

AI と材料研究者のコラボで耐熱材料を強くする

～AI の一見奇抜な「手」から納得の熱処理法を考案～

配布日時：2023年9月25日 14時

国立研究開発法人物質・材料研究機構（NIMS）

概要

1. NIMS と名古屋大学からなる研究チームは、人工知能（AI）と材料研究者の共同作業で、Ni-Al 合金の高温強度を従来よりも向上できる新しい二段熱処理法を考案しました。AI が発見した優れた熱処理パターン群を材料研究者が分析し、材料学的なエッセンスを抽出することで、より高い強度を実現できる熱処理パターンが得られました。本成果は、マテリアル分野において AI と材料研究者のコラボで新しい考え方が生まれることを示す事例と言えます。

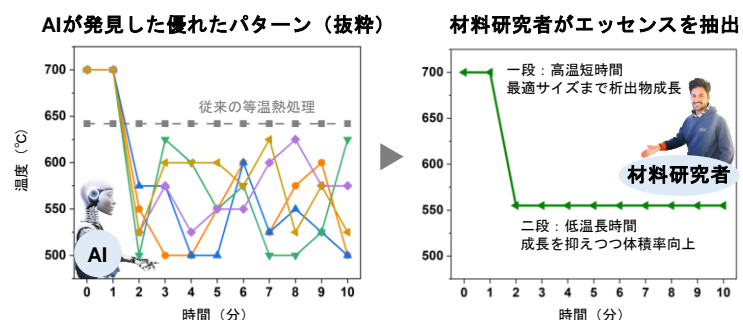
2. Ni-Al 合金は γ 相と γ' 相で構成され、高温強度を向上するためには γ' 相のサイズと体積率を適正な値に制御する必要があります。 γ' 相のサイズと体積率は熱処理の条件で決まりますが、温度と保持時間の組み合わせで構成される熱処理のパターンは膨大で、例えば、全時間を 10 等分し、温度を 9 水準とした場合、熱処理パターンの数は約 35 億（9 の 10 乗）通りにもなります。そのため温度を一定にした等温熱処理に限定して検討がなされてきました。これまでに研究チームは実験を計算シミュレーションに置き換えて試行錯誤の時間とコストを減らしてきましたが、それでも 35 億のパターン全てを計算することは現実的ではありませんでした。

3. 今回、研究チームは、膨大な組み合わせから最適パターンを効率的に探索する AI アルゴリズム、モンテカルロ木探索を用いることで、等温熱処理を凌駕する 110 通りの熱処理パターンを発見しました。発見されたパターンは一見複雑で（図）、人間には思いつかない奇抜なものばかりでしたが、詳しく分析すると理にかなっていることがわかりました。AI が発見したパターンは、高温短時間で γ' を適正なサイズの手前まで成長させたのち、低温長時間で適正サイズを超えない様に成長を抑えつつ体積率を上げていることがわかったのです。ここから着想を得て、高温短時間と低温長時間を組み合わせる二段熱処理を考案し、AI が発見したパターンよりもさらに Ni-Al 合金の高温強度を向上できる熱処理法を設計しました。

4. 本手法を、今後、より実用的なニッケル基超合金へ適用し、ガスタービンの燃費向上に貢献することを目指します。

5. 本研究は、NIMS 技術開発・共用部門の出村雅彦部門長、源聡副プラットフォーム長、マテリアル基盤研究センターのVickey Nandal NIMS ポスドク研究員、ディープ研研究員、構造材料研究センターの長田俊郎主幹研究員、Dmitry S. Bulgarevich NIMS 特別研究員、名古屋大学の小山敏幸教授によって行われました。本研究の一部は、内閣府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」「統合型材料開発システムによるマテリアル革命」の支援のもと、NIMS 構造材料 DX-MOP の枠組みにて行われました。

6. 本研究成果は Scientific Reports 誌に 2023 年 8 月 4 日（Vol. 13, Article number 12660）に掲載されました。



AI と材料研究者の共同作業で考案した新しい二段熱処理法

* 物質・材料研究機構は、その略称を NIMS（National Institute for Materials Science）に統一しております。

研究の背景

析出物で強度を向上させるタイプの金属材料にとって、熱処理は強度を決定する重要なプロセスです。例えば、本研究の対象であるNi-Al合金¹⁾は、NiとAlがランダムに配列した γ （ガンマ）と呼ばれるマトリックス相と γ' （ガンマプライム）と呼ばれるNiとAlが規則的に配列した析出相で構成されます（図1）。熱処理²⁾によって γ' のサイズと体積率が決まりますが、適正なサイズと体積率に制御することで、高温での強度を大きく向上させることができます。

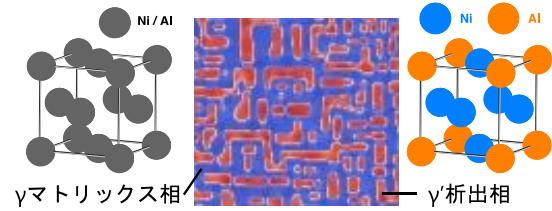
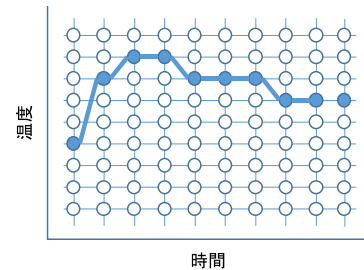


図1 Ni-Al合金の構造

一方で、取りうる熱処理パターン³⁾の数は膨大です。例えば、全体の熱処理時間を10分割し、各時間における温度を9水準と制限した場合でも、組み合わせは9の10乗、すなわち、約35億パターンにもなりません（図2）。このような膨大な組み合わせの中から最適な熱処理法を探索することは現実的ではなかったため、従来は、温度を一定にした等温熱処理³⁾と呼ばれるパターンに限定して最適化が行われてきました。等温熱処理を超えるようなパターンが存在する可能性はあるものの、有望なパターンを考える手がかりがない状態でした。

これまでに研究チームでは、実験を数値計算に置き換えることで、試行錯誤の時間とコストを減らすことに成功してきました。例えば、実験では一つの熱処理パターンを試すのに半月近くかかっていたところを、半日で結果を得ることができるようになりました。それでも35億パターン全てを計算することは現実的ではありませんでした。

時間10分割・温度9水準の場合
 $9^{10} = 3,486,784,401$ 通りのパターン



1ステップごとに枝分かれする
 => ボードゲームと類似

図2 膨大な熱処理パターン数

研究内容と成果

今回、研究チームは、膨大な組み合わせの中から効率的に最適なパターンを探索できるAIアルゴリズムを用いて、35億パターンの中に等温熱処理を超える熱処理パターンを見出しました。その上で、このAIが見出した優れたパターンの特徴を専門家の視点で分析し、高温短時間と低温長時間を組み合わせる二段熱処理を考案しました。この考え方に沿って最適化を行ったところ、AIの最良値よりもさらに高温強度を向上できる新しい熱処理パターンを設計できました。

本研究では、モンテカルロ木探索⁴⁾というAIアルゴリズムを用いました。これは将棋や囲碁などのボードゲームで有望な手を探索するために利用されている最新のアルゴリズムです。熱処理のパターンは時間

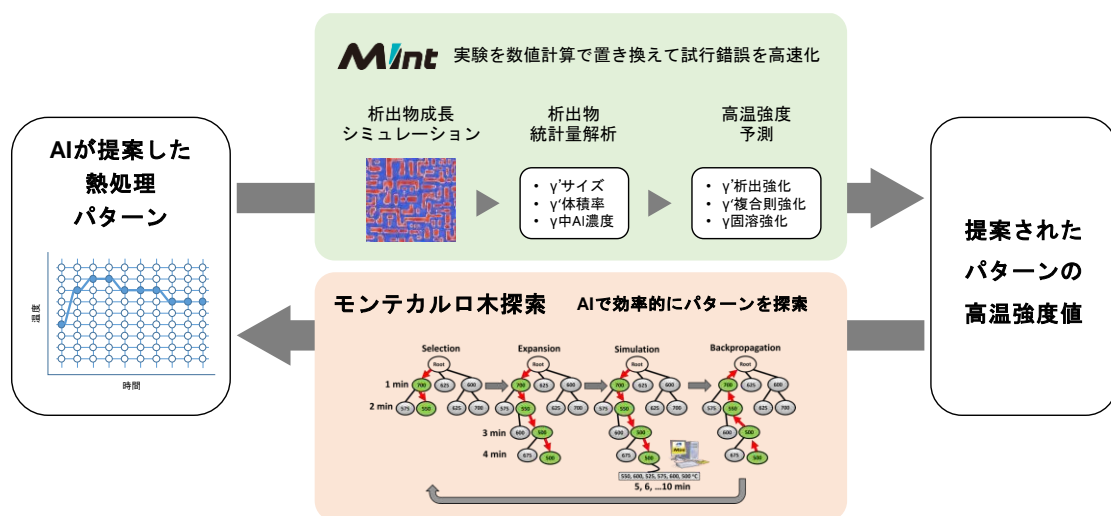


図3 AI（モンテカルロ木探索）が提案したパターンを数値計算で検証し、その結果からAIが次のパターンを提案する試行錯誤を1620回実施。110個の優れたパターンを見出しました。

を進めるごとに選択肢が枝分かれし、それぞれが異なる結果をもたらすのですが、これはボードゲームとそっくりです。

AI が提案したパターンについて数値計算で高温強度を求め、その結果を AI にフィードバックして次の提案に活かすという試行錯誤を 1620 回実施し、従来の熱処理を凌駕する 110 のパターンを見つけました (図 3)。AI が発見したパターンは、ジグザクと昇温と降温が組み合わされた複雑なもので、人間には思いつかないようなパターンでした (図 4a)。AI が発見したパターンが何故優れているのか、その理由を専門家の視点で分析したところ、優れたパターンには次のような共通する特徴があることがわかりました。まず、高温で γ' を急速に成長させ、適正なサイズ (約 41nm) を超える前に降温し、それ以上成長しない条件となっていました。その後は、低い温度域を長時間維持することで適正サイズを超えないように極力成長を抑えつつ、体積率をゆっくり増加させ、高温強度を向上させていました。 γ' は原子の拡散⁵⁾が速くなる高温ほど速く成長します。また、 γ' は熱力学的には低温ほど安定⁶⁾で、温度を低くするほど体積率が増加していきます。AI の発見したパターンはこれらの特徴を、事前に教わることなく、うまく利用していることが分かってきたのです。

以上の分析から、高温短時間と低温長時間を組み合わせることが本質であって、ジグザクと昇温・降温を小刻みに繰り返す必要は必ずしもないということに気がつきました。そこで、高温短時間と低温長時間の二つの等温熱処理を組み合わせた二段熱処理を考案しました (図 4b)。このアイデアに基づいて、二段目の低温長時間における温度を最適化したところ、AI が発見した最良パターンを凌駕する熱処理パターンを設計できました (図 4c)。

考案した二段熱処理はこれまでにない発想に基づいており、AI の発見を専門家が分析することで初めて

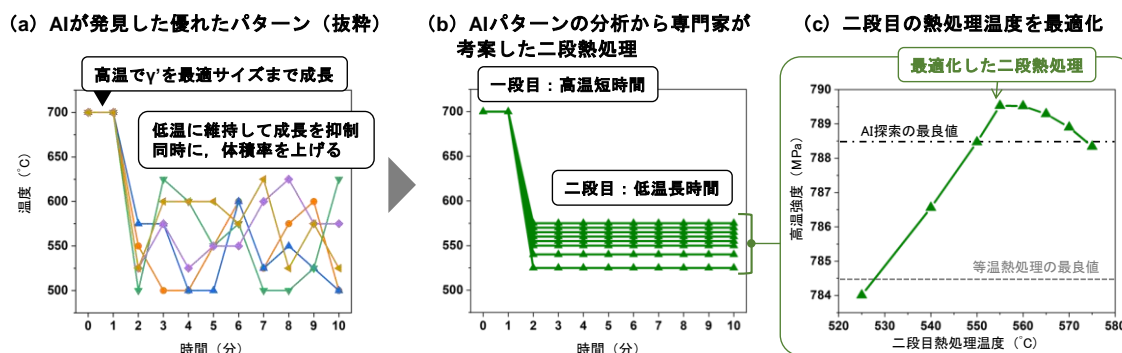


図 4 AI が発見した優れたパターンの抜粋 (a)。AI パターンの分析をもとに考案した二段熱処理 (b)。二段目の熱処理温度を最適化し、AI の発見した最良パターンよりも高温強度を向上できる優れた熱処理パターンを設計することに成功 (c)。

構想することができました。AI と専門家の共同作業の賜物といえます。将棋や囲碁では AI の棋譜をプロ棋士が深く考察するところから新しい戦法が生まれています。マテリアル分野においても、AI と専門家の共同作業から新しい考え方が生まれることを、本成果は示しています。

今後の展開

今回の AI と専門家の共同作業で開発した手法は、同様に析出物が強度を担う合金に適用できます。特に、本研究の Ni-Al 合金は実用的な耐熱材料であるニッケル基超合金のモデル合金であり、今回の成果の展開が期待できます。今後、より実用的な合金系への適用を進めることでガスタービンの燃費向上に寄与できるプロセスの改善方法を見出し、低炭素社会の実現に貢献することを目指します。

掲載論文

題目: Artificial Intelligence Inspired Design of Non-Isothermal Aging for γ - γ' Two-phase Ni-Al Alloys

著者: Vicky Nandal, Sae Dieb, Dmitry S. Bulgarevich, Toshio Osada, Toshiyuki Koyama, Satoshi Minamoto, Masahiko Demura

雑誌: Scientific Reports (doi: 10.1038/s41598-023-39589-2)

掲載日時：2023年8月4日

用語解説

- (1) Ni-Al 合金：Ni に少量の Al が添加された合金で、Ni と Al がランダムに配列した γ マトリックスに、Ni と Al が規則的に配列した γ' 相が析出した構造を有しています。 γ' は高温ほど強度が高いという性質があり、この相のサイズと体積率によって、合金全体の高温強度が左右されます。
- (2) 熱処理：析出物のサイズ、体積率を調整するために行う熱処理のことをここでは指しています。
- (3) モンテカルロ木探索：枝分かれする組み合わせを効率的に探索する AI アルゴリズム。スコアに基づいて有望な枝を選択して深掘りし、検証（本研究では数値計算によって高温強度を評価した）結果からスコアを更新するということを繰り返して、より優れたパターンを探索する手法です。将棋や囲碁など、一手ごとに選択肢が枝分かれし、組み合わせの数が指数関数的に増えるケースにおける効率的な探索手法として開発されました。
- (4) 原子の拡散：Ni や Al 原子が結晶の中で位置を変え、移動することを拡散と言います。原子の拡散によって、析出物は成長します。
- (5) 熱力学的に安定：エネルギー的に安定という意味で、低温では有利になります。

本件に関するお問い合わせ先

（研究内容に関すること）

NIMS 技術開発・共用部門 部門長 出村雅彦（でむらまさひこ）

E-mail: DEMURA.Masahiko@nims.go.jp

TEL: 029-860-4847

URL: https://samurai.nims.go.jp/profiles/demura_masahiko

（報道・広報に関すること）

NIMS 国際・広報部門 広報室

〒305-0047 茨城県つくば市千現 1-2-1

TEL: 029-859-2026、FAX: 029-859-2017

E-mail: pressrelease@ml.nims.go.jp