

マテリアルズインフォマティクスに基づく Ti-6Al-7Nb合金の機械的特性予測

材料デザイン工学コース
物性制御工学研究室

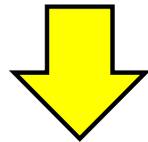
B4 友石捺南子

本資料では、一部、研究データ保護のため、加工してあります。

Ti合金の特徴



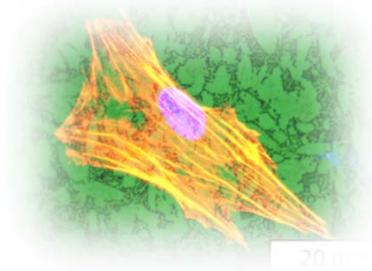
- ・ 高比強度
- ・ 高耐食性
- ・ 低ヤング率
- ・ 低細胞毒性



人工骨の材料として利用

私たちの体の中では、骨を作る「骨芽細胞」が遊走する（動く）方向に強い骨ができる。したがって、骨芽細胞の動きを制御したい。

当研究室の
先行研究

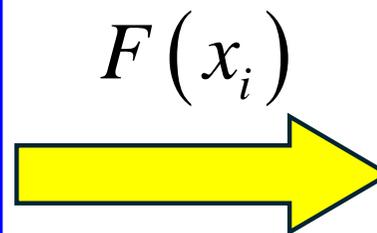
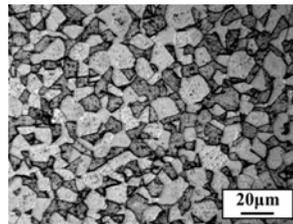


金属組織で骨芽細胞挙動の制御が可能

Q. 細胞制御に適した組織を持つ材料が、人工骨として必要とされる機械特性を有するか？

材料・プロセスパラメータ： x_i

- ・ 合金組成
- ・ 熱処理温度・時間
- ・ 各相の組成
- ・ 各相の分率
- ・ 各相の結晶構造



機械的特性： F

- ・ 引張強度
- ・ 硬度
- ・ ヤング率



マテリアルズインフォマティクス

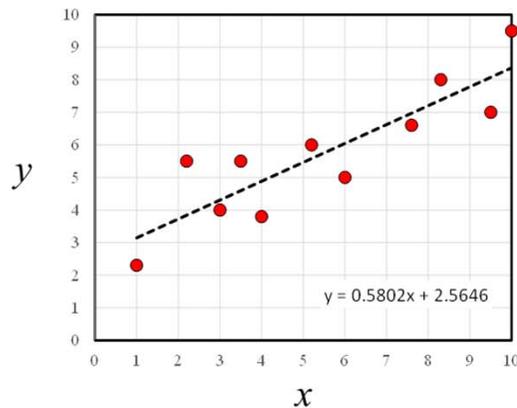
データ科学や人工知能を活用し、
材料開発や材料特性評価を効率化

【機械学習】

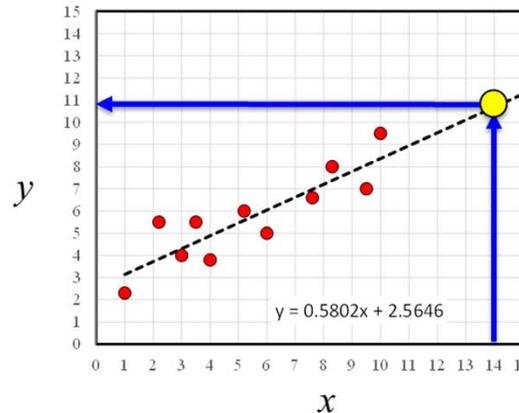
コンピュータにデータを学習させて、パターンやルールを見つけ出したり、
未知のデータを予測したりする技術

回帰：データの相関を見出し、未知データの予測 → $F(x_i)$

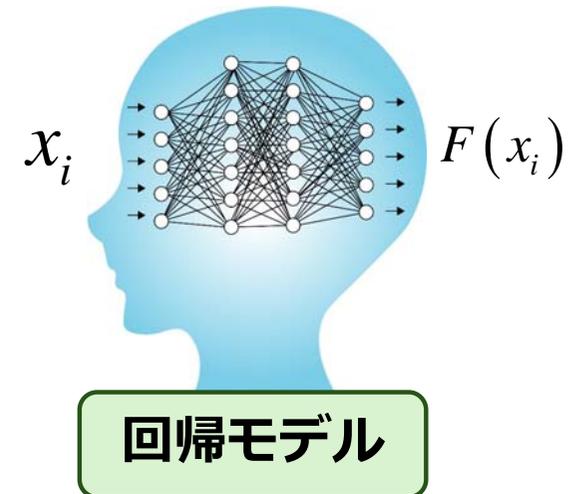
(1変数関数 $y(x)$ の場合)



➡
(予測)



(多変数関数 $F(x_i)$ の場合)



【目的】 マテリアルズインフォマティクスを活用し、生体用
Ti-6Al-7Nb合金の機械的特性予測を可能にする

「Orange Data Mining」

機械学習を視覚的に行うためのオープンソースツール
Pythonベースで開発されている



<https://orangedatamining.com/>

回帰モデルの作成

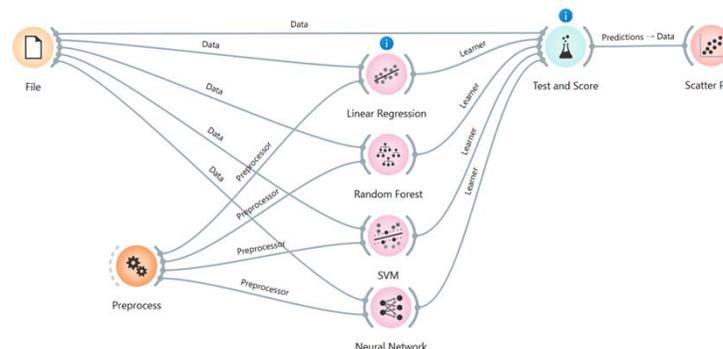
観測データ
(x_i と F の組)

回帰モデルの作成
(Random Forest、SVM、
Neural Network)

回帰モデル
 $F(x_i)$ の評価

SVM: Support Vector Machine

過去の文献から、材料・
プロセスパラメータ(x_i)
と機械的特性(F)との関係
を抽出 (286組データ)
(次のスライドで説明)



Ti-6Al-7Nb合金の
機械的特性を予測
し、実験値との比
較を行う

「Orange Data Mining」

機械学習を視覚的に行うためのオープンソースツール
Pythonベースで開発されている



<https://orangedatamining.com/>

回帰モデルの作成

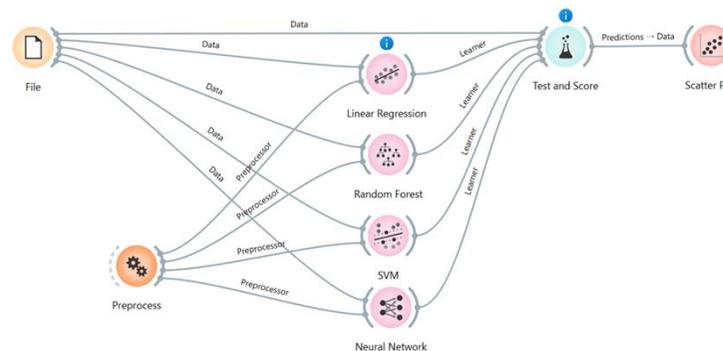
観測データ
(x_i と F の組)

回帰モデルの作成
(Random Forest、SVM、
Neural Network)

回帰モデル
 $F(x_i)$ の評価

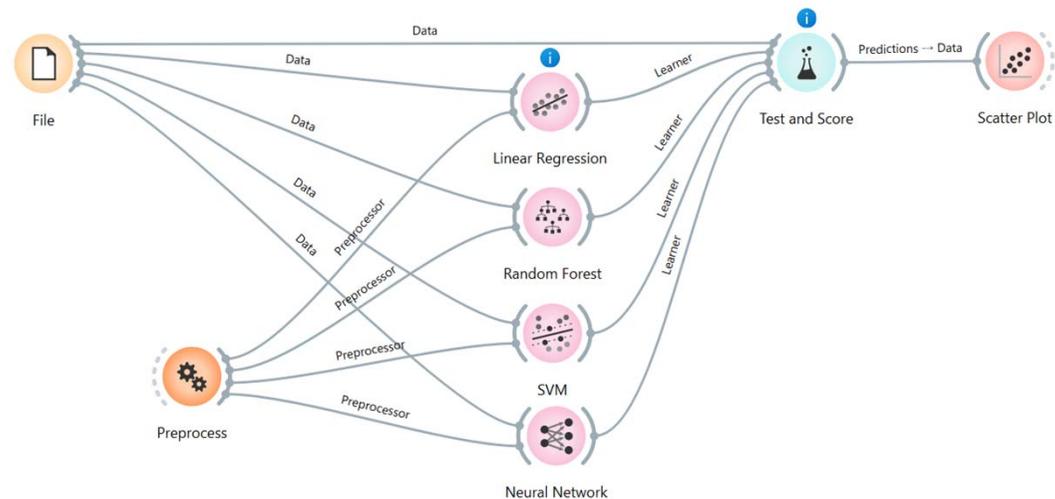
SVM: Support Vector Machine

過去の文献から、材料・
プロセスパラメータ(x_i)
と機械的特性(F)との関係
を抽出 (286組データ)
(次のスライドで説明)



Ti-6Al-7Nb合金の
機械的特性を予測
し、実験値との比
較を行う

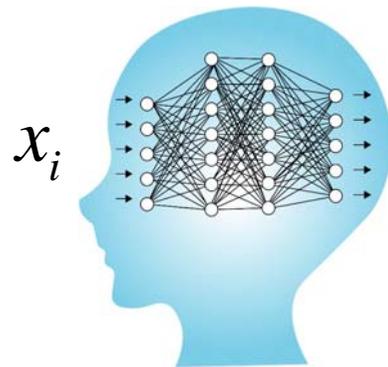
回帰モデルの作成 (Random Forest、SVM、Neural Network)



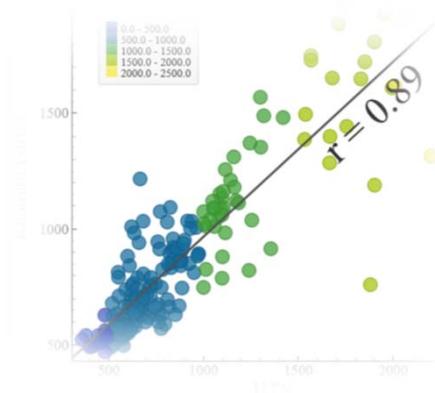
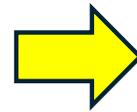


Ti-6Al-7Nb合金の機械的特性予測

～実験値と予測値との比較～



$F(x_i)$



ロッド状試料
(スウェーピング加工)



薄板に切削



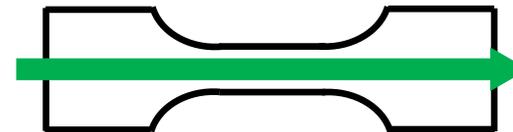
真空封入

850°C24h熱処理

24h

酸化被膜除去

引張試験片へ切削



850°C熱処理材

引張試験

初期歪速度 $8.33 \times 10^{-4} \text{ s}^{-1}$

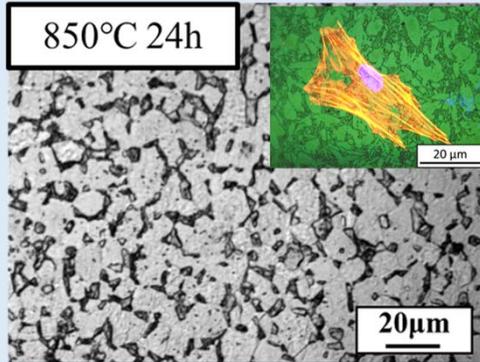
破断まで

鏡面研磨

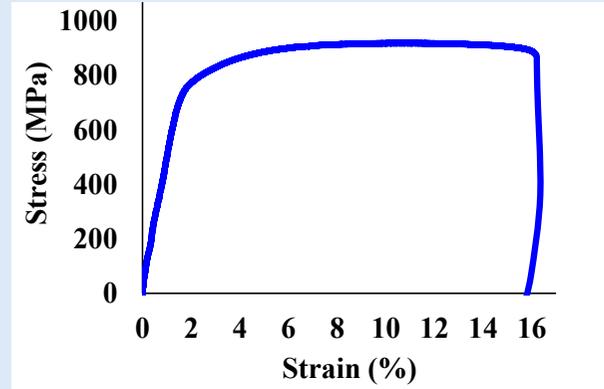
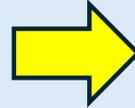
ビッカース硬さ試験

荷重50g, 7点測定

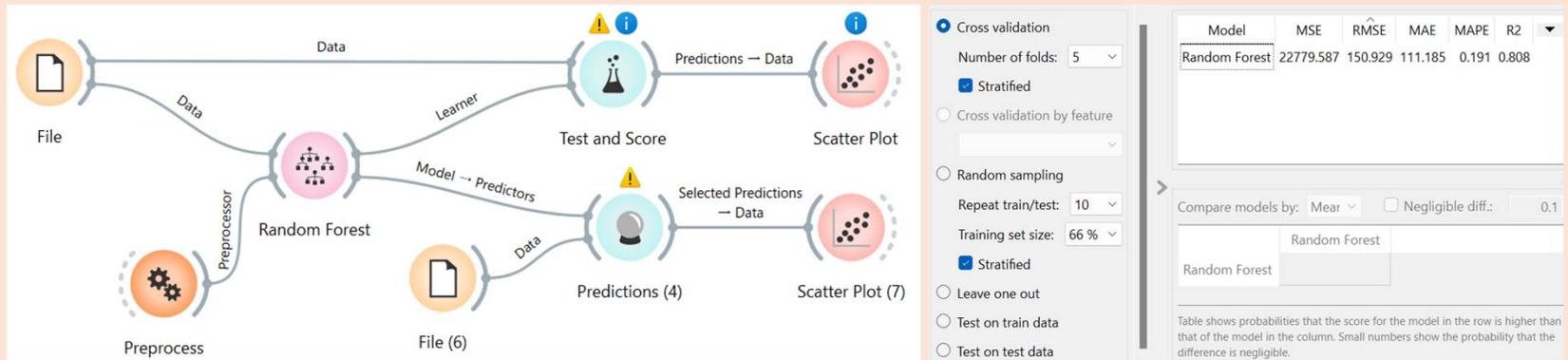
実験



引張試験、
ビッカース硬
さ試験を実施



モデル 予測



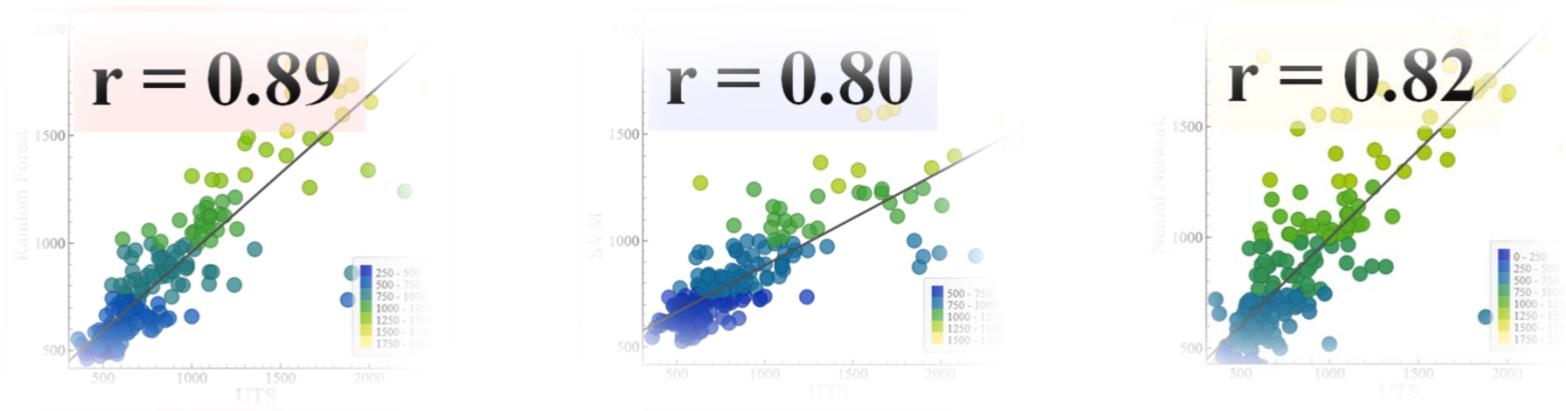
【実験結果とモデル予測比較】

	引張強度(MPa)	降伏強度(MPa)	ビッカース硬さ (HV)	破断伸び(%)
実験値	919.7	749.71	368.6	14.4
予測値	890.8	704.2	366.2	12.6



良好な一致
が見られた

【機械特性の予測精度 モデル比較】



Random Forestがもっとも良く観測された機械特性値を予測した

【Ti-6Al-7Nb合金の機械的特性予測 実験結果とモデル予測比較】

	引張強度(MPa)	降伏強度(MPa)	ビッカース硬さ (HV)	破断伸び(%)
実験値	919.7	749.71	368.6	14.4
予測値	890.8	704.2	366.2	12.6

実験結果とモデル予測値に良好な一致が見られた

機械学習を用いて、Ti-6Al-7Nbの機械的特性予測が可能