材料科学のためのコンピュータ ネットワーク環境 —なぜ材料科学に必要なのか—

統合化熱力学データベース —Thermo-Calc を例として—

大谷 博 司*

1. はじめに

近年、材料物理化学の分野で、材料の持つ熱力学的諸量を統一的に再評価し、これをデータベース化する試みが盛んに行われている⁽¹⁾。しかしこのようなデータは、そのままでは単なる数値に過ぎず、一部の関係者を除いて積極的に利用する気になれないのが本当であろう。そこで、これらの貴重な熱力学的データを用いて状態図などを計算し、現実の材料の設計開発や基礎物性の理解に役立てるために、統合化熱力学データベースの構築が、欧米を中心に積極的に行われるようになってきた⁽²⁾。この統合化熱力学データベースとは、一言でいえば、データベースを利用してさまざまな熱力学的計算を行い、その結果を可視化するための計算機ソフトウェアのことである。

そこで本稿では、代表的な統合化熱力学データベースとして Thermo-Calc を例にとってその概要を紹介し、このようなデータベースの今後の利用形態について考えてみたい。なお本稿は、本年7月に開催された金属学会セミナー「材料開発・設計における状態図の基礎と応用」で筆者が発表した内容⁽³⁾に、加筆修正をしたものであることをあらかじめお断りしておく。

2. Thermo-Calc の構成

Thermo-Calc⁽⁴⁾は、1981年にスウェーデンの王立工科大学において事実上の開発に着手されて以来、今日までに幾多

* 東北大学助手；工学部材料物性学科(〒980-77 仙台市青葉区荒巻字青葉)

Integrated Thermodynamic Databases —Thermo-Calc by Way of Example—; Hiroshi Ohtani (Department of Materials Science, Faculty of Engineering, Tohoku University, Sendai)
Keywords: database, thermodynamics, phase diagram calculation
1994年6月30日受理

図1 Thermo-Calcの主要モジュール。

の改良が加えられ、VAXをはじめとする世界中の数多くの機種種のコンピュータに移植されてきた、統合化熱力学計算ソフトである。

Thermo-Calc は、モジュールとよばれるいくつかの独立したプログラム単位から構成されている。Thermo-Calc に含まれるモジュールを図1に示した。各モジュールには固有の機能があり、その機能の実現のために、それぞれに多くの命令(コマンド)が準備されている。利用者は、一旦 Thermo-Calc を起動すれば、そこから出ることなく自由にモジュールの間を往来できる。したがって、各モジュールの目的を正確に理解し、それぞれの機能を互いに有機的に結び付けることが、このソフトウェアを使いこなす一つのこつである。いくつかの重要なモジュールについて、その代表的な機能をまとめてみよう。

(1) DATABASE モジュールと GES モジュール

DATABASE モジュールは、利用者の必要とする熱力学パラメータを、表1に示したような種々の熱力学データベースから取り出す機能を提供するものである。データベースとして通常最も利用頻度の高いものは、SGTE (Scientific Group Thermodata Europe) とよばれるヨーロッパの熱力学データ研究グループによる、SSOL データベースであろう。ここには現在、熱力学的評価の終了した200以上の合金系のパラメータが、連続したテキストファイルの形態で集録されている。もちろん利用者自身がデータベースを構築して、Thermo-Calc において利用することも可能である。

また GES モジュールには、このようにして取り出した熱力学パラメータを数値として確認し、必要に応じて修正や再定義を行う機能がある。したがってこのモジュールを用いれば、利用者自身がデータベースを書き換えることが可能である。このモジュールには、副格子モデル⁽⁵⁾、イオン性溶体の

表1 Thermo-Calc の熱力学データベース.

データ ベース名	内 容
SSUB	SGTE により評価された純物質に関するデータベース.
SSOL	SGTE により評価された多元系合金に関するデータベース.
SLAG	H. Gaye, D. Coulombert により評価された Al_2O_3 - CaO - FeO - Fe_2O_3 - MgO - MnO - SiO_2 系スラグのデータベース.
ION	王立工科大学において評価された Al - Ca - Mg - Si - O , C - Ca - Fe - Si - O , Cr - Ni - O , Al - Si - O - N 系データベース.
KP	L. Kaufman による Fe , Cr , Ni , B , C , Co , Mo , Nb , Ti , W , Mn , Al , Si , Cu から構成される 2 元系データベース.
GEO	S. K. Saxena による Al - Ca - K - Fe - Mg - Na - Si - O 系の珪酸塩および酸化物に関するデータベース.
FE	鉄希薄溶体中での固相間の平衡を計算するためのデータベース. Al , C , Co , Cr , Cu , Mn , Mo , N , Nb , Ni , Si , Ti , V , W が 0.1% から最大 20% (元素による) の範囲内で正確な相平衡が計算できる.

ための副格子モデル⁽⁶⁾, Kapoor-Frohberg-Gaye のスラグモデル⁽⁷⁾⁽⁸⁾などの熱力学モデルがあらかじめ組み込まれている.

(2) POLY-3 モジュール

このモジュールは, 平衡計算を行うために用意されたものであり, 考えられるほぼすべての熱力学的な計算ができる. 平衡計算は, 未定定数法を用いてシステムの自由エネルギーを最小化する手法を用いており, 通常の熱力学計算に伴う複雑な拘束条件(たとえば相や原子のモル数, 電気的中性条件など)は, すべてこのモジュールが吸収して処理する. したがって, たとえばガス相やイオン性溶体, 正則溶体など, それぞれ固有の拘束条件を内包するいくつかの相を同時に平衡化するような条件を与えたとしても, 計算の錯誤を生じる心配はない.

計算の初期値はモジュールにより自動的に与えられるが, 2 相分離や規則相の計算等を行う際には, 利用者が適切な数値を設定する必要がある.

計算の結果は, Post-processor において多様なダイアグラムとして表示される. 座標軸としては, 温度や組成ばかりでなく, 活量や圧力, 各相の分率や規則度パラメータなど, さまざまな状態変数を設定できるので, 現象の本質を理解する上で大きな助けになる場合が多い.

(3) PARROT モジュール

表1に示したようなデータベースを使って, 状態図を計算するだけであれば, このモジュールは必ずしも必要ではない. しかし, 与えられるデータベースで計算できる合金系は限られたものであり, 目的の系がそこに見つからなければ,

利用者自らが熱力学的評価を行う必要がある. この PARROT モジュールは, このようなアセスメントを支援するためのツールである.

具体的には, 過去の文献から選択した状態図データや熱力学データを, 実験条件と一緒にモジュールに読み込ませ, 同じ条件で計算した結果と比較する. もし両者の差が許容範囲よりも大きければ, モデルの熱力学パラメータ(相互作用パラメータなど)を変化させて差を縮めていき, 許容限度に収まるまでその操作を繰り返す. ちょうど最小 2 乗法によるパラメータフィッティングを連想すればよいが, それよりはかなり柔軟性に富んでおり, たとえば不等号の条件なども考慮できる.

3. Thermo-Calc による計算例

Thermo-Calc によって計算した状態図の例を, 図2と図3に示した. いずれも SSOL データベースを利用して計算したものであるが, 出力結果の正確な理解のために, 相領域のラベリングなどに最小限の手を加えてある.

図2は, Fe-Cr-Mo 3 元系の1000°Cにおける等温断面状態図である. 比較的単純な状態図計算の場合, 計算の初期値は通常一つの点を設定すれば十分であるが, 相領域が孤立している場合や 2 相分離を生ずる場合には, 複数の点を初期値として登録しておく必要がある.

図3には, Fe-1.5Cr-3Ni-0.4Mn-0.3Si-C 系の縦断面状態図を計算した結果を示した. このような複雑な状態図では, 相領域の同定が困難であるので, 相境界線上にどのような相の境界であるのかを表示する機能なども用意されている.

ここで, Thermo-Calc の主な特徴についてまとめてみると次のようになる.

- (1) 平衡状態については, 考え得るほぼすべての平衡計算

図2 Fe-Cr-Mo 3 元系の1000°Cにおける等温断面状態図.

図3 Fe-1.5Cr-3Ni-0.4Mn-0.3Si-C系の縦断面状態図.

が実行できる. また平衡計算の応用として, 界面での局所平衡を仮定した凝固シミュレーション, バラ平衡, 相平衡に及ぼす二次相変態の影響や圧力効果なども計算できる.

(2) 利用者自身が熱力学的評価を行うことができる. また, その結果を個別のデータベースとして利用したり, 既存のデータベースに組み込むことも可能である.

(3) 一方, 選択できる熱力学モデルが, 通常 GES モジュールの項で述べたようなもの限定され, 新たに熱力学モデルを定義することが難しい.

紙面の都合上, 十分な計算例をここに引用することができなかったが, 鉄鋼材料を中心にさまざまな利用例⁽⁹⁾が報告されているので, そちらも是非参照していただきたい.

4. 熱力学データベースとネットワーク

ここで紹介したように, Thermo-Calc をはじめとする統合化熱力学データベースを用いれば, これまで多大な時間と労力の投入が必要であった複雑な熱力学計算が, 誰にでも行えるようになる. そして, それらの計算結果は熱力学に則っているが故に十分に正確であり, また現実の材料開発・材料設計において主導的な役割を果たし得るほどに, ソフトウェアとしての完成度も高い.

一方, 近年の計算機, 特にワークステーションの急速な普及に伴い, 計算機同士を互いに接続し, 必要な情報を共有しあうコンピュータネットワークの思想が普及しつつある. このような領域は, これまで一般に情報工学に属するものとして, 材料工学や物理化学の専門家からは, あまり関心を持たれなかった分野であろう. しかし, このネットワークの浸透力は強力かつ急速であり, 知らぬ間に, 身の回りにネットワ

ーク環境が構築されていたりして, 驚かされることがある.

我が国において, この統合化熱力学データベースを, 今後材料開発などの実際の現場で应用するために解決すべき課題は, いかに多くの信頼できる熱力学データを整理・蓄積し, データベースとして管理・運営するかという点である. そのためにはまず, 現在個別の利用者毎のパッケージとして供給されているデータベースを, できるだけオープンな場所に置き, ネットワークから広く利用できる環境を整える必要がある. また, 基本的な熱力学データの標準化⁽¹⁾やデータの評価などを行う, ワーキング・グループの設置も是非必要であろう. いずれにせよ, ネットワークの有効利用が, 熱力学データベースの今後の普及・発展のキーワードになると考えられる.

5. おわりに

従来, 熱力学には煩雑な数式を取り扱うイメージがあり, 熱力学計算というだけで着手をためらった研究テーマも, 案外多かったのではないと思う. しかし, 近年の統合化熱力学データベースの発展により, このような状況が少しずつ打開され, これまで熱力学や状態図に馴染みの薄かった研究者や技術者の間にも, この種の計算を行ってみたいという潜在的欲求が高まっていると, 筆者は日頃感じている.

我が国には, 製鋼反応の推奨平衡値⁽¹⁰⁾や, MALT2 データベース⁽¹¹⁾など, 優れた国産の熱力学データが数多く存在している. 現在は, これらの蓄積されたデータをできる限り標準化し, 状態図や種々の物性値の計算に応用する段階に来ている. 統合化熱力学データベースと, コンピュータネットワークの結合が, 独創的でオープンな熱力学データベースの構築へと発展することを, おおいに期待したいと思う.

文 献

- (1) 田中敏宏, 飯田孝道: 日本金属学会会報, **32**(1993), 535.
- (2) C. W. Bale and G. Eriksson: Can. metall. Q., **29**(1990), 105.
- (3) 大谷博司: 材料開発・設計における状態図の基礎と応用(金属学会セミナーテキスト), 日本金属学会, (1994), 115.
- (4) B. Sundman, B. Jansson and J.-O. Andersson: CALPHAD, **9**(1985), 153.
- (5) M. Hillert and L.-I. Staffansson: Acta Chem. Scand., **24**(1970), 3618.
- (6) M. Hillert, B. Jansson, B. Sundman and J. Ågren: Metall. Trans. A, **16A**(1985), 261.
- (7) M. L. Kapoor and M. G. Froberg: Arch. Eisenhüttenw., **45**(1974), 663.
- (8) H. Gaye and D. Coulombert: EC Report PCM RE 1064, CECA No. 7210(1984).
- (9) 長谷部光弘: 材料開発・設計における状態図の基礎と応用(金属学会セミナーテキスト), 日本金属学会, (1994), 43.
- (10) 日本学術振興会第19委員会篇: 製鋼反応の推奨平衡値, (1984).
- (11) 日本熱測定学会篇: 熱力学データベース MALT2, 科学技術社, (1992).