

井上 (純) 研究室

鉄鋼冶金とデータ駆動科学の融合



物質・環境系部門
大規模実験高度解析推進基盤

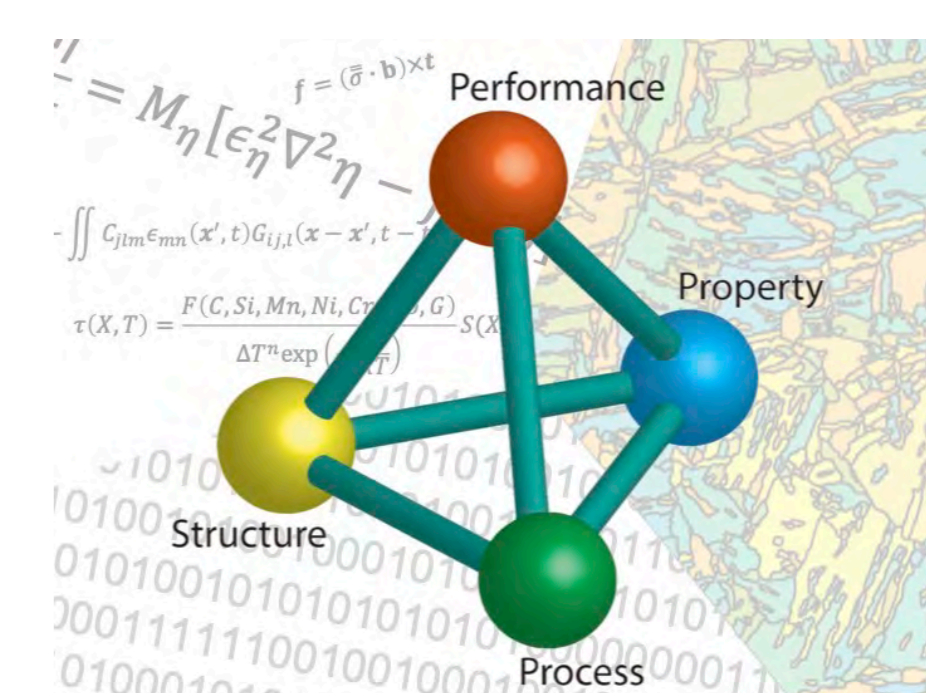
鉄鋼冶金インフォマティクス

工学系研究科 マテリアル工学専攻/先端学際工学専攻

http://metall.iis.u-tokyo.ac.jp

冶金学とデータ駆動科学の融合により構造材料の特性の飛躍的向上を目指す

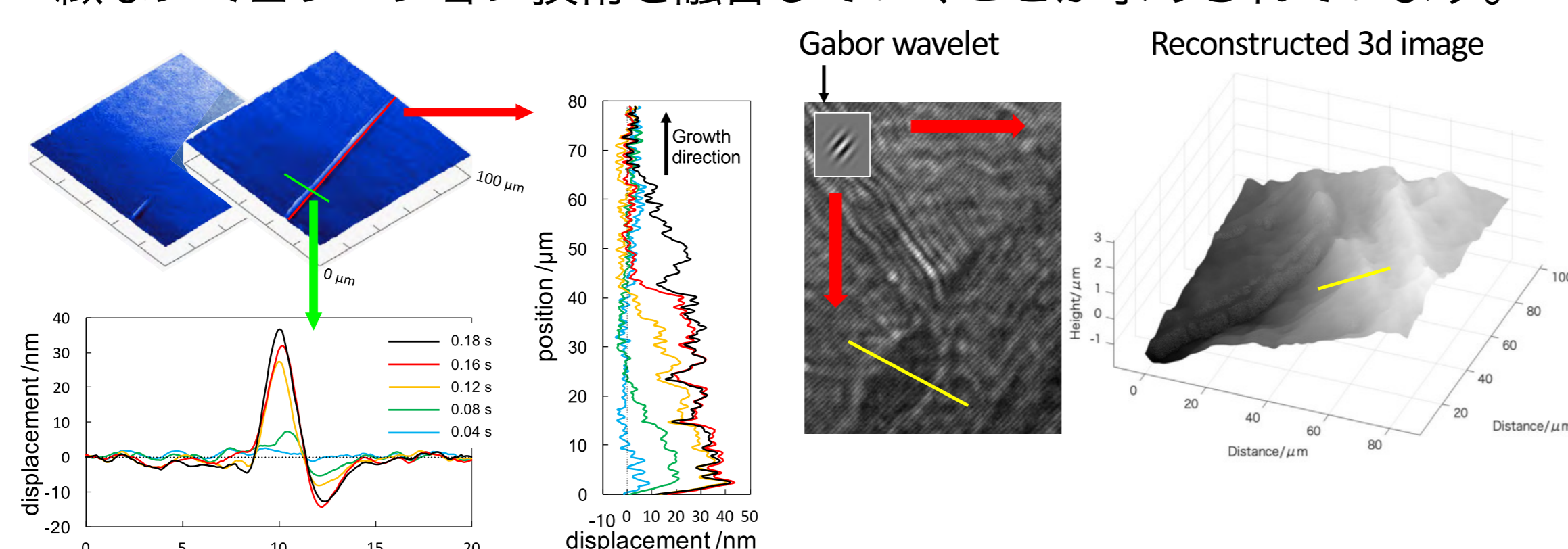
私たちの身の回りの様々な構造体を支える材料の高強度化は、社会の様々なニーズに応えるとともに、移動体とりわけ自動車の車体軽量化を通して資源・環境問題の改善に寄与すると期待されています。我々の研究室では、構造材料の組織形成や力学特性を支配するメカニズムを明らかにするために、従来の冶金学とデータ駆動科学を融合したマテリアルズ・インテグレーション(Materials integration, MI)という新たな手法の開発をしています。



プロセス・構造・特性・性能の関係を
先人の知恵とデータから読み解く

①相変態や局所変形挙動をナノレベルでかつリアルタイムに捉える

鉄鋼材料の力学特性は変態生成組織の形状や分率に大きく依存します。この例では、フェライトプレート(FP)とベイナイト(B)の組織形成に伴う表面起伏の微小な違いを明確に捉えることに成功しました。従来の特性を凌駕する材料開発には、斬新な発想による実験事実の提示と精緻なシミュレーション技術を融合していくことが求められています。

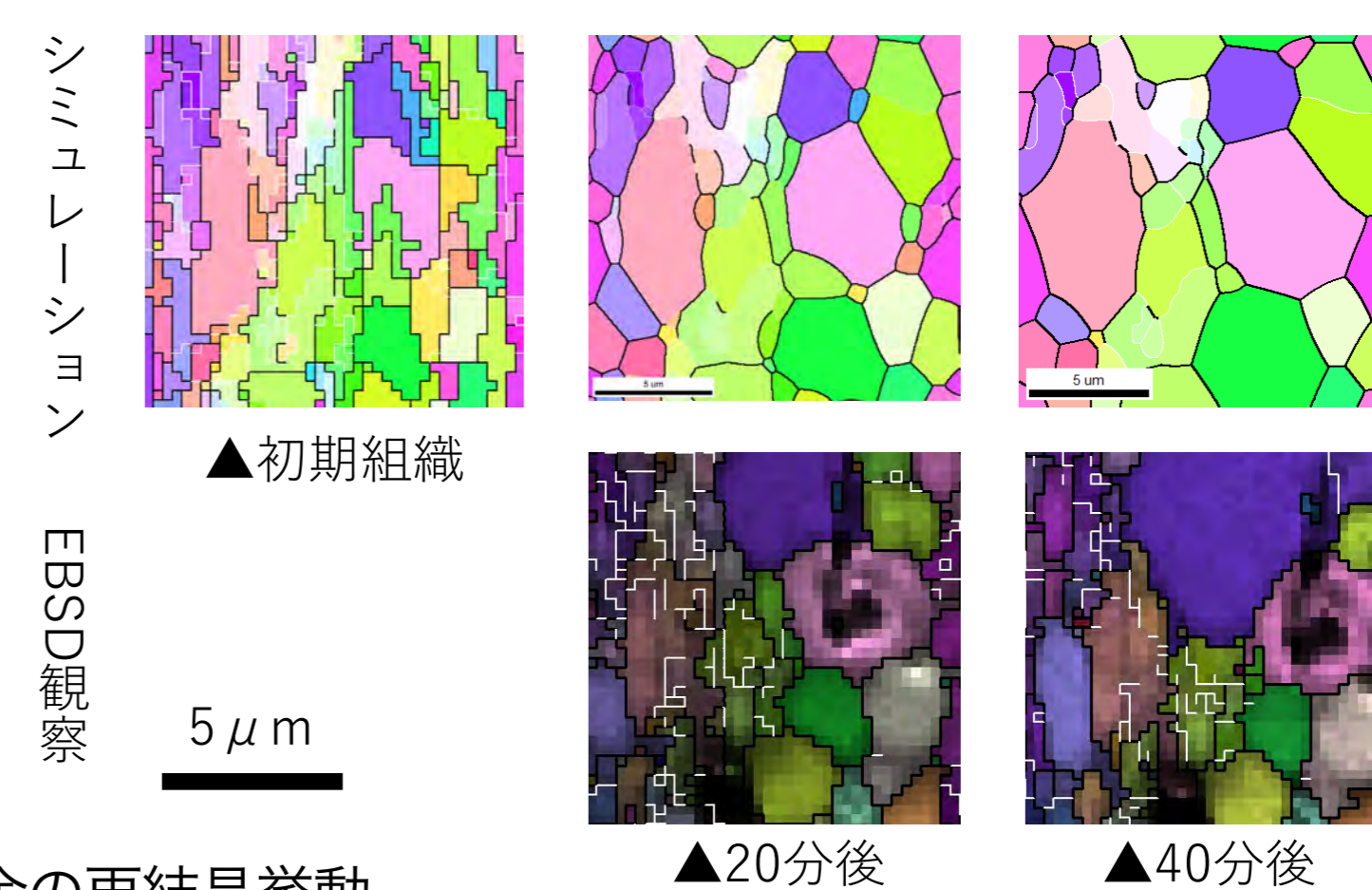
1) S. Komine et al., *Scr. Mater.* 162(2019), 241.

▲Bainitic ferrite(左)とWidmanstätten ferrite(右)の表面起伏の断面形状変化¹⁾

C. Lin, et al., *Tetsu-to-Hagane* 108 (2022) 360-369
▲デジタルホログラフィック顕微鏡(DHM)とGabor waveletを用いて3次元画像を復元²⁾

②直接計測困難な材料の内部情報を間接データから数理統計的に定量評価する

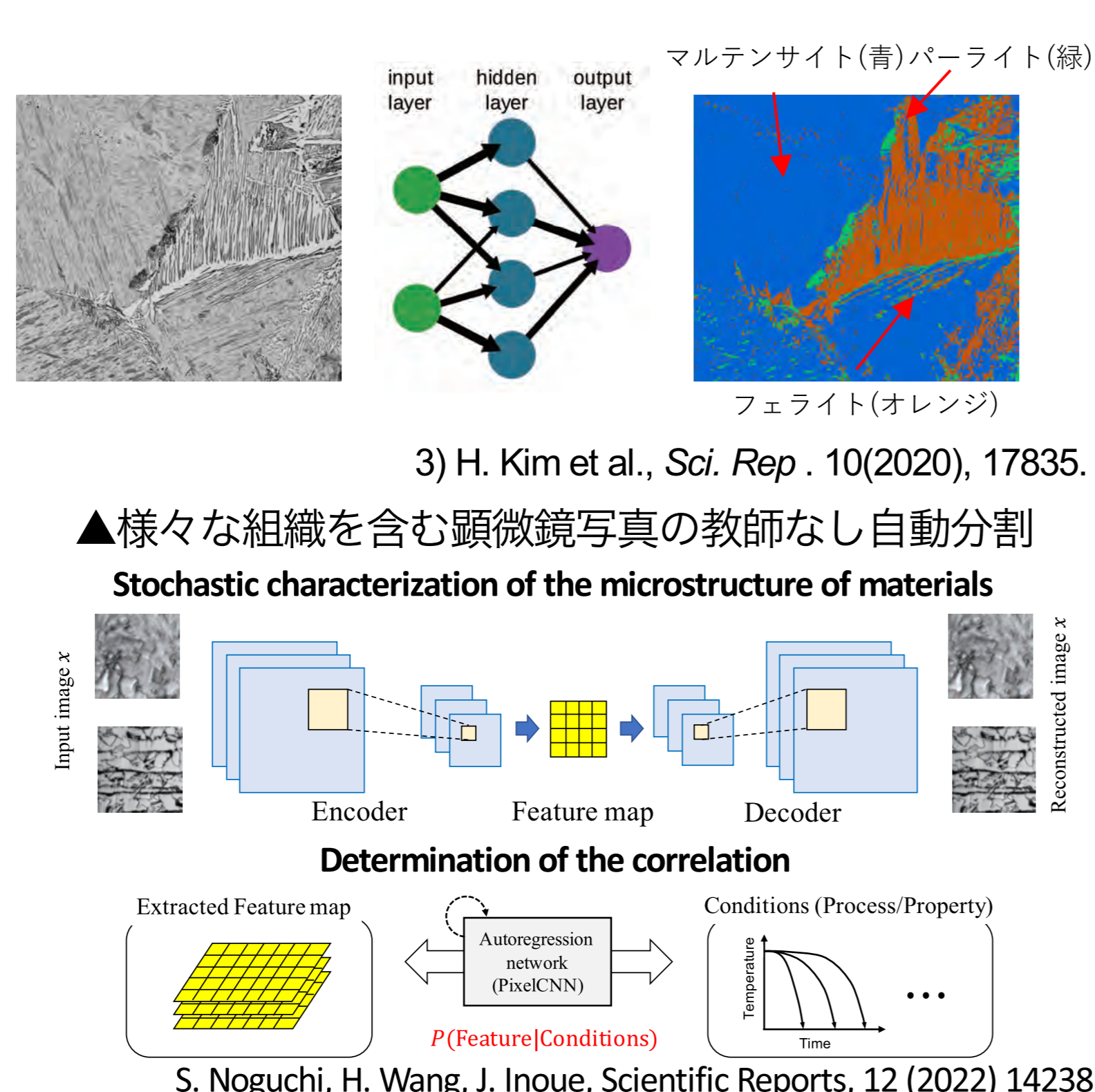
アルミ合金の特性は集合組織によって大きく変化するため、その制御には再結晶集合組織の形成過程の解明が必要です。この例では、気象予測にも用いられるデータ同化という手法を用いることで、EBSDやX線回折から得られる間接データと数値モデルを同化し、直接計測が困難な組織因子を明らかにすることを目指しています。



▲A1050合金の再結晶挙動
実際の組織変化とフェーズフィールドシミュレーションを同化

③複雑な材料組織の分類や幾何学的特徴抽出を全自動かつ高速に実行する

鉄鋼材料の微細組織は非常に複雑なため、その分類や定量評価は長年の経験を積んだ研究者にしかできない、所謂「匠の技」です。この例では、最新の機械学習モデルを適用することで、その自動化が可能であることを示しています。この様な解析を通し、従来の常識に囚われない新たな気づきが得られると期待しています。

3) H. Kim et al., *Sci. Rep.* 10(2020), 17835.

▲様々な組織を含む顕微鏡写真の教師なし自動分割

Stochastic characterization of the microstructure of materials

Determination of the correlation

Autoregression network (Pix2Pix)

Conditions (Process/Property)

Temperature, Time

Autoregression network (Pix2Pix)

Conditions (Process/Property)

Temperature, Time

Autoregression network (Pix2Pix)

Conditions (Process/Property)

Temperature, Time

Autoregression network (Pix2Pix)

Conditions (Process/Property)

Temperature, Time

Autoregression network (Pix2Pix)

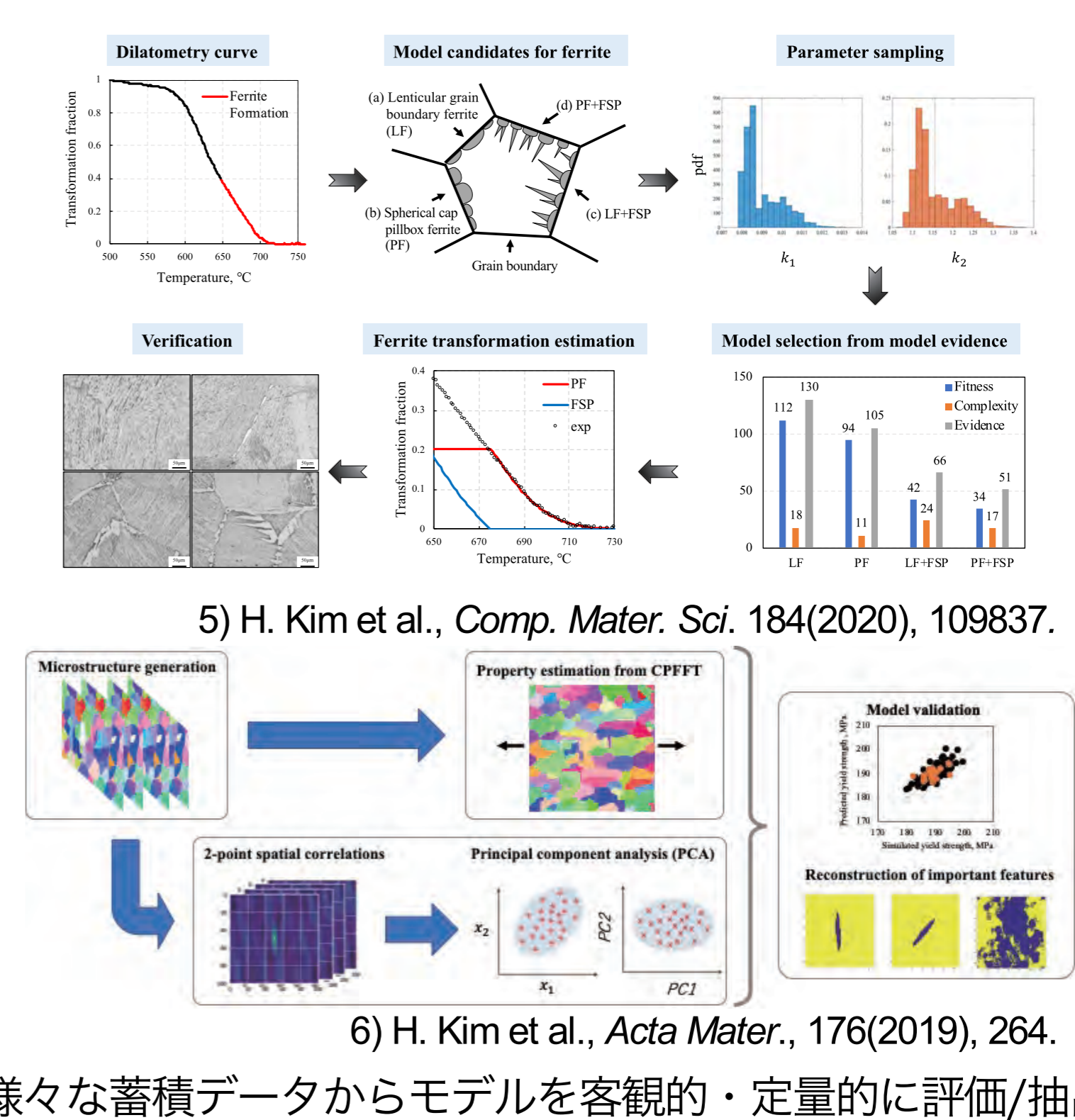
Conditions (Process/Property)

Temperature, Time

S. Noguchi, H. Wang, J. Inoue, *Scientific Reports*, 12 (2022) 14238

④スパースモデリングにより組織形成や特性を支配する原理を自動抽出する

金属材料の組織形成や特性を予測するモデルは多数存在しますが、どのモデルが現象を説明しているのかの判断は、結局、提唱者の「偉さ」が決め手だったりします。この例では、実はベイズの定理を用いることで、現象を説明するモデルのランク付ができることを示しています。正しい現象の理解には恣意性を排除する枠組みの構築が重要です。

5) H. Kim et al., *Comp. Mater. Sci.* 184(2020), 109837.6) H. Kim et al., *Acta Mater.*, 176(2019), 264.

▲様々な蓄積データからモデルを客観的・定量的に評価/抽出

