

令和元年6月14日現在

機関番号：12601

研究種目：若手研究(B)

研究期間：2017～2018

課題番号：17K14832

研究課題名（和文）データ駆動型アプローチによる二相組織の疲労予測

研究課題名（英文）Fatigue prediction of dual-phase microstructure by data-driven approach

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）・助教

研究者番号：10711153

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 3,300,000円

研究成果の概要（和文）：金属材料の力学的特性を予測するためには、一般に材料・加工条件から微細組織を予測するためのモデルと、組織から特性を予測するためのモデルが必要である。従来の特性予測モデルでは、第二相の体積分率や母相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、空間相関関数を用いて二相組織の局所的な空間配置を定量的に取り扱った。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。さらに主成分解析を行い計算コストを抑えることで、様々な条件下の疲労寿命予測が期待できる。

研究成果の学術的意義や社会的意義

鉄鋼材料を初めとした多くの実用材料の疲労寿命をより正確に予測できるようになる。またスパースモデリングによるモデル選択や、データ同化手法を適用することで、どのような組織因子が疲労特性に寄与するか明らかにできる。さらに、フェーズフィールド法などの組織予測手法と組み合わせることで、製造プロセスから性能への一貫予測が実現されると期待される。さらには、クリープや腐食といった他の材料特性についても、同様のアプローチで、予測するための指針を立てられる。これらを組み合わせることで、例えば疲労特性と破壊靱性をバランスよく両立するような材料の開発指針を立てることなどにも役に立つ。

研究成果の概要（英文）：In order to predict mechanical properties of metal materials, generally, a model for predicting microstructure from materials and processing conditions and a model for predicting properties from microstructure are required. Conventional property prediction models take into account only the macroscopic factors such as volume fraction of the second phase and the strength ratio of the matrix phase to the second phase, however in fatigue problems, local deformation behavior has significant importance. In this study, the spatial correlation function was used to quantitatively evaluate the local spatial arrangement of the two-phase materials. Since this method can be extended to multiphase structures of three or more phases, it can be applied to many practical materials, and a more universal fatigue prediction method can be expected. Furthermore, fatigue life prediction under various conditions can be expected by principal component analysis to reduce the calculation cost.

研究分野：材料信頼性

キーワード：疲労 機械学習 スパースモデリング データ同化

様式 C - 19、F - 19 - 1、Z - 19、CK - 19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

コンピュータを用いた数値シミュレーションによる金属材料の機械的特性予測は 1980 年代から活発に行われてきた。金属材料の機械的特性を予測するためには、一般に、材料・加工条件から微細組織を予測するためのモデルと、組織から特性を予測するためのモデルが必要である。組織を予測する手法としては、フェーズフィールド法を初めとして、種々の手法が提案されており、近年の計算技術の発展とともに、詳細な微細組織を予測可能になりつつある。一方で、組織から機械的特性(特に疲労特性)を予測するモデルは、未だに予測精度が十分でなく、手法が確立していない。一般的に金属材料では、疲労寿命の多くが、疲労き裂の発生と、短いき裂(結晶粒 3~10 個程度まで)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 9 割程度を占め、疲労寿命のばらつきを支配する。個々の組織と疲労特性の関係については、様々な経験則が提案されており、定性的な予測がある程度可能であるが、一般的な疲労予測手法は未だ確立していない。その理由のひとつは、実用材料の組織が非常に複雑であり、二相組織の分布や粒の連結性のように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、き裂発生や短いき裂進展の観察が、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分布状態を熱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。現在、これらの実用材料の組織から、一般的な手法で定量的な疲労寿命予測を行うことは極めて困難であると言える。

計算モデルやデータ駆動型手法を用いて材料の組織や特性を予測する試みは、米国や欧州でも近年活発化している。代表的なプロジェクトとして、米国の Integrated Computational Materials Engineering (ICME) や「マテリアルゲノムイニシアチブ (MGI)」という大統領イニシアチブがあるが、これらは物理モデルにもとづくシミュレーションをマイクロからマクロまでつなげて順問題を解くことに注力している。本研究で扱うような疲労の問題では、疲労き裂発生則など、未だに物理モデルが確立していないところが多い。材料の応力ひずみ応答を精度良く予測するための取り組みとして、結晶塑性有限要素法 (CPFEM) は広く利用され始めており、Raabe 教授(マックスプランク研究所)などが成果を上げている。また、ニューラルネットワークなどのデータ駆動型手法を用いて材料特性を予測する試みは、Kalidindi 教授 (Georgia Tech) により精力的に行われている。一方で、これらのシミュレーションとデータ駆動型手法を組み合わせた研究は始まったばかりである。

2. 研究の目的

本研究の目的は、結晶塑性論に基づく有限要素解析と種々のデータ駆動型アプローチ(空間相関関数や主成分解析、統計的機械学習)を組み合わせることで、組織から疲労特性を予測する手法を提案することである。この提案手法を用いることで、鉄鋼を中心とした二相組織を有する材料について、疲労寿命と微細構造の関係を明らかにする。

3. 研究の方法

(1)精度のよい微細組織モデルの提案、(2)疲労き裂発生の予測手法の提案、(3)空間相関関数をベースとした機械学習の適用、(4)極値解析による疲労寿命予測を行う。また実際に単相(フェライト鋼)や二相組織(フェライト・パーライト鋼)の材料を準備し、疲労き裂発生や短いき裂進展の観察を行い、実験結果を比較することで、提案手法の予測精度を検証する。

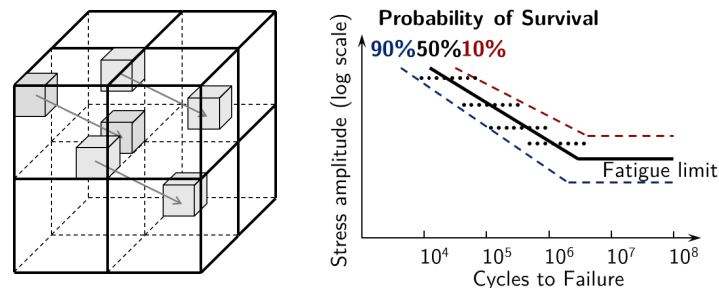


図 1 空間相関関数の算出(左)と確率疲労曲線(右)

4. 研究成果

フェライト鋼、パーライト鋼、フェライト・パーライト鋼について、SEM観察を行い、EBSD解析を行った。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 、傾きの 3 パラメータを統計的に取得した。結晶方位は、方位分布関数 (ODF) によって評価した。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。ただし、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 θ) を反映可能な分割手法を提案した。ODF をもとに結晶方位を割り当てる方法は多数提案されているが、より一般的な結晶方位分布に対応するため、Melchior と Delannay が提案した手法を用いた。各材料について丸棒試験片を作成し、ひずみ制御で一定振幅低サイクル疲労試験を行い、破断寿命の 1/2 サイクルのヒステリシスループから、繰返し応力ひずみ曲線を得た。グローバルモデルの構成則には Mises の降伏関数を用いた J2 流れ則を、サブモデルの構成則には結晶塑性モデルを用いた。J2 流れ則では背応力 (backstress) を組み込みパウシンガー効果を考慮した。結晶塑性モデルでは、Hutchinson らが提案した式を用いた。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た。上記の構成則 (J2 流れ則・結晶塑性) を用いて、繰返し応力ひずみ曲線を計算し、実験から得られた繰返し SS 曲線とフィッティングすることで、結晶塑性パラメータを逆解析により求めた。

き裂発生を観察するには、従来からレプリカ法などが使用されてきたが、本研究ではより効率的にき裂発生サイクル数を取得するために、試験機コントローラからのトリガ信号を用いて、繰返し波形上の任意のタイミングで、マイクロスコープによる表面観察を行った。疲労試験片にはピコ秒レーザによる微小穴や、極浅い切欠きを導入することで、疲労き裂発生力所を限定し観察を容易にする工夫をした。結晶塑性有限要素解析では、前述の微細組織モデルをサブモデルに利用することで、各すべり系の塑性ひずみ分布を計算した。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。疲労き裂発生クライテリオンには、一般に利用されることが多く、パラメータ数が比較的少ない Tanaka-Mura モデルや Fatemi-Socie モデルを検討した。加えて、図 2 に示すように機械学習を利用することによって疲労強度予測を行うことを検討した。

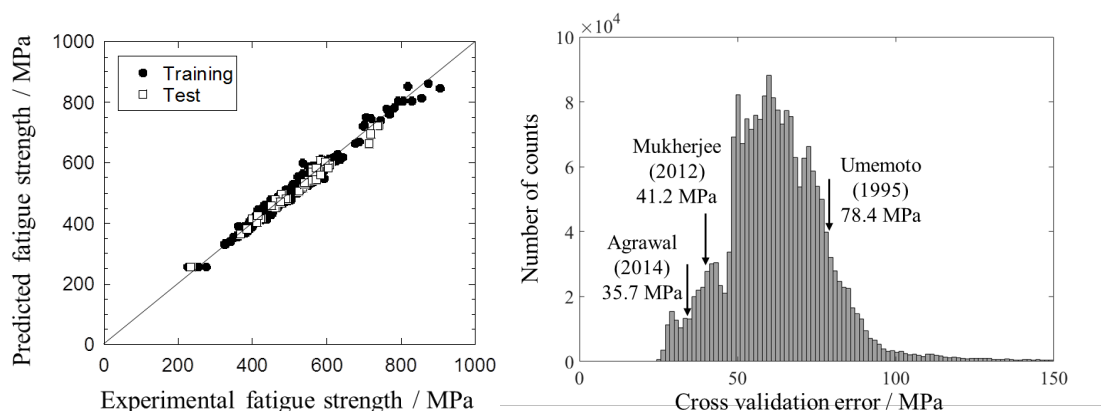


図 2 ニューラルネットワークによる疲労強度予測 (左) と状態密度付き全状態探索 (ES-DoS) の結果

5. 主な発表論文等

[雑誌論文] (計 2 件)

Shiraiwa Takayuki, Miyazawa Yuto, Enoki Manabu, Prediction of Fatigue Strength in Steels by Linear Regression and Neural Network, MATERIALS TRANSACTIONS, 査読有, 60, 2019, 189-198.

DOI: 10.2320/atertrans.ME201714

Shiraiwa Takayuki, Briffod Fabien, Enoki Manabu, Development of integrated framework for fatigue life prediction in welded structures, ENGINEERING FRACTURE MECHANICS, 査読有, 198, 2018, 158-170.

DOI: 10.1016/j.engfracmech.2017.11.012

[学会発表] (計 6 件)

Takayuki Shiraiwa, Briffod Fabien, Manabu Enoki, Fatigue Performance Prediction of Structural Materials by Multi-Scale Modeling and Machine Learning, 4th World Congress on Integrated Computational Materials Engineering (ICME 2017), 2017

Takayuki Shiraiwa, Briffod Fabien, Manabu Enoki, Fatigue Life Prediction of Welded Structures by Microstructure-based Simulations, International Congress of Fracture (ICF 14), 2017

Takayuki Shiraiwa, Briffod Fabien, Manabu Enoki, Uncertainty Quantification of Fatigue Life Prediction in Welded Structures using Microstructure-based Simulations, 17th International Conference on New Trends in Fatigue and Fracture (NT2F17), 2017.

Takayuki Shiraiwa, Briffod Fabien, Manabu Enoki, Fatigue Life Prediction of Welded

Jointby Microstructure-based Simulation, International Institute of Welding (IIW) International Conference 2018, 2018.

Takayuki Shiraiwa, Briffod Fabien, Manabu Enoki, Uncertainty and Sensitivity Analysis in Fatigue Life of Welded Joint using Crystal Plasticity Simulations, Materials Science and Technology 2018, 2018.

Takayuki Shiraiwa, Briffod Fabien, Manabu Enoki, Evaluation of Fatigue Performance in Welded Structures by Microstructure-based Simulation, International Conference on Computational & Experimental Engineering and Sciences (ICCES), 2019.

6 . 研究組織

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、研究者個人に帰属されます。