

特別講演

□第189回春季講演大会学術貢献賞(浅田賞)受賞記念
特別講演(2025年3月8日)

フェーズフィールド法と鉄鋼材料学

Contribution of Phase-Field Method to Iron and Steel Science and Engineering

小山敏幸

名古屋大学 教授
(4/1以降)

Toshiyuki Koyama

物質・材料研究機構 NIMS 招聘研究員



*脚注に略歴

1 はじめに

日本鉄鋼協会第198回春季講演大会にて、学術貢献賞(浅田賞)を受賞する栄誉を賜った。あらためて関係各位に心より感謝する次第である。受賞内容は、「フェーズフィールド法¹⁾の鉄鋼分野への普及」で、受賞講演として「フェーズフィールド法と鉄鋼材料学」と題し、3つのトピックス:[(1)状態図から組織形成シミュレーションへ²⁾、(2)改良セカント法に基づく二相組織の応力-ひずみ曲線計算^{3,4)}、および(3)材料組織生成AI⁵⁾およびエージェントAI]を題材に、鉄鋼材料学へのフェーズフィールド(PF)法の展開に関して筆者が重要と考える話題を、やや広い視点からお話しさせていただいた。以下、それぞれの要点について解説する。

2 状態図から組織形成シミュレーションへ

日本鉄鋼協会のホームページ(HP)にて、現在、会員向けのオンデマンドWeb講座がラインナップされている⁶⁾。その中に筆者のコンテンツ「状態図(相変態編)ー自信を持って使うための熱力学的基礎ー6:状態図から組織形成シミュレーションへー状態図とPhase-field法(非線形拡散方程式)の相補関係ー」があり、これはPF法の鉄鋼分野への普及の端的な例と思う。内容はもともと「ふえらむ」の記事で、「Fe-Cu合金におけるスピノーダル分解シミュレーション」をプログラム付きで解説したものである²⁾。当時、掲載プログラムはJavaで書かれていたが、昨今のデータサイエンスの発展によりPythonがプログラミング言語として標準になりつつあることを受けて、上記のWeb講座では、Javaのソースコー

ドをPythonに書き直し、さらにそのコードをWeb講座のHPからダウンロードできるよう事務局にお願いした。Pythonのプログラミング環境は、Anaconda⁷⁾等をインストールすることによって簡単に構築できるので、ダウンロードしたプログラム(Jupyter notebook形式)を、自身のパソコン上で即座に実行できる。計算理論の詳細やプログラムの実行手順等は、上記のオンデマンド講義内で、デモンストレーションも含め説明しているの、具体的内容に関してはWeb講座⁶⁾をご参照いただきたい。

3 改良セカント法に基づく二相組織の応力-ひずみ曲線計算

PF法は材料内部組織形成のシミュレーション手法であるが、その計算理論内に、不均一組織の全自由エネルギー評価法が含まれている。特に弾性エネルギーの計算に関しては、不均一な組織内の弾性場を、マイクロメカニクス(MM)⁸⁾に基づき数値計算する実効的ノウハウが集約されている¹⁾。この分野は現在、PF微視的弾性論⁹⁾と呼ばれているが、ここで使用している数学理論自体はMMと全く同じである。MMでは、例えば楕円体介在物等を対象に、解析解と数学理論体系の確立に力点が置かれるのに対し、PF微視的弾性論では、不均一組織を対象に、数値計算ノウハウの確立とその改良に力点が置かれている。

さて、介在物を含む組織の応力-ひずみ曲線の計算^{2,3,10)}において、以前、セカント法が提案され、そこではMM(森-田中の平均場近似)が使用された。この計算理論は極めて有用であるが、多くの場合、介在物形状については楕円体(球、板、

* 1986年名古屋工業大学を卒業後、同大学院を経て、1990年に同大学工学部助手に就任し、その後、(独)物質・材料研究機構主幹研究員、名古屋工業大学教授を経て、2015年より名古屋大学教授に就任。2025年より物質・材料研究機構 NIMS 招聘研究員。

および棒の形状は楕円体にて表現できる)が仮定されている。PF微視的弾性論は、いわば任意形態の組織を対象としたMMであるので、任意形状の介在物を含む複合材料組織を捉えるようにセカント法を拡張できる。そこで鉄鋼材料の複相組織(フェライト・パーライト組織や、フェライト・ベイナイト組織など)を対象に、種々の解析を提案させていただいた(詳細については文献^{2,3,10})をご参照いただきたい)。このようにPF法は、組織形成だけでなく、各種のエネルギー場やポテンシャル場の数値計算手法の集合体でもあるので、様々な活用の仕方がある点を強調したい。

さらに重要な点は、PF法の組織形成シミュレーションと、複相組織の力学特性計算がシームレスに結びついた点、およびMMの理論体系が非常に普遍的な数学体系を有しているため、複相組織の力学特性計算のアルゴリズムが、そのまま他の特性計算(熱拡散、電気伝導、物質拡散等)に横展開できる点である。つまり広範囲な材料分野を対象に、組織形成シミュレーションと特性計算を融合した解析が現在可能となっている。このあたりの全体像に関しては、すでに解説¹⁾があるので、そちらをご参照いただければと思う。

4 材料組織生成AIおよびエージェントAI

当該分野の今後の展望として、やや私見もふくめ、ここでは材料組織生成AIとエージェントAIを取り上げる。まず背景であるが、2022年に大規模言語生成モデル(Large language model: LLM)のChatGPTがOpenAI社からリリースされ、生成AI分野が本格的にスタートし、現在、AI開発競争は世界的に激化している¹¹⁾。また同じ2022年に、3つの画像生成AI: DALL·E2, Midjourney、およびStable Diffusion(SD)が出現し、特にSDがオープンソースとして公開されたことから爆発的にこの分野も広がった。したがって現在のAI開発研究では、LLMと画像生成AIを軸足としたマルチモーダルな環境が主流となっている¹²⁾。以下、材料組織生成AIとエージェントAIについて、PF法との連携の視点から、最近の話題について説明する。

4.1 材料組織生成AIとPF法の連携⁵⁾

画像生成AIの学習は、通常、二段階にて進められる。一段目は例えばインターネット上の画像のビッグデータを用いた教師あり学習で、これにより任意の画像を生成可能な画像生成AIのひな型が構築される。二段目はファインチューニングで、特定分野の画像を追加学習し、ひな型AIを、その特定分野の画像生成に特化した生成AIに成長させる。さてPF法では、計算の初期条件を変更することにより、種々の組織形

態を量産できるので、これを画像生成AIのファインチューニングに活用することは有益であろう。これは、PF法のアウトプット組織情報を用いて、画像生成AIの基盤力を鍛えるアプローチであり、一連の手順は以下のようにまとめられる⁵⁾。

- ① ひな形の画像生成AIを選択(現在、世界的に多くの画像生成AIが公開・共有されている)
- ② PF法にて、目的とする組織の教師データを準備
- ③ ①の画像生成AIを、②のデータを用いてファインチューニング(DreamBooth学習を推奨)
- ④ 実験組織を準備
- ⑤ ③の画像生成AIを、④のデータを用いてファインチューニング(LoRa学習を推奨)

図1は、①としてv1-5-pruned-emaonly.safetensors(Stable Diffusionに標準装備されている学習モデル¹³⁾)を選択し(図1(a):例としてブロック壁を6例生成)、②PF法で多結晶組織を100枚用意して(図1(b))、③DreamBooth学習にてファインチューニングした結果である(図1(c):6例生成)。まずこの段階までにて、PF法の組織をほぼ忠実に再現する画像生成AIが構築できたことがわかる。次にここでは、④粒界相を含むネオジム磁石の組織写真¹⁴⁾を1枚使用した(図1(d))。これを用いて、図1(c)の画像生成AIをLoRa学習にてさらにファインチューニングした結果が図1(e)である(6例生成)。図1(d)の粒界相組織の特徴が、かなりリアルに生成されている。一方②と③のPF法のデータを省いて、①に直接④の実験データをファインチューニングにて学習させると、当然ではあるが実験組織の再現度は低下する⁵⁾。実験で得られる組織写真には、多くの場合ノイズが含まれるので、ノイズの少ない計算組織情報を用いて事前学習させた後、実験の組織写真を追加学習させる本手順は有効と考えられる。またこの手順の場合、実験の組織写真が少数で足りる点も工学的に重要であろう。試みに鉄鋼材料組織に対して、同様の手順で生成AIを構築した例を図2(A)と(B)に示す(図の見方は図1(d)と(e)の場合と同じである)。それぞれフェライト・パーライト組織¹⁵⁾、および球状黒鉛鉄組織¹⁵⁾で、実験組織の再現度は、若干低いように見えるが、実験組織写真を1枚しか使用していない点を考慮すると、この結果は悪くないように思われる。

なお重要な視点として、画像生成AIは物理的シミュレーションでは無い点を理解しておくことが大切である。生成AIには、不可避的にハルシネーション(虚偽の生成)が含まれるので、筆者は、画像生成AIをシミュレーションの代用とすべきでは無いと考えている。あくまで類似の組織形態を参考情報として生成するシステムであって、推奨される適用事例としては、例えば材料開発において指針を考える時に活用する、組織の多様性を広く把握する、また教育用に使用する

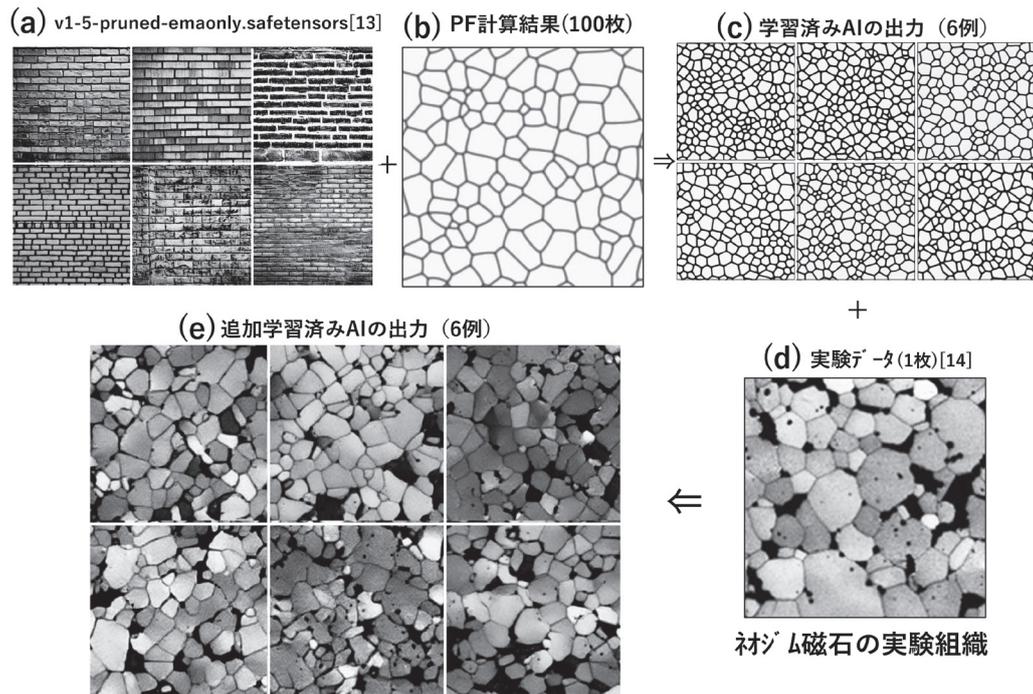


図1 PF法の出力組織情報を用いて、ひな形の画像生成AI¹³⁾をファインチューニングし、さらに実験データ¹⁴⁾を追加学習して、生成画像の精度向上を試みた解析例

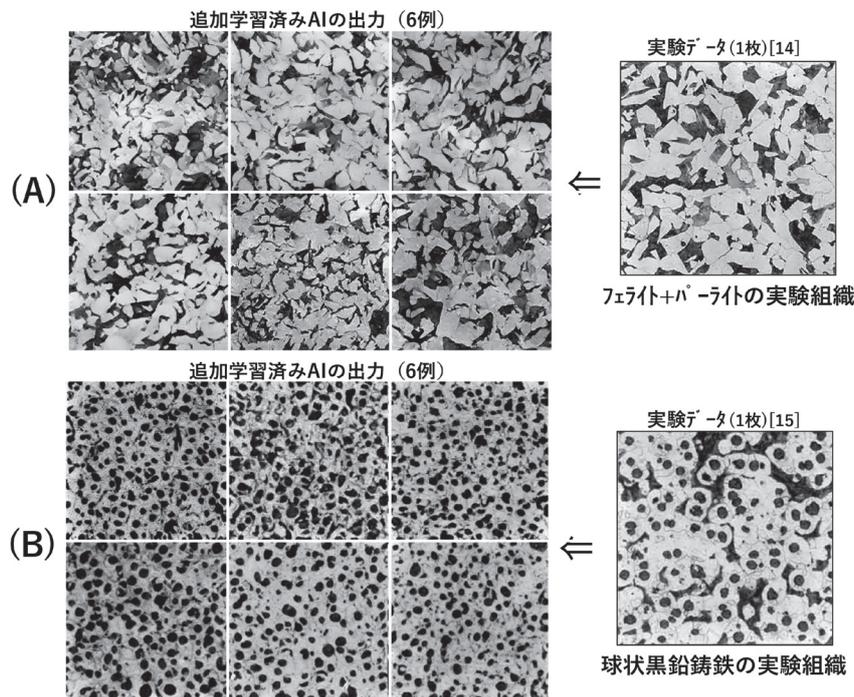


図2 実験データ¹⁵⁾を追加学習して、生成画像の精度向上を試みた解析例：(A) フェライト・パーライト組織の場合、(B) 球状黒鉛鑄鉄組織の場合

など、それほど精度を要求しない活用の仕方が有益と思われる。一方、今後世界的に、個別にファインチューニングした材料組織生成AIシステムが乱立することも予想されるので、これらをツール群とみなした活用法も、これからの材料開発や材料教育において重要となるかも知れない。

4.2 エージェントAIと材料工学の連携

OpenAI社が提唱している汎用人工知能へのロードマップ¹⁶⁾において、現在のLLMは、レベル2(推論エンジン)からレベル3(エージェント)に移行中と認識されている(当該分野の進展スピードは極端に速いので、本原稿が出版された

時にはレベル3が日常になっているかも知れない)。最近のLLMの特徴は推論が強化されたことで、これはエージェントとして自立駆動するLLMに必要な能力でもある。

さて言語生成AIには、もともと以下の示す本質的な限界があることが知られている¹⁷⁾。(1) 最新の情報(例えば今日の天気や株価等)にアクセスできない。(2) 独自の情報源にアクセスできない。(3) 推論が弱い(簡単な計算も間違える)。(4) ファインチューニングによる汎用性の劣化(特定のタスクに対応するようにファインチューニングすると汎用性が劣化)。これらを受けて、LLM自身を鍛えることを優先せずに、(LangChainによる外部関数呼び出し機能¹⁸⁾や、LangGraphの外部ツール呼び出し機能¹⁸⁾を用いて、苦手なことは別のツールで実行させる方法論が近年大きく進展している。その典型例を図3に示す(エージェントは、「AIが自律的に仕事をする」意味で使用される言葉であるが、外部ツールを活用できるAIは、結果的に自律的に仕事ができるようになるため、ここでは外部ツール活用型AIをエージェントAIと記している点に注意されたい)。図3は、エージェントAIが、「東京で今日、出かける時の適切な服装は？」の問いに答える例で、情報として東京の今日の気温が必要である。しかしLLMは過去の情報しか学んでいないので、現在の東京の気温はわからない。LangChainやLangGraphは、ChatGPTなどのLLMと、各種の外部ツールを組合わせて、エージェントAIシステムを構成する環境¹⁷⁾であり、図3はLangGraphを用いて、ChatGPTと外部ツールとしてGoogle検索を組合わせ

た例である(LangGraphの役割は、「ツール:Google検索」が使えること、およびこのツールへ「検索単語」を入力できることを、ChatGPTに知らせ、LLMとツールの連携をタスクフローのように規定することである)。ChatGPTは現在の東京の気温はわからないのだが、Google検索が使えることはLangGraphから教えてもらっているので、ChatGPTからは、ツール:Google検索を使いなさい、入力キーワード:東京の現在の気温としなさい、という指令がエージェントAIに戻ってくる(LLMには、各種プログラムの実行能力が本質的に備わっていない点に注意されたい)。LangGraphのエージェントAIは、ツール:Google検索を実行できるので、入力キーワード:東京の現在の気温を入力して実行すると、現在の気温12°Cが返ってくる。エージェントAIが、この値をChatGPTに戻すと、ChatGPTは現在の気温情報を入手できたので、「東京は12°Cなので、厚手のコートがよい」と、適切な回答が得られる。つまりLLMが、次のステップで使用する適切なツールと、そのツールへのインプット情報を教えてくれるので(LangGraphで事前にツール名とツールの使い方情報をLLMに教えている)、これは言わば、エージェントAIがツールとLLMの橋渡しを行っている形である。

以上は一般的な説明であるが、これを材料学に置き換えた場合が図4であり、ここでは、Fe合金の相、組成、および温度を指定して、ギブスエネルギーの値をエージェントAIに質問した例を示す。実際にFe-Cr合金とFe-C合金の α 相のギブスエネルギーを計算するプログラムをPythonで作成し、

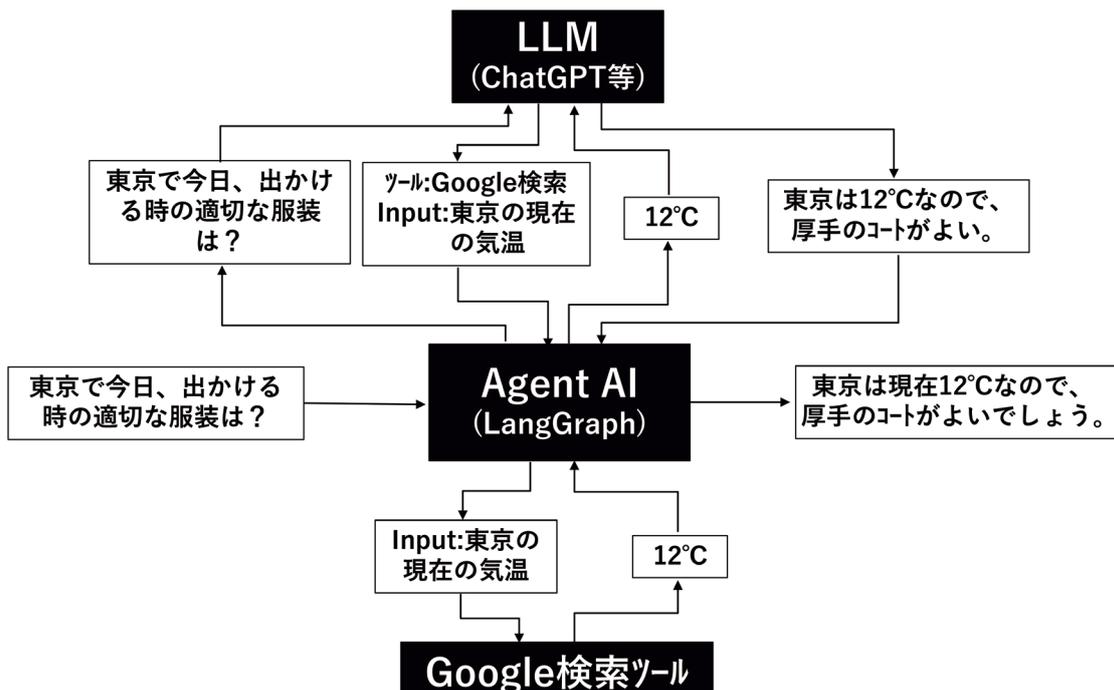


図3 LLMとツール呼び出し機能の関係図(エージェントAIの基本構成)

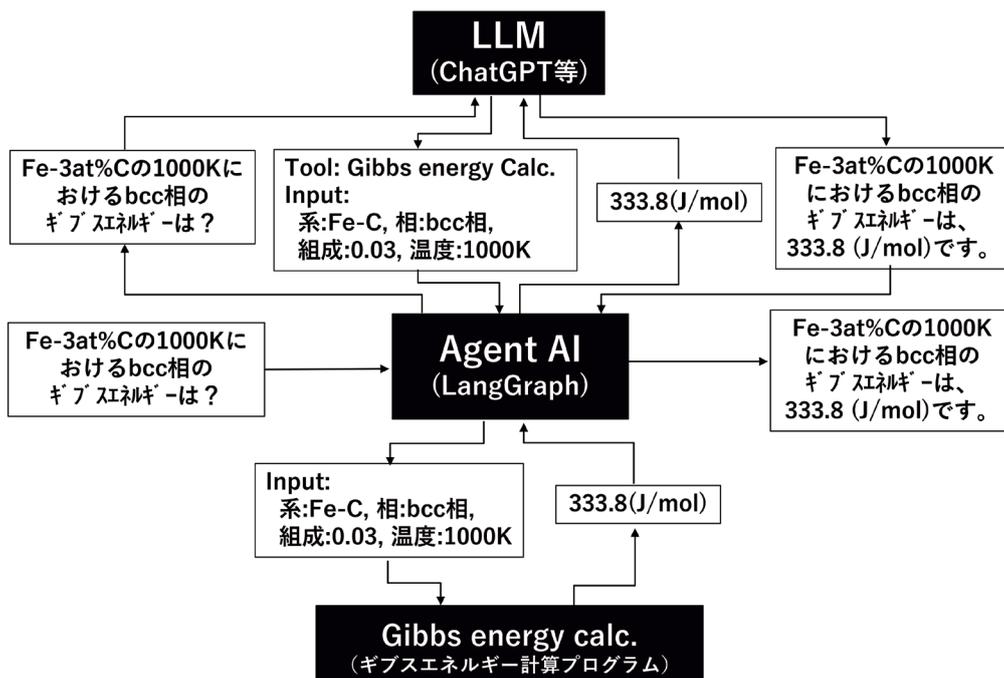


図4 ギブスエネルギーを計算するエージェントAIの構成図

図4の下の部分に組み込み (ツール名を Gibbs energy calc とした)、エージェント AI に「Fe-3at%C の 1000K における bcc 相のギブスエネルギーは？」と質問した。ChatGPT は当然ギブスエネルギーの計算は出来ないが、ツール : Gibbs energy calc を使えることは LangGraph から教えてもらっているので、ChatGPT から、Tool : Gibbs energy calc を使いなさい ; 入力パラメータは、系 : Fe-C, 相 : bcc 相, 組成 : 0.03, 温度 : 1000K としなさい、という指令がエージェント AI に戻ってくる。LangGraph のエージェント AI はツールを実行できるので、入力パラメータ [系 : Fe-C, 相 : bcc 相, 組成 : 0.03, 温度 : 1000K] を入力して実行すると、333.8 (J/mol) が返ってくる。エージェント AI が、この値を ChatGPT に戻すと、ChatGPT はギブスエネルギー値を入手できたので、「Fe-3at%C の 1000K における bcc 相のギブスエネルギーは、333.8 (J/mol) です」と、正確な回答が返ってくるわけである (同じシステムで、「Fe-20at%Cr の 1000K における bcc 相のギブスエネルギーは？」と聞くと、「Fe-20at%Cr の 1000K における bcc 相のギブスエネルギーは、-2920.3 (J/mol) です」と返ってくる)。さらに同じシステムで、「日本一高い山は？」と聞くと、「富士山です」と返ってくるので、このエージェント AI のシステムは、既存の LLM の特化型強化になっていることがわかる。

重要な点は、LLM とツールの組合せが自在である点である。LLM は ChatGPT でなくてもよく、複数の LLM を組み合わせることも可能である。ツールも一つである必要はない。試

みにツールの部分に Fe-Cr 合金 α 相のスピンノーダル分解の PF シミュレーションプログラムを組み込んで、「Fe-50at%Cr の 673K 等温時効における bcc 相の PF シミュレーションを実行せよ」と入力した結果、ある意味、当然ではあるが、きちんとしたスピンノーダル分解の実行結果が得られた。以上は些細な例ではあるが、この環境は、既存のソフトウェアを実行できるエージェント AI を現在容易に構築できるようになったことを意味している。つまりユーザーはソフトウェアのマニュアルを読まなくても自然言語で指示すればよい。ツールの位置に、第一原理電子状態計算、分子シミュレーション、CALPHAD 法、PF 法、有限要素法、また流体シミュレーションなどのソフトウェアを置くといったことが近未来的に起こった時、材料研究のスタイル自体が大きく変わるかも知れない (エージェント AI は、アシスタント、スタッフ、ライブル、...)。

5 おわりに

PF 法と鉄鋼材料学の関わり合いにおいて、過去・現在・未来を視野に、やや広いお話をさせていただいた。まず PF 法と PF 微視的弾性論の組合せは、材料組織を基軸とした材料設計において有益である。これは PF 法の体系が各種のエネルギー論と速度論を内包し、かつ PF 微視的弾性論の体系は、様々な材料特性計算に広く展開できるからである。また PF 法から計算される組織情報を活用した画像生成 AI 構築手

法は、実験情報の効率的活用手法として有効と思われる。さらに特性計算と連携させることにより（潜在空間など、機械学習のノウハウも活用することによって）、組織-特性解析が精緻化できる可能性も高い。LLMにツールを装備させる環境が整備されたことを受けて、Chat型AIが、エージェント型AIへと移行し始めており、材料分野においても今後の展開が期待される。以上のように各種手法の発展が超加速している昨今ではあるが、最も大切なことは、強力なツールを縦横に活用しつつ、材料科学・工学の基礎・基盤となる課題を抽出し、学問の深化と拡大を目指す視点であろう。

謝辞

本研究の一部には、JST SIP（統合型材料開発システムによるマテリアル革命）、文部科学省データ創出・活用型マテリアル研究開発プロジェクト事業（データ創出・活用型磁性材料研究拠点JPMXP1122715503）、およびJST-CREST（JPMJC22C3）のご支援をいただきました。

参考文献

- 1) 小山敏幸：応用物理, 94 (2025), 10.
- 2) 小山敏幸：ふえらむ, 11 (2006), 647.
- 3) 小山敏幸：鉄と鋼, 97 (2011), 212.
- 4) T. Koyama：ISIJ International, 52 (2012), 723.
- 5) 小山敏幸：日本機械学会誌, 128 (2025), 30.
- 6) 日本鉄鋼協会HP, 会員向けWeb講演会, <https://www.isij.or.jp/event/webinar/index.html>, (2025年3月).
- 7) ANACONDAダウンロードサイト, <https://www.anaconda.com/download>, (2025年3月).
- 8) 森勉, 村外志夫：「マイクロメカニックス」, 培風館, (1976).
- 9) 小山敏幸, 塚田祐貴：「材料組織弾性学と組織形成」, 内田老鶴圃, (2012).
- 10) 足立吉隆, 小山敏幸：「3D材料組織・特性解析の基礎と応用」, 新家光雄（編）, 内田老鶴圃, (2014).
- 11) 岡留剛：「深層学習生成AIの基礎」, 共立出版, (2024).
- 12) D. Foster（著）, 松田昇一, 小沼千絵（訳）：「生成Deep Learning（第2版）」, オライリー・ジャパン, (2024).
- 13) CIVITAIホームページ, <https://civitai.com/models/62437/v1-5-pruned-emaonly>, (2025年3月).
- 14) JFEテクノロジーサーチ（株）分析事例, https://www.jfe-tec.co.jp/nano-c/ebsd_feepma.html, (2025年3月).
- 15) 川重テクノロジー（株）分析事例, <https://www.kawaju.co.jp/rd/material/performance/kinzoku.html>, (2025年3月).
- 16) 汎用人工知能のロードマップ, <https://chatgpt4online.org/openai-5-level-development-strategy-to-agi/>, (2025年3月).
- 17) E.Karpas, O.Abend, Y.Belinkov, B.Lenz, O.Lieber, N.Ratner, Y.Shoham, H.Bata, Y.Levine, K.Leyton-Brown, D.Muhlgay, N.Rozen, E.Schwartz, G.Shachaf, S.Shalev-Shwartz, A.Shashua and M.Tenenholtz：MRKL Systems, arXiv:2205.00445 [cs.CL], <https://arxiv.org/abs/2205.00445>, (2025年3月).
- 18) 西見公宏, 吉田真吾, 大嶋勇樹：「LangChainとLangGraphによるRAG・AIエージェント [実践] 入門」, 技術評論社, (2024).

(2025年3月17日受付)