

令和 3 年 4 月 24 日現在

機関番号：12601

研究種目：若手研究

研究期間：2019～2020

課題番号：19K15308

研究課題名（和文）多相組織における疲労き裂発生の統計モデリング

研究課題名（英文）Statistical modeling of fatigue crack initiation in multiphase microstructure

研究代表者

白岩 隆行（SHIRAIWA, TAKAYUKI）

東京大学・大学院工学系研究科（工学部）・講師

研究者番号：10711153

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 3,200,000円

研究成果の概要（和文）：本研究では、結晶塑性論に基づく有限要素解析と種々の統計モデリング手法（空間相関関数や畳み込みニューラルネットワーク）を組み合わせることで、少ない実験数で疲労性能を予測する手法、そして疲労を支配する組織因子を抽出する手法を提案した。具体的には、疲労き裂発生を予測する物理モデルの提案、空間相関関数や畳み込みニューラルネットワークをベースとした統計モデリングの適用、疲労性能を支配する組織因子の抽出を行った。この提案手法を用いることで、鉄鋼を中心とした多相組織を有する金属材料について、疲労性能と微細構造の関係を明らかにした。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本研究では、空間相関関数を用いて、二相組織の分布状態を定量化するところに特色がある。従来は、第二相の体積分率や、マトリックスと第二相の強度比といったマクロな組織因子が使用されてきたが、疲労の問題では局所的な変形挙動が重要である。そこで本研究では、2点空間相関関数を用いて、多相組織の局所的な分布状態を含む形で、組織因子を数値化する。この手法は三相以上の多相組織にも拡張可能であるため、多くの実用材料に適用可能であり、統一的な疲労予測手法の提案が期待できる。

研究成果の概要（英文）：In this study, by combining finite element analysis based on crystal plasticity theory and various statistical modeling methods (spatial correlation function and convolutional neural network), a method for predicting fatigue performance with a small number of experiments was proposed. Also, we found out microstructural factors controlling fatigue property. The proposed model predicts the fatigue crack initiation using statistical modeling based on spatial correlation functions and convolutional neural network, and extracts the dominant microstructural factors. By using this proposed method, the relationship between fatigue properties and microstructures of metal materials having multiple phases was clarified.

研究分野：材料信頼性

キーワード：疲労き裂発生 破壊力学 結晶塑性 空間相関関数 鉄鋼 チタン合金 マグネシウム合金 逆問題解析

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属します。

## 1. 研究開始当初の背景

一般的に金属材料では、疲労寿命の大部分を疲労き裂の発生と短いき裂の進展寿命で占められる。特に高サイクル疲労においては、き裂発生と短いき裂進展が疲労寿命のばらつきを支配する。一般的な疲労予測手法は未だ確立していないが、そのひとつの理由は、実用材料の組織が非常に複雑であり、二相以上の組織の空間的分布や粒の連結性のよう数値化する方法が確立していない組織因子が多く含まれるためである。もうひとつの理由は、き裂発生観察が、長いき裂進展と比べて難しく、実験データが乏しいためである。特に実用材料では、二相あるいはそれ以上の多相組織の状態を熱的・機械的処理により巧みに制御することで、高い機械的特性を得てきた。このような材料は、Fe合金だけを取ってみてもフェライト・パーライト鋼、DP鋼(フェライト・マルテンサイト鋼)、TRIP鋼、2相ステンレス鋼など、実用的に非常に重要な鉄鋼材料が含まれる。これら実用材料の組織は、数多くの研究者・技術者の知見と努力により開発されてきた。化学組成の組合せも含めると、二相や三相の組合せは無数にあるため、我々の知らない有益な複相組織の材料がまだいくつも存在するはずである。これらの組合せの数と比較すると、現在得られる疲労データは非常に小さなデータ数しか有しておらず、スモールデータをどのように扱うかが重要である。これらのデータを用いて疲労性能を支配する組織因子を明らかにすることは、今後の材料開発を加速させるために重要な課題である。

混合組織の機械的特性に関する研究として、第二相として硬質粒子の分散した材料に関する研究は、以前からマイクロメカニクスと平均場理論によって体系化されている。しかしながら、第二相の分率が多くなると、硬質粒子同士の相互作用が大きくなり、平均場近似が成り立たなくなる。このような混合組織の応力ひずみ曲線を予測する方法として、Secant法やセルフコンシステント法があり、静的な応力ひずみ応答はある程度予測可能であるが、繰返し荷重下の応力ひずみ応答を予測する手法はほとんどない。また、疲労き裂発生を予測するためには、局所的な応力状態を正確に予測する必要があるが、従来の結晶塑性有限要素法(CPFEM)を用いた研究の多くはマクロな特性(強度・硬さ)の予測に注力しているため、精度のよい微細組織モデルを作成する手法が確立していない。本研究では、これらの課題について、新しい多相組織モデルの構築手法と、CPFEMを組み合わせることで解決する。CPFEMでは、各すべり系のせん断塑性ひずみが算出されるため、転位論ベースのき裂発生則と直接関連づけることができる。

また近年、データ科学に関心が集まっている。単純に予測を行う「機械学習」と、データ生成過程の理解を行う「統計モデリング」ではいくつか共通の手法を用いるが、その目的が明確に異なる。機械学習では、ディープラーニング等により精度のよい予測を得ることができるが、過学習や予測モデルのブラックボックス化が起こるために、答えの意味を理解することが難しい。例えば機械学習を用いて材料の機械的特性を予測する試みは、以前から多く存在するが、そのほとんどは物理的な理解を伴わないのでブラックボックスとしての活用にとどまっている。一方で統計モデリングは、スパースモデリングや変数選択を行うことにより、予測結果がどのような要因により決まるかを知ることができる。モデルには事前知識に基づく仮説が組み込まれているため、データに基づく仮説検証が可能である。本研究では、畳み込みニューラルネットにおけるフィルタ抽出や交差検証によるモデル選択を行うことで、疲労特性を支配する組織因子の抽出を試みる。これにより、多相組織の疲労き裂発生メカニズムについて、本質的理解を進めるための手がかりを得る。

## 2. 研究の目的

本研究の目的は、結晶塑性有限要素解析と種々の統計モデリング手法を用いて、少ない実験数で疲労性能を予測する手法、そして疲労を支配する組織因子を抽出する手法を提案することである。

## 3. 研究の方法

<EBSD解析> フェライト・パーライト鋼、DP鋼について、SEM観察を行い、EBSD解析を行う。DP鋼は参考文献に従って準備した孤立型と連結型を用いる。粒形状は、各粒を楕円形に近似し、長径 $a$ 、アスペクト比 $a/b$ 、傾き $\theta$ の3パラメータを統計的に取得する。結晶方位は、方位分布関数(ODF)によって評価する。またIQ値等により各相を判別し、その空間的配置を表す空間相関関数を計算する。

<粒形状・結晶方位のモデル化> 粒形状をメッシュモデルで表現する際には、ポロノイ分割を使用することが多い。しかし疲労き裂発生では、局所的な応力が重要であるため、より詳細に粒形状を再現することが必要である。そこで、重み付きポロノイ分割の式に異方性を導入することで、上述の3パラメータ(長径 $a$ 、短径 $b$ 、傾き $\theta$ )を反映可能な分割手法を用いる。またODFをもとに結晶方位を割り当てる方法はMelchiorとDelannayが提案した手法をベースとして、隣接する粒の方位差を再現できる形に拡張したものをを用いる。さらに粒の連結性(二相の分布)を再現するため、空間相関関数が実験値に合うように繰返し計算を行うことで、できるだけ精度のよい多相組織モデルを得る。さらにDP鋼についても本手法が有効であるか検討する。

<結晶塑性有限要素解析> 結晶塑性モデルでは、Hutchinsonらが提案した式を用いる。計算は市販の有限要素解析ソフト Abaqus と、MaxPlanck 研究所開発の Damask をもとに、パウシンガー効果を導入できるように修正した結晶塑性計算のサブルーチンを用いる。結晶塑性パラメータは、低サイクル試験における繰返し応力ひずみ曲線から逆解析により求めた値を用いる。上記の多結晶モデルをもとに、各すべり系の塑性ひずみ分布を計算する。ただし、3次元のモデルでは、計算コストの点で研究がうまく進まないことも予想される。その場合には、すべり面を2次元に投影した線を考えることで、2次元の有限要素モデルで、3次元の結晶方位を考慮できるように工夫する。また、高速フーリエ変換 (FFT) を利用して、有限要素解析の高速化を検討する。

<疲労き裂発生則> CPFEM から算出された各すべり系のせん断塑性ひずみを、種々の疲労き裂発生則に代入し、き裂発生寿命と発生位置を求める。疲労き裂発生のカライテリオンには、利用例が多くパラメータ数が比較的少ない Tanaka-Mura モデルや Fatemi-Socie モデルを検討する。

<高サイクル疲労試験> 提案手法の予測精度を検証するために疲労試験を行う。き裂発生の観察には、従来のレプリカ法ではなく、試験機コントローラからのトリガ信号により駆動するマイクロスコープと自動ステージを用いて、試験片全面の表面観察を行う。この方法では切欠き等の人工的な欠陥を入れることなく、材料表面からの自然なき裂発生観察でき、一度の試験で複数のき裂発生寿命データを得られると期待できる。またデジタル画像相関法 (DIC) により結晶粒スケールのひずみ分布を計測し、粒形状や相分布と変形挙動の関係を評価する。さらに、試験片破断前に疲労試験を中断して、き裂発生位置付近の EBSD 解析を行い、相分布とき裂発生の関係を実験的に明らかにする。

#### 4. 研究成果

様々な二相分布 (ランダム、層状、クラスタ状、粒界析出型など) を持つ組織モデルを多数作成し、前述の CPFEM によりき裂発生寿命を計算し、組織-疲労のデータベースを構築した。計算から得られたデータを学習データとして、畳み込みニューラルネットワーク (CNN) に適用することで、組織と疲労き裂発生寿命または繰返し応力ひずみ曲線を対応づけることを検討した。その学習の結果として、重み値の組であるフィルタが得られる。画像解析の先行研究によると、CNN に画像を入力してある特徴量を予測する場合、フィルタにはその特徴量に影響を与える画像因子が反映されると報告しているものと、フィルタに物理的な意味はないとする報告が両方ある。本研究では、高サイクル疲労試験におけるデジタル画像相関法 (DIC) のひずみ場測定やき裂周辺の EBSD の測定結果と比較することで、フィルタに抽出される組織因子の物理的な意味について検討した。

もうひとつの手法として、空間相関関数による特徴抽出を事前に行う方法を検討した。まず多相組織の分布を3次元の空間相関関数を用いて数学的に表現した。次に、主成分分析や t-SNE により次元を縮約することを検討した。主成分分析では、特性につながる重要な情報が削除されないように、単純に上位の主成分を用いるのではなく、繰返し応力ひずみ応答との相関を考慮して変数選択した。具体的には、空間相関関数の上位主成分を入力値の候補として、すべての入力値の組合せについて、交差検証による変数選択を行った。このような変数選択では膨大な量の組合せを検討する必要があるため、2段階に行うこと方法を検討した。例えば、初めに線形回帰モデルにより候補となる主成分を10個程度に刈り込み、その後に残った入力候補でニューラルネットワークによる変数選択を行うことが考えられる。得られた空間相関関数の主成分に対して、Gerchberg-Saxton アルゴリズムから派生した Hybrid input-output (HIO) アルゴリズムを用いて、その空間相関関数を組織への逆変換することで、疲労に関する組織因子の抽出を試みた。

## 5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計5件（うち査読付論文 2件/うち国際共著 0件/うちオープンアクセス 0件）

1. 著者名 Shiraiwa Takayuki, Takahashi Hiroyuki, Enoki Manabu	4. 巻 778
2. 論文標題 Acoustic emission analysis during fatigue crack propagation by Bayesian statistical modeling	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Materials Science and Engineering: A	6. 最初と最後の頁 139087 ~ 139087
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.msea.2020.139087	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 Shiraiwa Takayuki, Murakami Takao, Enoki Manabu	4. 巻 126
2. 論文標題 Effect of overload on fatigue crack growth behavior of thin copper foil	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 International Journal of Fatigue	6. 最初と最後の頁 202 ~ 209
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.ijfatigue.2019.05.012	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 Shiraiwa Takayuki, Briffod Fabien, Enoki Manabu	4. 巻 269
2. 論文標題 Fatigue Life Prediction of Welded Joint by Microstructure-based Simulation	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 MATEC Web of Conferences	6. 最初と最後の頁 03005 ~ 03005
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1051/mateconf/201926903005	査読の有無 無
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 Sakaguchi Ryota, Shiraiwa Takayuki, Chivavibul Pornthep, Kasuya Tadashi, Enoki Manabu, Yamashita Norio, Yokota Hideo, Matsui Yutaka, Kazama Akira, Ozaki Keita, Takamatsu Hiroyuki	4. 巻 0
2. 論文標題 Multiscale Analysis of MnS Inclusion Distributions in High Strength Steel	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 ISIJ International	6. 最初と最後の頁 0
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2355/isijinternational.ISIJINT-2019-739	査読の有無 無
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 Sakaguchi Ryota, Shiraiwa Takayuki, Chivavibul Pornthep, Enoki Manabu	4. 巻 0
2. 論文標題 Prediction of Fatigue Life of Steels in Consideration of Defect-induced Crack Initiation and Propagation	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 ISIJ International	6. 最初と最後の頁 0
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2355/isijinternational.ISIJINT-2019-573	査読の有無 無
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 -

〔学会発表〕 計21件 (うち招待講演 0件 / うち国際学会 8件)

1. 発表者名 Takayuki Shiraiwa, Manabu Enoki
2. 発表標題 Data Assimilation for Fatigue Life Prediction of Welded Joint
3. 学会等名 5th World Congress on Integrated Computational Materials Engineering (ICME 2019) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Fabien Briffod, Takayuki Shiraiwa, Manabu Enoki
2. 発表標題 Crystal Plasticity Simulation of Fatigue Behavior in Extruded Magnesium Alloy
3. 学会等名 5th World Congress on Integrated Computational Materials Engineering (ICME 2019) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 白岩隆行, Fabien Briffod, 榎学
2. 発表標題 ビードオンプレート溶接材の疲労性能予測と実験的検証
3. 学会等名 日本金属学会講演大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 加藤翔也, Fabien Briffod, 白岩隆行, 榎学
2. 発表標題 二相組織鋼における引張強度・伸び向上のための組織最適化
3. 学会等名 日本金属学会講演大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 中島 誓哉, Fabien Briffod, 白岩 隆行, 榎 学
2. 発表標題 難燃性Mg合金の疲労き裂発生及び進展の観察と疲労寿命予測
3. 学会等名 日本金属学会講演大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 岡出 健太郎, 白岩 隆行, 榎 学
2. 発表標題 AEを用いた低サイクル疲労試験のMg合金の変形機構の解析
3. 学会等名 日本金属学会講演大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 BRIFFOD Fabien, SHIRAIWA Takayuki, ENOKI Manabu
2. 発表標題 Fatigue Behavior of Extruded Mg/LPSO two-phase alloys
3. 学会等名 日本金属学会講演大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 岡出 健太郎, 白岩 隆行, 榎 学
2. 発表標題 Mg合金の低サイクル疲労試験中のAE挙動の評価
3. 学会等名 第22回アコースティック・エミッション総合コンファレンス
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Manabu Enoki , Fabien Briffod , Takayuki Shiraiwa
2. 発表標題 Prediction of Fatigue Crack Initiation in Magnesium Alloys
3. 学会等名 2019 Sustainable Industrial Processing Summit ( 国際学会 )
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Takayuki Shiraiwa , Fabien Briffod , Manabu Enoki
2. 発表標題 Fatigue Performance Prediction of Steel Welded Joints by Materials Integration
3. 学会等名 NIMS Week 2019 ( 国際学会 )
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Shoya Kato , Fabien Briffod , Takayuki Shiraiwa , Manabu Enoki
2. 発表標題 Microstructure Prediction of Dual Phase Steel with Optimal Strength-Elongation Balance
3. 学会等名 NIMS Week 2019 ( 国際学会 )
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 加藤翔也, Fabien Briffod, 白岩隆行, 榎学
2. 発表標題 強度・伸び向上のためのDP鋼の組織最適化
3. 学会等名 日本金属学会関東支部ヤングメタラジスト研究交流会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 岡出 健太郎, 白岩 隆行, 榎 学
2. 発表標題 低サイクル疲労試験のMg合金の変形機構のAE挙動による解析
3. 学会等名 日本金属学会関東支部ヤングメタラジスト研究交流会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Fabien Briffod, Takayuki Shiraiwa, Manabu Enoki
2. 発表標題 Fatigue in Extruded Mg/LPSO two-phase alloys: A Combined Experimental-Numerical Study
3. 学会等名 Material Research Meeting (MRM) 2019 (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Takayuki Shiraiwa, Ryota Sakaguchi, Pornthep Chivavibul, Fabien Briffod, Manabu Enoki
2. 発表標題 Prediction of defect-induced fatigue failures using physical model and data assimilation techniques
3. 学会等名 Material Research Meeting (MRM) 2019 (国際学会)
4. 発表年 2019年



1. 発表者名 Fabien Briffod, Takayuki Shiraiwa, Manabu Enoki
2. 発表標題 Observation and crystal plasticity simulation of microstructurally short crack propagation in rolled Ti-6Al-4V alloy
3. 学会等名 Material Research Meeting (MRM) 2019 (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 中島 誓哉, Fabien Briffod, 白岩 隆行, 榎 学, 田口 真
2. 発表標題 難燃性Mg合金溶接接手の疲労き裂発生及び進展解析
3. 学会等名 日本金属学会講演大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 岡出 健太郎, 白岩 隆行, 榎 学
2. 発表標題 AE及びEBSDによるMg合金の低サイクル疲労試験中の変形機構解析
3. 学会等名 日本金属学会講演大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 加藤 翔也, Fabien Briffod, 白岩 隆行, 榎 学, 後藤 聡太
2. 発表標題 DP鋼の引張特性向上のための組織形態最適化
3. 学会等名 日本金属学会講演大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 宮地 拓也, 白岩 隆行, Fabien Briffod, 榎 学
2. 発表標題 - 型チタン合金の疲労特性に及ぼす 相結晶粒径の影響
3. 学会等名 日本金属学会講演大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Fabien Briffod, Takayuki Shiraiwa, Manabu Enoki
2. 発表標題 Micromechanical investigation of stage I fatigue crack propagation in bi-modal Ti-6Al-4V alloy
3. 学会等名 日本金属学会講演大会
4. 発表年 2020年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

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

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関