

1. はじめに

本稿では,SIP-MI プロジェクト⁽¹⁾において構築された, 鉄鋼材料における溶接部の組織形成シミュレーションシステ ムについて紹介させていただきたい.特に今回,マテリアル ズインテグレーション(以後,MIと記す)の視点に立ってシ ミュレーションのシステム設計を行ったので,本稿ではこの 部分に焦点をあてて説明する.具体的な計算システムや計算 理論の詳細については,当該システムのマニュアルや関連論 文等(後述)を参照していただきたい.

さて本計算では,鉄鋼材料における溶接部の組織形成を対 象に,フェーズフィールド(PF)法⁽²⁾を中心とした一連の組 織形成シミュレーション手法を用いて,組織形態形成を計算 するシステムの構築を行った.鉄鋼材料の内部組織形態形成 のシミュレーションや微視的メカニズム解明に関する研究 は,周知のように各国において盛んに進められており,現在 も新しい知見が絶えることがない⁽³⁾.これは鉄鋼材料の組織 形成が,数ある金属材料の中でも桁外れに複雑かつ多様性を 有しているためである.まず今回のシステム構築の基本コン セプト(MIの考え方)として,必要以上に精緻なメカニズム に立ち入ることはせず,将来に渡って拡大する鉄鋼材料の研 究知見を容易に取り入れることができるような,ある意味, ロバストな集約システムを目指して設計を行った.具体的な 指針は以下のようにまとめられる.

 (I) 近年の計算熱力学⁽⁴⁾の知見を反映できる形式とする.
CALPHAD法⁽⁵⁾および熱力学データベースの発展 はめざましく、この分野と本システムとの連携は必 須であるとした.ただし、単純に PF シミュレーションと CALPHAD 法を連携させると、計算量の急 拡大が生じ、実用上計算不可能となるので、これを 回避する手法⁽⁶⁾をいくつか考案した(この部分の改 良は、現在も進展中である).

- (II) 組織形成については、PF 法を基本計算手法として システムを整備する.ただし、PF 法を対象とした プロジェクトではないため、必要に応じて、PF 法 以外の他の組織シミュレーション手法も考慮した.
- (III) 優れた組織形成シミュレーションシステムを構築す ることが目的ではなく,優れたインテグレーション システムを構築することが MI の目的である.した がって,これまでの溶接現象全体にかかる材料科 学・工学的知見を組織形成シミュレーションシステ ムに集約でき,かつ将来的に成長できるシステム設 計とした.

上記(III)が今回のプロジェクトの特徴であろう.従来の多 くのプロジェクトでは、シミュレーションシステム自身の高 度化が目的となるので、システム性能は、計算によって、ど れだけ現実の現象を精度よく計算できるかによって評価され る.材料組織形成の研究を対象とした場合、この評価軸は通 常困難を極める.平衡状態図ですら、世界中の協力の下、過 去50年をかけて、実験とデータベース化を繰り返し、よう やく最近になって実用化してきたことを考えると、普遍的に 組織形成を自在に計算するシステムが一朝一夕に実現するこ とはありえない.現在、PF 法の分野を中心に、材料、相変 態現象、およびプロセス条件を固定し、かつ限られた仮定の 範囲内で、ようやく計算が可能になる分野が1つ1つ増え

^{*} 名古屋大学 大学院工学研究科 材料デザイン工学専攻;教授(〒464-8603 名古屋市千種区不老町)

^{**} 北海道大学 工学研究院 材料科学部門;教授

^{***} 東京農工大学 大学院工学府 機械システム工学専攻;准教授

^{****} 東京大学 大学院工学系研究科 マテリアル工学専攻;上席研究員

^{*****} 物質・材料研究機構 統合型材料開発・情報基盤部門; リサーチアドバイザー

Development of Microstructure Simulation System in SIP–Materials Integration Projects; Toshiyuki Koyama*, Munekazu Ohno**, Akinori Yamanaka***, Tadashi Kasuya**** and Susumu Tsukamoto*****(*Department of Materials Design Innovation Engineering, Graduate School of Engineering, Nagoya University, Nagoya. **Division of Materials Science and Engineering, Graduate School of Engineering, Hokkaido University, Sapporo. ***Department of Mechanical Systems Engineering, Institute of Engineering, Tokyo University of Agriculture and Technology, Tokyo. ****The Department of Materials Engineering, School of Engineering, the University of Tokyo, Tokyo. ****Research and Services Division of Materials Data and Integrated System (MaDIS), National Institute for Materials Science (NIMS), Tsukuba)

Keywords: materials integration, computational materials science, phase transformation, microstructure, phase–Field method, CALPHAD method, welding, CCT Diagram

²⁰¹⁹年5月20日受理[doi:10.2320/materia.58.494]

始めて来た所である⁽⁷⁾.一方,個々のシミュレーションの高 度化は脇において,工学的な観点からは,使える部分からと にかくシステム化し,足らない部分は,周辺の材料学的知見 で補って,全体的な統合システムを整備することは重要であ ろう.特に近年,機械学習による逆問題の活用⁽⁸⁾が材料工学 分野でも一般化し始めたので,不明なパラメータやプロセス 条件を含んだ統合システムの価値が再認識されている.なぜ ならば逆問題にて,統合システム内の不確かなパラメータや プロセス条件を決めることが可能になってきたからである. 以下では,これらの思想の下,組織シミュレーションがどの ように構築されたかについて説明する.

2. 計算対象の組織形成

本研究で計算対象とした,鉄鋼材料の溶接時に現れる組織 形成⁽⁹⁾⁻⁽¹¹⁾は,(1)凝固によるデンドライト組織形成,(2)オー ステナイト(y)多結晶粒組織形成,(3)フェライト(α)析出組 織形成(アロトリオモルフフェライト,フェライトサイドプ レート),および(4)硬質相組織形成(パーライト変態組織,ベ イナイト変態組織)である.なおマルテンサイトに関して は,最後に残存した y 相がマルテンサイトに移行すると想定 し,マルテンサイト自体の形成過程は本システムの対象外と した.

まず上記の(1)~(4)は独立した計算モジュールとして開発さ れ,個別に計算を行うことができるように設計した.さらに (2)~(4)については,同一の部材を対象に,溶接時における温 度履歴が共通となる条件にて,一連の組織形成を解析できる システム設計とした.なお(1)は,現在,世界的に大きく進展 している"定量的フェーズフィールド法"に基づくデンドラ イト成長解析の基本モデル⁽¹²⁾を,直接適用したモジュール であり,計算手法・解析手順等はすでに広く知られているの で,以下では,特に後者の(2)~(4)の組織形成の計算システム 設計に関して重点的に説明させていただく.

連続冷却変態線図(CCT 線図)と組織形成シミュレーションとの連携

本システムの最大の特徴は、連続冷却変態線図(CCT線 図)と組織形成シミュレーションの連携である.鉄鋼材料の 溶接組織計算のボトルネックは、変態の開始点(温度・時 間・場所)の設定であろう.これらを、理論・シミュレーシ ョンから推定することは、現代の最先端の理論をもってして も困難である.他方、本 SIP-MI プロジェクトにおいて、 機械学習を活用することにより、CCT線図が系統的に入手 できる環境が整えられた⁽¹³⁾.CCT線図の元データについて は、SIP-MIプロジェクト内で測定した実験データに加え、 物質・材料研究機構におけるCCT線図データベー ス⁽¹⁴⁾⁻⁽¹⁶⁾、および日本鉄鋼協会溶接CCT 図集⁽¹⁷⁾が集約さ れ、これらCCT線図自体を機械学習することにより、鋼材 成分を入力すると、各相の変態開始曲線、冷却終了後の各相

体積分率,および硬さが出力される CCT 線図予測モジュー ルが製作された(実際の CCT 線図予測モジュールでは、降 伏点,引張り強度,および応力-ひずみ曲線も同時に出力さ れる). したがって,本システムでは, CCT 線図が既知であ る前提で、各種の組織形成モジュールを連結させていく方法 論を採用した. つまり溶接条件から, 部材の各位置における 温度履歴がわかり、既知である CCT 線図上で、その温度履 歴をたどることによって、各種変態の開始点(温度・時間)が 決まる. あとはこのタイミングにあわせて, (2)~(4)の組織形 成モジュールを並べれば,一連の組織形成を系統的に解析で きることになる.このように設計することによって、従来、 計算において設定が極めて困難であった、各種の変態の開 始・終了をどこで切り替えればよいかの問題が解消された. CCT 線図と機械学習が結びつき, CCT 線図を前提とした組 織形成シミュレーションが可能となった点は、今後、多方面 に大きな影響を及ぼすと期待される.

4. 溶接における組織形成シミュレーション

以下,一連の計算手順および計算例について説明する.な お温度場は3次元の計算で,組織形成は2次元の計算であ る(MI 統合システムにおいて, y 多結晶組織形成に関しては, 3次元計算のモジュールも整備されている点を記してお く).また細かい設定に関しては,MI 統合システムにおい て,各種のマニュアルをモジュール別に作成してあるので, そちらを参照されたい.

(1) y 多結晶粒組織形成シミュレーション

三次元の温度場の設定については, Rosenthal の式⁽⁹⁾⁻⁽¹¹⁾ を用いた.溶接条件として,部材の各種定数(融点,Ac3温 度,熱伝導率,熱拡散係数,初期温度,熱源の移動速度,入 熱量など)を入力すると、部材全体の各位置における温度履 歴がわかる.この温度履歴にあわせて、まずy多結晶組織形 成の計算を行った例を図1に示す⁽¹⁸⁾.図の左上頂点が点熱 源の位置であり,溶融池が存在した領域において γ相は柱状 晶となり、溶接の熱影響部(HAZ部)では、局所的な温度場 に依存して,溶融池の縁に近いほど,γ結晶粒サイズが大き くなっていることがわかる.この組織が計算された後,本シ ステムのユーザーは、その後の冷却過程において析出・変態 を計算したい場所を選択する(フェライト析出,パーライト 変態、およびベイナイト変態については、解像度および計算 速度の制約から、上記領域の一部分を切り出して計算を行う ため).たとえば、図1のX1位置の四角領域を選択したと しよう.図の上面が部材表層になるので、この位置は、表層 から2mmの位置である(以後,この領域を"切り出し領域" と記す). このように切り出し領域を固定すると、Rosenthal の式から、その位置における温度は時間の関数として入手で き,その情報を CCT 線図上に記入すると,この切り出し領 域において、どの温度・時間で、どの析出や相変態が開始・ 終了するかがわかる(切り出し領域の温度も、当然ながら既



図1 y多結晶組織形成シミュレーション.溶融池部分 では凝固による柱状晶形成も計算されている.



図2 CCT 線図上での Rosenthal の式に従う温度履歴 の計算結果.

知である). 図2は,実験的に決定されたFe-0.15C-1.5Mn 鋼のCCT線図上に,切り出し領域の温度履歴(図中の曲線 で,Rosenthalの式の計算結果である)を記入した例であ り,この図から,全ての析出・変態の開始温度(時間)および 終了温度(時間)の情報がわかる.

(2) α相の析出シミュレーション

切り出し領域のγ多結晶組織形態が,そのままα相析出 計算の境界条件となる.切り出し領域の温度変化は, Rosenthalの式から計算され,α相析出の開始温度(時間)と 終了温度(時間)は,CCT線図から得られる.図3にγ多結 晶組織からα相の析出を計算した例を示す.(a)が図1から 切り出された初期組織例で,(b)がα相析出の計算結果であ る⁽¹⁹⁾.α相析出の初期では,温度が高く,α相の析出形態 は,粒界アロトリオモルフの形態をとる(図(b)の青線ま で).その後の温度低下に伴いサイドプレート状の組織形態 へと遷移する(アロトリオモルフの計算にはPF法を,サイ ドプレート形成には,セルラーオートマトン法⁽²⁰⁾を活用し ている).この遷移する温度(時間)の切り替えも,図2の CCT線図の情報を活用する点に注意されたい.従来,この



図3 α相析出のシミュレーション.アロトリオモルフ フェライトおよびフェライトサイドプレートの析 出形態が計算されている.

部分の遷移に関して,研究者によって種々のモデル・仮定が 存在し,汎用的な計算システム構築の大きな障害となってい た.個々の相変態のメカニズムの本質を究めることは,もち ろん重要な学術課題であるが,本アプローチのように, CCT線図やシミュレーションモデルなどの種々の知見を縦 横に組み合わせ,鉄鋼材料分野の知見をインテグレートし て,現象を大枠から把握する方法論は,鉄鋼材料に代表され る複雑・多様な材料開発において実用的な優位性を有すると 考える次第である.

(3) 硬質相形成のシミュレーション

図4と図5は、それぞれパーライト変態とベイナイト変態 の計算例である.(a)の初期組織は4(2)にて説明したα相析 出組織で、(b)はα相析出で残存したγ相からのパーライト およびベイナイト変態を計算した結果である(赤系の色部分 が、パーライトおよびベイナイトに対応する).図4は冷却 速度が遅い場合で、すでにα相の成長が顕著であり、かつ 特に炭素が濃化したγ相領域((a)の黒い部分)においてパー ライト変態が生じていることがわかる.また図5は冷却速 度が速い場合で、α析出は短時間で終了し、残存したγ相領 域全体がベイナイト変態した結果となっている.

パーライトおよびベイナイトは、フェライト相およびセメ ンタイト相から構成される組織であるが、本計算では、パー ライト(もしくはベイナイト)を、一つの単一相のように仮定 して計算を行った(マルチフェーズフィールド法⁽²⁾を基本計 算手法として採用).パーライト変態およびベイナイト変態 自体を対象とした PF シミュレーションは、現在も新モデ ル⁽²¹⁾⁽²²⁾が提案され続けているため、あえて個別の変態機構 の詳細に立ち入らずに、パーライトコロニーやベイナイトバ リアントの単一ドメイン形成のダイナミクスに焦点を絞った モデル化とした.ただし4(2)の α析出シミュレーションにお いて、組織内における溶質元素の濃度分布情報が得られるの で、パーライト変態とベイナイト変態の計算では、これに起 因する局所的な化学的駆動力の影響を考慮できるようにモデ ル化している.一見、簡易モデルではあるが、個別の詳細モ



図4 パーライト変態シミュレーション. α析出で炭素 が濃化した γ 相領域において,パーライト変態が 生じている.



図5 ベイナイト変態シミュレーション. α 析出で残存 した y 相領域全体が, ベイナイト変態する結果が 得られている.

デルの発展情報を、変態の駆動力やドメイン移動の緩和係数 項に取り込むことができる仕様を採用したので、今後の当該 分野の進展に継続的に対応することができるモデルとなって いる点を強調しておきたい.

5. まとめ

本研究では、MIの考え方を意識したシステム設計を行った.組織形成の研究や優れたシミュレーションの追求だけでなく、実用的観点、学術的観点、各種の材料学的知見、および各種のノウハウを、材料工学的センスでインテグレートし、今後の発展の"伸び代"も見据えながら、成長しつづけることのできるシステムの構築を目指した.特に本稿で示した方法論:CCT線図とPFシミュレーションの連携や、PF法とセルラーオートマトンの連携等は、その試みの一つである.なお、本計算のアウトプットは組織形態情報(濃度場、結晶方位場、PFなど)であり、これらは、画像としてもデータ化されるので、各種の画像処理技術を軸足とした機械学習⁽²³⁾に(すなわち、本プロジェクトにおける"特性空間システム"に)、そのまま受け渡すことができる点を記しておく.

本研究は、内閣府総合科学技術・イノベーション会議の戦

略的イノベーション創造プログラム(SIP)「革新的構造材料」 (管理法人:JST)によって実施されました.ここに感謝申し 上げます.

文 献

- (1) http://www.jst.go.jp/sip/k03/sm4i/project/project-d1. html, (SIP-MI プロジェクト HP, 2019年5月現在).
- (2)小山敏幸,高木知弘:フェーズフィールド法入門,丸善, (2013).
- (3) 小山敏幸:ふぇらむ, **19**(2014), 635-639.
- (4)阿部太一:材料設計計算工学計算熱力学編,内田老鶴圃, (2011).
- (5)阿部太一:カルファド法による状態図計算一TDBファイル作成で学ぶ材,内田老鶴圃,(2015).
- (6)野本祐春,若目田寛,瀬川正仁,山中晃徳,小山敏幸,高木 知弘:日本機械学会第31回計算力学講演会論文集,(2018), 066.
- (7) X. Dong, H. Xing, K. Weng and H. Zhao: J. Iron Steel Res. Int., **24**(2017), 865–878.
- (8) 小山敏幸:ふぇらむ, **23**(2018), 680-686.
- (9)松田福久:溶接冶金学,日刊工業,(1972).
- (10) 百合岡信孝,大北 茂:鉄鋼材料の溶接,産報出版, (1999).
- (11)溶接学会,日本溶接協会編,溶接·接合技術総論,産報出版,(2015).
- (12) M. Ohno, T. Takaki and Y. Shibuta: Phys. Rev. E, 96 (2017), 033311.
- (13) M. Watanabe, T. Kadohira, S. Minamoto, S. Tsukamoto, T. Kasuya, M. Okada and J. Inoue: "Prediction of Continuous Cooling Transformation Curves for Steels from Database", 4th World Congress on Integrated Computational Materials Engineering, (2017).
- (14) CCT 線図データベース: Mat Navi(NIMS 物質・材料データ ベース HP), https://mits.nims.go.jp/.
- (15) T. Kasugai and M. Fujita (Eds.), Atlas of CCT Diagrams for Welding. (I), NRIM-special report, No.99–02, (1999).
- (16) T. Ishikawa, N. Yurioka, M. Yamazaki and M. Fujita (Eds.), Atlas of CCT Diagrams for Welding.(II), NIMS-MITS-special report, (2008).
- (17)日本鉄鋼協会(編),溶接構造用鋼の溶接用 CCT 図集,日本鉄 鋼協会,(1997).
- (18) M. Ohno, Y. Shibuta and T. Takaki: Mater. Trans., 60 (2019),170–179.
- (19) T. Kohtake, A. Yamanaka and Y. Suwa: Metal. Mater. Trans. A, **49** (2018), 5023–5034.
- (20) 棗千修:鉄と鋼, 103(2017), 730-737.
- (21) 毛利優斗,塚田祐貴,小山敏幸:鉄と鋼,105(2019), 305-313.
- (22) M. Toloui and M. Militzer: Acta Mater., 144(2018), 786–800.
- (23) 足立吉隆,松下康弘,上村逸郎,井上純哉:システム制御情 報学会誌,61(2017),188-193.

★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★ 小山敏幸

- 1990年4月 名古屋工業大学工学研究科物質工学専攻博士後期課程退学,同 月に名古屋工業大学助手
- 2002年4月 (独)物質・材料研究機構 計算材料科学研究センター 主任研究 員
- 2011年4月 名古屋工業大学 大学院工学研究科 教授
- 2015年4月 現職

専門分野:相変態,材料設計計算工学,フェーズフィールド法

◎金属材料分野を中心に,相変態・組織形成の研究に従事.

フェーズフィールド法を基軸とした材料設計計算工学分野を中心に活動.

大野宗

小山敏幸

