

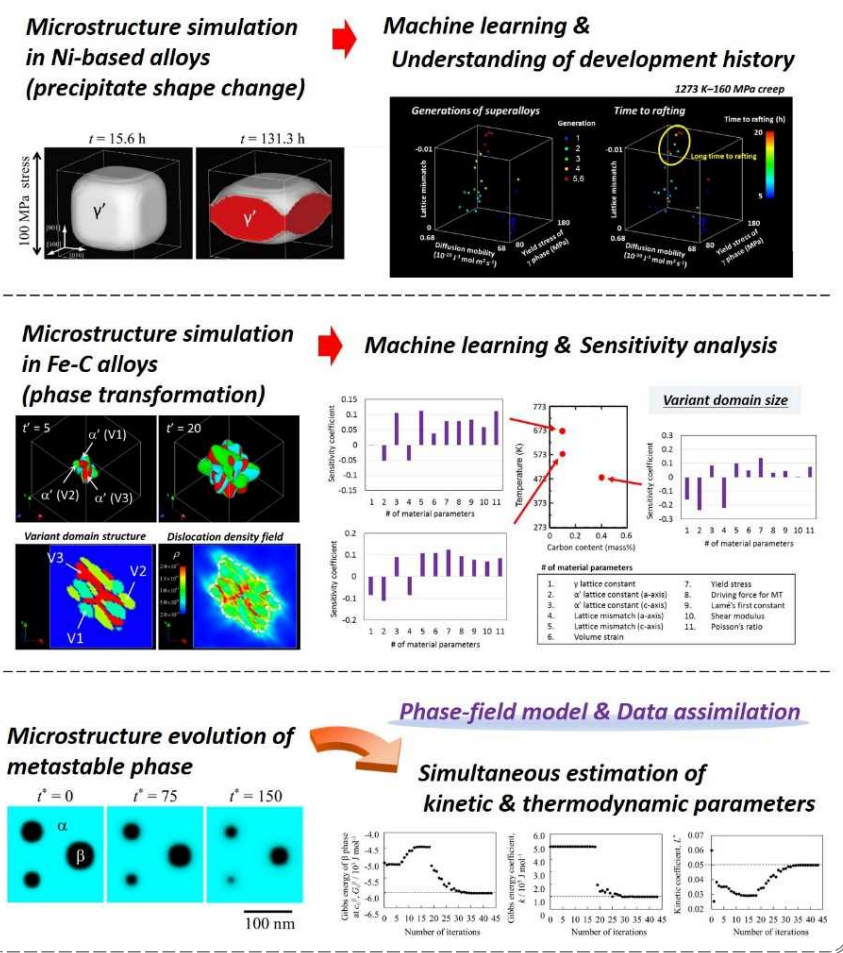
研究の概要

材料開発において、所望の特性を発現させるためには、材料組織の制御が必要である。本研究では、フェーズフィールド(PF)法に基づき、構造材料の組織形成モデルを構築し、そのモデルに含まれる材料パラメータの条件を変更した複数のシミュレーションを実施する。得られたデータと機械学習の手法を用いて、材料パラメータ条件を入力とする組織の高速予測システムを構築し、組織制御のための材料パラメータ設計指針を得る。一方、PFモデルを構築しても、値の不明なパラメータがモデルに内在するために組織予測が難しい場合があることから、組織の実験データをPFモデルに同化し、PFモデルに含まれる複数のパラメータの値を同時に推定・最適化する手法を構築する。

研究の成果

ニッケル基合金の高温クリープ中の析出相形態変化、および、鉄鋼のマルテンサイト変態について、材料パラメータ条件から組織を高速に予測することを可能にした。これにより、歴代のニッケル基合金は高応力・短時間クリープにおける組織変化を遅滞させる方向に開発が進んできたことを明らかにした。また、鉄鋼のマルテンサイト組織に及ぼす材料パラメータの影響度が温度・組成によって異なることを定量的に示した。一方、組織変化の実験データをPFモデルに同化して準安定相のギブスエネルギーを推定する手法を構築した。PFシミュレーションで作成した擬似観測データを用いてパラメータ推定の試行実験を行い、複数のパラメータ値の同時推定が可能であることを示した。

研究領域「理論・実験・計算科学とデータ科学が連携・融合した先進的マテリアルズインフォマティクスのための基盤技術の構築」
(研究総括: 常行真司、H27年度発足)



参考文献・リンク

- ・ Y. Tsukada, T. Koyama, F. Kubota, Y. Murata, Y. Kondo, Intermetallics 85 (2017) 187-196.
- ・ Y. Tsukada, E. Harata, T. Koyama, Proc. of the 5th International Symposium on Steel Science, pp. 127-130, 2017.
- ・ <http://www.material.nagoya-u.ac.jp/PFM/>