

# 鉄鋼材質予測のためのコンピューターシミュレーション技術

Method of Computer Simulation Technology for Predicting Material Properties of Steels

## 增井浩昭 Hiroaki Masui

帝京大学 理工学部 材料科学工学科 教授

# **(1)** はじめに

コンピューターによる鉄鋼の材質予測は、例えばデータ整理に使う統計的な相関回帰線の作成のレベルからネットワークを使った箇所分散型研究に至るまでその範囲は広い。また、厚板、薄板、電磁鋼板等各品種別の製品の材質予測は古くから品質管理の一環として各鉄鋼メーカーで独自に行われており、設備制約の中できめ細かく操業条件に反映されているが、ここではむしろ将来を見据えてコンピューターを有効に使った鉄鋼に応用できる材質予測という視点でとらえたい。コンピューターを使うと言っても材質にかかわる基本的な理論の構築や実験確認が重要であることに変わりなく、それらがコンピューターの演算能力と組み合わさって材質予測が可能となるわけで、3次元可視化やアニメーション等により実験を補完するような材質上の情報が得られることも少なくない。ここでは広範な研究の中からいくつかの例を挙げながらコンピューターによる材質予測の入門の一端を述べたい。

## **全** コンピューターでよく使われる 材質予測

#### 2.1 計算熱力学による組織制御

化学平衡反応で物質成分に依存する化学ポテンシャル $\mu$ i、モル数niに対し、Gibbs-Duhemの式: $SdT-VdP+\Sigma^i n_i d\mu$ i = 0が成立するが等温等圧ではGibbs-Duhemの法則 $\Sigma^i n_i d\mu$ i = 0が成り立つ。また別のGibbsの式から $\Sigma^i \mu_i dn$ i = 0が成立することから化学ポテンシャルやモル数は系内の他の成分のそれらを変えることなくしては変化させられないことが示され、これが平衡状態図や相律の原理となる。この式を使って多くの計算状態図が生まれてきた $^1$ )。1976年にスウェーデン王立工科大学で開発された CALPHAD(Calculation of Phase Diagrams)と呼ばれる相平衡計算に始まり $^2$ 3、今日

の市販の計算状態図ソフトThermo-Calc<sup>4,5)</sup>に至るまで熱力学的基礎式から計算で決定する計算熱力学状態図は材質予測に画期的な役割をもたらした。鉄鋼の場合、Fe-X-C (N) 系状態図が決まれば各温度における安定相の特定から析出物の特定もできる。最近のIF鋼における微細Nb、Tiの炭・窒化物の析出挙動は再結晶集合組織形成に重要である<sup>6,8)</sup>。ステンレス鋼の場合にはFe-Cr-Sの析出挙動が腐食性に大きく影響する<sup>9)</sup>。昭和50年代頃に厚板等で出鋼成分、加熱圧延条件等の操業データと材質データの組み合わせによる材質予測が行われたが、最近ではそれに計算熱力学を取り入れることにより非平衡状態での材質予測もある程度可能になってきた<sup>10)</sup>。金属間化合物等に比べ鉄鋼の場合かなりの熱力学基礎データがそろっているとは言え特殊なFe-Ga系<sup>11)</sup>や形状記憶合金のFe-Ni-Si 合金<sup>12)</sup>等の詳細な状態図は実験で細部を確認しなければ実用に供しない。

一方、熱力学的平衡を状態図作成以外に利用する試みもな されている。今、旧相  $\alpha$  と新相  $\beta$  の間で局所平衡が成り立 っているとするとこの平衡は旧相から新相への移行時には上 記のGibbsの熱力学的な平衡状態においてi成分の化学ポテ ンシャルの通常の局所平衡からのずれ、つまりソリュート・ ドラッグ効果 $\Delta \mu_i^{id}$ を抽出することが考えられる $^{13}$ 。界面エ ネルギー等の項 $f(\sigma)$  も考慮して  $\Delta \mu^{id}$  を 2 相  $\alpha$ 、 $\beta$  間で  $\mu_i^{\beta} + f(\sigma) + \Delta \mu_i^{sd} = \mu_i^{\alpha}$ のように組み込むことで、たとえば 極低炭素鋼の変態、拡散や再結晶挙動へのNbの効果を抽出 することができる。図 $1^{14}$ は鉄にNbを添加させたときの再 結晶の粒界移動速度の遅れをNb量の効果として計算した結 果であり、従来の析出物としてのNbの取り扱いへの新たな 解釈である。 Δμ<sup>sd</sup> は偏析した不純物濃度、拡散係数、偏析 エネルギーや析出物のZener 因子等から想定され、Thermo-Calcとの組み合わせで対象とする元素のソリュート・ドラ ッグ効果にGibbsの法則をあてはめればその効果が半定量的 に解明される。

一方、クラスター変分法<sup>15,16)</sup>という多粒子を統計力学的に扱う熱力学があり、規則格子や合金組成の自由エネルギーの計算を行う際に、ある相の原子配列に基づくエントロピーと内部エネルギーを求めることで未知の原子配列の相の内部エネルギーも導かれ、ひいてはその原子配列の出現する確率を求めることができ、相平衡だけでなく原子配列にいたるようなより詳しい局所的な平衡状態図の作成を可能としている。クラスターモデルの原子配列には標準として八面体位置や四面体位置などが考えられそこに種々の原子を置いて計算を行うことも多い<sup>17,18)</sup>。この方法は結晶の原子の対称性やさらに後述の分子動力学で使われるレナードジョーンズポテンシャルのような原子間相互作用エネルギーを自由エネルギーのエンタルピー計算に取り入れることで原子配列まで計算でき<sup>18)</sup>、さらに古典的分子動力学や電子論を取りこむことで第

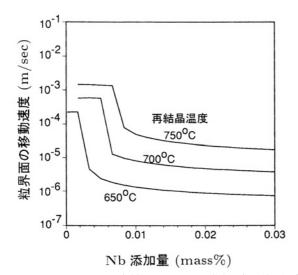


図1 ソリュート・ドラッグ計算による Fe-Nb 合金の各再結晶温度に おける粒界面の移動速度と添加 Nb 量との関係  $^{14)}$ 

一原理計算に近い厳密解が得られる一方、変数が増加した場合の統計力学となり計算時間が大幅に増大したときには現実的でなくなる。これを避ける目的でクラスター変分法を使わずに事象の発現確率を熱力学的な活性化エネルギーで置きかえることによるモンテカルロ法で代替する試みも行われており、コンピューターによる三元合金の規則不規則転移の説明等がなされている<sup>19</sup>。

#### 2.2 FEMによる材質予測

FEM (Finite Element Method、有限要素法) による材質 予測もコンピューターの進歩とともに幅広く行われるように なった分野である。力学系の応力解析分野ではたとえばプレ ス成型の張出し加工や深絞り加工の破断成形限界20)や複合 材料の応力解析21)等に使われる。一方、鉄鋼材料の応力ー 歪曲線や加工硬化能へのFEMの適用も盛んであり、たとえ ばフェライトーベイナイト2相鋼のベイナイト率の増大にと もなう降伏点伸びの減少22)や介在物有無による引張り破断 挙動の詳細<sup>23)</sup>など従来からある程度知見されていた現象の より定量化がなされた。FEMは多くの既存ソフトがあるが、 一方、独自にZienkiewicz等の理論<sup>24)</sup>等を参考にFEMプロ グラムを構築しVoidの量と応力-歪曲線との関係を計算す ることも試みられた<sup>25)</sup>。2次元の場合で示すと図2(a)<sup>25)</sup>に 示すようVoid周辺をFEMの基本の3角要素でメッシュ分割 し、3角要素点i、j、kからなる各辺ij、jk、kiへの力 $F_{ij}$ 、 $F_{jk}$ 、  $F_{ki}$ と試料座標軸x、yの応力 $\sigma_x$ 、 $\sigma_y$ 、 $\tau_{xy}$ 、……との関係式 が基礎となり、たとえば $F_{ij}$ のx成分は $F_{ijx} = (\sigma_x \upsilon_x + \tau_{xy} \upsilon_y) S_{ij}$ で表される。ここで $\upsilon_x$ 、 $\upsilon_y$ はx、yへのii面法線の方向余弦、 Sij はij 側の断面積を表す。このようにしてVoid 周辺のマト

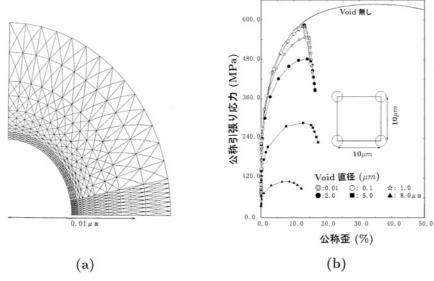


図2 FEM計算における (a) Void 周辺の金属マトリックスのメッシュ分割法と (b) 種々のサイズの Void を含む金属 (加工硬化指数: 0.3) の公称応カー公称歪曲線<sup>25)</sup>

リックスを3角要素でメッシュを構成し、力学的釣り合いを計算していくことにより、Void周辺のマトリックスの真相当歪の分布とともに試料軸y方向の応力、歪を求めており、マトリックスの加工硬化指数の低下とVoid、分散粒子の共存による鉄鋼材料の延性の急激な低下を予測している。たとえば図2 (b)  $^{25}$  はVoid直径と応力一歪曲線の関係を表す。ここでVoid は図のように一辺が $10\,\mu{\rm m}$ の正方形の各項点に直径 $0.01\sim8.0\,\mu{\rm m}$ の各Voidを配列したままこの間隔で ${\bf x}$ 、 ${\bf y}$ 方向に無限に存在するものと仮定している。

また、FEMは電磁鋼板の電磁界解析<sup>26,27)</sup>などにも使われる。図3<sup>28)</sup>は方向性電磁鋼板でのリング試験片内の磁束密度を図示したものであるが、このようにリング試料内を回転する磁束と方向性電磁鋼板の磁気異方性を組み合わせるために、まずリングの一部である三角形のショートケーキ状の小ブロックを作り次のそれと接する任意固定境界を設定しそれらをつなぐことで磁束を360°回転させながら、一方材質の磁気異方性は試料軸に固定するようにして置けばこのように磁束密度の流れが再現される。どのFEMにも共通しているのはメッシュ分割作成と境界条件設定の適否が計算予測の結果に重要な影響を与えるために、仮に既存のソフトを使う場合にもかなりの熟練を必要とする。

#### 2.3 分子動力学による材質予測

完全結晶を含め均質連続体の力学ならば有限要素法等で十分威力を発揮するが、結晶粒界のような不均質な固体や亀裂などでは分子動力学(Molecular Dynamics、MD)が有用になる。自由電子のような量子化されたものは扱えないが、たとえば金属原子が電子雲の中に正に帯電したイオンが詰め込まれていると考えることで計算を行う。これを原子埋め込み法(EAM、Embedded Atom Model)法と言い、よく使われるFinnis-Sinclair法ではN個の原子からなる原子系全体

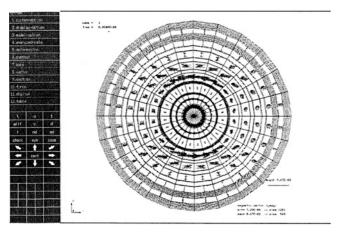


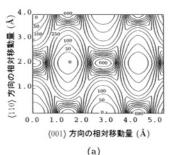
図3 電磁解析 FEM 計算による方向性電磁鋼板のリング試料での 磁束密度<sup>28)</sup>

のエネルギーは次の式で表わされる<sup>29)</sup>。

ここで、 $r_{ij}$ は原子iとjとの相対距離、 $f(\rho_i)$  は原子iの位置でi以外の原子が作る電荷密度  $\rho_i$ と原子iとの多体の相互作用エネルギーを表し、一方、 $V(r_{ij})$  は2個の原子i、jのイオンの斥力相互作用エネルギーを表す。実際の計算は両者とも金属の種類に対応したパラメーターと原子間の距離rの簡易式で表されるので、原子の配列さえ把握すれば計算はさほど手間がかからない $^{30}$ 。具体的には次式のように表される。

$$E = -A \sum_{k}^{N} \sqrt{\sum_{j}^{N} \{ (r_{kj} - d)^{2} + \frac{\beta (r_{kj} - d)^{3}}{d} \}} + \frac{1}{2} \sum_{i,j}^{N} (r_{ij} - c)^{2} (C_{0} + C_{1}r_{ij} + C_{2}r_{ij}^{2}) \cdot \cdot \cdot \cdot \cdot (2)$$

ここで∑の中の式はすべてF-Sモデルで与えられているパ ラメーター式である<sup>29)</sup>。通常のワークステーションではMD 計算は107個程度の原子数しか扱えないので小さなセルを考 え周期境界条件を与えてそれを繰り返す。このセルは何度も 繰り返して使うがその内外の原子の出入りによる増減はな い、つまりこの周期境界条件に囲まれる replica unit cell内 の原子数を一定にする方法でバルク状態を再現する。また MDでは運動方程式の位置や速度を定める必要があり、この ため古典的な運動方程式から原子の位置の時間発展 $r_i(t+\Delta t)$ を求める差分式を作る必要があり、 $r_i(t+\Delta t)$ 、 $r_i(t-\Delta t)$ をテーラー展開して両辺の和から離散化された時刻  $(t + \Delta t)$ での位置 $r_i$ 、tでの速度 $v_i$ を算出するVerlet法が便利である。 図4<sup>31,32)</sup>はF-S法を使って鉄の体心立方格子 (bcc) のバルク 状態での {110} 面内のすべりに必要な必要エネルギーを求 めたものである。〈111〉方向のすべりのポテンシャルエネ ルギーが〈110〉方向のそれよりも小さく、bccのすべり方 向が〈111〉であるという実験事実を傍証している。上記の



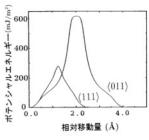


図4 EAM (Finnis-Sinclair) 分子動力学計算による bcc鉄の {110} 面内のすべり方向別ポテンシャルエネルギー。

- (a) ポテンシャルエネルギー等高線(50*mJ/m*<sup>2</sup>ピッチ)と
- (b) すべり方向別ポテンシャルエネルギーカーブ<sup>32)</sup>

ポテンシャルエネルギーを距離 $r_{ij}$ で偏微分して力を出すことも可能であり便利である。また、類似の計算により粒界の  $\Sigma$  対応方位別の粒界エネルギーも出るので電磁鋼板の二次 再結晶機構の解明等にも有効である。この程度の計算では 64bitのワークステーションで約2日程度で結果が出る。 EAM 法は他にも原子配列を考慮した転位挙動 $^{33-35}$ 、破壞 $^{36}$ 、Fe-H  $\Re 37$ 、水素脆化 $^{38}$ 、内部摩擦 $^{39}$ )等に幅広く使われ、F-Sモデルについても粒界破壊 $^{40}$ 、転位芯構造 $^{41}$ や引張り試験  $^{42}$ の計算がなされている。他にも古典的分子動力学で2体間のポテンシャルのみを扱ったものとしてレナード・ジョーンズ法 $^{43}$ 、Morse ポテンシャル法 $^{44}$  があるが計算は類似している。

一方、分子動力学では第一原理計算と呼ばれ原子の運動エ ネルギーを電子との作用、クーロン引力、斥力を考慮してシ ュレディンガー方程式により求める方法があり<sup>45,46)</sup>、その一 つは化学でよく使われる波動関数を用いる分子軌道法であ り、他の一つは結晶でよく使われるバンド計算法である。最 近は密度汎関数、第一原理擬ポテンシャルやそれらを使い電 子の状態を仮想運動エネルギーとして扱う Car-Parrinello 法47)の発見と分散メモリー並列型計算機の発達でこの第一 原理計算による結晶の理想強度や壁界破壊や粒界破壊48)、  $SiC^{49)}$ やAl-Mg合金 $^{50)}$ の粒界の原子同士のボンドのつながり を計算した第一原理引張り試験などで新しいナノ構造が解明 されつつある。これらの計算は精度は高いがかなりのコンピ ューターの計算容量を必要とするのが一般的である。これに 対しては電子状態の計算の収束を高めるために種々の工夫が なされてきているが<sup>51,52)</sup>、原子のすべりや粒界のポテンシャ ルエネルギーや計算熱力学に必要な原子間ポテンシャルエネ ルギー等の一般的な原子の位置、速度等の動きや比較的大き な系全体のシミュレーションを行う場合にはポテンシャルを 気軽に自由に扱える点で上記のEAMのような古典的分子動 力学の方が取り扱いやすい。なお、最近は古典的分子動力学 (レナード・ジョーンズ法) や第一原理計算 (Car-Parrinello 法)を取りこんだ分子設計支援ソフト53)が販売されており、 リラグゼーション後の原子配置も3次元可視化されたり便利 であるがそのソフト指定のワークステーションが必要である 場合がある。

# **3** 独自シミュレーションによる 材質予測

これはあえて上記のように体系化された一般的な計算手法や既製ソフトを使わずに、独自のシミュレーション手法を使うものである。コンピューターの演算機能を使うのは当然であるが、可視化も含め説得力を高めるにはプログラムの開発

努力も要求される。以下にいくつかの例を示す。

#### 3.1 ペンシルグライド理論による変形集合組織

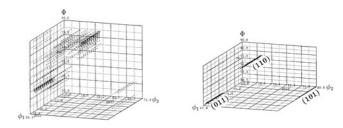
Taylorを始め種々改良構築されてきたペンシルグライド 理論<sup>54-58)</sup>も加藤-Dillamoreの研究<sup>59,60)</sup>によってbccに関して は完成された感がある。これはbccの {110} 〈111〉、{112} 〈111〉のすべり系を考慮し、それらの幾何学的条件のもと に最小すべりの法則を適用させたもので、圧延等の平面歪で も容易に予測できるので有用である。ペンシルグライド理論 の優れた点は非線型の解のため唯一の解析解が得られること で、コンピューターで扱いやすく特に可視化には最適である。 fccに関しても最近x [100]、y [010]、z [001] の結晶主軸の まわりの {111} 〈110〉 すべり系群のいずれかが最小すべり の法則に従って活動をするというモディファイドペンシルグ ライド理論が提唱された $^{61-63)}$ 。図 $5^{64)}$ はこの理論でfccの2軸 張出し試験の頂点部の結晶回転の様子を擬ダイナミック法で 表現したもので、これは多くの研究者65-67)が実験で確認して いるように2軸張出しの最終ではいかなるfccの金属でも板 面に垂直に〈110〉となる理由をアニメーション的に説明し ている。圧縮、圧延の安定方位もこの理論で予測できる。こ のような3次元可視化や加工率に伴う定量的集合組織の予測 やアニメーション化には前述の理由でペンシルグライド理論 はコンピューター化に適している。

#### 3.2 モンテカルロ法等統計的処理による二次再結晶予測

方向性電磁鋼板等に使われている一次再結晶後の高温焼鈍  $(1,200\,^\circ\mathbb{C})$  での異常粗大粒、すなわち二次再結晶生成のモンテカルロ法や統計的手法を利用したシミュレーションは多くの研究者によって行われている  $^{68-78}$  。これは基本的に Hillert<sup>79</sup>の提唱した粒成長予測式

$$\frac{dR}{dt} = AME \left( \frac{1}{R_c} - \frac{1}{R} \pm \frac{Z}{A} \right) \cdots (3)$$

に基づいている。ここで、R:粒径、t:時間、A:結晶粒の表面積を表す形状因子、M:粒界易動度、E:粒界エネルギー、 $R_c$ :成長と収縮の分岐点となる臨界粒径、Z:Zener



(a) 重: 42.6% (b) 重: 87.5% 5 fcc金属のモディファイドペンシルグライド理論による2軸張出 し試験片の頂点部の板厚歪量 (a) 42.6%と (b) 87.5%の結

晶方位の擬ダイナミック表現<sup>64)</sup>

<del>190</del> 34

因子、またAE/R。は粒成長駆動力の統計的期待値、-AE/Rは粒径Rの粒の収縮力、 $\pm ZE$ はインヒビターの粒界移動抑制力を表わしている。この式は本来一次、二次の両方の粒成長に適用されるようになっているが、隣接する2個の粒の二次再結晶にこの式を変形させて

$$\frac{dR_i^H}{dt} = \sum_{K} \sum_{j} a_j^K M^{HK} \left( \frac{A_j E^K}{R_j^K} - \frac{A_i E^H}{R_i^H} \pm Z E^{HK} \right) \cdots (4)$$

が提唱された $^{70-72}$ 。結晶粒は方位クラス1、2、……、H、…  $\cdots$ 、K、 $\cdots$ と粒径クラス1、2、 $\cdots$ 、i、 $\cdots$ 、j、 $\cdots$ を 有し $R^n$ は方位がHクラス、粒径がiクラスの粒の粒径である。  $M^{HK}$ と $E^{HK}$ は方位Hと方位Kの粒が隣接する粒界の易動度お よび粒界エネルギーである。 $a_i^K$ は全結晶粒の表面積和に対す るiK 粒の表面積和の比であり、これは任意の粒(この場合は R! 粒)に注目したときのその粒がiK粒と接する確率を表す。 図680)は上記の理論で計算させたもので磁性に好ましい Goss 方位の '6' の二次再結晶粒の体積割合は一次再結晶粒 が $12\mu$ mのときはほぼ100%に近いが、 $11\mu$ mで90%、  $10 \mu m$ や $12.9 \mu m$ のときは80 %程度まで落ちることを表わ している。統計的手法はこのように定性的には、たとえば電 磁鋼板の二次再結晶の粒成長挙動やインヒビター強度の減少 程度とGoss方位の先鋭化<sup>81)</sup>等をよく再現する。好ましくは 各方位クラスの粒界エネルギーや易動度の定量化が必要であ り、実験82-84)としては一次再結晶粒と Σ9対応方位にある二 次再結晶Goss粒の優先成長方位関係が注目されている。さ らに別の実験<sup>85)</sup>では Σ9 対応方位は高易動度の高エネルギー 粒界であると言われている。一次再結晶の集合組織形成に対

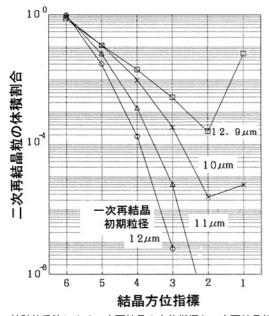


図6 統計的手法による二次再結晶の方位指標と一次再結晶初期粒径 との関係('2'~'6':二次再結晶方位、'1'~'6':一次再結晶 方位、'6'=Goss方位)<sup>80)</sup>

しても異なる方位の2粒間 (粒界)を方位差の平均値を与え核生成サイトとし、一方粒成長駆動力は変形した粒とその核との方位差が大きいほど大きいとしたモデル $^{86,87}$ もあり、実測した冷間圧延集合組織をベースに方位をEuler角 ( $\phi$ 1、 $\Phi$ 、 $\phi$ 2)をモンテカルロ法で与えて再結晶集合組織を再現させている。方位差をスカラー値で与える方法は次節でも述べるが他に方法が見当たらない場合には一次近似的には有用である。上述の二次再結晶の統計的シミュレーションでは具体的に方位のEuler角を扱ってはいないが方位の異なる粒の粒界エネルギー等にスカラー値で順位付けしている点で同類であろう。この点では再結晶シミュレーションは純粋に個々のすべり系から歪テンソルですべりの非線型理論を扱う冷間集合組織の形成予測とは異なった難しさがある。

#### 3.3 Phase Field法による粒界挙動予測

結晶方位や相の異なる2つの物質の境界を表現する方法として注目されてきている研究に Phase Field 法がある。  $Fan^{88)}$ らの定義では、これは不均一系の全エネルギーFを下記左辺の局所的な自由エネルギー密度 $f_0$ と右辺の勾配エネルギー項の関数に置き換える。

$$F = \int \left[ f_0(\eta_1(r), \eta_2(r), \dots, \eta_p(r)) + \sum_{i=1}^p \frac{\kappa_i}{2} (\nabla \eta_i(r))^2 \right] d^3r$$

ここで注目すべきは  $\eta_i$ という結晶方位場を表す変数パラメーターを導入するものでFanらは図 $7^{88}$ のように記述している。つまり、自分の粒内の結晶方位は1とし、隣接する他の粒のそれを0として粒界は段階的に距離に応じてで案分させた値をとる。これにより、たとえば方位の異なる二つの粒の粒界に有限の厚みをもたせることもできる。デンドライトの凝固などでは固相を1とし、液相を0とする $^{89}$ 。また、 $\eta_i$ を時間の関数とすれば $\partial\eta_i(r,t)/\partial t$ は局所的な結晶方位場変数  $\eta_i$ の発展成長率を表すのでこれも上式のFを  $\eta_i(r,t)$  で偏微分することで求められる。さらに結晶方位場変数  $\eta_i$ から  $\varphi(r) = \Sigma_{i=1}^{p_i} \eta_i^2(r)$  という関数を定義するとこの関数は

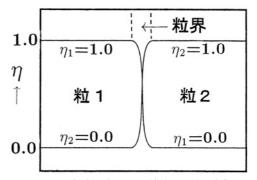


図7 Phase Field法(Fan)による隣接する結晶方位場  $\eta_1$ 、 $\eta_2$ と '粒界'との関係の模式図 $^{88}$ 



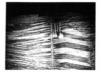
図8 bcc鉄の異なる結晶方位粒の粒界をPhase Field類似法で隣接 させた3個粒の圧延における変形シミュレーション9

1.0 (粒内) ~0.…… (粒界) と表せるので、これを濃度に置 きかえれば結晶粒と結晶粒界が識別でき粒成長90,91)やデン ドライトの成長92)の可視化が可能となる。また自由エネル ギーには濃度関数をもちこむこともできるので相分解、相変 態%)や析出挙動%にも適用できる。Phase Field法での結晶 方位や相を1~0の間にスカラー値化してその段階的変化を 取るという概念を受け入れることは物理的に必ずしも容易で はない<sup>95)</sup>。しかしながら便宜的には有用で、図8<sup>96)</sup>はコンピ ューター上で3つの結晶方位の異なるbcc 鉄結晶粒を圧延変 形させる際に各粒間(粒界)の9個の歪テンソル、回転成分 を隣接する粒のそれらからFanらの概念と同様に距離に比例 案分させた重み付けで与えたPhase Field類似法で可視化し たものだが、その物理的意味はややあいまいなものの、粒界 も両隣接粒に合わせて比較的なめらかに変形し、別により厳 密解により粒界変形を求めた方法<sup>97)</sup>との差は以外に小さく、 計算速度も格段に早いので便宜的にしばしば使われている。 他にもPhase Field法とクラスター変分法の組み合わせ<sup>98)</sup>、 フラクタルとの組み合わせ99)等があり、今後の進展が期待 される。

#### 3.4 熱延冷却中のオンライン変態予測

これはある意味では鉄鋼の中での材質予測の最も重要な部 分であるが、一種の加工熱処理の応用である。一つの試み  $^{100)}$ は熱間圧延と  $\gamma \rightarrow \alpha$  域での熱処理が高速でからみあうホ ットストリップ工程での材質予測をCahnの核生成ー変態予 測式<sup>101)</sup>や成長速度の推定のためにZener-Hillertの理論<sup>102)</sup> を使い、一方ホットランテーブルでの鋼の冷却の変態潜熱の 発生を考慮した2次元熱伝導方程式で温度変化を取りこみ、 この両者を組み合わせてホットストリップ材質を劣化させる ベイナイトの生成抑止限界を推測している。高速熱延操業で の材質予測の難しい点は正確な温度予測である。実際には理 論と操業との差を修正するために実験操業後のフェライト、 パーライト、ベイナイト等の材質の確認による実験係数の修 正が必要であるがこのような高速操業でのオンライン鉄鋼材 質予測は今後ともコンピューターの最も重要な活用の一つで ある。







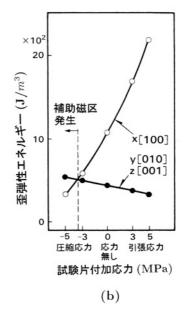
1mm

圧縮応力無し

圧縮応力: 4 MPa

圧縮応力: 6 MPa

(a)



方向性電磁鋼板を圧延方向(図の水平方向)に応力付加したと きの(a)補助磁区(図の垂直方向)発生の走査型電子顕微鏡 写真と(b)理論予測結果<sup>105)</sup>

#### 3.5 電顕観察と力学計算による磁歪発生予測

コンピューターによる材質予測も地道な実験を元にある種 の法則に従う解析解を見つけるとたいへん有用な場合があ る。変圧器の騒音はもとになる方向性電磁鋼板の補助磁区 (90° 磁区) の発生が原因であることは古くから知られてい た103)。図9104,105)は方向性電磁鋼板の試験片に走査型電子顕 微鏡内で圧延方向に圧縮応力と磁場を加えながらこの補助磁 区の発生状況を観察し、それをもとに主磁区 (180°磁区) の 方向に平行な結晶のx [100] 主軸の力学的な弾性エネルギ ーよりもそれと直角のy [010] 主軸、z [001] 主軸方向のそ れらが大きい場合に補助磁区が発生するとの仮説を立てて比 較したものである。磁歪発生への電磁鋼板の被膜張力、外部 応力や疵による残留応力の影響がコンピューターで予測で き、2軸応力下の磁歪発生の実験結果<sup>106)</sup>をも予測し実用に 適していることがわかったが、この例のように電子顕微鏡に よる磁区観察等の実験事実の裏づけから磁歪発生への応力の 影響を体系化し定量的に外部応力、被膜張力、溝残留応力等 の影響を予測したコンピューターシミュレーションは材質予 測のあるべき基本的な方向であり、より実用的である。今後、 磁区と粒界方位差の観察等興味深い物性研究でさらに材質予 測が進展されるであろう107)。

#### 3.6 プレス加工の耳の発生予測

材料物理学の基本的な理論からコンピューターにより近似的に成型等の外形的な姿を予測することも材質予測の一つである。缶の深絞り加工では円筒部の数カ所に耳 (earing)と称する突起状の不要な部分が生じ、歩留まりを低下させている。これをbccの全てのすべり系の組み合わせ48通りからある面指数の鋼板の360°方向のSchmid因子を計算し、これをすべり量に置き換えて合計のすべり量をスカラーとして取り出すことで一応の計算ができる108-110)。



### 新しいアイデアによる 材質予測の例

コンピューターの利用は多方面に広がり、従来と異なった 材質予測法を産み出す。ここでは例としてニューラルネット、 画像処理、感性工学、3次元可視化、ネットワークを取り上 げる。

#### 4.1 ニューラルネットによる予測

ニューラルネット法の利用は鉄鋼業においては比較的古く、1980年代頃から例えば連続焼鈍材の表面疵の原因特定等に使われていた。製鋼、連続鋳造、熱間圧延、酸洗、冷間圧延、連続焼鈍と多岐にわたる工程の中で、表面疵の大きさ、形状等がどこの工程ともっとも因果関係が深いかをニューロンを使って調べられた。ニューロン (neuron) は神経細胞のことで要因となるスカラー入力qがその強さに重みwが掛けられ重み付けされてw\*qとなり、さらにバイアスb (これも一種の重みのようなものであるが)を適宜加算していく。この両者の和がスカラー出力を作成する伝達関数の引数となる。これを順次加算結合することでニューラルネットとして構成されて行くものである。伝達関数には入力のw\*qとバイアスの大きさを比べてqがーb/wを超えると0から1にジャンプするステップ関数と0から1に勾配をつけてなめら

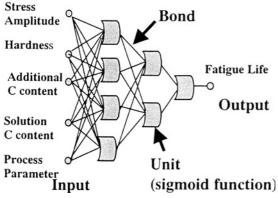


図10 工具鋼の疲労寿命を予測するニューラルネットワークの 構造図<sup>112)</sup>

かに上昇するシグモイド関数が主に使われる。なお、ニューラルネットもパソコンで十分使える個別売りの市販ソフト<sup>111)</sup>があるので便利であるがソフト指定のC言語ソフトがインストールされていること等の制約はある。最近材質予測にも使われるようになり、図10<sup>112)</sup>では工具鋼の疲労寿命予測にこのようなニューラルネットを構成させ、マルテンサイト基地の固溶C量が疲労寿命に大きな影響を及ぼすことを明らかにした。これ以外にも特に複雑な要因のからむ耐熱材料のクリープ寿命予測等に応用されている<sup>113)</sup>。

#### 4.2 画像処理による材質予測

画像処理は本来肉眼では判別しにくい物体や図面を特殊な 強調法によって識別しやすくする手法でこれもコンピュータ ーの得意とするところである。数種類のサンプルの特徴との 差を比べてどれかにあてはめてしまうテンプレートマッチン グ法、ある図形を骨格処理で特徴付けしこれから細線化法で 等高線図のようにして識別しやすくする方法、結晶粒界の強 調化および連結による粒度分布測定法、2つの濃度に単純化 する2値化法と連結処理の組み合わせでパーライトの面積率 を定量化する方法等数え上げたら切りがないほどその技法は 多いが114,115、大半はパソコン用の市販のソフトで使えるよ うになっており、最近の光学および電子顕微鏡にはすでにソ フトを付属していることが多い116。これらは原理、プログ ラムも簡単であり取り組みやすい。図11117)は平坦化法で低 炭素鋼の光学顕微鏡組織の一部の矩形領域を鮮明化させたも のである。平坦化法は画素毎に原画の濃度レベルを出した後、 濃度レベルの高い画素から順に低い方へ平均画素数 (全画素 数÷濃度レベル数) 個の濃度を高い方から順に均等に割り付 けていく方法であるが、このような単純な画像処理でもかな り不明瞭な組織写真図の鮮明化にも効果がある。画像処理は

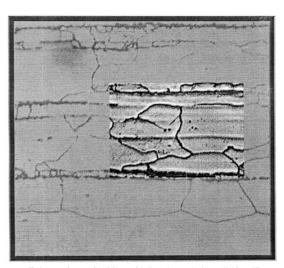


図11 画像処理(平坦化法)で低炭素鋼の光学顕微鏡組織の一部を 鮮明化させた組織写真図<sup>117)</sup>

残念ながら断層写真等の特殊な例外を除いて2次元平面的な画像処理が一般的であり、材質予測としても2次元画面識別の類が多いのが特徴だが、工夫をするとさらに高度の材質予測の知見が得られることもある。たとえば鋼板の結晶粒に氷酢酸化学腐食法でエッチピットを出した後、平坦化法でエッチピットの各辺直線部分の輪郭を明瞭に出し、これの座標を読むことで立体幾何学的な計算を行い面指数、圧延方向指数を出すこともできる<sup>118</sup>。この手法は圧痕で微小領域の弾性挙動を解明するナノインデンテーション試験<sup>119-123</sup>)にも応用できると思われる。この場合、顕微鏡画像をコンピューターに取りこんで直接観察しながら結晶方位を出せるので操作が容易で全体観を目で追いやすい利点もある。

#### 4.3 感性工学による材質予測

単に強度、硬さ、絞り値などの材料物性値だけでは表わせ ない材質がある。古くから火花試験で鋼中のC量を推定した り、また熱したこてをあてたときのハンダ金属の溶融性の触 感なども一種の感性工学と言えよう。金属組織の印象イメー ジなども含まれる。ニュートンのりんごのように材料開発や 新理論も発端となる部分は直感的な思考、感性に依るところ が多く、これらの感性をコンピューターの中でニューラルネ ットなどで有機的につないだり、とりわけ3次元可視化する と視覚に訴える分、頭に残る印象が強くこれが新たな発想の 引き金になることは容易に想像できる。一つの試み124-126)を 紹介する。Ti-6Al-4V合金の熱処理の違いで顕微鏡組織を変 え、アンケート方式で組織の類似度を評点化して分類しても らう官能検査を行い、個人間の差を有意差チェックするとと もにその類似度が球状・針状や粒状・層状等の組織の形態、 サイズ等の分類から来ていることを統計的に分析整理した。 さらにこれらの官能検査による組織上の分類と引張り強さ、 伸び、絞りとが相関性があることを見つけ、最終的にこれら の感性から来る評点は材料の物性値とも密接に関係しており 材質予測のひとつの方法になりうる、としている。このよう な材質予測法は手間の多いわりに精度的に難があると思われ 勝ちであるが、それはその合金系あるいは他の金属組織を多 く知見している研究者の思いであり、たとえばまったく異分 野の材料を初めて扱う研究者にとっては組織に対する官能検 査は直感の働く貴重な情報源として評価されてよい。とりわ けコンピューターでは統計的整理が客観的かつ迅速に行われ ることがあり、上述のニューラルネットや画像処理と組み合 わせたり、各種のナノ機構予測理論を取り入れると今後さら に発展する可能性がある。

#### 4.4 3次元可視化とアニメーションによる材質予測

最近は優れた3次元可視化やアニメーションのソフトがパ

ソコンでも使えるようになり材質予測にも威力を発揮してい る。歴史的に振りかえって見ると、以前はUNIXワークステ ーションのXウインドウシステムが可視化の標準であり、 Xlibをグラフィックスライブラリとして使っていたが、それ には高性能のグラフィックスアクセラレーター活用のための 3次元APIの標準化が必要であった。この時期にシリコング ラフィックス (SGI) 社が開発した可視化用の OpenGL (Graphics Library) が3次元APIの実質上の標準となった。 OpenGLとはグラフィックスのためのハードを動かすソフ トウェア・インターフェイスのことで約350種類のグラフィ ックス・ルーチンを収めたライブラリとなっている<sup>127)</sup>。た とえば照光下の球体の可視化等である。プログラマーはこれ らのルーチンを組み合わせて3次元のカラー画像を出せる。 したがって現在ほとんどの3次元可視化のソフトはOpenGL 仕様であり、UNIXワークステーションは基本的にOpenGL が可能であるがパソコンでもそれを可能とする専用ボードを 売っている。材質研究者が最初からOpenGLでプログラム を作ることはたいへんで実際は市販の可視化ソフトを使う。 世界で最も普及している可視化ソフトのひとつAVS<sup>128)</sup>の例 で可視化の原理を説明してみよう。可視化にはあらかじめ指 定されたフォーマットでデータを出力しなければ可視化ソフ トはデータを読めない。したがってデータの出力には通常C 言語等でファイル出力されるように材質予測プログラムを作 る。結晶の表現でとりわけ重要なのはメッシュの3次元表示 の出力であり、一例として図12129にCプログラムと出力結 果の一部を示す。つまり格子点を幾何学的な順序で番号を付 けそれぞれにデータを与える。可視化ソフトは出力ファイル にソフト固有の識別子(この場合は…….inp)をつけておい てやれば自動的に読みこむ。次にソフトはこのデータを加工 し、図形データへのマッピング、レンダリングというデータ 変換・連結作業を経て画像として自動的にディスプレイす

```
-0.300000 -0.600000 -0.300000
-0.200000 -0.600000 -0.300000
-0.100000 -0.600000 -0.300000
/* u c d ファイルのヘッダ出力 */
fprintf(wfp, "%d %d 3 0 0\n", node, cell);
for( dz=-3 ; dz<4 ; dz++ )
    for( dy=-6 ; dy<1 ; dy++
         for( dx=-3; dx<4; dx++)
             /* メッシュデータの牛成 */
              Y = ((double) dy)/10.0;
Z = ((double) dz)/10.0;
                                                                                -0.100000
              fprintf(wfp, "%d %f %f %f\n", n , X , Y , Z ) ;
                                                                            18 0.000000
                                                                            19 0.100000
                                                                            20 0.200000
                                                                            21 0.300000 -0.400000
                                                                                                      -0.300000
                                                                                                        -0.30000
                                                                               -0.100000 -0.300000 -0.300000
                            (a)
                                                                                              (b)
```

図12 3次元可視化による立方晶メッシュを出力させる

- (a) Cプログラムの一部分と
- (b) 出力されたノード値およびセルの各ノード点の座標の一部分<sup>129)</sup>

る。この過程で可視化までの処理を小さな作業単位、たとえ ばスカラー値読みこみ、3軸座標割りつけ、Postscriptファ イルへ出力等多岐に分けてそれぞれをモジュールとしてアイ コンのように独立させて階層的に並べたマルチプラットフォ ームとなっており、使用者はこれらをマウスで組み合わせる ことができ、任意のデータ入力および可視化表示が可能で慣 れると使いやすい。モジュールも自分の開発したCプログラ ムで追加できる。初めから完成された例えば有限要素法や分 子動力学等の市販ソフトの便利さも必要だが、自分でソフト 読み込み用出力データのプログラム作成という開発要素もあ る分、可視化の範囲も広く汎用性は高い。さらに時系列に出 力させたデータをつなぐモジュールによってセミアニメーシ ョン可視化ができバーチャルリアリティも可能である130)。 図8は連続する3つの異なる方位の結晶を圧延変形させたと きの可視化の例であり、さらに変形のアニメーションも可能 である。今後の材質予測には欠かせないツールの一つであ る。

#### 4.5 ネットワーク活用による材質予測

コンピューターネットワークも種々あり、ハイパーテキス ト (Hyper Text Markup Language、HTML) を使ったホー ムページを基本としアイコンメニューをクリックするだけで 多くの世界的な情報が得られるWWW (World Wide Web) 方式のインターネット、個人間での文書やりとりを基本とす るE-mail、ローカルホストマシンと各サーバーへの経路を ふるい分けするゲートウエイ・サーバーを介して組織内・外 部との交信が可能なローカルエリアネットワーク (LAN)、 さらに個人やワークショップ内の机上のワークステーション やパソコン、プリンター等をつなぐイーサーネット等数えた ら切りがない。材質予測に必要な材料関係のデータベースも 当然ながらLANを通して取りこむことができる<sup>131-135)</sup>。ハン ドブック的なコンピューター上の閲覧もあれば、さらに進ん で材料の比熱、密度等を入力すると最適な溶接条件を出力し てくれるオンライン材質設計支援システムも開発されている 136)。大学や国立の研究所等の公的研究所では鉄鋼材料の組 織予測、合金設計、拡散係数、分子動力学、画像情報等を誰 でもアクセスすれば提供してくれるところもあり、便利であ る <sup>113, 137-139)</sup>。 ケンブリッジ大学の MAP (Materials Algorithms Project) <sup>137)</sup>は有名であるが、そのねらいの一つは利 用する側のユーザーも自己のソースデータ等を提供してお互 いにより豊富な情報源ネットワークを構築することにあり、 たとえばそのためのソース書きこみ用に言語はC、C++か Fortran77,99を指定しており、それなりのルールが要求さ れる。しかしこれはたいへん重要なことで一般に数年後にし か最新情報を追加しない市販本との大きな差であり、日々最

新の世界中の材質データが自由に使えてそれをもとに材質予測ができるとすればその効果は計り知れない。一方、可視化ニーズの拡大とインターネットやWWWブラウザの普及に伴い3次元画像の転送も増えてきたがこれには画像ソフトをWeb上で動かすためにHTMLからCGI (Common Gateway Interface)のプログラムを経て可視化ソフトを呼び出すことでWebブラウザーから可視化サーバを操作する方法等が取られている。このような可視化データの転送技術は緊急性を前提とする医療データ分野では必須であり127,140)、最新のMRIや高速のCTスキャン、3次元計測器の開発が3次元ボリュームデータの転送を容易にしており、今後材質予測分野への応用が期待できる。

## (5) 終わりに

コンピューターによる材質予測は他にも無数あり、それら を限られた紙面でまとめるのは容易ではない。それらは適切 な専門書に譲って、むしろ優れた先駆者の苦労や微力ながら 自らの経験から今後志向する初歩研究者へのなんらかのアド バイスとして役立てればと考える。最近よく使われ成果をあ げているEBSPのような方位解析器にも言えるが古典的な原 理、理論がコンピューターの発達とともに新たな研究分野を 切り開くことが多い。計算熱力学、FEMも同様である。コ ンピューター性能の飛躍的な向上がなければ日常的に分子動 力学や3次元可視化、アニメーション等を材質予測に使うこ とは考えにくい。さらに高速化することによりオンライン材 質予測が実用的に普及することが期待される。しかしながら いずれの場合も洗練されたアルゴリズムやC言語、フォート ラン、最近はPerl等のプログラム言語技術が伴なわないと 迅速な計算、高度の可視化、材質予測は不可能であり、それ には極力日ごろ各研究者が自前でそれらを作り、専門のプロ グラマーの指導でレベルアップしていく努力をぜひお勧めし てしめくくりたい。

#### 謝辞

研究の進め方で多大な助言をいただいた新日本製鉄鉄鋼研究所の久保田猛氏と画像可視化処理等のプログラミングに努力した帝京大学理工学部宇梶仁氏に感謝します。

#### 参考文献

- 1) 石田清仁,大沼郁雄:計算機シミュレーションを用いた材料開発の基礎と応用,日本金属学会セミナー, (1998).1.
- 西沢泰二:日本鉄鋼協会西山記念技術講座,131(1989),
   19.

- 3) 石田清仁: 状態図の基礎から応用まで, 日本金属学会 セミナー, (1987), 49.
- 4) B. Sundman, B. Jamsson and J.-O. Andersson: CALPHAD, 9 (1985), 153.
- 5) CRC 総合研究所 (http://www.crc.co.jp), (2000)
- 6) 日本鉄鋼協会基礎研究会極低炭素鋼板研究会報告書, (1993)
- 7) 大谷博司:CAMP-ISIJ, 10 (1997), 452.
- 8) 岡本 力, 末広正芳, 岸田宏司: CAMP-ISIJ, 10 (1997), 453.
- 9) 及川勝成, 鷲見新一, 大谷博司, 石田清仁: CAMP-ISIJ, 10 (1997), 456.
- 10) 橋本 保: CAMP-ISIJ, 10 (1997), 588.
- 11) 池田 靖, 大沼郁雄, 貝沼亮介, 石田清仁: 日本金属 学会講演概要, (2000) 127, 311.
- 12) 檜室義幸,大沼郁雄,貝沼亮介,石田清仁:日本金属 学会講演概要,(2000)127,311.
- 13) M. Suehiro, Z.-K. Liu and J. Ågren: Acta. mater., 44 (1996), 4241.
- 14) 末広正芳:計算機シミュレーションを用いた材料開発 の基礎と応用、日本金属学会セミナー、(1998)、103、
- 15) R. Kikuchi: Phys. Rev., 81 (1951), 998.
- 16) 毛利哲雄:計算機シミュレーションを用いた材料開発 の基礎と応用、日本金属学会セミナー、(1998)、25.
- 17) 足立裕彦, 田中 功:まてりあ, 36 (1997) 9, 829.
- 18) 小野寺秀博, 下野昌人:日本金属学会講演概要, (1999) 124, 326.
- 19) 丸川健三郎, 茂木 真:日本金属学会講演概要, (2000) 127, 306,
- 20) 小野直人, 札軒冨美夫, 小森唯志, 吉田 亨:CAMP-ISIJ, 9 (1996), 1323.
- 21) 本田紘一, 香川 豊:MARC事例報告集, 13 (1993), 121
- 22) 村岡隆二,遠藤 茂: CAMP-ISIJ, 12 (1999), 1305.
- 23) 吉田博司, 勝元 弘, 南雲道彦:日本金属学会講演概 要, (1999) 124, 412.
- 24) O. C. Zienkiewicz and R. L. Taylor: The Finite Element Method, 4th edition, McGRAW-HILL BOOK COMPANY, London, (1994)
- 25) 白石春樹: NRIM. SR-98-01, (1999)
- 26) 植山高次,梅津健司:新日鉄技報,341(1991),23.
- 27) 中田高義,高橋則雄:電気工学の有限要素法,森北出版,(1992)
- 28) 川鍋知英, 芳谷直治, 增井浩昭:帝京大学理工学部材料科学工学科卒業論文, (1997)

- 29) M. F. Finnis and J. E. Sinclair: Phil. Mag., 50 (1984),
- 30) R. Watanabe, A. Nogami and T. Matsumiya: Mater. Sci. Forum, 204-206 (1996), 227.
- 31) R. Watanabe, T. Asami, H. Ukaji, Y. Ishikawa and H. Masui: Proc. THERMEC'2000, 3 (2000)
- 32) 浅見俊夫,石川陽一,宇梶 仁,渡辺隆治,增井浩昭:日本金属学会講演概要,(2000) 127, 154.
- 33) 堂山昌男:日本金属学会講演概要, (1999) 124, 48.
- 34) 下村義治,向田一郎,杉尾健次郎,桐谷道雄:日本金属学会講演概要,(1999)124,49.
- 35) 文 矛, 顔 慶雲:日本金属学会講演概要, (2000) 127. 232.
- 36) 楠 克之,中村森彦:日本金属学会講演概要,(1999) 124,48.
- 37) 文 矛,福山誠司,横川清志:日本金属学会講演概要, (1999) 125, 289.
- 38) 許 学軍,文 矛,福山誠司,横川清志:日本金属学会講演概要,(1999)125,295.
- 39) 谷口大輔, 井出直樹, 浅野 滋:日本金属学会講演概要, (2000) 127, 509.
- 40) 屠秋,小野寺秀博,山本良一:日本金属学会講演概要, (1999) 124, 277.
- 41) 後藤卓史,安藤新二,頓田英樹:日本金属学会講演概要,(1999) 125,156.
- 42) 金子竜太,相原智康,川添良幸:日本金属学会講演概要,(2000)127,237.
- 43) 村田雅人,向井喜彦:鉄と鋼,80(1994)2,172.
- 44) L. A. Girifalco and V. G. Weizer: Phys. Rev., 114 (1959) 3, 687.
- 45) 川添良幸:まてりあ, 37 (1998) 7, 583.
- 46) 丸山 豊, 大野かおる:まてりあ, 37 (1998) 7, 573.
- 47) R. Car and M. Parrinello: Phys. Rev. Lett., 55 (1985), 2471.
- 48) 呂 広宏,鈴木 晃,伊藤 彰,香山正憲,山本良 一:日本金属学会講演概要,(1999) 125, 369.
- 49) 香山正憲:日本金属学会講演概要, (2000) 127, 153.
- 50) 魯 広宏, 香山正憲, 山本良一: 日本金属学会講演概要, (2000) 127, 152.
- 51) 石井 聡, 大野かおる, 川添良幸: 日本金属学会講演 概要, (1999) 124, 269.
- 52) 褒 英造,大野かおる,川添良幸:日本金属学会講演 概要,(1999) 124, 269.
- 53) 分子設計支援ソフトウエア Discover, Cerius 社, (1998)

- 54) G. I. Taylor: Proc. Colloq. Deformation and Flow of Solids, Madrid, (1955), 3.
- 55) J. W. Hutchinson: J. Mech. Phys. Solids, 12 (1964) 11, 25.
- 56) 大久保忠恒:塑性と加工,9(1968),681.
- 57) H. R. Piehler and W. A. Backofen: Met. Trans., 2 (1971), 249.
- 58) R. Becker: Scripta. Metall., 32 (1995) 12, 2051.
- 59) I. L. Dillamore and H. Katoh: Proc. Conf. Quant. Texture Analysis, (1971)
- 60) I. L. Dillamore and H. Katoh: Metal Science, 8 (1974). 21.
- 61) H. Masui: Acta mater., 47 (1999) 17, 4283.
- 62) H. Masui: Proc. ICOTOM-12, 12 (1999), 381.
- 63) H. Masui: Proc. ICOTOM-12, 12 (1999), 279.
- 64) H. Masui, H. Ukaji and H. Katoh: Proc. THER-MEC'2000, 3 (2000)
- 65) S. Kohara: Proc. ICOTOM-6, 6 (1981), 300.
- 66) R. D. Starczan and R. Baro: Proc. ICOTOM-6, 6 (1981), 308.
- 67) Y. Zhou and K. W. Neale: Acta Metall., 42 (1994), 2175.
- 68) T. Nakayama and Y. Ushigami: Proc. 7th Int. Symp. Metal. Mat. Sci., RISO, (1986), 463.
- 69) G. Abbruzzese and K. Lucke: Acta Metall., 34 (1985), 905.
- 70) 武智 弘:日本金属学会報, 26 (1987), 619.
- 71) T. Nakayama and Y. Ushigami: Materials Science Forum, 94-96 (1992), 413.
- 72) G. Abbruzzese, K. Lucke and H. Eichelkraut: Proc. ICOTOM-8, 8 (1988), 693.
- 73) G. Abbruzzese and K. Lucke: Materias Science Forum, 204-206 (1996), 55.
- 74) A. Nogami, T. Matsuyama and Y. Fukuda: Materias Science Forum, 204-206 (1996), 303.
- 75) 小林正和, 高山善匡, 杜澤達美, 加藤 一, 斎藤宏和: 日本金属学会講演概要, (1999) 124, 347.
- 76) 清水正義,野村 浩,松原秀彰,近藤鋭治:日本金属 学会講演概要,(1999) 124,347.
- 77) 若井史博, 榎本尚也, 小川 浩: 日本金属学会講演概 要, (1999) 125, 553.
- 78) Y. Takayama, M. Inoue, T. Tozawa, H. Kato and M. Kobayashi: Proc. ICOTOM-12, 12 (1999), 884.
- 79) M. Hillert: Acta Metall., 13 (1965), 227.
- 80) 中山 正:学位論文, 京都大学, (1993), 126.

- 81) 牛神義行,中村修一: CAMP-ISIJ, 13 (2000), 1203.
- 82) J. Harase and R. Shimizu: Acta Metall., 38 (1990), 1849.
- 83) J. Harase, R. Shimizu, J. Kim and J. S. Woo: Proc. ICOTOM-12, 12 (1999), 1009.
- 84) Y. Ushigami and T. Kubota: Proc. ICOTOM-12, 12 (1999). 981.
- 85) Y. Hayakawa, T. Takamiya and M. Kurosawa: Proc. ICOTOM-12, 12 (1999), 1101.
- 86) 早川康之:計算機シミュレーションを用いた材料開発 の基礎と応用、日本金属学会セミナー、(1998)、83.
- 87) 稲垣裕輔:日本金属学会誌,50 (1986),250.
- 88) D. Fan and L.-Q. Chen: Acta mater., 45 (1997) 2, 611.
- 89) W. J. Boettinger, A. A. Wheeler, B. T. Murray and G. B. McFadden: Mat. Sci. Eng., 178 (1994), 217.
- 90) 諏訪嘉広,斎藤良行: CAMP-ISIJ, 12 (1999), 1286.
- 91) 諏訪嘉広,斎藤良行:CAMP-ISIJ, 13 (2000), 1252.
- 92) 束 千修,大笹憲一,成田敏夫:日本金属学会講演概要,(2000)127,400.
- 93) 小山敏幸, 土井 稔:日本金属学会講演概要, (2000) 127, 293.
- 94) 小山敏幸, 宮崎 亨:日本金属学会講演概要, (1999) 124, 345.
- 95) 宮崎 亨:まてりあ, 36 (1997), 854.
- 96) 塚本 修, 增井浩昭:帝京平成大学大学院修士論文, (2000)
- 97) H. Masui, H. Ukaji, O. Tsukamoto and T. Asami: Proc. ICOTOM-12, 12 (1999), 405,
- 98) 大野宗一,毛利哲雄:日本金属学会講演概要,(2000) 126,268.
- 99) 小山敏幸, 土井 稔:日本金属学会講演概要, (2000) 126, 281.
- 100) 末広正芳, 瀬沼武秀, 小田高士: CAMP-ISIJ, 12 (1999), 393.
- 101) J. W. Cahn: Acta Metall., 4 (1956), 449.
- 102) C. Zener: Trans. AIME, 167 (1946), 550.
- 103) 近角聡信:強磁性体の物理(下), 裳華房, (1984), 106.
- 104) H. Masui: IEEE Trans. Magn., 31 (1995) 2, 930.
- 105) H. Masui, M. Mizokami, Y. Matsuo and H. Mogi: ISIJ Int., 35 (1995) 4, 409.
- 106) A. J. Moses: IEEE Trans. Magn., MAG-15 (1979), 1575.

- 107) 川原浩一,柳生幸徳,野際公宏,連川貞弘,渡辺忠雄:日本金属学会講演概要,(2000) 126,218.
- 108) C. E. G. Tucker: Acta Metall., 9 (1961), 275.
- 109) 村上英邦, 瀬沼武秀: CAMP-ISIJ, 8 (1995), 1430.
- 110) 增井浩昭,鈴木達也:日本鉄鋼協会講演大会発表予定, (2001)
- 111) 数値演算可視化システム MATLAB, Neural Network Toolbox, サイバネットシステム社, (1998)
- 112) 久保田邦親:CAMP-ISIJ, 12 (1999), 595.
- 113) 原田広史,村上秀之:計算機シミュレーションを用いた材料開発の基礎と応用,日本金属学会セミナー, (1998),61.
- 114) 長谷川純一, 興水大和, 中山 晶, 横井茂樹: 画像処理の基本技法, 技術評論社, (1997)
- 115) 八木伸行, 井上誠喜, 森 正樹, 中須英輔: C言語で 学ぶ実践画像処理, オーム社, (1995)
- 116) S2200 画像処理ソフトウエア, 伊藤忠テクノサイエンス, (1997)
- 117) 堀内龍弥, 芳谷直治, 增井浩昭:帝京大学理工学部材料科学工学科卒業論文, (1996)
- 118) 山崎貴博, 芳谷直治, 增井浩昭:帝京大学理工学部材料科学工学科卒業論文, (1997)
- 119) 澤 健司,田中紘一:日本金属学会講演概要,(1999) 124,436.
- 120) 井岡郁夫, 二川正敏, 涌井 隆, 小林一治: 日本金属 学会講演概要, (1999) 124, 437.
- 121) 松岡三郎:日本金属学会講演概要, (1999) 125, 487.
- 122) 安堂正巳,加藤雄大,谷川博康,香山 晃:日本金属 学会講演概要,(1999) 125,488.
- 123) 大村孝仁,早川正夫,宫原健介,松岡三郎,津崎兼彰:日本金属学会講演概要,(2000) 126,457.

- 124) 栗原 豊, 金子隆一, 星本健一, 藤田充苗: 材料科学, 28 (1991) 5, 245.
- 125) 金子隆一, 栗原 豊, 藤田充苗: 材料科学, 30 (1993) 6.315.
- 126) 金子隆一, 栗原 豊, 藤田充苗, 星本健一, 田中千秋: CAMP-ISIJ, 8 (1995), 1619.
- 127) マーク・キルガード: Open GL (日本語版), アジソン・ウエスレイ・パブリッシャーズ・ジャパン, (1997)
- 128) 宮地英生,吉川慈人:可視化情報,20 (2000)78, 13
- 129) 增井浩昭, 宇梶 仁, 加藤 弘: Proc. 4th. Visualization Conference, (1998), 57.
- 130) 宮地英生: Proc. 3th. Visualization Conference, (1997), 63.
- 131) 小野 陽:まてりあ, 33 (1994) 10, 1249.
- 132) 川添良幸:まてりあ、33 (1994) 10、1241.
- 133) 渡辺雅俊:まてりあ,33 (1994)10,1245.
- 134) 越後谷淳一:まてりあ、38 (1999) 1, 8.
- 135) 藤田充苗:まてりあ、38 (1999) 1、24、
- 136) 池田友彰, 大西一志, 鈴木秀一, 深田康人: CAMP-ISIJ, 9 (1996), 1396.
- 137) ケンブリッジ大学:MAP (http://www.msm.cam. ac.uk/map/mapmain.html), (2000)
- 138) 金属材料技術研究所 (http://www.nrim.go.jp:8080 /open/user/), (2000)
- 139) 金属材料技術研究所(http://inaba.nrim.go.jp/), (2000)
- 140) 梶谷文彦, 豊田英嗣: 可視化情報, 20 (2000) 76, 2,

(2000年11月21日受付)