

(解説)

# 材料開発および利用におけるMI技術

和田 堯\*1・井元雅弘\*2・中山啓太\*2・倉 千晴\*3(博士(工学))・小林拓史\*4

## MI Technology in Developing and Utilizing Materials

Takashi WADA・Masahiro INOMOTO・Keita NAKAYAMA・Dr.Chiharu KURA・Takufumi KOBAYASHI

### 要旨

効率的に新材料開発を進めていく手法としてMaterials Informatics/Materials Integration (MI) 技術が注目されている。当社が扱う幅広い金属材料の材料開発および利用技術の開発においてもAIやシミュレーションに代表されるMI技術の活用を進めている。その中で代表的な事例として、溶接材料と薄鋼板を対象に実験データを基にAIで材料特性を予測し、化学成分や熱処理条件を探索して目標特性を達成する材料を見出した事例や、MIを活用して少ない実施例で材料特許を取得した事例を解説する。また厚鋼板、銅合金を対象に原子レベル、材料組織・特性、部品への加工性を評価するシミュレーションを構築して机上で開発を行った事例も解説する。最後にMIを有効に広く活用していくための展望について述べる。

### Abstract

Materials Informatics/Materials Integration (MI) technology is gaining attention as a method to advance the development of new materials efficiently. Kobe Steel is actively utilizing MI technology, exemplified by AI and simulations, in developing and utilizing a wide range of metal materials and their associated technologies. This article explains some representative cases: one involves using AI to predict material properties based on experimental data for welding materials and thin steel sheets, enabling the discovery of materials that achieve target properties by exploring chemical composition and heat treatment conditions. The other case explains how MI was used to obtain a material patent with few embodiments. Also explained is a case where simulations were constructed to evaluate the atomic-level material structure, properties, and processability into parts for thick steel plates and copper alloys. This allowed the development to be conducted on the desk. Finally, this article discusses the outlook for broadly utilizing MI to its fullest potential.

### 検索用キーワード

MI, マテリアルズ・インフォマティクス, マテリアルズ・インテグレーション, 分子動力学法, 組織予測, 材質予測, FEM, AI, 機械学習

まえがき=カーボンニュートラルのように世の中を取り巻く環境が大きく変化する中で、材料や部品に求められる要求はますます多様化・複雑化・高度化して開発競争が激化している。いっぽうで、少子高齢化・人口減少に伴い開発人材の確保が難しくなることが予想される中、より効率的に新材料開発を進めていく必要がある。

従来の材料開発では実験・理論・研究者の経験と勘に依存した開発スタイルが主流であり、膨大な時間と労力が必要になることが多いが、近年、これを解決する新たな材料開発手法の一つとしてMaterials Informatics/Materials Integration (MI) が注目されている。MIは米国で2011年に始まったMaterials Genome Initiativeを筆頭に、日本でも2010年代半ばから機能材料を対象とした情報統合型物質・材料イニシアティブ (MI<sup>2</sup>I) や、構造材料を対象としたSIP-MI<sup>1), 2)</sup>などの国家プロジェクトで基礎研究が進められてきた。その後、素材メーカーでもMIを活用した材料開発を実施したり、ITベンダーが色々な関連サービス提供を始めたりと産業応用が拡大している<sup>3)</sup>。当社でもDX戦略の一つとしてMIによる材料開発の変革を掲げて取組を進めている。

MIにはAI/機械学習に代表される情報科学を材料科学に応用していくMaterials Informaticsや、SIP-MIで提

唱されている実験、理論、計算/シミュレーションと情報科学を融合していくMaterials Integrationの考え方がある。代表的なMIによる材料開発の手法は、演繹(えんえき)的なアプローチとして実現象を捉えた物理モデルを構築してシミュレーションにより机上で開発を行う手法と、帰納的なアプローチとして実験やシミュレーションにより生み出されたデータをAIで分析して化学成分などの設計情報と材料特性との関係を見出していく手法がある。

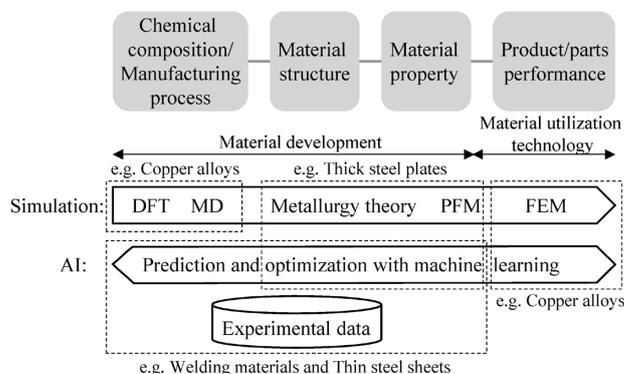


図1 材料開発から利用におけるMI技術活用  
Fig.1 Application of MI technology for material development and utilization

\*1 技術開発本部デジタルイノベーション技術センター \*2 技術開発本部材料研究所 \*3 技術開発本部応用物理研究所 \*4 技術開発本部ソリューション技術センター

シミュレーション技術には第一原理計算や分子動力学法による原子レベルのマイクロ計算、冶金理論やフェーズフィールド法による材料組織・特性のメゾスケールの計算、部品への加工性や強度特性を評価する有限要素法(FEM)のマクロ計算と、取り扱う現象のスケールに応じた技術がある。AI技術には設計情報から材料特性の予測モデル(順問題解析)を線形回帰、ガウス過程回帰、ニューラルネットワークなどの回帰手法によりデータから学習する技術や、所望の材料特性を実現する可能性の高い設計情報をベイズ最適化などの最適化技術で探索(逆問題解析)する技術がよく用いられる<sup>4), 5)</sup>。

当社では鉄鋼・アルミニウム合金・銅合金・溶接材料といった幅広い金属材料を対象に、化学成分・製造プロセス条件を見極めて所望の材料特性を実現する材料自体の開発と、材料から部品への加工や部品としての性能を担保する構造設計などの材料利用に関する開発を行っており、これら各種金属材料での材料開発および利用において適材適所でMI技術の活用(図1)を進めている。

本稿では、1章で溶接材料、2章で薄鋼板を対象に、実験データを基にAIで材料特性予測および化学成分や熱処理条件の探索を行った材料開発の事例を、3章で厚鋼板、4、5章で銅合金を対象に、ミクロおよびマクロの各スケールのシミュレーションを構築して一部AIを組み合わせた材料開発および利用の事例を解説する。

## 1. 溶接材料での実験データとAIを活用した材料開発

本章では溶接材料の一種であるアーク溶接用のフラックス入りワイヤを対象にAIで実験データから材料特性予測モデルを学習し、強度・じん性バランスに優れた材料の化学成分を探索した事例を紹介する。

今回開発したAIによる予測・探索技術の概略を図2に示す。従来の溶接材料開発は、①原材料配合、②複数原材料から構成される溶接材料の化学成分(溶材成分)、③溶接後の溶接金属の化学成分(溶金成分)、④溶接金属の機械的特性(溶金特性)の各関係性を考察しながら実施している。そこで、この溶接材料開発の特徴を考慮したMI技術として、①~④の各順逆方向の関係をつなぐAIの予測・探索技術を開発した<sup>6)</sup>。予測技術は①→②、②→③、③→④の各順方向の計算を行う予測モデルを構築し、①→④の全体の予測は各予測モデルを連結させることで実現した。また予測モデルを活用して④→③→②→①の逆方向の計算を行う探索技術も開発した。各予測・探索技術について詳しく説明する。

まず①原材料配合から②溶材成分の予測は線形式で表

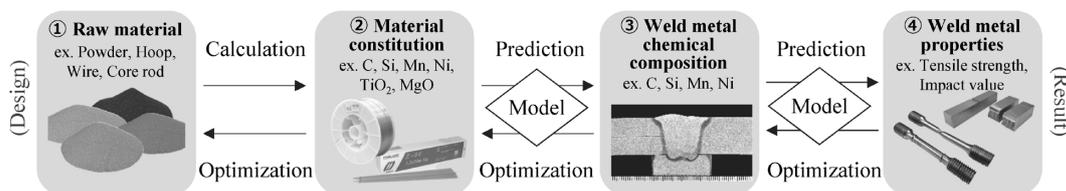


図2 溶接材料設計におけるMI活用コンセプト  
Fig.2 Concept of MI application for welding material designing

せる特徴を活かしてモデル化し、②溶材成分から①原材料配合の探索は線形モデルに効果的な凸最適化手法をベースにした手法を開発した。つぎに②溶材成分から③溶金成分、③溶金成分から④溶金特性の各予測モデルは複雑な溶接現象や材料組織形成に関わり明確な関係性を物理理論に従って構築することが現時点では難しいため、実験データから機械学習手法の一種であるガウス過程回帰により予測モデルを学習した。しかし、予測モデルの説明変数である溶材成分や溶金成分の種類は数十個と多く、限られた実験データに対して単純に機械学習手法を適用しただけでは良好な予測精度の実現が難しかった。そこで、予測精度を向上させる工夫として材料知見により成分の中から影響の小さいものは除外して説明変数の絞り込みを行ったり、溶金特性の一つであるじん性の予測では試験温度とぜい性破面率の材料学的な関係をモデルに取り込んだりして独自の予測モデルを開発した。さらに、④溶金特性から③溶金成分、②溶材成分の探索は予測モデルに用いたガウス過程回帰と相性の良いベイズ最適化を用いた。

今回、本技術を高強度鋼を用いた構造物向けのアーク溶接用フラックス入りワイヤに適用した。まず広範な強度クラスの数千点の実験データを収集し予測モデルを学習した。つぎに検証題材として設定した溶接金属の引張強さ(TS)  $\geq 830$  MPa、0℃じん性( $vE0^\circ C$ , 0℃のシャルピー吸収エネルギー)  $\geq 90$  Jを達成すると予測される原材料配合を探索し、実際にワイヤを試作して溶金特性を評価した。さらに、評価した結果を実験データに追加して同様の流れを数サイクル試行した。図3に人の知見に基づいて試作した従来結果(白印)と、MIに基づいて試作した結果(黒印)を示す。MIでは従来設計に対して大胆に複数の成分を変えた設計を提案しており、

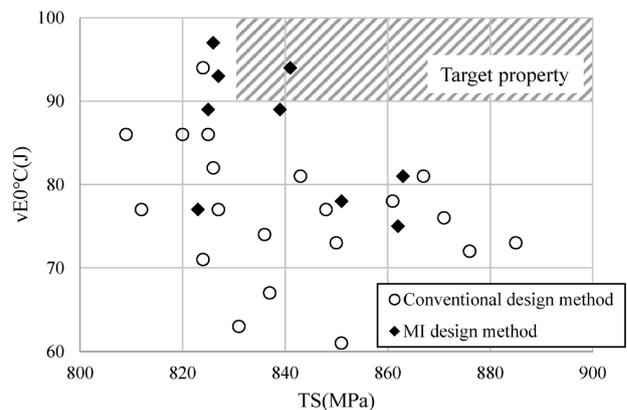


図3 従来設計手法とMI設計手法による材料特性の比較  
Fig.3 Comparison of material properties between conventional design method and MI design method

その中の一つの材料はTS,  $vE0^{\circ}C$ の特性バランスが最適化され目標特性を達成することができた。MIにより効率的に目標特性を達成する材料を見出せたことに加え、従来の設計指針と異なる成分を活用するという新たな気付きも得られた。

## 2. 薄鋼板での実験データとAIを活用した材料開発

本章では、自動車用超ハイテンの材料開発を対象にこれまで当社に蓄積された実験データを用い、AIによる特性予測モデルを構築して候補材料の探索を行うことで目標特性を満足する材料を発見でき、さらには少ない実施例で特許取得まで至った事例を紹介する。

自動車用超ハイテンは衝突安全性向上の観点から引張強さ (TS)、成形性確保の観点から全伸び (EL) および穴広げ性 ( $\lambda$ ) といった、互いに背反する機械的特性の両立が求められる。また一般に添加成分を多くすれば機械的特性は向上する傾向にあるが、溶接性や製造性の観点から鋼材成分には上限がある。こうした制約範囲内で優れた機械的特性を実現する超ハイテンの材料開発は難易度が高く開発に要する実験コストは膨大である。そこで、MI技術を活用して少ない実験で所望の材料を探索することを試みた。

まず当社でこれまで蓄積されてきた超ハイテンの実験データ 369 点を用い、AIによる特性予測モデル構築を行った。説明変数には鋼材成分、熱処理条件に加えて「 $Ae_3$  点と均熱温度 ( $T_1$ ) の差」や「 $Ms$  点と冷却停止温度 ( $T_2$ ) の差」といったパラメータも併用した。これらのパラメータは材料組織の変化をより直接的に捉え、機械的特性の予測精度を向上することを狙って導入したものであ

り、 $Ae_3$  点や  $Ms$  点は熱力学計算ソフト Thermo-Calc<sup>7)</sup> を用いて成分情報から算出可能である。目的変数はTS, EL,  $\lambda$  の3変数とし、予測手法にはガウス過程回帰を用いた。TS, ELの予測値と実験値の関係を図4に示す。TS, ELともに高精度に予測することができた。

つぎに構築した予測モデルとベイズ最適化を用い、検証題材として設定したC, Si, Mnの成分範囲内で目標特性：TS  $\geq 950$  MPa, EL  $\geq 22\%$ ,  $\lambda \geq 20\%$  を満足する材料の探索を実施した。ベイズ最適化により所望の特性を満たす確率が最も高いと予測される成分・熱処理条件を複数提案させ、実際に材料試作・特性評価を行った。1回目の探索では18材料を提示させ、2回目の探索では1回目の実験データを学習データに追加し、さらに2材料の探索を実施した。その結果、2回目の探索で目標特性を満足する材料を発見することができた。

さらに上記検討で発見した成分・熱処理条件について、AIによる特性予測モデルを用いて少ない実施例で特許取得することを試みた。具体的なロジックはつぎのとおりである。①まず大量の実験データを用いて成分・熱処理条件から特性を予測するAIモデルを構築したことを説明し、予測値と実験値の比較からこのモデルの予測値が信頼に値することを示す。②AIモデルにより請求項範囲の内・外の成分・熱処理条件で特性を予測したバーチャルデータを作成し、請求項範囲が妥当であることを説明する。③実際の実験データで実施例と比較例の2点を示す。表1に特許出願に用いた実験データとバーチャルデータを示す。ここで、バーチャルデータの特性欄の○は目標特性を満たすもの、×は満たさないものを示す。通常は請求項範囲を規定するためにそれぞれのパラ

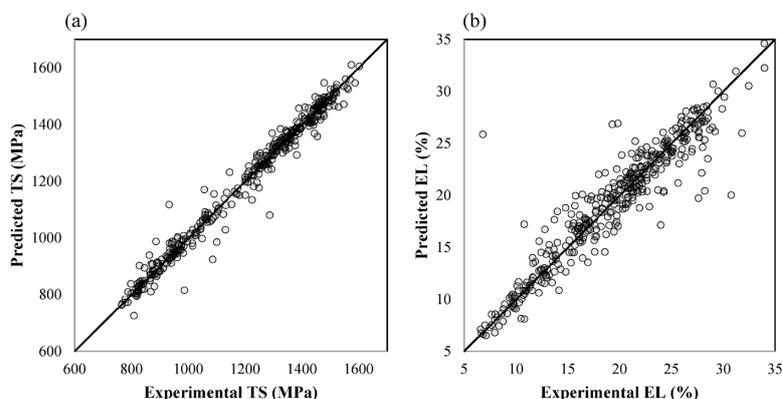


図4 各特性の予測値と実験値の関係 (a) 引張強さ, (b) 全伸び

Fig. 4 Relationship between predicted and experimental values of each property (a) tensile strength, (b) total elongation

表1 特許取得に用いた実験データとバーチャルデータ

Table 1 Experimental data and virtual data used for patent acquisition

Data No	Chemical compositions of materials							Annealing condition parameters					Mechanical properties				
	C	Si	Mn	Al	Ti	Ni	Mo	Cr	$T_1 - Ae_3$	$T_{preAT}$	$Ms - T_2$	$T_{postAT}$	$t_{preAT}$	$t_{postAT}$	TS	EL	$\lambda$
	(mass %)							(°C)					(s)			(MPa)	(%)
Experimental-Data 1	0.20	0.8	2.0	0.04	0.00	0.0	0.0	0.5	-9	500	180	400	10	300	983	24.2	39.0
Experimental-Data 2	0.24	0.6	2.4	0.60	0.00	0.0	0.0	0.0	24	450	218	460	90	20	933	19.1	42.2
Virtual-Data1	0.20	0.8	2.0	0.04	0.00	0.0	0.0	1.0	130	500	50	400	10	300	○	×	○
Virtual-Data2	0.20	0.8	2.0	0.04	0.08	0.0	0.0	0.0	110	500	100	400	10	300	×	○	○
Virtual-Data3	0.40	2.0	2.0	0.04	0.00	0.0	0.0	0.0	48	380	5	380	100	450	○	×	×
Virtual-Data4	0.20	0.8	2.0	1.2	0.00	0.0	0.0	0.0	-12	450	200	400	23	300	×	○	○
Virtual-Data5	0.20	0.8	2.0	0.04	0.00	0.5	0.0	0.0	130	450	100	400	5	300	×	×	○
Virtual-Data6	0.20	0.8	2.0	0.04	0.00	0.0	0.2	0.0	110	500	50	400	5	300	×	×	○

※○: achieve target property. ×: not achieve target property

メータを変化させた多数の実験データに基づく実施例を用意する必要があるが、今回は大部分をAIで予測したバーチャルデータで代用することで、実際の実験データはわずか2点だけの特許を構築することができた。本特許を出願し2022年10月に特許査定を取得、登録特許<sup>8)</sup>となった。

### 3. 厚鋼板での冶金および破壊力学モデルとAIを活用した材料開発

船舶、建築鉄骨などの大型構造物に用いられる厚鋼板は溶接により組み立てられる。鋼板の溶接熱影響部(Heat affected zone, HAZ)は一般に母材よりじん性が低下するため、HAZじん性の確保が構造物の安全性を確保する上で重要となる。実験的にHAZじん性に対する成分や溶接条件の影響を評価するには鋼板の溶製や圧延に加え、溶接施工または溶接時の熱履歴を模擬した熱処理が必要となり多くの試作コストを要する。そのため多数の実験データに基づくAIによる予測ではなく、物理モデルをベースにしたHAZじん性の予測と逆問題解析による厚鋼板HAZの鋼板成分設計に取り組んだ。本章ではその概要を紹介する。

逆問題解析を行うには成分と熱履歴からHAZじん性の予測を行う順方向の予測モデルが必要となる。順方向の予測には成分・熱履歴から相変態を計算し、その変態温度情報に基づき破壊の起点となる硬質第二相組織などの組織特徴量を計算するモデルと、最弱リンク説でぜい性破壊の発生を判定するモデルを連結させた<sup>9)</sup>。本モデルでは、化学成分の異なる低炭素厚鋼板に対して様々な冷却速度におけるHAZの相変態挙動を再現し、HAZのマイクロ組織の特徴量を用いた計算によってぜい性破壊が主となる温度域でのシャルピー吸収エネルギーの計算が可能である<sup>9)</sup>。また焼き入れ焼き戻しプロセスに対応した母材の強度とじん性予測もモデル化している<sup>2)</sup>。

いっぽう逆問題解析においては、最適化計算にかかる時間を低減するために、構築した順問題のモデルを用いてランダムな化学成分による1万回を超える順方向の計算を実行し、ニューラルネットワークによって近似関数を学習した。このAIモデルを用いて制約条件下で最適

化計算を実施することで、鋼材成分・溶接条件(1パス)の自動設計を行うことが可能となった。逆問題解析の検証題材として、980MPa級の強度を有し、母材およびHAZ部の低温じん性を両立する鋼板の成分とプロセス(溶接入熱)条件の設計を検討した。最適化時の制約条件として、母材強度および母材じん性の下限と合金コストや炭素当量の上限を規定し、4~8 kJ/mmの入熱範囲でHAZじん性を最大化する化学成分を探索した。逆問題解析で抽出した検証用の鋼板成分を表2に示す。表2の鋼板成分を狙い組成として鋼板を溶製し、圧延後に焼き入れ焼き戻しプロセスで母材鋼板を作製し、母材の引張試験とシャルピー衝撃試験を実施した。HAZじん性は再現HAZ熱サイクル材を用いて評価した。なお、じん性の評価指標はシャルピー吸収エネルギーが50 Jとなる遷移温度とした。表3に実験検証の結果と逆問題解析で求めた特性を示す<sup>2)</sup>。HAZじん性の予測値と実験値の差異がはかると比べ比較的大きいが、各特性を満足する実験検証結果が得られた。完全な試作レス化には至らないものの、材料設計指針を得るための手法として有効であると考えられる。これらのモデルの活用により、様々な仕様や制約条件に対応した鋼板開発の効率化への貢献が期待される。

### 4. 銅合金での分子動力学法を活用した材料開発

銅合金は優れた熱伝導性・導電性を示す材料として車載端子、電子機器、機械のケーブルなどの製品に利用されているが、製品の軽量化や小型化の要求に応えるべく、高強度・高導電率を有する銅合金の開発が進められている。銅合金の強度を向上させる方法の一つに固溶強化がある。固溶強化のメカニズムは諸説提唱されているが、仮説の一つとしてサイズ効果説<sup>10)</sup>がある。サイズ効果説は、単一元素の材料(溶媒側)に異なる元素(溶質側)が固溶することにより、溶質原子と溶媒原子の原子半径の違いから格子ひずみが生じ、溶質原子に転位が固着(ピンニング)して転位運動が抑制されることで強度が向上するという考えである。溶質/溶媒原子半径差が大きいほど固溶強化が大きくなる傾向は実験的には知られているが、サイズ効果説の原子レベルのメカニズムはよく分かっていない。そこで2元素銅合金を対象に、多数の原子の動的な解析が可能な分子動力学法<sup>11)</sup>(Molecular Dynamics, 以下MD法という)を用いて溶質原子に固着した転位が離脱する際に必要なデピンニング力を計算するシミュレーションモデルを作成した。さらに、デピンニング力に関連の深い因子を抽出し、簡易

表2 検証試験用の鋼板成分

Table 2 Chemical compositions of steel plate for verification test

(mass%)					
C	Si	Mn	Ni	Cr	Mo
0.06	0.4	1.6	2.0	1.0	0.5
Others Cu, Nb, V, Al					

表3 逆問題解析検証試験結果

Table 3 Inverse problem analysis verification test results

	Base material		HAZ
	Tensile strength (MPa)	50 J transition temperature (°C)	50 J transition temperature (°C)
Predicted value	1,090	-44	-91*
Experimental result	1,011	-45	-58~-70
Target property	> 980	< -40	< -50

\* Worst value in the heat input range for calculating HAZ toughness

にデピンニング力を計算する予測式も開発した。本章ではその事例<sup>12)</sup>を紹介する。

はじめに、MD法に用いるモデルとして溶媒原子にCu、溶質原子にNiあるいはMoを1原子、刃状転位を一つ導入した結晶構造を持つCu-NiおよびCu-Moのモデルを作成した。なお、銅のような面心立方格子(FCC)中の転位は二つの部分転位と積層欠陥に拡張することが知られており、この現象を再現できるようにした。つぎに、MD法にてモデルのすべり面方向に加える力を増加させることにより、部分転位が溶質原子から離脱するのに必要なデピンニング力を求めた。その結果、Cu-NiよりもCu-Moのモデルでは約10倍のデピンニング力が必要であることが分かった(図5)。原子サイズはMo>Ni~Cuであることから、溶質/溶媒原子半径差が大きいほど固溶強化が大きくなる傾向とも一致しており、デピンニング力の比較ができるようになった。

いっぽう、MD法で計算を行うためには各元素の原子間ポテンシャルが必要であり、その作成には膨大な計算コストを要するため色々な元素を固溶させたシミュレーションをすることが困難である。そこで、簡易的な予測式を構築することを検討した。MD法の結果を考察すると、溶質原子の周囲の体積ひずみの最大値と第一原理計算で求めた溶質/溶媒原子間のズレがデピンニング力に関係していることを見出した。そして、デピンニング力 $F_V$ を予測する式(1)を開発した。

$$F_V = \alpha |\Omega| G b^2 |\varepsilon_V^{\max}| \dots \dots \dots (1)$$

ここで、 $\alpha$ : フィットティングパラメーター、 $\Omega$ : 第一原理計算で求めた溶質/溶媒原子間のズレ、 $G$ : せん断剛性、 $b$ : バーガースベクトル、 $\varepsilon_V^{\max}$ : 最大体積ひずみである。これらパラメータは元素に応じて決まる値や簡易的なシミュレーションで求めることができる値である。この予測式を用いて種々の元素を固溶させたときのデピンニング力 $F_V$ を計算することで、固溶強化に対して効果の高い添加元素を机上計算でスクリーニングすることができる。これにより高強度銅合金の新たな設計指針が得られることが期待される。

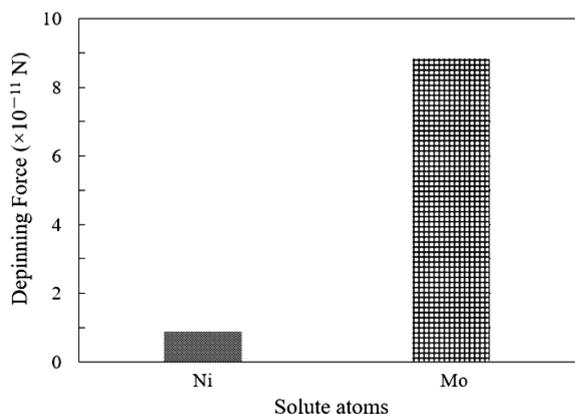


図5 溶質原子から部分転位が離脱する際に必要なデピンニング力  
Fig. 5 Depinning force required for partial dislocation to move away from solute atom

## 5. 銅合金での有限要素解析とAIを活用した材料利用技術の開発

本章では車載端子に用いられる銅合金板材の多工程曲げ加工プロセスに対して、有限要素法によるシミュレーションにAIを組み合わせて加工条件を最適化した事例<sup>13)</sup>を紹介する。

車載端子はピン状のオス端子と内部に板ばね機構を有するメス端子で構成されており、端子特性として重要な導電性は、オス端子をメス端子に挿入した際にメス端子内部の板ばねが変形することによって発生する反力(接圧)によって確保されている。近年、省スペース化の観点から車載端子の小型化が進められているが、接圧を従来同等に保つためには、端子小型化でメス端子内部の板ばねが短くなり、ばね定数が低下する分をばね部の変形量を増やして接圧を確保する必要がある。ただし、ばね部の変形量が増えて塑性変形してしまうと所望の接圧が得られなくなるため材料を高強度化して塑性変形を抑制する必要がある。しかしながら、高強度化により曲げ加工性が悪くなり、製造時に割れ・しわが発生しやすくなるという課題が生じる。曲げ加工性の改善方法として、曲げ加工条件を適切に設計することが挙げられるが、加工条件パラメータが多くあり実験により適切な加工条件を見出すのはコストがかかる。そこで、曲げ加工性をシミュレーションで評価する技術と最適化技術を組み合わせることで、効率的に最適な曲げ加工条件を探索する技術を開発した。

曲げ加工性を評価するシミュレーションとして図6に密着曲げを対象にしたFEモデルを示す。密着曲げは全4工程(1st~4th)で段階的に曲げていく工程であり、1st曲げ半径 $R_1$ 、1st曲げ角度 $\theta_1$ 、2nd曲げクリアランス $C$ 、2nd曲げ半径 $R_2$ 、2nd曲げパンチ半径 $R_p$ 、3rd曲げ角度 $\theta_3$ の計6個が主な加工条件パラメータである。曲げ加工性のシミュレーションでの評価には、過去知見から板表面の割れ・しわの度合いと曲げひずみに一定の相関があることが確認されているため、4th曲げ後の板表面に発生した最大曲げひずみ $\varepsilon_{\max}$ を用いた。有限要素解析には動的陽解法ソフトであるLS-DYNA<sup>14)</sup>を用いた。また加工条件パラメータの変更に伴いFEモデルを変更

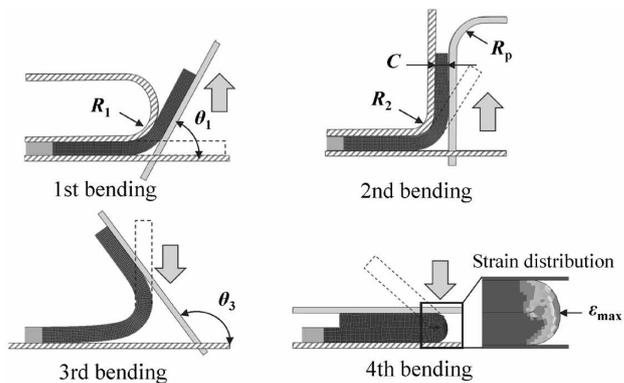


図6 密着曲げ評価のFEモデル  
Fig.6 FE model for contact bending evaluation

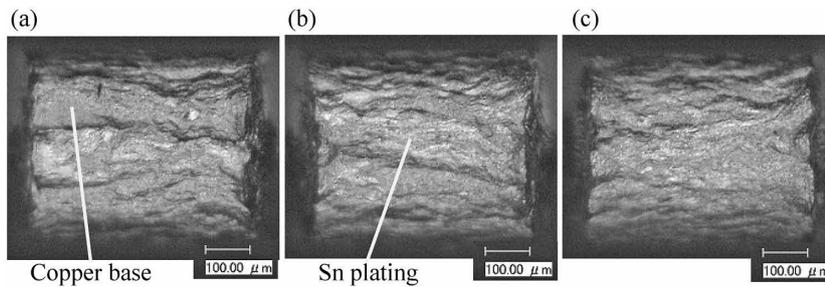


図7 各条件で実験した密着曲げ部の外観 (a) 従来条件, (b) 手動調整条件, (c) 最適化条件  
 Fig.7 Observation of contact bending outside surface experimented under each condition  
 (a) Conventional condition, (b) Manually adjusted condition, (c) Optimized condition

する必要があるためCADおよびメッシュ作成ソフトであるCATIA V5<sup>15)</sup>, HyperMesh<sup>16)</sup>も用いた。

本シミュレーションを用い、最適化技術により最大曲げひずみ $\epsilon_{max}$ が小さくなるような加工条件パラメータを探索した。シミュレーションの計算時間は1ケースあたり約30分と長いので、少ないシミュレーション実行回数で最適解が得られやすいバイズ最適化を用いた。全体の計算フローは、最初に実験計画法により選定した加工条件パラメータでシミュレーションを実行して初期データを取得した後に、バイズ最適化により加工条件パラメータを探索、FEモデルを変更してシミュレーションを実行する。新たに得られたデータを追加して同様の計算を繰り返しながら探索を行っていく。

本技術の有効性を検証するために (a) 従来条件, (b) 手動調整した条件, (c) 最適化条件の3種類の密着曲げ加工用の金型を製作して実験を行った。各条件での密着曲げ部の外観を図7に示す。今回の実験に用いた銅合金板にはSnめっきが施されており、従来条件や手動調整した条件では板表面のSnめっきが剥離し、銅素地が露出した幅が大きいものに対して、最適化条件では銅素地の露出が抑制されており良好な曲げ加工条件であることが確認できた。本技術を活用することで、特性の異なる銅合金板材に対して最適な曲げ加工条件を素早く提示できるようにすることが期待される。

**むすび** = 本稿では各種金属材料を対象にAIやシミュレーションに代表されるMI技術を活用した材料開発および利用の事例を解説した。MIを有効に活用していくためには、当社独自の実験や世の中の文献・特許などで公開されている幅広い実験データを蓄積していくこと、物理現象を各スケールで捉えた物理モデルを構築し実験では困難な様々な条件で机上のシミュレーションによりデータを生み出していくこと、そのようにして集められた人では処理しきれない大量の高次元な情報に対してAIを活用して新たな材料を探索していくことが大切である。またMIを広く活用していくためには、実験データを蓄積するためのデータベースと、AIやシミュ

レーションの技術を材料開発者自身がプログラミングレスで使えるようなツールから構成されるプラットフォームが必要になると考え、クラウド上に「DataLab<sup>®</sup>」と呼ぶ基盤開発も行っている。DataLab<sup>®</sup>の詳細については、本号「**「全社データ分析基盤DataLab<sup>®</sup>」の構築と活用**」p.13~16をご参照いただきたい。DataLab<sup>®</sup>は溶接材料の開発現場での活用から進めており<sup>6)</sup>、今後さらに活用範囲を広げて、お客様の多様なニーズに素早く応えていける開発体制を構築していきたい。

なお本研究の一部は、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)「**統合型材料開発システムによるマテリアル革命**」(管理法人: JST)によって実施した成果である。

#### 参 考 文 献

- 1) 出村雅彦. 鉄と鋼. 2023, Vol.109, No.6, pp.490-500.
- 2) 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 最終成果報告書. [https://www.jst.go.jp/sip/dl/p05/p05\\_results-report2023\\_1.pdf](https://www.jst.go.jp/sip/dl/p05/p05_results-report2023_1.pdf). (参照2023-12-15).
- 3) 三井住友銀行. 経済・業界動向に関するレポート. [https://www.smbc.co.jp/hojin/report/investigationlecture/resources/pdf/3\\_00\\_CRSDReport090.pdf](https://www.smbc.co.jp/hojin/report/investigationlecture/resources/pdf/3_00_CRSDReport090.pdf) (参照2023-12-15).
- 4) 日野英逸ほか. あたりあ. 2019, Vol.58, No.1, p.7-11.
- 5) 松井孝太ほか. あたりあ. 2019, Vol.58, No.1, p.12-16.
- 6) 谷口元一ほか. R&D神戸製鋼技報. 2023, Vol.72, No.1, p.91-96.
- 7) Thermo-Calc Software AB. <https://thermocalc.com/>. (参照2024-1-29).
- 8) 株式会社神戸製鋼所. 中山啓太ほか. 高強度鋼板の製造方法. 特許第7146127号(P7146127). 2022.10.3.
- 9) 井元雅弘ほか. R&D神戸製鋼技報. 2021, Vol.71, No.1, p.31-36.
- 10) Z. Huda. Mechanical Behavior of Materials Fundamentals, Analysis, and Calculations, 1st ed. Springer, 2021, p.63-79.
- 11) 都築和馬ほか. 日本金属学会誌. 2002, Vol.66, No.7, p.728-734.
- 12) C. Kura et al. Mater. Today Commun. 2024, 38, 108242.
- 13) 小林拓史ほか. 第74回塑性加工連合講演会 講演論文集. 2023, p.303-304.
- 14) Ansys LS-DYNA. <https://www.ansys.com/ja-jp/products/structures/ansys-ls-dyna>. (参照2024-1-29).
- 15) DASSAULT SYSTEMES CATIA V5. <https://www.3ds.com/ja/products-services/catia/>. (参照2024-1-29).
- 16) Altair HyperMesh. <https://www.altairjp.co.jp/hypermesh/>. (参照2024-1-29).