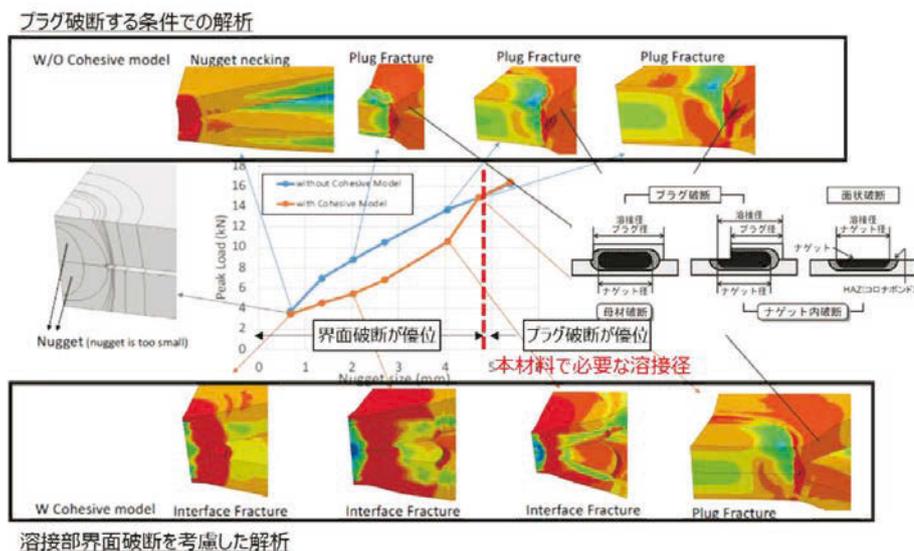


図 A-5-1-2) 逆解析の例 1180MPa ハイテン 1.4t で必要な溶接径の導出

### 3. 今後の計画、社会実装に向けて

今後、次世代ハイテンで想定される  $0.3\text{mass}\%$ 以上の鋼板に対応する各種予測モジュールの UPDATE を行い、MI システムへの実装を完了させる。また、併せて情報工学的アプローチを導入することで計算コストを下げ、簡易に最適な溶接条件や材料組成を導出することができるようにする。

チーム名：A1-5-2 製品応用 MI（2000 系アルミニウム合金）

チームリーダー：奥野 好成（昭和電工(株)）

参画機関：昭和電工(株)、東京大学、物質・材料研究機構

## 1. 背景、目的など

### (1) 背景・目的

2000 系、7000 系を中心とする高強度アルミ合金が急激に伸びると市場予測されている。2018 年市場規模は 379 億 USD であり、直近の年平均成長率 7.8%で、2023 年に 552 億 USD になると予想されている (<https://www.marketsandmarkets.com/PressReleases/high-strength-aluminum-alloy.asp>)。一方で、アルミ合金部材の大きな課題としては、強度があげられる。特に、自動車関連部材においては、高温での強度に対する要求が増している。

### (2) 目標

本サブチームの出口イメージは、①軽量化とそれに伴う強度低下・コスト増加を回避できる材料、②多数の要求特性を維持しつつ高温強度を向上し得る材料、の提案を MI によって行うことである。

## 2. 実施概要

### (1) 実施体制

参画機関の役割、相互関係を図 A1-5-2-(1)に示す。



図 A1-5-2-(1) 本テーマの実施体制

### (2) 実施項目

- 1)2000 系アルミ合金データベースの構築（昭和電工）
  - 公開されているアルミ合金データの収集と収集したデータの構造化
- 2)ニューラルネットワークのバイズ学習による予測モデル構築（昭和電工、NIMS、東大）
  - ニューラルネットワークのバイズ学習による室温特性・高温特性の予測モデル構築
- 3)中間層の理論的説明（昭和電工、東大）
  - CALPHAD 法や LSKWN 法に基づく、組成・プロセス条件と組織、組織と特性の紐づけ
- 4)組成・プロセス条件の提案
  - 逆問題解析ツールの開発と高温強度特性有するアルミ合金を作成する組成・プロセスの提案

### (3) 主な成果

- 1)2000 系アルミ合金データベースの構築（昭和電工）

一般に公開されているデータを用いて、機械可読性の高いデータベースを完成した(図 A1-5-2-(2))。MatWeb (<http://www.matweb.com/>) のデータベースと日本アルミニウム協会

(<https://www.aluminum.or.jp/>) のデータベースから、必要な情報を得て構築した。

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J
1	通し番号	引張強度(MPa)	0.2%耐力(MPa)	伸び(%)	シリコン, Si(wt%)	鉄, Fe	銅, Cu	マンガン, Mn	マグネシウム, Mg	クロム, Cr
2	1	220	140	9	0.7	0.25	4.46	0.8	0.5	0.06
3	2	185	95	18	0.85	0.35	4.46	0.8	0.5	0.06
4	3	225	146	13	0.5	0.35	4	0.7	0.7	0.06
5	4	180	70	22	0.5	0.35	4	0.7	0.6	0.06
6	5	185	75	11	0.25	0.25	4.35	0.6	1.5	0.06
7	6	215	135	11	0.06	0.06	2.7	0.025	0.125	0.025
8	7	170	75	18	0.1	0.15	6.3	0.3	0.9	0
9	8	185	95.5	18	0.85	0.35	4.46	0.8	0.5	0.06
10	9	205	125	12	0.85	0.35	4.46	0.8	0.5	0.06
11	10	200	110	10	0.85	0.35	4.46	0.8	0.5	0.06
12	11	179	68.9	22	0.5	0.35	4	0.7	0.6	0.06
13	12	186	75.8	20	0.25	0.25	4.35	0.6	1.5	0.06
14	13	240	130	12	0.25	0.25	4.35	0.6	1.5	0.06
15	14	220	95	12	0.25	0.25	4.35	0.6	1.5	0.06
16	15	172	75.8	18	0.2	0.3	6.8	0.4	0.02	0
17	16	220	125	12	0.2	0.3	6.8	0.4	0.02	0
18	17	220	110	12	0.2	0.3	6.8	0.4	0.02	0
19	18	210	190	11	0.05	0.05	2.7	0.025	0.125	0.025

図 A1-5-2-(2) 構築した構造化データベース

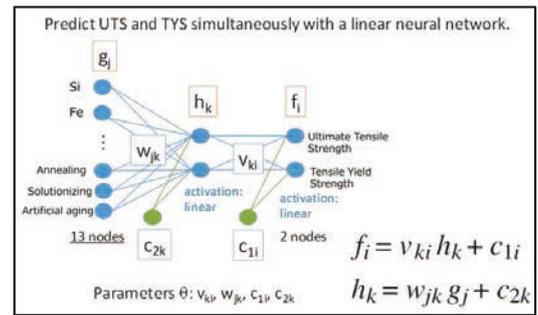


図 A1-5-2-(3) ニューラルネットワーク

## 2) ニューラルネットワークのベイズ学習による予測モデル構築 (昭和電工、NIMS、東大)

データベースを用いて線形ニューラルネットワーク(図 A1-5-2-(3)) のパラメータのベイズ推定をレプリカ交換モンテカルロ法によって実行した。説明変数は、Si 等の添加元素量、焼鈍・溶体化・人工時効の有無、中間層はノード数 2 個の 1 層、目的変数は室温での引張強度と 0.2%耐力とした。室温と高温の引張強度はそれぞれ R2 = 0.917、0.628 で高予測精度となった(図 A1-5-2-(4)(5))。

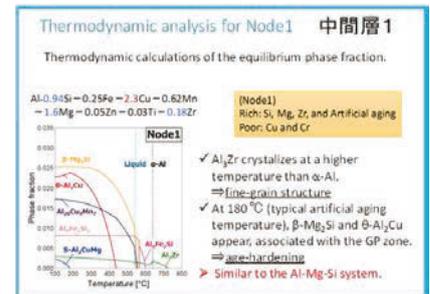
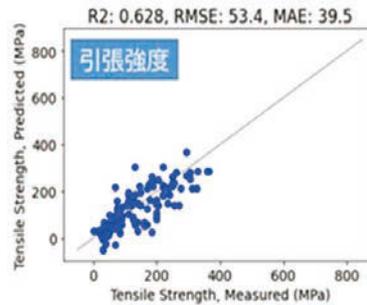
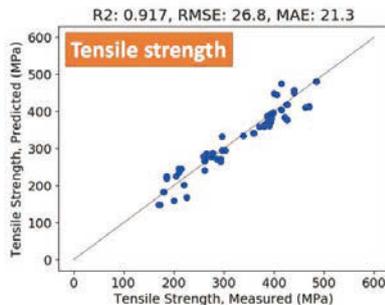


図 A1-5-2-(4) 室温引張強度 図 A1-5-2-(5) 高温引張強度 図 A1-5-2-(6) 中間層解釈  
3) 中間層の理論的説明 (昭和電工、東大)

更に、中間層の各ノードのそれぞれの重みから、強化機構の説明が可能となった。例えば、図 A1-5-2-(6)に示すように、中間層ノード 1 は時効温度処理によるβ-Mg<sub>2</sub>Si とθ-Al<sub>2</sub>Cu 相による強化機構として解釈され、それぞれの重みに応じて引張強度や 0.2%耐力が決まるとして予測されていることが分かる。この結果は、アルミ合金開発者の経験的知見と合致するものである。

## 4) 組成・プロセス条件の提案

逆問題解析は逆行列計算により実行することが可能であり、逆問題解析モジュールを開発した。それによる、高温引張強度を達成する組成・プロセス条件を提案していく予定である。

成果は ① ポスター発表 (2020/2/25)TMS2020 @ San Diego、② ポスター発表 (2020/10/28)SIP2 成果報告、③ 口頭発表(2021/3/16)TMS2021@VirtualMeeting、④ 論文発表 [https://doi.org/10.1007/978-3-030-65261-6\\_43](https://doi.org/10.1007/978-3-030-65261-6_43)、⑤ 口頭発表 (2021/4/20)MRS 2021 Spring Virtual Meeting で公開した。

## 3. 今後の計画、社会実装に向けて

今後は、中間層の解釈のため LSKWN 法による解析、事後分布の評価、逆問題解析、高温・高強度合金の設計を実施し、アルミ合金特性・逆問題 MI システムを完成させ、実活用につなげる。

チーム名 : A2 プロセスデザイン 【A2-1~A2-4 の成果概要】

チームリーダー : 渡邊 誠 (物質・材料研究機構) 、井頭 賢一郎 (川崎重工業株式会社)

参画機関 : 物質・材料研究機構、川崎重工業 (株) 、大阪大学、東北大学、兵庫県立大学、名古屋大学、トーホーテック (株)

1. 緒言

A2 "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基複合材料 (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、求められる特性や性能予測に対して、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る。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 技術の開発を進めることで、MI による材料開発の革新を図ることを目指している。

2. A2-1~A2-4 成果概要

ここでは A2-1~A2-4 の成果について図にまとめる。これらのサブテーマでは Ni 基合金を対象に、粉末製造プロセス最適化 (A2-3)、粉末 3D 積層造形プロセス中のき裂発生予測 (A2-1)、3D 造形に適した合金探索のための $\gamma'$ 析出予測 (A2-2)、時効熱処理による組織予測とそれに基づく強度および疲労などの性能予測 (A2-4) について、ベイズ最適化や統計モデル、数値シミュレーションなどを活用し、開発を進めている。また A2-4 では開発したワークフローの Mint システムへの実装を完了するなど、システムへの実装を順次進めている。さらに、C1 チームとの連携に基づき、3D 造形に適した新しい合金組成の探索と試作を実施し、MI を活用した材料開発加速の実例を示すべく開発を進めている。

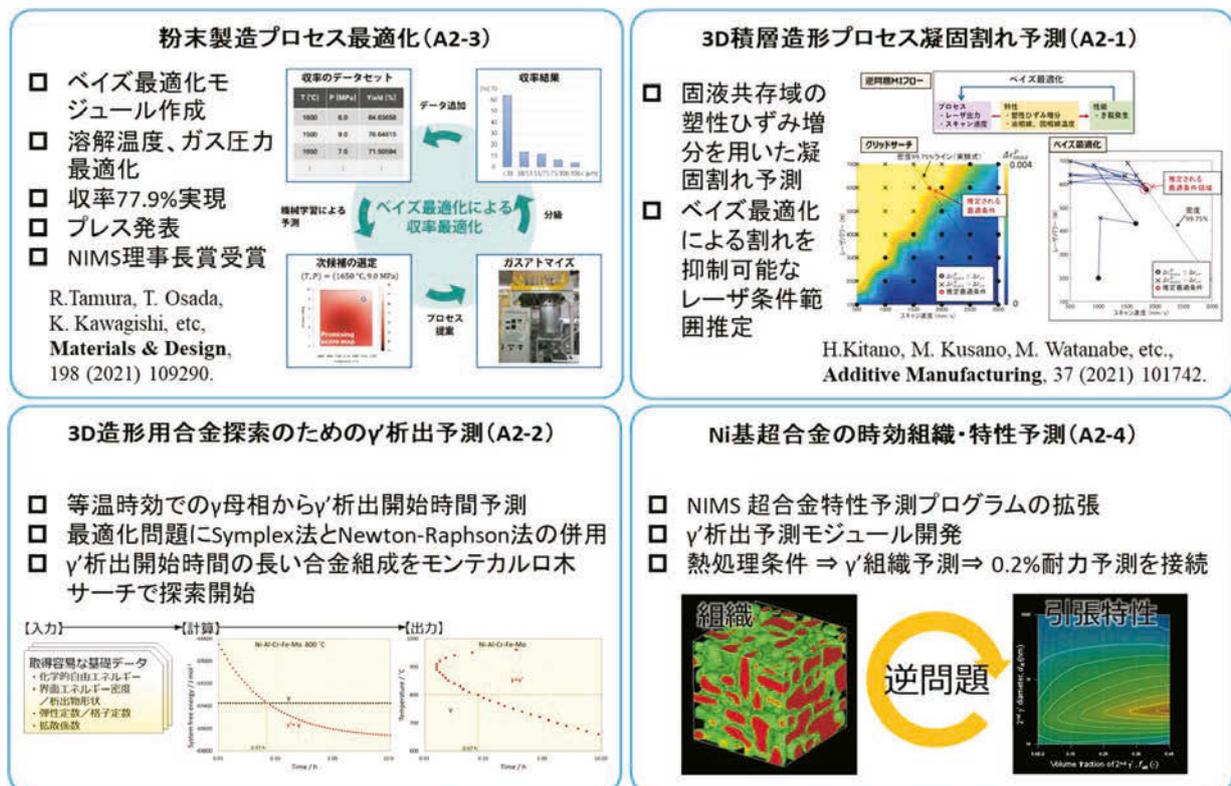


図 A2-1) プロセスデザイン : A2-1~A2-4 の成果概要

チーム名：A2-1 粉末3D造形プロセス MI
チームリーダー： 渡邊 誠（物質・材料研究機構）
参画機関：物質・材料研究機構、大阪大学、東北大学、兵庫県立大学、川崎重工業(株)

## 1. 背景、目的など

### (1) 背景・目的

三次元（3D）積層造形プロセスは、コンピュータ上のデザインにそって、原材料を積層していくことで、切削等の加工を行わずに、三次元構造体を直接作成可能なプロセスである。従来技術では困難な複雑形状部材の作製や、一体製造による必要部品数の低減が可能である。さらに加工による原料廃棄を抑制し、コスト削減や低環境負荷が期待できることから、様々な産業分野において、活発な技術開発と実用化が進められている。特に、高強度金属材料など難加工性材料を利用し、少量で高品質な製品が求められる航空機産業やエネルギー関連産業において、今後ますます利用が進むと考えられている。これらの分野において重要な、高性能耐熱合金部材製造に対する、本プロセスの適用では、造形プロセス中に生じるき裂発生抑制が課題の一つとなっている。その解決には、三次元積層造形プロセスに適した材料開発とプロセス条件の最適化が鍵となる。しかし、新しい材料の開発には非常に長期に渡る研究が必要であり、MI 技術活用による開発期間短縮への大きな期待がある。そこで、本サブチームでは、き裂発生を抑制でき、かつ要求力学特性を満足する材料開発を加速するための MI 技術の開発を目指す。計算科学いわゆる Integrated Computational Materials Engineering (ICME) を活用した材料開発は、欧米で非常に活発な取り組みがなされている。中でも米国 Questek Innovation 社が多くの実績を挙げており、3D 造形用材料開発プロジェクトも複数の金属材料について進められており、日本でも国を挙げての技術開発が必要不可欠な状況にある。

### (2) 目標

Ni 基合金の 3D 積層造形プロセスを対象とし、レーザー特有の急冷凝固過程における組織やき裂発生予測、特性予測を可能とする技術を実現する。

## 2. 実施概要

### (1) 実施体制

本サブテーマは 5 機関で構成されている。実施体制図を図 A2-1-(1) に示す。A2-1 では C1 での研究開発に貢献できる MI 技術の開発を担っている。そのために 3D 造形プロセス中の組織やき裂発生予測技術の構築を進めている。さらに、得られた知見に基づいて、3D 造形プロセスに適した新しい合金組成の探索と選定を、C1、A2-2、A2-3 と協力して実施している。また、開発モジュールについて、A4 と連携して MI システム(MInt) への実装を進めている。

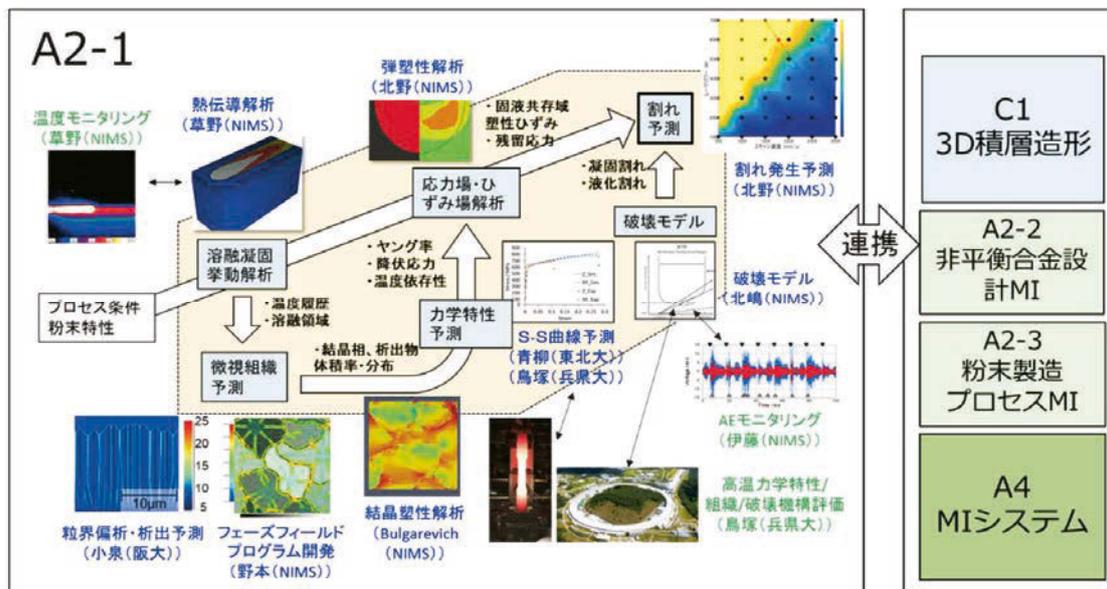


図 A2-1-(1) A2-1 研究開発体制と他テーマとの連携図

## (2) 実施項目

### 1) 3D 積層造形プロセス MI (NIMS)

- き裂発生予測技術の開発、バイズ最適化による最適プロセス条件探索、新合金探索

### 2) 3D 積層造形された Ni 基超合金の最適熱処理条件推定のための MI 技術開発 (阪大)

- 凝固偏析のフェーズフィールド計算、凝固偏析組織を出発とした  $\gamma'$  析出計算

### 3) 金属 3D 積層造形材の機械学習による力学特性推定技術の開発 (東北大)

- 機械学習モデルの構築、有限要素法による応力ひずみ曲線の予測技術構築

### 4) 3D 造形 Ni 合金の高温力学的特性と室温靱性の調査とその支配機構解明 (兵県大)

- くびれ速度制御画像計測高温引張試験法の開発、高温割れの結晶方位依存性調査

### 5) 3D 積層造形 MI 技術の実展開への課題抽出 (KHI)

- 開発の方向性について産業界の観点から逐次提言

## (3) 主な成果

割れ発生メカニズムの中で凝固割れを対象として、造形時の凝固完了までに蓄積される塑性ひずみ増分をパラメータとして、レーザ出力と走査速度に対してき裂発生予測を可能とした。フェーズフィールド法による凝固時の溶質偏析予測と、この偏析に基づいた  $\gamma'$  析出予測技術を開発した。析出物粒径や体積率、結晶配向性など組織因子を考慮した高温応力ひずみ曲線予測技術の構築を進めた。バイズ最適化により、少ない試行回数で適切なプロセス条件を探索することが可能であることを示し、逆問題 MI としての有用性を示した。

## 3. 今後の計画、社会実装に向けて

造形中の液化割れや固相割れを予測するワークフローの構築と、そのために必要な組織や特性の予測技術の開発を進め、必要な材料特性を満足しつつも造形中に割れの生じない材料探索を支援する MI 技術を確立する。C1 での検証を経て、後続プロジェクトでの社会実装に貢献する。

チーム名：A2-2 急冷非平衡合金設計 MI
チームリーダー：戸田 佳明（物質・材料研究機構）
参画機関：物質・材料研究機構

## 1. 背景、目的など

### (1) 背景・目的

三次元金属積層造形法は新しい造形プロセスであるため、従来の鍛造や鋳造に適さなかった新しい合金系で造形でき、既存材料よりも優れた特性を示す可能性がある。しかし、新しい合金を実験的な手法のみで探索するのは、多くの試料と時間が必要で効率が悪い。また、機械的特性に大きく影響する析出組織を計算により予測して探索するにしても、従来のモデルでは多くの入力パラメータが必要で、かつ計算に時間がかかり効率的・網羅的な合金探索はできない。そこで本研究では、入手が容易ないくつかの入力パラメータで析出組織を迅速に予測するプログラムを開発・実行し、様々な組成・温度での析出条件を予測して、積層造形に適した新しいニッケル基合金を探索する。

### (2) 目標

任意の合金組成・温度・時間における多元系ニッケル基合金の $\gamma'$ 相の析出挙動を容易に迅速に網羅的に予測するプログラムを開発・実行し、 $\gamma'$ 相の析出時間が遅く、かつ $\gamma'$ 相の体積分率が高い合金組成を探索し、三次元積層造形法に適した新しい耐熱ニッケル合金として提案する。

## 2. 実施概要

### (1) 実施体制



図 A2-2-(1) A2-2 チームの他研究機関との相互関係

本サブチームは物質・材料研究機構のみで実施されるが、積層造形プロセスや探索する新しい耐熱ニッケル基合金の特性について、A2-1 チームの参画機関（大阪大学、東北大学、兵庫県立大学、物質・材料研究機構）や川崎重工業と連携する。

### (2) 実施項目

#### 1) 急冷非平衡合金設計 MI（物質・材料研究機構）

- 析出予測モジュールの開発
- 積層造形に最適なニッケル合金の探索

### (3) 主な成果

#### 1) 急冷非平衡合金設計 MI (物質・材料研究機構)

$\gamma$ 母相と $\gamma'$ 析出相 (あるいは析出前のエンブリオ) の共存状態にある系全体のエネルギーを、Ni-Al-Co-Cr-Fe-Mo-Nb-Ti 合金の二相分離の化学的自由エネルギーと母相/析出相界面に起因する界面エネルギーおよび弾性ひずみエネルギーの和で表す。3種類のエネルギーを個別に評価するのではなく、共通の変数である析出相の組成を変化させて、和が最小になるように Simplex 法と Newton-Raphson 法で最適化したエネルギー値を用いた。析出物の大きさは LSW 理論に基づいて大きくなると仮定し、界面エネルギーを時間の関数で表した。そして、二相共存の自由エネルギーと $\gamma$ 相過飽和固溶体のエネルギーを時間を変えて比較し、前者が低くなった条件で $\gamma'$ 相が析出したと予測した。温度を変えて同様に析出開始時間を計算し、等温析出曲線 (TTP) 図を予測した。図 A2-2-(2)は、Fe-0.025C-53.8Ni-18.12Cr-2.97Mo-0.46Al-0.93Ti-5.42Nb 合金 (Alloy718 相当) の、本研究で自作したプログラムで予測した $\gamma'$ 相の析出開始線 (赤実線) と、実験より求めた析出開始線 (黒点線) を比較した結果である。両者の析出ノーズ (最も短時間で $\gamma'$ 相が析出を開始する温度と時間の条件) の時間差は、対数時間スケールの 1 オーダーの約 20%、温度差は 20°Cであった。エネルギー論による数少ない入力パラメータで、他の組織予測モデルに比べても遜色ない精度が得られた。

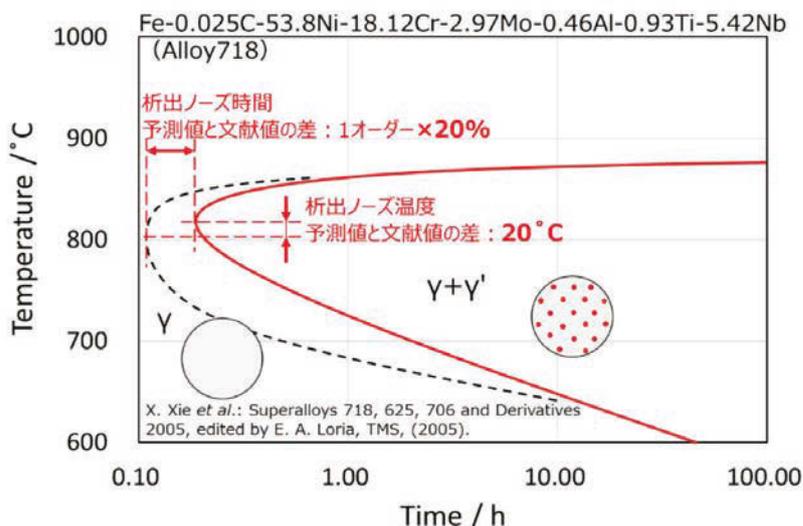


図 A2-2-(2) 実用耐熱ニッケル基合金 Alloy718 の計算により予測した TTP 線 (赤実線) と、実験値 (黒点線)。

### 3. 今後の計画、社会実装に向けて

今後は、開発した析出予測プログラムにより、Ni-(0~10)Al-(0~20)Co-(0~25)Cr-(0~20)Mo-(0~10)Nb-(0~5)Ti [mass%]の組成範囲内をグリッドリサーチ法、および A5-1 チームが行うモンテカルロツリー探索法を用いて、 $\gamma'$ 相の析出ノーズが長時間側にあり、かつ $\gamma'$ 相の平衡体積分率が高い合金組成を探索し、積層造形に適した新しいニッケル合金として提案する。そして、A2-1 と A2-3 チームに依頼して積層造形体を作製し、組織観察や基本的な機械特性を評価する。さらに、これらの評価結果を計算で再現できるように析出予測プログラムを修正・改善して再探索し、所望の特性やスペックを有し、積層造形に適した新たなニッケル合金組成を提案する。

析出予測プログラムのコードは自作でありカスタマイズが容易であることから、需要に応じた入出力形式に対応させて MInt システムへ実装させることが可能である。また、析出予測プログラムを改良することで、耐熱鋼や耐熱チタン合金の計算予測も可能であるため、様々な種類の析出強化型耐熱合金の探索に応用できるようにしたい。

チーム名：A2-3 粉末製造プロセス最適化 MI

チームリーダー：川岸 京子（物質・材料研究機構）

参画機関：物質・材料研究機構、トーホーテック(株)

## 1. 背景、目的など

### (1) 背景・目的

ガスアトマイズ法は他の主な粉末製造法より比較的安価なプロセスであり、広い粒度分布の粉末製造が可能である。粉末冶金、積層造形プロセスの隆盛により、国内の粉末需要は飛躍的に伸びている。要求性能を満足する粉末の収率が向上すれば、粉末のコストが低減し、部材コストの低減につながる。さらに MI の使用によって少ない実験回数で最適製造条件を求めることができれば、製造コストの低減が可能となる。よって、ベイズ推定により最適な粉末製造条件を予測することで、開発期間の短縮、コスト削減を行うことを目標とする。

本プロジェクトで提案する MI プログラムをアトマイズ条件最適化に適用可能であると実証できれば、この手法は粉末メーカー各社、研究機関などそれぞれの装置で応用可能である。よって国内の粉末製造技術の低コスト化を実現し、国際競争において優位となる。

さらに、ガスアトマイズ以外の粉末製造法の最適化にも適用を試み、開発 MI の汎用性を検証する。MI により高品質粉末を低コストで製造可能とすることで、国産粉末成形部材の特性向上、コスト削減を行い、国際競争力の向上をめざす。

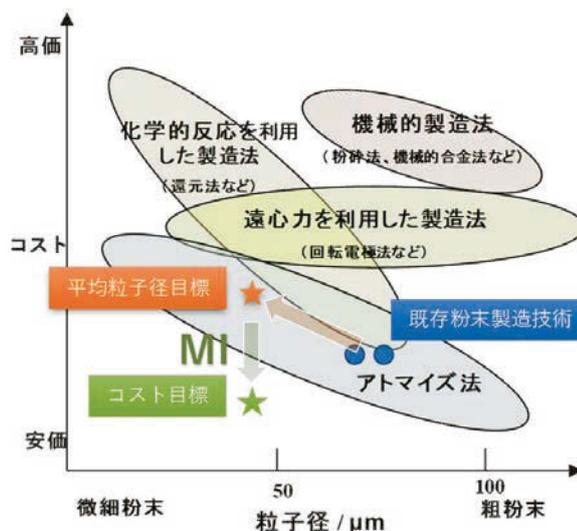


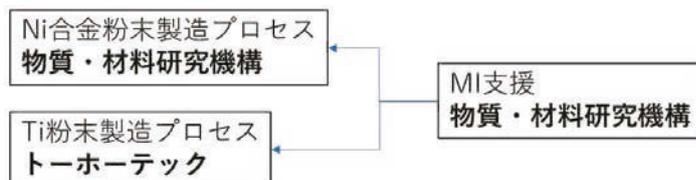
図 A2-3-(1) 各種粉末製造法による粒子径と製造コスト

### (2) 目標

粒径 53 $\mu\text{m}$  以下の粉末の収率が最大となる粉末作製条件を、MI を活用して求めることで、粉末製造コストを削減する。

## 2. 実施概要

### (1) 実施体制



## (2) 実施項目

### 1) 粉末製造プロセス最適化 MI の開発 (物質・材料研究機構)

- ガストマイズ法による Ni 合金粉末作製プロセスにおける、材料の組成、噴霧条件等の製造パラメータの検討
- 粒径 53 $\mu\text{m}$  以下の粉末の収率が最大となる条件を見出す MI の開発

### 2) 逆問題 MI を活用した HDH 法チタン系粉の高効率プロセス最適化 (トーホーテック)

- 水素化脱水素法によるチタン粉末製造プロセスの最適化

## (3) 主な成果

溶湯ノズル径、ノズル長さの異なるノズルを数種類作成し、2019 年度に製造パラメータとして変化させた溶融温度、ガス圧力に加え、溶湯ノズル位置もパラメータとして変化させ、最適なプロセスを逆問題解析により探索した。得られる合金粉末の粉末組成、酸素含有量、形状、粒度分布等を解析し、各パラメータと特性のデータベースを作成した。ベイズ最適化により、粒径 53 $\mu\text{m}$  以下の粉末の、溶解インゴット重量に対する収率が最大となる条件 (溶融温度、ガス圧力、溶湯ノズル径、溶湯ノズル長さ) を求めた。溶解温度、ガス圧力、溶湯ノズル径を変化させたときの 53 $\mu\text{m}$  以下の粉末の収率を用いて、ベイズ最適化により各ノズル径における収率を予測した。その結果を図 A2-3-(2)に示す。白い部分が収率の高い温度、圧力を表す。実験パラメータが多くなると特性の傾向が複雑となることから、本研究で用いた MI による予測が有効であり、少ない実験データで効率的に予測することが可能であると実証できた。

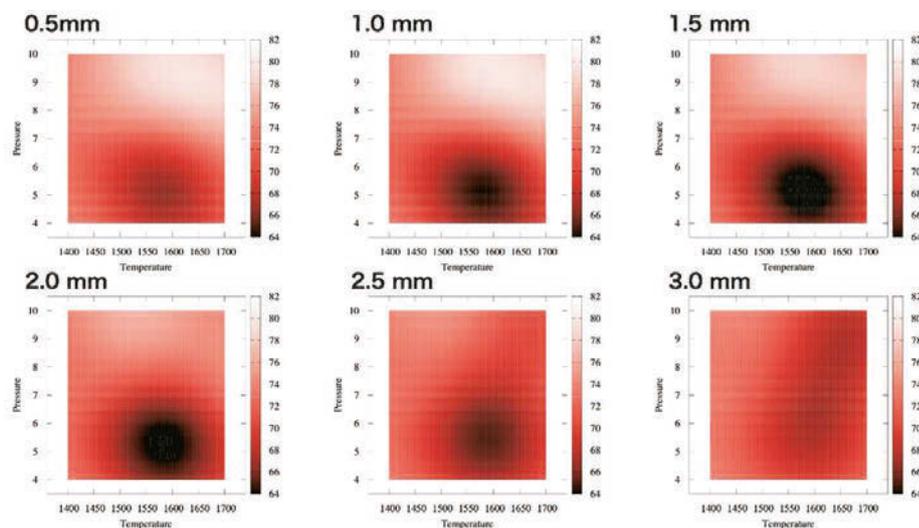


図 A2-3-(2) ノズル径ごとの収率予測

## 3. 今後の計画、社会実装に向けて

装置依存なく、各種粉末のアトマイズプロセスにおいて粒度分布予測が可能となる、プロセス最適化 MI を構築し、粉末冶金や積層造形など各種適用分野に応じた最適粉末の供給コスト削減に貢献することを目指す。

<b>チーム名：A2-4 熱処理組織・性能制御 MI</b>
<b>チームリーダー：長田 俊郎（物質・材料研究機構）</b>
<b>参画機関：物質・材料研究機構、名古屋大学</b>

## 1. 背景、目的など

### （1）背景・目的

航空機材料の実用化・事業化は、米欧 OEM の開発計画に大きく依存する。この様な利益体系の中においては、XF9 エンジン等の国防用試作エンジンを除けば、現行民用エンジンで使用される耐熱材料は海外メーカより提案されたものが主となる。これまでも物質・材料研究機構ではタービン翼やディスク用途として世界トップレベルの Ni 基超合金（TMS/TMW/TMP）の開発・提案を行ってきた。しかしながら、海外 OEM（ロールス・ロイス）との直接の共同研究を除けば、航空機エンジンにおける国内メーカーを通じた材料の実用化には至っていないのが現状である。これら問題の解決のため、海外 OEM に勝る、企業現場から基礎研究までの一気通貫した連携体制を構築し、開発スピードを大幅に向上することが急務となる。これに対し、本 SIP では、モノづくりと将来の FAA（米連邦航空局）認証を目指す C 領域、およびそれら計算技術を活用し支援する A 領域の強固な連携を基にした、統合型材料開発システム（MI）の開発を進めている。その中でも、本 A2-4 課題は、Ni 基超合金開発における A-C 領域連携の要となる基礎研究及びそれを活用した C 領域の支援を実施することを目的とする。具体的には、最終的な特性を決定する上で極めて重要な、溶体化・時効熱処理プロセスに着目し、熱処理中の組織予測を可能とするフェーズフィールド（PF）モデル、及びそれを用いた特性予測を可能とする超合金特性予測プログラムを開発することを目指す。また、国内メーカと大学・国研間の連携を支援し、A 領域における研究実施の円滑化を図る。

### （2）目標

粉末原料による耐熱合金鍛造プロセスを対象とし、金属粉末鍛造材における熱処理プロセスの解析技術を開発、組織及びマクロ特性の予測技術実現を図る。

## 2. 実施概要

### （1）実施体制

本テーマ A2-4 は A 領域および C 領域を連結するカギとなるテーマであり、全体課題に対する位置づけは以下のとおりである。本サブテーマでは、課題全体・目標である「統合型材料開発システム開発（Leader 出村）」に対し、複数機関・複数テーマ間・フィジカル-サイバー間の課題を連結し、C2 テーマ「高性能化のための Ni 粉末鍛造プロセスの開発（Leader 今野、Co-Leader 長田）」における目標達成を加速化することを目的に体制を構築している。更に、A2-4 サブテーマ内には、主に「析出組織予測」を担当する名古屋大学小山教授、および「特性予測」を担当する NIMS 長田が連携することで、金属粉末鍛造材における熱処理プロセスを対象とした、組織-特性予測シス

テム構築を目指す。

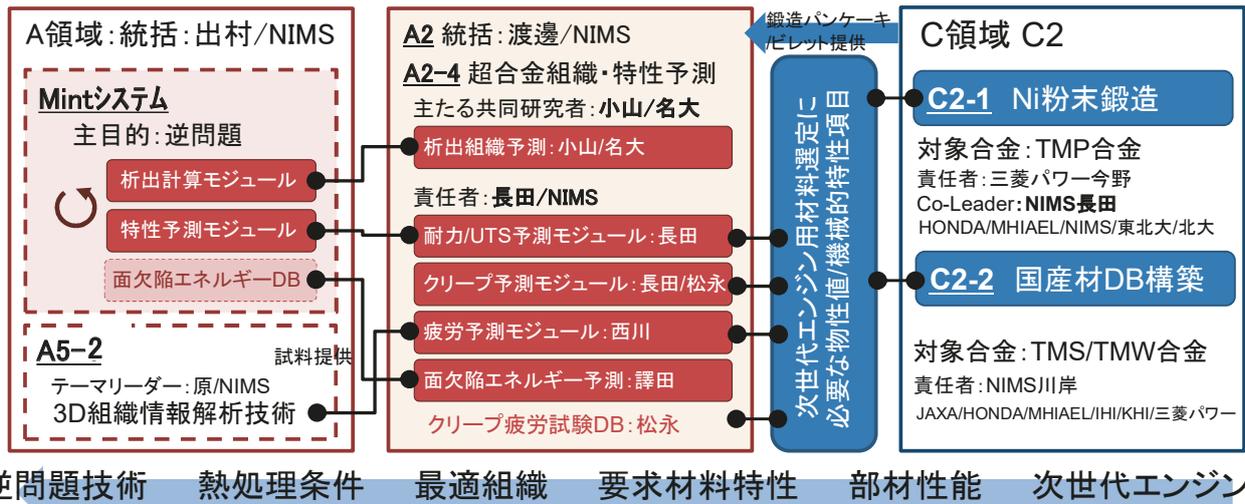


図 A2-4-(1) A2-4 及び関連する機関の研究開発実施体制

## (2) 実施項目

### 研究課題「Ni 基超合金における時効組織・特性予測プログラムの開発」

1) NIMS 超合金特性予測プログラムの拡張（実施機関：物質・材料研究機構）

- 超合金特性予測プログラム(Ni-Al 対応版)の Mint システムへの実装。
- 超合金特性予測プログラムと高温疲労予測モジュールの連結・拡張。
- 超合金特性予測プログラム中のクリープ予測モジュールにおける結晶粒径依存性対応・拡張
- 面欠陥エネルギー予測技術の確立

2) 析出組織予測モジュール開発（実施機関：名古屋大学）

- 三次元 $\gamma'$ 組織形成シミュレーション構築
- 擬三元系マッピングのための多成分系対応三元状態図 DB 整備
- 核生成対応改良 N モデル提案および核形成を考慮した組織形成シミュレーション構築

## (3) 主な成果

1) 当初の目標通り、超合金特性予測プログラム(Ni-Al 対応版)の Mint システムへの実装化、および NIMS 超合金特性予測プログラムと疲労予測モジュールとの連携による高温疲労予測を完了した。

2) 三次元 $\gamma'$ 組織形成シミュレーションならびに核形成を考慮した二次元 $\gamma'$ 組織形成シミュレーション構築、および Ni-Al 二元系対応組織予測モジュールの Mint システムへの実装を完了した。

## 3. 今後の計画、社会実装に向けて

今後は C2 にて取得の機械的特性に対する NIMS 超合金特性予測プログラムによる予測精度の確認を実施し、最適組織を提案する。また、最適組織を実現可能なプロセス条件探索を実施することで、粉末鍛造材特性の最大化を目指す。更に C2 にて取得の各種特性予測を実施することで、後続プロジェクトへと繋げ、2030 年以降のディスク超合金の社会実装に貢献する。

チーム名：A2-5 粉末焼結 MI
チームリーダー：品川 一成（九州大学）
参画機関：九州大学

## 1. 背景、目的など

### (1) 背景・目的

粉末冶金は複雑形状部品をニヤネット成形可能な技術であり、解析により焼結収縮変形を予測し、プロセス設計等が理論的に行えるようになれば、手間とコストを大幅に削減できる。一方、焼結解析システムの実現には材料データベースの構築が課題となる。解析手法については国内外で開発されてきているが、材料特性、特に金属粉末の焼結特性は明らかになっておらず、精度良い解析の実行を困難にしている。本研究では、焼結特性を系統的に計測し、得られたデータを基に材料データベースを構築する。また、これを用いた焼結解析システムを確立することを目的とする。

### (2) 目標

金属粉末の焼結特性を計測するために、雰囲気制御圧縮－試験装置の仕様を策定、導入する。本装置を用いて高温での粉末成形体の収縮変形の計測を実施し、これを基に焼結構成式のパラメータを決定し、材料データベースを構築する。また、広範囲の焼結条件を考慮できる焼結解析システムを確立する。

## 2. 実施概要

### (1) 実施体制

品川 一成（九州大学・教授）：焼結解析システムの構築、データベースの確立

工藤 健太郎（九州大学・助教）：焼結特性計測システムの構築、データベースの確立

### (2) 実施項目

#### 1) 焼結特性計測システムの構築

- 雰囲気制御焼結－圧縮試験機の仕様を策定し、試験装置を導入する。
- 焼結－圧縮試験の試験片の作製条件および試験条件を決定する。

#### 2) データベースの確立

- 焼結－圧縮試験で収集したデータを整理する一連の作業方法を確立する。
- 得られた諸データを基に、焼結特性の関数モデルを検証し、焼結構成式を確定する。

#### 3) 焼結解析システムの構築

- 広範囲な条件での粘塑性挙動に対応可能な解析コードを作製する。
- 実験との比較検証を行い、解析システムを完成させる。

### (3) 主な成果

焼結－圧縮試験では、焼結温度にて円柱状試験片に一定の圧縮応力を加え、その時の高さ方向、半径方向の寸法変化を、備え付けの変位センサーおよび非接触式のレーザ変位計で計測する。金属粉末を扱うには試験を真空中で行う必要があり、これが可能となる雰囲気制御焼結－圧縮試験装置を策定、導入した。図 A2-5-(1)は Ni 基超合金粉末成形体について計測した高さ方向と半径方向のひずみの時間変化の例を示してある。金属粉末の焼結特性を計測するシステムは構築できた。

焼結特性データベースの基礎となるのは焼結構成式であり、構成式中の焼結応力、縦粘性係数、粘性ポアソンが、焼結特性を表す要素となり、これらはさらに相対密度、温度等の関数として表される。一方、材料の変形機構が低応力では拡散クリープ、高応力では転位クリープとなるため、この推移も考慮する必要がある。これまで焼結－圧縮試験で得られたデータを基に、パラメータを決定、整理している。今後データ数を充実させることで、さらに正確な値を追求していく。

焼結解析については、既存のプログラムを改良し、対象範囲を拡張した。図 A2-5-(2)は小型 HIP 実験による焼結体 (NIMS 提供) と、仮データを用いて有限要素解析を行った結果を比較した例である。HIP では粉末材料を封入缶に充填し、高温でガス圧を負荷することで、粉体が収縮、緻密化するが、封入缶は収縮しないため、変形が生じる。仮データを用いてのシミュレーションではあるが、形状変化が一致することが確認できた。

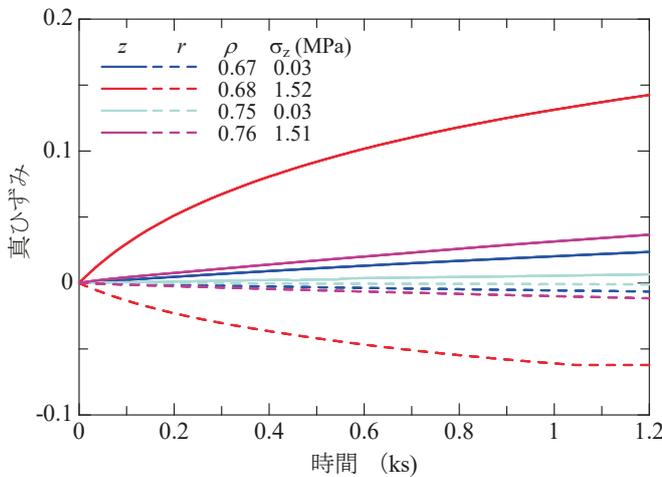
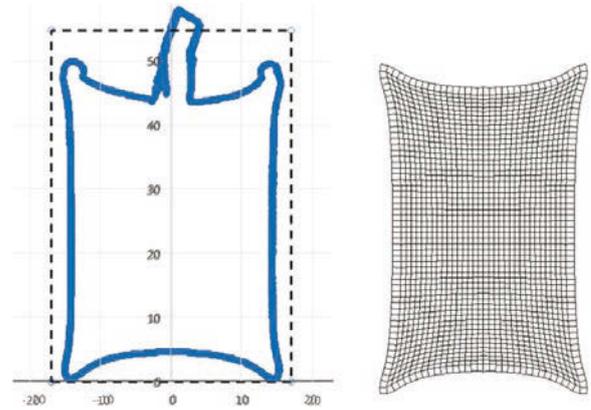


図 A2-5-(1) 高さ方向( $z$ )および半径方向( $r$ )のひずみの測定例 ( $\rho$ : 初期相対密度,  $\sigma_z$ : 負荷応力)



(a) 実験結果 (b) 解析結果  
図 A2-5-(2) HIP 後の封入缶 (初期外径 34 mm, 初期高さ 55 mm)

### 3. 今後の計画、社会実装に向けて

焼結－圧縮試験を継続し、データを充実させることで焼結特性データベースを完成させる。また、データベースを基に焼結解析を実行し、結果を実験と比較することで手法の妥当性を検証する。さらに実プロセスを念頭に、焼結プロセス設計に適用していく。

チーム名：A2-6 鍛造性能 MI

チームリーダー：柿本 英樹 ((株)神戸製鋼所)

参画機関：(株)神戸製鋼所、日立金属(株)、大阪大学、岐阜大学、  
物質・材料研究機構、東京大学

## 1. 背景、目的など

### (1) 背景・目的

航空機向けエンジン等に活用される Ti 合金鍛造部品や Ni 基超合金の大気中恒温鍛造のプロセス設計には鍛造解析技術の高精度予測が必要で、そのために高ひずみ域を含む鍛造時の境界条件などを構築する必要がある。構築した鍛造解析技術を鍛造プロセス設計に適用することで、設計技術は航空機分野における海外機関で社会実装されているレベルと同等以上になると考えられる。

一方、逆問題 MI の鍛造プロセス設計への適用例は無く、所望特性を得るための鍛造プロセス設計を逆問題 MI として取り扱えるように基盤技術を探索・検討しておく必要がある。

参画機関は、産側で国内最大のプレス機で Ti 合金鍛造品の製造実績を有する神戸製鋼、学側で第 1 期 SIP にて大型鍛造シミュレータ、ねじり等の特徴ある小型シミュレータを立上・活用した研究実績と基盤設備、実験/モデル構築技術を有する大阪大学、岐阜大学、NIMS、東京大学で構成し、連携して取り組むことで活用・実装しやすい環境にある。

### (2) 目標

インゴットを原料とする先端鍛造プロセスを対象とし、高精度な鍛造解析技術を開発し、プロセス設計技術を確立する。

## 2. 実施概要

### (1) 実施体制

学側の機関が主に、鍛造解析の高精度化に必要な境界条件の構築・モデル化に取り組み、性能予測・鍛造プロセス設計に対する逆問題 MI 技術基盤を探索・検討する。Ti 合金鍛造部品や Ni 基超合金の製造実績を持つ産側の機関が主に素材の準備、構築されたモデルの検証を行う。

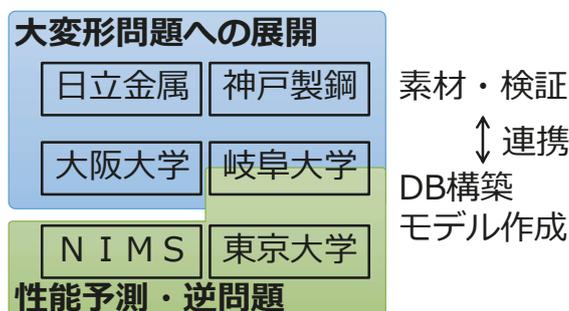


図 A2-6-(1) 役割の概要

### (2) 実施項目

- チタン合金の熱間鍛造プロセス技術の開発 (神戸製鋼所)
  - Ti-6Al-4V 合金素材の準備・提供

- 鍛造シミュレータによる解析モデルの評価・検証データの取得
- 2) 熱間鍛造プロセスにおける変形・温度予測基盤技術の開発 (大阪大学)
  - 塑性変形にともなう加工発熱予測のための加工発熱係数の測定試験手法の検討
  - Ni 基合金 (2 材種)、Ti 合金 (1 材種) の特定の条件範囲での加工発熱係数の測定・同定及び予測精度確認
- 3) 熱間鍛造マテリアルキャラクタリゼーションの高度化および高精度鍛造シミュレーション技法の開発 (国立大学法人東海国立大学機構 岐阜大学)
  - 大ひずみ導入小型試験機の作製、流動応力同定手法の検討
  - 熱間リング圧縮試験を用いた熱間境界条件同定、境界条件 DB 構築
- 4) (物質・材料研究機構)
  - 製造条件の異なる Ti-6Al-4V 鍛造材などの組織情報パラメータ取得
  - MI 的手法を用いた SEM 画像から組織因子の抽出、定量化を行う手法の検討
- 5) (東京大学)
  - 微視組織的微小き裂進展のデータ取得及びそれを予測する数値解析手法を検討
  - 結晶塑性有限要素解析を用いた疲労特性の予測手法を検討

### (3) 主な成果

- 鍛造シミュレータによる解析モデルの評価・検証データ取得、モデル検証に活用 (図 A2-6-(2))
- 加工発熱係数の高精度測定・同定試験装置改良、データ取得及び $\pm 5$  °C以内の精度確認 (図 A2-6-(3))
- 機械学習に基づく最適化手法を用いた摩擦係数・熱伝達係数の同時自動同定技術の開発 (図 A2-6-(4))
- 各種製造条件による Ti-6Al-4V 鍛造材の組織データを蓄積(図 A2-6-(5))
- 疲労き裂発生・微視組織的微小き裂進展の予測数値解析手法を提案(図 A2-6-(6))

大変形問題への展開では、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。加工発熱係数の温度・ひずみ依存性を把握し有効性を検証するとともに、境界条件の自動同定方法を構築した。

性能予測・逆問題に関しては、製造条件の異なる Ti-6Al-4V 鍛造材を用いてプロセスと機械的性質に関与すると考えられる組織の対応付けを進めるとともに、疲労性能予測に向けてマイ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。

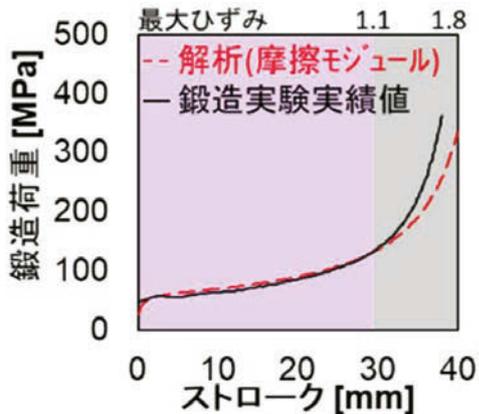


図 A2-6-(2) 鍛造シミュレータ試験と解析の比較

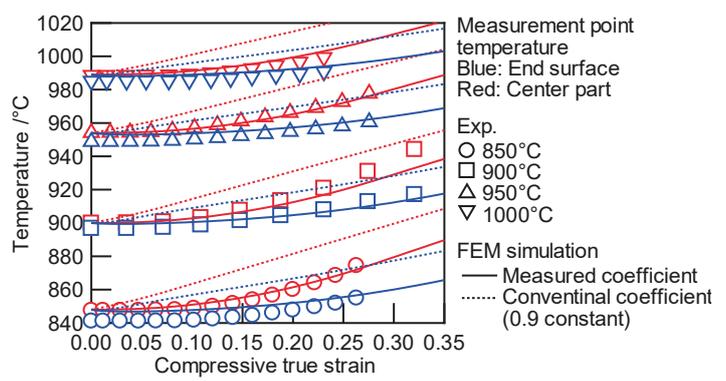


図 A2-6-(3) 温度予測の精度検証例

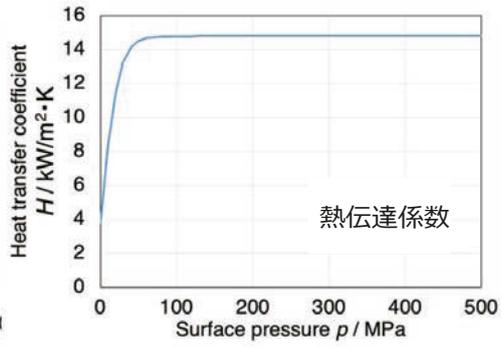
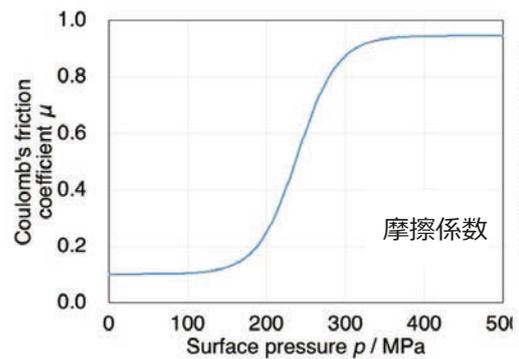


図 A2-6-(4) 自動同定されたモデル

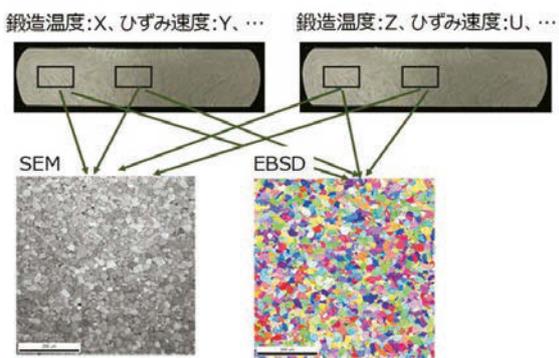


図 A2-6-(5) 製造条件 – 組織データの例

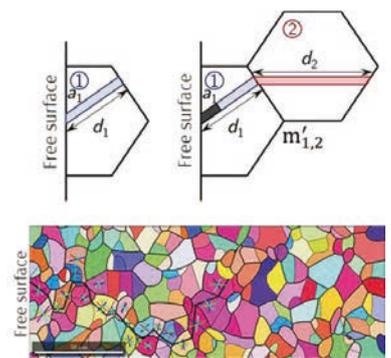


図 A2-6-(6) き裂進展モデルの例

### 3. 今後の計画、社会実装に向けて

Ti 合金の鍛造解析においては、高ひずみ域で潤滑状態の変化が一因と考えられる荷重予測との乖離が見られるため、後半年度で精度向上に取り組む。

鍛造 Ti 合金の疲労性能予測モジュールおよび逆解析による摩擦係数自動同定モジュールの構築を目指し、鍛造 Ti 合金の疲労性能予測モジュールは MInt への実装を計画している。

チーム名：A2-8 チタン焼結合金設計 MI

チームリーダー：近藤 勝義（大阪大学）

参画機関：大阪大学

## 1. 背景、目的など

### (1) 背景・目的

チタン製構造部材の信頼性向上や小型軽量化に対して、静的な引張強度に加えて、疲労強度などの動的強度の向上が求められる。そこで、静的および動的強度を高い水準で発現するチタン粉末合金（含、積層造形材）の合金設計ニーズに応えるべく、これらの力学特性に対する固溶原子の振舞いを実験解析と計算科学（第一原理計算、固溶強化 Labusch モデル等）を用いて定量的に理解し、強化機構の定量解析を図る。具体的には、引張試験結果と結晶組織解析結果を用いて作成する実験データベース（DB）と固溶強化理論に基づく Labusch モデルとの融合によって、対象とする溶質元素（酸素、窒素、炭素など）による固溶強化量の予測を試みる。他方、理論計算により結晶格子歪みを導出し、その結果と上記の固溶強化量の相関を見出した上で、要求される力学特性と固溶強化成分の相関性を提示する順問題に帰着する計算 DB の構築を図る。最終的には、両者の成果を連携して固溶強化量予測モデルを提案し、純チタン材および汎用 Ti64 合金において引張および疲労強度を高い精度で推定できることを示す。

### (2) 目標

実験 DB と計算 DB の連携に基づく理論計算モデルを提案し、焼結法および積層造形法で作製する固溶強化チタン合金の静的・動的力学特性を高い精度で予測可能であることを実証する。

## 2. 実施概要

### (1) 実施項目

1) チタン焼結合金の高次機能化に向けた実験解析と計算科学の融合によるマルチスケールでの合金設計とプロセスデザインの最適化手法の確立

- 実験データベースの構築

廉価な元素を利用したチタン焼結合金の組織構造解析と力学特性評価を通じた実験データベースの構築

- 計算データベースの構築

第一原理計算を用いた網羅的シミュレーションによる材料定数のデータベース構築

- 予測モデルの構築と実証①（静的力学特性の予測）

実験 DB と計算 DB 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、順問題として高強度 $\alpha$ -Ti 単相合金の組成設計可能であることを示す。

- 予測モデルの実証②（動的力学特性の予測）

固溶強化チタン合金の疲労強度と耐力の相関 DB を作成し、上記の予測モデルを用いて疲労強度を高い精度で予測できることを実証する。

## (2) 主な成果

### ● 実験データベースの構築

酸素・窒素の固溶量が異なるTi積層造形体を作製し、それらの引張試験と結晶組織解析を実施した。両者の結果から固溶強化量を算出し、Labusch モデル中の転位-溶質原子相互作用の最大値  $F_m$  を導出した。図 A2-8-(1)に示すように同モデルに基づく固溶強化量の予測値と実験値はよく一致した。積層造形 Ti 材においても、O および N が固溶強化量に及ぼす影響は焼結押出体と同様であることを確認し、また同モデルの適用による強化量予測が可能であることを実証した。

### ● 計算データベースの構築

予測モジュールへの適用が可能と考えられる添加元素 (B、C、Al、V、Cr、Ni、Mo 等) による固溶モデルに係る第一原理計算 DB を作成した (図 A2-8-(2))。

### ● 予測モデルの構築と実証①

純 Ti 材を対象に、上記の計算 DB と実験 DB を用いてパラメータ抽出を行い、Labusch モデルに基づくTi合金の固溶強化量予測モデルを構築した (図 A2-8-(3))。予測誤差の指標である交差検証スコアは 41 MPa となり、中間目標値 (60 MPa 以下) を達成した。

### ● 予測モデルの実証②

現在、疲労強度評価用固溶強化チタン合金を試作中。

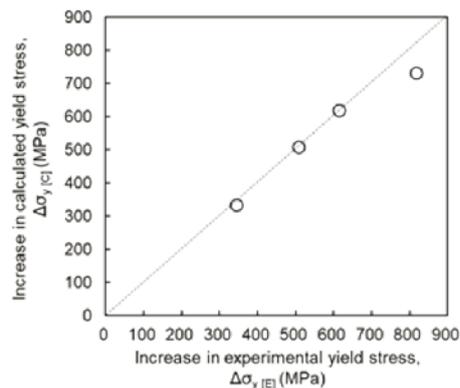


図 A2-8-(1) 積層造形 Ti 材の酸素固溶強化量の 実験値と Labusch モデルに基づく計算値

		a	b	c	Volume	da	db
pureTi		2.9389	2.9388	4.6451	34.7438		
Al	sub	8.7991	8.7991	9.2756	621.9352	-0.0121	-0.
B	int_octa	8.8313	8.8313	9.3832	633.7697	0.0201	0.
C	int_octa	8.8306	8.8309	9.3441	631.0524	0.0194	0.
Cr	sub	8.78	8.8371	9.2216	618.3303	-0.0312	0.
Cu	sub	8.7827	8.7826	9.2562	618.3179	-0.0285	-(
F	int_octa	8.8334	8.8331	9.3442	631.4048	0.0222	0.
Fe	sub	8.774	8.8667	9.1904	616.9728	-0.0372	0.
Hf	sub	8.8353	8.8354	9.312	629.5354	0.0241	0.
Mg	sub	8.8195	8.8192	9.3125	627.2804	0.0083	0.
Mn	sub	8.7344	8.9264	9.2069	617.1659	-0.0768	0.
Mo	sub	8.7465	8.9309	9.2479	621.0631	-0.0647	0

図 A2-8-(2)第一原理計算による格子歪データベースの一例

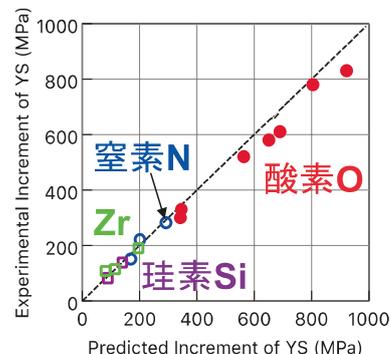


図 A2-8-(3) α-Ti 材の固溶強化量。予測値と実験値の比較

## 3. 今後の計画、社会実装に向けて

1. 固溶元素を含むα-Ti 単相粉末合金を対象に、固溶強化量予測モデルを用いて推定する固溶強化量と疲労限度の相関関係を実験的に確認した上で、同モデルによる疲労強度推定の有用性を実証し、これまでの実験 DB に疲労限度を追加する。

2. 実用展開に向けて、同予測モデルを用いて O/C 固溶強化 Ti64 粉末合金の疲労強度予測が可能であることを実証する。

チーム名：A2-9 高機能粉末製造 MI
チームリーダー：千葉 晶彦（東北大学）
参画機関：東北大学、日本積層造形(株)

## 1. 背景、目的など

### (1) 背景・目的

金属積層造形において、原料には真球状でサテライが無く、ポロシティが無い（低い）粉末を使用することが重要である。プラズマ回転電極プロセス（plasma rotating electrode process, PREP）はそのような高品質の粉末を製造することができる。PREP は、日本では 1970 年代から研究が行なわれていたが、粒径が比較的粗大で低減に限界があること、プラズマアークの制御による安定した溶融速度の達成が困難であったことから研究が衰退した。現代では中国とロシアにおいて、軍需用の Ti-6Al-4V 合金をはじめとして PREP の研究開発が盛んである。現状では PREP 粉末粒径が比較的粗大であり、更なる粒径の低減が求められている。しかし、先行研究では主に回転速度と回転電極径の影響について調査されているものの、他の方法での粒径低減及び粉末特性の達成が必要である。そこで本研究では、PREP において粒径を含めた粉末特性の向上のため、異なるプロセス条件のもとで粉末を作製・評価することで、プロセス条件と粉末特性の関係を明らかにする。

### (2) 目標

本研究では、高温物性、PREP プロセスパラメータと粉末特性の関係を明らかにする。PREP 粉末の粒径を制御するために、高効率に粉末粒径を微細化する技術を開発する。3D 造形におけるサイバーとフィジカルの親和性を高める新規 PREP 装置を開発する。

## 2. 実施概要

### (1) 実施体制

研究体制図を右図 A2-9-(1)に示す。日本積層造形(株)と連携して、同一の研究課題について東北大学が主体となって推進する。ベンチャー企業設立の際には、日本積層造形(株)からの出資も検討する。

### (2) 実施項目

1) 研究題目：CPS 対応型高機能金属粉末製造プロセス開発指針の探索（東北大学）

研究開発概要：ガスの巻き込みが無く、サテライト付着が無く、円形度がほぼ 1 に近い真球形の粉末製造に最適な量産性の高い PREP 装置のプロトタイプ<sup>1)</sup>の作製を目指し、CPS 対応型の金属積層造形技術（CPSAM）を構築する PREP 方式による高機能金属粉末製造プロセス創



#### 研究開発項目

- ・PREP粉末生成プロセスの解明(I)
- ・PREP粉末生成プロセスの解明(II)
- ・アトマイズガス混入量と粉末粒径の関係の定量化
- ・PREP製粉後の粉末内部のガス欠陥の存在確認と粉末形成プロセスの可視化。
- ・新規PREP装置の設計指針の策定
- ・事業化(ベンチャー企業設立)の検討
- ・高荷重保持高速回転軸受けの開発
- ・非移送式プラズマガン搭載PREP装置による製粉性能評価

図 A2-9-(1) 研究体制図

製の基盤を構築する。2025 年度までには、航空機をはじめとする自動車産業などで開始されるデジタル製造業の CPSAM にとって必須となる PREP 粉末供給事業を開始する。

2) 研究題目：CPS 対応型高機能金属粉末製造プロセスパラメータの最適化法に関する研究（日本積層造形(株)）

研究開発概要： 東北大学金属材料研究所の千葉研究室と共同で、当社所有の PREP 粉末量産製造装置を用いて PREP 粉末生成プロセスの解明、新装置開発に資するプロセス因子の解明をおこない、高性能な PREP 粉末製造装置の設計指針を得る。

### (3) 主な成果

PREP において電極材料の高温物性、回転速度、プラズマ電流、電極への吹付ガスの 4 つのパラメータが粉末特性に与える影響を調査し、以下に示す知見が得られた。

(1) Ti-6Al-4V 合金の場合、回転電極直径  $d$  または回転速度  $\omega$  を増加させることにより、平均粉末径が低下する。図 A2-9-(2) に示されるように、回転速度  $\omega$  が 40,000rpm 以上で SLM に使用可能な平均粒径  $30\mu\text{m}$  以下の製粉が可能となる（ただし電極径に依存する）。

(2) Ti-6Al-4V 及び SUS316L 合金ではサテライトフリーの円形度が 0.95 以上の真球に近い製粉が可能である。低融点系の A4032 合金では、液滴が凝固完了前にチャンバー壁に衝突する傾向を示す。プラズマパワーの制御が重要である。

(3) 電極の回転速度と直径に加えて、プラズマ電流によって決定される溶融速度  $Q$  は、PREP 粉末サイズの微細化制御に重要となる。

(4) シミュレーションにより、揺動効果はガスの圧力によって機械的に溶湯を揺らすことであり、電極端面から液滴の離脱を促進し、リガメントが形成されている場合はこれを分裂させて粉末の形成を促進することを示した。揺動効果は粉末粒径サイズの微細制御に重要である。

(5) 統計モデルを適用することにより、PREP パラメータと平均粉末粒径の関係を定量的に評価できる。

### 3. 今後の計画、社会実装に向けて

最終目標である、溶融速度  $Q$  一定の条件における、粒形  $d$ 、電極棒径  $D$  と電極棒回転速度  $\omega$  との関係の定量化、 $Q$  とプラズマ出力  $P$  の関係の定量化の目標はシミュレーション、観察、実験結果を総合してほぼ目標は達成した。高比重材料の製粉を可能とする電極回転軸の開発に成功し、日本積層造形(株)において実際操業にて実用化に成功した。社会実装については、金属積層造形プロセスの DX 化に不可欠な PREP 粉末として、社会に定着させるべく、2019 年末に創設したベンチャー企業（株）東北 PREP 技術（<https://www.toprep-sendai.jp/>））を発展させ、本格的な PREP 装置開発と当該技術に関する専門企業として社会実装を実現させる。

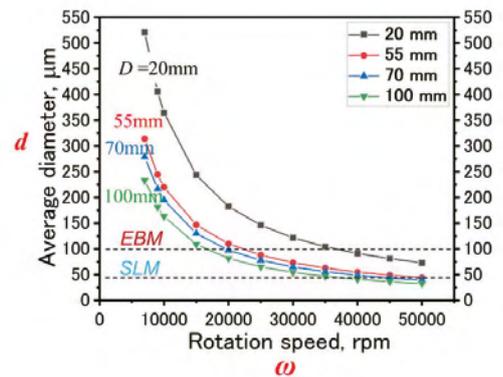


図 A2-9-(2) PREP 粒径  $d$  と電極回転速度  $\omega$

チーム名：A3 原子（分子）・構造体デザイン

チームリーダー：岡部 朋永（東北大学）、伊藤 明彦（東レ(株)）

参画機関：東北大学、東レ(株)、(株)SUBARU、東京大学、宇宙航空研究開発機構、名古屋大学、物質・材料研究機構、慶應義塾大学、上智大学、東京理科大学

## 1. 背景、目的など

### (1) 背景・目的

航空機機体構造に用いられる材料の特性向上において、逆問題解析を適用するためには、複数の物理現象（マルチフィジックス）を同時に扱いながら、原子・分子から構造体までのスケール（マルチスケール）を繋いで行く技術が必要となる。これにより、社会実装までの開発期間が短くなることが予想されている。研究責任者を中心とするグループにおいては、分子スケールから簡易的な機体設計までを扱えるマルチフィジックス/マルチスケールシミュレーション技術を開発してきた。このようなシミュレーション技術は、航空業界において“Atoms to Aircraft”と呼ばれている。本テーマでは、先進的な炭素繊維強化プラスチック(CFRP)の機体適用を対象とし、開発現場での適用を可能とした、統合シミュレーションツールをシステムとして構築する。具体的には、多成分系ネットワークポリマーの開発研究から構造部材設計、マニファクチャリングに至るまでを系統的に扱え、かつ逆問題解析による材料組成最適化までを扱える統合的なシミュレーターを構築することを目的とする。

### (2) 目標

研究開発は4つのサブチームに分かれて実施されている。サブチームごとの目標を下記に記載する。

#### 【航空機用先進複合材料ネットワークポリマーの架橋反応プロセスモデリング】

航空機用先進複合材料におけるマトリックス樹脂を対象とした原子あるいは分子スケールでのモデリングツールを構築する。特に、ネットワークポリマーの架橋反応プロセスにおける量子化学計算を構築し、それを高分子材料の硬化反応に組み込むことで架橋ネットワーク形成に関する反応散逸粒子動力学シミュレーションを構築する。また、実験結果の再現を行い、材料開発現場での利用を可能とする。

#### 【航空機用先進複合材料マトリックス樹脂のメゾ・マイクロスケールモデリング】

マトリックス樹脂の巨視的特性を、高分子の化学組成より議論することが可能となるモデリングツールを構築する。繊維周りの相分離を再現すべく自己無撞着場理論及び密度汎関数理論を用いた高分子の粗視化シミュレーションを開発し、反応散逸粒子動力学シミュレーション及び実験の両方の結果を再現可能とする。また、微視スケールから立脚したマイクロメカニクスモデルを構築し、マルチファンクショナル CFRP、結晶性熱可塑性樹脂マトリックスからなる CFRTP あるいは薄層 CFRP の実用化にむけた複合材料解析技術を確立する。

#### 【マルチフィジックス/マルチスケールシミュレーション(MP/MS)統合解析ツール開発】

航空機用先進複合材料におけるマルチフィジックス/マルチスケールシミュレーション(MP/MS)統合解析ツールを開発する。開発した MP/MS 解析ツールは B 領域とも連携し、参加企業における材料開発あるいは製造技術に実装する。また、解析ツールの MI システム全体における統合化ツールへの実装も進める。さらに、高速成形熱可塑 CFRP のマルチスケールモデリングを構築し、AFP 積層製造技術へ展開する。

#### 【機械学習を援用した逆問題 MI システムの開発】

機械学習を援用したマルチスケール解析と物性の階層的スクリーニング手法を確立し、逆問題解析によるマルチスケール最適材料設計及び製造技術開発に貢献する。

## 2. 実施概要

### (1) 実施体制

次の4つのテーマ別のサブチームを構成し、この中で定期的なミーティングを実施しながら、研究の進捗管理を行っている。

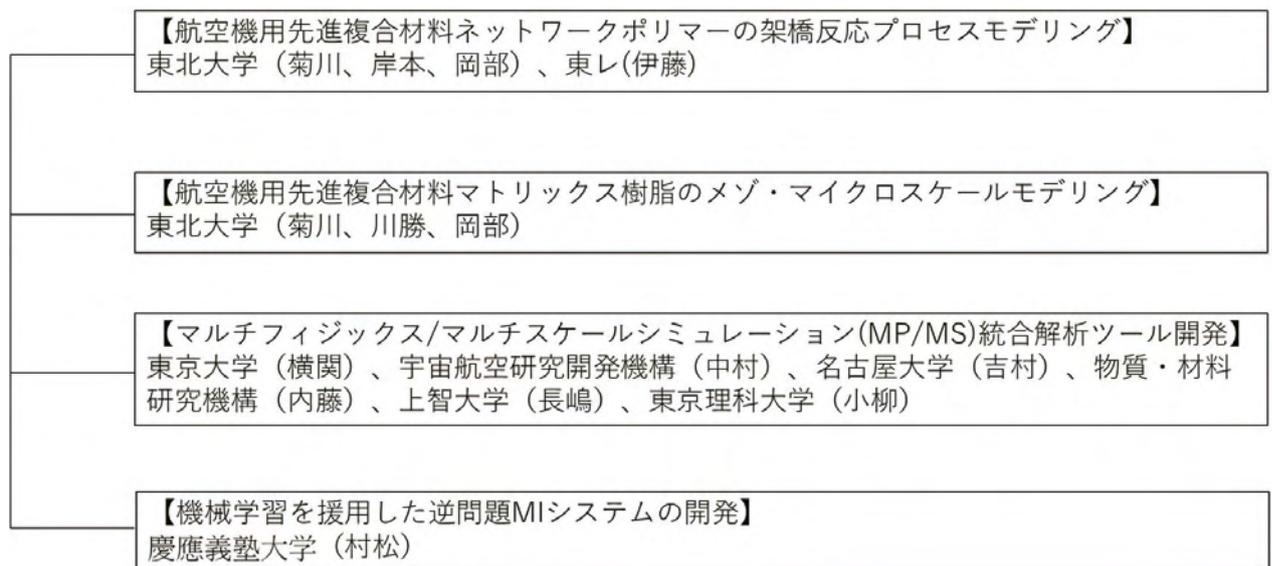


図 A3-(1) サブチームの構成

### (2) 実施項目

#### 【航空機用先進複合材料ネットワークポリマーの架橋反応プロセスモデリング】

架橋高分子材料（熱硬化性高分子）の架橋反応を想定した反応モデルを DPD 法に組み合わせた反応 DPD シミュレーションを用い、全原子分子動力学（MD）モデルと整合する構造形成過程を再現する。また、反応 DPD 法によって得られた構造を基に全原子 MD モデルを復元するリバースマッピングの実装を行う。

#### 【航空機用先進複合材料マトリックス樹脂のメゾ・マイクロスケールモデリング】

ミクロな分子シミュレーションとマクロな流体・弾性体解析および AI を用いた物性予測との間をつなぐための方法論として、熱可塑性および熱硬化性樹脂のアモルファス化あるいは化学反応による硬化に伴って生じるメソスケール（中間スケール）の相分離構造の形成の動力学を再現する手法

を開発する。

#### 【マルチフィジックス/マルチスケールシミュレーション(MP/MS)統合解析ツール開発】

分子スケールからマクロスケールに至るまでの統合解析ツールの構築を行う。それに伴い、各種ツールの基本的な開発を完了させ、コードの高速化・大規模並列化を実施する。また、2021年度からの逆問題解析への適用を念頭に、マルチスケールツールと逆問題解析ツールとのカップリングについて予備検証を開始する。

#### 【機械学習を援用した逆問題 MI ツールの開発】

機械学習を援用し、マルチスケール解析と材料物性について階層的スクリーニングが可能な解析ツールを開発する。

### (3) 主な成果

4つのサブチームでの主要ツールの開発は完了し、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解析ツール群を構築した。このツールを下記のように CFRP 用 MI システムである CoSMIC の第 1 階層「航空機用熱硬化 CFRP 解析用ツール群」としての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。具体的な成果例としては、下記ツール 1、2、3 を併用することで、反応硬化シミュレーションを従来の 500 倍程度高速で行うことが可能となり、またツール 7 によって実験との誤差 10%以内で有孔圧縮強度予測が可能となった。

#### 【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、下記のような 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 CoSMIC への追加実装を開始した。

#### 【第 2 階層：汎用インハウスコードによる解析ツール群】

アイソパラメトリック要素(高次要素、静的解析、固有振動解析、動解析)  
 幾何学的非線形解析（トータルラグランジュ形式、アップデートラグランジュ形式）  
 構造要素線形解析（シェル（MITC） + アイソパラメトリック梁） <NLFESTAR>  
 弾塑性解析、粘塑性解析、粘塑性くびれ解析

X-FEM

平板シェル要素の固有振動解析

平板シェル要素の座屈解析（線形固有値解析、座屈後解析）

Mindlin 板要素

非圧縮性流体 FEM、浸透流 FEM

SPH（2D、3D、曲線座標、衝撃解析、変形解析、破壊解析）

全原子 MD

標準的な DPD

【第3階層：商用・汎用ソルバー上で動くユーザーサブルーチン】

LAMMPS(反応硬化、各種物性評価)

ABAQUS（OHT、OHC、ドリリング、面外衝撃解析）

DYNA（OHT、OHC）

逆問題解析の実績に関しては、機械学習ツール（ツール6）と実験を組合せて、難燃性樹脂の新規高性能材料探索に成功した（B1 連携）。これら知見を踏まえて逆問題解析の具体的な適用方法および CoSMIC への実装方法の検討を行っている。これについては今後も検討を進めていきたい。

### 3. 今後の計画、社会実装に向けて

本課題で開発する CFRP の機能性及び力学特性を評価するモジュールを一元的に扱える材料開発システム(CoSMIC)を B 領域と連携しながら開発し、複合材料およびその構造を製品とするものづくり関連企業に提供する。

チーム名：A4 MI 統合システム
チームリーダー：源 聡（物質・材料研究機構）、井上 純哉（東京大学）
参画機関：物質・材料研究機構、東京大学

## 1. 背景、目的など

### (1) 背景・目的

構造材料の設計は、取り扱うべき時間や長さのスケールや物理モデルが多岐にわたるため、多様な現象を理解するための要素技術(理論モデル、経験式、データ)を組み合わせ(以下、ワークフローと呼ぶ)、その全体を最適化する必要がある。SIP1 期ではそのような順問題を解くためのワークフローの設計・実行システム(以下、MInt システム)を PSPP(プロセス-構造-特性-性能)連関の概念の下に構築し、SIP2 期では逆解析を行う際に必要な複雑な計算シナリオを実現するためのアプリケーションプログラミングインターフェイス群(API、以下、総称して MInt-API)を開発している。さらに語彙情報の管理(特性空間インベントリ)や材料データベースの構築、システムを安全に利用できる環境の構築を行っている(外部計算資源活用、インフラ構築技術)。

MInt システムは構造材料の性能評価に関する理論、実験、計算機シミュレーションから得られた情報を蓄積・活用しようとするものである。そのようなハイブリッド的なシステムは高度化された要素技術を適材適所で利用できれば効力を発揮すると思われる。一方でその環境を組み上げようとする開発の規模が大きくなる。また、分野を越えてデータを蓄積・活用するような基盤は研究機関が中心となってシステム開発を共通インフラとして構築することが重要と考える。

構造材料の問題を解くうえで複数のソフトウェアを連成的に解こうとする動きは、軽合金の構造材料の開発を目的とした PRISMS(米)や、種々のソフトウェア間のデータ連携を模索した ICMEg(欧州)の取り組みが参考になる。これらの取り組みでは、独自のソフトウェアの開発とともに材料情報の管理環境の構築や、ソルバー間のデータ統合が試みられている。対して、MInt システムが持つ優位性は、物理モデルの連関自体の管理や計算・実験データの再利用性の考慮、API の活用まで含めて一貫した開発が行われていることである。一方で、マテリアルズ・インフォマティクスで第一原理計算データベースを活用しようとする動き(Materials Project(米)、OQMD(米)、Aflowlib(米))は、MInt システム側から見ると、アクセスができるデータの多様性が得られるという意味でメリットが大きいと捉えている。

### (2) 目標

#### 【逆問題解析の数理的手法のシステム実装】

A1 で開発した逆問題解析の数理的手法をシステム上で柔軟に動作させるために汎用化し、システムへ実装する。

#### 【逆問題解析ワークフローの繰り返し計算に関わる柔軟な制御技術】

逆問題解析に必要なワークフローの繰り返し計算に関わる柔軟な制御技術を確立する。

### 【先端材料・プロセス向け新規開発モジュールの実装】

A2 で開発が進められている先端材料・プロセス向けの新規開発モジュールの実装を進め、同時に、実装の作業を簡易化するシステム手法を確立する。

### 【ユーザ・インターフェース】

ユーザビリティ及びセキュリティ対策が向上したユーザ・インターフェースを完成させる。

### 【アプリケーションプログラミングインターフェース（API）群】

モジュール間の入出力を規定する API 群を整備し、API を活用したモジュール設計をユーザが柔軟にできる仕組みを実現する。

### 【リモートアクセス制御】

研究所や企業に分散している計算機資源を有効に活用しつつ、ワークフロー制御の一元性を両立できるようなリモートアクセス制御に関する技術を確立する。

### 【構造材料記述のためのデータ構造のシステム反映】

A5 で開発する構造材料を記述するためのデータ構造をシステムに反映し、データの関連を調べられるような仕組みを実装する。

## 2. 実施概要

### （1）実施体制

A4 は NIMS と東大の二拠点での連携の下、開発を行っている。NIMS 拠点では MInt システムの基本機能の開発と運用を担当し、(1)ワークフロー設計・実行機能の開発、(2)材料データベースの構築・制御、語彙情報の収集・管理、(3)API 設計・開発、(4)インフラ強化とセキュリティ対策、(5)システム運用を担っている。また、東大拠点では A1 で進められている逆解析に関する技術の一般化と MInt システムへの実装を担当する。

### （2）実施項目

#### 1) MInt システムの開発 (A4(NIMS))

- MInt-API の開発と逆解析への対応
- MInt システムの利便性向上、外部計算資源活用
- 語彙情報の収集と解析、データベースの構築(A5 連携含む)
- MInt システムのセキュリティ強化、インフラ強化

#### 2) 逆問題解析の数理的手法のシステム実装 (A4(東大))

- A1 で取り組まれる課題の逆問題適用
- 材料の不均一性／不確実性も考慮した逆問題への解法の探索

### （3）主な成果

#### 1) MInt システムの開発 (A4(NIMS))

- MInt-API の開発と逆解析への対応

MInt システムを外部プログラムから制御するための API 群(MInt-API)の開発を行った。この MInt-API は、ワークフローの実行制御、データの蓄積・抽出、語彙登録・解析など様々な機能を実装している。これらを組み合わせて、まずは例題として解析関数の最適化問題などを通じて API 利用技術の確立を行った。その後、材料工学に関する問題に対して MInt-API の活用の事例を構築した。例えば、A1 連携としての API 活用と逆解析事例の構築(図 A4-(3)にて後述)や、A2 連携としての SIP1 期に独自開発した WFAS(溶接部疲労寿命解析のための統合環境)の MInt-API 化による MInt システムとの接続などが挙げられる。後者は WFAS の機能を単独で実行するのではなく、MInt-API を経由して実行することで、ユーザは従来の WFAS のユーザ・インターフェースの感覚を損ねることなく、計算制御、データ管理を MInt システムにゆだねることが可能となり、計算後のデータの利活用に大きな幅ができることとなった。さらに機能面としては、伝熱解析の機能の拡張を積層材料の解析にも適用できるように行った。

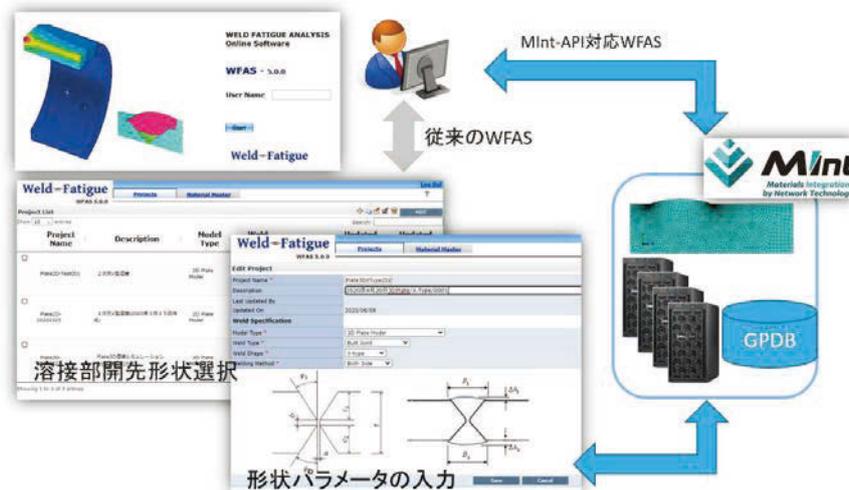


図 A4-(1) MInt-API 化された WFAS の利用イメージ

- MInt システムの利便性向上

MInt システムの GUI 改修やマニュアルの改訂により利便性を向上させた他、ワークフロー情報や、実行中のジョブの状況、計算資源の情報をシステム管理者やユーザへ提供するインフラを構築した。

- 語彙情報の収集と解析とデータベースの構築(A5 連携含む)

様々な研究者により蓄積されたワークフローや語彙の情報をまとめてグラフデータベースを構築し、MInt システムに蓄積された全体の情報としての語彙関連の解析が行えるようになった。入出力情報の経路検索や、深層学習による PSPP 関連解析などを実施した。

材料の特性に関するデータは目的ごとに異なって取得されている場合が多く、データベースによって項目名が異なる形で格納されている場合が多い。ここでは、項目名の異なる複数の材料データベースから横断的にデータを抽出する試みを行い、Ashby チャートや機械学習用データセットを生成した。また、A5 で設計されたクリープに関する材料データの MInt システムへの引き込み検証を行い、システムとの連携に問題がないことを確認した。さらに MInt システムのデータ以外で一般に公開されているデータ、例えば第一原理計算データ(OQMD(米)など)へのアクセス機能も MInt-API の機能の一部として実装した。

- MInt システムのセキュリティ強化、インフラ強化、外部計算資源活用

システムを安全に利用するためにはセキュリティ対策が非常に重要であるが、カーネルやミドルウェア、ライブラリに対して深粒度スコアを算出し、問題となりうる箇所のバージョンアップを実施した。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点を目的として最新のインフラ構築技術を元に、これまで MInt システムの構築に数か月要していたものを、数日以内に稼働できる技術を開発した。新規でのシステム立ち上げや、複数箇所でのシステム同期を図る際に有効である。また、企業内計算機やクラウド資源のような遠隔に存在するような特殊構成の計算資源を必要とするモジュール(商用コード、秘匿データ含む)を外部計算機として制御することで、柔軟にワークフローが実行されるような仕組みを構築した。計算機のピーク需要に対するロードバランサ、商用コードの活用や秘匿データの活用の推進、など多くの役割が存在する(図 A4-(2))。

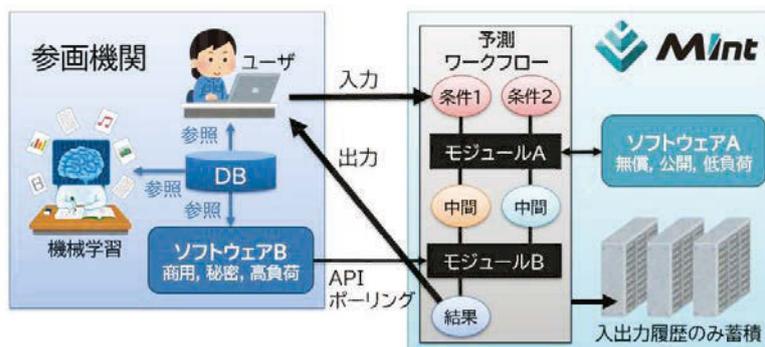


図 A4-(2) 外部計算資源活用のイメージ

## 2) 逆問題解析の数理的手法のシステム実装 (A4(東大))

- A1 で取り組まれる課題の逆問題適用

A1 で取り組まれている全課題を整理して、逆問題に対応させるワークフローとして A1-2「高強度 AI 合金」と A1-3「破壊靱性予測」(図 A4-(3))を選択して MInt システムへ実装した。

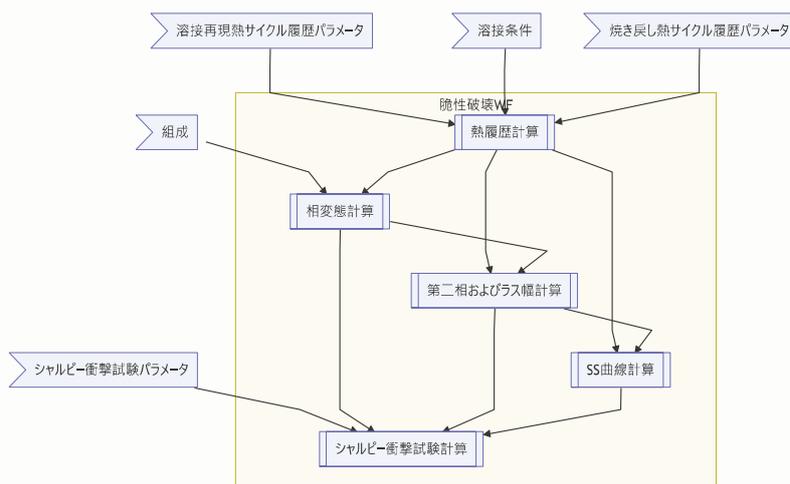


図 A4-(3) A1-3 開発「破壊靱性予測」のシステム実装

さらにその順問題ワークフローに MInt-API の一つである WF-API を適用し、順問題ワークフローから効率的に逆問題解析が実行可能であることを示した。

- 材料の不均一性／不確実性も考慮した逆問題への解法の探索

上記とは別に、材料の不均一性／不確実性も考慮した逆問題解法の探索も進めた。ここでは

PSPPの根幹をなす材料組織に着目し、その不均一性／不確実性を考慮した記述因子の自動抽出、並びに抽出された因子を用いた順問題／逆問題解析手法の確立を目指す(図 A4-(4))。

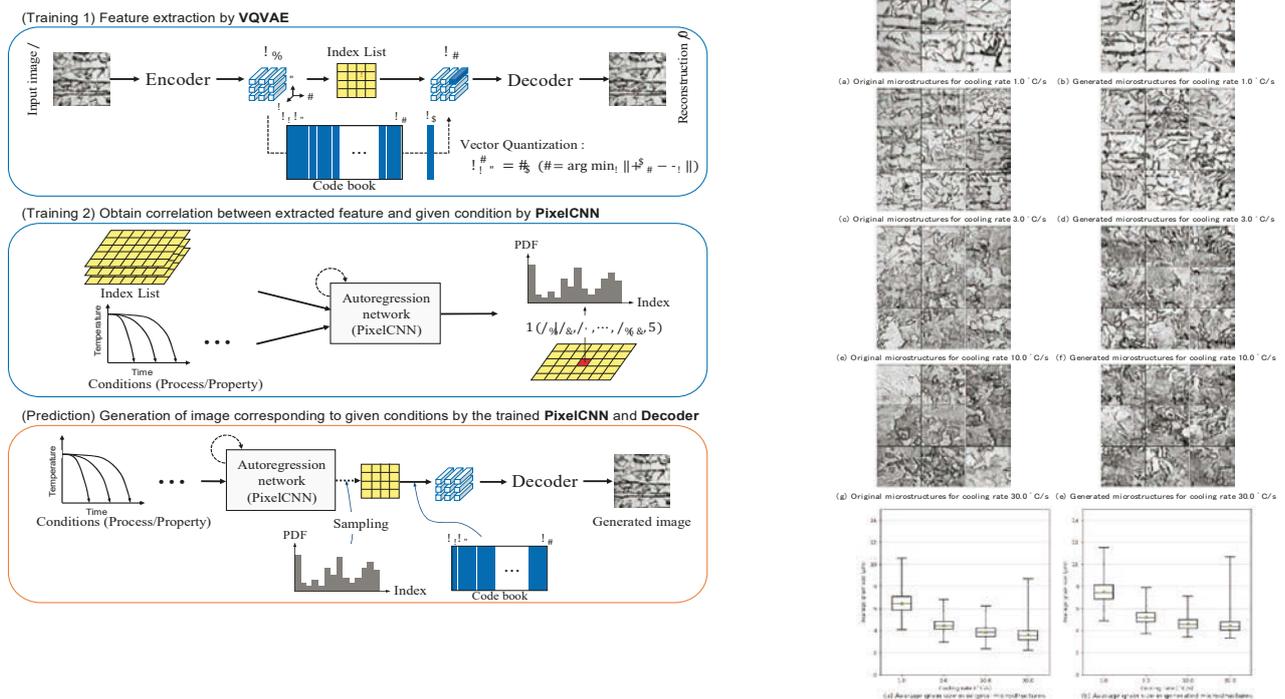


図 A4-(4) 組織因子と PSP 連関の自動抽出アルゴリズムの適用事例

### 3. 今後の計画、社会実装に向けて

社会実装を確実なものとするためには、MInt システムにセキュリティが確保された環境で実装された多様なモジュールが安定的に稼働する必要がある。そのために、以下の方針で開発を進めていく。

- (順問題解法の精緻化と逆解析の数理モデルの実装) A1、A2 連携の推進と API 活用  
A1、A2 で検討されている順問題、逆解析モデルの実装を進める。ならびに A1 連携として材料の不均一性／不確実性も考慮した逆問題ワークフローの汎用性の検証を行う。A2 連携として、MInt-API を活用しながら WFAS の拡張や Ni 基合金組成探索機能を実現していく。
- (MInt システムの安全性向上) セキュリティ対策とシステムのコンパクト化、インフラ強化  
2020 年度に MInt システムはセキュリティ対策の一環として大規模なミドルウェアアップデートを実施した。MInt システムのアクセスに必要であった仮想専用線(VPN)を不要とし、インターネットの一般回線からアクセスできるようにして利便性を向上させる。反面、セキュリティの脅威が増すので、計算資源の監視や不正アクセス防止の対策を行う。さらに日々更新されるセキュリティの脅威に迅速に対応するためには頻度の高いシステムの更新が求められるが、同時に更新時の検証工数が膨大になるという問題が生じるため、システムのコンパクト化を図ることとする。続けて、外部計算資源活用の本格的な実証に入る。また、MInt システム環境構築の迅速化を順次運用段階に移す。加えて今後要求計算能力の増大が想定されるために計算機を増強する。

チーム名：A5-1 構造材料データ記述方式設計

チームリーダー：出村 雅彦・門平 卓也（NIMS）、芦野 俊宏（東洋大学）

参画機関：物質・材料研究機構、東洋大学

## 1. 背景、目的など

### (1) 背景・目的

材料開発にとってデータが極めて重要であることは論を待たない。最近ではデータ駆動型手法が広まっており、データを保有するだけでなく、再利用できる形に整理しておくことが求められている。しかし、実際には、同一企業・同一機関の中ですら再利用は進んでいない。課題はデータを再利用可能な形で記述する方法が確立していない点にある。材料データは、対象材料、目的によって多様であり、統一的な形式を設定することが難しい。新規プロセス、新規分析・解析方法に対応できる柔軟性も求められる。世界的にも標準となりうるデータ記述方式は材料分野には存在しない。本サブテーマでは「マテリアル革命」における逆問題課題を対象に、データ記述方法を設計すること、さらに、データ再利用手法を開発することを目的とする。

### (2) 目標

以下の特徴を有するデータ構造を設計し、利用可能な形で公開する。

- ・ 構造の階層性・相互関係などを表現し、3D 構造情報解析技術とリンク可能
- ・ 新規の測定方法、材料形について随時拡張可能
- ・ 事実上標準化に向け、可能な限りインターネット標準技術を用いて記述

## 2. 実施概要

### (1) 実施体制

図 A5-1- (1) に示すように、材料オントロジーによるトップダウンアプローチと、この材料分野ごとのデータ設計を行うボトムアップアプローチを組み合わせる。トップダウンアプローチを東洋大学が、ボトムアップアプローチを NIMS が担当する。

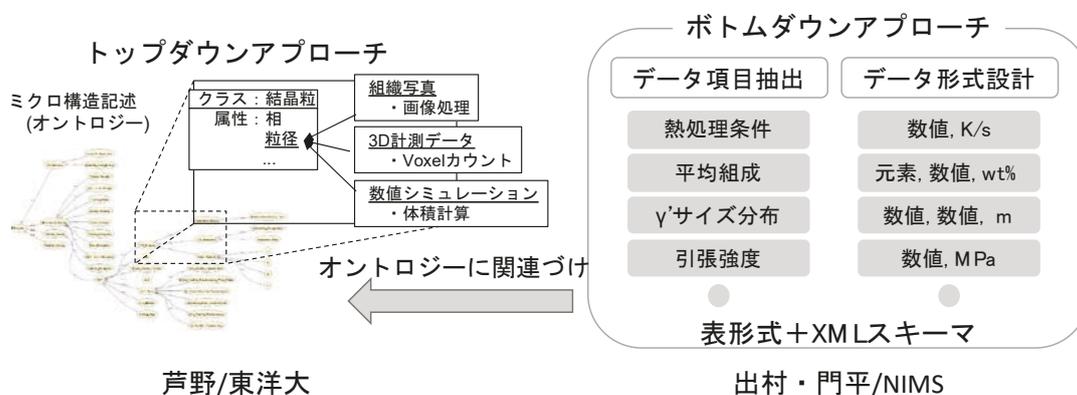


図 A5-1- (1) 研究開発方法論と実施体制

## (2) 実施項目

### 1) 構造材料データ記述方式設計 (NIMS)

- 鉄鋼材料のクリープ・疲労を対象として、NIMS データシート、日本鉄鋼協会データベース等を参考にデータ設計を実施する。
- 機械学習データセットを作成する web アプリケーションソフトウェアを開発する。

### 2) マテリアルズインテグレーションのための構造材料データベースの構築 (東洋大学)

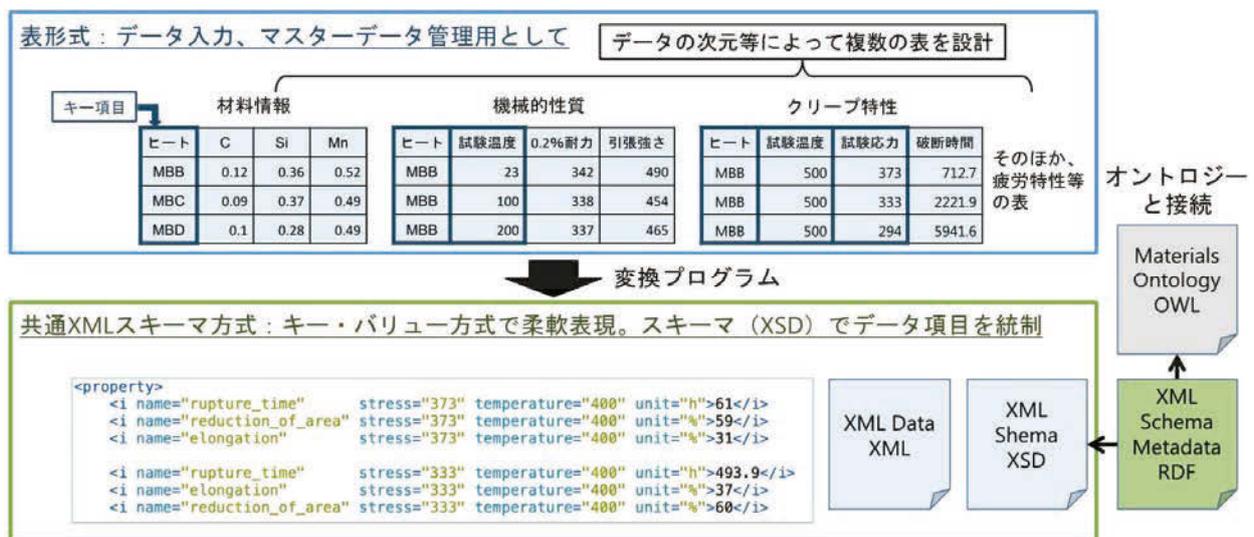
- クリープ試験・ニッケル基超合金の性能に関わる、物性・マイクロ組織等を記述するオントロジーを開発する。
- オントロジーとボトムアップアプローチのデータ構造 (XML スキーマ) を関連づける RDF (Resource Description Framework) の中間層を設計する。

## (3) 主な成果

- 図 A5-1- (2) に示すように、鉄鋼材料のクリープ・疲労について、オントロジーとの連携による効果を繰り返しつつ、現場で利用する表形式、プログラムから利用するための XML スキーマ形式によるデータ記述方式を設計した。さらに、相互に変換するためのプログラムも開発した。
- オントロジーと XML スキーマを RDF によって連結し、これを SPARQL エンドポイントに格納することで、オントロジーデータ項目からスキーマのデータを引き出す仕組みを構築し、これを実際にデモンストレーションする web アプリケーションソフトウェアを開発した。

## 3. 今後の計画、社会実装に向けて

- 後半は、社会実装に向け、設計した鉄鋼材料のデータ構造を、企業内でのデータ活用のために応用していく研究開発に注力する。
- 企業内のデータ再利用とともに、アカデミアによる公知データと、企業が有する産業データを合わせて利用する効果について検証していく。



A5-1- (2) 鉄鋼材料のデータ設計とオントロジー接続によるデータ抽出の仕組み構築

チーム名：A5-2 3D 構造情報解析技術の開発

チームリーダー：原 徹（物質・材料研究機構）

参画機関：物質・材料研究機構、理化学研究所、関西大学

## 1. 背景、目的など

### (1) 背景・目的

材料の組織は三次元(3D)かつ異方性を有するものなので、観察も本来 3D で行うべきであるが、殆どの顕微鏡手法が二次元(2D)像に立脚しており、3D 組織観察は技術的に発展途上である。本研究課題では材料組織を、特にこれまで 3D 観察ができなかったスケール領域において、組織情報を三次元的に正確に取得するための 3D 観察・解析技術の研究開発を実施する。

### (2) 目標

本研究課題では、3D 構造情報取得技術とその解析技術を確立し、本技術分野で世界をリードする組織解析技術パッケージを構築するとともに、逆問題解決に資するデータの取得を可能とすることを目標とする。

## 2. 実施概要

### (1) 実施体制

A5-2 では、図 A5-2-(1)に示すように NIMS が FIB-SEM ベースの 3D 観察技術を、理研・関西大のグループが主に光顕ベースの 3D 観察技術と 3D 硬さ試験の技術開発を実施している。観察対象は A1-1(東大、JFE スチール)、A1-3(神戸製鋼所)等の他課題と連携し、試料の提供を受ける。これらの観察技術で取得したデータの画像処理および特徴量抽出の技術開発は理研が主導して実施している。

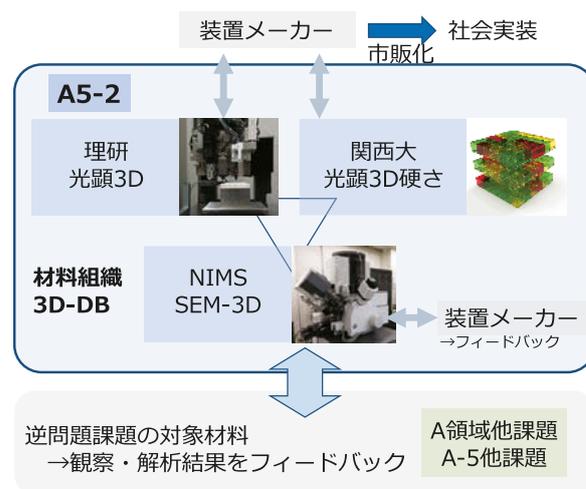


図 A5-2-(1) 実施体制図

### (2) 実施項目

- 1) 電子顕微鏡によるマイクロ-ナノ 3D 組織観察・画像解析技術の開発 (NIMS)
- 2) 光学顕微鏡によるマクロ 3D 組織観察ならびに 3D 画像解析 (理化学研究所)
- 3) 組織観察に適した加工条件探索及び加工機上でのナノインデンターの開発 (関西大学)

### (3) 主な成果

- 1) 電子顕微鏡によるマイクロ-ナノ 3D 組織観察・画像解析の技術開発 (NIMS)  
3D 観察のマクロ-ミクロのスケールギャップを埋める新技术を搭載した FIB-SEM (図 A5-

2-(2)左) を導入し、鉄鋼材料や Ni 基合金など、他課題の種々の材料に応用し、組織の3D 観察だけでなく、き裂伝播挙動の3D 解析など、従来できなかった大体積の3D 観察によるデータを取得し提供している。

2) 光学顕微鏡によるマクロ 3D 組織観察ならびに3D 画像解析 (理化学研究所)

複合材対応 3D 内部構造顕微鏡システム (3D-ISM) (図 A5-2-(2)右) を開発した。本システムは精密切削-エッチング-断面観察を全自動で行うシステムであり、計画仕様を上回る性能 (視野範囲 10x5x1mm 分解能 0.4x0.4x1 $\mu$ m/voxel) を有する。本システムを用いて鉄鋼材料の観察を開始し、MA 組織のアスペクト比が従来の2D 観察での結果よりも大きいなど、3D 観察ならではの結果が得られている (図 A5-2-(3)) 。

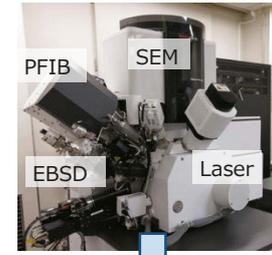
3) 組織観察に適した加工条件探索及び加工機上でのナノインデンターの開発 (関西大学)

複合材対応 3D 内部構造顕微鏡システム内にナノインデンターを導入するとともに、押し込み機構を構築することで、2D・3D 硬さマッピング計測システムを実現した。

### 3. 今後の計画、社会実装に向けて

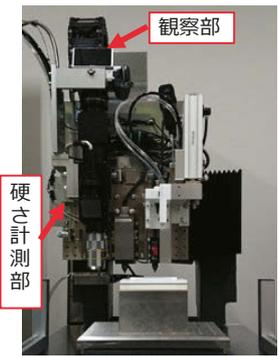
- 先端材料・プロセスの階層的不均一構造に対応できるよう、複数の観察手法を連携させることで、nm から cm までをカバーするマルチスケールな 3D 構造情報取得技術確立し、逆問題解決に資する 3D データを提供する。これらのデータは、複数の階層にまたがる組織特徴をつなぎ合わせるための貴重な実データとなる。
- 3D 組織と硬さ分布の同時計測技術確立し、組織情報と硬さ情報を兼ね備えた 3D データ提供により逆問題解決に貢献する。両者を同時に兼ね備えた 3D データはこれまでに計測された例はなく、ミクロ組織の機械的な特性がマクロな機械的特性に与える影響を理解するための貴重な実計測データになることが期待される。
- 逆問題サンプルの 3D 組織計測データ、材料組織の定量情報データの DB 拡充を行い、予測モデルの高精度化に貢献する。
- 複合材対応 3D 内部構造顕微鏡システムは、観察装置製造メーカーの協力の下、市販化に向けた社会実装が順調に推進している。

●PFIB-SEM-FsLaser (NIMS)



●MI-3DISMの開発 (理研)

●微小硬さ計測機能の開発 (関西大)



同一平面観察を実現

装置の販売事業化を計画中

図A5-2-(2) 開発中の3D組織観察装置群



図 A5-2-(3) M-A 組織の観察(左)と抽出(右)

チーム名：A5-3 高次元構造材料データへの数理的アプローチ
チームリーダー：赤木 和人（東北大学）
参画機関：東北大学

## 1. 背景、目的など

### (1) 背景・目的

プロセス—構造—特性—パフォーマンス（PSPP）の関係を活かして逆問題を解くにあたって、複雑な構造情報（高次元構造材料データ）を定量的に記述する手法が強く求められている。A5-3 サブチームは、トポロジカルデータ解析（TDA）に基づく数理的なアプローチにより顕微画像の定量化と特徴抽出を実現し、MI システムの構築に寄与することを目的とする。独自に開発しているTDAのソフトウェア基盤「HomCloud」は強力な逆解析の機能を備えており、画像の解析や定量化を得意とする ImageJ、OpenCV、MatLAB や他の TDA ソフトウェアと比較して優位性がある。どのスケールのどの構造情報が PSPP に関連に基づく材料開発に役立つのかを明らかにし、産学官の連携により現場の肌感覚と汎用的な MI システムを橋渡す。

### (2) 目標

材料の性能や特性は、非常に幅広いスケール範囲に及ぶ階層的で 3 次元的な幾何特徴を有する構造に関係すると考えられる。この構造はプロセス条件によって大きく変化するため、欲しい性能から逆問題的に最適なプロセスを決定するには適切なデータベースが必要となる。本サブチームは材料特性と高い相関性を持つ構造記述子の生成に取り組み、様々なプロセス条件下で得られたマルチスケールな 3 次元構造を MI システムに効率的に蓄積する手法を確立する。

## 2. 実施概要

### (1) 実施体制

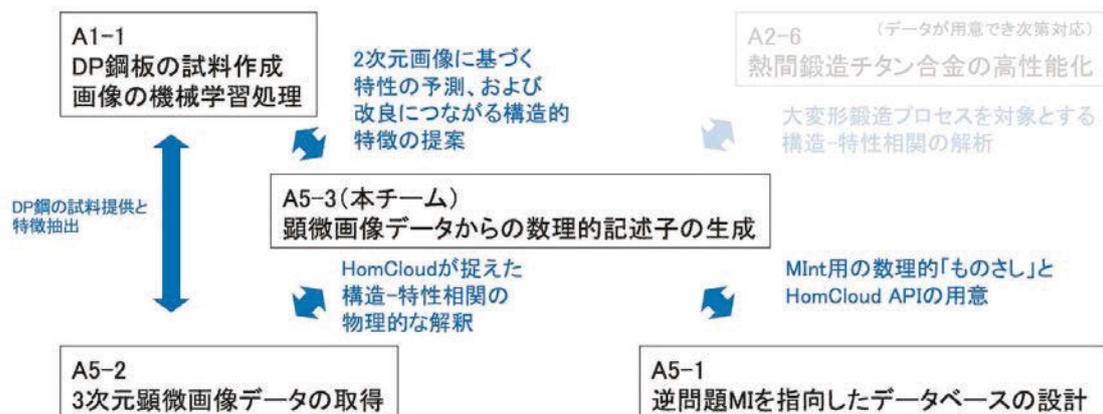


図 A5-3-(1)

A5-3 サブチームの参画機関は東北大学のみであり、他のサブチームとの連携を図に示す。

## (2) 実施項目

### 1) 高次元構造材料データへの数理的アプローチ (東北大学)

- DP 鋼の顕微画像を定量化し、引張強度と良い相関を示す構造的特徴を抽出する
- HomCloud を高度化し、実用的なコストでの 3 次元の金属組織の扱いを可能にする
- MInt から HomCloud を呼び出して材料特性を予測できるようにする
- トポロジカルデータ解析 (TDA) を補完/補強する数理的手法の開発に取り組む
- TDA コミュニティを通じて成果の普及を行う

## (3) 主な成果

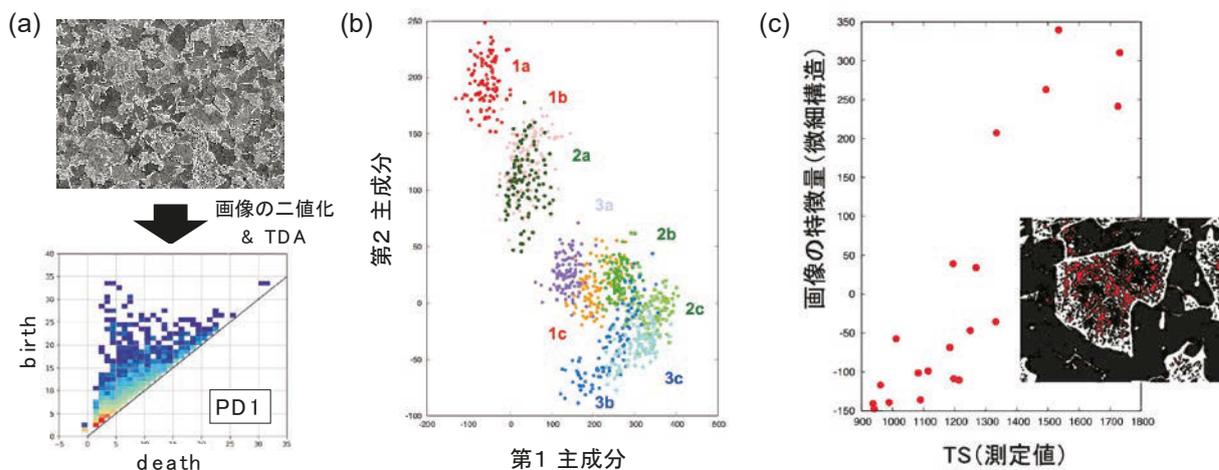


図 A5-3-(2)

図 A5-3-(2) (a)(b)TDAと主成分分析により、DP 鋼の電子顕微鏡画像の定量化と分類に成功した (c)引張強度と良い相関を示す幾何学的特徴を捉え、逆解析を実施した。

図 A5-3-(3) 幾何学的特徴に基づいて鉄鋼組織の粒界構造を再構成した例。HomCloud の高度化により 3 次元の組織画像を実用的に扱えるようになった。



図 A5-3-(3)

実装に関しては、MInt に「ものさし」となるベクトルデータを収録し、Python API を通じて HomCloud に試料画像から材料特性を予測させる目処が立った。併せて、別の視点からの構造情報も取り出すべく、TDA を補完/補強する数理的手法の開発を進めている。

## 3. 今後の計画、社会実装に向けて

他のチームとの連携を密にして材料組織のマルチスケール性を掘り下げ、構造的特徴に基づいて材料特性を測る「ものさし」の物理的な理解と精度の向上に取り組む。また、2020 年度に 20 社超の国内企業をメンバーに含む TDA コミュニティを立ち上げた。今後さらに HomCloud ユーザの裾野を広げつつ、SIP で得られた知見やノウハウを材料開発の現場に持ち込めるような活動を行う。

## B 領域

# 「CFRP」の取り組みと成果





領域名：B CFRP

領域長：岡部 朋永（東北大学）、中村 俊哉（JAXA）

## 1. はじめに

B 領域では、A 領域と共同で開発される CFRP 用 MI システムである CoSMIC (Comprehensive System for Materials Integration of CFRP)を CFRP およびその構造物の開発に適用する。具体的には、設定された目標性能を達成する材料・構造・製造プロセスをサイバー空間（MI システム）で事前に導き出し、それをフィジカル空間（試作・試験）にて実証する。さらに開発時間・コストの低減も定量的に検証可能とする。適用対象には、MI システム適用の好例となることが期待され、我が国が強みを有し、グローバルにも要求が高まっている航空機用複合材料およびその製造プロセスを選定した。

現状、CFRP に関連する技術開発スピードは海外 OEM からの要求に追いついておらず、来るべき中型機、小型機需要の増加に対して、現状の材料・生産レートでは間に合わないことが予想されている。これを打開するためには、官学が有する計算技術・学術基盤を援用した新たな切り口が必要不可欠である。本研究開発では、国内材料メーカーないしは重工各社が技術開発を実施し、官学が CoSMIC を通じてサポートする産官学オールジャパン体制で取り組んでいく。

以下、3 チームの研究開発について述べる。これらは全て(A3)チームの当該サブチームとの連携の下で推進される。なお、開発された計算モジュール、データベース等は、事業化の妨げにならないよう留意しつつ、CoSMIC に統合的に蓄積され、我が国全体の材料開発競争力向上のために活用されるものとする。

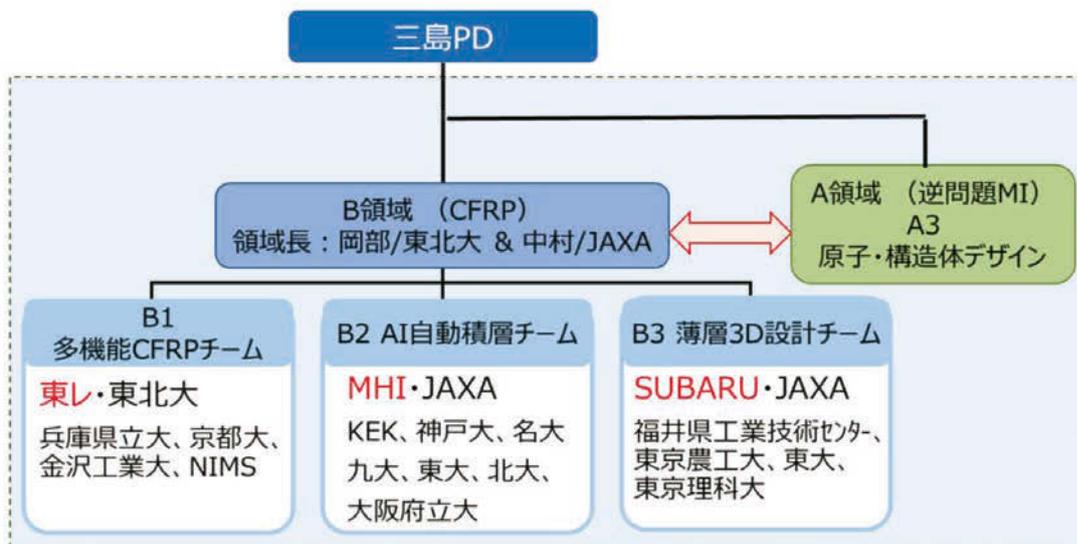


図 B-(1) 実施体制

## 2. 各チームの目標と取り組みの概要

### B1. 多機能複合材料の開発による高付加価値化

MI システム を活用した多機能ポリマー・プリプレグに関するマルチフィジックス・マルチスケールモデリングに基づいて、構造材を設計する新規ツールを作成し、最終的な材料特性を高精度に予測する手法を確立するとともに、これを用いた構造材料設計を実施する。

上述の手法の実用化のために、構造材に必要な力学特性をもつ力学ドメインと、機能ドメインからなるポリマー系、プリプレグ系の設計データベースを構築する。これにより、構造材向けに必要な力学特性を付与したうえで、複数の機能性（難燃性、高熱伝導性等）をあわせて付与した材料を設計する。設計ツールの一つである SOM（自己組織化マップ）の活用により、難燃性と力学特性を両立する系を構築し、力学特性のデータベース構築を進める。また、並行して複数の機能ドメインを付与するための熱硬化／熱可塑の相分離制御ならびにフィラーの局所配置技術の開発を進める。

### B2. AI 援用積層最適化による CFRP 設計・製造自動化技術の開発

CFRP は航空業界で注目を集めてきた材料で、特に 2003 年に開発を開始した Boeing787 は、ほぼ全構造が CFRP 化され、その効果もあつての低燃費等の性能とともに、構造の多くが日本製であったことも話題となった。CFRP は日本発の新材料であることもあり、21 世紀初頭の日本の CFRP 技術は世界に誇るものであったが、Boeing787、続く Airbus A350 登場以来、CFRP 構造製造に向けた自動機械等の発展が海外では著しく、今ではこういった自動機械を大量導入する国、企業が高い競争力を有する時代となってきた。

こういった自動機械時代に、日本の産官学の知恵と経験、最新研究成果を基に、CFRP の良さをより活かし、欠点を矯める、各種最適化を機械製造に盛り込むことで、新たな競争力を育む、革新的な CFRP 設計、製造自動化技術確立を進め、日本の CFRP 産業の競争力再興に貢献していく。

### B3. 薄層材自動積層による CFRP の 3D 高自由度設計技術の開発

多様な積層構成を可能にし、設計の自由度を向上させるメリットがある薄層 CFRP と、積層の自由度が高い可変幅ステアリング積層が可能な AFP 技術を組み合わせ、MI システムで得られる最適設計構造部品の製造を実現化する。

材料技術として、薄層プリプレグシートの高速度製造技術の開発を行う。さらに、高自由度 AFP（可変幅ステアリング積層）に対応可能なプリプレグ製造条件を検討する。

製造技術として、高自由度 AFP の積層パラメータや積層装置のチューニングを行いながら、積層時の型への密着性や可変幅の安定性などの材料チューニングも進め、高自由度製造技術（薄層プリプレグ・可変幅・ステアリング積層）を確立する。

設計・解析技術として、積層構成と強度に関するカーペットチャートを作成し、MI システムを用いた構造部品の積層設計の最適化に取り組みながら、可変幅ステアリング積層最適化技術を活用して構造部品重量の 10% 軽減を達成する。

チーム名：B1 多機能 CFRP の開発による高付加価値化

チームリーダー：吉岡 健一（東レ(株)）、岡部 朋永（東北大学）

参画機関：東北大学、東レ(株)、兵庫県立大学、京都大学、金沢工業大学、  
物質・材料研究機構、日本電気(株)

## 1. 背景、目的など

### (1) 背景・目的

航空機、自動車、鉄道などの構造材には、これまで力学特性向上による軽量化を目的に CFRP の適用が検討・推進されてきた。これらの構造材への適用例・使用量が増えるにつれて、力学特性の要求に加えて、難燃性・熱伝導性・制振性などの機能性を付与することにより、現在用いられる機能材料の削減による軽量化やコスト低減が注目されてきている。特に今後も拡大が見込まれる航空機構造材用途向けには実装可能な機能性付与技術の開発が重要となっている。

一方で、こうした新技術の開発に要する期間の短縮もまた重要視されてきている。自動車や電子材料用途など産業用材料においては、高機能化などにより材料設計の複雑度が増しても、開発手法の更新等が同時に行われ開発期間の短縮がはかられてきている。しかしながら、航空機システムの開発は、逆にその複雑度が増すにつれて開発期間が延長、長期化している、とくに、異方性を有する CFRP は従来の、比較的均一で等方的な性質を有する金属材に対して試験項目や設計が煩雑化する傾向にあり、使用部位が拡大するにつれ評価点数が指数関数的に増大し、材料開発期間やそのコストを延長・増大させる要因の一つとなっており、材料開発の新要素として機能性が加わることで、さらなる開発期間の延長が懸念される。

そこで、MI システムを活用して次世代航空機構造材への機能性付与をポリマー設計およびプリプレグ設計の観点から実施して早期に実装可能な技術として用いることができれば、開発期間の大幅な短縮がや試験項目や試験点数の軽減などを通して開発費の軽減がはかれる。その結果、従来、欧米を中心とする巨大な資本と長年の経験・実績を有するメーカーしか参入できなかった航空機などに CFRP の裾野が拡大し、技術的ポテンシャルをもつ我が国の多くの企業の参加が期待できる。

いわゆる MI と関連する材料のインテグレーション自体は、国外のメーカーを含め広く検討されており、材料の特性からプリプレグ、CFRP、部材の設計まで階層的に検討されているが、航空機用一次構造材としての特性を維持したまま難燃性や熱伝導率など機能性を付与しようという試みはほとんど行われていない。顧客から難燃性の要求は多いが、航空機向けの構造材の難燃性要求基準は、現在の適用機種である B787 などの中大型機ベースの難燃性がベースラインとなっている。しかし、一般的に材料厚みが薄くなると難燃性が低下するため、より小型となる次世代機の軽量化のために薄肉化がすすむことで難燃性が不足する可能性が高いため、難燃性の改善が求められている。

### (2) 目標

構造材に必要な力学特性のドメインと、複数の機能ドメインからなるポリマー系、プリプレグ系の設計データベースを構築する。特に構造材向けに必要な力学特性に加えて、複数の機能性（難燃性、

高熱伝導性、制振性等)をあわせて付与した材料を設計する。航空機構造として一般的な CFRP の有孔板引張強度、有孔板圧縮強度をそれぞれ 480MPa および 310MPa として、これらの低下率を 5%以内に抑えながら、難燃性については、燃焼時の発熱量 (OSU 法) を 65kw/m<sup>2</sup> 以下、熱伝導率については CFRP 厚さ方向で 10%の向上、制振性については CFRP 振動測定における減衰率 10%向上を目標とする。

一方で、多機能ポリマー・プリプレグに関するマルチフィジックス・マルチスケールモデリングに基づく構造材の設計ツールを構築し、最終的な構造材での材料特性を高精度に予測する手法を確立する。設計したプリプレグは、CFRP 部材を模擬した小スケールの要素試験により、効果の実証を行い検証する。達成目標としては【TRL-5】とする。

## 2. 実施概要

### (1) 実施体制

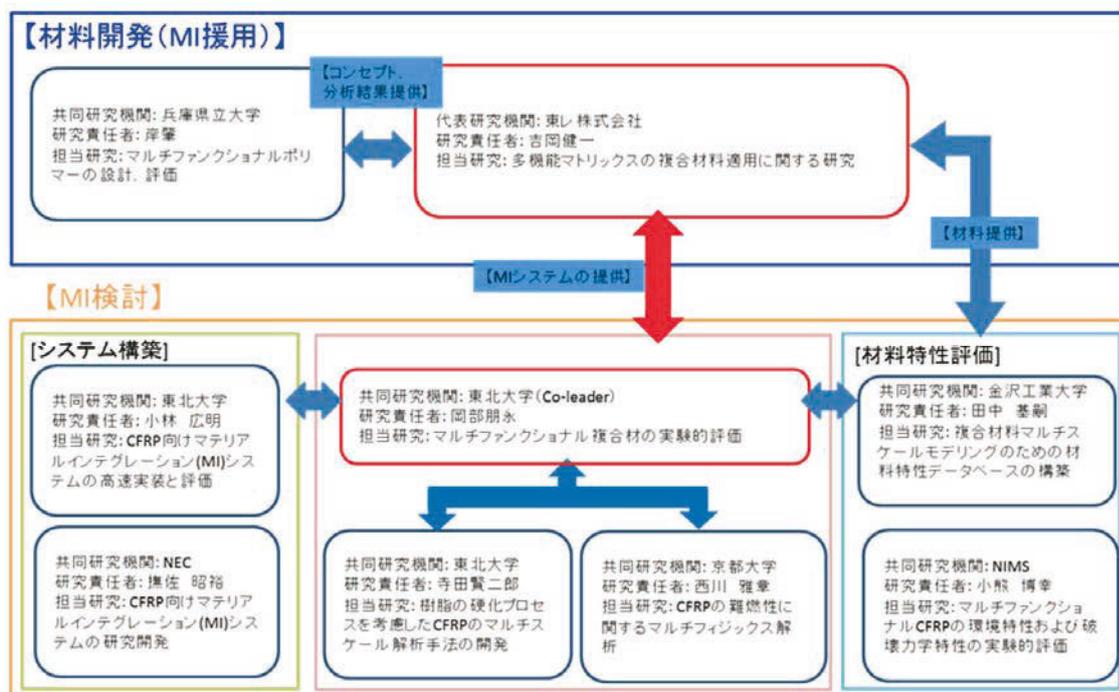


図 B1-(1)

\* CFRP 向けマテリアルインテグレーション(MI)システム : CoSMIC

サイバーでは、MI システムに基づく材料設計指針にしたがって最適な材料の探索、選定、評価、フィードバックを通して精度の高い材料設計を行うことを目的に、東北大、京大で基本的なシミュレーションを実施するための体制づくりを行い、東北大、金沢工大、NIMS でマトリックスとなるポリマーの特性評価から CFRP 特性評価により、データベース構築の準備を実施した。また、シミュレーションを高速で実施するためのシステム導入について、システム開発に NEC が、システムに対するツールの実装を東北大が実施した。フィジカルでは、兵庫県立大や東レで実際に多機能性を有するポリマーを設計、評価分析を行う予定に従い、兵庫県立大では基本的な材料の選定を行った。東レでは難燃性評価のための基礎情報および逆問題解析に用いるベースラインの評価を行った。

## (2) 実施項目

- 1) 多機能マトリックスの複合材料適用に向けたプリプレグ・CFRP設計、複合材料（模擬部材を含む）の製造およびプリプレグ／複合材料の基本特性、機能性の評価（東レ株式会社）
- 2) マルチフィジックス/マルチスケールシミュレーション技術を駆使したマルチファンクショナル CFRP の力学的特性評価（東北大学 大学院工学研究科）
- 3) マルチファンクショナルポリマーにおける樹脂ドメイン構造の設計および材料特性評価（兵庫県立大学）
- 4) CFRP の難燃性に関するマルチフィジックス解析（京都大学）
- 5) 樹脂の硬化プロセスを考慮した CFRP のマルチスケール解析手法の開発（東北大学 災害科学国際研究所）
- 6) 複合材料マルチスケールモデリングのための材料特性データベースの構築（金沢工業大学）
- 7) マルチファンクショナル CFRP の環境特性および破壊力学特性の実験的評価（物質・材料研究機構）
- 8) CoSMIC の高速実装と評価（東北大学 情報科学研究科；2020 年より参画）
- 9) CoSMIC の研究開発（日本電気株式会社；2020 年より参画）

## (3) 主な成果

1) 樹脂難燃化に伴い変動するパラメータとして、樹脂弾性率、ガラス転移温度（耐熱性）、靱性を選択した。東レでは 2019 年度に A-3 プロジェクトから自己組織化マップ（SOM）を導入し、2018-2019 年に測定した樹脂データをもとに、2020 年度にモデル樹脂として新規組成 BR-100 を試作した。BR-100 を用いた CFRP の難燃性は  $65\text{kw/m}^2$  以下を達成した。また、OHC（有孔板圧縮）では  $321\text{MPa}$  でありベンチマーク材（OHC： $310\text{MPa}$ ）同等以上であり目標を達成した。また、OHT（有孔板引張）では  $651\text{MPa}$  とベンチマーク材 OHT： $480\text{MPa}$ 、以上であることを確認している。

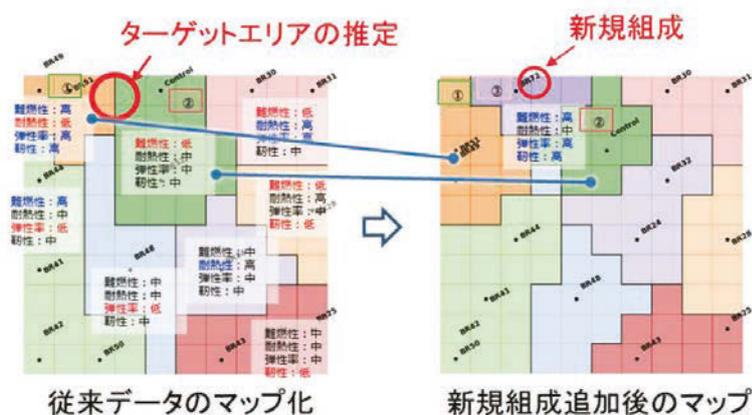


図 B 1-(2) 自己組織化マップを用いた難燃プリプレグ設計

2) 多成分系熱硬化性樹脂として、エポキシ-シアネート系（Epoxy-Cyanate）を対象としシミュレーションを実施し、ガラス転移温度の高精度な予測および密度、弾性率を従来のエポキシアミ

ン系 (Epoxy-amine) と同じく 10% 程度の誤差で予測・推定できることを示した。また、シアネート系樹脂が持つ熱安定性および難燃性の要因を解析した。シアネート系樹脂は酸素を消費しにくく、難燃性が高いことが確かめられた。

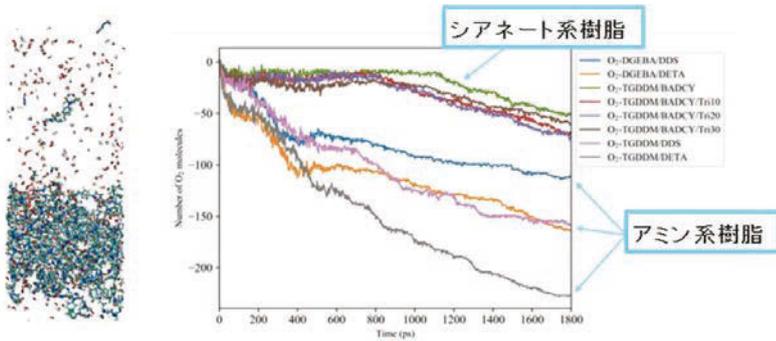


図 B1-(3) 燃焼シミュレーションにおける酸素消費量

3) シアネートエステルエポキシ-PES の 3 元系の検討を実施、2019 年までの検討で、相分離制御により UL94 V-0 の難燃性が得られることを確認した。また、グラファイトファイバーが、特定のドメインにのみ選択的に配置されることを見出した。2020 年には本技術を応用し得られた CFRP の板厚方向の熱伝導性  $1.1\text{W/m}\cdot\text{K}$  であり、目標値  $0.8\text{W/m}\cdot\text{K}$  を達成していることを確認した。

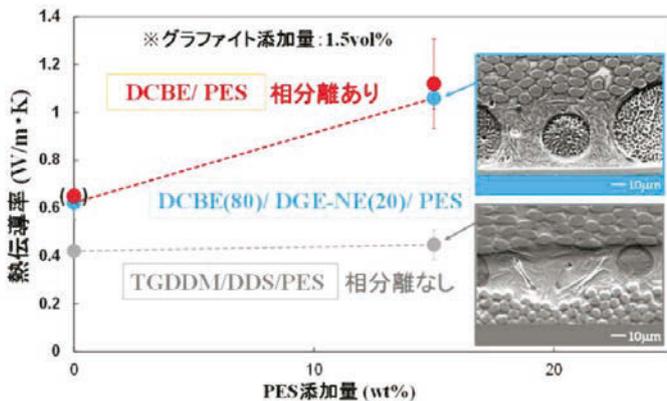


図 B1-(4)

4) CFRP の熱伝導特性が着火に与える影響について解析的に評価することができた。また CFRP 内部における熱伝導特性と熱分解挙動について、積層レベルのメソスケールで解析可能な PGD(Proper Generalized Decomposition)法を 2018 年度より検討を開始し、二次元の移流拡散解析までを効率的に計算可能な解析プログラムを開発した。

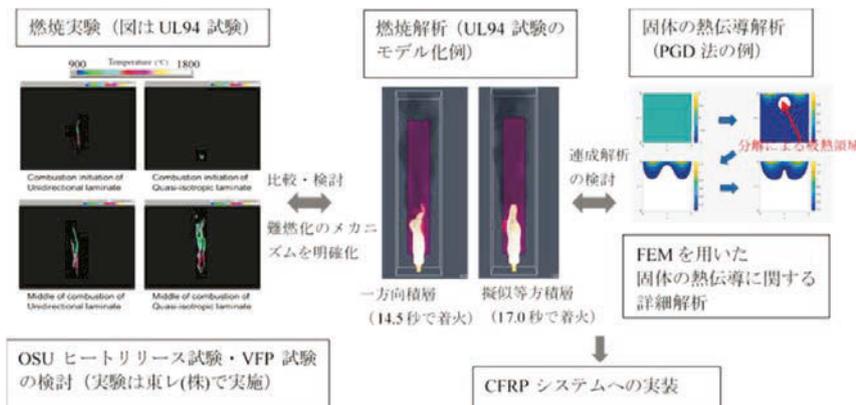


図 B1-(5)

\* CFRP システム : CoSMIC

5) CFRP のユニットセルに対する数値材料試験により、硬化過程における樹脂の物性変化を考慮した CFRP のマクロな粘弾性変形挙動の特徴付けを行い、硬化度依存性のある関数として導入したマクロ異方性材料構成則を構築した。

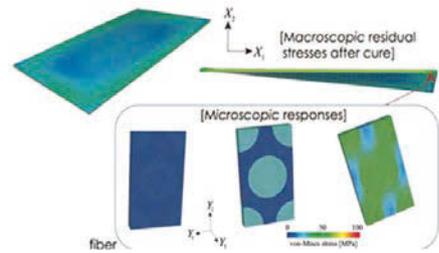


図 B 1 -(6)

6) 難燃ベンチマーク材 (FR-0,FR-1) ならびに難燃モデル (BR-100) プリプレグの難燃ファイラー配合系での、有孔板引張ならびに圧縮における静的特性ならびに疲労特性を評価した。疲労試験においては、 $10^6$  サイクル程度までの寿命領域における応力レベル-寿命曲線を作成した。準三次元 XFEM による難燃性擬似等方 CFRP の OHT 損傷進展解析向けのデータを取得した。

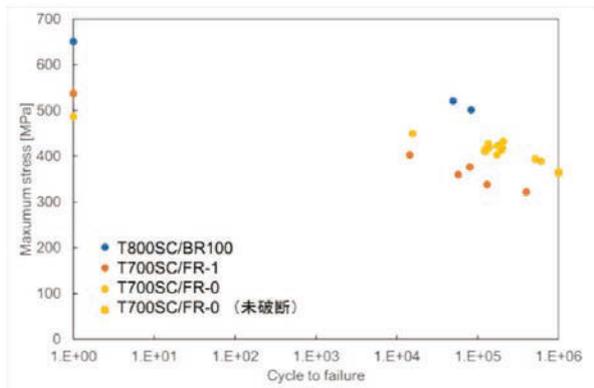


図 B 1 -(7) OHT 疲労試験結果

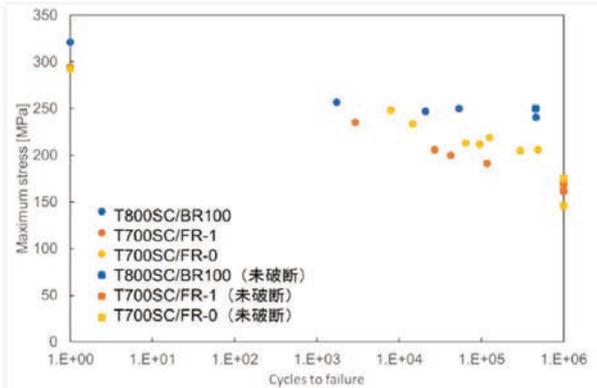


図 B 1 -(8) OHC 疲労試験結果

7) 難燃ベンチマーク材 (FR-0,FR-1) ならびに難燃モデル (BR-100) プリプレグの種々の構成による引張疲労特性を評価した、ファイラーの配合により、静的特性では、繊維方向の特性には影響が少ないが、非繊維方向 ( $\pm 45^\circ$ ,  $90^\circ$ )、特に剪断特性が影響する  $\pm 45^\circ$  での低下がみられることを明確にした。

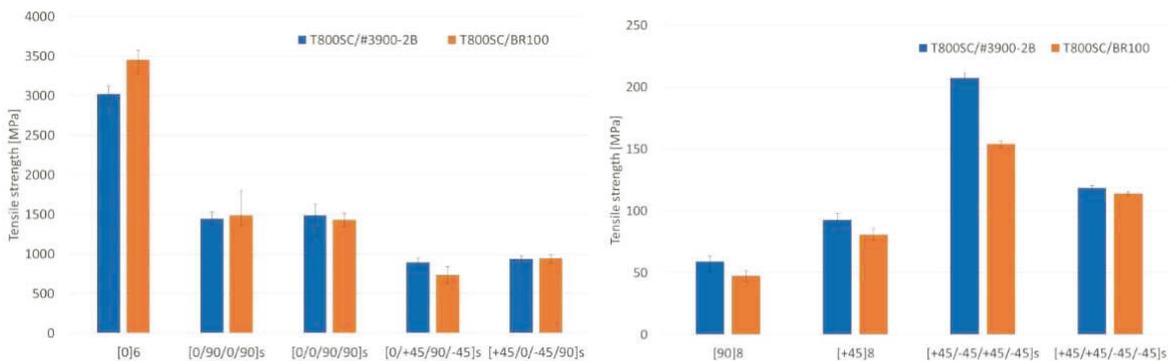


図 B 1 -(9) 各種積層構成での引張強度特性

8) 分子シミュレーション、有限要素法、有限差分法、有限体積法、自己組織化マップの各種アプリケーションについて主要カーネルの計算コスト分析を行った。次に、高コストカーネル分析に基づき、高性能ベクトル処理エンジンへのオフロードにより高速化が期待できるものを抽出し、当該カーネルのベクトル処理向け実装とその初期評価を行った。その結果、疎行列連立一次方程式のソルバカーネルに対して、初期実装で Xeon プロセッサでの実行時間に比べ直接法での解法で 15% の時間短縮、反復法での解法で 3 倍の処理時間の高速化をそれぞれ達成した。

9) ハイブリッド型スーパーコンピュータ上で動作するプロトタイプを構築し、解析ソフトウェアについてシステム利用方式の分析としてプログラムインターフェースの調査

(図 B1-(10)) を実施した。そして、CoSMIC を設計するために必要な情報を採取した。

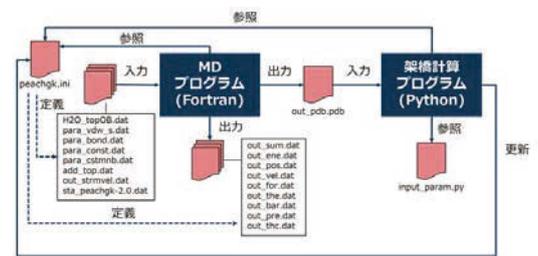


図 B1-(10)

10) 【全体総括】B-1 では、材料設計、材料のデータベース作成、シミュレーション、MI システムの構築の4つの軸をもつため、担当機能ごとに4つのグループで活動を実施した。CoSMIC の一つ自己組織化マップ (SOM)により、逆問題的にマトリクス樹脂設計が可能であることが示すことができ、材料設計、シミュレーション技術の融合を図ることに成功した。材料データベースの拡充の過程で材料の問題点を明確にすることができ、同データを用いた疲労損傷解析が成功したことにより、今後の材料設計、シミュレーションへの展開可能であることを確認した。現在までに作成したツールは、CoSMIC への移植が完了し、フィジカル-サイバーの融合、社会実装にむけ前進している。

### 3. 今後の計画、社会実装に向けて

2018 年より実施している製造メーカー（部品メーカー含む）へのヒアリング結果などより、材料への難燃性など機能性付与の要望が高まっていることが確認されており、特に要望の多い難燃性を足掛かりに材料の開発を進める。また、高熱伝導性や制振特性の付与など潜在的な要望に対しても、先んじて提案することが採用にむけて必要である。

提案アプローチとしては、製造メーカーからの材料提案要求に乗るケースであり、これは次期の機種のアナウンス前後に開示される情報に従う。本ケースでは、東レが提案主体として活動する。具体的な時期は不明であるが、2022-2023 年には製造者が実証可能なレベル（TRL-5）に到達している必要がある。

また、別ケースとして本 PJ で目標とする枠組みである製造メーカーを巻き込んだ形でワークショップを行い、材料提案にもっていく形がある。製造メーカーでの材料の要求特性への落とし込みがされていない状況で、CoSMIC を活用したパッケージ提案を行い、製造者と連携する。これまでに構築した系に CoSMIC を用いて、製造メーカーからの要求に合わせこみ、2025 年ごろにかけて提案していく予定である。正式に認定され実部材として使用されるのは 2030 年ごろを想定している。

チーム名：B2 AI 援用積層最適化による CFRP 設計・製造自動化技術の開発

チームリーダー：阿部 俊夫（三菱重工業(株)（中菱エンジニアリング(株)））、  
中村 俊哉（宇宙航空研究開発機構）

参画機関：三菱重工業(株)、宇宙航空研究開発機構、高エネルギー加速器研究機構、  
神戸大学、名古屋大学、九州大学、東京大学、北海道大学、大阪府立大学、  
信州大学

## 1. 背景、目的など

### (1) 背景・目的

航空機複合材構造製造において『ロボット積層』、AFP(=Automated Fiber Placement)装置は、欧州製を中心に進歩が著しい。このため、日本の複合材技術の国際競争力が急速に低下しつつある。一方、民間航空機の需要は、2020年に世界に蔓延した新型コロナ禍の影響を直接受け、中国国内線を除けば、大打撃を受けた。そういった逆風下ながら、現在、世界各国でワクチン接種が進み、航空業界も「After コロナ」が期待される時期となってきた。今後の航空機開発においては、価格重視であるとともに、米国のパリ協定復帰の影響もあり、サステナビリティ重視の風潮がより強まり、構造軽量化、低燃費は大きな製品アピールポイントになる。これに大きく貢献する複合材構造の出番が強く期待される場所である。ただ、現状の複合材技術ではコスト的にも量産性でも想定される大量産(月産100機以上)には対応が困難であり、開発・進歩の著しい『ロボット積層』AFP装置をベースとした生産革命、Game Changeが必要である。

複合材素材では炭素繊維を始め日本メーカーが世界をリードしており、この素材での競争力を活かしながら、複合材の欠点、課題を産官学連携、CoSMICの活用を通じた研究開発を進めていき、課題解決を図る。

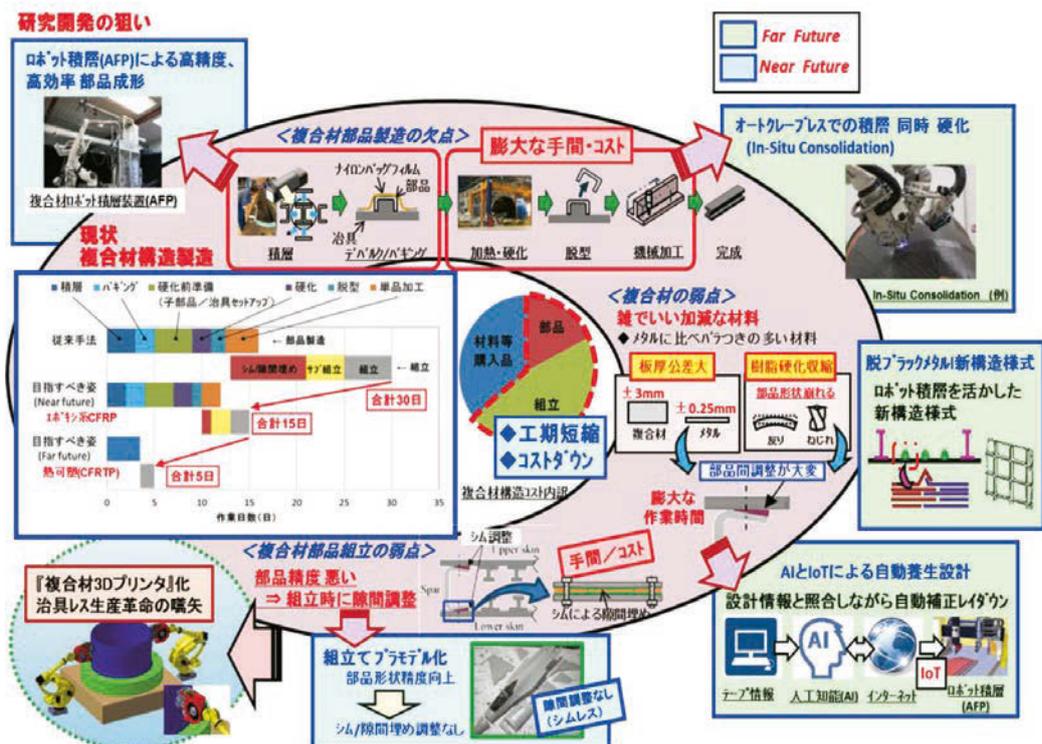


図 B2-(1) 複合材構造製造課題と研究開発に依る成果期待

## (2) 目標

現状のエポキシ複合材構造製造に比べ、複雑形状の翼形状 構造部品に対し、手積層の5倍以上の高速積層、かつ強度向上を実現。また、熱可塑複合材に向けて「脱オートクレーブ」積層、同時硬化の目途付けをさせる。具体的には以下。

- 複合材自動積層装置を活用した最適積層設計、製造手法の基礎確立
- 複合材自動積層、及び複合材適用構造の製品品質、製造性に拘る課題洗い出し結果を基に MI システム を活用した材料改善スキーム明確化
- 多目的最適化手法とデータマイニングの融合による多変量パラメータを最適化する設計・製造自動化手法の基礎確立
- 熱可塑複合材の AFP 自動積層、同時硬化に向けた手法基礎確立
- 実証試験評価を基にした構造軽量化、高生産性による製造コスト試算、ビジネスモデル検討

## 2. 実施概要

### (1) 実施体制

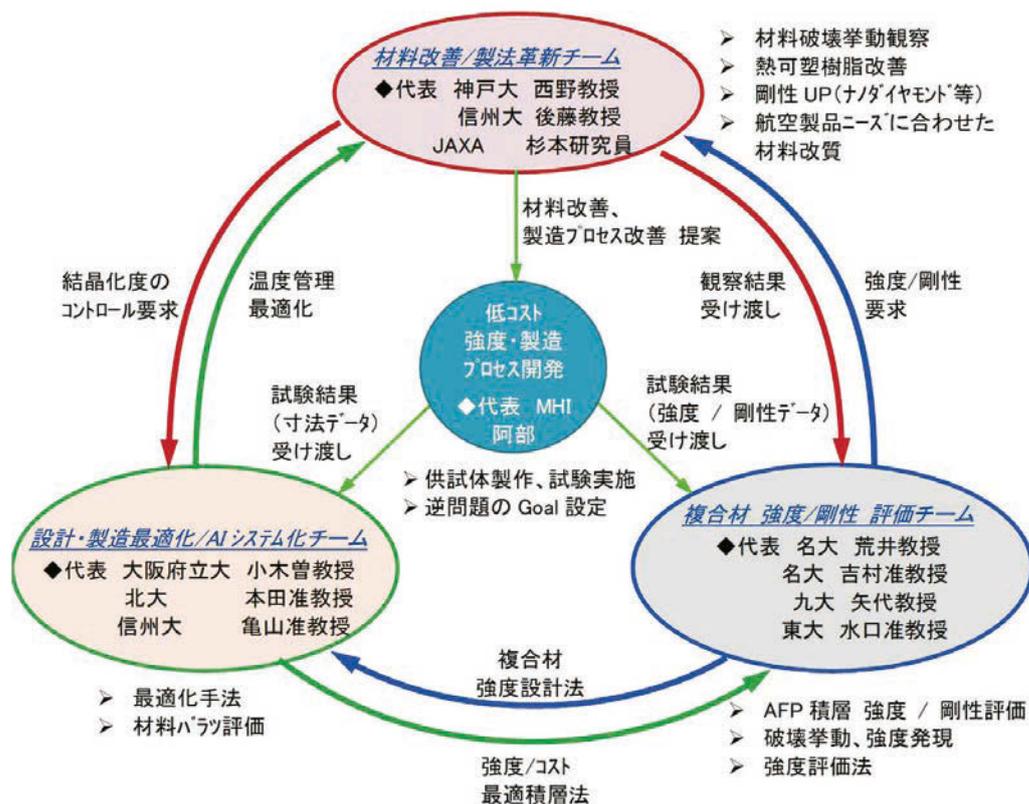


図 B2-(2) 参画機関の役割、相互関係

### (2) 実施項目

1) AI 援用による設計・製造自動化 複合材の研究(三菱重工業(株))

- AFP 積層の特徴(Gap、Lap 等内部欠陥増加)が強度に与える影響基礎評価

- 複合材積層最適化に向けたシステム開発基礎構築
- AFP 装置導入・運用準備
- 2) 熱可塑複合材の自動積層、同時硬化に関する研究(宇宙航空研究開発機構)
  - 熱可塑複合材 積層・同時硬化 (In-Situ Consolidation) 中の急速な温度変化計測法とシミュレーション精度向上
- 3) PEEK の複合材料化による CFRTP の構造構築のための最適化(神戸大学)
  - 熱可塑樹脂(PEEK)のナノフィラ混練による特性改善基礎評価
- 4) プライ端部が内在する複合材料積層板の損傷進展プロセスの解明(名古屋大学)
  - Gap/Lap が複合材衝撃損傷に与える影響評価と衝撃後圧縮強度評価の基礎構築
- 5) プライ端部が内在する複合材料積層板の損傷進展プロセスの解明(九州大学)
  - Gap/Lap が内在する複合材積層板の微視構造モデル化基礎構築
- 6) AFP 積層に基づく新構造様式設定(東京大学)
  - AFP 積層を活用した積層様式での強度向上
- 7) AI 援用によるステアリング積層複合材の多目的最適化(北海道大学)
  - 逐次近似最適化による多目的最適化システム基礎構築とデータマイニング有用性確認
- 8) 『ロボット積層』AFP 装置に依る製造最適化研究 (大阪府立大学)
  - Gap/Lap によって生じる板厚や性能の空間変動を評価する解析モデル開発
- 9) 『ロボット積層』AFP 装置に依る積層構成多目的最適化(信州大学)
  - Gap/Lap を有する積層板の近似解析モジュールの基礎構築

### (3) 主な成果

- ・複合材自動積層装置(AFP)の導入・設置工事  
 度重なるコロナ禍緊急事態宣言により、作業員(仏人)帰国・工事中断を余儀なくされた。但し、この間、三菱重工が生産用に導入整備中の自動積層装置を代用し、機械積層特有の課題整理を実施した。同時に、導入中の装置稼働に要するソフトウェア等の習熟に努めた。
- ・Gap、Lap 等、欠陥盛込供試体での強度・剛性評価と性状観察  
 機械積層時に多発する内部欠陥(Gap、Lap)盛込供試体での各種強度・剛性試験と CFRP 積層内部の性状詳細観察を系統的に実施。積層自由度(積層順序、比率)、及び応力集中部付近への Gap、Lap 有無により、初期破壊、最終破壊強度ともに影響を受けることを確認。
- ・炭素繊維の強さを活かす積層最適化モジュール基礎構築  
 CFRP の強度的な弱点となる応力集中部、孔有り構造に関する強度低下状況を各種試験で評価。これと並行して、孔周辺での歪状況等を基に、積層最適化モジュールの基礎を構築。
- ・熱可塑複合材 革新成形法の課題洗い出しと材料改善検討  
 AFP を用いた熱可塑複合材革新成形法(In-Situ Consolidation(ISC))の技術課題(熱反り、樹脂結晶化度変化に依る強度変動)に対し、積層時の温度履歴予測検討を進めた。また、熱可塑樹脂(PEEK)に各種充填剤を溶融混練実施。結晶化度への影響評価を進めた。

## 『B2 研究活動成果総括』

AFP 積層品質課題(Gap、Lap)の評価、及び最適積層設計に関係する各種検討、評価、及び CoSMIC 盛込みを期待するモジュール基礎確立活動を実施した。

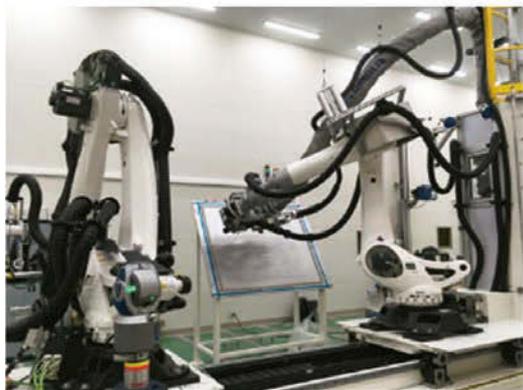


図 B2-(3) 導入工事中 AFP 装置  
(JAXA 調布飛行場分室)

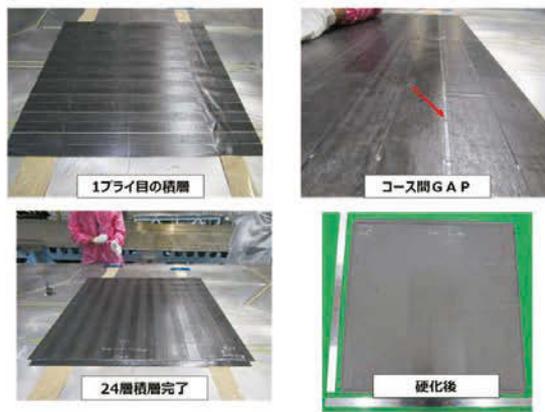


図 B2-(4) AFP 積層品質評価事前試験

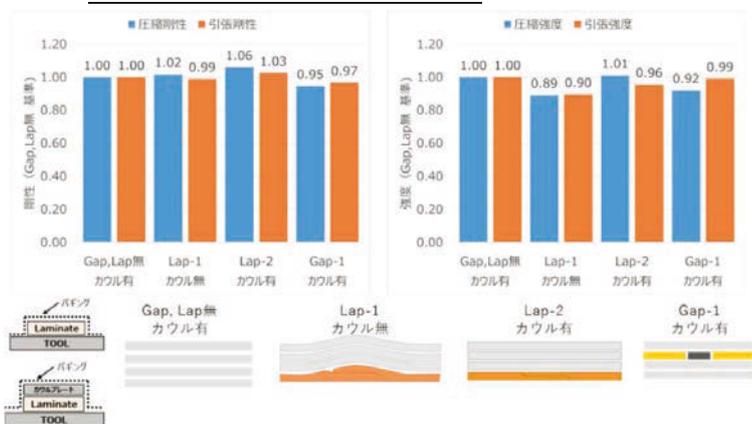


図 B2-(5) Gap/Lap 影響試験

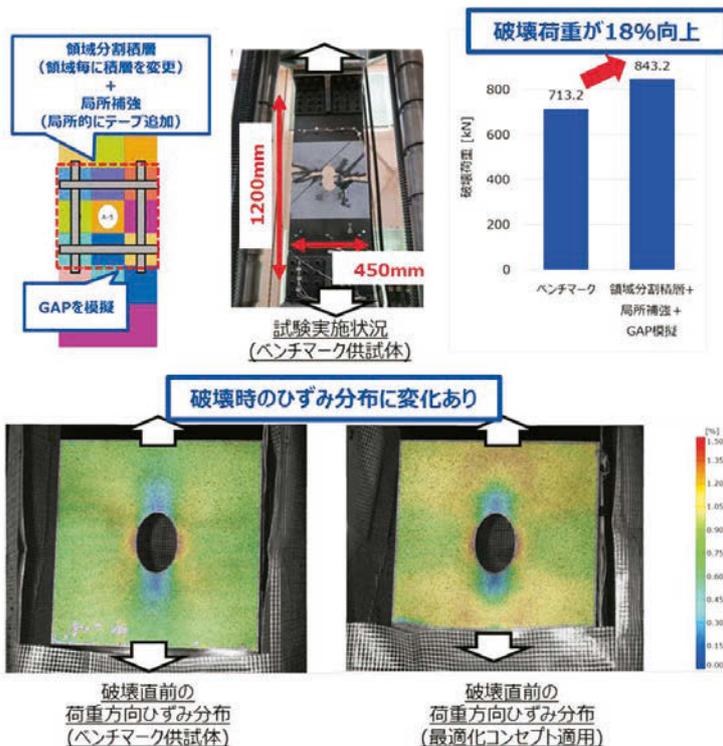


図 B2-(6) 積層最適化試験結果

### 3. 今後の計画、社会実装に向けて

新型コロナ禍に依る国内外動向を注視しつつ、極力早期の AFP 本格稼働を進めていく。

AFP 積層品質欠点(Gap、Lap 等)の影響評価、シミュレーション手法開発を進め、その結果を含めた、『ロボット積層』AFP 時代に相応しい高生産性/軽量化 両方を狙う最適化手法開発、及びそれに向けたモジュール構築を進め、最終的には研究成果(開発モジュール)を CoSMIC に盛り込み、複合材活用を考える、多くの産業界の社会ニーズに貢献していく。

**チーム名：B3 薄層材自動積層による CFRP の 3D 高自由度設計技術の開発**

**チームリーダー： 内山 重和 ((株)SUBARU)、  
中村 俊哉 (宇宙航空研究開発機構)**

**参画機関：(株)SUBARU、宇宙航空研究開発機構、福井県工業技術センター、  
東京農工大学、東京大学、東京理科大学**

## 1. 背景、目的など

### (1) 背景・目的

現在の複合材部品は、材料強度を積層設計時に低下させないための同一方向の連続積層や積層順序等の設計制約、決められた厚さの材料を用いる製造制約、あるいは一方向材を複雑形状に賦形したときにできる隙間や重なりによる強度低下や構造に流れる複雑な荷重に対して直線積層の組み合わせで耐荷させている設計・製造両面に関わる制約など、複合材の持つ真のパフォーマンスを発揮できていない課題がある。本研究では、これらの制約を取り払い、設計・製造面の自由度を高めて複合材の特性を更に引き出す高自由度設計複合材技術を開発することを目的とする。

高自由度設計複合材は複合材部品を、薄層プリプレグテープを用いてその幅・厚さをコントロールしながらステアリング積層するが、設計面においてこれらは積層数も増えて設計自由度が上がることになり、従来のような人の手に大きく依存する設計手法のままでは設計難度が高くなりすぎる課題がある。そこで MI システムのマルチスケールシミュレーションによる材料特性の把握や積層設計ツール等を活用して複合材の持つ真のパフォーマンスを引き出す設計を行う。

製造面においては、従来の自動積層装置は単位時間あたりの積層量が性能の指標であり、複雑な積層は苦手としていた。自動積層装置の進化において AFP はステアリング積層といったより複雑なものを積層できるようになってきたが、高自由度設計複合材では更に複雑な積層に対応するための、薄層材を用いた可変幅ステアリング積層のできる高自由度 AFP を開発する。

設計面では MI システムによる設計技術開発、製造面ではそれを実現する高自由度 AFP 開発を行い、学術的なアプローチが必要な MI システムと産業的な意義の大きい製造技術、この組み合わせによって、複合材部品重量の 10%低減を実現する。広く社会で活用できるように公共的な学や官に成果を集約することで、社会実装を促進できると考えている。

### (2) 目標

達成 TRL： TRL4 航空機翼構造要素を例に要素技術開発を完了。

#### ① 薄層 CFRP の開発

- 高自由度 AFP に適合した層間強化薄層プリプレグシート加工条件の確立。

#### ② 高自由度 AFP (自動積層機) 開発

- 自動積層装置による複数本テープでの幅・厚み可変およびステアリング積層技術の確立。

#### ③ 設計・解析技術

- 構築された設計最適化手法を用いた、強度・剛性を確保した上で、10%の軽量化目標を達成した航空機翼構造要素レベルの供試体の設計。
- ④ 成形品
  - 高自由度 AFP を用いた薄層テープのステアリング積層による、最適化された複合材構造要素の実大部品の製造。
  - 製造した構造要素の実大部品に対して、強度および剛性について解析評価の実施。

## 2. 実施概要

### (1) 実施体制

S U B A R Uにて A 領域と連携した、CoSMIC を活用した航空機設計プロセスを構築する。そこに必要な材料データとして、東京大学および東京農工大学にて開発するツールを用いて許容値データベースを作成する。

使用する材料は、福井県工業技術センターが持つ開繊技術を発展させつつ、高自由度設計技術に適合するようチューニングし、JAXA および理科大で研究するステアリング積層技術と、S U B A R Uで開発する高自由度 AFP を使って実際の構造部材を製造する。

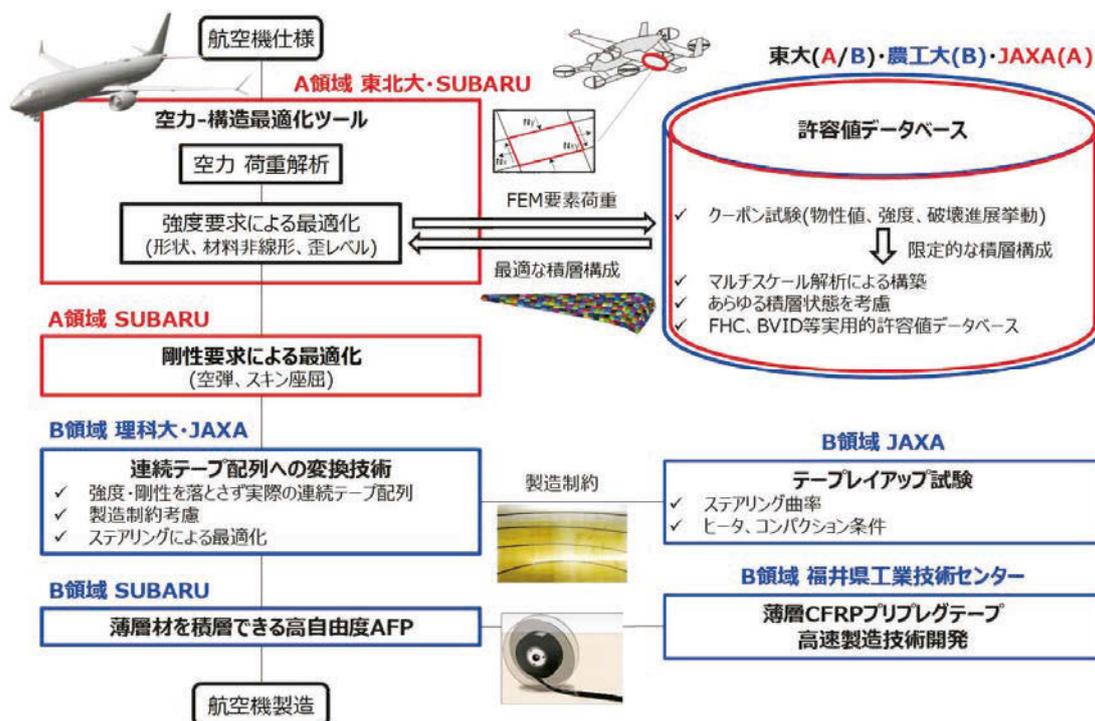


図 B3-(1) 研究開発実施体制

### (2) 実施項目

#### 1) 全体取りまとめ、実用向け高自由度 AFP 開発（S U B A R U）

- 開発する技術の集約。
- 薄層材と高自由度 AFP による高自由度複合材の設計・製造技術の獲得。

#### 2) 薄層 CFRP を用いた高自由度設計及び自動積層装置による試作評価

- 薄層 CFRP の高自由度設計手法の検証、試作評価。
  - 自動積層装置に適用可能な薄層 CFRP 積層データの作成。
- 3) 自動積層装置用低コスト薄層プリプレグの開発 (福井県工業技術センター)
- プリプレグの生産を効率化・高速化する技術を開発。
- 4) 薄層 CFRP の損傷・破壊メカニズムの解明とモデリング (東京農工大学)
- 薄層 CFRP の損傷・破壊メカニズムの解明及び損傷・強度データを収集、蓄積。
- 5) 薄層 CFRP のマルチスケール解析手法逆問題への適用 (東京大学)
- A3 開発のマルチスケール解析手法を薄層 CFRP の強度予測解析へ適用、品質評価。
- 6) 薄層 CFRP を用いた積層最適化 (東京理科大学)
- 積層最適化、ステアリング積層技術の構築。

### (3) 主な成果

#### 材料技術

炭素繊維開繊装置と熱硬化性樹脂塗布装置に、炭素繊維中に熱硬化性樹脂を連続して含浸させる装置を加えた今までにない新しい装置を開発し、厚さ 0.05mm 以下の熱硬化性薄層プリプレグシートを加工速度 20m/min 以上 (世界最速) で、かつ、1 工程で連続して生産する加工技術の開発に成功した。

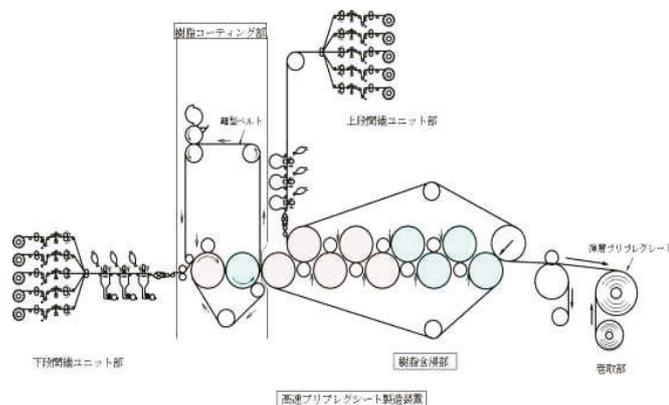


図 B3-(2) 薄層プリプレグシート製造ライン

#### 製造技術

可変するテープピッチを、任意の状態コンパクトローラまで送るテープガイド機構を試作、また 2019 年度に導入した簡易積層装置を用いて積層板を製作し、内部品質評価を進めると共に、薄層プリプレグテープを積層する際の課題を抽出して、これらの成果を全て高自由度 AFP の仕様に反映した。また、高自由度 AFP の組立設置を完了し、積層トライを開始した。

#### 設計・解析技術

材料試験を実施し、積層板の損傷・強度データ取得と、薄層化が各強度に与える影響を考

察し、繊維と樹脂の特性から薄層 CFRP の層レベルの特性を推定するマイクロモデルを作成して実験的に取得可能な層レベル特性からマイクロモデルパラメータを逆推定するためのモデルを構築した。これらの成果を用いて CoSMIC のデータベースとなるカーペットチャートの構築を進めた。

層間強化 CFRP を用いた衝撃付与後圧縮試験の結果、薄層化による強度の向上が認められ、薄層材の適用は構造重量軽量化における重要な要素の 1 つである事を再認識出来た。



図 B3-(3) 高自由度 AFP

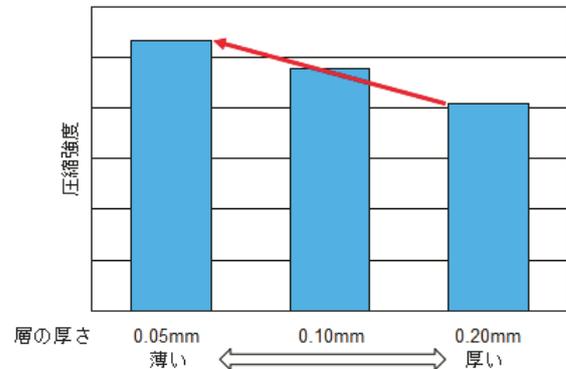


図 B3-(4) 衝撃付与後の圧縮強度  
(層間強化 CFRP)

材料技術、製造技術、設計・解析技術の 3 本柱を軸に各機関と連携し、成果を統合しながら MI システムの構築を進めた。

### 3. 今後の計画、社会実装に向けて

材料技術では、薄層プリプレグシート高速製造ラインを用いて、離型資材を使用しない層間強化薄層プリプレグシートの高速製造技術の開発を行い、20m/min で連続的に製造可能な加工条件を確立する。

製造技術では、導入した高自由度 AFP を用いて積層パラメータや積層装置のチューニングを行いながら、最終的には実構造部品となる複雑な形状の積層を実施して、高自由度製造技術(薄層プリプレグ・可変幅・ステアリング積層)を確立する。

設計・解析技術においては、これまでに構築してきたカーペットチャートの充実化を更に促進すると共に、A 領域の CoSMIC を用いた構造部品の積層設計の最適化に取り組み、構造部品重量の 10% 軽減を達成する。薄層材だけでなく厚層材についてもデータを充実させ、航空外用途へも CoSMIC を利用できるような進めていく。

CoSMIC による設計結果を使って高自由度製造技術で実際の部品を製造し、一連の流れを実証することで、早期の社会実装につなげる。



## C 領域

# 「粉末・3D 積層」の取り組みと成果



領域名：C 粉末・3D 積層

領域長：中野 貴由（大阪大学）、渡邊 誠（物質・材料研究機構）

## 1. はじめに

C 領域は5つの相補的なテーマにより構成され、開発競争が激しい耐熱合金粉末プロセスと、次世代輸送・エネルギー機器用超高温耐熱材料であるセラミックス基複合材料について、MI システム（統合型材料開発システム）を活用した革新的な材料・プロセスを実現し、我が国の産業競争力強化を図ることを目的としている。A 領域で開発する MI システムは、逆問題 MI システムに立脚して、欲しい性能から必要となる材料の構造・特性を提案し、かつその実現が可能なプロセスを提示する。そこで C 領域では、A 領域との密接な相互連携を基軸に、我が国が強みを持ち、今後益々その重要性を増すことが予想されている先端構造材料・プロセス、中でも Additive Manufacturing（AM）をはじめとする新規プロセスへと展開する。その結果として、多階層自動最適化 MI システムを開発し、日本発の高機能航空機エンジン部品やそのプロセスの開発に対し、実装を試みる（図 C-(1)）。

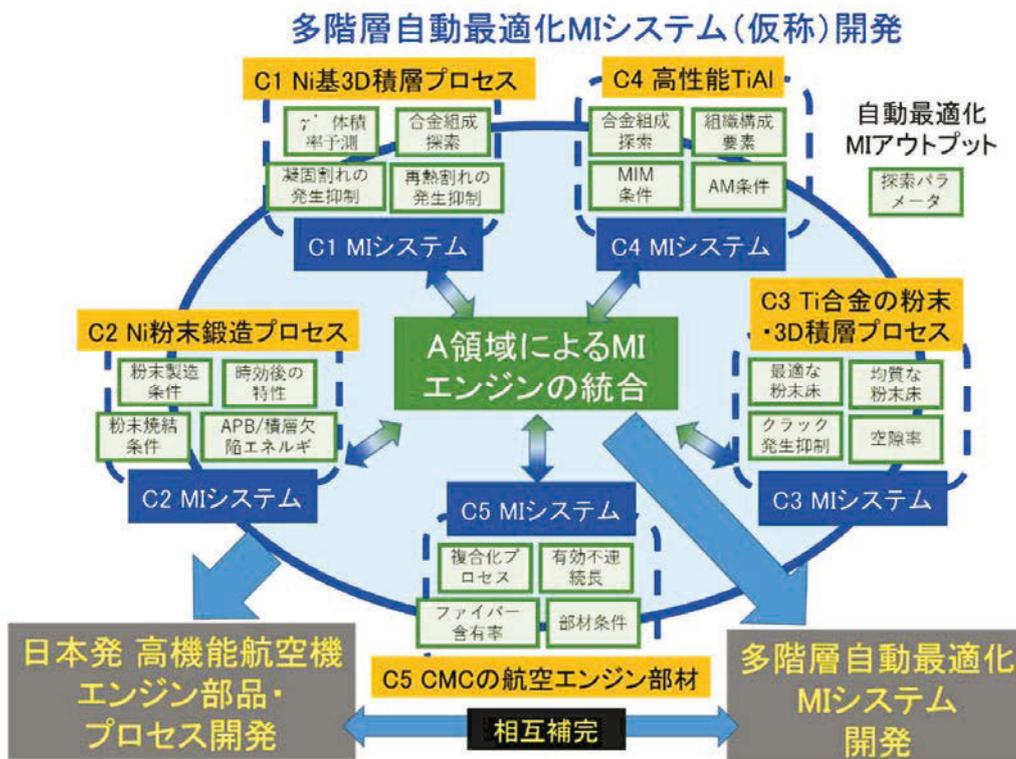


図 C - (1)

## 2. 各チームの目標と取り組みの概要

### C1. Ni 基合金の 3D 積層造形プロセスの開発

近年、温室効果ガスの排出削減要求が高まっており、水素活用への機運が高まっている。水素活用の一つの方法として、水素焚きガスタービン発電が挙げられるが、水素特有の燃焼の難しさから、燃焼バーナーの設計複雑化および材料の高耐久化への要求が高まっている。C1 チームでは、その解として「高温強度に優れ 3D 積層造形プロセスに適した新規 Ni 基合金の創出」と、「複雑構造をもつ燃焼バーナーの製造および燃焼試験による実証」を目指す。

### C2. 高性能化のための Ni 粉末鍛造プロセスの開発

高強度 Ni 基合金では、合金粉末を用いた HIP(Hot Isostatic Pressing)成型材、3次元積層材や HIP 後に鍛造成型を行う粉末鍛造プロセス材（以下 PM 鍛造材）の適用が欧米で先行して拡大している。C2 チームでは、プロセス開発と MI システムの連携により、タービンディスクに用いられる高強度 PM 鍛造材と同等以上の機械的性質が得られる低コストな新規製造プロセスの開発を目的とする。さらに、開発した材料・製造プロセスの認証取得に必要な、動向・先行事例調査、材料試験・データベース構築をオールジャパン体制の共同研究により推進する。

### C3. Ti 合金の粉末・3D 積層造形プロセスの開発

Additive Manufacturing（以降、AM）技術は市場成長が見込まれる航空機関係分野に関して、適用検討例が増えている。C3 チームでは、所望する AM 部材の特性を入力すると、それを実現するために必要な各プロセスでの最適なパラメーターを出力する MI システムの開発を目標とする。国際的に競争力を持った AM 部材開発を日本国内のサプライチェーンで従来の材料開発より早く実現させることを目指す。

### C4. 高性能 TiAl 基合金動翼の粉末造形プロセス開発と基盤技術構築

航空機エンジンの高性能化にとって不可欠な TiAl 基合金の LPT（低圧タービン動翼）への適用を、未だ世界でどこも達成していない粉末プロセス（MIM：金属射出成型と AM：3次元積層造形）を用いて実現すべく、C4 チームでは、東工大を中心とした産学協働によって MI システムの構築とその実証に挑んでいる。

### C5. セラミックス基複合材料の航空機エンジン部材化技術の開発

CMC 材料・部材を航空機エンジンへ適用するためには多くの高度な技術を融合することが重要となっている。C5 チームでは、CMC 材料・部材開発に役立つシステムの構築を行っている。CMC プロセス工程の課題の解決に役立ち、性能保証できるプロセス条件設定のための複合化モジュール、性能を保証するために危険欠陥分布を抽出する組織解析モジュール、長時間使用した後の劣化を予測する危険性判定モジュール、これら三つのモジュールの開発を推進している。

チーム名：C1 Ni 基合金の 3D 積層造形プロセスの開発

チームリーダー：井頭 賢一郎（川崎重工業(株)）、中野 貴由（大阪大学）

参画機関：川崎重工業(株)、大阪大学、物質・材料研究機構

## 1. 背景、目的など

### (1) 背景・目的

近年、温室効果ガスの排出削減要求が高まっており、水素活用への機運が高まっている。水素活用の一つの方法として、水素焼きガスタービン発電が挙げられるが、水素特有の燃焼の難しさから、燃焼バーナの設計複雑化および材料の高耐久化への要求が高まっている。

C1 チーム「Ni 基合金の 3D 積層造形プロセスの開発」では、その解として「高温強度に優れ 3D 積層造形プロセスに適した新しい Ni 基合金の創出」と「複雑構造をもつ燃焼バーナの製造および燃焼試験による実証」を目指している。以下では、これまでの成果について報告する。



図 C1-(1) C1 チーム研究開発の概要図

### (2) 目標

#### 1) MI を活用した新規 Ni 基合金の製造実証

3D 積層造形材として、必要な力学特性を有する新規 Ni 基合金の製造実証

#### 2) 燃焼バーナ高耐久化の実証

3D 積層造形された燃焼バーナが実圧環境での燃焼試験において 4 時間以上の連続燃焼を完遂

## 2. 実施概要

### (1) 実施体制

新しい Ni 基合金の創出にあたっては、サイバー／フィジカル連携により、合金創出に要する期間・コストを大幅に短縮化することを目指す。A2 チーム「プロセスデザイン」から合金組成提案を受け、C1.大阪大学での製造実証、C1.川崎重工業株式会社（KHI）での燃焼バーナ製造、C1.物質・材料研究機構（NIMS）での材料評価および組成改良、という開発体制をとる。

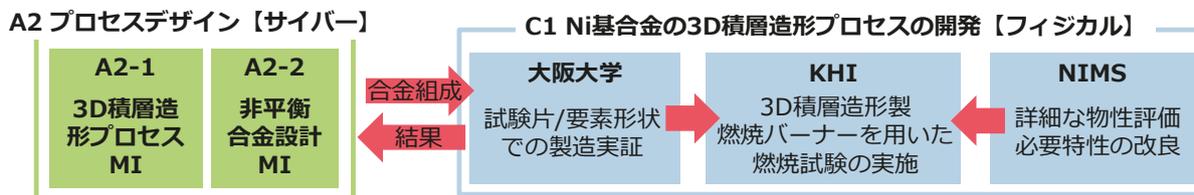


図 C1-(2) 実施体制図

## (2) 実施項目

### 1) MI を活用した新規 Ni 基合金の製造実証 (大阪大学)

- 新規 Ni 基合金での実験データの蓄積
- 新規 Ni 基合金での順問題解析シミュレーションデータと上記実験データの整合性確認

### 2) 燃焼バーナ高耐久化の実証 (KHI、NIMS)

- 新規 Ni 基合金により 3D 積層造形された燃焼バーナの製造技術確立
- 3D 積層造形用の材料評価技術による新規 Ni 基合金の高耐久性の確認

## (3) 主な成果

γ'相(主に Ni<sub>3</sub>Al 相)により強化された Ni 基耐熱合金において、3D 積層造形でのクラックの生じやすさを指標に 3 段階の難易度(易 “X 合金” < “Y 合金” < “Z 合金” 難)と定義した。高温強度特性の序列は、“X 合金”

< “Y 合金” < “Z 合金” であり、造形しやすさとのトレードオフの関係にある。これまでに各種合金種別に対して、図

C1-(3)に示すスケジュールで開発を進めてきた。

	A2. サイバー		C1. フィジカル	
	合金創出	プロセスマップ	燃焼バーナ製造・評価	燃焼試験
2019年度	-	X合金	X合金	X合金
2020年度	Y合金	Y合金	X-Y合金	X合金
2021年度	Y-Z合金	Y-Z合金	Y-Z合金	Y合金
2022年度	Z合金	Z合金	Z合金	Y-Z合金

図 C1-(3) 合金種別と開発スケジュール

### 1) MI を活用した新規 Ni 基合金の製造実証 (大阪大学)

大阪大学は、3D 積層造形プロセス MI から提案された新規 Ni 基合金に関し、フィジカル空間でのレーザ積層造形法による製造実証を実施し、データの蓄積 (データベース構築) とサイバー空間⇄フィジカル空間の連携による整合性検証を精力的に進めている。

既に、複数種の既存/新規析出強化型 Ni 基合金においてレーザ積層造形を完了し、プロセス条件と種々の組織パラメータの対応図 (プロセスマップ) を構築するとともに、機械学習を用いた、順方向 (プロセスパラメータから組織) /逆方向 (組織からプロセスパラメータ) の高精度な予測を可能としている。さらに、組織と力学特性やクラック形成の、合金組成に依存した関連性を明らかにしつつある。

積層造形体は、その造形条件に依存し、図 C1-(4)に公開可能な IN718 合金 (“X 合金”に相当)の例を示す通り、造形方向に<110>が優先配向した主層 (緑色) と<100>が優先配向した副層 (赤色) からなる特徴的な層状組織や、造形方向に<110>が配向化した単結晶様組織、さらには配向が無秩序化した多結晶組織を示した。この傾向は、新規合金においても類似

することを明らかにし、こうした組織形成挙動が Ni 基超合金で一般的に成り立つことを見出し、Ni 基超合金における組織制御指針を得た。層状組織における主層／副層界面（粒界）は 45°の角度差を持ち、合金組成に依存して、① 界面が転位の伝播の障壁となることで強化（降伏応力の顕著な上昇）に寄与する場合、② as-built 状態で界面がクラックの起点となる場合、が存在することが示された。①の

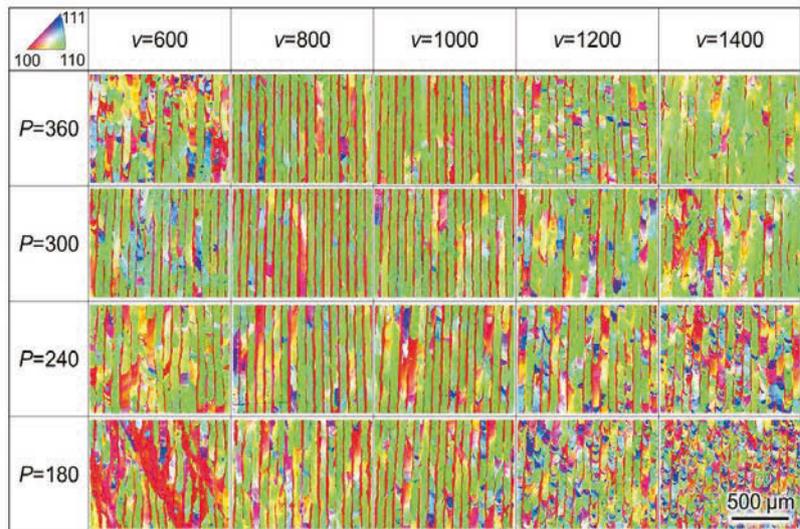


図 C1-(4) 析出強化型既存モデル合金（IN718）におけるプロセスマップ（組織データベース）。特徴的な層状組織、単結晶様組織、多結晶組織の作り分けが可能に。

場合では、as-built 材にて時効処理材よりも高い降伏応力を示し、強化のために積極的に層状組織を導入することが有効である。一方で、②の場合では、高角度粒界を除去するような組織制御が必要であり、投入エネルギー密度による溶融池形状の制御（溶融池シミュレーションにより予測を可能としている）やスキャンストラテジーの変更によって既に高角度粒界の除去とクラック抑制を実現している。

こうした成果は、金属材料分野のトップジャーナルである Acta Materialia 誌（Impact Factor =8.2）等に掲載されるとともに、2021 年 5 月 4 日付の日刊工業新聞の 1 面トップ記事として掲載されるなど、関連分野の専門家、さらには国民からの高い関心を集めている。

## 2) 燃焼バーナ高耐久化の実証（KHI、NIMS）

### 2-1) KHI

2020 年度までは、3D 積層造形プロセスによる“X 合金”を用いた水素焚き燃焼バーナの基礎製造技術の確立に取り組み、その燃焼バーナを用いた実証試験（燃焼リグ試験）に注力した。

燃焼バーナの内部には複数の燃料供給流路が備わっているため、従来は機械加工によって複数部品を別々に準備し、溶接やロウ付け等によって接合していたものである。3D 積層造形プロセスでの製造にあたっては、燃焼バーナの基本構造への影響を最小化しつつ、3D 積層造形プロセスでの製造性を勘案した一体構造への設計改良を行った。一体構造への変更による組み合わせ誤差が低減することが確認され、部品性能の向上に繋がることが期待される。加えて、変形シミュレーション技術の活用、熱処理工程の最適化などにより、所望の寸法精度を達成した。

本燃焼バーナ試作品を用いた燃焼リグ試験を実施し、所望の設計性能を満たした。使用前後において、流量検査・非破壊検査などの各種検査での合格も確認している。今後、より過酷な環境での燃焼リグ試験を実施することで、材料の耐久性評価を行っていく計画である。

## 製造技術の開発

## 燃焼試験@KHI



図 C1-(5) 燃焼試験に供した 3D 積層造形プロセス製 燃焼バーナ

### 2-2) NIMS

“X 合金”に相当する Hastelloy-X 合金の耐酸化特性向上を目的として、組成探索を行った。強度を低下させる析出物の析出量を低減させ、固溶強化を維持しつつ、1100℃での耐酸化性向上のため Al 量を増加、Mo 量を低減することを試みた。熱力学計算ソフトウェア Thermo-Calc により相安定性を検証し、結果得られた候補組成について、アーク溶解で合金を作製、耐酸化特性を確認した。決定した改良合金組成を用いて KHI で積層造形材を作製し、特性評価を行う予定である。

積層造形材の特性評価として、耐酸化特性と高温強度特性を評価した。1100℃における等温酸化試験、繰り返し酸化試験の結果から、造形に用いる粉末の酸素含有量が酸化特性に大きく影響することが明らかとなった。また、高温マイクロビッカース試験により、積層造形材のビッカース硬さ試験を室温から 1100℃まで計測することができた。今後、微細組織観察により  $\gamma'$ 析出挙動等を評価していく予定である。

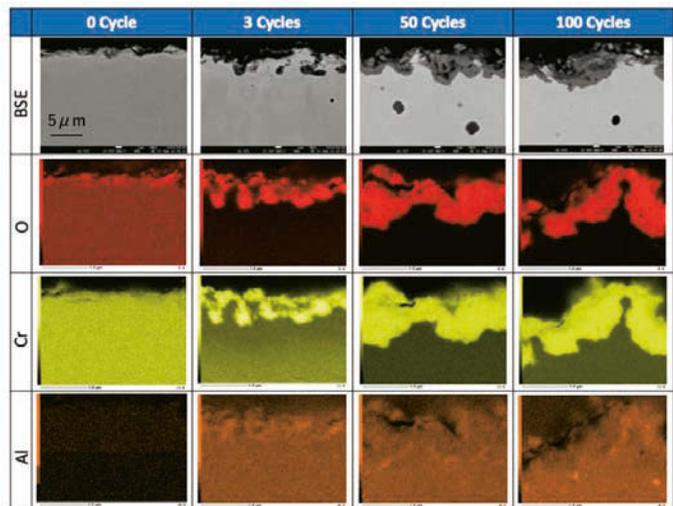


図 C1-(6) 積層造形 Hastelloy-X 合金の 1100℃繰り返し酸化による酸化膜断面

### 3) 成果サマリー

2020 年度までに“X 合金”での合金組成探索、プロセスマップの取得、燃焼バーナ製造、燃焼試験の各項目が順調に進捗した。また、A2 チームとの連携が活性化する体制の構築も終え、2021 年度からは A2 チームから提案される新しい“Y 合金”や“Z 合金”の研究開発がより具体化する計画である。緊密にサイバー／フィジカル連携を深めながら、研究開発を推進していく。

### 3. 今後の計画、社会実装に向けて

サイバー／フィジカル連携にて生み出された合金創出ワークフローは、我が国の材料開発競争力の源泉として、A 領域が開発する MInt システムに実装されることを見込む。その一つの実証例である C1 チームでは、水素焚きガスタービン向けの燃焼バーナでの実証を担う位置づけである。この実証試験を経て、新規 Ni 基合金や 3D 積層造形プロセスのメリットを明確化することで、具体的な製品化・社会実装に向けての検討が進むことを見込む。

チーム名：C2-1 粉末鍛造ディスク材の製造プロセス開発

チームリーダー：今野 晋也（三菱パワー(株)）、長田 俊郎（物質・材料研究機構）

参画機関：三菱パワー(株)、物質・材料研究機構、(株)本田技術研究所、  
三菱重工航空エンジン(株)、北海道大学、東北大学

## 1. 背景、目的など

### (1) 背景・目的

航空機エンジンに用いられる高強度 Ni 基合金の市場は、中小型民間機の需要拡大とともに大きく成長することが期待されている。(図 C2-1-(1) )

本開発は、従来の欧米プロセスで得られる機械的性質を得るための製造プロセスを、国産技術を活用することで再探索し、最適化するものであり MI を活用した逆問題解析の適用例として適している。本開発で得られるデータを MI 側に提供し解析することで、本開発で対象とする航空機エンジン用の PM 鍛造材だけでなく、任意の PM 鍛造材について、機械的特性の目標を設定すれば最適な製造プロセスの選定ができるツールの開発を可能とする。前記のプロセス開発と MI の連携により、欧米が技術的に先行しビジネスを独占している PM 鍛造材の分野で、日本が欧米に追いつき、凌駕することを可能とする。本研究では、タービンディスクに用いられる高強度 PM 鍛造材と同等以上の機械的性質が得られる低コストな新規製造プロセスを開発しその最適化を行うことを目的とする。また、特殊な大型設備を用いずに国内の従来設備で実施できるプロセスを開発する。



図 C2-1-(1) 民間航空機エンジンに用いられる粉末プロセス材の例

対象とする PM 鍛造合金 HGN200(TMP-5002)(以下 HGN200 と呼称する)は図 C2-1-(2)左に示す通り、世界最強レベルのクリープ耐用温度を有し、次期 PM 鍛造材として有望である。

PM 鍛造合金の製造は、特に米国の PCC グループ及び ATI グループが市場の大部分を占めており、特殊な大型設備を用いた高温での恒温超塑性加工技術を以て他の企業の参入を許さない状況にある。この PM 鍛造材の超塑性加工は加工速度が  $10^{-3}/s$  以下程度であるため、特殊設備の使用やプロセスコスト、金型の寿命が課題となっている。

本開発では各研究機関が所有する基盤技術を終結させて、図 C2-1-(2)右のように加工速度が  $10^{-2}/s$  以上で製造可能な国産の PM 鍛造材及びそのプロセスを開発し、現在国内メーカーが

参画できていない民間機エンジンの高圧タービンビジネスに参入する足がかりとする。

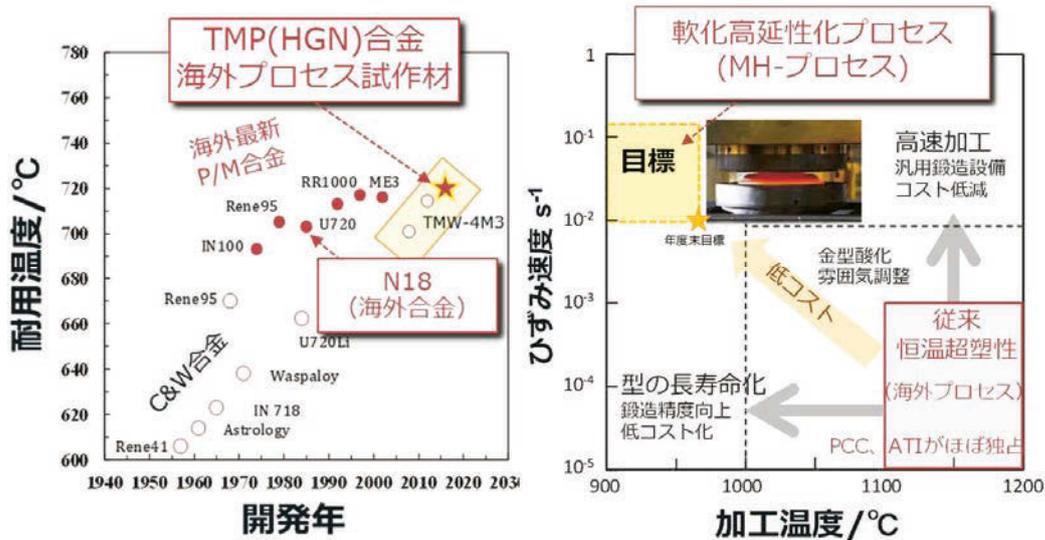


図 C2-1-(2) ベンチマーク (左) タービンディスク材、(右) 粉末鍛造プロセス

## (2) 目標

国産開発プロセスにより海外中型民間機高圧タービンディスク相当品の試作を完了。上記試作ディスクの破壊調査において力学特性目標およびコスト目標を達成し、航空機エンジンメーカーに実用化に向けた検討を開始。小型機エンジン部品について国産 PM ディスク材を用いた試作を完了。上記試作材の破壊調査において小型機エンジンメーカーが設定する力学特性目標およびコスト目標を達成し、国産プロセスによる国産材の次世代航空機エンジンへの適用検討を開始。(TRL5)

## 2. 実施概要

### (1) 実施体制

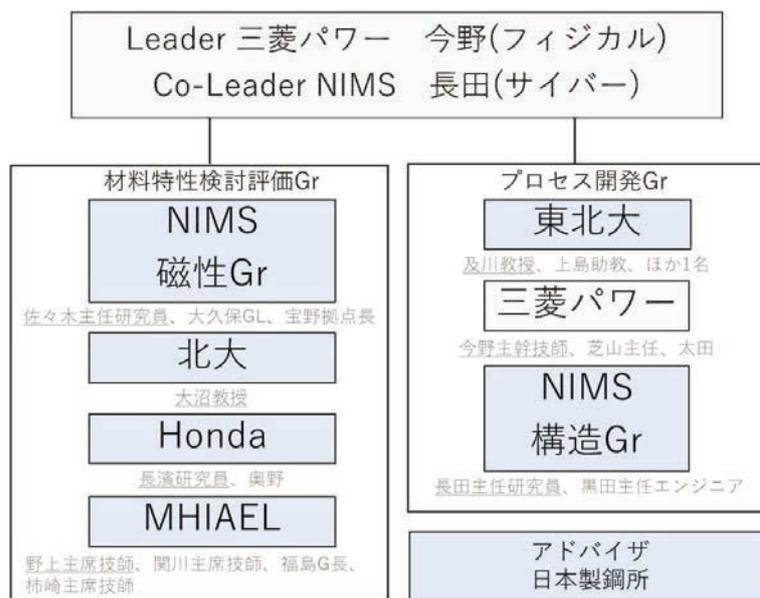


図 C2-1-(3) 実施体制

## (2) 実施項目

- 1) 粉末鍛造ディスク材の製造プロセス開発 (三菱パワー)
  - 粉末製造、HIP、ビレット製造、ニアネット鍛造プロセスの開発を取り纏める
  - 独自技術により開発した高性能粉末製造装置により、PM 鍛造材用の合金粉末の製造プロセスを確立し、開発に必要な粉末を本開発に提供する
- 2) 1500 ℃鍛造シミュレータを活用した Ni-Co 基超合金の鍛造 (物質・材料研究機構)
  - NIMS が本田技術研究所と共同で開発した HGN200 や N18 について、1500 ℃鍛造シミュレータを用い、鍛造試験を実施する
  - 鍛造により得られたデータ群及び知見は、三菱パワー・東北大にフィードバックすることで、プロジェクト後半に実施されるフルスケール鍛造へと繋げる
- 3) マルチスケール組織解析による粉末冶金 Ni 基超合金の組織形成過程の解析 (物質・材料研究機構)
  - 微細組織を走査電子顕微鏡(SEM)、透過電子顕微鏡(TEM)、および 3 次元アトムプローブ(3DAP)を用いて精緻に解析し、加工・熱処理中の組織形成過程を詳細に解明する
  - 得られた知見を MI チームにフィードバックして、フェーズフィールド法などによる組織形成シミュレーションの高精度化や第一原理・分子動力学計算による強度予測に貢献する
- 4) PM ディスク材の評価項目の調査検討及び国産プロセス材と欧米プロセス材の比較評価 (本田技術研究所)
  - 実機にディスク材を適用する為に必要な目標を調査検討し、試作された材料の組織解析を実施し、強度特性を取得する
  - 国産の最適化されたプロセスで作製された HGN200 の組織・強度特性解析と並行して、従来の欧米プロセス材との彼我比較を行うことで国産材料のポテンシャル評価を行う
- 5) ディスク材の評価 (三菱重工航空エンジン)
  - 実際の航空エンジンに適用しているディスク材特性を、「従来の粉末 HIP & 鍛造プロセス材」と「MH プロセス材」の 2 種類で比較し、力学的特性、加工性等の差異を明らかにする
- 6) PM ディスク材の広範囲ナノ組織定量化および国産プロセス材と欧米プロセス材のナノ組織比較評価 (北海道大学)
  - X 線小角散乱(SAXS)法により、ナノ組織を評価する
  - 電子顕微鏡やアトムプローブ法と比較して 7 桁から 8 桁程度大きな体積における組織情報を取得することで、時効過程において生じる各オーダーの $\gamma'$ 相の複雑な時間発展を解明する
- 7) ニッケル基超合金粉末鍛造の変形特性モデリング (東北大学)
  - MH プロセスを適用したニッケル基超合金粉末鍛造時の変形特性を小型鍛造試験により取得し、応力ひずみ線図のデータベースを作製する
  - 取得データから、流動応力モデルを構築し、ビレット鍛造時の荷重・変形の予測を可能とする

### (3) 主な成果

三菱パワーで粉末製造、HIP、ビレット鍛造を行い、NIMS の 1500 トン鍛造シミュレータを用いて東北大の変形予測の知見も反映することで、2/3 スケールディスク素材 (φ180×50mm) の試作を完了し製造プロセスを確立した。(図 C2-1-(4))

HONDA と MHIAEL において力学的特性試験、機械加工性試験、組織解析により、欧米プロセス材と国産プロセス材の比較評価を行った。一部試験継続中の評価項目もあるが、国産プロセス材は目標強度と同等以上であることを確認した。

NIMS と北大で、SEM、3DAP、SAXS を用いて進めた組織解析研究において、3 次  $\gamma'$  相の分布を SAXS によって、2 次  $\gamma'$  相の分布を SEM によって評価し、これらの知見から時効処理中の  $\gamma'$  相の発展の様子を定量評価した。(図 C2-1-(5))

東北大では据込鍛造の組織予測モデルを試作した。有限要素法による逆解析によって、再結晶率・粒径の計算式中の材料パラメータを決定し、概ね計算値と実験値が一致した。

開発全体として、2/3 スケールディスクの試作および強度評価を実施できたため、当初計画の中間目標は達成できたと評価する。個別に見ても、各参画機関間で連携しながら、それぞれの課題に対し十分な成果を上げており、全体の開発の進捗に貢献した。

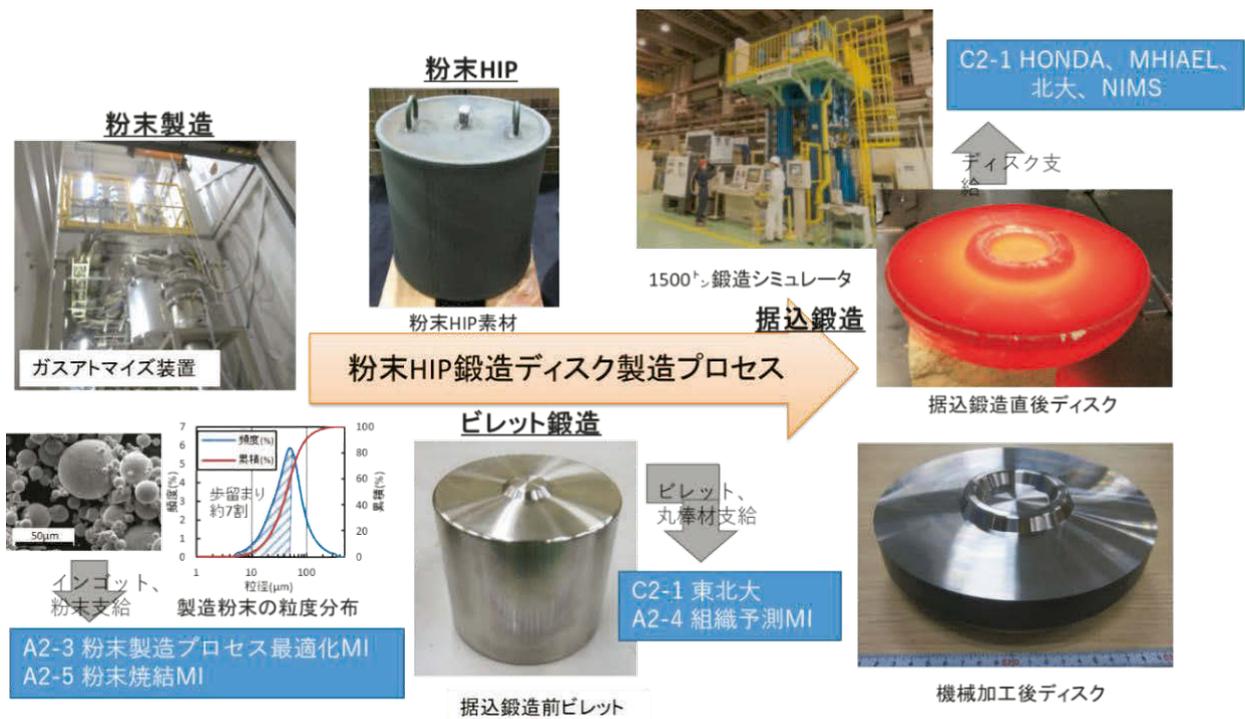


図 C2-1-(4) 2/3 スケールディスクの製造プロセス

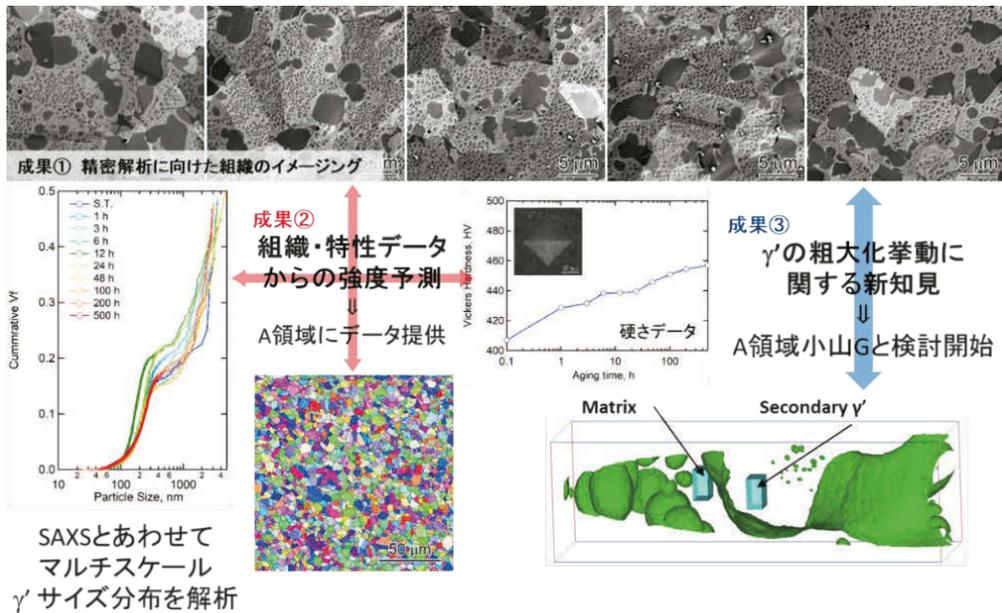


図 C2-1-(5) 熱処理中の組織変化に関する基礎研究と特性・組織予測への展開

### 3. 今後の計画、社会実装に向けて

2020 年度までに確立した 2/3 スケールディスク素材の製造プロセスを基に、実機スケールディスク素材の製造プロセスを検討する。まずは各エンジンメーカーと共同で実機スケールディスクの詳細形状を決め、それに合わせて各プロセスを検討する。

並行して強度データ取得を行い、国産プロセス材のポテンシャル見極めが完了した後は、実機相当サイズの模擬ディスク材を用いて評価検討を進める。

また、本開発の最終目標は、国産材と国産プロセスを組み合わせた航空機エンジン部材に適用することであるが、まずは、欧米で開発された既存材の製造プロセスを国産プロセスに置き換え、その実績のもとに、国産材と国産プロセスを用いた航空機エンジン部材を実用化することとしている。認証取得には時間がかかり、本開発期間内での認証取得は困難であるが、本開発では認証に必要なデータ採取が可能な段階まで到達し、その後は、ガスタービン学会で立ち上げを検討しているプロジェクト(国産材認証取得のためのデータベース化)等により認証取得を進める計画である。

<b>チーム名：C2-2 航空機材料の国際標準化・認証のための材料データベースの構築</b>
<b>チームリーダー：川岸 京子（物質・材料研究機構）、今野 晋也（三菱パワー(株)）</b>
<b>参画機関：物質・材料研究機構、三菱パワー（株）、航空宇宙開発機構、 （株）本田技術研究所、三菱重工航空エンジン（株）、 （株）IHI、川崎重工業（株）</b>

## 1. 背景、目的など

### (1) 背景・目的

現行エンジンに使用されている高温材料は海外メーカーにより開発されたものが主となっている。これに対して、日本国内でも高効率航空機エンジンの実現に向けて高温強度に優れた耐熱材料および製造プロセスの研究を進めており、動翼、静翼、ディスク用材料として、高温強度、耐環境特性、コスト、製造性などのバランスに優れた材料が開発されている。これらの材料はいずれも現在汎用材料として広く使用されているものに比べて優れた特性を持ち、実用化されればエンジンの効率向上が可能であるが、現状ではこれら国内開発の材料が民間エンジン部材に実用化されるには一部にとどまっている。航空機材料の実用化・事業化は、米欧 OEM の開発計画に大きく依存する。SIP で開発した材料・製造プロセスが彼らの開発に採用されるためには、基本設計が始まる前に、認証取得のための諸データ等の完備が必要条件である。基本設計に間に合わなければ、次の計画まで待たなければならず、大きな機会損失となる。その加速の必要性和、費用・時間は 1 社が負担するには過大であることから、航空機エンジン用国内開発材料の国際標準化・認証活動として、SIP で開発した材料・製造プロセスが FAA（米連邦航空局）、米欧 OEM 等の認証を取得するために必要な、動向・先行事例調査、材料試験・データベース構築を、日本ガスタービン学会との連携のもと、オールジャパン体制の共同研究により推進する。

### (2) 目標

- ① 認証取得のための課題の抽出・整理、およびその解決手法を明らかにすべく動向調査、先行事例調査を行い、データベースの枠組を構築する。
- ② データベース構築の第一段階として、各種材料試験を行う。

## 2. 実施概要

### (1) 実施体制

素材準備機関である NIMS・三菱パワー、物性・機械的特性評価機関である、IHI・HONDA・KHI・MHIAEL、データベース構築機関である NIMS、データベースを使用した社会波及効果評価機関である JAXA で構成される。エンジンメーカーを中心とし、材料設計、材料創製、部材開発、エンジン設計に携わる複数機関が強固に連携することにより、将来の認証取得

を目的とした国内材料特性データベースとその枠組み構築を図る。



図 C2-2-(1) 実施体制

## (2) 実施項目

- 1) タービン翼材の作製及びデータベースの構築（国立研究開発法人物質・材料研究機構）
- 2) タービンディスクのプロセス技術確立（三菱パワー株式会社）
- 3) 性能向上の効果検証（国立研究開発法人航空宇宙開発機構）
- 4) タービンディスク用 Ni 基合金の材料特性評価（株式会社本田技術研究所）
- 5) タービンディスク用 Ni 基合金の材料特性評価（三菱重工航空エンジン株式会社）
- 6) タービン翼用 Ni 基合金の材料特性評価（株式会社 IHI）
- 7) タービン翼用 Ni 基合金の材料特性評価（川崎重工株式会社）

## (3) 主な成果（2020年4月開始のため1年間の成果）

### 1) データベース構造の検討

タービン翼材料 TMS-238、タービンディスク材料 TMW-4M3 を選択し、素材の仕様、プロセス、加工方法、試験項目・手法、結果等、データベースに必要な検討項目を整理した。

### 2) 予備的材料試験

データベース構造が適当であるか検証するための予備的材料試験として素材を調達し、材料試験を開始した。

## 3. 今後の計画、社会実装に向けて

高温強度、耐環境特性、コスト、製造性などのバランスに優れた国内開発耐熱材料を民間の航空エンジンにおいて使用するためには、国際競争力のある材料を対象とした信頼性のある材料データを取得し、材料データベースとそれを活用した寿命予測技術により、その材料の信頼性を FAA 等の認定機関に認証させる必要がある。本プロジェクトでフレームワークを構築する材料特性データベースにより、将来の認証取得を目指してデータを蓄積し、部材としての信頼性を高めることで、日本主導のエンジン製造の技術基盤を確立する。

チーム名：C3 Ti合金の粉末・3D積層造形プロセスの開発

チームリーダー：高橋 聡（(株)IHI）、野村 直之（東北大学）

参画機関：(株)IHI、東北大学、(株)大阪チタニウムテクノロジーズ、日本積層造形(株)

## 1. 背景、目的など

### (1) 背景・目的

世界的に Additive Manufacturing 技術(以降、AM)の製品への適用が急速に進んでいる。その中でも今後市場の成長が著しい航空機関係分野では他の分野に先駆け、適用製品が増えている。特に Ti 合金に関しては鋳造から AM への転換を見込んでおり、これがなされるとサプライチェーンのあり方は大きく変わり、また急激に巨大な市場へと成長することが考えられる。この背景には寡占化と需要拡大が進むことにより、素材供給不安が懸念される Ti 合金製大型鋳物の市場に対して、新たに AM プロセスを実用化させることで、部材製造プロセスの選択肢を広げる意図がある。そのため、海外のジェットエンジンメーカーでは粉末サプライヤや造形メーカーとの垂直統合など、粉末製造から下工程に至るまで投資・生産規模拡大が始まっている。

一方で、現時点の日本国内の AM 市場は未だ生産規模が小さく、AM 技術の両断工程への適用については欧米に対して後れを取っていることは否めず、世界市場への参入はできていない。今後市場へ参入するにあたっては、国外の企業連合に対して、プロセスコストの低減・部材開発期間の短縮や、AM の特性を生かした設計技術の適用による部材の付加価値向上を行い、高い競争力を持つこと、また、それを実現する MI モジュールの開発が必要となる。そのため本研究では上記のうち、プロセスコスト低減・部材開発期間の短縮に着目し、SIP の他のチームと協働し、それに資する MI モジュールを開発するとともに、粉末製造、粉末特性評価、積層造形、特性評価と AM に関係する研究開発を国内で一貫して行い、国際的に競争力を持ったサプライチェーンの構築を最終目的とする。なお本研究で対象とする部材形状は比較的低温部（～200℃程度）で使用される静止部品への適用を念頭に、低圧圧縮機ノズルのような一体かつ複雑形状を持つ部材を対象とする。求められる特性としては一般的に各所で使用されている AMS 材と同等なものとする。

本研究で使用する粉末は以下とする。

- 大阪チタニウムテクノロジーズ製開発プロセス Ti 合金粉末（以下、経済型粉末）
- 大阪チタニウムテクノロジーズ製現行プロセス Ti 合金粉末（以下、現行粉末）
- 造形装置純正 Ti 合金粉末 CL41（以下、ベンチマーク粉末）

### (2) 目標

最終目標（2022 年度末時点）

- 経済型粉末製造プロセスを実証する。原材料費の 20%のコスト削減を目標とする。（TRL2）

- 経済型粉末における材料レシピおよび造形レシピを開発し、実部材の製造を行う。(TRL3)
- 経済型粉末の設計指針を構築する。(TRL3)
- 現行粉末、ベンチマーク粉末および経済型粉末によって造形された部材の特性を評価し、それをもとにデータベースを構築する。(TRL2)

## 2. 実施概要

### (1) 実施体制

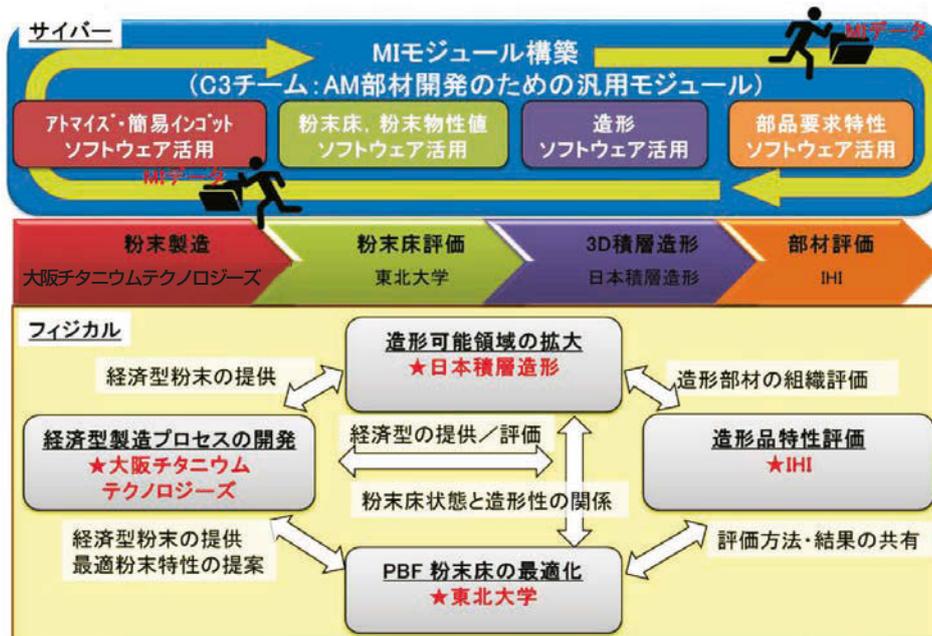


図 C3-(1) サイバー・フィジカル、産学官連携の関係図

### (2) 実施項目

- 1) 経済型粉末製造プロセスの構築 (大阪チタニウムテクノロジーズ)
  - 小型テスト用アトマイズ装置を流用し、ラボレベルで簡易インゴットおよび経済型粉末を製造する。
  - 簡易インゴット溶解装置を導入・設置する。
- 2) 積層造形に用いる粉末の評価法・指針構築 (東北大学)
  - 粉体の流動挙動および粉末床の表面状態、気孔率が測定できる粉末床質評価装置を開発し、リコーティング時の粉末の流動挙動の実測を行う。
  - これらの実験値とリコーティングシミュレーションの結果を比較することにより、シミュレーションの妥当性と問題点について検討するとともに、シミュレーションの精度をさらに向上させるための解析手法の改善を行う。
  - 上記の実験およびシミュレーションから得られる (粉末特性) - (リコーティング) - (粉末床状態) のデータベースを、経済型粉末の特性改善のためにフィードバックする。
- 3) Ti 合金造形プロセスの構築 (日本積層造形)

- 現行粉末およびベンチマーク粉末について PDCA サイクルを回し、粉末品位／粉末床状態／造形条件と造形体特性の関係を分析・整理する。

#### 4) 造形部材の特性評価／適用検証 (IHI)

- 現行粉末、経済型粉末およびベンチマーク粉末における造形部材の特性データ取得とその評価・整理を行う。

- これらの結果を用いて粉末品位が部材特性に与える影響を定量的に評価する。

### (3) 主な成果

#### 1) 経済型粉末製造プロセスの構築 (大阪チタニウムテクノロジーズ)

- ラボレベルで経済型粉末の特性ばらつきに及ぼす製造パラメータの影響を明らかにした。さらに得られた結果から経済型粉末を製造し、各機関に提供した。

- 簡易インゴットから経済型粉末作製までのプロセス条件の影響を定量的に明らかにし、得られた結果を元に経済型粉末量産用設備を 2020 年度内に立上げた (図 C3-(2))。



図 C3-(2) 簡易インゴット装置

#### 2) 積層造形に用いる粉末の評価法・指針構築 (東北大学)

- 粉体の流動挙動および粉末床の表面状態、気孔率が測定できる粉末床質評価装置を開発し (図 C3-(3))、リコーティング時の粉末の流動挙動の実測を行った。

- 粉末床実験とリコーティングシミュレーションの結果を比較することにより、シミュレーションの妥当性と問題点について検討した。検討結果より、シミュレーションの精度をさらに向上させるための解析手法の改善を行った。

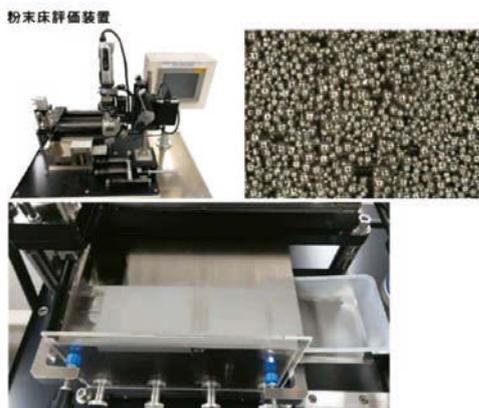


図 C3-(3) 粉末床質評価装置

### 3) Ti 合金造形プロセスの構築（日本積層造形）

- Concept Laser M2(第 1 世代)における造形プロセス条件の見極めのための試験片造形および模擬ノズル形状品の造形試作を各粉末（現行粉末、ベンチマーク粉末）で実施した。

### 4) 造形部材の特性評価／適用検証（IHI）

- Concept Laser M2（第 1 世代：日本積層造形、第 4 世代：三菱商事テクノス）における造形条件と造形試験片の品位（金属組織中の空隙率、クラック）の相関を整理し、各粉末（経済型粉末、現行粉末、ベンチマーク粉末）でのプロセスウィンドウの絞り込みを行った。

- Concept Laser M2（第 1 世代）において、いずれの粉末においてもプロセスウィンドウは同傾向を示しており、装置の最適条件であれば、粉末品位に影響されず高密度の部材が造形できることが分かった。

- Concept Laser M2（第 4 世代）での造形部材の組織観察と特性評価（引張、伸び、絞り）の結果をもとに、各粉末（ベンチマーク粉末、現行粉末）での造形プロセスウィンドウの絞り込みを行った。

- Concept Laser M2（第 4 世代）において、いずれの粉末においてもプロセスウィンドウは第 1 世代より広域で、かつ同傾向を示した。第 1 世代同様に、今回確立したプロセスウィンドウは経済型粉末でも展開可能であると考えられる。

- サプライチェーン全体での MI モジュール構築に向け、前後工程での Input / Output の精査を行い、MI ソフトウェアで活用するパラメータを設定し、繋ぎ込みの指針を作成した。



図 C3-(4) Concept Laser M2（第 4 世代）を用いて造形した模擬ノズル

### 5) チーム全体総括

- フィジカル面では、粉末床実験とリコーティングシミュレーションにより、粉体の流動挙動および粉末床の表面状態との相関を明らかにした東北大学を核とし、目標とした造形部材の特性を得られるよう、「経済型粉末製造技術」と「粉末特性を生かす造形技術」について、特性に及ぼすそれぞれの影響を体系づけた。これにより、経済型粉末の製造プロセスから造形プロセス開発および部材評価によるデータ取得まで、一貫して影響を評価し、遅滞なく開発を遂行するとともに、経済型粉末ならびに経済型粉末を利用した造形体特性データベース化に着手した。

●サイバー面では、粉末製造や造形などの工程毎に MI ソフトウェアを作成し、最終的に図 C3-(5)に示すサプライチェーン全体を繋ぐ MI モジュール構築を目指した。その基礎段階として各工程の INPUT/OUTPUT データを取得し、一部のソフトウェアを試作した。

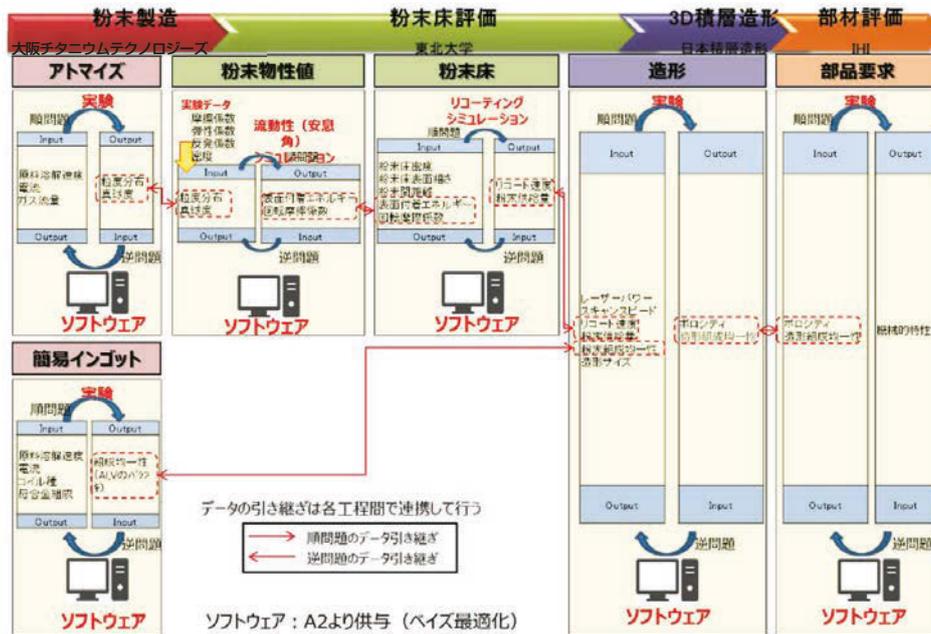


図 C3-(5) サプライチェーン全体を繋ぐ MI モジュール像

### 3. 今後の計画、社会実装に向けて

当初予定として、

- 2023FY から 2026FY にかけて部品設計用のデータベース取得、関連プロセス開発、各種規定の整備を実施。併行して、医療分野等の航空機分野以外での適用を進めていく。
  - 2026FY から 2027FY にかけて模擬部材の設計、製造を実施し、品位評価およびリグ試験による技術実証を実施。
  - 2028FY 以降、実機環境を模擬した強度試験およびプログラム提案を各 OEM に行う。
- であったが、中間評価において、SIP における C3「Ti 合金の粉末・3D 積層造形プロセスの開発」は終了となった。

チーム名：C4 高性能 TiAl 基合金動翼の粉末造形プロセス基盤技術構築と開発

チームリーダー：竹山 雅夫（東京工業大学）、福島 明（三菱重工航空エンジン(株)）

参画機関：東京工業大学、三菱重工航空エンジン(株)、(株)神戸製鋼所、  
大阪冶金興業(株)、大阪大学

## 1. 背景、目的など

### (1) 背景・目的

新たに開発される全ての航空機エンジンには環境負荷低減の観点から低燃費化が求められ、軽量高比強度な TiAl 基合金の低圧タービン（LPT）動翼（鋳造、鍛造）への実用化がなされた。現在は、設計の自由度が高く、ニアネット成形が可能な粉末プロセスによる TiAl 製 LPT 動翼の実用化が求められている。

本研究開発は、MIM および AM という異なる粉末製造プロセスに適用可能な TiAl 合金を実用化する上での諸課題を解決し、従来の実験中心ではなく、MI 技術を活用して、既存の実用合金を凌駕する高強度・高靱性 TiAl 基 LPT 動翼の実用化に資する設計製造基盤技術の構築を行う。特に重要なのは、成形プロセスにおいて酸素濃度が大きく異なる MIM と AM 両方において、要求特性を満足する合金設計手法の確立である。その鍵となるのは酸素を含む多元系状態図データベース（DB）とそれを利用した組織制御法からなる「組織設計モジュール」、および複数の組織構成要素からなる合金の緒特性をシミュレーションによって予測する「特性予測モジュール」の構築である。次に重要となるのは、200mm 以上ある LPT を高精度で製造するための MIM/AM プロセスパラメータの最適化を導く「プロセス設計モジュール」の構築である。特に、MIM では、これまで前例のないこの大型部材に適用可能な射出・焼結のシミュレーション技術、一方、AM では、プロセスパラメータをニューラルネットワークにより決定する技術の構築を目指す。これらの基盤技術の構築は、世界最高の設計原理とプロセス技術を有する産学が連携することによって初めて成されるものであり、本分野において世界に日本の技術力を示すものとなる。

### (2) 目標

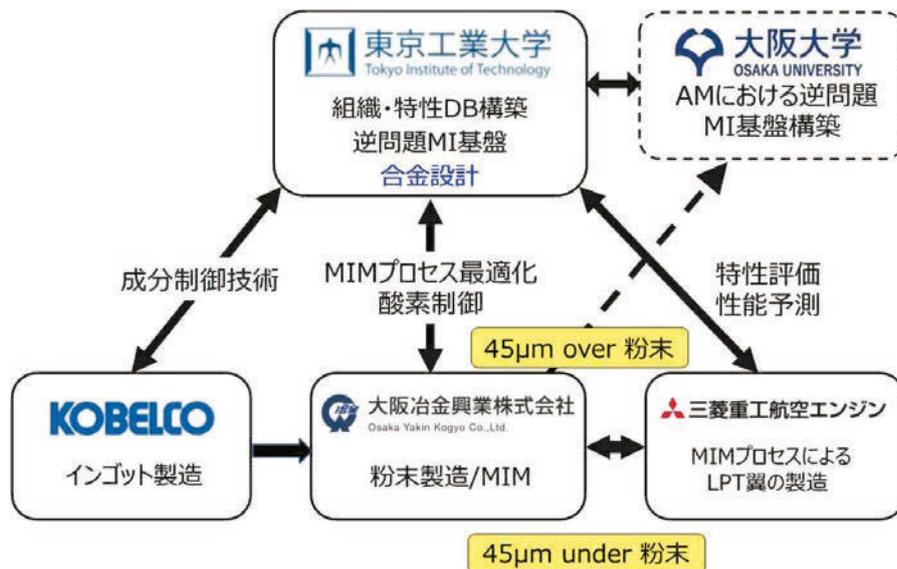
世界に類の無い強度と靱性を有する新規 TiAl 基合金を粉末プロセスにて製造することを目標に、その逆問題 MI システムの構築とそれに基づいたモデル合金提案、動翼の試作、検証を行う。具体的には、東工大が、要求特性を満たし、且つ、MIM および AM 両プロセスに適用可能な合金設計・組織設計のための逆問題 MI システムの構築を、神戸製鋼所が、コストリーダーシップ戦略の元、東工大が設計した合金の Al 成分制御から粉末リサイクルまでの一貫した溶解技術の確立を行う。そのインゴットを大阪冶金興業（OYK）が粉末化し、MIM については三菱重工航空エンジン（MHIAEL）がニアネット成形を可能にする翼型輪郭度を満たす大型翼製造プロセスの MI システムの構築を、また、OYK が動翼の試作、MHIAEL がその強度試験を行う（TRL 4～5）。

一方、AM については、阪大が OYK の製造した粉末を用いて、MI システムを活用した 3D 積層

造形プロセス最適化とタービン翼の試作を実施する（TRL 4）。

## 2. 実施概要

### (1) 実施体制



### (2) 実施項目

- 1) 逆問題 MI システムの構築（東工大）
  - 組織設計/特性予測モジュールの構築
  - MI システムを活用した合金設計
- 2) 粉末射出成形を用いた最適化プロセスの構築と実証（三菱重工航空エンジン）
  - 射出成形/焼結シミュレーション技術の構築
  - 大型翼の設計/試作（大阪冶金興業と共同実施）
- 3) 高品位/低コストの粉末用 TiAl 基合金鋳塊製造技術の開発（神戸製鋼所）
  - 目標 Al 濃度以内に制御可能な成分分析手法の確立
  - 量産安定性向上のための溶解鋳造プロセス改善指針の抽出
  - 不純物濃度が増加した TiAl 基合金粉末のリサイクル技術
- 4) 粉末製造および射出成形／焼結プロセスの構築（大阪冶金興業）
  - 適正な焼結条件の確立
  - 評価用試験片の作製および検証用実験データ取得
- 5) AM プロセスにおける逆問題 MI システム技術の構築（大阪大学）
  - 健全造形のための AM プロセスウィンドウ探索
  - AM 造形体の力学特性・微細組織評価ならびに組織形成・変形機構解明とその DB 化

### (3) 主な成果

プロジェクト全体としては、産学連携により既存の合金の特性を凌駕するモデル合金の提案、およびその MIM および AM プロセスによる大型動翼の試作に成功した。各機関の成果を以下に記す。

#### 1) 逆問題 MI システムの構築 (東工大)

- 組織設計モジュールについては、本合金の組織構成相となる  $\beta$ 、 $\alpha_2$ 、 $\gamma$  三相共存領域の酸素添加に伴う変化を実験および計算により明らかにし、状態図 DB の構築と組織設計に及ぼす酸素の影響を明らかにした (図 C4-(1)左)。また、その DB に基づいて、その酸素濃度依存性を低減する多元合金化の方向性を見出し、MIM および AM に適用可能なモデル合金を提案した。
- 特性予測モジュールについては、モデル合金を用いて高温ナノインデンテーションを含む各種試験を行い、要求特性を満たす組織構成要素を明確化 (図 C4-(1)右) するとともに、組織のデジタル化による DB 化を行い、組織の絞り込みが可能なシステムを構築した。

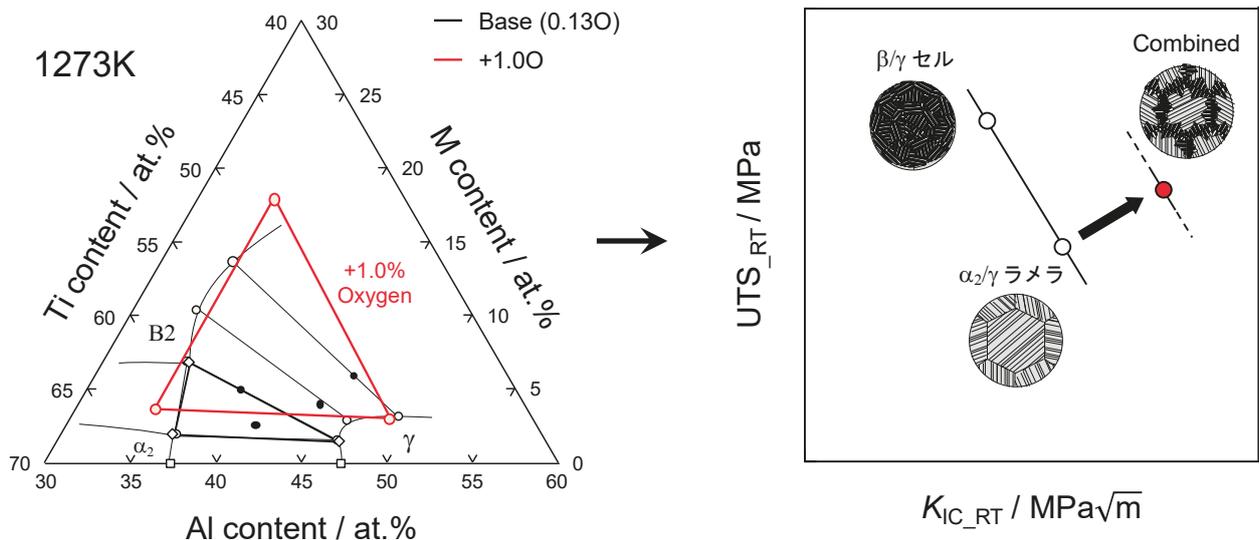


図 C4-(1) 酸素を含む状態図 DB の構築(左)および諸特性に及ぼす組織構成要素の影響の明確化(右)

#### 2) 粉末射出成形を用いた最適化プロセスの構築と実証 (MHIAEL)

- 東工大が提案したモデル合金の特性発現指針に基づいた組織制御素材が、中間目標となる強度と靱性を満たすことを確認した (図 C4-(2)左)。
- OYK と連携し MIM による大型翼の試作に取り組み、外観および内部欠陥のない翼長 200 mm の TiAl 大型動翼成形体の試作に成功した (図 C4-(2)右)。
- 射出成形シミュレーションでは、粉末濃度分布予測、脱脂過程における内部欠陥の発生予測を行った。

- 焼結シミュレーションでは、3次元のセッター型に対応する焼結シミュレーション技術を開発し、計算精度を向上させた。

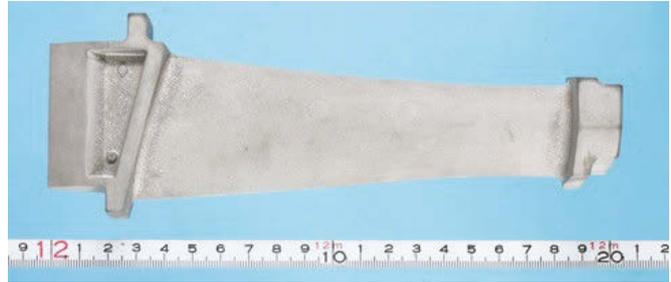
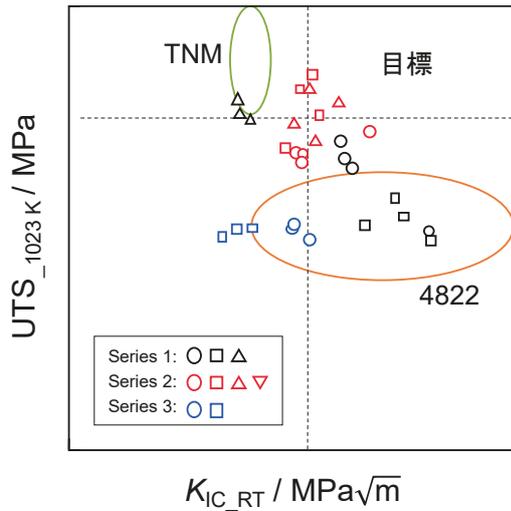


図 C4-(2) 独自に開発したモデル合金のベンチマーキング(左)および MIM 製 TiAl 大型動翼成形体(右)

### 3) 高品位/低コストの粉末用 TiAl 基合金鑄塊製造技術の開発 (神戸製鋼所)

- 迅速分析装置の立上げ及び分析技術構築に取組み、溶解中に目標アルミ濃度  $\pm 0.2\text{mass}\%$  以内へと制御できる分析手順を明確化した (図 C4-(3))。
- 不純物濃度が増加した TiAl 基合金粉末のリサイクルに向けた課題設定として、大阪冶金興業及び大阪大学と連携し AM、MIM で発生する粉末をリサイクルするために必要な目標酸素濃度を明確化した。

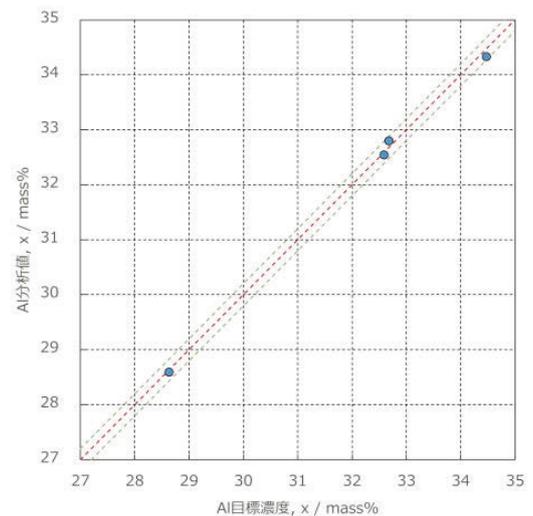


図 C4-(3) 迅速分析 (XRF) による目標アルミ濃度  $\pm 0.2\text{mass}\%$  以内への制御

### 4) 粉末製造および射出成形 / 焼結プロセスの構築 (OYK)

- 神鋼が作製した鑄塊についてガスアトマイズにより粉末を作製し、 $45\mu\text{m}$  以下を MIM プロセスに、 $45\mu\text{m}$  以上  $250\mu\text{m}$  以下を AM 用粉末として提供した。
- 各合金の焼結試験を実施し、焼結体の相対密度目標値 95% を満たす条件を確立した。

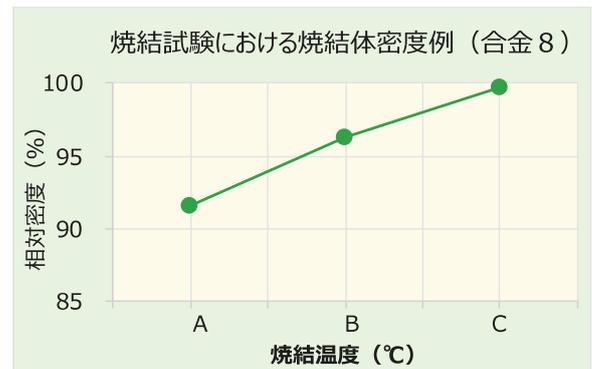


図 C4-(4) 合金に応じた焼結条件の確立

## 5) AMプロセスにおける逆問題 MI システム技術の構築（大阪大学）

- 各種プロセス条件を変化させたスクリーニング造形を実施し、造形体の寸法精度等を評価することで、健全造形が可能なプロセス条件を決定した（図 C4-(5)）。
- AM 造形体の組織形成機構を解明するとともに、組織と変形挙動との相関関係を明らかにした。
- 原料粉末、プロセス条件、微細組織、力学特性からなる DB を構築し、ニューラルネットワークを駆使した逆問題 MI を試行した。

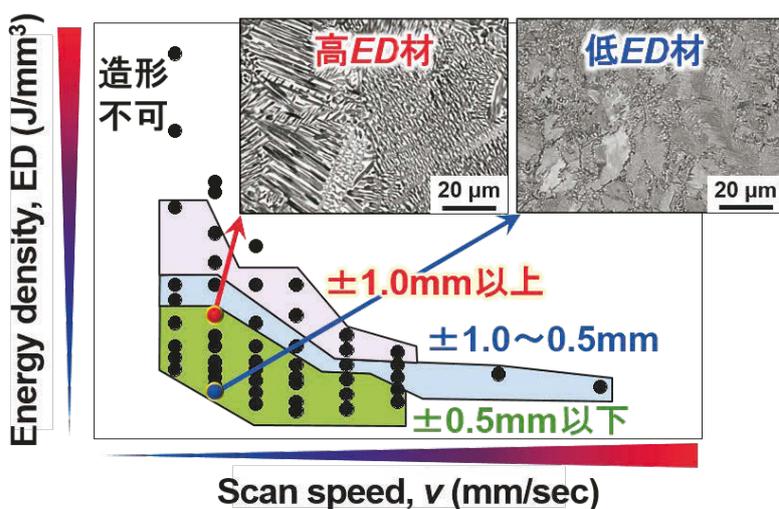


図 C4-(5) 寸法精度のプロセスマップ

### 3. 今後の計画、社会実装に向けて

各種モジュールの DB、シミュレーション技術の高精度化を目指すとともに、実翼成立性確認のための実翼疲労試験を実施する。社会実装に向けては、組織制御に関する知財を確保するとともに、海外 OEM での実機適用（社会実装）を目指して、情報交換を進めている。また、次のステップとして実際のエンジン部品に必要な特性取得を進めるとともに、エンジン試験等を計画する。

チーム名：C5 セラミクス基複合材料の航空機エンジン部材化技術の開発

チームリーダー：香川 豊／七丈 直弘（東京工科大学）、  
関川 貴洋（三菱重工業(株)）

参画機関：東京工科大学、三菱重工航空エンジン(株)、(株) I H I、川崎重工業(株)、  
東京大学、宇宙航空研究開発機構

## 1. 背景、目的など

### (1) 背景・目的

セラミクス基複合材料（CMC: Ceramic Matrix Composites）は軽量・耐熱性に優れている。そのため、航空機用エンジン部材として、近い将来に現行高温構造材料（超合金）に替わって利用されることが期待されている。CMC の中でも連続 SiC 繊維を SiC マトリックスと複合化した複合材料(以後、SiC/SiC と記述する)は特に優れた特性を持つことから、研究開発が世界的に活発化している。航空機用エンジン部材としての CMC の実用化時に最も重要な課題として「高温・長時間使用時の性能と安全性の保証」がある。近年、材料開発ではシミュレーション技術が多く活用されており、CMC の航空機用エンジン部材開発においても活用が期待される。CMC はモリシックセラミクスや金属材料と比較して極めて複雑な複合化組織であり、その変形や破壊現象は極めて多くの影響因子に支配されていることから、現状のシミュレーション技術では不十分である。MI によりサイバー空間上で材料試験が可能となり、その逆問題として部材設計が可能となれば、大幅に国際競争力が強化されると考えられる。そこで、本研究では、MI を CMC の部材開発に利用するための基礎・基盤となるモジュールを開発し、その組み合わせによってサイバー空間上で CMC の使用環境における振る舞いを予測する「バーチャルテスト」を構築し、航空機用エンジン部材としての CMC 開発を牽引する。最終的にはバーチャルテストの最適設計への適用、CMC の検査手法の開発を目指す。

### (2) 目標

研究開発では、CMC 材料・部材開発に役立つことができるシステムの構築を行う。システムには、CMC プロセス工程に関する課題の解決に役立つ、性能保証できるプロセス条件設定のための複合化モジュール、性能を保証する危険欠陥分布を抽出するための組織解析モジュール、長時間使用した後の劣化を予測するための危険性判定モジュール、これら三つのモジュールの開発を推進する。具体的な研究開発項目は以下の4つを対象とする。

#### ① 基盤技術・統合プラットフォーム

CMC 組織の構造可視化および認識技術、CMC の特性取得技術、CMC 用高温試験技術、CMC 用加速試験技術、研究項目②～④の研究開発に供する。

#### ② CMC の要求特性を満足するプロセス条件（複合化モジュール）

反応溶融合浸(RMI: Reactive Melt Infiltration)法による CMC マトリックス製造の基礎シ

ミュレータを作成し、RMI 法による CMC マトリックス製造プロセス中の SiC 繊維劣化予測を実現する。

③ CMC 複合化組織と重要力学特性の関連性評価（組織解析モジュール）

機械学習に基づき、X 線 CT によって取得した CMC 材料の組織データから CMC 材料の組織構造の自動認識を実現する。

④ CMC 部材の性能劣化の予測と危険性判定（危険性判定モジュール）

CMC 材料の高温での力学特性劣化予測モデルを構築し、同条件での材料試験を実施することでその評価を行う。

## 2. 実施概要

### (1) 実施体制

研究開発に従事する機関のうち、大学・公的機関側（東京工科大学、東京大学、宇宙航空研究開発機構）は主にサイバー側（材料試験データの取得およびシミュレーション）を担当し、企業側（三菱重工航空エンジン、IHI、川崎重工業）はフィジカル側（CMC 供試体の作製および結果の評価、部材設計へのフィードバック）を担当する。開発される3種のモジュールである複合化、組織解析、危険性判定は、それぞれの企業における CMC 材料・部材開発への利用を目的としている（図 C5-(1)）。

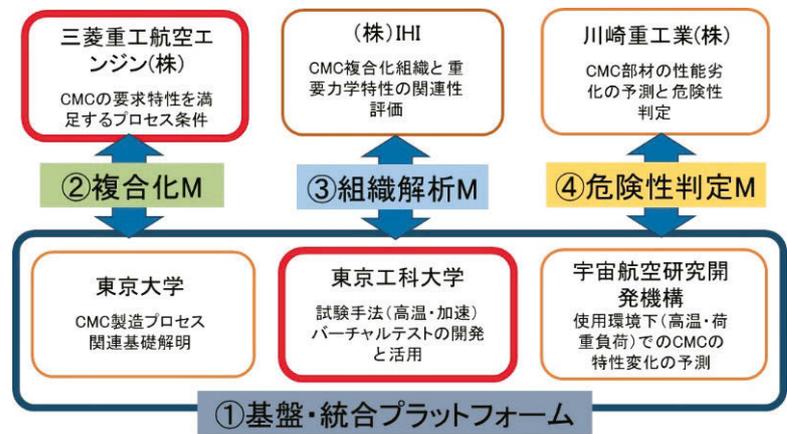


図 C5-(1) 参画機関の役割と相互関係

### (2) 実施項目

- 1) 基盤技術・統合プラットフォーム（東京工科大学）
  - AI 利用した組織識別アルゴリズム開発とバーチャルテストの実現
  - 研究開発項目を支える基礎・基盤技術の整備と活用
- 2) CMC の性能を保証する部材プロセス条件（三菱重工航空エンジン）
  - RMI プロセスを支配する影響因子の解明と特性との関連性評価
- 3) CMC 性能を保証するための危険欠陥分布抽出（IHI）
  - X 線 CT データ構築と力学特性との関連性評価
- 4) CMC 部材の性能劣化の予測と危険性判定（川崎重工業）
  - 高温劣化の評価に必要な CMC 部材供給と試験条件の提供
- 5) CMC 製造プロセスの含浸現象解明（東京大学生産技術研究所）
  - マルチフィジックスモデルに基づく含浸シミュレータの構築とプロセス最適化

6) CMC 製造プロセスにおける反応・界面現象解明 (東京大学工学系研究科)

- 溶融 Si とプリフォーム体との含浸速度、発熱反応・濡れ性の解明

7) CMC 部材の性能劣化の予測と危険性判定 (宇宙航空研究開発機構)

- CMC 部材の実環境模擬高温疲労における劣化予測モデルの構築

(3) 主な成果

1) 複合化モジュール (三菱重工航空エンジン、東京工科大学、東京大学)

繊維劣化予測シミュレーションの重要性から RMI 基礎過程の解明に基づくシミュレータの作製と、平板基本形状での溶融 Si 含浸試験結果に基づくデータ同化に取り組んでいる。マルチフィジックスベースモジュールを用いて複数細孔含浸サブモジュール、反応サブモジュール、細孔分布サブモジュール含浸および繊維劣化サブモジュールを搭載した含浸基礎シミュレータを作製した。各種高温炉を用い、複合化組織がマイクロ含浸に及ぼす影響、シミュレータの再現性確認用含浸速度・温度分布の経時データ、CMC プリフォームの炭素材と溶融 Si の反応・濡れ性を取得した。また、UD 積層プリフォームについて、溶融 Si 含浸の積層方向依存性調査と、プリフォームへの溶融 Si 含浸試験による含浸温度・速度データを取得してシミュレータにフィードバックした。

図 C5-(2)は、試験片レベルで含浸速度と温度分布の検証を行うため、RMI 装置を用いた複合化試験を示す。RMI 基礎シミュレータを用いた Si 含浸速度と温度分布のデータを取得し検証した結果、Si 含浸速度と反応温度との関係はシミュレーション

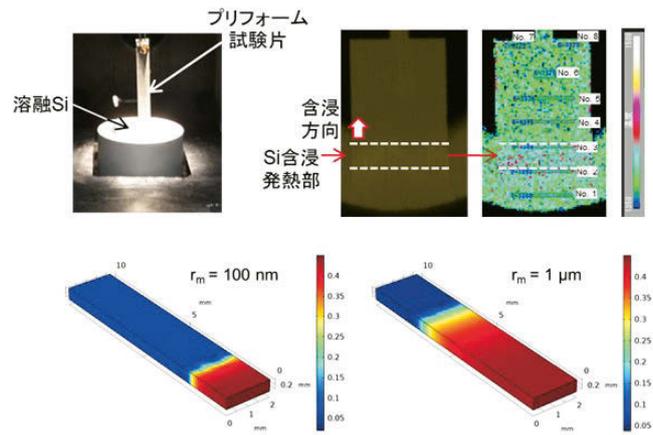
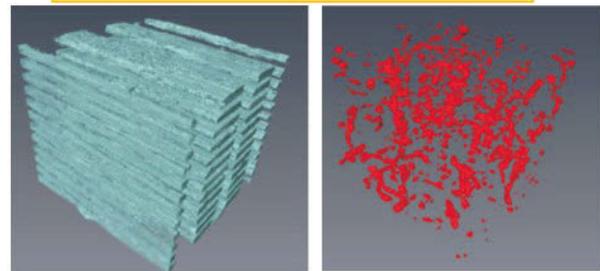


図 C5-(2)試験片レベルでの含浸速度と温度分布の検証。

RMI 複合化試験装置と複合化試験によるデータ抽出の状況、ならびに細孔径の寄与を調査した含浸シミュレーション結果の一例。

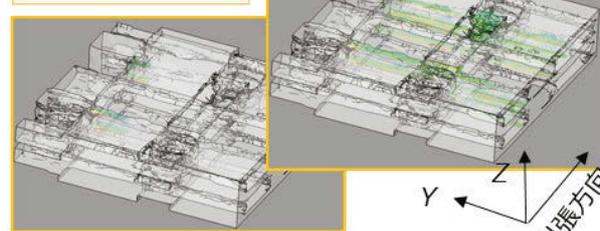
深層学習によるセグメンテーション



繊維束

空隙

X-FEMモデル



マトリックスき裂進展解析

図 C5-(3) X線 CT データを基に深層学習によるセグメンテーションした SiC 繊維束と空隙の抽出例。X線 CT データを基に X-FEM によるマトリックスき裂の発生・進展挙動の解析結果の一例。

結果と一致しておりシミュレーション用データ取得が有効であることが示された。

## 2) 組織解析モジュール (IHI、東京工科大学)

SiC/SiC CMC は従来の X 線検査法では繊維とマトリックスの識別が困難である。ここでは 3 次元 X 線 CT データを基に深層ニューラルネットワークを用いて、広範囲における 3D セグメンテーションの高精度化および安定化を行うためのアルゴリズムを開発し、繊維束、マトリックス、空孔のマイクロ組織識別を行える方法を構築した。3 平面を総合的に識別することにより高精度な評価が可能となった。3 次元 X 線 CT データに基づき X-FEM (eXtended Finite Element Method) による有限要素モデルの最適化技術を CMC カ学モデルに展開してバーチャルテストの実現性を可能としている (図 C5-(3))。

## 3) 危険性判定モジュール (川崎重工業、宇宙航空研究開発機構、東京工科大学)

実用的 CMC 部材として燃焼器ライナーを対象とし、CMC の高温疲労試験を実施し、劣化予測モデルに必要なデータの取得を行うとともに、GENOA/MCQ の上でバーチャル高温疲労試験を実施し、疲労損傷発生・進展挙動を予測解析しモデル化を行っている。同形状の試験片を用いて、高温疲労試験 (1000℃、大気中) を実施し、検証データを取得している。高温疲労と長時間高温暴露による力学特性の変化を調査し、力学損傷と化学損傷による劣化予測法の検討を行った (図 C5-(4))。

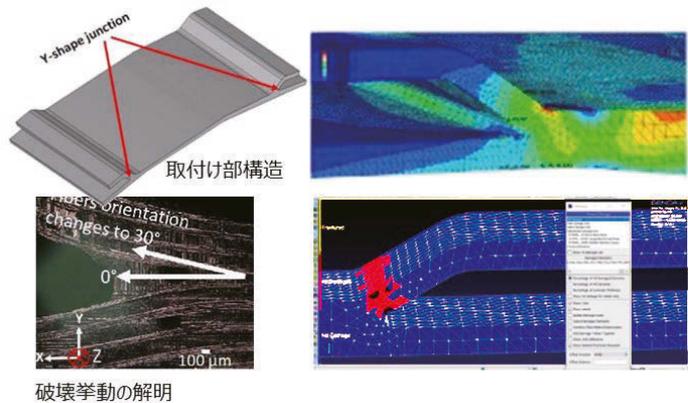


図 C5-(4) 燃焼器ライナー取り付け部の模式図と使用環境における応力分布の解析結果。クラック進展挙動の観察と GENOA による損傷蓄積過程。

## 3. 今後の計画、社会実装に向けて

本研究開発で対象としている CMC (SiC/SiC) は、現段階で航空機エンジン用材料としての応用が急務であると考えられている。研究体制には国内を代表する重工三社が参画しており、得られた成果は各企業における実用化のための材料・部材開発へ利用することが可能であり、CMC の高信頼性材料としての利用に貢献する。

本研究開発に参画する重工三社は、各々異なる使用環境での CMC 開発に取り組んでおり、戦略的重要性が極めて高い情報を含んでいる。それぞれの企業が大学・国研と共に研究開発する各種基本モジュールは公開し企業間の相互利用が可能な仕組みを構築する。更に、相互利用を可能にするための基礎・基盤となるツールも東京工科大学 CMC センターに構築しつつあり、これにより、部材実装へ加速達成するためのツールとして活用ができるため研究開発の時間・コスト低減に大きく寄与する。プロジェクト終了後にも各企業は研究成果を継続的に利用でき開発を加速できる。



—禁無断転載—

**戦略的イノベーション創造プログラム (SIP)  
統合型材料開発システムによるマテリアル革命  
研究開発中間成果報告集**

発 行 2021年10月

編集・発行 国立研究開発法人 科学技術振興機構

イノベーション拠点推進部 SIPグループ

〒102-0076 東京都千代田区五番町7 K's 五番町

電話 : 03-6261-0013

