

ニューラルネットワークを活用した Fe-C-Mn-Si4元系合金における等温 $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態の フェーズフィールドシミュレーション

Phase-field simulation of isothermal austenite-to-ferrite transformation
in Fe-C-Mn-Si quaternary alloy using neural network

鈴木大稀¹⁾, 仲村章一郎²⁾, 山中晃徳³⁾

Taiki Suzuki, Shoichiro Nakamura and Akinori Yamanaka

- 1) 東京農工大学大学院 工学府 (〒184-8588 東京都小金井市中町2-24-16, E-mail: s248018r@st.go.tuat.ac.jp)
- 2) 東京農工大学大学院 工学府 (〒184-8588 東京都小金井市中町2-24-16, E-mail: s237302x@st.go.tuat.ac.jp)
- 3) 博士(工学) 東京農工大学大学院 工学研究院 教授 (〒184-8588 東京都小金井市中町2-24-16, E-mail: a-yamana@cc.tuat.ac.jp)

To develop steels with excellent mechanical properties, it is effective to numerically analyze the austenite-to-ferrite transformation behavior in three dimensions and compare it with experimental results. In this study, a multi-phase-field (MPF) model is used to simulate microstructural evolutions during an isothermal austenite-to-ferrite transformation in a Fe-C-Mn-Si alloy. To reduce the calculation time for the MPF simulation, a surrogate model to calculate thermodynamic data using Thermo-Calc software is developed using a deep neural network (NN). In order to validate the developed technique, the calculation time and accuracy of MPF simulation of austenite-to-ferrite transformation in a Fe-C-Mn-Si alloy using the trained NN are compared to those obtained by the MPF simulation coupled with Thermo-Calc software (MPF-TC). The results obtained in this study demonstrate that the MPF with the NN surrogate model reproduces the result obtained using the MPF-TC. Furthermore, the trained NN enables us to accelerate the MPF simulation approximately five times faster than the MPF-TC.

Key Words : Steel, Austenite-to-ferrite transformation, Phase-field simulation, Neural network

1. 緒言

強度や延性に優れた鉄鋼材料の開発には、鉄鋼材料の製造工程において生じるマイクロ組織形成過程を予測し、制御する必要がある。鉄鋼材料の製造工程において生じるオーステナイト (γ) \rightarrow フェライト (α) 変態 ($\gamma \rightarrow \alpha$ 変態) [1, 2]は、鉄鋼材料のマイクロ組織形態を決める重要な相変態の一つであり、変態後に残留する γ 相は、マルテンサイト相やベイナイト相など、鉄鋼材料の高強度化に重要となる硬質相へと相変態するため、 $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態挙動の予測は重要である。

$\gamma \rightarrow \alpha$ 変態挙動を予測するために、フェーズフィールド (PF) 法[3]やマルチフェーズフィールド (MPF) 法[4]を用いた鉄鋼材料の $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態の研究が広く行われてきた。Militzer et al. [5]は、Mecozzi et al. [6]の実験結果をもとに、 γ/α 界面の易動度を決定し、MPF法を用いた合金組織形成計算ソフトウェア MICRESS (MICROstructure Evolution Simulation Software) [7]を用いて、 $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態過程における α 相の成長挙動を3次的に解析した。また、Kohtake et al. [8]は、Fe-C-Mn合金の $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態における律速モードの遷移を、PFモデルを用いて1次的に解析した。その結果、 α 相成長時の律速モードの遷移は、移動する γ/α 界面での侵入型固溶元素の濃度スパイクによって引

き起こされることを明らかにした。しかしながら、多元合金鋼の溶質元素の拡散・分配を含めた α 相の成長挙動を3次的に計算した事例は、著者の知る限り存在しない。

多元合金鋼での $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態過程における溶質元素の拡散・分配および α 相の成長挙動を精度よく解析するためには、実験データとCALPHAD (CALCulation of PHase Diagram) 法[9]に基づく熱力学計算ソフトウェアThermo-Calc[10]による熱力学データの計算と、MPF法の数値計算を連成することが有効である。しかしながら、Thermo-Calcから熱力学データを取得するには多くの計算時間を要するため、3次元シミュレーションに適用することは困難である。そこで本研究では、機械学習手法であるニューラルネットワーク (NN) [11]によってThermo-Calcを用いた熱力学データの計算を代替するサロゲートモデルを構築することで、 $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態シミュレーションの計算コスト削減を図る。本研究では、高強度鋼の基本組成であるFe-C-Mn-Si合金を対象に、等温 $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態の2次元MPFシミュレーションを実施し、開発する数値シミュレーション方法を検証した。

2. マルチフェーズフィールドモデル

本研究で使用するMPFモデルについて説明する。多元系合金鋼の凝固や相変態を解析可能なMPFモデルとして、

Kim-Kim-Suzuki (KKS) モデル[12]を用いる。結晶粒数を n 、溶質元素数を $m-1$ とする系において、KKSモデルで合金中の $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態挙動を表現するには、結晶粒 i の存在確率を表すフェーズフィールド変数 ϕ_i ($i = 1, 2, \dots, n$) と溶質元素 k の濃度変数 c_k ($k = 1, 2, \dots, m-1$) を定義し、以下に示す2つの時間発展方程式を解く。

$$\frac{\partial \phi_i}{\partial t} = -\frac{2}{n} \sum_{j=1}^n M_{ij} \left(\frac{\delta G}{\delta \phi_i} - \frac{\delta G}{\delta \phi_j} \right) \quad (1)$$

$$\frac{\partial c_k}{\partial t} = \nabla \left\{ \sum_{h=1}^n \phi_h \sum_{j=1}^{m-1} D_{kl}^h \nabla c_k^h \right\} \quad (2)$$

ここで、 G は系の全自由エネルギー汎関数であり、 M_{ij} は結晶粒 i, j 間の粒界モビリティである。 D_{kl}^h は、 k, l 元素間における、 k 元素の h 相における拡散係数であり、 c_k^h は h 相における k 元素の局所濃度変数である。

3. ニューラルネットワークを用いたサロゲートモデル構築

(1) ニューラルネットワークの作成方法

MPFモデルを用いて等温 $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態の解析を高速に行うために、Thermo-Calcで行われる熱力学計算を代替するサロゲートモデルを、NNを用いて作成する。Thermo-Calcを用いて $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態を解析する場合、温度および溶質元素濃度を入力値としてThermo-Calcに与え、Thermo-Calc上で計算された熱力学データを取得する。そのため、温度および溶質元素濃度を入力値、 $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態の解析に必要な各種熱力学データ (α, γ 各相におけるGibbs自由エネルギー、拡散ポテンシャル、拡散係数および拡散ポテンシャルの濃度微分値) を算出するNNを作成する。したがって、各相で4つずつ、合わせて8つのNNを作成する。NNの訓練に用いる訓練データ (入力値と出力値の組み合わせ) は以下の手順で作成する。

訓練データに含まれる溶質元素濃度の値域を設定するために、等温 $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態の1次元シミュレーションを実施する。対象とする合金の平均化学組成は、Fe-0.092-0.68Mn-0.8Si [wt.%] であり、 α 相の成長が生じる 830 °C において20秒間等温保持するMPFシミュレーションを行う。設定した各溶質元素濃度の値域を、分割幅を一定として分割し、分割したすべての溶質元素濃度の組み合わせで熱力学データを計算することで、 α 相に対しては253000、 γ 相に対しては2064480の訓練データを用意した。全訓練データのうちランダムな75%をNNの訓練に用いる教師データ、残りの25%をNNによる熱力学計算の精度検証に用いる検証データとした。

本研究では、NNの学習にSony Network Communications株式会社が提供するディープラーニングツールであるNeural Network Console[13]を用いる。各NNは全結合層であり、入力層と1層の隠れ層および出力層からなる3層構造である。Figure 1に、Gibbs自由エネルギーを算出するNN

の模式図を示す。隠れ層のノード数は、全てのNNで400とし、活性化関数には、NNの精度向上と訓練時間の短縮のためReLU[14]を用いる。また、損失関数には平均二乗誤差(MSE)、訓練における最適化にはAdam[15]を用いる。訓練にはミニバッチ処理を用い、バッチサイズは64とする。エポック数は損失関数を収束させるため、全てのNNで400とする。NNの構造は、 α 相と γ 相に対して同様である。

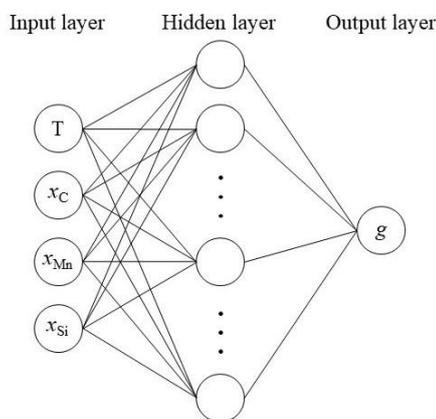


Fig. 1 Schematic diagram of the neural network which calculates the Gibbs free energy, g .

(2) 学習結果

Figure 2に、 α 相におけるGibbs自由エネルギーを算出するNNの学習曲線を示す。教師データを用いて算出される損失関数 (Training error) および検証データを用いて算出される損失関数 (Validation error) は、学習初期から 2.0×10^{-5} 以内、エポック数110以降は 1.0×10^{-6} 以内を推移した。他の熱力学データを算出するNNにおいても同様の傾向が得られた。よって、NNの学習は正しく行われ、熱力学データの値を精度よく算出できる訓練済みNNを作成することができたと考える。

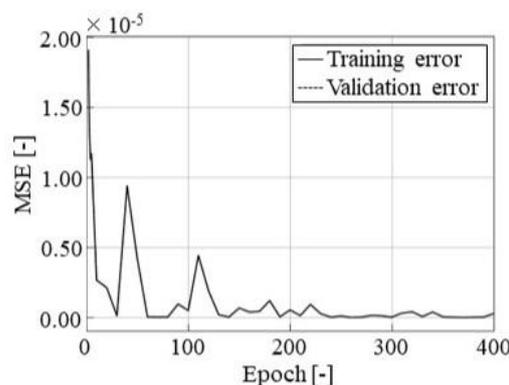


Fig. 2 Learning curve of the neural network which calculates the Gibbs free energy in α phase, g^α .

4. ニューラルネットワークを用いた等温 $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態シミュレーション

(1) 計算条件

訓練済みNNを用いたMPFシミュレーション (MPF-NN)

により、Thermo-Calcを用いたMPFシミュレーション(MPF-TC)を再現可能であることを検証する。MPF-TCの結果とMPF-NNの結果を比較することにより、MPF-NNの精度および計算速度を検証する。

合金の平均化学組成は、NNの訓練データ作成時と同様であり、830 °Cで5秒間等温保持するシミュレーションを行う。Figure 3(a)の0 sに、本シミュレーションの初期組織を示す。結晶粒1から4は α 相、結晶粒5から10は γ 相である。6つの γ 相からなる母相内に α 相を4つ配置する。各元素それぞれの初期濃度は、全領域において平均化学組成で一定とする。 α 相の成長を特徴づけるパラメータである粒界モビリティおよび粒界エネルギーは等方性を仮定する。

(2) 計算結果

Figure 3(a)にMPF-TCから得た α 相の時間発展、Fig. 3(b)に、MPF-NNから得た γ 相の時間発展をそれぞれ示す。どちらも時間経過とともに α 相が成長し、MPF-NNから得た結晶粒分布はMPF-TCから得た結晶粒分布と概ね一致した。Figure 4に、 α 相の体積分率の時間経過を示す。MPF-NNから得た α 相の体積分率のMPF-TCから得た α 相の体積分率に対する絶対誤差は2.6%以内であったことから、MPF-NNは、MPF-TCから得られる結晶粒分布を再現可能であることがわかる。また、Fig. 5にMPF-TCおよびMPF-NNから得たC濃度の時間発展をそれぞれ示す。どちらも時間経過とともに、C元素が α 相側から γ 相側に拡散し、MPF-NNから得たC濃度分布とMPF-TCから得たC濃度分布は概ね一致した。Figure 6に、C元素の0 s, 2.5 s, 5.0 s時点での濃度分布を示す。MPF-NNから得たC濃度は、MPF-TCから得たC濃度に対して 1.9×10^{-4} molar frac. の絶対誤差に収まっており、MPF-NNによりMPF-TCから得られるC濃度分布を定量的に再現可能であるとわかる。Figure 7に、MPF-TCおよびMPF-NNから得たMn濃度の時間発展をそれぞれ示す。時間経過とともにMn元素が α 相側から γ 相側に拡散し、MPF-NNから得た2.5 s時, 5.0 s時の濃度分布は、MPF-TCから得た同時刻のMn濃度分布と概ね一致した。Figure 8に、Mn元素の0 s, 2.5 s, 5.0 s時点での濃度分布を示す。MPF-NNから得たMn濃度のMPF-TCから得たMn濃度に対する絶対誤差は 1.4×10^{-5} molar frac. 以内に収まっており、MPF-NNはMPF-TCから得られるMn濃度を再現可能であるといえる。Figure 9に、MPF-TCおよびMPF-NNから得たSi濃度の時間発展を示す。Si濃度は時間経過とともに γ 相から α 相へ分配し、MPF-NNから得たSi濃度分布はMPF-TCから得たSi濃度分布と概ね一致した。Figure 10に、Si元素の0 s, 2.5 s, 5.0 s時点での濃度分布を示す。MPF-NNから得たSi濃度のMPF-TCから得たSi濃度に対する絶対誤差は 1.6×10^{-5} molar frac. 以内に収まっており、Mnと同様に、MPF-NNによりMPF-TCから得られるSi濃度を再現可能であるといえる。以上より、NNを用いてThermo-Calcで行われる熱力学計算を代替することで、 α 相の成長および溶質元素の拡散挙動を定量的に再現可能なMPFシミュレーションを行うことができた。

計算時間を比較すると、MPF-TCは約169時間12分22秒要したのに対して、MPF-NNは37時間3分43秒であり、計算速度は約4.6倍に向上した。以上より、訓練済みNNを用いることにより、従来のMPF-TCを用いた場合と同精度を保ちつつ、計算速度を向上可能であることが示された。今後は、Graphics Processing Unit (GPU) 用いた並列計算を行うことで、さらなる高速化と3次元シミュレーションが可能となる。

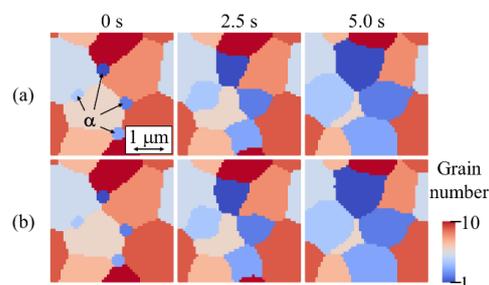


Fig. 3 Evolution of α phase during the isothermal austenite-to-ferrite transformation at 830 °C in Fe-0.092-0.68Mn-0.8Si [wt.%] alloy obtained from MPF simulation using (a) Thermo-Calc (MPF-TC) and (b) trained neural network (MPF-NN).

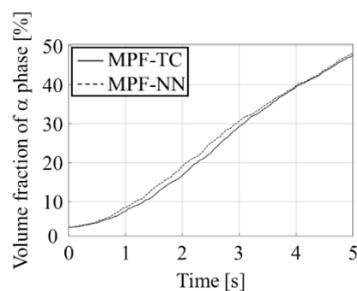


Fig. 4 Time variation of volume fraction of α phase during the isothermal austenite-to-ferrite transformation obtained from MPF-TC and MPF-NN.

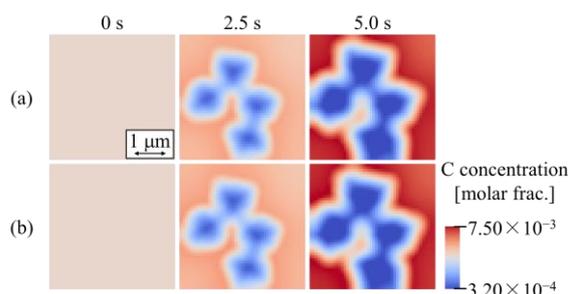


Fig. 5 Evolution of C molar fraction during the isothermal austenite-to-ferrite transformation obtained from (a) MPF-TC and (b) MPF-NN.

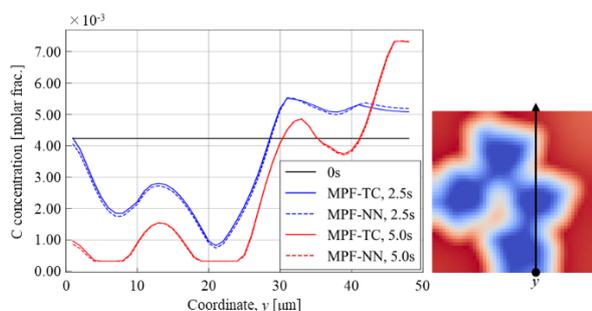


Fig. 6 Distributions of C molar fraction at 0 s, 2.5 s, and 5.0 s during the isothermal austenite-to-ferrite transformation obtained from MPF-TC and MPF-NN.

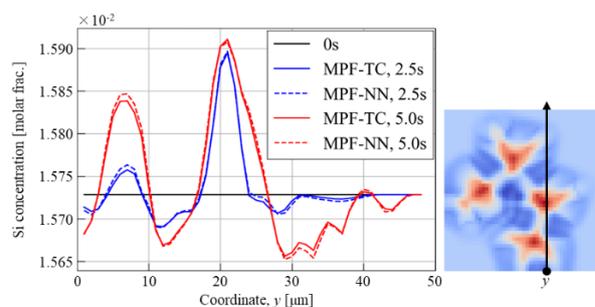


Fig. 10 Distributions of Si molar fraction at 0 s, 2.5 s, and 5.0 s during the isothermal austenite-to-ferrite transformation obtained from MPF-TC and MPF-NN.

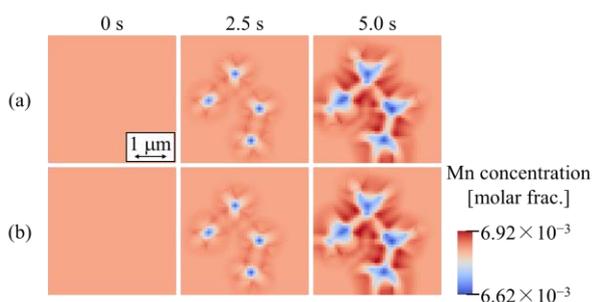


Fig. 7 Evolution of Mn molar fraction during the isothermal austenite-to-ferrite transformation obtained from (a) MPF-TC and (b) MPF-NN.

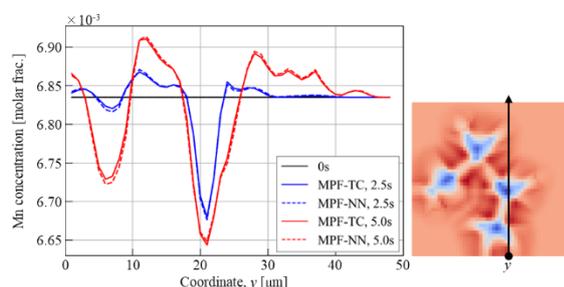


Fig. 8 Distributions of Mn molar fraction at 0 s, 2.5 s, and 5.0 s during the isothermal austenite-to-ferrite transformation obtained from MPF-TC and MPF-NN.

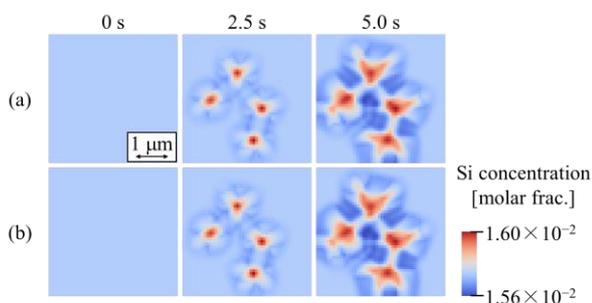


Fig. 9 Evolution of Si molar fraction during the isothermal austenite-to-ferrite transformation obtained from (a) MPF-TC and (b) MPF-NN.

5. 結言

本研究では、NNによってThermo-Calcを用いた熱力学データの計算を代替するサロゲートモデルを構築することで、 $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態シミュレーションの計算コストを削減することを目的として、等温 $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態の2次元MPFシミュレーションを実施し、Thermo-Calcを用いた計算結果と比較した。その結果、作成したNNがThermo-Calcによる熱力学計算を代替可能であることを示した。これまでThermo-Calcで行われていた熱力学計算をNNで代替することにより、GPUを用いたMPFシミュレーションを行うことが可能となるため、今後更なる計算高速化が可能となる。

参考文献

- [1] M. Gouné, F. Danoix, J. Ågren, Y. Bréchet, C. R. Hutchinson, M. Miltzer, G. Purdy, S. van der Zwaag, H. Zurob: Overview of the current issues in austenite to ferrite transformation and the role of migrating interfaces therein for low alloyed steels, *Materials Science and Engineering: R. Reports*, Vol. 92, pp. 1-38, 2015.
- [2] T. Yamashita, M. Enomoto, Y. Tanaka, H. Matsuda, K. Okuda: Effects of Alloy Elements on Carbon Partitioning in Early Stages of Proeutectoid Ferrite Transformation in Low Carbon Mn-Si Steels, *ISIJ International*, Vol. 60, pp. 369-376, 2020.
- [3] 高木知弘, 山中晃徳: フェーズフィールド法 - 数値シミュレーションによる材料組織形成, 養賢堂, 2012.
- [4] I. Steinbach, F. Pezzolla: A generalized field method for multiphase transformations using interface fields, *Physica D: Nonlinear Phenomena*, Vol. 134, pp. 385-393, 1999.
- [5] M. Miltzer, M. Mecozzi, J. Sietsma, S. Vanderzwaag: Three-dimensional phase field modelling of the austenite-to-ferrite transformation, *Acta Materialia*, Vol. 54, pp. 3961-3972, 2006.
- [6] M. G. Mecozzi, J. Sietsma, S. van der Zwaag, M. Apel, P. Schaffnit, I. Steinbach, Analysis of the $\gamma \rightarrow \alpha$ transformation in a C-Mn steel by phase-field modeling, *Metallurgical and Materials Transactions A*, Vol. 36, pp. 2327-2340, 2005.

- [7] H. Farahani, G. Zijlstra, M. G. Meccozzi, V. Ocelík, J. T. M. De Hosson, S. van der Zwaag: In Situ High-Temperature EBSD and 3D Phase Field Studies of the Austenite–Ferrite Transformation in a Medium Mn Steel, *Microscopy and Microanalysis*, Vol. 25, pp. 639-655, 2019.
- [8] T. Kohtake, A. Yamanaka, Y. Suwa: Phase-Field Simulation of α Growth Stagnation During $\gamma \rightarrow \alpha$ Transformation in Fe-X-Y and Fe-C-Mn Alloys, *Metallurgical and Materials Transactions A*, Vol. 49, pp. 5023-5034, 2018.
- [9] Z. K. Liu: Thermodynamics and its prediction and CALPHAD modeling: Review, state of the art, and perspectives, *Calphad*, Vol. 82, 102580, 2023.
- [10] J. O. Andersson, T. Helander, L. Höglund, P. Shi, B. Sundman: Thermo-Calc & DICTRA, computational tools for materials science, *Calphad*, Vol. 26, pp. 273-312, 2002.
- [11] S. Dong, P. Wang, K. Abbas: A survey on deep learning and its applications, *Computer Science Review*, Vol. 40, 100379, 2021.
- [12] S. G. Kim, W. T. Kim, T. Suzuki: Phase-field model for binary alloys, *Physical Review E*, Vol. 60, pp. 7186-7197, 1999.
- [13] P. Petersen, F. Voigtlaender: Optimal approximation of piecewise smooth functions using deep ReLU neural networks, *Neural Networks*, Vol. 108, pp. 296-330, 2018.
- [14] D. P. Kingma, J. Ba, Adam: A Method for Stochastic Optimization. *arXiv*, 2017.
- [15] Neural Network Console. <<https://dl.sony.com/ja/>>, 2024年1月31日アクセス.