

令和 2 年 9 月 9 日現在

機関番号：11301

研究種目：国際共同研究加速基金（国際共同研究強化）

研究期間：2018～2019

課題番号：17KK0108

研究課題名（和文）材料ライフサイクルのための統合型材料設計システムの創成

研究課題名（英文）Creation of Integrated Material Design System on Material Lifecycle

研究代表者

青柳 吉輝（Aoyagi, Yoshiteru）

東北大学・工学研究科・准教授

研究者番号：70433737

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 11,700,000円

渡航期間： 12ヶ月

研究成果の概要（和文）：真の材料設計のためには構造材料のライフサイクル（創製，加工，利用，劣化，再生）すべてを網羅するような統合型材料設計システムの構築が必要である。そこで本国際共同研究では，異なるスケール・事象に関するマルチスケールモデリングを得意とするその分野のプロフェッショナルが強固に連携することで，構造材料設計手法のブレークスルーを達成することを試みた。海外共同研究者の材料設計に関する知見を基課題に統合することによって，基課題のみでは達成が困難な，構造材料のライフサイクルに関する統合計算材料設計システムの一部を創成した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本国際共同研究によって，転位密度，結晶方位，結晶粒サイズなどの，材料固有のパラメータに基づいて金属材料の力学特性，変形挙動および材料寿命が予測可能となった。このことは，本モデルが単なる構造解析用の塑性論ではなく，新材料創製支援ツールになり得ることを意味している。構造用金属材料に関する本国際共同研究で得られた考え方を高分子材料や繊維強化複合材料に応用することによって，非金属最先端材料に関する研究成果もあっており，本海外研究課題の成果によって，金属材料のみならず，繊維強化複合材料といった最先端材料の材料ライフサイクルに基づく計算設計システムの構築に近づくと考えられる。

研究成果の概要（英文）：For true materials design, it is necessary to construct an integrated materials design system that encompasses the entire life cycle of structural materials (production, processing, use, degradation, and reuse). In this international collaborative research, we attempted to achieve a breakthrough in structural materials design methodologies through the collaboration of professionals in the field who are skilled in multiscale modeling for different scales. By integrating the material design knowledge of an international collaborator into the multiscale model proposed by the principal investigator, we have created a part of an integrated computational material design system for structural material lifecycle.

研究分野：計算塑性力学

キーワード：材料ライフサイクル 統合型材料設計 マルチスケールモデリング サイクル疲労 極値統計

1. 研究開始当初の背景

従来の「材料設計」では、単に材料特性に基づいた「材料選択」に過ぎないにも関わらず、この経験的アプローチは過去 20 年もの間重要視されてきた。しかしながら、近年では理論モデリングや観察・分析技術の格段なる進歩に伴い、最適化された機能を実現するための「真の材料設計」に移行してきている。基課題では、最先端材料の降伏曲面を材料微視組織から予測することで創製された材料の工業的応用が可能な計算材料設計システムの構築を目指している。しかしながら、図 1 のように、構造材料のライフサイクルは、創製から始まり、加工を経て実際に利用され、消耗による劣化、そして再生することで新たな創製へとつながる。UFGM (超微細粒金属材料: Ultrafine-Grained Metal) は高強度化の際に添加元素を必要とせず、また、FRTP (繊維強化熱可塑性樹脂: Fiber-Reinforced Thermoplastic) の母材は熱可塑性樹脂であり溶融が可能である。そのため、これらの最先端材料は従来の合金強化型金属や繊維強化熱硬化性樹脂と比べてリサイクル性に優れている。すなわち、基課題で対象としている最先端材料は再生可能材料であると言え、これらの過程を全て統合することで真の材料設計が可能となる。この統合は、従来の工学設計分野で実践されている材料選択を超えた重要な飛躍を意味している。

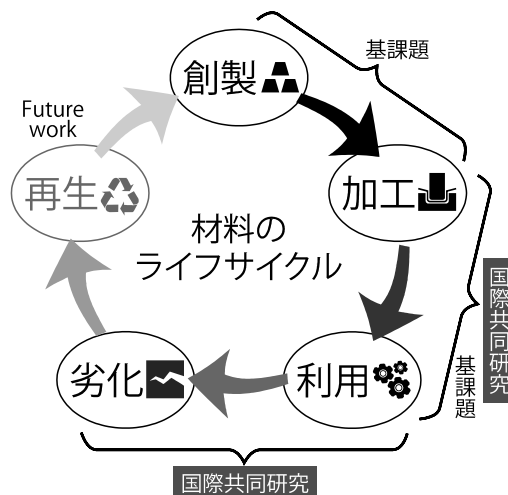


図1 統合型材料設計

近年、統合計算材料工学は、計算モデリングとシミュレーションを実際の製品開発と統合する段階に達してきており、一般的に「材料設計」と呼ばれる所望の力学特性や変形応答を達成するための「材料選択」からのブレークスルーになりつつある。統合計算材料工学には、材料創製、製造、加工、性能・特性・寿命予測といった複雑な要求を満たす必要があり、様々な分野の知見の中から学際的な設計最適化が必要とされる。個々の分野における研究は国内外で盛んに行われており、それらを統合しようというプロジェクトである新学術領域研究 (研究領域提案型) バルクナノメタル、シンクロ LPSO 等はその最たる例である。しかしながら、個々の研究は強力ではあるものの、構造材料のライフサイクルという意味でそれらを真に統合した例は見られない。

2. 研究の目的

本国際共同研究では、材料ライフサイクルを視野に入れた真の材料設計システムの創成を目指し、金属材料に対する実践的 CAE システムを実用レベルの解析コードに組み込むことによって、まずは創製から加工、利用、劣化まで過程をシミュレートする統合計算材料設計システムを構築する。再生に関する内容は本国際共同研究終了後の課題とする。基課題で得られた微視組織の観察結果に基づいて降伏曲面を数値解析的に予測する本システムを汎用 FEM 解析コードに組み込み、最先端金属材料にも利用可能な CAE システムを構築する。本システムを用いて、塑性加工の代表的な問題である圧延等を想定し、超微細粒金属シートを対象として数値解析を行う。得られた結果を実験結果と比較し、本システムの妥当性を検証する。次に、加工された製品が実際に使用される条件を想定し、寿命予測シミュレーションを行う。亀裂の発生、進展などの破壊に関する現象を基課題の微視的構成モデルに導入し、本システムを繰返し負荷による力学特性の変化が表現できるように拡張する。拡張した本システムを用いてサイクル疲労を想定した数値解析を行い、実用を想定した最先端材料の寿命を評価する。

3. 研究の方法

(1) 本研究では純アルミニウム A1050 の冷間強圧延材を供試材とし、EBSD (電子線後方散乱回折: Electron Back Scattered Diffraction Pattern) 法による微視的組織情報の取得および単軸引張試験を実施した。単軸引張試験では平行部が RD (圧延方向: Rolling Direction) および TD (板幅方向: Transverse Direction) に平行となるように試験片を各方向 8 枚ずつ切り出し、ひずみ速度 0.001 にて引張試験を行った。試験片の厚みは 0.2 mm、外形は ISO6892-1 の Type1 試験片の 1/2 サイズとした。応力の値はロードセルで測定した荷重を試験片断面積で除すことで計算し、ひずみは平行部にひずみゲージを貼り付け測定した。

(2) 結晶塑性有限要素解析では、次式に示される弾粘塑性構成式を用いた。

$$\overset{\nabla}{\mathbf{T}} = \mathbf{C}^e : \mathbf{D} - \mathbf{C}^e : \sum_{\alpha} (\mathbf{s}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{m}^{(\alpha)})_s \dot{\gamma}^{(\alpha)} \quad (1)$$

ここで、 $\overset{\nabla}{\mathbf{T}}$ は Cauchy 応力の共回転増分、 \mathbf{C}^e は異方性弾性係数テンソル、 \mathbf{D} は変形速度テンソル、 $\mathbf{s}^{(\alpha)}$ はすべり方向ベクトル、 $\mathbf{m}^{(\alpha)}$ はすべり面の法線ベクトル、 $(\)_s$ は 2 階のテンソルの対称成分および $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$ はすべり速度を表す。硬化則には次式の Pan-Rice 型すべり速度硬化則を用いた。

$$\dot{\gamma}^{(\alpha)} = \dot{\gamma}_0^{(\alpha)} \left(\frac{\tau^{(\alpha)}}{g^{(\alpha)}} \right) \left| \frac{\tau^{(\alpha)}}{g^{(\alpha)}} \right|^{m-1} \quad (2)$$

ここで、 $\dot{\gamma}_0^{(\alpha)}$ は参照すべり速度、 $\tau^{(\alpha)}$ は臨界分解せん断応力、 $g^{(\alpha)}$ は流れ応力および m はひずみ速度感受性指数を表す。流れ応力の発展式は次式のように表される。

$$g^{(\alpha)} = \tau_0^{(\alpha)} + \sum_{\beta} a \mu \tilde{b} \sqrt{\Omega^{(\alpha\beta)} \rho_d^{(\beta)} + \Omega_{GN}^{(\alpha\beta)} \rho_{GN}^{(\beta)}} \quad (3)$$

ここで、 $\tau_0^{(\alpha)}$ は $g^{(\alpha)}$ の参照値、 a は数値定数、 μ は横弾性係数、 \tilde{b} はバーガースベクトルの大きさ、 $\rho_d^{(\beta)}$ はすべり系 β に統計的に蓄積される転位密度、 $\rho_{GN}^{(\beta)}$ は GN 転位密度、 $\Omega^{(\alpha\beta)}$ および $\Omega_{GN}^{(\alpha\beta)}$ は転位相互作用行列を表す。転位密度速度 $\dot{\rho}_d^{(\beta)}$ は次式で表される。

$$\dot{\rho}_d^{(\beta)} = (1 - k \rho_d^{(\beta)}) \frac{r \rho_f}{\tilde{b}} \left| \dot{\gamma}^{(\beta)} \right| \quad (4)$$

ここで、 k は転位の対消滅率、 r は蓄積されている転位線の長さの平均値および ρ_f は林立転位の密度である。

材料パラメータの r 、 k および $\rho_d^{(\beta)}$ は、単軸引張試験で得られた応力ひずみ線図に対して単軸引張シミュレーションの結果を比較して同定した。結晶塑性解析において多結晶金属の巨視的な力学応答を予測する際には、微細構造の影響を再現するために十分な数の結晶粒が必要となる。本研究では、結晶粒数が解析結果に与える影響を調べるために、結晶粒数が 27 個 (図 2) および 216 個の場合における機械的特性を求めた。それぞれ 100 個および 30 個の結晶方位の異なるモデルを用意し、各モデルから得られた解析結果を極値統計にて処理する事で 0.2% 耐力およびヤング率の値を求めた。各モデルの初期結晶方位は、EBSD 測定の結果からランダムに抽出した。

極値理論は、膨大な数のデータから任意に抽出されたデータセット中の最大値または最小値がある分布に従うことを示すものである。材料の強度は材料中の最弱の部分の強度となるため、解析モデルの示す機械的特性の値は、Gumbel 分布に従うと仮定した。Gumbel 分布は以下の式で表される。

$$P_i = 1 - \exp \left[-\exp \left\{ \alpha (y_i - u) \right\} \right] \quad (5)$$

ここで、 y_i は i 番目の最小値を表し、 P_i は累積分布関数、つまり、データセットの最小値が y_i 以上となる確率であり、 α はばらつきを表す変数、そして u がモード値である。式(5)は以下のように変形される。

$$\ln \left\{ -\ln(1 - P_i) \right\} = \alpha (y_i - u) \quad (6)$$

各機械的特性の累積分布関数は以下の式で表される。

$$P_i(x_i) = \frac{i - 0.3}{n + 0.4} \quad (7)$$

ここで、 x_i は 0.2% 耐力 σ_i およびヤング率 E_i のそれぞれ、 i はデータを昇順に並べた際の順位、 n はデータの総数である。

(3) 上記のマルチスケール結晶塑性シミュレーションシステムおよび極値理論を用いて、低サイクル疲労を想定して解析を行った。評価指標としては次式に示す FIPs (疲労指標パラメータ: Fatigue Indicator Parameters) を用いた。

$$P_{FS} = \frac{\Delta \gamma_{\max}^p}{2} \left(1 + k \frac{\sigma_{n \max}}{\sigma_y} \right) \quad (8)$$

ここで、 P_{FS} は FIPs、 $\Delta \gamma_{\max}^p$ はサイクル疲労時のすべりの最大幅、 k は材料パラメータ、 $\sigma_{n \max}$ はすべり面に作用する最大垂直応力および σ_y は降伏強度である。FIPs の場合は最大値の極値分布を評価することになり、Gumbel 分布は次式で表される。

$$P_i = \exp \left[-\exp \left\{ -\alpha (y_i - u) \right\} \right] \quad (9)$$

解析モデルには、37 の結晶粒に対して EBSD 測定の結果から約 150 通りの異なる組合せの結晶方位を割り当てた。サイクル数は 3 とした。疲労破壊に対する長範囲のすべりの影響を表現するために、すべり面に平行な円盤状の損傷作用領域を定義し、その領域に対してすべりの値を平

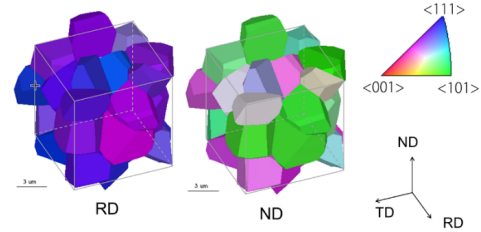


図2 結晶塑性シミュレーションの解析モデル

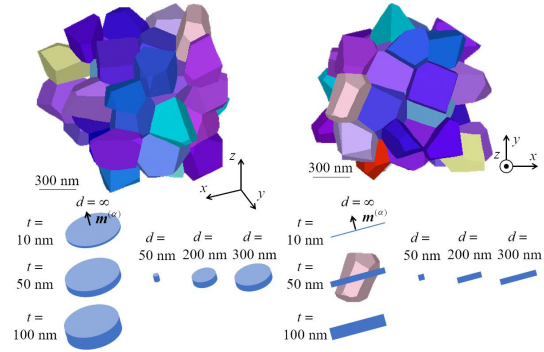


図3 損傷作用領域

均化して $\Delta\gamma_{\max}^p$ の算出に用いた。図3のように、損傷作用領域の大きさを変化させてその影響を調査した。

4. 研究成果

(1) 単軸引張試験から得られた 0.2%耐力の平均値は TD : 175.09 MPa, RD : 184.19 MPa, ヤング率の平均値は TD : 72.90 GPa, RD : 72.59 GPa であった。図4に、EBSD観察によって得られた結晶方位分布図および<111>に関する極点図を示す。結晶方位分布図から Brass 方位{110}<112>, Copper 方位{112}<111>, 極点図から S 方位が優先方位であることが分かる。試料面の法線方向に関する平均結晶粒径は 3.48 μm であった。

(2) 解析の結果得られた 0.2%耐力およびヤング率の値を図5に示す。プロットを直線近似した場合の傾き及び切片の値がそれぞれ α および u に対応する。各結晶粒数におけるモード値は、TDに比較してRDの方が大きくなり、結晶粒数によらずほぼ同じ値となった。また、モデルの結晶粒数が多い場合に、モデル群から得られる機械的特性の値のばらつきが小さくなる傾向が見られた。これらのことから、結晶粒数が少ないモデルを用いた場合であっても、複数のモデルに対して解析を行い、得られた機械的特性の値を極値統計処理する事で機械的特性の値を予測する事ができると考えられる。

(3) 極値統計によって求めた FIPs の最頻値および分散の TD と RD の比を図6および図7に示す。損傷作用領域の厚さや直径の変化に伴って TD と RD の比に差が生じているのがわかる。損傷作用領域が小さい場合、すなわち厚さが薄いあるいは直径が小さい場合は損傷に対するすべりの長範囲の影響を考慮することができないため正確な FIPs の値を求めるのが難しい。一方、図6を見ると、損傷作用領域が大きい場合は FIPs が粒全体の平均として算出されるため、局所的な損傷を評価することは困難であり、TD と RD の差は見えなくなる。圧延加工によって創製される微細粒金属材料の場合、極値統計に基づいて FIPs を評価することによって材料の寿命を評価することが可能となり、その際の損傷作用領域の大きさは材料の力学異方性を表すのに最適な大きさがあることが明らかとなった。

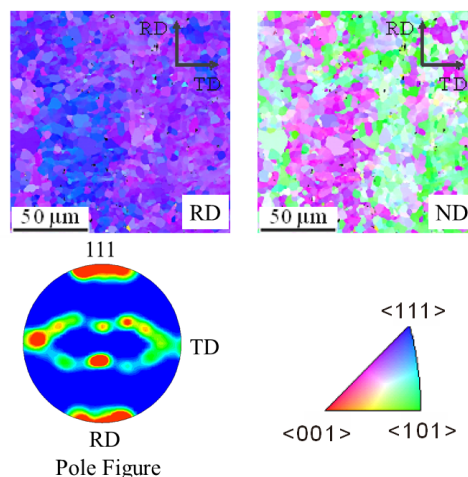


図4 EBSD 観察結果

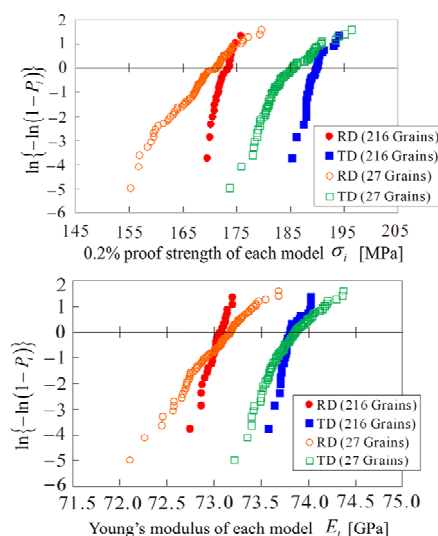


図5 極値統計による降伏強度およびヤング率

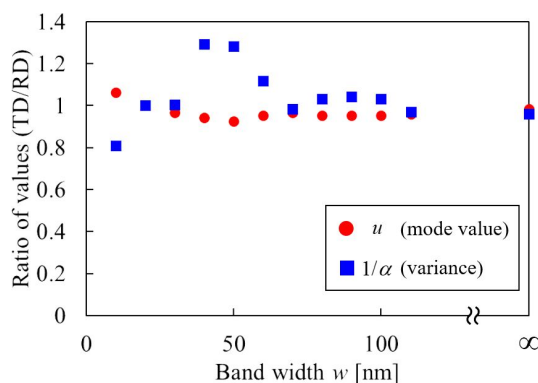


図6 損傷作用領域の厚さの影響

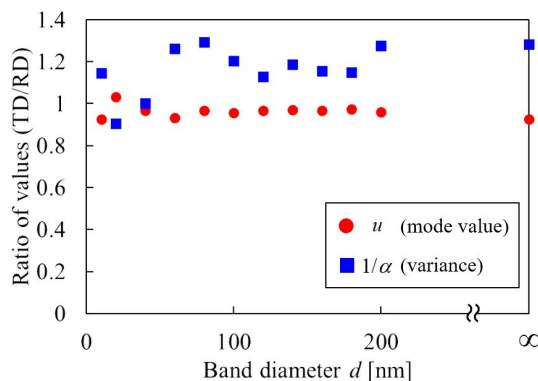


図7 損傷作用領域の直径の影響

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計7件（うち査読付論文 7件/うち国際共著 0件/うちオープンアクセス 5件）

1. 著者名 Watanabe, C., Kobayashi, B. Aoyagi, Y., Todaka, Y., Kobayashi, M., Sugiura, N., Yoshinaga, N. and Miura, H.	4. 巻 3
2. 論文標題 Heterogeneous Nano-structure and Its Evolution in Heavily Cold-rolled SUS316LN Stainless Steels	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 ISIJ International	6. 最初と最後の頁 582-589
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.2355/isijinternational.ISIJINT-2019-445	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 -

1. 著者名 小林正和, 岩間翔平, 渡邊千尋, 青柳吉輝, 三浦博己	4. 巻 7
2. 論文標題 強冷間圧延によりヘテロナノ組織を発達させたSUS316LNステンレス鋼板材の疲労特性	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 鉄と鋼	6. 最初と最後の頁 掲載決定
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 -

1. 著者名 Koga, N., Suzuki, S., Jiang, H., Watanabe, C., Aoyagi, Y., Kobayashi, M. and Miura, H.	4. 巻 -
2. 論文標題 Heterogeneous Nano-structure and Its Evolution in Heavily Cold-rolled SUS316LN Stainless Steels	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Journal of Materials Science	6. 最初と最後の頁 掲載決定
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Yoshiteru Aoyagi, Atsushi Sagara, Chihiro Watanabe, Masakazu Kobayashi, Yoshikazu Todaka and Hiromi Miura	4. 巻 941
2. 論文標題 Crystal Plasticity Simulation Considering Microstructures of Austenitic Stainless Steel on Macroscopic Yield Function	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Materials Science Forum	6. 最初と最後の頁 212-217
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.4028/www.scientific.net/MSF.941.212	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 渡邊千尋, 小林秀平, 青柳吉輝, 戸高義一, 小林正和, 杉浦夏子, 吉永直樹, 三浦博己	4. 巻 105
2. 論文標題 冷間強圧延したSUS316LN鋼のヘテロナノ組織とその形成過程	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 鉄と鋼	6. 最初と最後の頁 254-261
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2355/tetsutohagane.TETSU-2018-075	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている(また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 青柳吉輝, 渡邊千尋, 小林正和, 戸高義一, 三浦博己	4. 巻 105
2. 論文標題 強圧延誘起ヘテロナノ組織がオーステナイト系ステンレス鋼の力学特性に与える影響に関する結晶塑性シミュレーション	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 鉄と鋼	6. 最初と最後の頁 262-271
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2355/tetsutohagane.TETSU-2018-078	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている(また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 山崎恭和, 小林正和, 戸高義一, 渡邊千尋, 青柳吉輝, 三浦博己	4. 巻 105
2. 論文標題 冷間強圧延によりヘテロナノ組織を付与した二相ステンレス鋼の疲労破壊	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 鉄と鋼	6. 最初と最後の頁 272-281
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2355/tetsutohagane.TETSU-2018-080	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている(また、その予定である)	国際共著 -

〔学会発表〕 計13件(うち招待講演 5件/うち国際学会 8件)

1. 発表者名 Aoyagi, Y. and McDowell, D.
2. 発表標題 Multiscale Crystal Plasticity Simulation Based on Fatigue Indicator Parameters on Ultrafine-grained Metals
3. 学会等名 5th World Congress on Integrated Computational Materials Engineering (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Tsukuda, T. and Aoyagi, Y.
2. 発表標題 Modeling of Twinning-Induced Plasticity of High Entropy Alloy Based on Crystal Plasticity
3. 学会等名 The 10th Pacific Rim International Conference on Advanced Materials and Processing (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Aoyagi, Y., Sagara, A., Watanabe, C., Kobayashi, M., Todaka, Y. and Miura, H.
2. 発表標題 Multiscale Simulation Based on Macroscopic Deformation Model Predicted by Microstructure Information of Ultrafine-Grained Metals
3. 学会等名 The 10th Pacific Rim International Conference on Advanced Materials and Processing (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Aoyagi, Y. and McDowell, D.
2. 発表標題 Multiscale Crystal Plasticity Modeling on Martensitic Transformation Based on Mixture Law
3. 学会等名 International Symposium on Plasticity, Damage, and Fracture 2020 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Aoyagi, Y., Kobayashi, R. and McDowell, D.
2. 発表標題 Multiscale Crystal Plasticity Simulation on Effect of Microstructure Information of Metals on Macroscopic Mechanical Properties
3. 学会等名 The 13th International Conference on the Technology of Plasticity (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 塚田悠介, 椿翔太, 黒澤瑛介, 青柳吉輝
2. 発表標題 画像処理モデリングに基づくDP 鋼マルテンサイト組織形状に関するFEM 解析
3. 学会等名 日本材料学会第68期学術講演会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 小林亮太, 相樂篤志, 青柳吉輝
2. 発表標題 微細粒アルミニウムの微視組織情報に基づく巨視的降伏挙動に関する検討
3. 学会等名 日本機械学会第32回計算力学講演会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 塚田悠介, 渡邊千尋, 小林正和, 戸高義一, 三浦博己, 青柳吉輝
2. 発表標題 オーステナイト鋼におけるヘテロナノ組織形態の影響に関するFEM 解析
3. 学会等名 第5回材料WEEK 材料シンポジウム ワークショップ
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Yoshiteru Aoyagi, Atsushi Sagara, Chihiro Watanabe, Masakazu Kobayashi, Yoshikazu Todaka and Hiromi Miura
2. 発表標題 Crystal Plasticity Simulation Considering Microstructures of Austenitic Stainless Steel on Macroscopic Yield Function
3. 学会等名 International Conference on Processing & Manufacturing of Advanced Materials (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Atsuchi Sagara and Yoshiteru Aoyagi
2. 発表標題 Development of a multiscale simulation system based on microstructure of fine-grained aluminum
3. 学会等名 The 9th International Conference on Multiscale Materials Modeling (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Yoshiteru Aoyagi, Chihiro Watanabe, Masakazu Kobayashi, Yoshikazu Todaka and Hiromi Miura
2. 発表標題 MULTISCALE CRYSTAL PLASTICITY MODELING ON TWINNING OF HETERO-NANOSTRUCTURED STAINLESS STEELS
3. 学会等名 International Symposium on Plasticity, Damage, and Fracture 2019 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 附田拓也, 河原木雄介, 岡村一男, 青柳吉輝
2. 発表標題 結晶塑性論に基づくマルテンサイト変態誘起塑性モデルの構築
3. 学会等名 第4回材料WEEK 材料シンポジウム ワークショップ
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 附田拓也, 青柳吉輝
2. 発表標題 混合則を用いた双晶誘起塑性モデリングおよび結晶塑性シミュレーション
3. 学会等名 日本金属学会2019年春季講演大会
4. 発表年 2019年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

青柳研究室@東北大学機械系 最先端材料塑性の実験・シミュレーション
<https://web.tohoku.ac.jp/aoyagi/>

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
主たる渡航先の主たる海外共同研究者	マクドウェル デイビッド (McDowell David)	ジョージア工科大学・機械工学科・教授	