

SIP-MI プロジェクトにおける
組織予測システムの開発小山 敏 幸* 大野 宗 一** 山中 晃 徳***
糟 谷 正**** 塚 本 進*****

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ない。現在、PF 法の方野を中心に、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 名古屋市中種区不老町)

** 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(γ)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 γ 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。

3. 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、 γ 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) γ 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、 A_{c3} 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 γ 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、熔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、熔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 X_1 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 2 mm 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

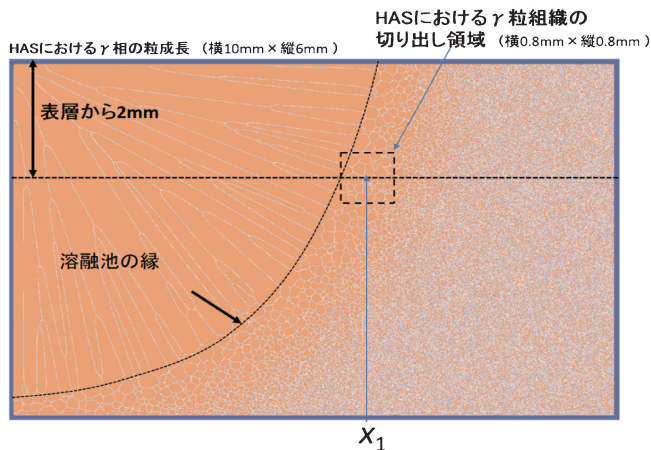


図1 γ 多結晶組織形成シミュレーション．溶融池部分では凝固による柱状晶形成も計算されている．

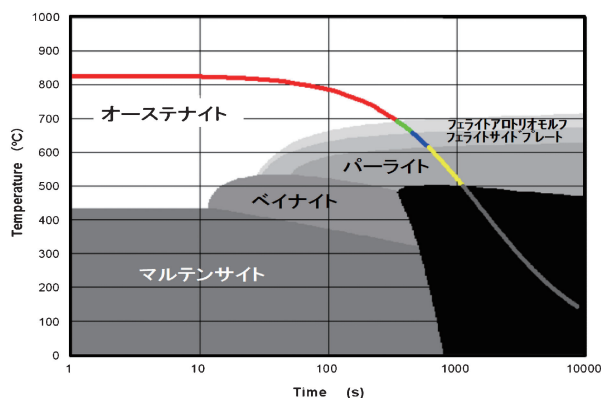


図2 CCT線図上でのRosenthalの式に従う温度履歴の計算結果．

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

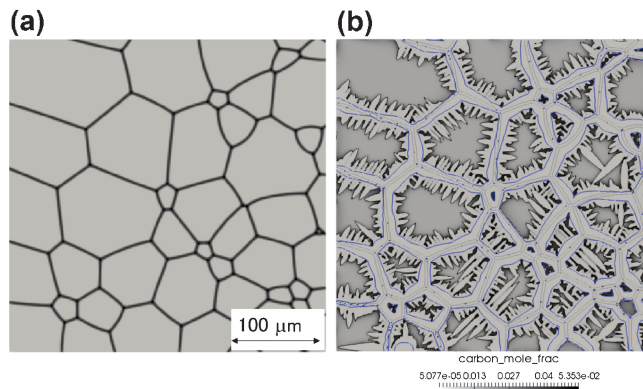


図3 α 相析出のシミュレーション．アロトリオモルフフェライトおよびフェライトサイドプレートの析出形態が計算されている．

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 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エーション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

