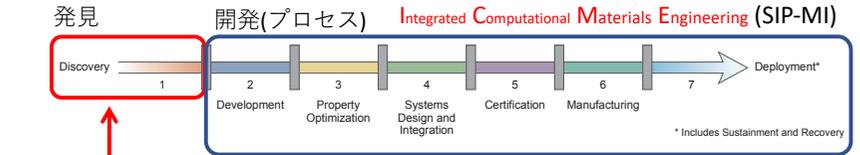


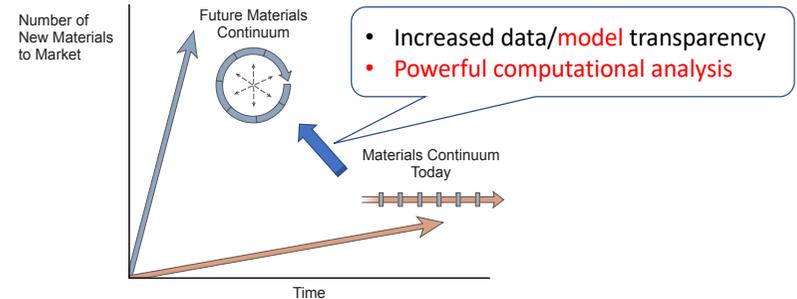
構造材料における マテリアルズ・インフォマティクス (材料科学 + 機械学習)

東京大学先端科学技術研究センター
(兼) 工学系研究科材料工学専攻
物質・材料研究機構
井上純哉

材料開発のフロー：



Materials Informatics (MI2I)

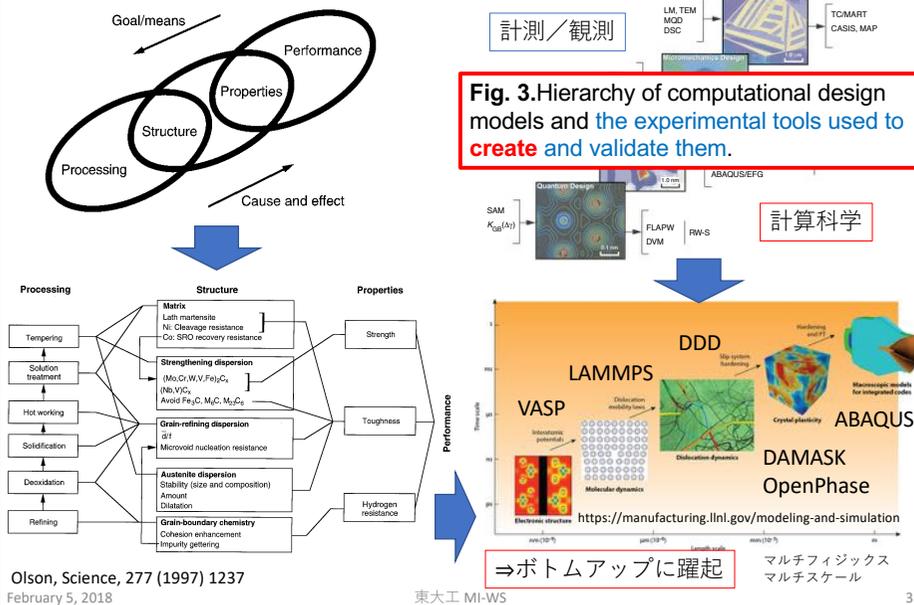


Materials Genome Initiative for Global Competitiveness,
NATIONAL SCIENCE AND TECHNOLOGY COUNCIL, June 2011
東大工 MI-WS

February 5, 2018

2

Integrated Computational Materials Engineering とは

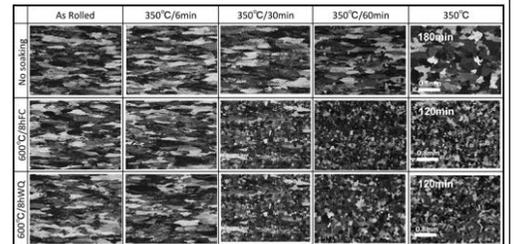
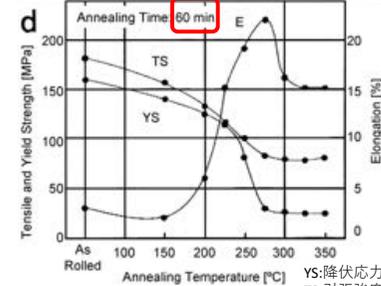


3

例：何故アルミは難しいか？

AA1050(Fe: 0.29 mass%, Si: 0.09mass%)

再結晶現象を予測する必要あり



吉田・大久保, 軽金属, 64 (2014) 285

影響因子：

- 合金元素 (Fe, Si, Cu, Mg, Mn, Ti, Zn, Zr)
- 保持温度・保持時間・冷却速度
- 圧下率・ロール径・圧延速度
- 析出相 (α -AlFeSi, Al_3Fe , ...)
- 集合組織 (結晶方位)

深層学習？

- やり方としてはありかも。でも、**そんなに潤沢にデータはありますか？**
- 材料学の発展という意味では興味なし
- そもそも、**分からない物理は何か？**

顧客が望む性能を満たし、かつ安価な
プロセスウィンドウをどう見つけるか？

February 5, 2018

東大工 MI-WS

4

再結晶を予測するには？

SG成長モデル (Humphreys)

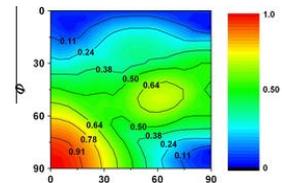
- 駆動力
 - 粒界エネルギー (Reed-Shockleyの式)
 - 蓄積ひずみエネルギー (提案はあるが...)

• 抗力

- 粒界の易動度 (Humphreysの式)
- ピンニング (Zener pinning)

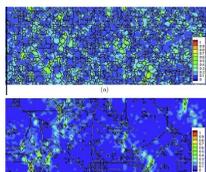
F.J. Humphreys, Mater. Sci. Technol. 8 (1992) 135-144.

• 平均場近似 (Taylor Factor)



J.J. Sidor et al. / Acta Materialia 59 (2011) 5735-5748

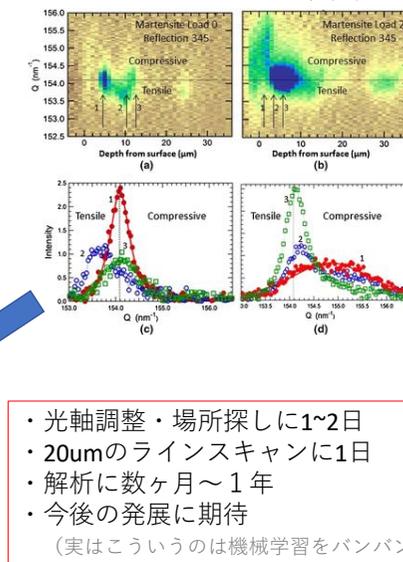
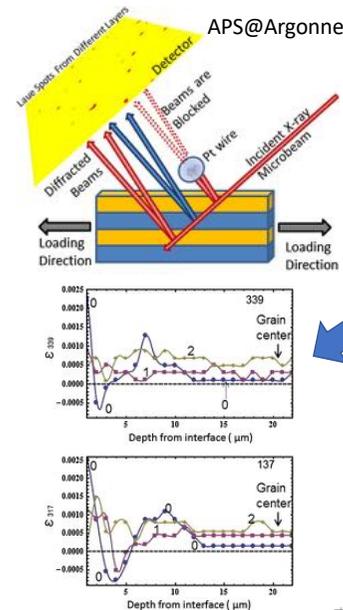
• 転位の相互作用 (CPFEM)



E. Popova et al. / Int. J. Plast 66 (2015) 85-102

⇒測れば良いじゃん！！

転位密度の分布は測れるか？



• 光軸調整・場所探しに1~2日
 • 20umのラインスキャンに1日
 • 解析に数ヶ月~1年
 • 今後の発展に期待
 (実はこういうのは機械学習をバンバン)

R.I. Barabashi et al., Metall. Mater. Trans., 45 (2014) 98

ここで機械学習登場

• 使い方

- ツールボックスとして
- 手法自体を真似る

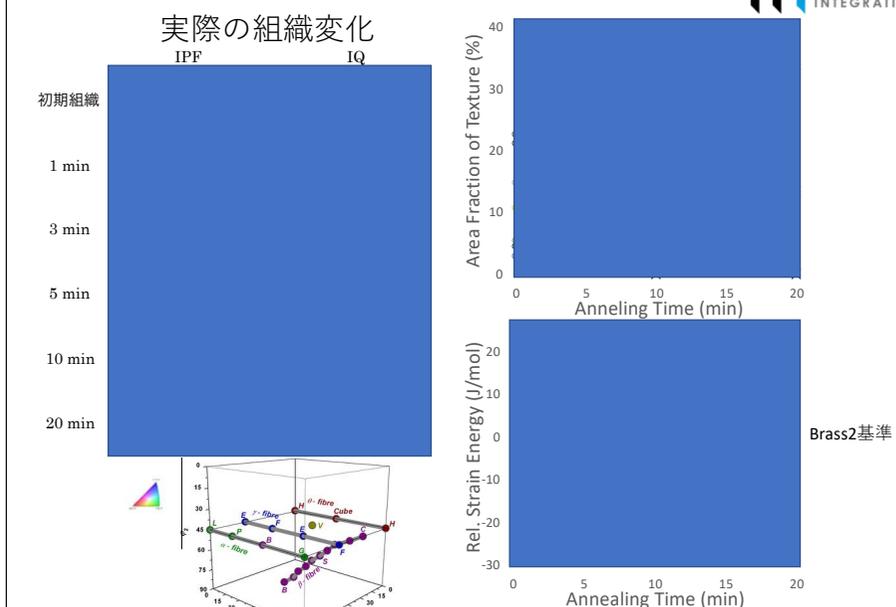
• 機械学習の解き方

- 確率モデルを定義
 - NN
 - 混合ガウス
 - GP等
- ベイズ推論
 - 最尤解・MAP解
 - 事後分布 = モデルの不確定性

• 再結晶の解き方

- SG成長モデルを確率モデルに変換
 - 蓄積ひずみエネルギー = 確率変数 (グループ毎)
 - 正規分布: $N(\mu, \sigma)$
 - 時系列: マルコフ性仮定
- データ: EBSD
 - 初期の粒配置
 - 各方位の体積率の時間推移
- ベイズ推論
 - 尤度関数: 体積率の誤差
 - 求める値: μ, σ の推移
- 要するに「データ同化」

バンド境界でのエネルギー変化



例：連続冷却変態曲線図 (CCT)

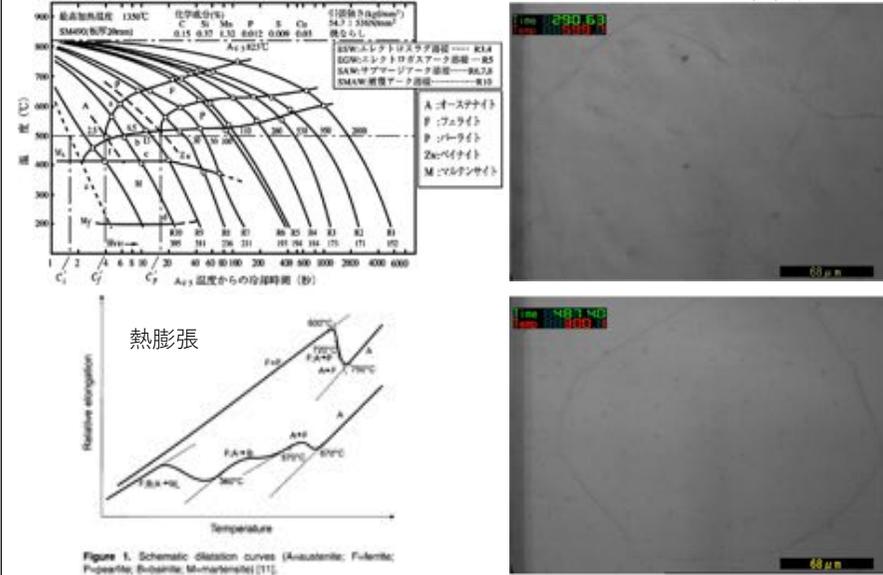


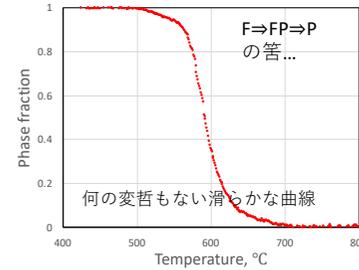
Figure 1. Schematic dilatation curves (Austenite; Ferrite; Pearlite; Bainite; Martensite) [11].

Suwanpinij et al., steel research int, 79 (2008) 793

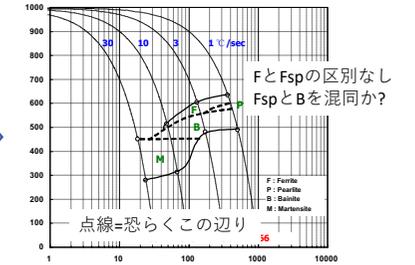
奥他, 鉄と鋼, 94 (2008), 363-368

CCTの何が難しい？

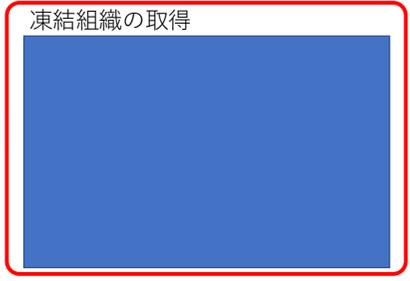
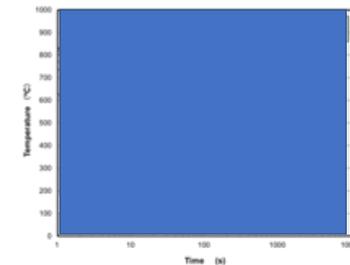
実際の熱膨張曲線



某テクノロジーサーチ作



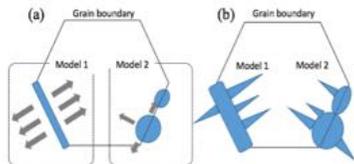
ベテラン研究者の知恵+執念



ここで機械学習登場

確率モデルの定義

- 出現相：F, FSP, P, B, ...
- 複数の生成モデルが混在



- 各生成モデルのパラメーター = 確率変数

ベイズ推論

- 尤度関数：体積変化の誤差
- 求めるモノ：各パラメーターの事後分布

⇒パラメーター推定 + モデル選択

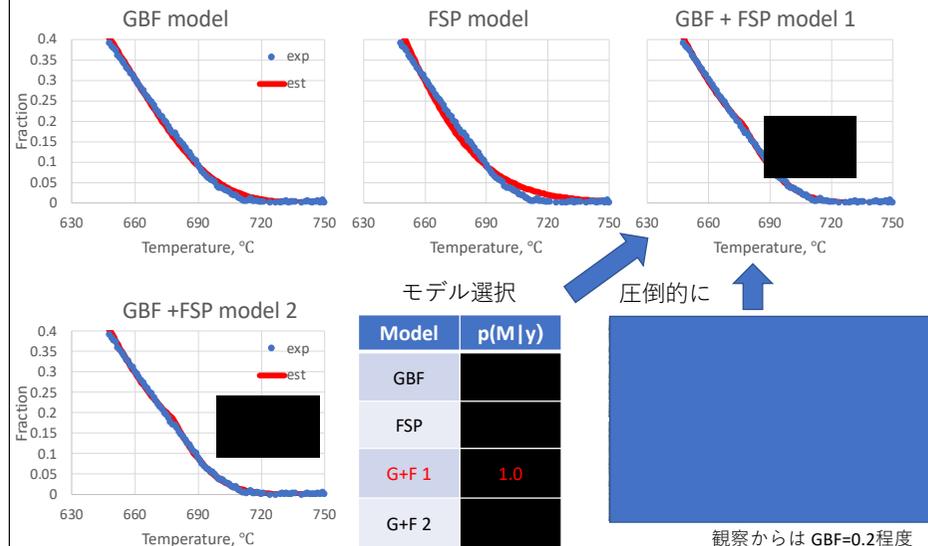
(自由エネルギー, エビデンス, 対数周辺尤度)

- F (粒界フェライト)
 - 成長：炭素拡散に律速
 - 核生成：N&G
 - 粒界で膜状
 - 粒界で楕円状
- FSP (フェライトサイドプレート)
 - 成長：Zener-Hillert
 - 核生成：
 - Nucleation & Growth
 - Site saturation

等々

見解の差異

パラメーター推定 + モデル選択



モデル選択

圧倒的に

観察からは GBF=0.2程度 T=660~680 °C

最後に



- 構造材料開発の歴史は長く、多くの天才達が残した知見は豊富
- 一方で、多くの未解明な現象／見解の不一致も存在
- 過去のデータや先端計測と先人の知見を活用し、新たな知見を生み出すことにも機械学習は有効
- その方面での若者の活躍にも期待

今後の課題 (Olsonの夢を実現するには)

- 構造材料は最終的には作って・使えてナンボ
- 様々な制約条件の存在 (経済, 技術, 性能, 信頼性)
- 様々な不確定性を明示化しつつ, ロバストなプロセスウィンドゥを見つける逆解析手法 (ROM, RBM, UQ等)