

令和元年6月11日現在

機関番号：13901

研究種目：基盤研究(B) (一般)

研究期間：2016～2018

課題番号：16H04394

研究課題名(和文) 高強度・高延性の両立を可能にする次世代金属材料のための多結晶構造最適化

研究課題名(英文) Topology optimization of metallic polycrystalline microstructure to improve strength and deformability

研究代表者

加藤 準治 (Kato, Junji)

名古屋大学・工学研究科・教授

研究者番号：00594087

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 14,000,000円

研究成果の概要(和文)：金属材料の最も重要な力学的性質は韌性であるがそれは強度や延性と相関関係にある。また、それらの力学的性質を決定付けるものは材料微視構造である結晶構造である。一方で、トポロジー最適化という、構造や材料の力学的性能を最大にするような最適形状をコンピュータで見出す方法がある。本研究は、結晶性材料の設計に役立てるために、トポロジー最適化を導入した新しい設計法の枠組みを開発した。ここでは、剛性や韌性、熱伝導性能を最大にする最適結晶構造を数値的に求める手法を開発し、その有用性を数値実験で確かめた。

研究成果の学術的意義や社会的意義

金属材料をはじめとする結晶材料は社会インフラを構成する基盤材料であり、その性能を改善するためにこれまで多くの研究が行われている。しかし、従来の方法はこれまでの実績と経験則に依存する部分が多く、より高度な材料の開発を推進するには限界がある。本研究は、それを改善するためのものであり、今後の先端材料開発における上流側の設計に大きく寄与するものであると考える。

研究成果の概要(英文)：Ductility is the most important mechanical characteristic for metallic materials and has co-relation with the strength and deformability. Those performances are determined by the microstructure, namely crystalline structure. In the meanwhile, it is well known that topology optimization is a powerful design tool to maximize the mechanical performance of structures/materials by applying computers. The present study developed a material design method to maximize the mechanical performance of polycrystalline microstructure, such as stiffness, ductility and thermal conductivity, and verified its usefulness by a series of numerical examples.

研究分野：計算力学

キーワード：トポロジー最適化 結晶性材料

様式 C-19、F-19-1、Z-19、CK-19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

結晶金属材料にとって最も重要な力学特性は靱性であるが、それとほぼ相関の高い強度と延性の両方を同時に高めることは不可能とされてきた。ところが近年、実験的ではあるが『異なる結晶粒径から成る多結晶構造によってそれが克服される』ということがわかってきた[1]。参考文献[1]の考え方は、結晶粒径の違いが及ぼす強度および延性の影響(粒径大→延性増加強度低下, 粒径小→強度増加延性低下)を勘案して単に大小異なる2つの結晶粒径から成る多結晶構造を用いるものである。しかしながら、その特性の力学的な発現メカニズムは解明されていない。また、種々の金属に対して実験を行っているが金属によってその効果にかなりのばらつきがある。これは、異なる結晶粒径を闇雲に混ぜ合わせただけでは、確かな性能改善は期待できないことを示唆している。

参考文献[1]: 平成26年度科学技術振興機構(JST)産学共創基礎基盤研究「ヘテロ構造制御」

2. 研究の目的

本研究では、これまでの我々の研究成果の枠組みに対し、厳密な数値的アプローチにより、高強度・高延性の同時改善という金属材料の普遍的な課題の解決に挑戦するものである。具体的には、多結晶構造が強度と延性の向上に及ぼす微視的なメカニズムを数値的に解明する。さらに、強度と延性を最高水準にまで高めることが可能な最適多結晶構造(最適粒径分布と配置, 結晶方位)を見いだすトポロジー最適化手法の開発を目的とする。

3. 研究の方法

本研究では強度と延性の両方を同時に改善する最適多結晶構造を見いだす手法の開発を行うが、本来は材料の微視構造だけでなく、その微視構造を有する巨視的構造の力学的挙動も同時に考慮しなければ物理的に意味のある最適材料設計にはならない。そこで、本研究では材料の微視構造と巨視的構造の力学問題を関連付けて解析する、マルチスケール解析法を導入し、それを最適化問題へと拡張した。以下ではそれをマルチスケール多結晶構造最適化と呼称する。

ところで、多結晶構造の複雑な幾何特性の再現と力学的応答を得るために本研究ではマルチフェーズフィールド法(以下MPF法に略)と有限要素法を融合し、さらにその最適化問題を解く手法を考えることとした。ただし、当初はMPF法に結晶塑性論を導入してマルチスケール構造解析を実施し、さらにその最適設計をすることで計画していたが、計算コストが膨大となり実用性を欠くことがわかってきた。そのため、本研究ではマルチスケール解析の枠組みの中で、非線形力学挙動に影響する個々の結晶粒の大きさと材料体積制約を課した上で、結晶粒の大きさと配置を最適化する剛性最大化問題を取り扱うこととした。また、結晶方位が考慮したものとし、その差異を確認した。

4. 研究成果

(a) 結晶方位を考慮しない最適設計法の開発1

本研究では、MPF法と有限要素法、および分離型マルチスケール解析とトポロジー最適化の融合した新しい枠組みを構築し、材料の微視領域における複雑な幾何学的表現を可能にする材料設計法を開発した。この手法では、マクロ構造の形や境界条件に合わせてそれに最適な材料微視構造が得られている。図-1は長さの異なるマクロ構造に対して最適な結晶構造を求めた計算例である。これらはマクロ構造の応力状態からしても合理的なトポロジーが得られていることがわかる。これにより、今までミクロ構造の最適化問題で困難とされていた金属材料の結晶構造を表現することが可能となった。この成果は、今後の先進的金属材料の開発分野において、非常に有益なものであると考えられる。

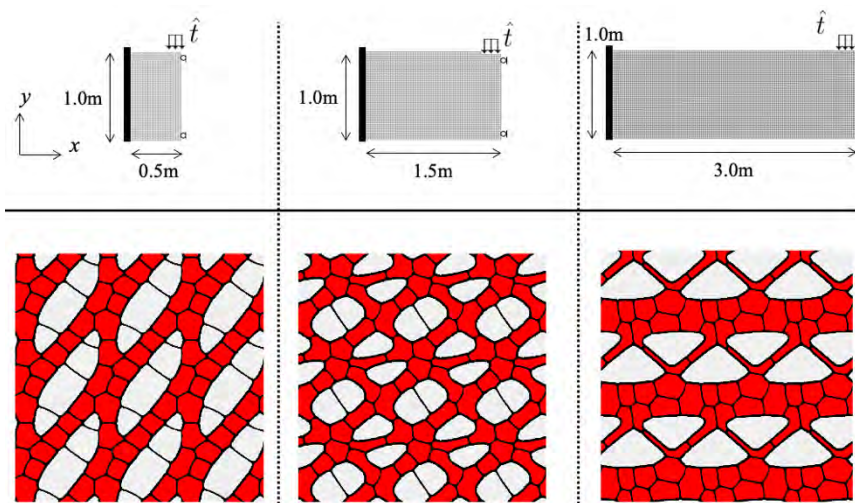


図-1 上段は3つのマクロ構造を示し、下段はそれぞれの最適結晶構造を示している。

(b) 結晶方位を考慮しない最適設計法の開発 2

本研究では、上記で成功した例を熱伝導性能最大化問題に適用し、本手法の汎用性と妥当性を確認した。熱伝導性能最大化問題に対しては、結晶粒の大きさを制御する体積制約を取り入れた時間発展式を新たに提案し、図-2 に示す最適化計算例でその妥当性を検証した。ここでは、結晶粒界で生じる熱伝導の物理は加味されていないものの、結晶粒の体積制約を満たしながら熱伝導性能を最大にする結晶配置ならびに粒界を可視化した。実際の材料開発においては、結晶粒の大きさに関する制約を課すことが多く、本研究はその基礎となる枠組みを構築したものとと言える。

本研究で得られた知見は、以下のとおりである。(1)いくつかの最適化計算例によって、マクロ構造の特性を考慮した最適な結晶配置が得られることが示された、(2)最適化によって一旦は目的関数値が最小値に近づくものの、曲率の効果によって結晶粒が丸みを帯び、最適な結晶配置を乱す傾向がある。これについては、曲率の効果排除する手法を取り入れることで、安定的に最適結晶配置が得られるものと考えられる。本研究では、Nestler らの体積制約法を導入し、アルミニウムの結晶粒ごとの体積を一定にすることで、ユニットセル内のアルミニウムの材料体積量を一定に保っている。

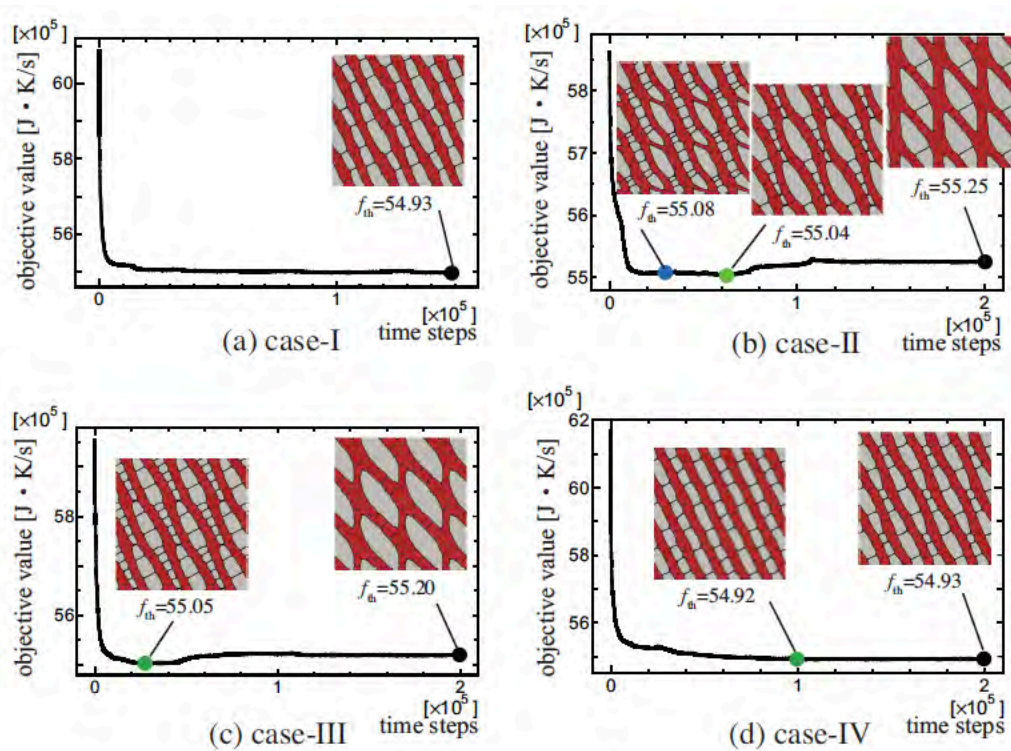
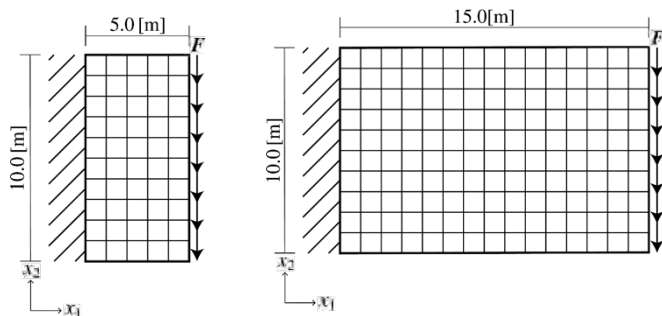


図-2 熱伝導量を最大する最適結晶構造と目的関数値の推移

(c) 結晶方位を考慮した最適設計法の開発

本研究では、マルチフェーズフィールド法と分離型マルチスケール解析法を組み合わせたトポロジー最適化を結晶方位に従って直交異方性であるとした場合の最適設計法を開発した。図-3 に示すような2つの片持ちの構造の剛性を最大にするようにしている。その結果、図-4, 5の最適設計例で示したように、結晶粒の配置と結晶方位を同時に最適化することにより合理的な材料微視構造が得られ、本手法の妥当性が明らかとなった。本手法により、結晶構造を有する異方性材料のミクロ構造のトポロジー最適化が可能となった。また、分離型マルチスケール解析法を用いることで、マクロ構造の力学的挙動を考慮した結晶組織の設計も可能であることを示した。本手法で提案した結晶方位の最適化を導入することにより、導入前と比較してマクロ構造の剛性を向上させることに成功した。また、本手法は様々な境界条件で適用出来ることから、今後の結晶性材料の開発や設計において、非常に有益であるといえる。



材料	方向	ヤング率 [GPa]	結晶方位 [rad]	
			1	2
材料 1 (赤)	y'_1	200	$\pi/4$	$3\pi/4$
	y'_2	100	$3\pi/4$	$\pi/4$
材料 2 (青)	y'_1	20	$3\pi/4$	$\pi/4$
	y'_2	10	$\pi/4$	$3\pi/4$

図-3 (左) 構造 1, (中) 構造 2, (右) 材料定数

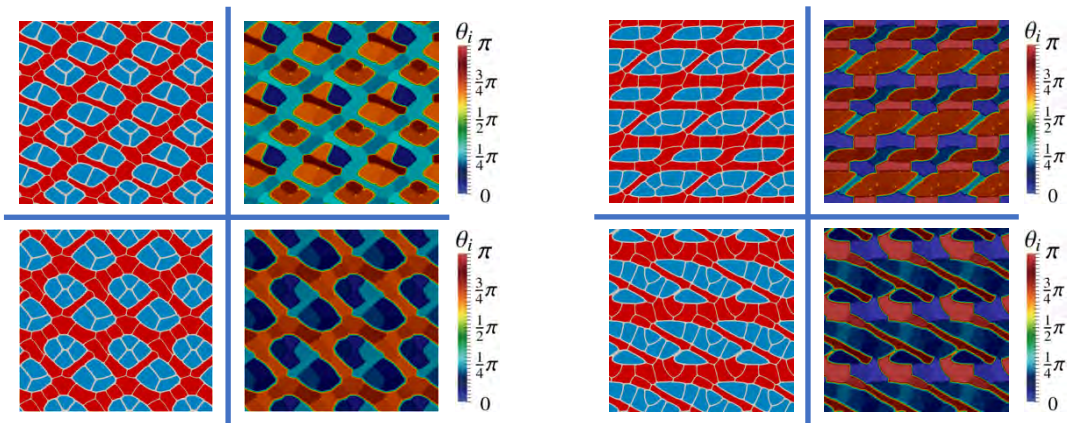


図-4 (上段) 構造 1 の最適結晶構造とその結晶方位, (下段) 構造 2 の最適結晶構造とその結晶方位

図-5 (上段) 構造 1 の最適結晶構造とその結晶方位, (下段) 構造 2 の最適結晶構造とその結晶方位

(d) 靱性を最大にする非結晶性マイクロ構造のマルチスケルトポロジー最適化の開発

前述のとおり, MPF法を用いて忠実にマクロ構造の靱性を向上させる結晶性マイクロ構造の最適設計を実施するのは計算コストが膨大となり現有の計算機環境では対応できない. そのため, 本研究ではMPF法だけ取り除いた状態で, マクロ構造の靱性最大化を可能にする非結晶性マイクロ構造の最適設計法を構築した. 図-6はマクロ構造を任意に6つの領域に分け, その領域において最適なマイクロ構造を求めた問題である. この方法は, 対応可能な計算機環境が整えばMPF法との融合は可能となるものに仕上がっている. マルチスケルトポロジー最適化で靱性を最大にする方法の開発はまだ世界的も行われておらず, 非常に有用な方法と思われる.

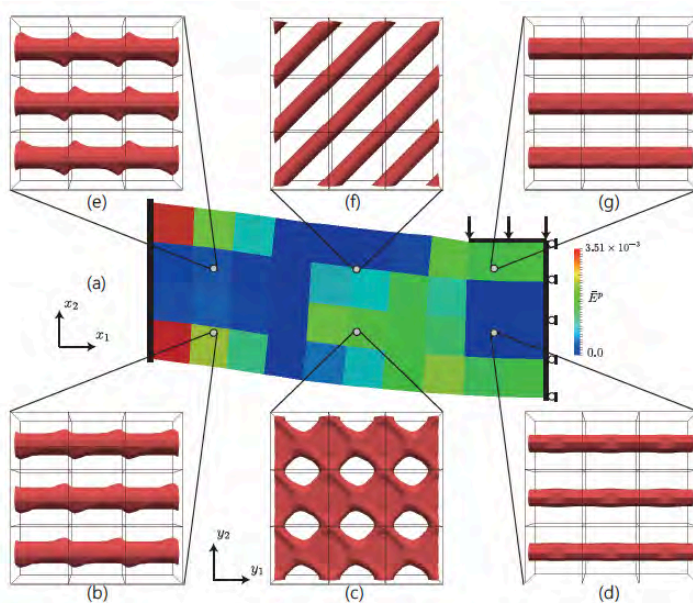


図-6 曲げせん断変形を受けるマクロ構造の靱性を最大にするマイクロ構造トポロジー

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕(計3件)

- ① 干場大也, 小川竣, 加藤準治, 京谷孝史, 複合材料の弾塑性挙動を考慮したマルチスケールトポロジー最適化, 日本計算工学会論文 (Transactions of JSCES), Paper No. 20180015, 2018.
- ② J. Kato, S. Ogawa, T. Ichibangase, T. Takaki, Multi-phase field topology optimization of polycrystalline microstructure for maximizing heat conductivity, Structural and Multidisciplinary Optimization, 57, 5, pp. 1973-1954, 2018, special issue.
- ③ Tomohiro Takaki, Junji Kato, Phase-field topology optimization model that removes the curvature effects, Mechanical Engineering Journal, Vol. 4, No. 2, 2017.

〔学会発表〕(計10件)

- ① 工藤寛史, 加藤準治, 京谷孝史, 結晶方位を考慮した MPF マルチスケールトポロジー最適化の提案, 第23回計算工学講演会, 日本計算工学会 (全4頁), 6月6-6月8日, 名古屋, 2018.
- ② 小山礼, 加藤準治, 高木知弘, 京谷孝史, 熱伝導性能最大化を目的とした結晶組織の最適設計, 第23回計算工学講演会, 日本計算工学会 (全4頁), 6月6-6月8日, 名古屋, 2018.
- ③ 小山礼, 加藤準治, 京谷孝史, 曲率の影響を取り除いた結晶性材料のマルチスケール最適設計, 第21回応用力学シンポジウム, 5月19, 20日, 名城大学 (全2頁), 2018.
- ④ 工藤寛史, 加藤準治, 京谷孝史, 結晶方位を考慮した MPF マルチスケールトポロジー最適化による剛性最大化問題, 第21回応用力学シンポジウム, 5月19, 20日, 名城大学 (全2頁), 2018.
- ⑤ 工藤寛史, 加藤準治, 京谷孝史, 結晶方位を考慮した材料微視構造のトポロジー最適化, 平成29年度土木学会東北支部技術研究発表会, 3月3日, 郡山 (全2頁), 2018.
- ⑥ 小山礼, 加藤準治, 京谷孝史, 曲率の影響を取り除いた結晶性材料の最適設計, 平成29年度土木学会東北支部技術研究発表会, 3月3日, 郡山 (全2頁), 2018.
- ⑦ 一番ヶ瀬俊季, 加藤準治, 魚住久雄, 木皮和男, 高木知弘, 熱伝導性能の最大化を目指した金属結晶構造の MPF マルチスケールトポロジー最適化, 日本機械学会 第30回計算力学講演会 (CMD2017), 9月16-18日, 大阪 (全2頁), 2017.
- ⑧ J. Kato, S. Ogawa, T. Kyoya and K. Terada, Material design applying a multi-scale topology optimization for elastoplastic solids, XIV International Conference on Computational Plasticity. Fundamentals and Applications (COMPLAS2017), (1page), Barcelona, Spain, September 5-7, 2017.
- ⑨ Junji Kato, Toshiki Ichibangase, Shun Ogawa, Takashi Kyoya, Tomohiro Takaki, Development of Multi-Scale MPF Topology Optimization to Maximize a Heat Conductivity Assuming a Metallic Crystalline Structure, 14th U.S. National Congress on Computational Mechanics, Montreal, Quebec, Canada, (1page), July 17-20, 2017.
- ⑩ 小川竣, 加藤準治, 京谷孝史, 弾塑性複合材料のマルチスケールトポロジー最適化によるエネルギー吸収性能最大化, 第22回計算工学講演会, 日本計算工学会 (全4頁), 5月31-6月2日, 埼玉, 2017.

6. 研究組織

(1) 研究分担者

研究分担者氏名：高瀬慎介

ローマ字氏名：Shinsuke Takase

所属研究機関名：八戸工業大学

部局名：大学院工学研究科

職名：講師

研究者番号 (8桁)：00748808

研究分担者氏名：高木知弘

ローマ字氏名：Tomohiro Takaki

所属研究機関名：京都工芸繊維大学

部局名：機械工学系

職名：教授

研究者番号 (8桁)：50294260