

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 29 年 6 月 27 日現在

機関番号：17102

研究種目：基盤研究(S)

研究期間：2012～2016

課題番号：24226015

研究課題名(和文)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

研究課題名(英文)A New Concept Breakthrough in Materials Development: Reverse 4D Materials Engineering

研究代表者

戸田 裕之(Toda, Hiroyuki)

九州大学・工学研究院・教授

研究者番号：70293751

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 125,700,000円

研究成果の概要(和文)：リバース4D材料エンジニアリング(R4ME)による材料開発方法論を構築した。最適化対象を「多数マイクロ組織制御」と「単一マイクロ組織制御」の2つのケースに分け、材料工学、機械工学の様々な課題にR4MEを適用可能にした。特に、粗視化手法、最適化手法およびR4MEの方法論をこれらにふさわしいものとして創成した。1枚の高精細3D画像に含まれる最大数十万個のマイクロ組織データをビッグデータとして活用した材料開発や、多結晶組織イメージングのデータを用いた多結晶組織最適化が可能であることを示した。

研究成果の概要(英文)：Material development methodology called Reverse 4D Material Engineering (R4ME) has been established. We have divided the optimization targets into two cases; "microstructure cluster control" and "single microstructure control" to make R4ME applicable to various issues in the materials and mechanical engineering. In particular, we have created a data coarsening method, optimization method and R4ME methodology appropriate for adapting them. We have shown that R4ME enables to use the information about a huge number of microstructural features embedded in one high-resolution 3D image as big data. The optimization of polycrystalline microstructure is also possible by employing the polycrystalline imaging technique.

研究分野：構造材料の強度と信頼性、およびその3D/4Dイメージング

キーワード：リバースエンジニアリング 最適化 粗視化 3D/4Dイメージング シンクロトロン放射光 イメージベ
ースモデリング 延性破壊 低サイクル疲労

1. 研究開始当初の背景

機械工学には、「リバースエンジニアリング」という概念が出てきた。これは、実物を形状計測後にCAE解析し、製品の設計の飛躍的効率化を図るものである。一方、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。機械製品では、限られた数の形状急変部等を考慮すればよいが、構造材料では、数~数十万個/mm³の粒子や欠陥等、膨大な数のミクロ構造が存在し、「設計」と言っても単純ではない。例えば、従来の表面・断面観察では、ミクロ組織の全数把握さえ不可能である。これでは、極少数のミクロ組織をサンプリングし、サイズ等の平均情報をマクロ特性を関連付けるしかなく、効率的な材料設計とはとても言えない。

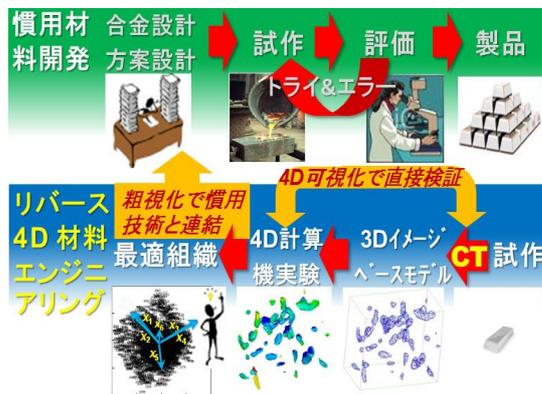


図1 R4MEの模式図

2. 研究の目的

近年、3D/4Dイメージングの発展により、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様になってきた。これを活用し、材料開発のための新しい技術体系：リバース4D材料エンジニアリング(R4ME)を創成した(図1下)。これまでの材料開発：「材料設計→試作・評価→材料創出」とは時間的に逆方向のアプローチにより、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構造は複雑で、理論的取り扱いはおろか、パターン化さえ困難である。本案では、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、IB、IBS)により、仮想的にミクロ構造を最適化する。さらに、複雑な3D微視形態を従来の材料設計技術に反映できる様に粗視化することで、ものづくりに展開可能な組織制御技術を構築する。

R4MEの要素技術のうち、既に確立した3D/4D観察、4D画像解析を除き、3D・IBS、粗視化の研究を行った。これらを統合してR4MEを創成した。そのため、様々な研究分野の知見を結集し、個別研究では達成できないレベルでR4MEを実現した。並行して、幾つかの応用研究(R4MEのデモンストレーター(DS)研究)を行い、提案法の有効性を目に見える材料特性改善効果の形で提示した。

3. 研究の方法

(1) R4MEの手法概説

・粗視化：表1の様に、粒子等の材料組織因子をサイズ、形状、空間分布等の44個のパラメータ(設計変数)で定量化する粗視化手法を確立した。また、グローバル感度解析(GSA)、主成分分析(PCA)、最適化モデルの誤差を組み合わせる設計変数を低次元化する粗視化手法を確立した。さらに、後述の「単一ミクロ組織最適化」のための単一粒子の空間分布の定式化も、図2のように設定した。

・最適化：IBSはモデル規模が大きく、「寡試行最適化」(数回の試行で求解)が重要である。図3は、提案したそのアルゴリズムである。代理モデルは、図4に示すインフィル・サンプリング基準(ISC)により、逐次更新する。代理モデルは、初期には人工ニューラルネットワーク(ANN)、その後はサポートベクターマシン(SVM)で構成した。SVMは、局所解に陥らず、必要とされる学習パターン数が微量の増加とともに急増しないという特徴がある。図5の様に、ANNと比べて少ないトライアルで高精度な求解が可能である。

・手法構築と応用：R4MEの対象を「多数ミクロ組織制御」と「単一ミクロ組織制御」の2つに分け、材料・機械工学の様々な課題に適用可能にした。DS研究₁では、水素ポアが損傷に及ぼす影響を、DS研究₂では、鋳物の製造欠陥からの疲労破壊を、DS研究₃では、多結晶組織制御を研究した。これらでは、上記2つのコンセプトを試行した。特に、単一ミクロ組織制御の実現により、3D/4Dイメージングで1枚の画像に含まれる非常に多数の組織データをビッグデータとして活用する材料開発が可能になった。またDS₃では、最新の多結晶組織イメージング技術を用いた多結晶組織最適化が可能であることを示した。

(2) DS研究₁：ポアの影響極小化
IB有限要素解析(FEA)の対象となったモデル

表1 幾何学的特徴の粗視化用パラメータ

カテゴリー	パラメータ
形状 (24種)	主軸の傾き、主軸方向直径のアスペクト比3種、境界ボックスアスペクト比3種、球状偏差3種、立方偏差3種、伸長指数、平均曲率の積分値、Euler数、図心3種、図心偏差3種、ポクセル分布の歪度、ポクセル分布の尖度
サイズ (10種)	境界ボックス体積、長さ、幅、表面積、球相当直径、ポクセル数、主軸直径、体積、厚さ、測地長
空間分布 (11種)	一定領域内の凝集度2種、隣接セルとの距離合計4種、空間分布傾向、クラスタ化程度、累積集中度、空間隣接度、数密度

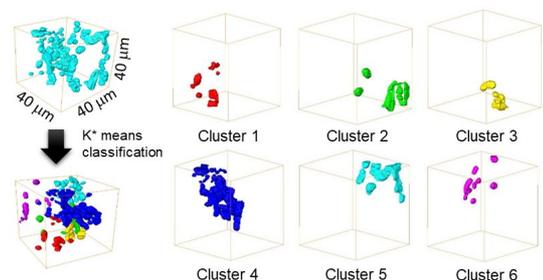


図2 K平均法(クラスタ分析法)の模式図

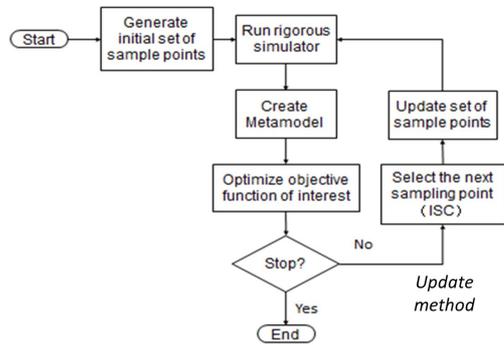


図3 R4MEの最適化プロセス

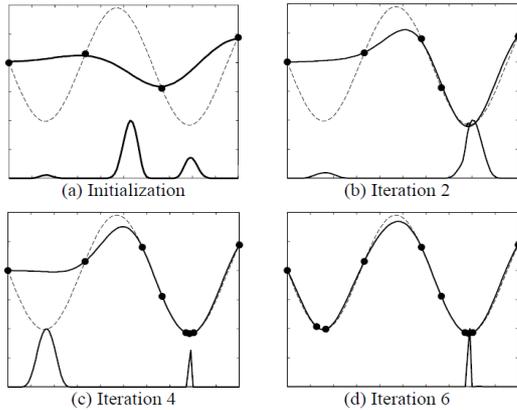
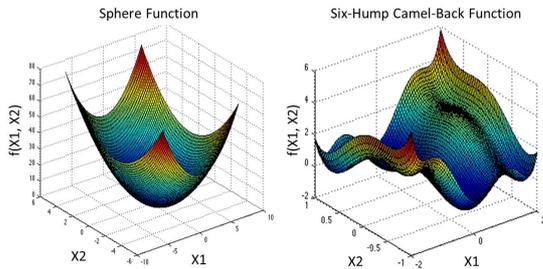


図4 ISC模式図。破線：データ。黒丸付き線：代理モデル。実線：不確かさの関数



(a)単一極値の場合 (b)複数極値の場合

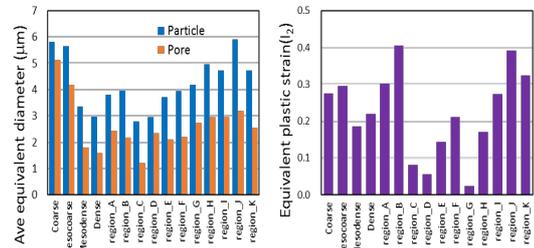
図5 ISC付き計算による最適化の例

は、2024アルミニウム合金のCT撮像から一辺40 μm の領域を無作為に抽出し作成した。また、粒子体積や水素量一定の条件で標準材を元に修正したモデルも作成した。IBモデルは、粒子とポアからなる3D像から表面メッシュを作成した。

FEA結果より、アルミニウム基地中の塑性歪および応力三軸度を、そして粒子中の主応力を評価し、それらが一定以上大きくなる体積を計測した。これらは延性破壊の発生および進展を促進するモデルの損傷度合いの指標と、それぞれ3つの目的変数； I_1 、 I_2 、 I_3 に対応する（図6(b)）。

(3) DS研究：疲労破壊抵抗最適化

AC4CH-T6アルミニウム鋳造合金を対象とし、放射光施設SPring-8で低サイクル疲労試験のCT観察を実施した。Si粒子の破損がCTで確認されたサイクル数を粒子の破損寿命とした。次に、4D可視化像を基にIBSを実施した。IBSでは、実験と同じ応力振幅を10サイクル負荷し、応力と歪の変化を調べた。



(a)組織の定量評価 (b)力学的特性の指標
図6 最適化の設計変数と目的関数の定義

試験前のCT画像から、画像に含まれる全Si粒子のサイズ、形状、空間分布を粗視化した。IBSと粗視化解析の結果を基に、最適化に用いるパラメータを決定した。そして、粒子破損寿命の短いSi粒子を含まない材料を最適材料とした。最適化は、ANNによった。

(4) DS研究：多結晶組織最適化

放射光CT画像を用いたIB結晶粒モデルの結晶塑性有限要素(CPFE)解析を行い、最適組織を調査した。試料は、Al-4%Cu合金である。放射光実験でその場観察引張試験を行い、DAGT法による結晶組織解析を実施した。3D結晶粒画像から結晶粒モデルを作成する方法は、図7に示す。歪計測およびCPFE解析の一例を図8に示す。最適化では、結晶粒のサイズ、形状、配置、結晶方位が応力に与える影響について評価し、各パラメータの不均一度を用いて最適組織を記述した。

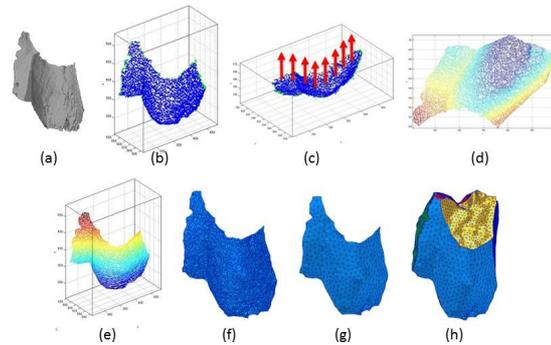


図7 GB* 3D像(a)からのGB*モデル作成手順：(b)からGB位置、平面回転、要素分割、位置復元、プリ°メッサー読み込み、再メッシュ、作成モデル

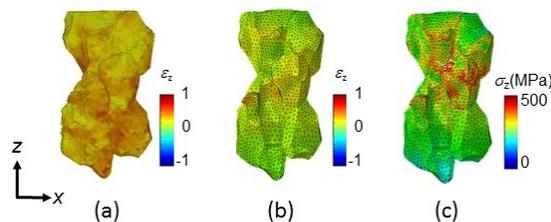


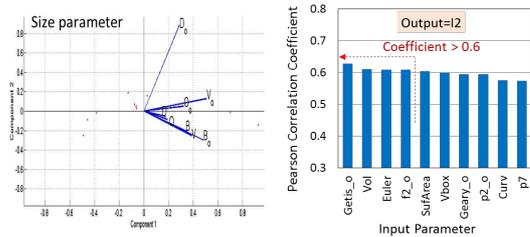
図8 実験結果(a)とCPFE(b)歪、(c)応力

4. 研究成果

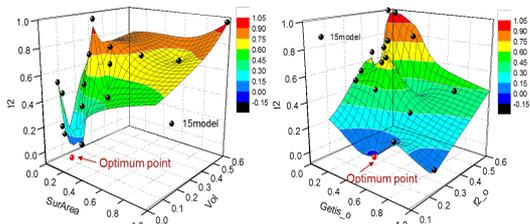
(1) DS研究：ポアの影響極小化

準備した15個のFEモデルでは、図6(a)の様に、粒子、水素ポアとも、設計変数(粗視化結果)が大きく変化している。これらモデルの持つ粒子と水素ポアの情報を合わせた88個の設計変数から、PCA、GSA等により重要なパラメータを4つに絞り込んだ(図9)。図9(b)

は、目的変数 I_2 (マトリックスの全相当塑性歪が0.05を超える領域の体積率)のGSAの結果である。この場合、0.6以上のピアソン係数を持つパラメータを選別している。最適組織をもたらす設計変数は、ポアの累積集中度(空間分布)と境界ボックスアスペクト比(形状)、粒子の体積と表面積(サイズ)の4つである。これを3D表示したものが図10である。最適組織は、粒子の体積約 $33\mu\text{m}^3$ 、真球の表面積より34%増加した凹凸を持つ粒子と予測された。またポアは、アスペクト比($f_2=L_x/L_z$)が1で、クラスタ集中度が比較的低い状態が最適組織となった。最適組織に最も近いモデルは図11(b)で、ポアや粒子の境界の一部領域で歪が集中しているものの、無変形領域が広く存在している。



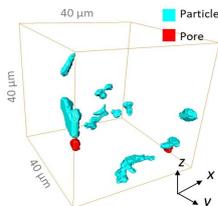
(a)主成分分析 (b)グローバル感度解析
図9 粗視化プロセスの一例



(a)粒子の最適組織 (b)ポアの最適組織
図10 最適化結果の3D表示の一例

相当塑性ひずみ I_2 に対応する最適値

Parameter	Optimum values			Object (I_2)
	Normalized	Actual	Object (I_2)	
Getis_o	0.3841	0.2778		-2.29%
f2_o	0.2671	1.0072		
SufArea (μm^2)	0.1616	66.4499		
Vol (μm^3)	0.0816	32.8870		

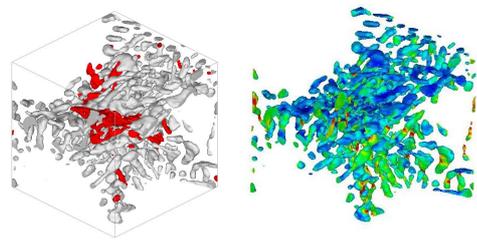


(a) I_2 に対応する最適値 (b)近似最適組織
図11 最適組織とそれに近いモデル

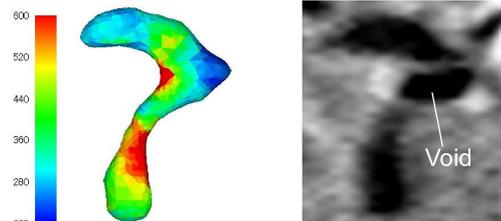
(2) DS研究 : 疲労破壊抵抗最適化

粒子の複雑さと粒子破損の関係を確認したところ、大きく複雑な形状の粒子が割れ易く、同体積率でも粒子が大きい(低数密度)方が割れ易く、荷重軸方向($0^\circ \sim 40^\circ$)に粒子が配向していると割れ易い傾向が見られた。FEA解析から得られた第1主応力の分布を図12に示す。粒子の形状だけでなく、局所的な粒子群の配列や密度を表すパラメータが最適化に必要である事が分かる。

Si粒子の第1主応力分布と実際のCT像を図13(b)に示す。屈曲部の最大応力点近傍で破壊が生じている。多くの場合、最大応力点と破損個所がほぼ一致し、最大応力は荷重軸方向に細長い粒子の狭隘部に発生した。



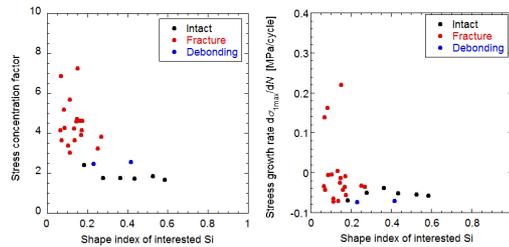
(a)粒子モデル (b)第1主応力
図12 解析モデルと主応力分布の例



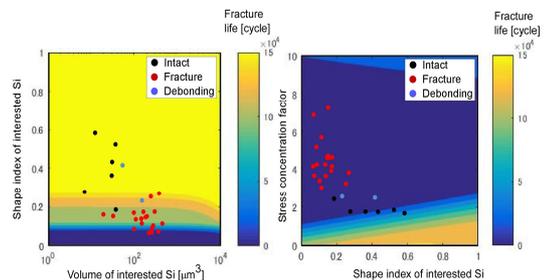
(a)第1主応力分布 (b)破損後のCT画像
図13 Si粒子の応力と破損

力学パラメータと設計変数の関係を図14に示す。形状が複雑な粒子は、応力集中係数が高く、高応力の場合は増加率も相対的に高くなった。形状係数0.3以下が危険領域であり、応力集中係数が2.5を超える場合は、粒子が割れた。ただし、主応力が低くても、界面剥離により亀裂発生起点となるので、界面の垂直応力も重要である。

得られたパラメータから、粒子の破損寿命の予測を試みた。統計的に破損との相関が強いパラメータを選定し、それらを入力として破損寿命を求めるANNを作成した。選定したパラメータは、粒子体積、傾斜角、形状係数、体積率、最大第1主応力の応力集中係数と増加率である。予測破損寿命分布を図15に示す。前述した形状係数0.3以下、応力集中係数2.5以上という危険領域では、ここでも短寿命となっている。



(a)応力集中係数 (b)主応力増加率
図14 形状係数と力学パラメータの関係



(a) $v_s-\beta_s$ 断面 (b) β_s-K_t 断面
図15 ANNで予測した粒子破損寿命の分布

本研究のような大規模数のSi粒子に対して3次元的な計測を実施した例は世界的にも稀で、疲労破壊と関連付けた幾何学パラメータの評価結果は、先進的な成果と言える。低サイクル疲労における最悪Si粒子の条件が世界で初めて定量評価でき、数値的最適化のための寿命予測法も妥当性を示せた。

本研究では、低サイクル疲労を対象にしたため、負荷応力を変えた時の亀裂発生寿命は予測できない。しかし、高サイクル疲労データを拡充すれば、より広範囲への適用が可能となり、実用性が増すものと思われる。また、結晶方位を考慮した弾塑性モデルの利用により、より局所的な塑性変形の集中が再現でき、疲労の影響が明確になる。

(3) DS研究 : 多結晶組織最適化

不均一度パラメータの計算結果を図16に示す。応力分配が不均一なデータが均一なものの上側に位置し、不均一度が有用とわかる。しかし、各組織因子との個別の相関は低い。そこで、複数の組織因子の影響を解析したのが表2である。結晶粒配置の影響が最も大きく、次いで結晶方位の影響が見られる。これは、3D評価の重要性を示唆する。

図17、図18は、応力不均一度が高い場合、低い場合の解析結果である。体積、Taylor因子と結晶粒の変形抵抗が対応付けられる。組織因子が複雑な結晶粒組織で、結晶粒の配置お

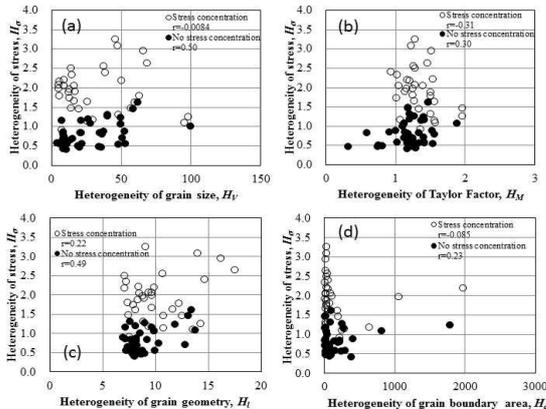


図16 応力の不均一度と各不均一度の関係

表2 重回帰分析結果

	全体	応力不均一	応力均一
相関係数, R	0.407	0.494	0.641
係数	結晶粒サイズ, a_1	-0.077	-0.013
	結晶方位, a_2	0.096	-1.090
	粒界面積, a_3	0.000	0.000
	配置, a_4	0.978	0.978

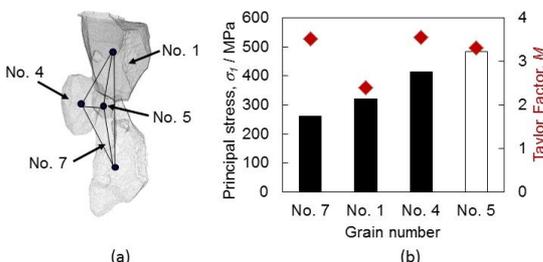


図17 応力不均一度が高い場合の解析結果

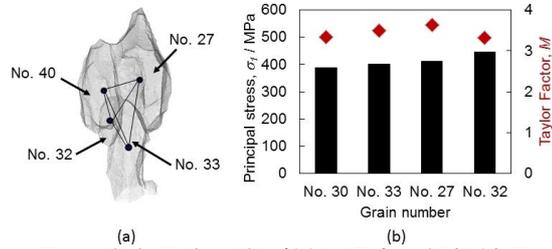


図18 応力不均一度が低い場合の解析結果

よび結晶方位の不均一度が応力の不均一度に及ぼす影響がそれらの重畳効果によって増幅される。これは、最適化手法の適用で初めて明らかとなった知見である。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕(計18件)

O. Kuwazuru(2番目), H. Toda(5番目), その他3名, Three-dimensional stress and strain around real shape Si particles in cast aluminum alloy under cyclic loading, Materials Science and Engineering A, 査読有, 678, 2016, 273-285.

DOI:10.1016/j.msea.2016.10.004

H. Toda(2番目), O. Kuwazuru(5番目), その他5名, Ductile fracture via hydrogen pore mechanism in an aluminum alloy; quantitative microstructural analysis and image-based finite element analysis, Materials Science and Engineering: A, 査読有, 671, 2016, 96-106

DOI:10.1016/j.msea.2016.06.037

H. Toda(1番目), M. Kobayashi(4番目), その他6名, Diffraction-amalgamated grain boundary tracking for mapping 3D crystallographic orientation and strain fields during plastic deformation, Acta Materialia, 査読有, 107, 2016, 310-324

DOI: 10.1016/j.actamat.2016.01.072

M. Kobayashi(1番目), H. Toda(4番目), その他3名, Construction of finite element meshes for polycrystal grains model from X-ray CT image, Materials Transactions, 査読有, 57(12), 2016, 2089-2096

DOI:10.2320/matertrans.M2016260

H. Toda(3番目), O. Kuwazuru(4番目), その他6名, Identification of material properties using nanoindentation and surrogate modeling, International Journal of Solids and Structures, 査読有, 81, 2016, 151-159

DOI:10.1016/j.ijsolstr.2015.11.022

H. Toda(1番目), M. Kobayashi(9番目), その他7名, The True Origin of Ductile Fracture in Aluminum Alloys, Metallurgical and Materials Transactions A, 査読有, 45(2), 2014, 765-776

DOI:10.1007/s11661-013-2013-3

H. Toda(3番目), M. Kobayashi(4番目), その他4名, A Method for the Identification of Mechanical Properties Using Surrogate Models, International Journal of Computer Theory and Engineering, 査読有, 6(3), 2014,

234-239

DOI: 10.7763/IJCTE.2014.V6.868

M. Kobayashi(3 番目), H. Toda(5 番目), その他 4 名, A Numerical Evaluation of an Infill Sampling Criterion in Artificial Neural Network-Based Optimization, International Journal of Computer Theory and Engineering, 査読有, 6(3), 2014, 272-277

DOI:10.7763/IJCTE.2014.V6.874

戸田裕之(1 番目), バトレス ラファエル, その他 3 名, リバース 4D 材料エンジニアリング: その構想と最近の展開, 軽金属, 査読有, 64(11), 2014, 518-524

DOI:10.2464/jilm.64.518

細川明秀, 戸田裕之(3 番目), その他 4 名, リバース 4D 材料エンジニアリングのためのイメージベース有限要素解析: 水素ポアからの延性破壊, 軽金属, 査読有, 64(11), 2014, 611-612

DOI:10.2464/jilm.64.611

桑水流理(1 番目), 戸田裕之(5 番目), その他 3 名, 低サイクル疲労を受けるアルミニウム鋳造合金の 3 次元き裂発生挙動, 軽金属, 査読有, 64(11), 2014, 570-575

DOI:10.2464/jilm.64.570

H. Toda(1 番目), M. Kobayashi(8 番目), その他 6 名, Grain boundary tracking technique: A four-dimensional visualization technique for determining grain boundary geometry via local strain mapping, Acta Materialia, 査読有, 61(14), 2013, 5535-5548

DOI:10.1016/j.actamat.2013.06.013

その他, 和文 6 件

[学会発表](計 8 3 件)

戸田裕之, 構造用金属材料の損傷・破壊挙動の 3D イメージング, 第 3 回放射光・中性子の相補的利活用セミナー/第 14 回 SPring-8 先端利用技術ワークショップ, 2017.2.17, 研究者英語センター(東京都新宿区)(招待講演)

戸田裕之, リバース 4D 材料エンジニアリングによる 3D 材料組織設計, 日本学術振興会 加工プロセスによる材料新機能発現第 176 委員会第 31 回研究会, 2016.12.20, エッサム神田ホール(東京都千代田区)(招待講演)

戸田裕之, シンクロトロン放射光マイクロトモグラフィーによる 4D イメージングとその応用, 平成 28 年度金属組織研究会, 2016.11.11, エッサム神田ホール(東京都千代田区)(招待講演)

戸田裕之, SPring-8 の高輝度放射光を用いた 3D/4D イメージベース計測技術とその構造材料への応用, SIP「革新的構造材料」コロキウムスペシャル 1st, 2016.9.29, 産業技術総合研究所つくば中央(茨城県つくば市)(招待講演)

H. Toda(3 番目), M. Kobayashi, その他 2 名, High-resolution X-ray computed tomography at SPring-8 and improvements of imaging

properties, 3rd Int'l Congress on 3D Materials Science 2016 (3DMS2016), 2016.7.10-13, St. Charles, Illinois(USA), P12 (Invited)

M. Kobayashi, H. Toda, その他 3 名, Characterization of inhomogeneous local strain during plastic deformation in aluminum alloy, TMS2015 144th Annual Meeting & Exhibition, 2015.3.15-19, Orlando, Florida (USA), 132 (Invited)

戸田裕之, 3D/4D 画像を用いた材料評価と組織制御, 日本鉄鋼協会第 219・220 回西山記念技術講座, 2014.11.25, 早稲田大学(東京都新宿区)(招待講演)

戸田裕之, シンクロトロン放射光による構造材料損傷破壊挙動の 3D/4D 解析, 日本顕微鏡学会第 58 回シンポジウム, 2014.11.16-17, 九州大学(福岡県福岡市)(招待講演)

H. Toda, M. Kobayashi, その他 2 名, Assessment of ductile fracture via 3D/4D image-based approaches, 4th Int'l Symposium on Steel Science(ISSS2014), 2014.11.3-6, Kyoto(Japan), 32-41 (Invited)

戸田裕之, 放射光による 4D 解析と材料設計へのフィードバック, 日本鉄鋼協会第 168 回秋季大会「先端解析・モデリングに基づく材料設計へのフィードバック」シンポジウム, 2014.9.26, 名古屋大学(愛知県名古屋市)(招待講演)

戸田裕之, 二相組織の位相コントラストイメージングとその延性破壊への応用, 日本鉄鋼協会第 168 回秋季大会, 2014.9.24-26, 名古屋大学(愛知県名古屋市)(招待講演)

その他, 招待講演等 6 件, 一般講演等 6 6 件

[その他]

戸田 裕之 (研究代表者) <http://hyoka.ofc.kyushu-u.ac.jp/search/details/K004938/research.html>

桑水流 理 (研究分担者) <http://csm.npes.u-fuku.ac.jp/>

小林 正和 (研究分担者) <https://www.tut.ac.jp/university/faculty/me/81.html>

6. 研究組織

(1)研究代表者

戸田 裕之 (TODA, Hiroyuki)

九州大学・工学研究院機械工学部門・主幹教授

研究者番号: 70293751

(2)研究分担者

桑水流 理 (KUWAZURU, Osamu)

福井大学・学術研究院工学系部門・准教授

研究者番号: 40334362

小林 正和 (KOBAYASHI, Masakazu)

豊橋技術科学大学・工学研究科・准教授

研究者番号: 20378243

バトレス ラファエル (BATRES, Rafael)

豊橋技術科学大学・工学研究科・准教授

研究者番号: 20313372
(平成 24~25 年度)