

TODAY



一般財団法人機械システム振興協会
専務理事・イノベーションセンター長
相澤 徹

今回は JRCM NEWS の紙面をお借りして、小生が勤務している一般財団法人機械システム振興協会の事業について、いくつかご紹介させていただきます。

まず第1は、令和5年度に鉄スクラップの高精度選別システムを検討するプロジェクトを実施しました。これは鉄スクラップの選別にあたって画像処理技術やロボットなど最先端の技術を使って効率化を図ろうというもので、東京大学工学部の星野岳穂教授に委員長をお願いし、関係者の方にお集まり頂いて1年間議論をしたものです。

第2は、同じく令和5年度に製造業の開発、設計、製造の各段階で生成AIを如何に使うかの検討プロジェクトを行いました。企業の方にも参加して頂き、著作権法からの議論も含めて、生成AI利用のメリットとリスクの評価方法を議論しました。令和6年度は生成AIを利用するための社内データの構築方法について議論する予定です。

上記の令和5年度プロジェクトの成果報告書は希望者に差し上げています。ご関心のある方はぜひ当協会のホームページ（下記参照）経由でご連絡下さい。

第3は、令和6年度からの新事業として、大学等の若手研究者による先端的分野の研究に対し、研究資金を当協会から交付して共同の調査・研究を行う公募事業を開始しました。

7月1日が公募の締め切りですが、既に全国の70余りの大学等に本事業のお知らせを

しています。令和6年度は初年度ということもあり、1件当たり150万円の資金を交付し、合計5件程度を採択する予定にしています。領収書の提出を求めない使い勝手の良い研究資金になっています。キラッと光る、まさにエッジの効いた研究テーマが出てくることを期待しています。

第4は、令和6年度に製造技術のデジタル化・データ化を進めるプロジェクトをいくつか立ち上げています。

まず、秋田県の由利本荘地域をモデル地域として、製造業の熟練技術者の技能・技術の伝承をいかに進めるか、暗黙知を如何にデータ化しAIに読み込ませるところまで持っていくかの検討を開始しました。地元企業、地元の公的な技術指導機関、技能・技術の形式知化のノウハウを持った企業の参加のもと、他の地域でも使える技能・技術の見える化の方法論「秋田メソッド」を創り上げることを目指しています。

また、技術のデジタル化・データ化については、京都にある株式会社ヒルトップにおいて試作品加工の過程において、職人の技を全てプログラム化し24時間無人で工作機械を稼働させるというビジネスが既に始まっています。同社でこのビジネスモデルを実現した役員の方に、その経験を11月8日（金）夕刻に当協会の一般向けセミナーで語っていただく予定です。

ご関心があればぜひご参加ください。詳細は後日、下記の機械システム振興協会ホームページにてお知らせします。

機械システム振興協会ホームページ：
<https://www.mssf.or.jp/>

**NEDO 航空機エンジン向け材料開発・評価システム基盤整備事業
研究開発項目2 「革新的合金探索手法の開発」
ハイエントロピー合金に関する基盤技術検討および調査（文献調査）について
（一財）金属系材料研究開発センター 総務企画部 主席研究員 宮前 収**

JRCMは、2021年度から2023年度にてハイエントロピー合金（High Entropy alloys：以下、HEAs）に関する標記の調査を実施しましたので、概要を次のとおりご報告いたします。この成果は、国立研究開発法人新エネルギー・産業技術総合開発機構（NEDO）の委託業務の結果得られたものです。

標記の「航空機エンジン向け材料開発・評価システム基盤整備事業」は、2015年度の経済産業省「電子ビーム三次元金属積造形技術の周辺技術等」に関する技術動向調査と、これに続く2017年度NEDOエネルギー・環境新技術先導プログラム「三次元金属積層造形における新合金開発の合金設計シミュレーション技術の研究開発」を経て行っている事業です。2015年度の調査結果は、JRCM News No.357に、2017年度先導プログラムのJRCM担当分の調査結果は、JRCM News No.383に概要を載せています。さらに2021年度と2022年度の成果概要をJRCM News No.439に載せており、今回は2023年度の成果を加え2021年度からの全体の成果概要になります。

本事業は、我が国の航空機エンジン向け材料及び部品製造における競争力向上に資するため、(1)量産化を志向した航空機エンジン部品の設計・製造プロセス（特に鍛造プロセス）の効率化、(2)人工知能（AI）、マテリアルズ・インフォマティクス（以下、MI）等の計算機科学を利用した国産材料の開発、(3)航空当局の認証取得に向けた航空機エンジンの材料特性及び実環境下における性能等のデータ収集、整備、蓄積を実施していくものです。この中でJRCMは、以下の調査研究を行っています。

- 2021年度：HEAsの論文・特許調査
- 2022年度：MIの論文・特許調査及びコンビナトリアル手法の論文調査
- 2023年度：耐熱HEAsのデータベース構築、耐熱HEAsの研究経緯調査及び航空機エンジン用材料の論文調査

1. HEAsの論文・特許調査

2005年頃からHEAsと呼ばれる新しい合金概念が提唱され大きな注目を集め、論文数も増加しています。特に最近7年間ほどは増加傾向に拍車が掛かっています。HEAsの定義は、JRCM News No.439を参照ください。

直近は、HEAsに限定されず、多成分系のMPEAs（multi-principal element alloys）、多成分で少なくとも2つの相を含むCCAs（complex concentrated alloys）もHEAsと並んで研究対象になることが多くなってきており、CCAs、MPEAsも調査対象にしています。

1-1. HEAsの論文調査

2017年から2021年11月までの523件の論文からを母集合として航空機エンジンへの適用が考えられる103件を抽出し、動向を整理しました。

合金の種類別では、早くから研究されているCantor合金（CoCrFeMnNi）が最も多くみられます（図1）。次に軽量化で研究対象になることが多いAl系合金、Ti系合金が続いています。超耐熱合金として米国空軍研究所などで研究されている高融点元素を組み合わせたNbMoTaW合金、NbMoTaVW合金も一画を占めています。

温度別の論文数では、600～1000℃が多く、1200℃超はまだ少ないことがわかりました（図2）。

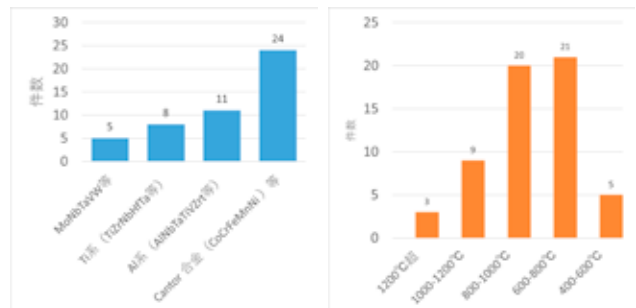


図1 合金の種類別論文数 図2 合金の温度別論文数

1-2. HEAsの特許調査

2012年から2021年11月公開の特許を検索、抽出し、動向を整理したものが図3です。2018年か

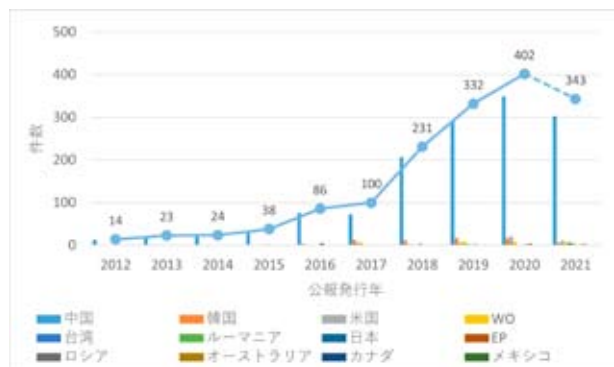


図3 HEAsの出願先国別の特許出願公開件数の推移

ら出願公開件数の増加が加速しており、中国への出願が圧倒的に多いことがわかります。

内容では、中国の国立防衛技術大学と中国人民解放軍軍事科学研究所からの出願には、米国空軍研究所開発中のNbMoTaWと比較したもの、NbMoTaWマトリクスを酸化物で分散強化したものが計4件あることが特筆されます。

2. MIの論文・特許調査

2-1. MIの論文調査

2002年から2022年6月までに公表された222件の論文を抽出し、動向を整理しました。MIは、機械学習を使用しているのでHEAsに機械学習を適用した論文を検索、抽出しています。件数が加速的に増加していることがわかります。中国(66件)、米国(52件)、インド(36件)の研究機関から多く公表されています。

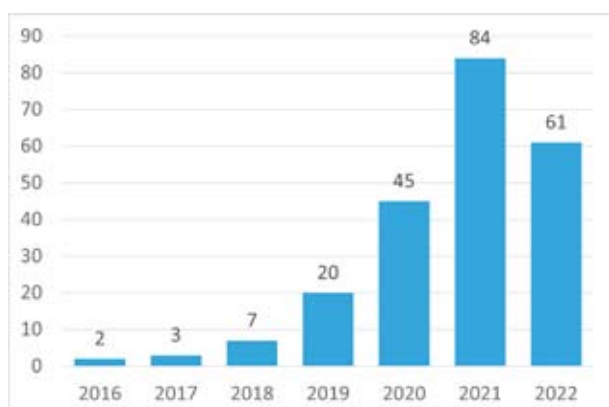


図4 HEAsに機械学習を適用した論文件数推移

抽出した222件を機械学習の5つの種類(ニューラル・ネットワーク、深層学習、遺伝的アルゴリズム、逆問題解析、その他機械学習)に分類し、それぞれの機械学習の種類でタイトルと要約を見て幅広い手法をカバーするように20件の注目論文を選定しました。被引用回数も選定の参考にしました。この20件の注目論文を分類したところ、機械学習の種類では、ニューラル・ネットワークが多いこと、機械学習の手法では様々な手法が用いられ、計算科学との併用も多いことがわかりました。

学習データの数が多くほど予測精度が向上することが知られています。注目論文を見ると、最低でも数百、多いものになると数十万のデータセットから学習しています。HEAsのMIでも学習データを容易に取得できるデータベースの構築が重要といえます。

プロセスデータを取り込んで所望の特性の材料設計を行うことは今後の課題といえます。

2-2. MIの特許調査

HEAsに限定せず、2022年6月までに公開された金属分野でのMIと人工知能などの特許を国際特許分類とキーワードを組み合わせて検索、抽出しました。

表1 機械学習の種類

転移学習 (Transfer Learning)	1
距離学習 (Metric Learning)	0
ニューラル・ネットワーク (Neural Network)	8
深層学習 (Deep Learning)	2
ブースティング (Boosting)	0
勾配ブースティング (Gradient Boosting)	0
教師あり学習 (Supervised Learning)	3
教師なし学習 (Unsupervised Learning)	1

表2 機械学習に用いられる手法

サポートベクターマシン (Support Vector Machine)	2	
k近傍法 (k-Nearest Neighbor Algorithm)	2	
ベイズ最適化 (Bayesian Optimization)	1	
遺伝的アルゴリズム (Genetic Algorithm)	3	
決定木 (Decision Tree)	0	
ランダムフォレスト (Random Forests)	1	
逆問題 (Inverse Problem)	3	
能動的学習 (Active Learning)	2	
敵対的ネットワーク (Generative Adversarial Network)	0	
条件付き敵対的生成ネットワーク (Condition GAN)	1	
サロゲートモデル (Surrogate Model)	1	
計算科学	熱力学計算	2
	密度汎関数法 (Density Functional Theory)	4
統計的手法	正準相関分析 (Canonical Correlation Analysis)	1
	重回帰分析 (Multiple Regression Analysis)	1
	ガウス過程 (Gaussian Process)	1
	モンテカルロ法 (Monte Carlo Method)	0

MIに関する特許出願では、日本国籍の出願人の特許出願が4件ありました。

人工知能に関する特許出願では、対象材料は鋼が3件、HEAsが2件、軟磁性アモルファス合金が2件、アルミニウム合金と銅合金(導電材)が各1件ありました。ほとんどが中国からの出願です。

3. コンビナトリアル手法の論文調査

材料の探索を高速化するには、サンプル作製と評価の高速化によるデータ取得サイクルの高速化とMIを組み合わせたことが必要です。サンプル作製と評価を高速化する手法、すなわちコンビナトリアル手法の論文調査を行いました。

HEAsに限定せず、2014年から2022年6月までに公開された791件の金属分野でのコンビナトリアル手法の論文を検索、抽出しました。図5に論文件数推移を示します。年々増加傾向にあります。図6に研究機関国籍別論文数を示します。米国と中国が圧倒的に多いことがわかります。

検索、抽出した791件の論文のうち、被引用回数の多いもので金属分野での汎用性が高いと思われる

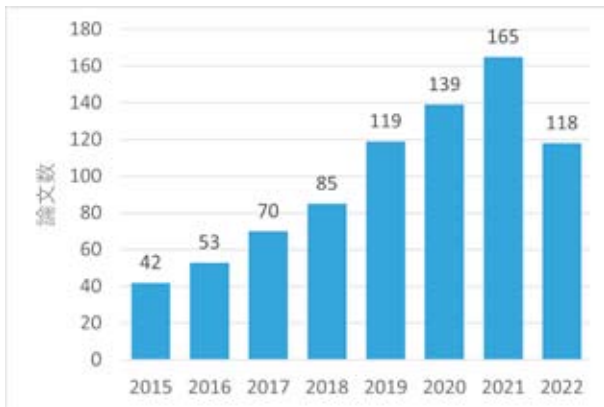


図5 コンビナトリアル手法の論文件数推移

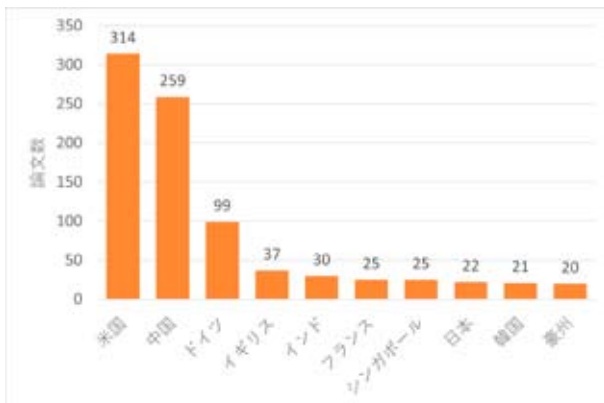


図6 コンビナトリアル手法の研究機関国籍別論文数

もの10件を選定して概要を整理し、今後の活用における課題を考察しました。

大きく分けると、(1) サンプル作製方法に特徴のあるもの、(2) サンプル評価方法に特徴のあるもの及び(3) 材料選定の絞り込みに特徴のあるものの3つになります。

(1) について最も多かったのは、レーザーDED (Direct Energy Deposition) によるもので3件ありました。同じ積層造形のSLM (Selective Laser Melting) に比べると高価な金属パウダーの使用量が圧倒的に少なく、造形速度が圧倒的に速いことが特長です。また、粉末の切り替えにより組成を自在に変更可能な点が有利です。このうちの一つは、2種類のパウダーを混合してからターゲットに噴射しレーザーで溶融するものです。組成の迅速切り替えの面では不利ですが、パウダーの均一混合を重視する場合は、噴射前に混合しておくのは有効な手段と考えられます。

積層造形以外では、マグネトロンスパッタリングとラピッドアロイプロトタイピング (RAP) がありました。マグネトロンスパッタリングは、100nm厚の膜を形成するもので、構造材料に不可欠な機械特性の評価は難しいですが、組織、機能などの評価には有効です。レーザーDEDに比べると合成の制御は容易と考えられます。したがって、機能材料の探索には有効な可能性があります。

RAPは、鋳造、熱間圧延、均質化、冷間圧延、再結晶焼鈍を効率的に組み合わせる方法ですが、組成の自由度ではレーザーDEDのほうが有利と考えられます。同じ組成でサイズの大きなサンプルを大量に作製するのに適しています。

今後は、目的によってレーザーDED、マグネトロンスパッタリング、RAPを使い分けることが得策と考えられます。

4. 耐熱HEAsのデータベース構築

新規のHEAsを開発する際に過去に研究されたHEAsの材料の3要素のデータをリレーショナルに迅速に検索・抽出できることを念頭に最新の80件の文献情報からデータベースを構築しました(図7)。HEAs特有のパラメータを除けば、他の合金にも適用可能です。



図7 データベースの概念

多くの作業者が効率的にデータ入力できるようにAccess Runtimeで入力し、Accessで集計・検索・出力するようにしました。

組織は、BCC、FCCなどの結晶構造、結晶粒・粒界の特徴などの文字情報に加え、SEM、EDX、XRDなどの画像情報も入力しています(図8)。

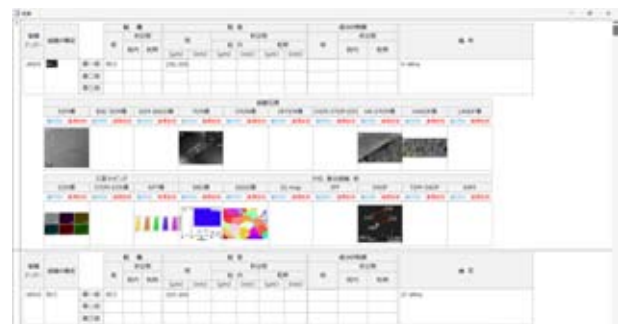


図8 組織の入力画面

集計・検索・出力では、HEAs特有のパラメータ、温度と比強度の関係、高温酸化などを整理しています。HEAsは、Nb、Mo、Taなどの高融点金属と、Ti、Zr、Hf、Al、Cr、Si、Bなどを単独又は組み合わせて構成されているものが多く、カテゴリ化したうえで抽出し整理しています(図9~図11に例示)。

表 4 検索・抽出した論文と Senkov Review 記載の耐熱 HEAs の構成元素

合金の種類	高融点金属のみ	Ti 利用		Al 利用				Cr 利用			Co, Ni 利用	Hf 利用		Si 利用	C, N 利用
		Ti 利用	TiZr 利用	AlTi 利用	AlTiZr 利用	AlHfTiZr 利用	AlCrTi 利用	CrTiZr 利用	その他 Cr 利用	HfTiZr 利用		HfTiZr 以外利用			
Senkov Review 合金	数	12	13	41	15	17	9	13	9	9	8	36	0	15	4
	比率 (%)	6%	7%	22%	8%	9%	5%	7%	5%	5%	4%	19%	0%	8%	2%
2021～2023.6 検索・抽出論文	数	49	33	53	131	77	9	40	17	26	57	98	48	31	33
	比率 (%)	9%	6%	10%	24%	14%	2%	7%	3%	5%	10%	18%	9%	6%	6%

比率が増加し Mo, V の比率が大きく減少しています。高融点金属以外では、Ti, Al, Zr の減少と Ni の増加が目立ち、Fe, B, O, N, C, Cu, Sn, Y, Be, Sc, Mg, Ru, Er の添加があり、C, N のように微量添加されるものも増えてきています。高融点金属以外のグループでは、AlTi, AlTiZr, Co, Ni, HfTiZr 以外の Hf, C, N が挙げられます。論文数の順位は大きく変化しており、大連理工大学が最多、西北工業大学が 2 番目になっています。米国は、2020 年から ULTIMATE プロジェクトが開始されており、ノース・テキサス大学、カリフォルニア大学、ロスアラモス国立研究所などの論文が公表されています。

6. 航空機エンジン用材料の論文調査

前述のように最近では HEAs だけでなく MPEAs, CCAs も並列に研究されていること、実用化されている Ni 超合金、TiAl 金属間化合物などと対比して HEAs の位置付けを理解する必要があることから、航空機エンジン用材料の論文調査を行いました。2003 年 1 月～2023 年 6 月公表の被引用回数上位のものを中心に 233 件をピックアップして分析しました。

図 12～図 14 に調査結果の例を示します。材料別では、Ni 基合金が多く、Ti 合金、TiAl 金属間化合物、Mo 基合金が続きます。HEAs が 4 件あります。製造方法等の特徴別では、積層造形で作成されたものが多く、単結晶や粉末冶金で作成されたものが続いています。課題別では、疲労強度、クリープが多く、

酸化、腐食や被切削性、加工性が続いています。接合性、韌性、耐摩耗性がその次に多くなっています。

7. 総括

以上を総括すると以下ようになります。

- 1) HEAs の論文を温度別、種類別に傾向を整理した。
- 2) HEAs の特許出願が急増しており、中国への出願が圧倒的に多い。
- 3) HEAs の MI の論文・特許出願は急増している。なかでもニューラル・ネットワークの論文が多く、計算科学との組み合わせも多い。
- 4) コンビナトリアル手法の論文が急増しており、米国と中国が圧倒的に多い。
- 5) 耐熱 HEAs のデータベースを Access にて構築し、組成・プロセス・組織・特性をリレーショナルに検索・抽出可能である。組織には顕微鏡写真等の画像も含まれる。80 件の論文データを入力し、HEAs の種類ごとに HEAs 特有のパラメータ、特性を整理した。HEAs 以外の金属にも適用可能である。
- 6) 2010 年公表の米国空軍研究所の論文を起点とする HEAs の研究経緯を調査し、高融点金属とその他元素の組み合わせの推移を整理した。C, N のように微量添加される HEAs も増えてきている。
- 7) 航空機エンジン用材料の論文調査を行い、Ni 基合金、Ti 合金、TiAl 金属間化合物、Mo 基合金が多い。HEAs も少数ながら存在した。製造法では、積層造形が多い。

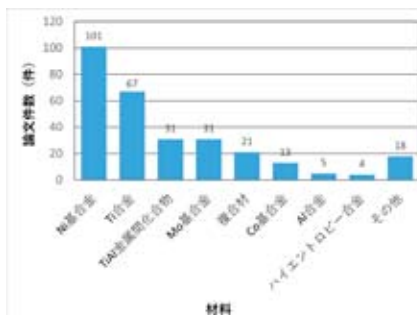


図 12 材料別の論文件数

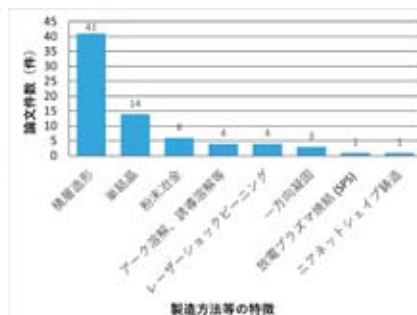


図 13 製造方法等の特徴別の論文件数

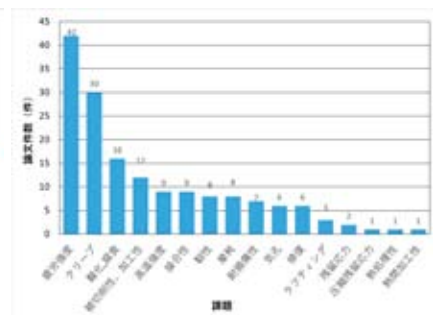


図 14 課題別の論文件数

<p>The Japan Research and Development Center for Metals JRCM NEWS / 第 448 号</p> <p>内容に関するご意見、ご質問は JRCM 総務企画部までお寄せください。 本書の内容を無断で複写・複製・転載することを禁じます。</p>	<p>発行 2024 年 7 月 1 日</p> <p>発行人 小紫 正樹</p> <p>発行所 一般財団法人 金属系材料研究開発センター 〒105-0003 東京都港区西新橋一丁目 5 番 11 号 第 11 東洋海事ビル 6 階 TEL (03)3592-1282 (代) / FAX (03)3592-1285 URL http://www.jrcm.or.jp/ E-mail jrcm@oak.ocn.ne.jp ※送付先の変更・中止等は上記 E-mail に御連絡をお願いいたします。</p>
--	---