

科学研究費助成事業（基盤研究（S））公表用資料  
〔平成27年度研究進捗評価用〕

平成24年度採択分  
平成27年3月12日現在

リバース4D材料エンジニアリングによる材料開発プロセス革新  
A New Concept Breakthrough in Materials Development:  
Reverse 4D Materials Engineering

課題番号：24226015

戸田 裕之 (TODA HIROYUKI)

九州大学・大学院工学研究院・主幹教授



研究の概要

これまで材料開発は、「材料設計→評価→材料創出」というプロセスであった。我々は、これと逆方向のアプローチにより、迅速かつ高精度に材料を開発するリバース4D材料エンジニアリングを研究している。この技術では、微視形態を忠実に取り込むイメージベースシミュレーションにより仮想的に材料組織を最適化し、その形態を粗視化してものづくり技術へと接続する。

研究分野：構造・機能材料

キーワード：力学的性質、マイクロモグラフィー、イメージベースシミュレーション、最適化、粗視化

1. 研究開始当初の背景

材料開発では、トライ&エラーを繰り返す（図1上側）ことが常である。また、構造材料では、ミクロンオーダーに限っても、数～数十万個/mm<sup>3</sup>の粒子や欠陥、10<sup>3</sup>～10<sup>9</sup>個/mm<sup>3</sup>の結晶粒など、膨大な数のマイクロ構造が存在



図1 従来の材料開発（上段）とリバース4D材料エンジニアリング（下段）

する。従来の表面・断面観察では、それらの全数把握さえ不可能であり、極々少数のマイクロ組織をサンプリングしてサイズ等の平均情報を計測し、これとマクロ特性を関連付けることで組織を制御しようとした。また、工業材料では、膨大な数の材種、用途、対象特性が存在し、それらに個別の新技术・新材料開発で対応している。しかし、これでは研究費や所要時間、研究者数を考えても、中国をはじめ諸外国に対し明確な優位性を得るこ

とは、今後益々困難になる。

2. 研究の目的

近年、3D/4D（4D=3D+時間軸）イメージング法の発展により、複雑かつ動的な現象にダイナミックにアプローチできるようになってきた。本提案ではこれを活用し、材料開発のための全く新しい技術体系：リバース4D材料エンジニアリング（以下、R4ME）を創成する。これまでの材料開発は、「材料設計→解析・評価→実材料創出」という時系列で進められている（図1上側）。本研究では、これと逆方向のアプローチ（図1下側）により、迅速かつ高精度に高性能材料を開発するパラダイムチェンジを提案する。

現実の材料のマルチスケール3D構造は、その複雑さ故、現在の科学では理論的取り扱いはおろか、そのパターン化さえ困難である。本研究では、微視形態を忠実に取り込む高精度4Dイメージベースシミュレーション（以下、IBS）により、仮想的にマイクロ構造を最適化する。さらに、複雑な3D/4D微視形態を従来の材料設計技術に反映できる程度に粗視化表現することで、ものづくりに展開可能な実用組織制御技術を確認する

3. 研究の方法

近年高分解能化が著しい3D/4Dイメージングを唯一実現できるX線マイクロモグラフィーと申請者が先導してきた各種4D画像解析技術にIBSを高い次元で組み合わせる。既存材料のナノ～マクロ組織を3D/4Dイメージングし、それをそのまま忠実に再現した3D

イメージベースモデルにより 4D 計算機実験を行う。膨大な数のマイクロ組織のうち、所望する特性に直接大きく影響する、極めて限定された種類、性状、領域のマイクロ組織（例えば疲労破壊等の場合、極端な場合には 1~数個）を特定した後、超大情報量となる 3D/4D 組織情報を「粗視化」（不要な情報を無視し、必要なものを単純なパラメーターで表現）により徹底して取捨選択する。これにより 3D/4D 最適組織形態を簡単に表現し、産業界の慣用材料製造パラメーターと結び付けることができる。

#### 4. これまでの成果

材料工学の様々な問題を想起し、膨大なマイクロ構造が連携してマクロ特性を発現させる場合から単一のマイクロ組織が特性を支配する場合まで、あらゆる場合にマイクロ組織最適化が可能な様に、R4ME の適用方法を分類した（図 2）。図 2 右側は、単一マイクロ組織支配型の現象への応用である。

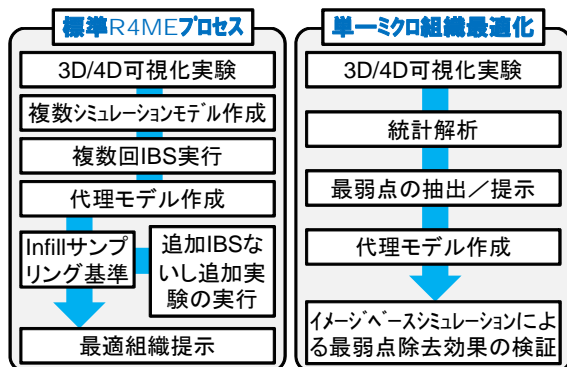


図 2 開発した R4ME プロセス（左）とその疲労き裂発生などへの応用（右）

R4ME の大容量 IBS は計算時間が膨大で、試行回数が極めて制限される。寡試行最適化（限られた数のデータ点で最適解探索）が必要になる。本研究では、Infill sampling 基準による代理モデルの逐次更新をもって、最適化を行っている（図 3）。

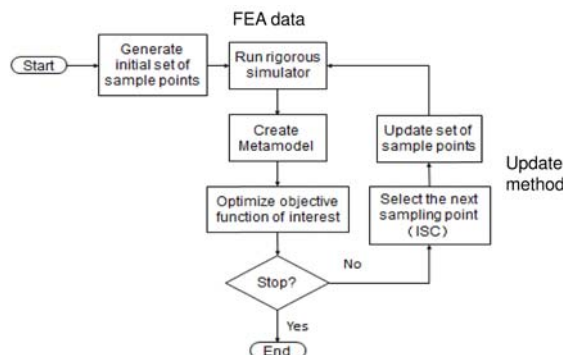


図 3 R4ME の最適化プロセス

粗視化に供する設計変数（マイクロ組織の幾何学的特徴を定量的に計測したもの）として

は、サイズ、形状、空間的分布、配向性など合計 48 個のパラメーターを画像解析プログラムとして実装した。これらを統計解析により低次元化（ごく少数のパラメーターで記述）する。

最適化技法の研究を 3 パターンに分類し、それぞれ異なるデモンストレーター研究を割り当て実際の応用を行いながら手法開発とフィードバックを同時に行う。これは、第 2 相の組織制御、疲労き裂発生、多結晶材料の損傷である。2 番目は、1 個ないし少数の粒子や材料欠陥が部材全体の破壊を規定する「単一マイクロ組織支配型」のデモンストレーター研究である。3 番目は、構造材料の力学特性に大きな影響を及ぼす因子として、第二相以外に結晶組織を取り上げた。ここでは、代表者らが開発した DAGT 法（X 線 CT と XRD を同時に行い、多結晶組織の変形破壊挙動を 3D/4D で可視化できる方法）を適用し、結晶粒形態をイメージングした。また、これを用いて結晶粒のイメージベースモデルを結晶塑性 FEM 解析している。

これまでの研究で、一通りの要素技術開発と方法論の構築は終了している。

#### 5. 今後の計画

現在の所、代理モデルには人工ニューラルネットワーク (ANN) を用いている。プロジェクト後半では、ANN を地球統計学で用いられるクリギングやサポートベクターマシンに代替することが有効と考えられる。

また、3D/4D 画像の詳細な検討から、マイクロ組織の性状、分布は、実用材料では場所によって大きく異なっており、1 個の試験片で 1 回だけ 3D/4D 観察をすることで、様々なマイクロ組織のパターンとその力学的レスポンスが得られることがわかった。つまり、当初予定していたモデルの人為的な修正は不要であり、1 個の試験片の観察を行い、その中の異なる領域の解析を行うだけで、最適化に必要なデータが蓄積されることになる。この知見は、R4ME の方法論にもフィードバックしていく。

#### 6. これまでの発表論文等（受賞等も含む）

1. H. Li, L. Gutierrez, H. Toda, et al., Identification of material properties by surrogate model with infill sampling criteria, Acta Materialia, (2015), under review.
2. 戸田、バトレス、桑水流他、リバーズ 4D 材料エンジニアリング：その構想と最近の展開、軽金属、64(11)、(2014)、518-524

ホームページ等

<http://hyoka.ofc.kyushu-u.ac.jp/search/details/K004938/>