

Fri. Jun 2, 2023

Room B

OS11 マルチスケール解析と材料モデリング

[B-11] OS11 マルチスケール解析と材料モデリング
(1)

座長:只野 裕一(佐賀大学)

10:30 AM - 11:45 AM Room B (1F Conference Room 102)

[B-11-01] ANNポテンシャルを用いた古典分子動力学法による α 鉄中のらせん転位とプリズマティック転位ループの相互作用解析*恒元 陽介¹、高橋 昭如¹、熊谷 知久²、野本 明義² (1. 東京理科大学、2. 電力中央研究所)

10:30 AM - 10:45 AM

[B-11-02] 転位動力学法を用いた亀裂一転位相互作用に基づく破壊靱性値評価

*渡邊 啓太郎¹、高橋 昭如¹ (1. 東京理科大学)

10:45 AM - 11:00 AM

[B-11-03] 機械学習による結晶欠陥および巨視的力学特性の関係の解明

*田中 まりの¹、佐々木 翔唯¹、Punyafu Jesada²、村松 眞由¹、村山 光宏² (1. 慶應義塾大学、2. 九州大学)

11:00 AM - 11:15 AM

[B-11-04] マクロ変形に対するハイドレートの微視的構造安定性の解明

*寺島 悠登¹、Brumby Paul¹、村島 隆浩²、村松 眞由¹ (1. 慶應義塾大学、2. 東北大学)

11:15 AM - 11:30 AM

[B-11-05] 液晶エラストマ製グローブ型デバイス開発に向けた力学解析

*吉村 厚輝¹、高橋 和義²、村島 隆浩³、村松 眞由¹ (1. 慶應義塾大学、2. 産業技術総合研究所、3. 東北大学)

11:30 AM - 11:45 AM

OS11 マルチスケール解析と材料モデリング

[B-12] OS11 マルチスケール解析と材料モデリング
(2)

座長:松井 和己(横浜国立大学)

1:15 PM - 2:45 PM Room B (1F Conference Room 102)

[B-12-01] LPSO型マグネシウム合金におけるキンク強化の寸法効果

*只野 裕一¹、木村 海斗¹、萩原 世也¹ (1. 佐賀大学)

1:15 PM - 1:30 PM

[B-12-02] FTMP場の理論に基づく MFSキンクモデリング

*長谷部 忠司¹、水谷 光汰²、有光 美優³ (1. 神戸大学、2. ハウス食品、3. 神戸大学大学院)

1:30 PM - 1:45 PM

[B-12-03] FTMP場の理論に基づく高 Crフェライト鋼のクリープモデリング

*長谷部 忠司¹、工藤 晃一郎²、城石 和真³ (1. 神戸大学、2. 神戸大学大学院、3. JR西日本)

1:45 PM - 2:00 PM

[B-12-04] 均質化弾塑性構成則の代理モデルによるマルチスケール解析

*山中 耀介¹、松原 成志朗²、平山 紀夫³、森口 周二¹、寺田 賢二郎¹ (1. 東北大学、2. 名古屋大学、3. 日本大学)

2:00 PM - 2:15 PM

[B-12-05] 非周期マイクロ構造を有する複合材料の代理均質化モデルによるマルチスケール解析

*中村 明莉¹、山中 耀介¹、新宅 勇一²、森口 周二¹、寺田 賢二郎¹ (1. 東北大学、2. 筑波大学)

2:15 PM - 2:30 PM

[B-12-06] 均質化法における接触を伴う周期境界条件のモデル化

*木口 裕希¹、瀧澤 英男¹ (1. 日本工業大学)

2:30 PM - 2:45 PM

OS11 マルチスケール解析と材料モデリング

[B-13] OS11 マルチスケール解析と材料モデリング
(3)

座長:高橋 昭如(東京理科大学)

3:00 PM - 4:15 PM Room B (1F Conference Room 102)

[B-13-01] SPHによる弾塑性マルチスケール解析の一方方向分離型解法

*全 世原¹、呂 学龍¹、松井 和己¹、山田 貴博¹ (1. 横浜国立大学)

3:00 PM - 3:15 PM

[B-13-02] 隣接ポイド距離が延性損傷に与える影響のマルチスケールモデリングによる評価

*伊本 咲矢¹、松井 和己¹、山田 貴博¹ (1. 横浜国立大学)

3:15 PM - 3:30 PM

[B-13-03] FTMP場の理論に基づく多結晶 Bauschinger効果モデリング

*長谷部 忠司¹、橋本 泰生²、塚本 巧海³ (1. 神戸大学、2. IHI、3. 神戸大学大学院)

3:30 PM - 3:45 PM

[B-13-04] FTMP場の理論に基づく疲労モデリング

*長谷部 忠司¹、尤 心平²、武部 亮裕² (1. 神戸大学、2. 神戸大学大学院)

3:45 PM - 4:00 PM

[B-13-05] 押し込み試験による局所力学特性の推定

*渡邊 育夢^{1,2}、陳 達徳^{1,3}、劉 大元^{2,1} (1. 物質・材料研究機構、2. 筑波大学、3. 名古屋大学)

4:00 PM - 4:15 PM

OS11 マルチスケール解析と材料モデリング

[B-11] OS11 マルチスケール解析と材料モデリング (1)

座長: 只野 裕一(佐賀大学)

Fri. Jun 2, 2023 10:30 AM - 11:45 AM Room B (1F Conference Room 102)

[B-11-01] ANNポテンシャルを用いた古典分子動力学法による α 鉄中のらせん転位とプリズマティック転位ループの相互作用解析

*恒元 陽介¹、高橋 昭如¹、熊谷 知久²、野本 明義² (1. 東京理科大学、2. 電力中央研究所)

10:30 AM - 10:45 AM

[B-11-02] 転位動力学法を用いた亀裂-転位相互作用に基づく破壊靱性値評価

*渡邊 啓太郎¹、高橋 昭如¹ (1. 東京理科大学)

10:45 AM - 11:00 AM

[B-11-03] 機械学習による結晶欠陥および巨視的力学特性の関心の解明

*田中 まりの¹、佐々木 翔唯¹、Punyafu Jesada²、村松 眞由¹、村山 光宏² (1. 慶應義塾大学、2. 九州大学)

11:00 AM - 11:15 AM

[B-11-04] マクロ変形に対するハイドレートの微視的構造安定性の解明

*寺島 悠登¹、Brumby Paul¹、村島 隆浩²、村松 眞由¹ (1. 慶應義塾大学、2. 東北大学)

11:15 AM - 11:30 AM

[B-11-05] 液晶エラストマ製グローブ型デバイス開発に向けた力学解析

*吉村 厚輝¹、高橋 和義²、村島 隆浩³、村松 眞由¹ (1. 慶應義塾大学、2. 産業技術総合研究所、3. 東北大学)

11:30 AM - 11:45 AM

ANNポテンシャルを用いた 古典分子動力学法による α 鉄中のらせん転位と プリズマティック転位ループの相互作用解析

Interaction analysis of a screw dislocation and a prismatic dislocation loop
in α -iron by molecular dynamics using ANN potentials

恒元陽介¹⁾, 高橋昭如²⁾, 熊谷知久³⁾, 野本明義⁴⁾

Yosuke Tsunemoto, Akiyuki Takahashi, Tomohisa Kumagai and Akiyoshi Nomoto

1) 東京理科大学 創域理工学研究科 機械航空宇宙工学専攻 (〒278-8510 千葉県野田市山崎2641,
E-mail: 7522541@ed.tus.ac.jp)

2) 博(工) 東京理科大学 創域理工学研究科 教授 (〒278-8510 千葉県野田市山崎2641,
E-mail: takahash@rs.tus.ac.jp)

3) 博(工) 電力中央研究所 上席研究員 (〒240-0196 神奈川県横須賀市長坂2-6-1,
E-mail: kumagai@criepi.denken.or.jp)

4) 博(工) 電力中央研究所 上席研究員 (〒240-0196 神奈川県横須賀市長坂2-6-1,
E-mail: a-nomoto@criepi.denken.or.jp)

This paper presents the molecular dynamics analysis of the interaction between a screw dislocation and a prismatic dislocation loop in α -iron. The diameter of the prismatic dislocation loop, the combination of the Burgers vectors of the prismatic dislocation loop and the screw dislocation, and the temperature of the system were varied and analyzed in terms of two aspects: the mechanism of the dislocations reaction and the Critical Shear Stress (CSS). As a result, when the Burgers vectors of the screw dislocation and the dislocation loop coincided, a helical dislocation was generated by pair annihilation of the dislocations. It was also found that the CSS was significantly increased by the generation of helical dislocations.

Key Words : screw dislocation, helical dislocation, prismatic dislocation loop, iron

1. 序論

中性子照射により α 鉄やフェライト鋼に形成される転位ループは、転位運動の障害物となって照射硬化や脆化の一要因となることが知られている。従って、材料の脆化挙動を理解するためには、転位と転位ループの相互作用について明らかにすることが重要である。転位と転位ループの相互作用を調べる手法のひとつとして、古典分子動力学法が用いられている。

α 鉄中に形成される転位ループは、バーガースベクトルが $a/2\langle 111 \rangle$ あるいは $a\langle 100 \rangle$ のプリズマティック転位ループであることが知られている[1]。Liuらは $a/2\langle 111 \rangle$ の転位ループ[2]を、Terentyevらは $a\langle 100 \rangle$ の転位ループ[3]を対象にらせん転位との相互作用について分子動力学法を用いて調べ、いずれもらせん転位運動を阻害すると報告されている。しかしながら、これらの研究ではAcklandらによって開発された埋め込み原子法 (Embedded Atom Method: EAM) による原子間ポテンシャルが使用されている[4]。このEAMポテンシャルはらせん転位が $\{110\}$ 面上を運動しないという問題があることが知られている。一方、近年では、機械学習を用いた原子間ポテンシャルの開発

が進んでいる。Moriらは人工ニューラルネットワーク (Artificial Neural Network: ANN) を用いた α 鉄の原子間ポテンシャルを開発した[5]。Moriらは、提案したANNポテンシャルを用いてらせん転位の移動のエネルギー経路を計算し、これまでに第一原理計算等で得られていた結果と同様の結果を再現することに成功しているため、ANNポテンシャルは転位ループとらせん転位の相互作用の検討により適した原子間ポテンシャルと考えられる。

本研究ではらせん転位の運動に及ぼす転位ループの影響を解析することを目的として、ANNポテンシャルを用いた古典分子動力学法の計算を行なった。また、本研究ではらせん転位と転位ループが反応する際のメカニズムと、らせん転位が転位ループを通過する際に必要な臨界せん断応力 (Critical Shear Stress: CSS) に着目して解析を行なった。

2. 解析手法

(1) モデルと計算手法

本研究では古典分子動力学法を用いて α 鉄中のらせん転位と転位ループの相互作用の数値解析を行なった。計

算コードはLAMMPSを使用した[6]. 計算に使用した原子モデルの概略図を図1に示す. 計算領域の大きさは15nm×10nm×10nmであり, 結晶方位はx方向にらせん転位の進行方向 $[11\bar{2}]$, y方向に体心立方格子のすべり面法線方向 $[1\bar{1}0]$, z方向に体心立方格子のバーガースベクトルの方向 $[111]$ とした. 本研究ではらせん転位の転位線方向がz方向と一致するように挿入し, らせん転位のバーガースベクトル b_{SD} を $a/2[111]$ とした. 転位ループは $a/2\langle 111 \rangle$ のバーガースベクトルを持つものを対象にした. $a/2\langle 111 \rangle$ で表現されるバーガースベクトルは8方向存在している. しかし, 転位ループは転位線を定義する方向によってバーガースベクトルが反対になる特性があり, 転位ループのバーガースベクトル b_{DL} は8方向の等価な方向から逆ベクトルを除いた4方向が存在する. 本研究ではその中で b_{DL} が $a/2[111]$ の転位ループを対象とした.

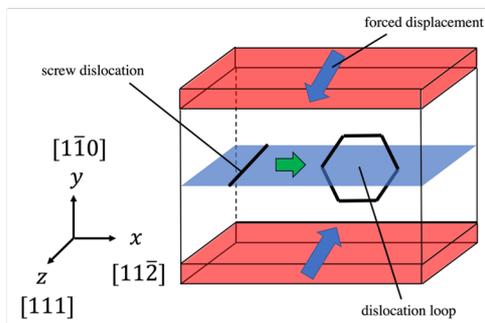


図-1 解析モデル

モデルのx方向とz方向には周期境界条件, y方向境界付近の原子(図1の赤い領域内の原子)には全方向の固定条件を適用してz方向の強制変位を与えた. この強制変位によりモデルにはせん断変形が付与され, それに応じたせん断応力 τ_{yz} が発生する. せん断応力 τ_{yz} によって動き始めたらせん転位が転位ループの衝突し, 抜け出るまでの計算を行なった. また, 負荷するせん断変形はせん断ひずみ速度が 1.0×10^8 /sとなるように設定し, 時間刻みは2.0 fsとして計算を行なった.

(2) 計算結果の整理

a) せん断応力の定量化

せん断応力 τ_{yz} は固定原子にかかるz方向の力 f_z とy平面の断面積 A_y を用いて以下の式(1)で定量化を行なった.

$$\tau_{yz} = -\frac{\sum f_z^{top} - \sum f_z^{bottom}}{2} \frac{1}{A_y} \quad (1)$$

b) 転位線の可視化

本研究ではらせん転位と転位ループの反応を, Ovito

に実装されているDXA(Dislocation eXtraction Algorithm)を使用して可視化を行なった[7]. 図2は原子のデータから転位を可視化したものであり, (a)は転位を構成する原子のみを可視化したもの, (b)はDXAを用いて転位線を可視化したものである. DXAは原子座標のデータから転位を表現する線分と, 転位を持つバーガースベクトルを算出することができる手法である. これにより, 線分をバーガースベクトルごとに分類して色分けすることが可能になるため, 転位を持つバーガースベクトルの変化を直接可視化することが可能になる.

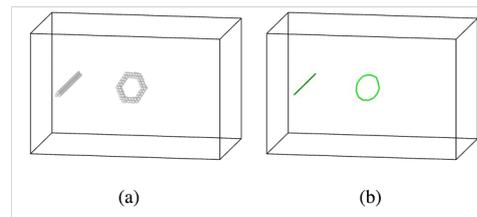


図-2 転位の可視化

3. 反応メカニズムと応力ひずみ関係

転位ループのバーガースベクトル b_{DL} , 転位ループの直径 d_{DL} および系の温度 T をパラメータとして α 鉄中のらせん転位と転位ループの相互作用解析を行なった. 変化させたパラメータを表1に示す.

表-1 計算パラメータ

b_{DL}	$a/2[111]$
$d_{DL}[\text{nm}]$	1.0, 2.0, 3.0
$T[\text{K}]$	10, 150, 300, 450, 600

$b_{DL} = a/2[111]$, $d_{DL} = 2.0$, $T = 300$ の場合における応力-ひずみ線図を図3に示す.

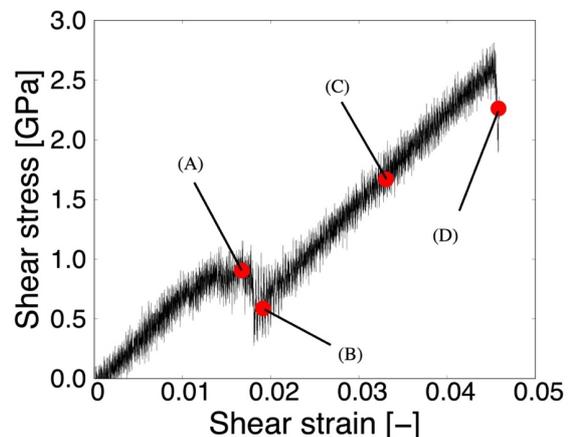


図-3 応力ひずみ線図

また、図3における(A)～(D)のときのらせん転位と転位ループの反応の様子を図4に示す。

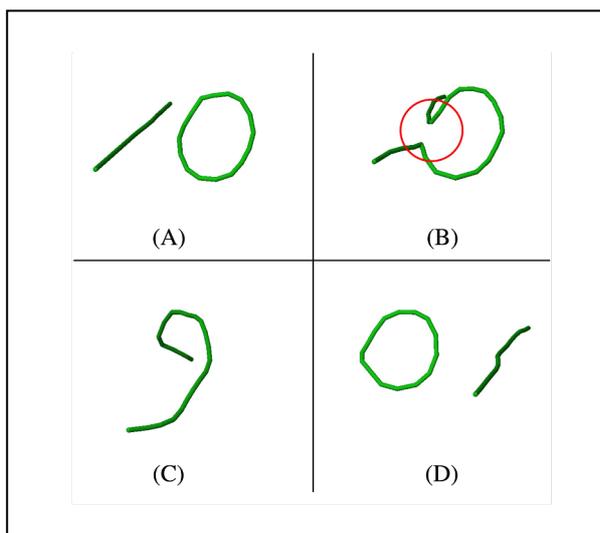


図-4 反応メカニズム

せん断変形をモデルに与え始めてから(A)までの間はせん断応力が増加する傾向が確認できる。(A)を超えてらせん転位が運動を始めると(B)でらせん転位と転位ループが接触する。この際、らせん転位と転位ループは赤い丸の中にあつた転位が対消滅を起こし、一つの転位線として結合する。そのときの反応はバーガースベクトルの足し合わせで式(2)となる。

$$\frac{a}{2}[111] + \left(-\frac{a}{2}[111]\right) = \mathbf{0} \quad (2)$$

式(2)の反応で、転位ループが解かれるようにz方向に広がり、z方向に向かって渦巻く形状の転位が形成する。この転位はヘリカル転位(Helical dislocation)、もしくはヘリックス(Helix)と呼ばれており、Terentyev, Liuらによる古典分子動力学法解析でも形成することが確認されている[2][3]。ヘリカル転位を形成してからせん断応力は単調に増加し、らせん転位と転位ループが再び分裂することでせん断応力は減少した。

4. 臨界せん断応力 (CSS)

系の温度および転位ループの直径がCSSに及ぼす影響を整理したグラフを図5に示す。図5よりCSSは温度の上昇とともに低くなり、転位ループの直径 d_{DL} が大きくなるほど大きくなる傾向を示した。このような転位ループの直径とCSSの関係については、今後検討をさらに進める必要がある。

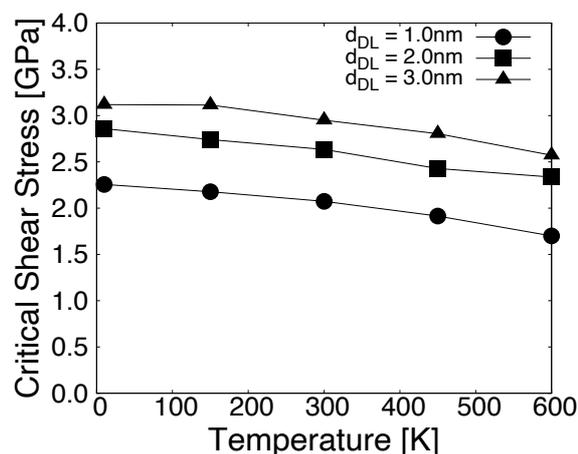


図-5 臨界せん断応力

5. 結論

ANNポテンシャルを用いてらせん転位とプリズマティック転位ループの相互作用解析を行なった。特に、らせん転位と転位ループの反応メカニズムおよび、臨界せん断応力に着目した解析を行なった。その結果、以下の知見が得られた

- (1) らせん転位と転位ループのバーガースベクトルが一致している場合の計算では、すべてのケースでヘリカル転位が形成する。
- (2) 系の温度が上昇するとCSSは減少し、転位ループの直径が大きくなるとCSSは増加する傾向がある。

謝辞: 本研究は文部科学省原子力システム研究開発事業JPMXD0221459116の助成を受けたものです。

参考文献

- [1] B. Yao, D. J. Edwards, R. J. Kurtz: TEM characterization of dislocation loops in irradiated bcc Fe-based steels, *Journal of Nuclear Materials*, 434(2013), pp.402-410.
- [2] X.-Y. Liu and S. B. Biner: Molecular dynamics of the interactions between screw dislocations and self-interstitial clusters in body-centered cubic Fe, *Scripta Materialia* 59 (2008), pp. 51-54.
- [3] D. Terentyev, D. J. Bacon and Yu. N. Osetsky: Reactions between a $1/2\langle 111 \rangle$ screw dislocation and $\langle 100 \rangle$ interstitial dislocation loops in alpha-iron modelled at atomic scale, *Philosophical Magazine*, Vol. 90, Nos. 7-7, 7-14 March (2010), pp.1019-1033.
- [4] G.J. Ackland, M.I. Mendeleev, D.J. Srolovitz, S. Han and A.V. Barashev: Development of an interatomic potential for phosphorus impurities in α -iron, *Journal of Physics: Condensed Matter*, Vol. 16 (2004), pp. S2629-S2642.
- [5] H. Mori and T. Ozaki: Neural network atomic potential to investigate the dislocation dynamics in bcc iron, *Phys. Rev. Materials*, Vol.4 (2020), p.040601(R).

- [6] A. P. Thompson, et al.: LAMMPS – a flexible simulation tool for particle-based materials modeling at the atomic, meso, and continuum scales, *Computer Physics Communications*, 271(2022), 108171.
- [7] A. Stukowski and K. Albe: Extracting dislocations and non-dislocation crystal defects from atomistic simulation data, *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.* 18 (2010) 085001 (13pp).

転位動力学を用いた 亀裂－転位相互作用に基づく破壊靱性値評価

Evaluation of fracture toughness
based on crack-dislocation interaction using dislocation dynamics

渡邊啓太郎¹⁾, 高橋昭如²⁾

Keitaro Watanabe and Akiyuki Takahashi

1) 東京理科大学大学院 創域理工学研究科 機械航空宇宙工学専攻 (〒278-8510 千葉県野田市山崎 2641,

E-mail:7522578@ed.tus.ac.jp)

2) 工博 東京理科大学 創域理工学部 機械航空宇宙工学科 教授 (〒278-8510 千葉県野田市山崎 2641,

E-mail:takahash@rs.tus.ac.jp)

In this study, the fracture behavior of microcrack near the macroscopic crack tip near the transition temperature is numerically analyzed in order to clarify the brittle-ductile transition mechanism. The fracture toughness values of macroscopic crack were calculated by considering the interaction between each crack, the dislocations emitted from each crack, and all of them using the dislocation dynamics method to confirm the effect of the emitted dislocation motion on the crack and the change in fracture behavior of the microscopic cracks due to temperature change.

Key Words : Dislocation dynamics, Crack-dislocation interaction, Fracture toughness

1. 緒言

鋼材の破壊で見られる現象として脆性－延性遷移 (Brittle-Ductile Transition:BDT)がある。BDTは温度が低下するとある温度で急激に破壊靱性値が低下してする現象である。BDT挙動に関して、亀裂先端の微視的な変形機構に基づく破壊挙動の計算機シミュレーションによる計算方法が研究されている。Tanakaらは、亀裂先端からの転位の放出および、放出された転位による亀裂先端部の応力の遮蔽効果を考慮した数値解析を実施している。数値解析と並行して実験も実施し、数値解析により予測された破壊靱性値と実験によって測定された値を比較することによって、数値解析の妥当性を評価するとともに、鋼材に見られる低温脆性が転位による遮蔽効果によって説明でき、またその温度依存性は転位の易動度の温度依存性によるものとまとめている[1]。しかし、このような亀裂先端からの転位の放出を考慮した場合、転位の放出によって亀裂先端が鈍化し、亀裂周辺の応力場が変化することが考えられる。さらにこの応力の変化に伴い、亀裂から放出した転位の運動も変化する。Orowanらは鋼材において、鈍化した亀裂はGriffith理論に基づき表面エネルギーから計算された破壊靱性値と比べて、高い破壊靱性値を持つことにより、鈍化した亀裂の近傍に存在する微視的な亀裂が先に亀裂進展を起し、鈍化した亀裂に伝播することで破壊が開始する挙動を示した[2]。

亀裂先端からの転位の放出および破壊の開始を考慮する計算機シミュレーションに対し、Noronhaらは、破壊靱性値は、鈍化した亀裂 (巨視的な亀裂) 先端付近に存在する微視的な亀裂の破壊開始によって決定されることを仮

定した計算機シミュレーションを実施した[3]。このモデルでは、巨視的な亀裂先端からの転位の放出を考慮するとともに、転位の放出に伴う亀裂先端の鈍化も考慮する。亀裂が作る応力場の計算に、亀裂先端が小さな曲率を有する場合の応力の計算式を用いることで、亀裂の鈍化に基づく応力場の変化を正確に考慮している。解析手順はまず、亀裂先端からの転位の放出を含む微視的な亀裂が破壊を開始するために必要な引張応力を微視亀裂単体で計算する。次に亀裂先端から放出された転位と亀裂先端の鈍化を考慮した巨視的な亀裂の応力場を計算し、微視亀裂があることを仮定する位置での引張応力を計算する。その引張応力に到達するために必要な応力拡大係数を算出し、破壊靱性値とみなす。しかし、このシミュレーションでは巨視的な亀裂と微視的な亀裂をそれぞれ別々のモデルで定義しているため、巨視的な亀裂と微視的な亀裂、それらから放出された転位の直接的な相互作用は考慮しておらず、微視的な亀裂先端における応力拡大係数を正確に計算することができない。

以上のような先行研究を考慮し、巨視的な亀裂と微視的な亀裂を同一モデル内に定義し、巨視的な亀裂と微視的な亀裂、それらから放出された転位の相互作用を直接計算することによって、より信頼性の高い破壊靱性値計算を実現する。

2. 数値解析手法・モデル

鋼材のBDT挙動の実験的研究から、初期亀裂 (巨視亀裂) は破壊が起こる前に大きく鈍化し、亀裂先端近傍に存在する析出物等による微視的な欠陥が劈開することで破壊

が伝播することが明らかになった。以上の破壊過程に基づき本研究では巨視亀裂の先端近傍に微視亀裂を配置している。鈍化した巨視亀裂と放出された転位による応力場を計算し、微視亀裂の応力拡大係数を算出する。微視亀裂の応力拡大係数は微視亀裂から放出された転位による遮蔽効果を考慮している。

(1) 巨視亀裂モデル

巨視亀裂は転位の放出による鈍化を考慮した半無限亀裂として、亀裂先端の応力場をCreagerらの理論式[4]を用いて表した。応力場は以下の式で表される。

$$\begin{cases} \sigma_{xx} = \frac{K_{app}}{\sqrt{2\pi r}} \cos \frac{\theta}{2} \left[1 - \sin \frac{\theta}{2} \sin \frac{3\theta}{2} \right] - \frac{K_{app}}{\sqrt{2\pi r}} \frac{\rho}{2r} \cos \frac{3\theta}{2} \\ \sigma_{yy} = \frac{K_{app}}{\sqrt{2\pi r}} \cos \frac{\theta}{2} \left[1 + \sin \frac{\theta}{2} \sin \frac{3\theta}{2} \right] + \frac{K_{app}}{\sqrt{2\pi r}} \frac{\rho}{2r} \cos \frac{3\theta}{2} \\ \tau_{xy} = \frac{K_{app}}{\sqrt{2\pi r}} \sin \frac{\theta}{2} \cos \frac{\theta}{2} \cos \frac{3\theta}{2} - \frac{K_{app}}{\sqrt{2\pi r}} \frac{\rho}{2r} \sin \frac{3\theta}{2} \end{cases} \quad (1)$$

極座標 (r, θ) は、曲率の中心から見た座標となっている。鈍化の大きさを表す亀裂先端の曲率半径 ρ は次式で計算する。

$$\rho = bN \sin \alpha \quad (2)$$

ここで、 b はバーガースベクトル、 N は放出された転位の本数、 α はすべり面角度である。

(2) 微視亀裂モデル

図1に示すように、微視亀裂は転位動力学法を用いて表現した。亀裂表面では、面力がゼロとなる境界条件を満足する必要がある。この境界条件を、図に示すように単位ベクトル $t = (0, 0, 1)$ 、バーガースベクトル $b = (0, b_y, 0)$ の上昇刃状転位を亀裂面に並べて満足させる。亀裂両端の転位を固定転位とし、亀裂先端を表す。亀裂面を構成する転位には、外部応力 σ_{app} と亀裂を構成する転位からの応力の総和 $\sum \sigma_y^{D_i}$ が作用する。

$$\sigma_y = \sigma_{app} + \sum_i \sigma_y^{D_i} \quad (3)$$

ここで、 σ_y は亀裂面を構成する転位にかかる応力の y 方向成分を表す。Peach-Koehlerの式を計算することによって、亀裂面を構成する転位にかかる力 F_x を次式のように表すことができる。

$$F_x = \sigma_y b_y \quad (4)$$

この力に基づいて転位を移動させ、亀裂面の条件 $(\sigma_y = 0)$ を満足させることで、亀裂面を作成する。亀裂を表現する配置を取得後、応力拡大係数の計算を行う。亀裂先端を表現する転位にかかる力は亀裂進展力とみなすことができ、亀裂先端の応力拡大係数を次式のように計算する。

$$K_{tip} = \sqrt{\frac{2\mu F_x}{1-\nu}} \quad (5)$$

ここで μ はせん断弾性定数、 ν はポアソン比である。亀裂先端の応力拡大係数 K_{tip} が臨界値 K_{Ic} に達したとき破壊が開始したとして解析を終了する。臨界値 K_{Ic} は単位面積あたりの表面エネルギー γ を用いて以下の式で表す。

$$K_{Ic} = \sqrt{\frac{4\mu\gamma}{1-\nu}} \quad (6)$$

臨界値 K_{Ic} を材料の破壊が起こる閾値とし、 K_{tip} が K_{Ic} に達したときの巨視亀裂にかかる負荷 K_{app} を、破壊靱性値 K_F とする。

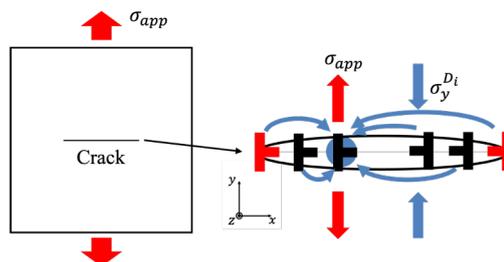


図-1 微視亀裂を表す転位

(3) 転位の温度依存性

転位の放出と転位の速度から転位の温度依存性を表現する。鋼材の破壊靱性試験[5]から、温度に対する引張降伏応力 σ_y の値が得られた。そしてトレスカの降伏条件から、せん断降伏応力を $\tau_f = \sigma_y/2$ として表し、転位源にかかる分解せん断応力 τ が $2\tau_f$ を超えた時に転位を放出させる。放出された転位は、以下の式に基づく速度で移動させる。

$$v = \left(\frac{|\tau| - \tau_f}{|\tau|} \right) (|\tau|)^m A \exp\left(\frac{-E_a}{kT} \right) \quad (7)$$

ここで $m = 400/T + 1.2$ 、 $A = 3.14 \times 10^{-4} \text{ m/s(MPa)}^{-m}$ 、 $E_a = 0.316 \text{ eV}$ である。そして $\tau < |\tau_f|$ のとき、 $v = 0$ として転位は移動しない。

3. 数値解析手順・条件

数値解析の手順は、1) 巨視亀裂に境界条件として、モードIの K_{app} を負荷させ、時間と共に K_{app} を増加させる。2) 巨視亀裂と放出された転位、微視亀裂を構成する転位にかかる力を計算し、転位の速度を計算し、転位を移動させる。3) 巨視亀裂に近い側の微視亀裂先端の応力拡大係数を $K_{tip\ near}$ 、遠い側を $K_{tip\ far}$ として、いずれかが臨界値に達したとき、達した側の亀裂先端から亀裂が進展すると判断する。4) その時巨視亀裂に負荷される K_{app} を破壊靱性値 K_F として算出した。

表1に解析条件、図2に解析の模式図を示す。

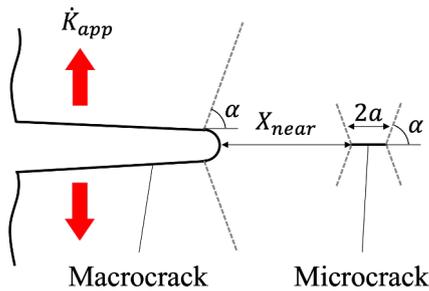


図-2 解析モデル

表-1 解析条件

Shear modulus [GPa]	79.0
Poisson's ration [-]	0.3
Burgers vector [nm]	0.254
Slip-plane angle α [°]	70.5
Critical value K_{Ic} [MPa \sqrt{m}]	1.0
Applied load rate \dot{K}_{app} [MPa \sqrt{m}/s]	0.01
Temperature [K]	93~213
Crack length $2a$ [μm]	1.0~3.0
Crack position X_{near} [μm]	1.0~5.0

4. 数値解析結果

(1) 微視亀裂の応力拡大係数 K_{tip} の変化

図3~5に微視亀裂先端の応力拡大係数 K_{tip} の変化を示す。横軸は巨視亀裂にかかる負荷 K_{app} 、縦軸は微視亀裂先端の応力拡大係数 K_{tip} をそれぞれ臨界値 K_{Ic} で無次元化している。図中にはそれぞれ数値解析のスナップショットも示している。本解析では温度、亀裂位置、亀裂長さによって3種類の破壊様式が得られた。

a) $K_{tip\ near} = K_{Ic}$

巨視亀裂の負荷の増大に伴い、微視亀裂から放出される転位による遮蔽効果を受けることで、応力拡大係数

が振動しながら上昇し、最終的に巨視亀裂に近い側 ($K_{tip\ near}$) が先に臨界値に達する。この破壊メカニズムは2章で述べた脆性破壊の過程と同様の傾向を示しており、このような破壊をする微視亀裂は脆性破壊の起点となると考えられる。

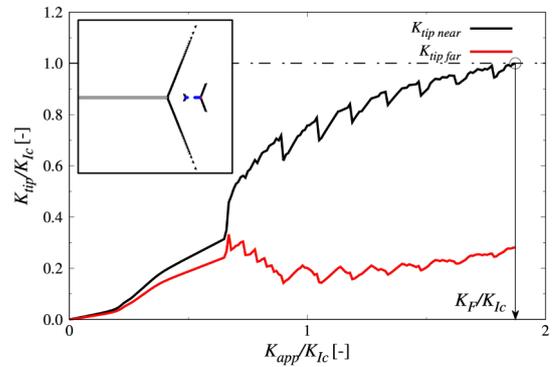


図-3 微視亀裂の応力拡大係数の推移 ($K_{tip\ near} = K_{Ic}$)

b) $K_{tip\ far} = K_{Ic}$

微視亀裂の応力拡大係数はa)と同様に振動しながら上昇する。しかし、巨視亀裂に近い側 ($K_{tip\ near}$) が急激に上昇しづらくなり、結果として巨視亀裂から遠い側 ($K_{tip\ far}$) が先に臨界値に達する。このような現象は巨視亀裂に近い側の微視亀裂先端から放出される転位は巨視亀裂と巨視亀裂から放出された転位の影響を受け進みづらくなることにより、亀裂先端周辺に転位が堆積する。以上により巨視亀裂に近い側の微視亀裂は転位による遮蔽効果を強く受け、結果として応力拡大係数が上昇しづらくなることが考えられる。この破壊メカニズムは直接巨視亀裂と結合することではなく、鈍化した亀裂自身が進展していく必要があり、2章で述べた脆性破壊の過程とは異なり、延性的な破壊と考えることができる。

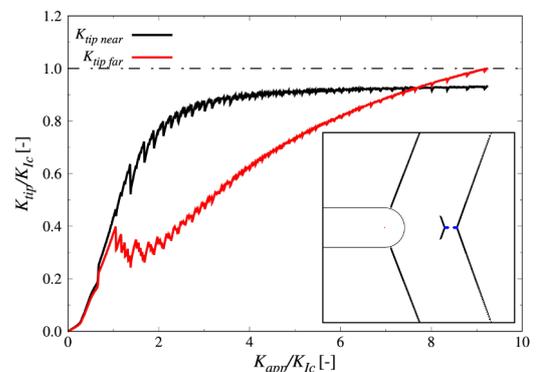


図-4 微視亀裂の応力拡大係数の推移 ($K_{tip\ far} = K_{Ic}$)

c) 亀裂閉口

亀裂転位が互いに打ち消し合い亀裂が閉口してしまう現象が見られた。これは微視亀裂から放出される転位数が多く、亀裂を閉口する力(遮蔽量)が亀裂を開こうとする外部応力を上回ってしまったことが考えられる。このメカニズムは巨視亀裂の破壊の起点にはなり得ないため、有効な破壊靱性値は算出できなかった。

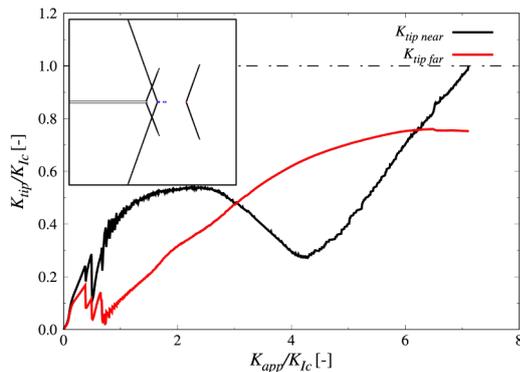


図-5 微視亀裂の応力拡大係数の推移 (亀裂閉口)

(2) 巨視亀裂の破壊靱性値 K_F

巨視亀裂の破壊靱性値 K_F を各亀裂条件、各温度で算出した。図6にその一例を示す。図6の横軸は温度、縦軸は算出した破壊靱性値 K_F を臨界値 K_{Ic} で無次元化したものを示している。図6の白色の領域はa)微視亀裂が巨視亀裂に結合する破壊(脆性的な破壊)を表し、灰色の領域はb)微視亀裂が巨視亀裂に直接結合しない破壊(延性的な破壊)を表している。同じ亀裂位置、亀裂全長であっても温度が上昇するとある温度で脆性的な破壊から延性的な破壊にシフトする。このような現象は実際の鋼材に見られる脆性-延性遷移と同様の傾向を示している。

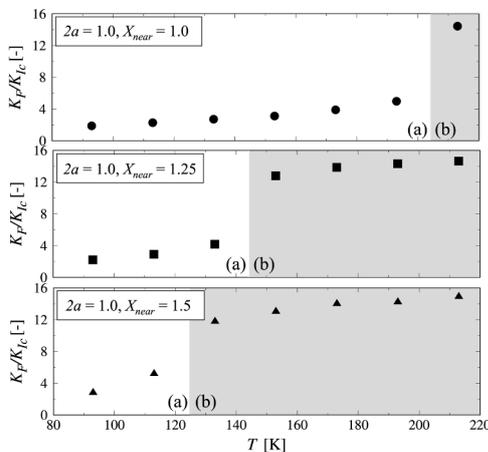


図-6 破壊靱性値の温度変化

(3) 破壊様式の変化

図7, 8には各亀裂条件で破壊メカニズムが(a)~(c)のどのメカニズムであったかを観察し、メカニズムが変わる境界に線を引き領域を分けている。図7は93 K, 図8は213 Kを示している。93 Kにおいて、亀裂全長が長い微視亀裂が脆性的な破壊を起こしやすい傾向を示している。また微視亀裂は巨視亀裂に近いほど脆性的な破壊を起こしやすい傾向を示しているが、亀裂全長が長い微視亀裂は巨視亀裂に近い位置では亀裂が閉口してしまう傾向がみられた。また93 Kでは脆性的な破壊(図中青色領域)が大きく広がっているのに対し、213 Kに温度が上昇すると脆性的な破壊を起こす領域が減少し、延性的な破壊(図中濃灰色領域)が広がる。これは脆性破壊の起点となり得る微視亀裂が減少していると言える。このように温度が上昇すると脆性破壊の起点となる微視亀裂は少なくなり、脆性破壊しづらくなり脆性破壊から延性破壊に遷移する可能性がある。

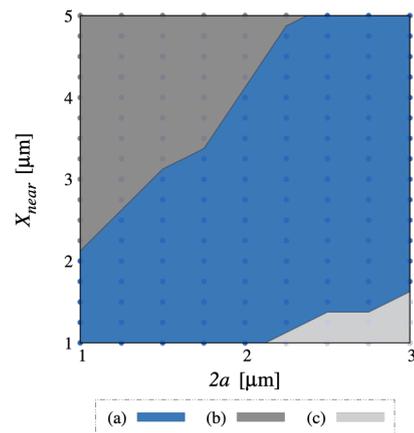


図-7 微視亀裂の破壊様式 (93 K)

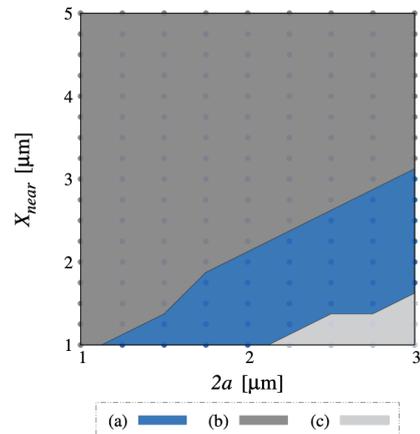


図-8 微視亀裂の破壊様式 (213 K)

5. 結言

本研究では、巨視亀裂先端近傍に存在する微視亀裂の破壊挙動について、転位動力学法を用いて解析を行い、亀裂—転位相互作用に基づいた破壊靱性値を算出した。以下にその結言を述べる。

- 微視亀裂の破壊様式は亀裂位置，亀裂全長，温度により，巨視亀裂に結合する様式（脆性的な破壊），巨視亀裂とは直接結合しない様式（延性的な破壊），亀裂が閉口し巨視亀裂の破壊に関与しない様式の3種類に分類することができる。
- 温度が上昇すると微視亀裂の破壊メカニズムは脆性的な破壊から延性的な破壊にシフトする。このようなことは実際の脆性—延性遷移で見られる減少と同様の現象を示している。
- 温度の上昇により脆性破壊の起点となる微視亀裂が減少することで脆性破壊から延性破壊に遷移する可能性を示した。

謝辞: 本研究は文部科学省原子力システム研究開発事業 JPMXD0221459116 の助成を受けたものです。

参考文献

- [1] M. Tanaka, E. Tarleton, S. G. Roberts, : The brittle-ductile transition in single-crystal iron, *Acta Materialia*, Vol. 56 (2008), pp.5123-5129.
- [2] E. Orowan : *Trans. Inst. Eng. Shipbuilders Scotland*, 1945, Vol. 89, p.165.
- [3] S.J. Noronha, J. Huang, N.M. Ghoniem, : Multiscale modeling of the brittle to ductile transition. *J. Nucl. Sci. Technol*, 539-544, 2004.
- [4] M. Creager, P.C. Paris: Elastic field equations for blunt cracks with reference to stress corrosion cracking, *Int. J. Frac. Mech.* 3, 247-252, 1967.
- [5] D.A. Curry, J.F. Knott: *Met. Sci.*, 1979, vol. 13, p.341.

11:00 AM - 11:15 AM (Fri. Jun 2, 2023 10:30 AM - 11:45 AM Room B)

[B-11-03] 機械学習による結晶欠陥および巨視的力学特性の関係の解明

*田中 まりの¹、佐々木 翔唯¹、Punyafu Jesada²、村松 眞由¹、村山 光宏² (1. 慶應義塾大学、2. 九州大学)

11:15 AM - 11:30 AM (Fri. Jun 2, 2023 10:30 AM - 11:45 AM Room B)

[B-11-04] マクロ変形に対するハイドレートの微視的構造安定性の解明

*寺島 悠登¹、Brumby Paul¹、村島 隆浩²、村松 眞由¹ (1. 慶應義塾大学、2. 東北大学)

11:30 AM - 11:45 AM (Fri. Jun 2, 2023 10:30 AM - 11:45 AM Room B)

[B-11-05] 液晶エラストマ製グローブ型デバイス開発に向けた力学解析

*吉村 厚輝¹、高橋 和義²、村島 隆浩³、村松 眞由¹ (1. 慶應義塾大学、2. 産業技術総合研究所、3. 東北大学)

OS11 マルチスケール解析と材料モデリング

[B-12] OS11 マルチスケール解析と材料モデリング (2)

座長:松井 和己(横浜国立大学)

Fri. Jun 2, 2023 1:15 PM - 2:45 PM Room B (1F Conference Room 102)

[B-12-01] LPSO型マグネシウム合金におけるキンク強化の寸法効果

*只野 裕一¹、木村 海斗¹、萩原 世也¹ (1. 佐賀大学)

1:15 PM - 1:30 PM

[B-12-02] FTMP場の理論に基づく MFSキンクモデリング

*長谷部 忠司¹、水谷 光汰²、有光 美優³ (1. 神戸大学、2. ハウス食品、3. 神戸大学大学院)

1:30 PM - 1:45 PM

[B-12-03] FTMP場の理論に基づく高Crフェライト鋼のクリープモデリング

*長谷部 忠司¹、工藤 晃一郎²、城石 和真³ (1. 神戸大学、2. 神戸大学大学院、3. JR西日本)

1:45 PM - 2:00 PM

[B-12-04] 均質化弾塑性構成則の代理モデルによるマルチスケール解析

*山中 耀介¹、松原 成志朗²、平山 紀夫³、森口 周二¹、寺田 賢二郎¹ (1. 東北大学、2. 名古屋大学、3. 日本大学)

2:00 PM - 2:15 PM

[B-12-05] 非周期ミクロ構造を有する複合材料の代理均質化モデルによるマルチスケール解析

*中村 明莉¹、山中 耀介¹、新宅 勇一²、森口 周二¹、寺田 賢二郎¹ (1. 東北大学、2. 筑波大学)

2:15 PM - 2:30 PM

[B-12-06] 均質化法における接触を伴う周期境界条件のモデル化

*木口 裕希¹、瀧澤 英男¹ (1. 日本工業大学)

2:30 PM - 2:45 PM

1:15 PM - 1:30 PM (Fri. Jun 2, 2023 1:15 PM - 2:45 PM Room B)

[B-12-01] LPSO型マグネシウム合金におけるキンク強化の寸法効果

*只野 裕一¹、木村 海斗¹、萩原 世也¹ (1. 佐賀大学)

FTMP場の理論に基づくMFSキंकモデリング

FTMP-based Modeling of MFS Kink Formation/Strengthening

長谷部忠司¹⁾, 水谷光汰²⁾, 有光美優³⁾

Tadashi Hasebe, Kota Mizutani and Miu Arimitsu

1) 博(工) 神戸大学 工学部 准教授 (〒657-8501 神戸市灘区六甲台町1-1, E-mail: hasebe@mech.kobe-u.ac.jp)

2) ハウス食品(株)

3) 神戸大学大学院 工学研究科 (〒657-8501 神戸市灘区六甲台1-1, E-mail: takebe.ryou@mail.mm4.scitec.kobe-u.ac.jp)

Based on the prominent descriptive capability of the FTMP-based kink simulations, the ultimate goal is ought to be an overall reproduction of the empirically well-documented complex behavior of LPSO Mg in terms of kink formations. This study examines one of the possible viewpoints for it to be made about their “scale-free” nature of the energy-releasing characteristics reported with respect to the AE measurement based on FTMP interaction field formalism. Demonstrated preliminarily are a significant change in the kink morphology, while maintaining appropriate “primary strengthening”, together with an improved return map characteristic.

Key Words : Crystal plasticity, Multiscale, Field theory, Kink, MFS, Acoustic emission

1. はじめに

FTMP場の理論[1-10]に基づくシミュレーションでは、キंक形成・強化問題[11]に対し、Rank-1接続条件[12]を満たす方向に分解した不適合度テンソルを直接的/間接的に構成式中の硬化則へ反映させることで、容易に変形中のキंक場の形成過程を再現することができる[6-10]. しかし実現象[11]においてもキंक形成過程や強度発現機構についてはそれらの詳細に不明な点が多く残されており、より現実の過程を表現するには、それらを勘案したさらなる検討が必要である。本稿では、とくに最近議論が活発に行われている非底面すべり系活動による影響や、AE計測実験で報告[13]されている解放エネルギーのスケール・フリー性や特異なりターン・マップなどが持つ物理的意味と強度発現への役割について検討を加えた。

2. キंक強化の捉え方について

キंक強化にはFig.1に示すように大きく2通りある[10]. すなわち、キंक形成時に流動応力が比較的高レベルで大きく低下することなく維持される”高止まり”現象を示す際の”Primary Strengthening”と、すでに形成済みのキंक場が生み出す強化である”Secondary Strengthening”の2種類である。通常”キंक強化”という用語は後者を指し、Hagiharaら[11]が行った45°二重圧縮試験により定量的に評価されることが多いが、筆者らの立場から言えば、同現象の再現はそれほど困難ではなく(筆者もすでに行っている[9]:後述)、筆者らはむしろ重要なのは前者であると認識しており、”なぜキंक場は形成中でも流動応力レベルを高いレベルで維持できるのか?”を解明せずして”キंक強化を理解できない、と考えている[10]. 本研究において

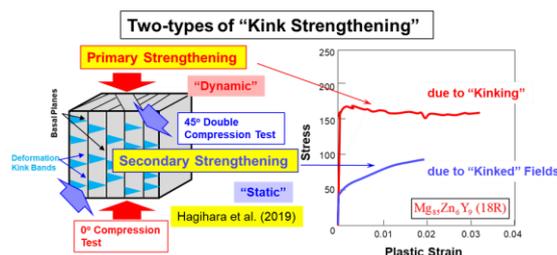


Fig.1 Two types of kink strengthening mechanisms.

対象とする”キंक強化”については、とくに前者の”Primary Strengthening”を指すものとする。

3. 解析方法および結果

3.1 構成モデル

Fig.2に本研究で用いる構成式を示す[9,10]. 本研究では基本的に不適合度テンソルを、Rank-1条件[13]を満たす方向に分解(Fig.3右下図)した上で導入するキंकモデルを用いるが、同モデルを独立した付加的自由度として用いるExplicitモデル[9]と、すべり変形に対する構成式に用いるImplicitモデル[10]の2種がある。ここでは前半にExplicitモデルの適用例、後半にImplicitモデルを用いた例について論じる。上記以外の材料・解析モデル/条件は共通しており、その概要をFig.3に示す。

3.2 Explicitモデルによる解析結果

形成されるキंक形態については、Explicitモデル[9]によって精密に再現される。Fig.4にその一例を示す。こうして得られたキंक組織に対し、数値上で”切り取り”作業の後、それらに対する45°二重圧縮解析[11]を行うことができ、Fig.5および6に示すように”Secondary Strengthening”

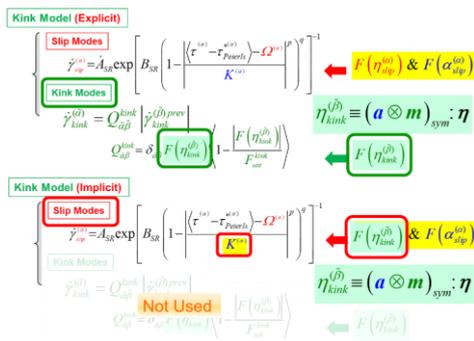


Fig.2 Explicit/Implicit kink models based on FTMP.

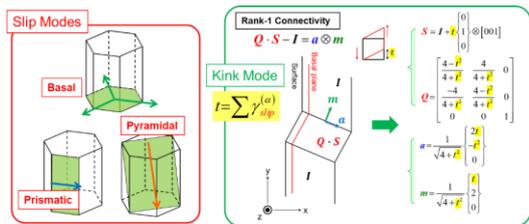


Fig.3 Slip systems for Mg and rank-1 connectivity condition.

を再現することができる[9]. Fig.6中にはFig.4の結果より切り出した試験片に対する結果(AおよびBと表記)も併記しており、ここでの移設情報は角度(結晶方位分布)のみである. さらに平均キंक角およびキंक領域の面積分率に対する定量評価をFig.6(a)および(b)にそれぞれ示す. 同図では、角度情報に加えて塑性デイスーション β^p 情報、転位密度項の影響(GN転位と等価：灰色線)、および両者を加味した結果(破線)も併せて示している. 同結果は、Somekawa ら[14]によるピッカース硬さ試験による結果(同図(c))と定性的に一致しており、この仮想試験の妥当性を示している.

3.3 キंक強化の内訳候補について

上記の結果より、少なくとも”Secondary Strengthening”に関しては、Fig.6(d)に示すような強度発現の内訳を想定することができる. やはり5割近くを占めるのはSchmid因子による強化分であり、それを底上げる形でGN転位的強化が加わる. 筆者の視点で重要だと思われるのは、”不適合度強化”と称した部分である. そもそも0°圧縮時のキंक形成において発展する β^p 場は不適合度由来の自由度の付与に伴う不均質場そのものであり、Fig.6(a)および(b)よりわかるようにその寄与はむしろGNによるそれよりも大きい. これらは併せて”残留変形に伴う”強度増加分と捉えることができよう. 他はいわゆる”回位”の存在に関連する寄与分であり、後半で言及する.

3.4 Explicitモデルによる解析結果の概要

Explicitモデルを用いた解析では、解析対象であるMg単結晶モデルにおいて予め結晶方位のゆらぎを与える必要があるものの、基本的にはImplicitモデルの場合と同様にくさび形キंक形成過程を再現することができ、かつそれらが一様ではなくむしろon-demand的に生じることと関連して、Implicitモデルでは表現が難しかった”Primary

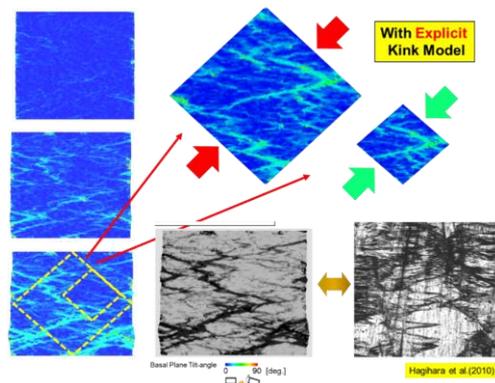


Fig.4 Simulated kink morphology.

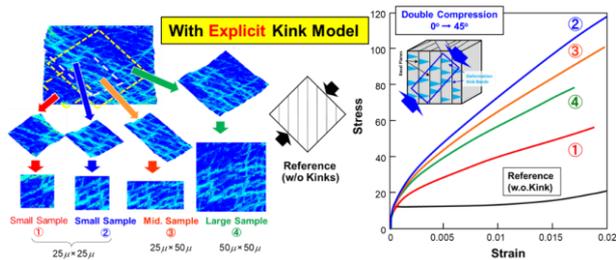


Fig.5 Virtual double compression test, together with resultant “secondary strengthening” via stress-strain curves.

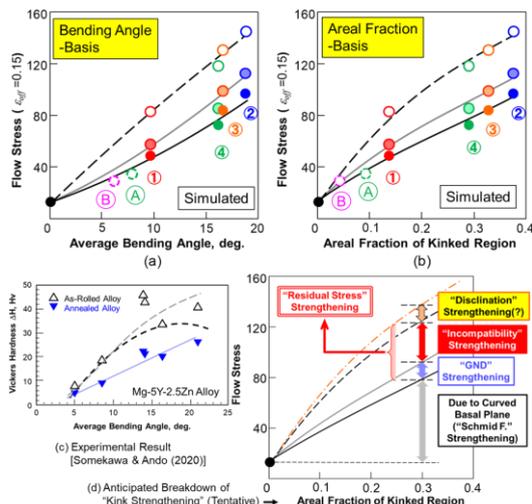


Fig.6 Variation of flow stress with (a)average bending angle and (b)areal fraction of kinked region, together with (c)experimental observation [14] and (d)anticipated breakdown of “secondary strengthening.”

Strengthening”についても再現が可能となる[10]. ここでは、とくに、LPSO単相DS(一方向凝固)材におけるAE観測結果[13]で報告されている解放エネルギーのスケール・フリー性を付加的に考慮した場合の解析およびその結果について検討を加える.

4. エネルギー解放特性におけるスケール・フリー(SF)性について

これまで様々な実験観察結果からキंक形成のスケール・フリー(SF)性[13,15]やフラクタル性が確認されており、一方で詳細観察からキंक界面の複雑な構造が明らかにされつつある. とりわけ、単純な刃状転位列から逸脱した

箇所におけるc転位の存在や最小単位での回位の形成などが素過程レベルでの理解に不可欠であり、希薄合金系において観察されるPLC効果との関係も指摘されている。後者については、変形誘起後に観察されるキंक界面の蛇行が降伏応力上昇現象に直接対応しており、そのための局所的アコモデーション機構こそが強度発現に対する重要な素過程である可能性を示唆している。一方で、キंक構造自体は数〜数十 μm オーダーで観察されており、上述のスケール・フリー性の存在とも絡めてマルチスケル的な理解が必要とされる。

LPSO単相DS材では、c軸に対し垂直方向圧縮した場合、AE信号に広いスケール範囲/エネルギー・レベル(〜6桁)に渡るスケール・フリー性が存在することが報告[13]されている。しかも、同特性は、キंक帯がマクロに観察される降伏前においても、降伏後とほぼ同様な様相を示す。加えて、AE信号のリターン・マップを見ると、第四象限に結果が集中しており、キंक形成規模に時系列的相関が存在することを強く示唆している。同傾向は最近の白岩ら[15]による点過程解析に基づく結果とも一致しており、余震-本震型の挙動を示すと評価されている。ただし、押し出しLPSO- α -Mg二相材にはこうした傾向は認められないことも報告されており、この場合の点過程解析では群発型地震と類似した挙動を示す。

本研究では、こうしたAE特性を考慮した場合にどのような影響があるかについて調べる。Fig.7に手順の概要を示す。そのために、FTMPにおける中心概念であるFlow-Evolutionary(F-E)則[1,3] $\eta_{KK} = \kappa \delta U^e$ (静的条件下)および相互作用場の理論[1,4,5]を用いる。メインで頭に扱うスケールをScale Cとすると、任意のスケールScale sからの相互作用を考慮した場合の表式は次のようになる。

$$\tilde{\eta}_c = \eta_c + \int_C^A e_{cs}^{-1} \eta_{cs} dl_s \quad (1)$$

ここで、 η_{cs} はScale sからScale Cへの相互作用不適合度場、 $e_{cs} \equiv l_c/l_s$ は両スケール間のスケール比をそれぞれ表す。一方、エネルギーのスケール・フリー性が存在する場合、任意スケールのエネルギー頻度 $F_{\delta U^e}^s$ は、最小スケールをScale Aとすると $F_{\delta U^e}^s = F_{\delta U^e}^A (\delta U_s^e / \delta U_A^e)^m$ のように表すことができる。同関係式とF-E則を組み合わせることで具体的な表式に表現される。

$$\eta_{cs} = \kappa_{cs} \left(F_{\delta U^e}^s / F_{\delta U^e}^C \right)^{1/m} \delta U_s^e \mathbf{I} \quad (2)$$

ここで、 κ_{cs} はScale sからScale Cへのエネルギー伝達を表す双対係数である。上式を式(1)に用いることで最終的に、

$$\tilde{\eta}_c = \eta_c + \left\langle e_{cs}^{-1} \kappa_{cs} \right\rangle \left(F_{\delta U^e}^A / F_{\delta U^e}^C \right)^{1/m} \delta U_A^e \mathbf{I} \quad (3)$$

が得られる。ここで、 $\left\langle e_{cs}^{-1} \kappa_{cs} \right\rangle \equiv \int_C^A e_{cs}^{-1} \kappa_{cs} dl_s$ とおいた。相澤らによると、個々のキंकを円錐形状で近似した場合、サイズは半径/高さでそれぞれ100倍、エネルギーで約6桁のオーダーに跨っていることから、式(3)中において、 $e_{cs}^{-1} \equiv l_A/l_c: 10^{-2} \sim 10^{-4}$ および $F_{\delta U^e}^A / F_{\delta U^e}^C \sim 10^6$ となる。

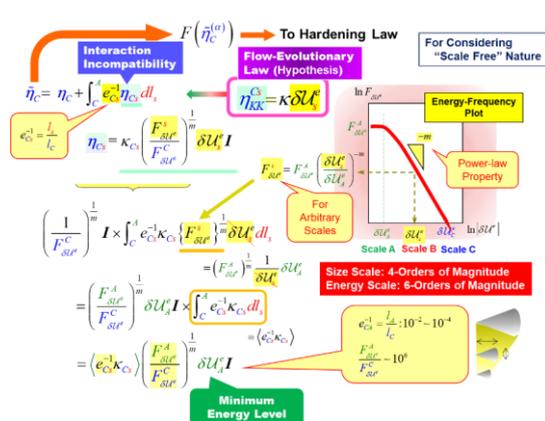


Fig.7 Overview of the process for artificially taking into account the experimentally-observed “scale-free” nature of the energy releasing characteristics into FTMP-based simulation, making an effective use of interaction field formalism for incompatibility tensor field.

5. 解析結果および考察

Fig.8にSF性を考慮した場合の解析結果を示す。応力-ひずみ線図における赤破線はSF性を考慮する前の結果を示している。なお、ここでは底面すべり系に平行にキंक/すべり相(それぞれ軟質/硬質相を表す)を層状に並べかつ方位ゆらぎを加えた単結晶モデルを考え、底面に沿った圧縮(c軸方向へは引張り)変形を与える場合を考えている。変形各図を見ると、モデル上部から下方へキंक形成部が伝播する形で変形が進行している。同過程において応力-ひずみ線図における応力”高止まり”状態が維持されている。そしてリターン・マップはSF性考慮前(ここでは図示は省略)と比べて大幅に改善されており、第四象限に存在する割合が増加することで、実験結果[13]により近い結果となっている。

Fig.9にはFig.8の変形図中に□で示した箇所の拡大図を示す。ここでは符号付角度分布(左図)と弾性ひずみエネルギー分布(右図)を比較している。試料右表面において生成したキंक帯が左方向へと成長・伝播していることが確認できるが、軟質/硬質相境界部を貫く際に弾性ひずみエネルギーの値が局所的に増大している様子が確認できる。この過程は、Fig.10に模式的に示したような、キंक帯がせん断される過程と等価なものと考えることができる。同過程においては、変形の適合(アコモデーション)のために、局所的に $\langle c+a \rangle$ 転位が導入されなければならない。上記弾性ひずみエネルギーの局所的増大はこの現象と対応付けて解釈することが可能である。

上記結果において着目すべきはスケール・フリー性の存在に加え、4)においてScale Aとして表現した”最小スケール”の存在である。この”最小スケール”における現象としては上記のキंक帯-異相あるいは被せん断界面の相互作用が主要な過程として含まれると考えられる。この点については、非底面すべり系の寄与との関係で次節において議論する。

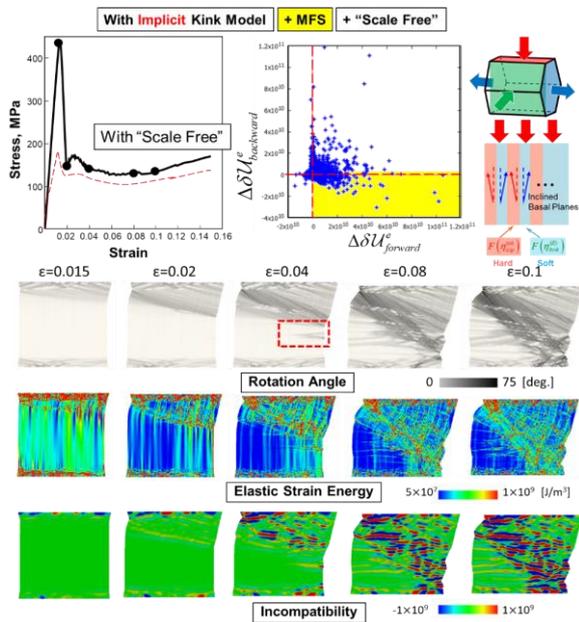


Fig.8 Summary of simulation results with enhanced contribution of the incompatibility DOFs, plus artificially-introduced “scale-free” nature, displaying (a) stress-strain curve, (b) energy return map (at strain of 0.015), snapshots of contours for (c) rotation angle (absolute value), (d) elastic strain energy, and (e) incompatibility (trace), respectively.

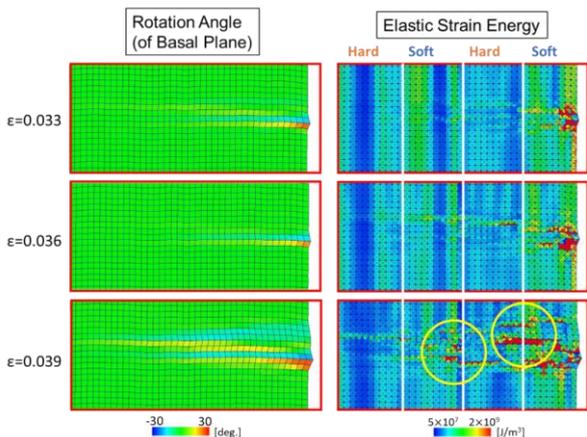


Fig.9 Magnified contours of signed rotation angle and strain energy for the simulation results in Fig.11, scrutinizing secondary emergence of ridge kink from the right surface of the sample, eventually growing into kink bands that continue to propagate to the left, penetrating through the hard/soft boundaries.

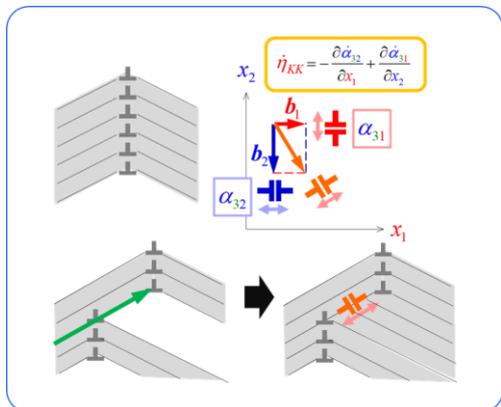


Fig.10 FTMP-based perspective for $\langle c+a \rangle$ dislocation activity.

6. 非底面すべりの役割に関する検討

つい最近までLPSO-Mg材においてキंक組織がLPSO相中に形成される際には少なくとも常温付近において非底面すべりは強く抑制され、底面すべりのみが活動しているものと考えられていた。しかしその後、非底面すべり系も活動していることが判明し、とりわけ a 転位を有する柱面すべりは室温においても明確かつ頻繁に観察されている。錐面すべりについては、直接の観察は報告されていないものの、ND(中性子回折)による間接的な観測例や、必ずしも錐面すべり系の活動ではないがナノオーダーにおける c 転位の存在が報告されている。FTMPに基づくシミュレーション[7-10]においては基本的にすべてのすべり系を考慮しており、これらの事実はその仮定を正当化するものである。

Fig.11に、Implicitモデルを用いた解析(SF性は考慮せず)モデルにおいて、非底面すべり系のCRSS (τ_0 により制御)を系統的に変化させた場合の結果を示す。CRSSの増加に伴い、応力-ひずみ線図における初期の応力レベルが大きく上昇することがわかる。これは、キंक変形開始時にとりわけ非底面すべり系の活動が大きく寄与していることを示している。ある程度キंक場が形成され、塑性変形の継続が可能になると応力レベルは落ち着き、CRSSの差異にあまり依存しなくなる。一方、変形モードはCRSSにより大きく異なり、非底面すべりの活動が抑制されるほど変形の局所化が顕著になる傾向が見られる。

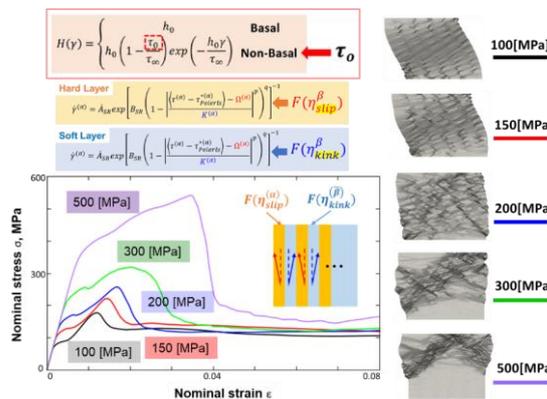


Fig.11 Effect of contribution of non-basal slip activity on formed kink morphology and stress response.

ところで、FTMP場の理論において、前節の最後で言及した局所アコモデーション過程としての $\langle c+a \rangle$ 転位の導入については、4D時空に拡張した不適合度テンソル $\eta_{ij} = \epsilon_{iklp} \epsilon_{jmnp} \partial_k \partial_m \epsilon_{ln}^p$ に対する保存則(発散が0となる条件)から導かれる不適合度速度 $\dot{\eta}_{KK}$ の関係式、

$$\dot{\eta}_{KK} = \text{div}(\alpha_{BC})_{skew} \quad (1)$$

を採用することで考慮できる可能性がある。上式の2Dでの表示は次のようになり、

$$\dot{\eta}_{KK} = -\frac{\partial \dot{\alpha}_{32}}{\partial x_1} + \frac{\partial \dot{\alpha}_{31}}{\partial x_2} \quad (2)$$

いわゆる二種のedge-on刃状転位の対生成・対消滅を表すと解釈することができる。その模式図はFig.10に示されて

いるが、二種の刃状転位のBurgersベクトルの合成によって、まさに $\langle c+a \rangle$ 転位を表すことが容易に理解できる。

Fig.12には、底面すべり系を基本に、柱面すべり系(a方向をBurgersベクトルとする)と組み合わせた場合(最左図)、および錐面すべり系($\langle c+a \rangle$ 方向をBurgersベクトルとする)と組み合わせた場合(最右図)の解析結果をそれぞれ示す。ここでは角度分布および弾性ひずみエネルギー分布を示している。

底面すべりに加えて柱面すべりのみを考慮した場合(最左図)、すなわち錐面すべり系を考えない場合、キンク変形は抑制される傾向があり、応力レベルは上昇するものの、図中中段最左図のように、形成されるキンク組織と関連して複数箇所において弾性ひずみエネルギーの局所的な解放が生じるようになる。これは、ひび割れのような現象が生じていると解釈することができ、最終的に試料は破断に至る。一方、底面すべりに加えて錐面すべりのみを考慮すると、キンク形成が容易になることから最右図に示すように不均一な変形が生じやすくなり、応力レベルは大きく低下する。そこで前述の「底面すべり+柱面すべり」にわずかに錐面すべりの活動を許すと、同中央図に示すようにエネルギー解放は大きく抑制されることがわかる。ただし、この場合においてもまだ局所的なひずみエネルギー解放が生じていること、それに伴い応力レベルが急速に低下することから、錐面すべりの活動に関しては、上述のナノオーダーにおける $\langle c+a \rangle$ 転位の活動と絡めたより精密な取り扱いが必要であることを強く示唆している。これは今後の課題の一つである。

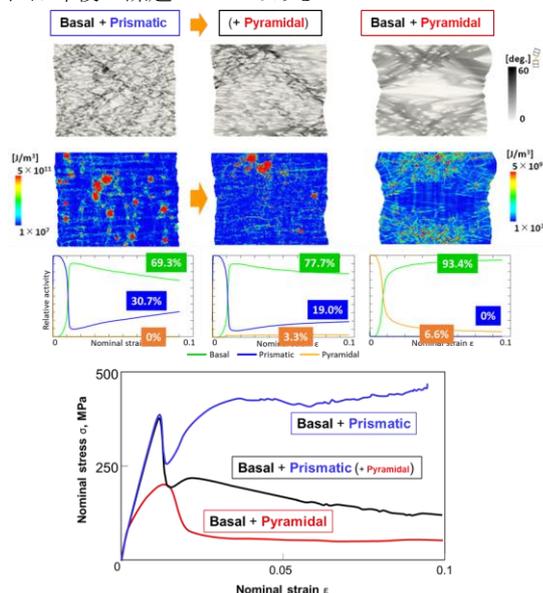


Fig.12 Effect of non-basal slip activities on kink formation, elastic strain energy contour and stress response.

7. その他の検討

7.1 紙束を用いた圧縮試験におけるキンク状模様の形成

Drozdenko や Karel ら[16]は、モデル材として紙束を用いた圧縮試験と DIC 法を組合せることで、キンク状態の再現とそれに対応する数値シミュレーションを行って

いる。本研究における上記キンクモデルを用い、層状構造の各種解析条件を変化させて得られた解析結果を Fig.13 にまとめて示す。ここでは紙ではなく従来の Mg の材料定数を用いているが、ある一定の条件下では実験結果[16]と同様のキンク状態が発現する。方位ゆらぎを与える層の数を増加させると、むしろ彼ら[16]が併せて報告している解析結果と類似したキンク状模様が得られることがわかる。さらに、与える弾性定数を Mg のそれを基に等方とした場合、および Drozdenko-Karel ら[16]が使用しているものとした場合について調べた結果を Fig.14 に示す。同結果より、キンク状模様に実験結果に近いモードから彼ら[15]の解析結果に近いモードへの遷移が認められ、形態発現に及ぼす材料定数の影響が一部ではあるが明らかとなった。

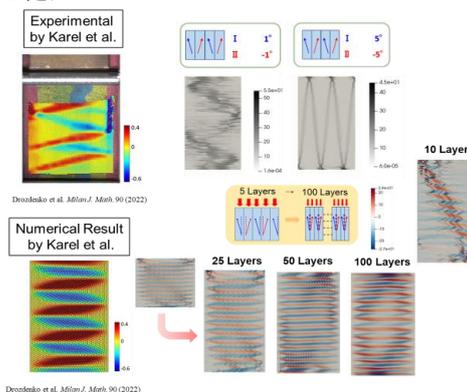


Fig.13 Enlarged contour diagrams for signed rotation angle, compared with experimental and analytical result by Karel et al. (2020).

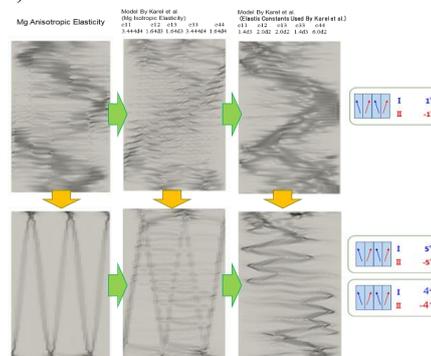


Fig.14 Enlarged contour diagrams for signed rotation angle for different elastic constants.

7.2 LPSO-Mg DS 単相材の引張試験

Takagi ら[17]による、 c 軸から 14 度傾けた方向への引張試験では、試験片中央部を斜めに横切るキンク帯形成に起因する不規則な変形モードとともに、変形進行に伴うほぼ一定の応力レベルが観察されている(Fig.15 黒線および Fig.16 下図)。本解析結果では、Fig.15 および Fig.16 において比較して示すように、両者を精度よく再現していることがわかる。ただし、転位密度項の寄与を変化させることで応力レベル、変形モードともに変化しており、応力レベルは同寄与を大きくした方が再現度が改善するのに対し、変形モードについては Fig.17 に示すようにむしろ多少悪化するという結果となっている。なお、不適合度項を用いた場合の方が変形モードは実験により近い結果となるものの、同項を用いない場合(転位密度項のみを考

慮した場合)においてもさほど変わらない程度の結果が得られている(Fig.17 最左図). これは, 本実験におけるキンク帯はいわゆる Orth 型と呼ばれるものに近く, 比較的単純な形態であったためであると考えられる.

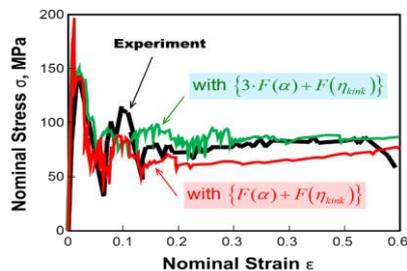


Fig.15 Comparison of simulated stress-strain curves with experimental result for kink-incompatibility model with/without enhanced dislocation density term.

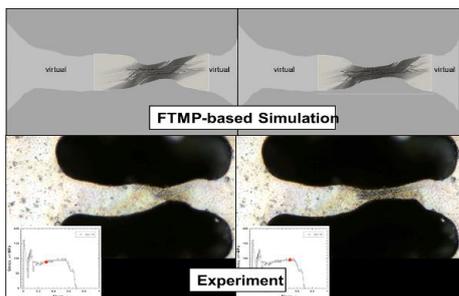


Fig.16 Comparisons of simulated snapshots with experiment, with virtually attached grip parts.

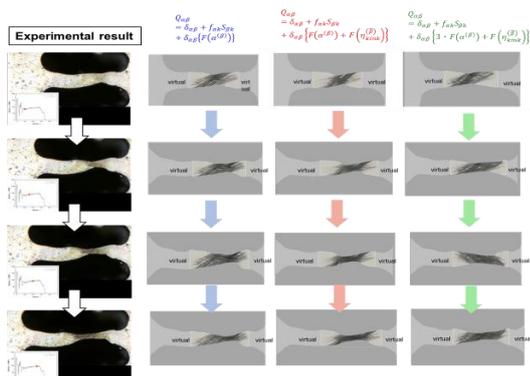


Fig.17 Extended comparisons of simulated snapshots (with virtually attached grip parts) with experimental counterparts for three analytical conditions.

8. 結語

本報ではFTMP場の理論に基づき, キンク形成時/形成後の強度について種々の検討を行った. とくに解放エネルギーにスケール・フリー性が存在する場合や最小スケールにおける現象についても多角的観点から考察を加えた.

本研究の一部は, JSPS 科研費, 新学術領域「ミルフィーユ構造の材料科学」(研究代表: 阿部英司), JP18H05483 の助成を受けたものである. 記して謝意を表する.

参考文献

- [1] Hasebe, T.: Field Theory of Multiscale Plasticity, Cambridge Univ. Press, 2023.
- [2] Hasebe, T.: Multiscale crystal plasticity modeling based on field theory, *CMES*, Vol.11, pp.145-155, 2006.
- [3] Hasebe, T. et al.: Modeling and simulations of experimentally observed dislocation substructures based on Field Theory of

Multiscale Plasticity (FTMP) combined with TEM and EBSD-Wilkinson method for FCC and BCC poly/single crystals, *Materials Transactions*, Vol. 55, pp.779-787, 2014.

- [4] Hasebe, T.: Interaction fields based on incompatibility tensor in Field Theory of Plasticity, Part I: Theory, *IMMIJ*, (*Interaction and Multiscale Mechanics: An Int. J.*), Vol.2, pp.1-14., 2009.
- [5] Hasebe, T. Interaction fields based on incompatibility tensor in Field Theory of Plasticity, Part II: Application,” *IMMIJ*, (*Interaction and Multiscale Mechanics: An Int. J.*), Vol.2, pp.15-30., 2009.
- [6] Yamasaki, K. and Hasebe, T.: Duality of the incompatibility tensor,” *Mater. Trans.*, Vol.61, pp.875-877, 2020.
- [7] Nawa, Y. and Hasebe, T.: FTMP-based kink deformation and strengthening mechanism for mille-feuille structures,” *Mater. Sci. Forum*, Vol.1016, pp.1019-1023, 2021.
- [8] Nawa, Y. and Hasebe, T.: FTMP-based kink deformation and strengthening mechanism for mille-feuille structures,” *Int. J. Multiphysics*, Vol.15, pp.325-348, 2021.
- [9] Mizutani, K., Nawa, Y. and Hasebe, T.: Kink modeling and simulations based on Field Theory of Multiscale Plasticity (FTMP), Part I: Explicit kink model and double compression Test,” *Mater. Trans.*, Vol.64, pp.785-794, 2023.
- [10] Hasebe, T. and Mizutani, K.: Kink modeling and simulations based on Field Theory of Multiscale Plasticity (FTMP), Part II: Implicit kink model and scale-free treatment,” *Mater. Trans.*, Vol.64, pp.795-804, 2023.
- [11] Hagihara, K., Yamasaki, M., Kawamura, Y. and Nakano, T., (2019), “Strengthening of Mg-based Long-Period Stacking Ordered (LPSO) Phase with Deformation Kink Bands,” *Mater. Sci. & Eng.: A*, **763**-19, 138-163.
- [12] Inamura, T., (2019), “Geometry of kink microstructure analysed by rank-1 connection,” *Acta Materialia*, **173**, 270-280.
- [13] 相澤ほか: その場中性子回折によるミルフィーユ構造材料—キンクメカニズム解明に向けて, 新領域MFS 報告会, 2019.
- [14] Somekawa, H. and Ando, D.: Microstructure and mechanical properties of caliber rolled Mg–Y–Zn alloys, *Mater. Sci. Eng. A*, Vol.780, 139144. 2020,
- [15] Shiraiwa, T., Tamura, K. and Enoki, M.: Analysis of kinking and twinning behavior in extruded Mg–Y–Zn alloys by acoustic emission method with supervised machine learning technique, *Mater. Sci. & Eng.: A*, Vol.768, 138473.(1-11), 2019.
- [16] Drozdenko et al.: Elastoplastic deformations of layered Structures, *Milan J. Math.*, Vol.90, pp.691-706, 2020.
- [17] Takagi et al.: Extended ductility due to kink band formation and growth under tensile loading in single crystals of Mg–Zn–Y alloy with 18R-LPSO structure, *J. Alloys & Compounds*, Vol.806, 1384-1393, 2019.

FTMP場の理論に基づく高Crフェライト鋼の クリープモデリング

FTMP-based Modeling of High Cr Steel in Creep

長谷部忠司¹⁾, 工藤晃一郎²⁾, 城石和真³⁾

Tadashi Hasebe, Xinping You and Akihiro Takebe

1) 博(工) 神戸大学 工学部 准教授 (〒657-8501 神戸市灘区六甲台町1-1, E-mail: hasebe@mech.kobe-u.ac.jp)

2) 神戸大学大学院 工学研究科 (〒657-8501 神戸市灘区六甲台1-1, E-mail: you.xinping@mail.mm4.scitec.kobe-u.ac.jp)

3) JR西日本

Against highly complex hierarchical material systems as in high Cr heat-resistant ferritic steels exhibiting inhomogeneous recovery-triggered accelerated creep rupture, we tackled their practically-feasible multiscale modeling and simulations based on FTMP (Field Theory of Multiscale Plasticity), implemented in crystal plasticity framework. The objectives include: (a) Reproduction of the experimentally-observed accelerated degradation of the creep strength due to inhomogeneous recovery of the microstructures under relatively low stress conditions, (b) Identification of the minimal conditions for (a) to occur, focusing extensively on the interactions among the hierarchical scales, and (c) Construction of an overall evaluation/prediction system utilizing the FTMP-based duality diagram representations. on them.

Key Words : High Cr steels, Lath martensite, Crystal plasticity, FEM, Field theory of plasticity

1. はじめに

高Crフェライト系耐熱鋼は、ラス・マルテンサイト組織を基本とし、ブロック、パケットおよび旧 γ 粒組織から成る複雑な階層構造を有しており、固溶、析出、転位および粒界というすべての強化機構を駆使することで高温クリープ域に至る高強度を実現している。しかしながら低応力長時間域での急激なクリープ強度の低下が報告されており、組織の不均質回復がその主因とされている。本研究では、こうした階層組織のモデル化と不均質回復に伴うクリープ強度の低下現象をFTMP(Field Theory of Multiscale Plasticity)[1-7]に基づいて簡潔かつ適切に表現することを目的としたマルチスケールモデリング手法についての検討を加える。

2 階層性ラス・マルテンサイトモデルの作成

2.1 概要

Fig.1に本研究におけるモデル化の指針を示す。高密度転位から成るラス組織をScale A, ラス・ブロック組織をScale B, その集合体としてのラス・パケット組織~旧オーステナイト粒組織をScale Cと称することにし、さらに強度発現を基底強度からの積み上げとして適切に表現することが重要な点である。同左下図(NIMSによるピッカース硬さの圧痕サイズ依存性)に示すように、この組織の強度発現にはサイズ依存性が存在することが明らかにされている。このことは、同組織のモデル化にあたって注意する点で、間違ってもミクロレベル(例えばScale A)で直接マクロ強度を直接表現してはいけないということ

えて

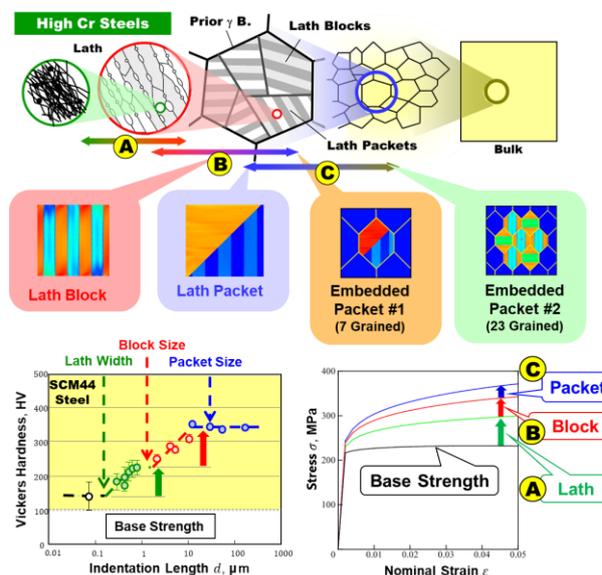


Fig.1 Modeling outline of hierarchical complex system for high Cr steels with lath martensite structures.

くれる。言い換えると、Fig.1右下図に示すように、強度の基底レベルからの積み上げが必須で、その落差の存在があつてはじめて強度劣化の自然な数値表現に繋がる。

2.2 ラス・ブロックモデルの作成

本研究では、Scale Bに位置するラス・ブロック組織を直接モデル化の対象とし、その組み合わせでパケット組

織以降を組み上げる。最微視構造(Scale A)としの高密度転位組織については後述のように相互作用場に基づく仮想モデル化を行い、局所回復挙動の表現を試みる。Fig.2aにラス・ブロックモデルの作成手順を示す。ここでは、まずFCC(γ) \rightarrow BCT(α')変態時のBain格子対応(最上図)に基づく変態ひずみを初期分布として与えた試料に対して、等二軸圧縮を与える(中段図)ことで、定エントロピー下での温度変化を模擬し、不適合度の寄与による変形を誘起させる。するとブロック境界にはらせん成分を主とする転位密度テンソル場が自発的に発達(最下段左図)し、実験で観察されているらせん転位ネットワーク(同右図)が再現される。それに対応してFig.2bに示すようなねじれ境界を伴うラス・ブロック組織のモデルが自然に構築される。

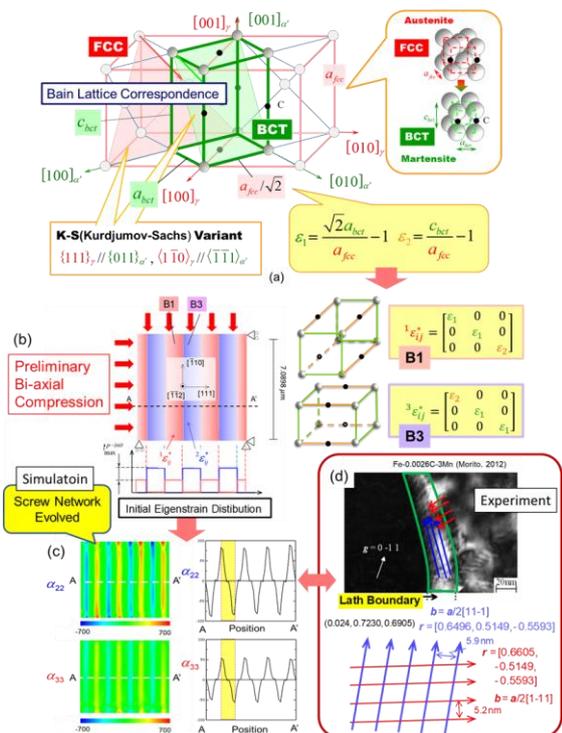


Fig.2a Modeling procedure of a single block model, as the minimum constituent of the hierarchy. (a)Bain lattice correspondence between FCC and BCT, (b)initial distortion distribution for preliminary analysis, (c)developed screw dislocation distribution, and (d) experimentally-observed lath boundary.

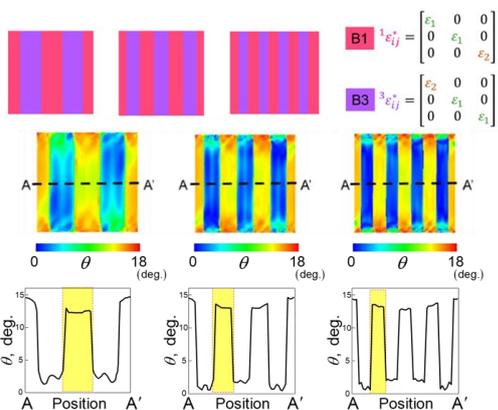


Fig.2b Developed misorientations for single block models with various block widths.

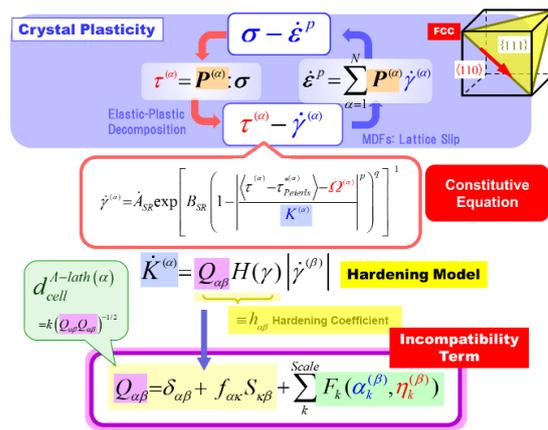


Fig.3 Crystal plasticity-based constitutive framework, together with hardening model incorporating FTMP-based η - μ DOFs via dislocation density and incompatibility terms.

なお、同図では、一例としてB1とB3の組合せの結果を示している。ここで、不適合度の寄与とは、Fig.3に示すように構成式中の硬化則(硬化比 $Q_{\alpha\beta}$)に不適合度項 $F(\eta)$ として転位密度項 $F(\alpha)$ と共に加えることで考慮することを意味する。

こうして得られたラス・ブロックモデル(あるいはそこから切り取ったもの)を任意に組み合わせる(“cut-&-paste” operation)ことで、ラス・パケットモデルそしてそれらを内包する旧オーステナイト粒としての埋め込みパケットモデル、さらにそれらの集合体である階層組織のモデル化を自由に行うことが可能となる。このプロセスはDi-CAP(Deformation-induced Context-dependent Autonomic Pluripotency)コンセプトに基づく位置付けられ、Fig.1に関連して上述した、階層的な強度発現機構の再現が自然に実現できる。階層ラス組織モデルの完成には、これらに加えてさらに、以下で詳述するスケール間相互作用の導入が必須となる。

2.3 相互作用場に基づくラス組織(Scale A)のモデル化

本研究では、ラス・ブロックモデル(Scale B)を基準に下位スケールのラス(高密度転位組織: Scale A)との相互作用

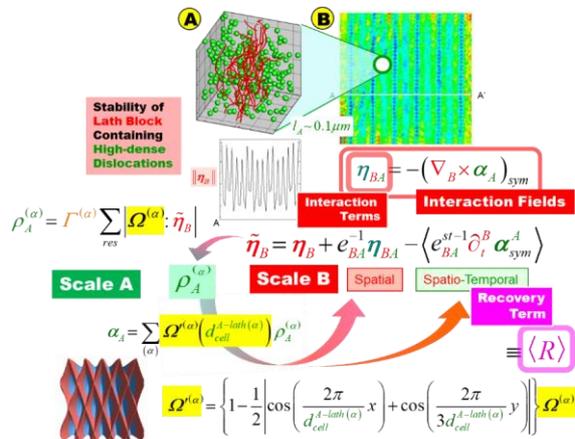


Fig.4 Overview of interaction field-based model for Scales A and B.

に基づく強度底上げと回復を表現する。その概要をFig.4に示す。ここでのモデル化の特徴は、ラス内の高転位密度組織に対するScale Aを”仮想的に”扱う点である。その代表量は d_{cell}^{A-lath} で表され、同量はFig.3中最下部に示すように、応力レベルを規定する硬化比 $Q_{\alpha\beta}$ のノルムの逆数で与えられるとする。これは既報[6,7]における有効セルサイズモデルを援用したものであり、最小スケールとしてのラス内高密度転位組織を表すものとする。

Scale Bを基準とした不適合度の相互作用場[6]は

$$\tilde{\eta}_B = \eta_B + e_{BA}^{-1} \eta_{BA} - \left\langle e_{BA}^{\sigma-1} \partial_i^B \alpha_{sym}^A \right\rangle \quad (1)$$

と表される。ここで、 η_{BA} はScale A→Scale Bに対する相互作用場の空間成分で、

$$\eta_{BA} = -(\nabla_B \times \alpha_A)_{sym} \quad (1)'$$

で評価される。一方、 $\partial_i^B \alpha_{sym}^A$ は同相互作用場の時空混合成分を表し、以降

$$\langle R \rangle \equiv \left\langle e_{BA}^{\sigma-1} \partial_i^B \alpha_{sym}^A \right\rangle \quad (1)''$$

とにおいて、ここでは組織回復を表すと解釈する。同項は、刃状転位密度(Scale A)のScale Bにおける時間微分を表し、ここでの文脈では上昇運動に伴う回復過程が想定される。逆の過程、すなわちScale B→Scale Aに対しては

$$\rho_A^{(\alpha)} = \Gamma^{(\alpha)} \sum_{res} \left| \Omega^{(\alpha)} : \tilde{\eta}_B \right| \quad (2)$$

により考慮し、同量からScale Aにおける転位密度テンソル α_A が次式により得られる。

$$\alpha_A = \sum_{(\alpha)} \Omega^{(\alpha)} \left(x, d_{cell}^{A-lath(\alpha)} \right) \rho_A^{(\alpha)}$$

$$\Omega^{(\alpha)} \left(x, d_{cell}^{A-lath(\alpha)} \right) = \left\{ 1 - \frac{1}{2} \cos \left(\frac{2\pi}{d_{cell}^{A-lath(\alpha)}} x_1 \right) + \cos \left(\frac{2\pi}{3d_{cell}^{A-lath(\alpha)}} x_2 \right) \right\} \Omega^{(\alpha)} \quad (2)'$$

この仮定は、Scale Bでの不適合度ノルム $\|\eta_B\|$ の分布が、Fig.4中央の挿入図に見られるようなブロック幅よりも微細かつpeakyなゆらぎを示すことに基づいている。式(2)中の $\Omega^{(\alpha)}$ は投影テンソルであり、上昇方向への分解 $m^{(\alpha)} \otimes m^{(\alpha)}$ を含む計5種の方向を同時に考慮した上で自然選択させている[5]。なお、特徴量である d_{cell}^{A-lath} は式(2)'のように使用し、微分計算を通じて η_{BA} などに反映される。

こうすることでFig.5に示すようなScale B/A間のフィードバック・ループが導入され、Scale Aにおける局所的な回復に伴う強度劣化情報が拡大されることになる。

なお、本稿における7粒埋め込みパッケージモデルに対する計算では、式(1)''の代わりに、

$$\langle R \rangle = \left\langle -a \mu b \dot{\rho}_A^{(\alpha)} / \sqrt{\rho_A^{(\alpha)}} \right\rangle \quad (4)$$

を直接硬化則に加えることで同効果を表現している。

3. 解析結果と考察

3.1 階層性ラス・マルテンサイトモデルにおけるクリープ変形・破壊挙動

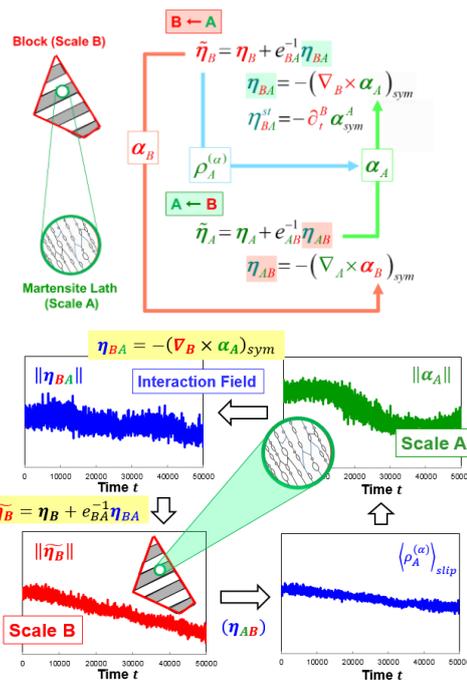


Fig.5 Modeling scheme of interacting fields, i.e., Scales A and B.

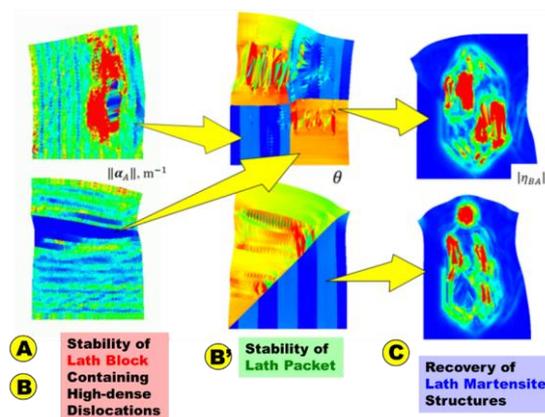


Fig.6 Hierarchical presentations of simulated fractured contours for lath block, packet and embedded (7-grained) packet models, demonstrating typical three-step modeling and the corresponding simulation results that reproduce inhomogeneous recovery-triggered localized creep recovery and subsequent ruptures.

上述の方法で作成したモデルを改めて単一ブロック(A)とし、これを組み合わせた単一パッケージ(B)、さらに同モデルを単結晶内に埋め込んだ、埋め込みパッケージ(C)とモデル構成を進めた場合のクリープ破断解析例をFig.6に示す。上述のように、局所回復を含むScale Aとの相互相は(A)の段階で考慮されており、相互作用場を介した転位密度ゆらぎ(Scale A)の”負のフィードバック”機構が働くことにより、局所変形が急速に促進され、その結果、加速的にクリープ破壊が生じる。重要なのは、この”ゆらぎの増幅効果”であり、低応力条件下においてのみ活性化され、高応力条件下では抑制される。

Fig.7に、(C)のモデルに対する、クリープ速度線図を示

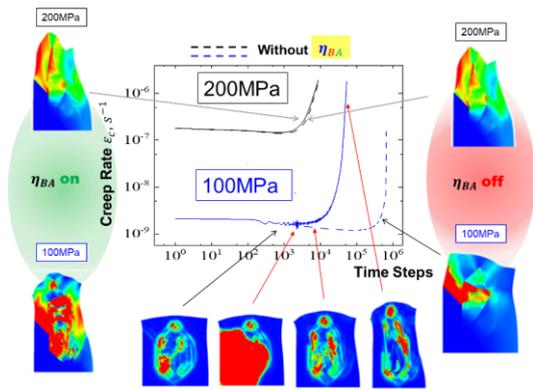


Fig.7 Simulated creep curves comparing with and without spatial interaction field.

す。ここでは相互作用場 η_{BA} の有無の影響とともに示している。高応力条件(200MPa)では、 η_{BA} の有無に関わらずほぼ同様の傾向を示すことがわかる。同図には、対応する転位密度分布図を併記している。特筆すべきは、低応力条件(100MPa)における、クリーブ破断に至る過程での複雑な挙動である。すなわち、破断の前駆的挙動としてクリーブ速度においてもゆらぎが生じ、ブロック境界近傍における転位密度の爆発的増加(“発火”現象)を経て、加速的な最終破断に至る。同現象の発現には、 η_{BA} の考慮に加えて、破壊の素過程として、最微視レベルでの回復モデル $\langle R \rangle$ の導入が必要であり、両者の寄与については次節で詳しく調べる。

本解析に基いて得られたクリーブ破断時間線図を Fig.8 上図に示す。解析の time step を実時間へ適当にスケール ($\Delta t \rightarrow 0.3[\text{hr}]$) することで、 10^4 時間を超える低応力領域での急速なクリーブ強度の低下を数値的に再現(赤線)することに成功している。なお、 η_{BA} あるいは $\langle R \rangle$ のいずれかの寄与を 0 にするとこのような強度低下は生じない(図中の黒線)。同下図は改良 9Cr-Mo 鋼に対する代表的な実験結果[7]を示している。

3.2 “負のフィードバック発現”に対する必要条件

上述の相互作用場 η_{BA} の導入および回復項 $\langle R \rangle$ それぞれ寄与について系統的に調べた結果を示す。各々の量に重みを 0~1 の範囲で変化させ、種々の組合せ条件下(例えば η_{BA} を 0.25, $\langle R \rangle$ を 1 とする)でクリーブ解析を実施し、破断に至る過程を調べた。得られた結果をまとめた結果を Fig.9 に示す。同図中、黄色背景は“発火”が生じた条件を示しており、濃淡はクリーブ破断加速の大小を表している。同結果より、相互作用場 η_{BA} の導入と回復項 $\langle R \rangle$ の導入の両者が不可欠であることがわかる。とくに、いずれかの寄与が 0 の場合は、ほぼ両者の寄与がない場合と変わらない結果となっている。

なお、上記の“発火”現象は、パケット界面等におけるクリーブき裂の発生に対応していると解釈できるが、その発現機構については更なる精査が必要であるが、そこに至る過程については次節に示す双対線図や Ph-S トラジ

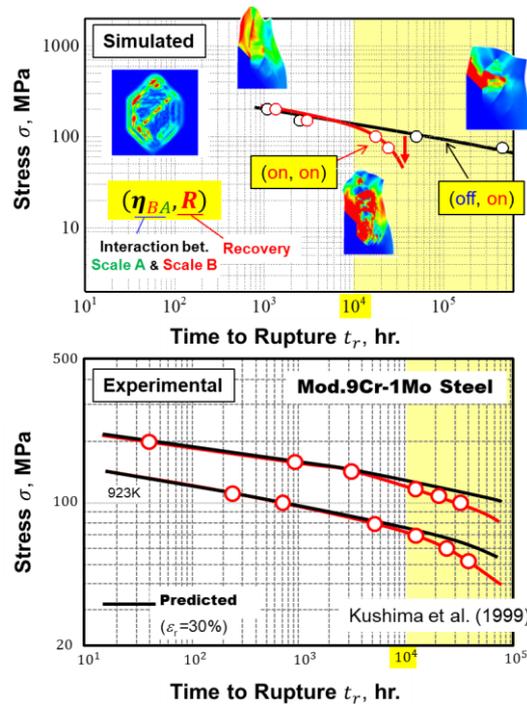


Fig.8 Simulated stress-rupture time diagrams with and without full interaction conditions, together with typical experimental results by Kushima et al.[7].

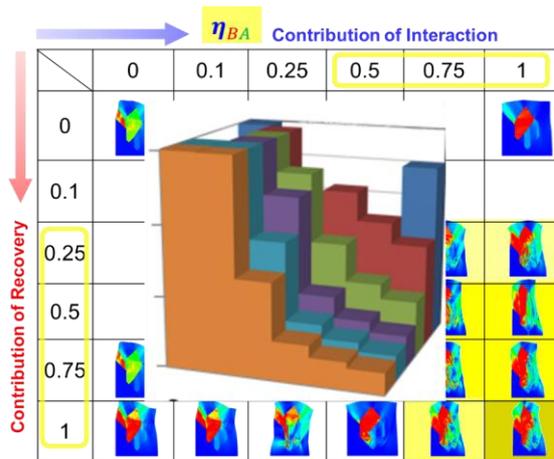


Fig.9 Combination map of $(\eta_{BA}, \langle R \rangle)$ contributions for inhomogeneous recovery in present simulation.

エクトリーを駆使することで詳細に調べることができる。

3.5 双対線図に基づくエネルギー流れ・不適合度発展過程の可視化について

FTMP のもう一つの特徴は、不適合度場に対する余剰弾す。ここでは相互作用場 η_{BA} の有無の影響とともに示している。高応力条件(200MPa)では、 η_{BA} の有無に関わらずほぼ同様の傾向を示すことがわかる。同図には、対応性ひずみエネルギーの解放もしくは再配分を図示することでその様子を“可視化”したり評価したりできることである。一例として、7 粒パケット埋め込みモデルの結果に対する各点毎の双対線図(Fig.3(c)に対応)を Fig.11 に示す。図中、④および⑥の領域に横軸(δU^e)の大きな変化(正方向に一

且増加した後の減少)が生じた直後にパケット領域②および⑦において η_{KK} の急激な増大が生じる. その際若干の δU^e の負方向への移動が見られ, 同量域においてもエネルギー解放が生じていることが確認できる. なお, より詳細には, 不均質回復が生じるのは同下部のパケット境界近傍の粒界三重点からであり, 同箇所 η_{BA} が発火するが如く急激な値の上昇が生じる(図中中央の分布図).

上記の様子を Ph-S トラジェクトリー(η_{KK} vs $\dot{\eta}_{KK}$)で見ると Fig.10 のようになり, 不均回復が生じる領域②および⑦では, Ph-S-T 上で右旋回の傾向が顕著に生じている様子が確認できる. すなわち不適合度速度が先行して増加し, それを追うように(一定の位相遅れで)不適合度が増加する, という連鎖的な挙動を示し, 同時に半径方向へ大きく分散することがわかる. これに対し, 周囲領域では同位相傾向を示し, 分散は比較的小さいかもしくはほとんど生じない. 上記の右旋回傾向は, 同域における不適合度速度の増加と不適合度発展の因果関係より理解できるが, その旋回中の半径増大の度合いと拡大率が不安定性を具体的に表すことになる.

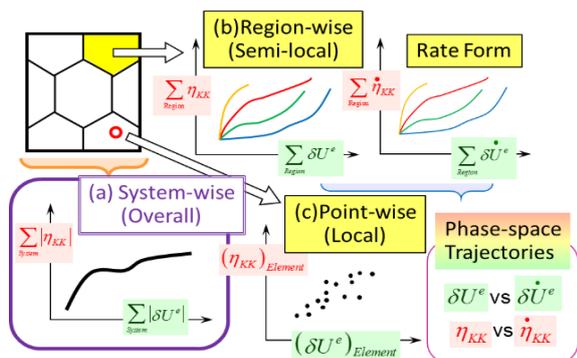


Fig.10 Schematic of FTMP-based new evaluation schemes, i.e., duality diagrams and phase-space (Ph-S) trajectories, for system-, region- and point-wise versions, respectively.

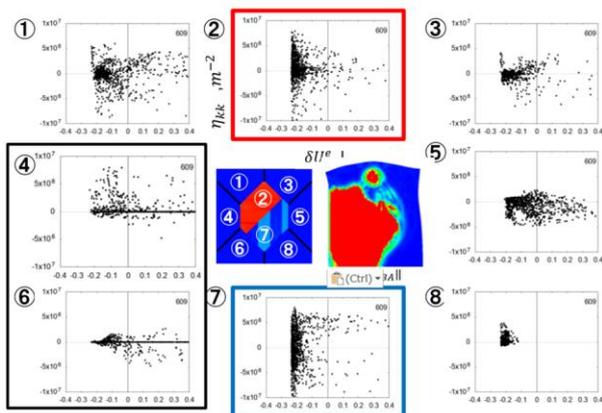


Fig.11 Point-wise duality diagrams for eight regions, where regions 2 and 7 eventually subject to explosion in the incompatibility, upon release of strain energy significantly stored in regions 4 and 6.

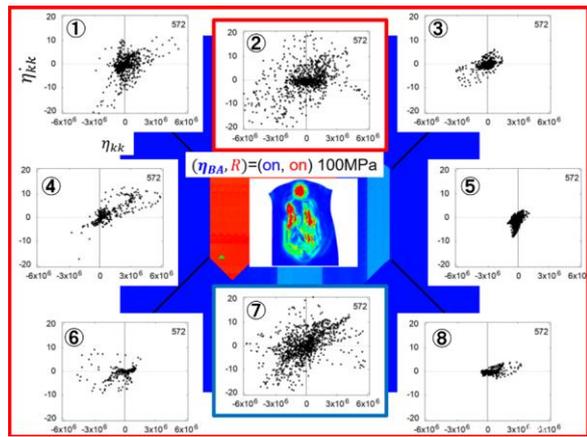


Fig.12 Corresponding point-wise Ph-S trajectories to Fig.9, exhibiting divergent with rightward rotation at regions 2 and 7, meaning instability onset therein.

3.6 埋め込みパケットモデル(23 粒モデル)に対する解析結果について

改めて23粒パケット埋め込みモデルを構築し, Scale C を含めた3スケール解析を実施するとともに, 同様に上記の双対線図法を適用した. 同モデルのDi-CAPに基づく構築プロセスをFig.13に示す. 3スケール間の相互作用は, Scale Bを中心にFig.14のように模式的に示すことができ

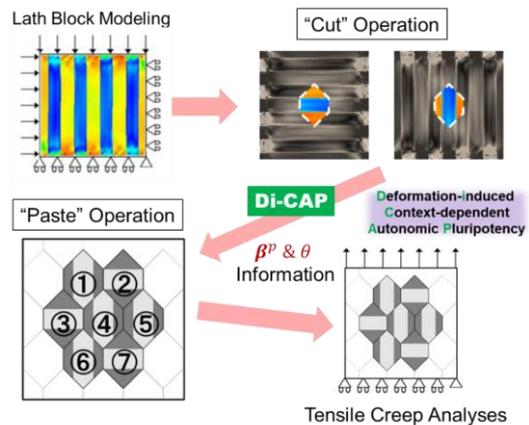


Fig.13 Di-CAP-based “cut-&-operation” for constructing 23-grained embedded lath packet model for creep simulations.

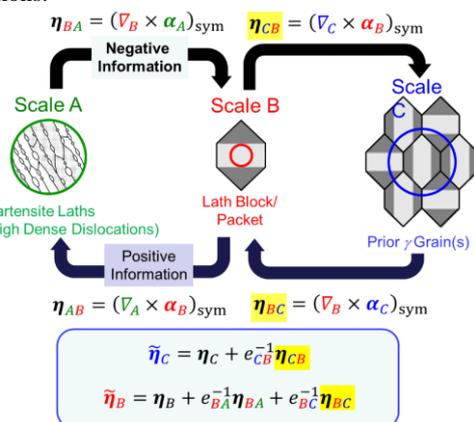


Fig.14 Three-scale modeling/simulation for hierarchical lath martensite steel under creep.

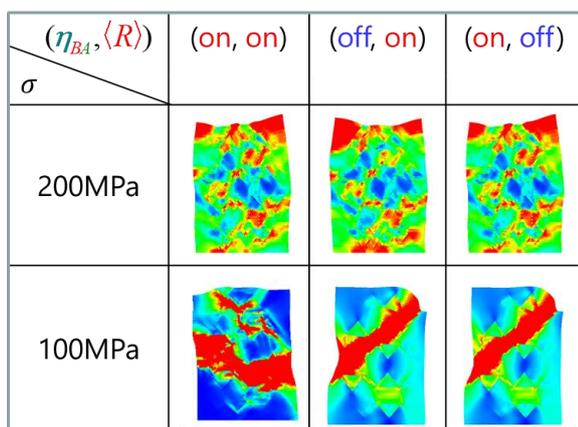


Fig.15 Creep ruptured samples via simulation, comparing three representative conditions of interaction field combinations.

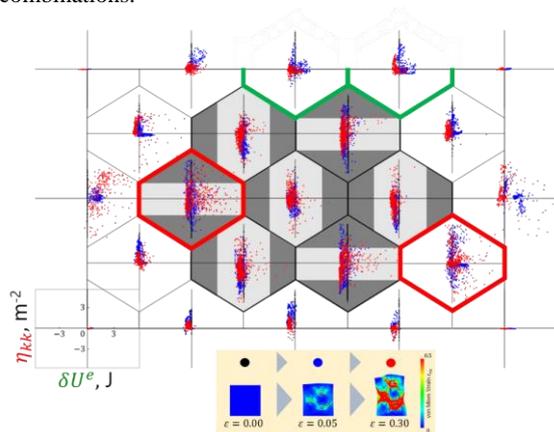


Fig.16a Point-wise duality diagrams for 23-grained embedded packet model.

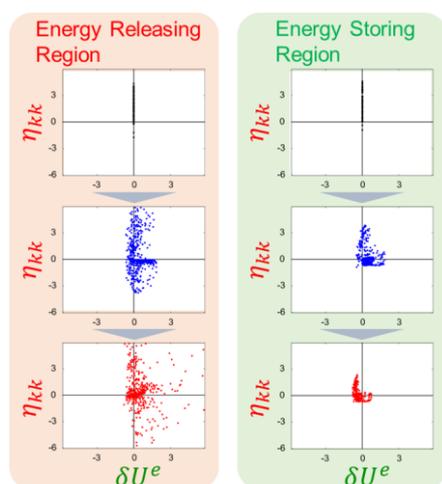


Fig.16b Selected snapshots of point-wise duality diagrams for Fig.16a (23-grained embedded packet model), comparing energy storing and releasing regions.

る。得られた結果の例として、クリーブ破断時における Mises 相当ひずみ分布を Fig.15 に示す。ここでは、 $(\eta_{BA}, \langle R \rangle)$ 条件の組合せとして両者を考慮した (on, on) と、いずれかの寄与を 0 とした (off, on) あるいは (on, off) の 3 条件下での結果を代表例として示しているが、7 粒モデルの場合

と同様に、不均質回復には η_{BA} と回復項 $\langle R \rangle$ 両者の導入が不可欠であることがわかる。また、200MPa では破断モードは条件によらずほぼ同一なのに対し、100MPa では大きく異なることがわかる。

さらに双対線図を描いた結果の例を Fig.16a に示す。ここでは、ひずみエネルギー蓄積領域(緑枠線)とエネルギー解放が顕著な領域(赤枠線)が自然に役割分担されており、後者の領域は Fig.15 における 100MPa, (on, on) 条件における破断箇所と対応している。Fig.16b には、それぞれに対するスナップショット例を示している。前出の 7 粒モデルでは、エネルギー蓄積が顕著な領域④および⑥において硬化領域の導入が必須であったが、パケット領域が十分大きくなることで、そうした付加的条件が不要となる。

4 結言

本稿では、FTMP 場の理論に基づく流動発展仮説の考え方と、同理論に立脚したラス・マルテンサイト組織のモデル化、さらに Di-CAP に基づく埋め込みラス・パケットモデルの構築とクリーブ変形解析結果の概要を紹介した。同材のような複雑な階層構造を有する組織の合理的なモデル化に留まらず、破断過程やその多角的な評価法までもが、比較的容易に可能となることを示した。

参考文献

- [1] Hasebe, T.: Field Theory of Multiscale Plasticity, Cambridge Univ. Press, 2023.
- [2] Hasebe, T. et al.: Modeling and simulations of experimentally observed dislocation substructures based on Field Theory of Multiscale Plasticity (FTMP) combined with TEM and EBSD-Wilkinson method for FCC and BCC poly/single crystals, *Materials Transactions*, Vol. 55, pp.779-787, 2014.
- [3] Hasebe, T. and Sugiyama, M.: FTMP-based simulation for self-evolving dislocation substructures under simple shear for steel single crystals having BCC structure, *Proc. 35th Riso Inter. Symp. on Materials Science; New Frontiers of Nanometals*, (Eds: Faester, S., Jensen, D. J., Hansen, H., Ralph, B. and Sun, J.), pp.313-320, 2014.
- [4] Matsubara, Y. and Hasebe, T.: FTMP-based modeling and simulations of creep damage and rupture in lath martensite structures, Part 2: Simulation Results and Evaluations”, *Proc. 56th Symp. High Temp. Strength of Maters.* (2018).
- [5] Hasebe, T.: Interaction fields based on incompatibility tensor in Field Theory of Plasticity, Part I: Theory, *IMMIJ, (Interaction and Multiscale Mechanics: An Int. J.)*, Vol.2, pp.1-14., 2009.
- [6] Hasebe, T. Interaction fields based on incompatibility tensor in Field Theory of Plasticity, Part II: Application, ” *IMMIJ, (Interaction and Multiscale Mechanics: An Int. J.)*, Vol.2, pp.15-30., 2009.
- [7] Kushima, H., Kimura, K. and Abe, F.: Degradation of Mod.9Cr-1Mo steel during long-term creep deformation, *Tetsu to Hagane*, Vol.85, pp.841-847, 1999.

均質化弾塑性構成則の代理モデルによるマルチスケール解析

Surrogate Modeling of Homogenized Elastoplastic Constitutive Laws for Decoupled Multiscale Analysis

山中耀介¹⁾ 松原成志朗²⁾ 平山紀夫³⁾ 森口周二⁴⁾ 寺田賢二郎⁵⁾

Yosuke Yamanaka, Seishiro Matsubara, Norio Hirayama, Shuji Moriguchi and Kenjiro Terada

¹⁾修(工) 東北大学 工学研究科 (〒 980-8572 宮城県仙台市青葉区荒巻字青葉 468-1, E-mail: yosuke.yamanaka.s7@dc.tohoku.ac.jp)²⁾博(工) 名古屋大学 工学研究科 (〒 464-8603 愛知県名古屋市千種区不老町, E-mail: seishiro.matsubara@mae.nagoya-u.ac.jp)³⁾博(工) 日本大学 生産工学部機械工学科 (〒 275-8575 千葉県習志野市泉町 1-2-1, E-mail: hirayama.norio@nihon-u.ac.jp)⁴⁾博(工) 東北大学 工学研究科 (〒 980-8572 宮城県仙台市青葉区荒巻字青葉 468-1, E-mail: s_mori@irides.tohoku.ac.jp)⁵⁾博(工) 東北大学 工学研究科 (〒 980-8572 宮城県仙台市青葉区荒巻字青葉 468-1, E-mail: tei@irides.tohoku.ac.jp)

We propose a new surrogate modeling for homogenized elasto-plastic material behavior. At first, to obtain the macroscopic stress-strain relationships, we conduct numerical material tests on a representative volume element (RVE) of a heterogeneous material. Arranging these macroscopic material responses, we obtain a data set of the macroscopic constitutive relationship. Using this data set, we construct a surrogate model by means of radial basis function interpolation and perform optimization of hyperparameters. In the presentation, surrogate computations of the load / unload problem of an elastoplastic material are carried out to verify the feasibility of the proposed method.

Key Words : Multiscale analysis, Computational homogenization, Elastoplasticity, RBF interpolation, Surrogate modeling

1. はじめに

分離型マルチスケール解析手法は微視的(ミクロ)構造に非均質性を有する材料の巨視的(マクロ)な力学挙動を予測可能とする手法であり, 計算コストの面で優れることで知られている. しかし, この手法は材料の均質化された力学挙動を表現可能なマクロ構成則を必要とし, その定式化が困難となる場合がある. このような問題は, Helmholtz エネルギーに加えてマクロ降伏関数やマクロ塑性ポテンシャルの定式化が必要となる弾塑性材料において顕著である. そこで本研究では, 分離型マルチスケールにおけるマクロ弾塑性構成則の代理モデルを開発する.

2. 2スケール境界値問題

図-1に示すような, 周期的なミクロ構造(ユニットセル)で構成された非均質材料の準静的釣り合い問題を考える. 数学的均質化理論[3]に倣ってミクロ座標を y , マクロ座標を x でそれぞれ表すと, マクロひずみ $\tilde{\varepsilon}(x)$ とミクロ変位 $u(x, y)$ はマクロ変位 $\tilde{u}(x)$ を用いて以下のように与えられる.

$$\tilde{\varepsilon}(x) = \frac{1}{2}(\nabla_x \tilde{u}(x) + (\nabla_x \tilde{u}(x))^T), \quad (1)$$

$$u(x, y) = \tilde{\varepsilon}(x) \cdot y + u'(x, y), \quad (2)$$

ここで, $u'(x, y)$ はミクロ構造内で周期的に分布する擾乱変位である. また, 式(2)より, ミクロひずみ $\varepsilon(x, y)$

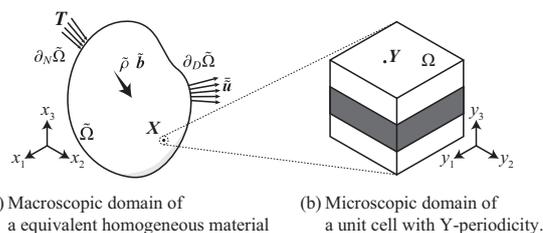


図-1 2スケール境界値問題におけるマクロおよびミクロ領域

は次のように求められる.

$$\begin{aligned} \varepsilon(x, y) &= \frac{1}{2}(\nabla_y u(x, y) + (\nabla_y u(x, y))^T) \\ &= \tilde{\varepsilon}(x) + \frac{1}{2}(\nabla_y u'(x, y) + (\nabla_y u'(x, y))^T) \end{aligned} \quad (3)$$

このミクロひずみの体積平均は, 擾乱変位の周期性および式(3)より明らかにマクロひずみと一致する.

$$\tilde{\varepsilon}(x) = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} \varepsilon(x, y) d\Omega, \quad (4)$$

ここに, $|\Omega|$ はユニットセルの体積である. 同様に, 次の周期境界条件が境界 $\partial\Omega^{[\pm J]}$ 上に課される.

$$u'^{[+J]}(x, y) - u'^{[-J]}(x, y) = 0, \quad (5)$$

ここで, 上付き文字 $[\pm J]$ は境界 $\partial\Omega^{[\pm J]}$ 上の値であることを示している.

これらの条件の下でミクロ変位 $u(x, y)$ を求めるミクロ境界値問題は以下のように定義される.

$$\nabla_y \cdot \sigma(x, y) = 0, \quad \forall y \in \Omega, \quad (6)$$

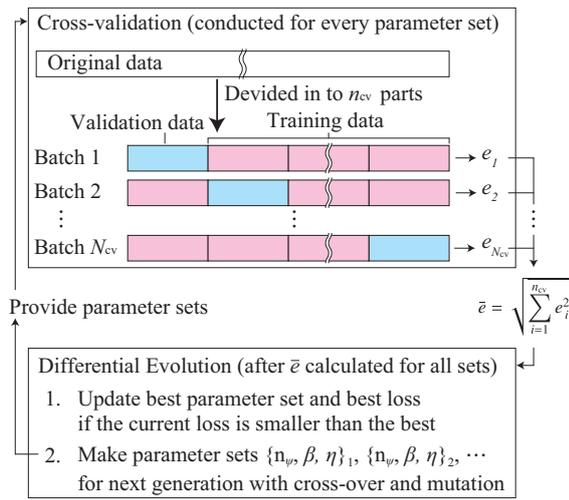


図-2 パラメータ最適化のアルゴリズム

ここで、 $\sigma(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ はマイクロ応力であり、式 (3) のマイクロひずみと任意の材料構成則を用いて決定される。

一方、マクロ応力 $\bar{\sigma}(\mathbf{x})$ に関する釣り合い式は次のように与えられる。

$$\nabla_{\mathbf{x}} \cdot \bar{\sigma}(\mathbf{x}) + \bar{\rho} \mathbf{b} = \mathbf{0}, \quad \forall \mathbf{x} \in \bar{\Omega}, \quad (7)$$

ここに、 $\bar{\rho}$ は均質化された質量密度であり、 \mathbf{b} は加速度である。式 (7) を用いてマクロ変位 $\bar{\mathbf{u}}(\mathbf{x})$ を求めるためには、適切な境界条件を設定するとともに、マクロひずみ $\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}(\mathbf{x})$ とマクロ応力 $\bar{\boldsymbol{\sigma}}(\mathbf{x})$ の適切な関係式を決定する必要がある。 $\bar{\boldsymbol{\sigma}}(\mathbf{x})$ の具体的な関数形を均質化理論から導出することはできないが、Hill-Mandel の原理 [2] より次の条件が与えられる。

$$\bar{\boldsymbol{\sigma}}(\mathbf{x}) = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) d\Omega. \quad (8)$$

すなわち、マクロ応力はマイクロ応力の体積平均と等価であり、これによりマイクロな力学的挙動を間接的にマクロ境界値問題へと反映することが可能となる。

弾塑性材料を対象とする場合、擬似時間 t を導入して増分的にこれらの境界値問題を解くことが一般的である。これ以降では、下付き文字 $n+1$ を用いて時刻 $t = t_{n+1}$ における値であることを表すこととする。

3. 代理モデルの定式化

(1) RBF 補間

従来の分離型マルチスケール解析において、式 (8) のマクロ応力 $\bar{\boldsymbol{\sigma}}$ はマクロ弾塑性構成則を用いて求められる。一般的なマクロ弾塑性構成則では、時刻 $t = t_{n+1}$ におけるマクロ応力 $\bar{\boldsymbol{\sigma}}_{n+1}$ はマクロ内部エネルギー \bar{U} とマクロひずみ $\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_{n+1}$ を用いて次式から得ることができる。

$$\bar{\boldsymbol{\sigma}}_{n+1} = \partial_{\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}} \bar{U}_{n+1}(\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_{n+1}) \quad (9)$$

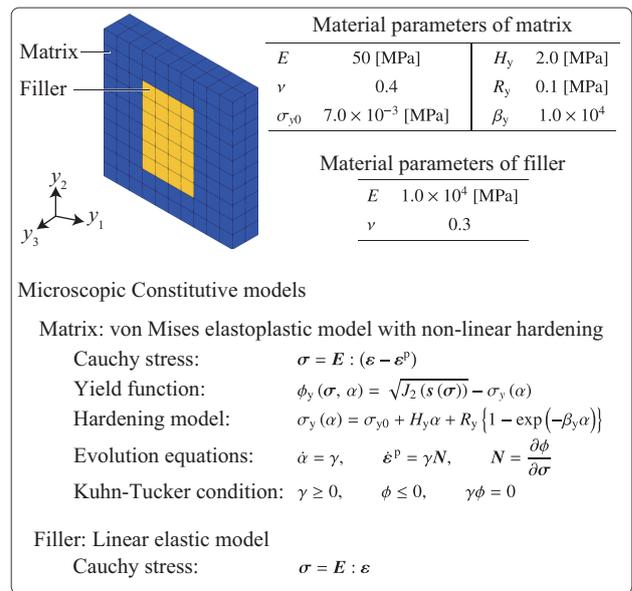


図-3 ユニットセル

本研究では、構成式 (9) を代理する関数 ϕ を放射基底関数 ψ による RBF 補間 [1] を用いて次式で定義する。

$$\bar{\boldsymbol{\sigma}}_{n+1} = \phi(\mathbf{f}) = \sum_i^{n_d} \omega_{(i)} \psi(r_{(i)}(\mathbf{f})), \quad (10)$$

$$r_{(i)}(\mathbf{f}) = \|\mathbf{f} - \mathbf{f}_{(i)}\|, \quad (11)$$

$$\mathbf{f} = \begin{Bmatrix} \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_{n+1} \\ \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_{n+1}^{\text{acc}} \end{Bmatrix}. \quad (12)$$

ここに \mathbf{f} は説明変数ベクトルであり、 $\mathbf{f}_{(i)}$ は RBF 補間に使用する n_d 個の教師データにおける i 番目のデータ点における \mathbf{f} を表している。また、 $\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_{n+1}^{\text{acc}}$ は弾塑性材料の履歴依存性挙動を再現するために本研究で導入するマクロ累積ひずみであり、その第 k 成分 $\bar{\varepsilon}_{k,n+1}^{\text{acc}}$ は次式で表される。

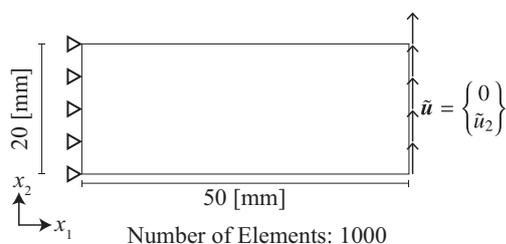
$$\begin{aligned} \bar{\varepsilon}_{k,n+1}^{\text{acc}} &= \bar{\varepsilon}_{k,n}^{\text{acc}} + \Delta \bar{\varepsilon}_k \left\{ H(\bar{\varepsilon}_{k,n+1} - \bar{\varepsilon}_{j,n}^{\text{max}}) + H(\bar{\varepsilon}_{k,n}^{\text{min}} - \bar{\varepsilon}_{j,n+1}) \right\}, \\ \bar{\varepsilon}_j^{\text{max}} &= \max_{s \in [0,t]} \{ \bar{\varepsilon}_j(s) \mid s \in [0,t] \}, \\ \bar{\varepsilon}_j^{\text{min}} &= \min_{s \in [0,t]} \{ \bar{\varepsilon}_j(s) \mid s \in [0,t] \}. \end{aligned} \quad (13)$$

さらに、 $\omega_{(i)} \in \mathbb{R}^6$ は重み係数ベクトルである。

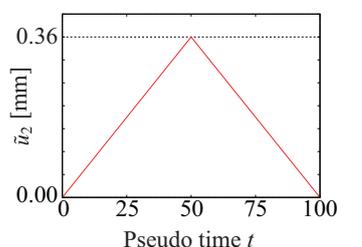
(2) 教師データ作成とパラメータ最適化

式 (10) の重み係数 $\omega_{(i)}$ を決定するために、ユニットセルに対して数値材料試験 (Numerical Material Test; NMT) を実施することで、次式のマクロ応力-ひずみ応答履歴データ \mathbf{X} を得る。

$$\mathbf{X} = \begin{Bmatrix} \cdots & \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_{n-1}, & \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_n, & \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_{n+1}, & \cdots \\ \cdots & \bar{\boldsymbol{\sigma}}_{n-1}, & \bar{\boldsymbol{\sigma}}_n, & \bar{\boldsymbol{\sigma}}_{n+1}, & \cdots \end{Bmatrix} \in \mathbb{R}^{12 \times (n_d)} \quad (14)$$



(a) Targetted structure



(b) History of imposed displacement

図-4 マクロ問題の設定

このデータ X より，教師データとなる説明変数行列 F と応答行列 P を以下のように作成する．

$$F = \{f_{(1)} \cdots f_{(n_d)}\}^T \in \mathbb{R}^{n_d \times 12}, \quad (15)$$

$$P = \{\phi_{(1)} \cdots \phi_{(n_d)}\}^T \in \mathbb{R}^{n_d \times 6}, \quad (16)$$

$$\phi_{(i)} = \tilde{\sigma}_{(i)} \in \mathbb{R}^6. \quad (17)$$

これらの教師データ F, P を用いることで，重み係数 $\omega_{(i)}$ を以下のように求めることができる．

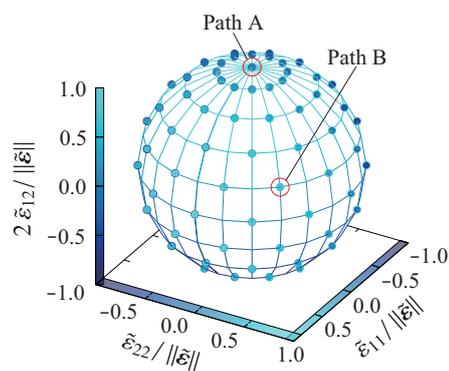
$$\{\omega_{(1)} \cdots \omega_{(n_d)}\}^T = (\Psi + \eta I)^{-1} P, \quad (18)$$

$$\Psi_{ij} = \psi(r_{(i)}(f_{(j)})), \quad \text{where } i, j = 1, \dots, n_d \quad (19)$$

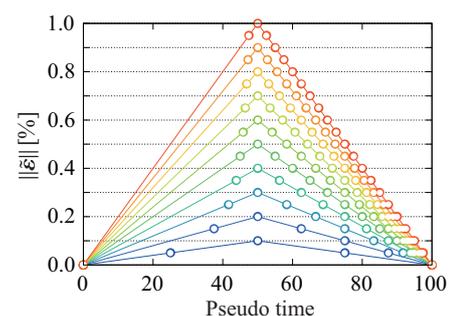
ここで，式(10)および(19)の放射基底関数 ψ には様々な関数形が存在し，教師データに応じて最適な関数形を選択する必要がある．そこで本研究では， ψ がパラメータ $n_\psi \in \mathbb{N}$ の値によって場合分けされる以下の関数であると定義する．

$$\psi(r_{(i)}(f)) = \begin{cases} n_\psi = 1: & \left\{ 1 + \left(\frac{r_{(i)}(f)}{\beta} \right)^2 \right\}^{1/2} \\ n_\psi = 2: & 1 + \frac{r_{(i)}(f)}{\beta} \\ n_\psi = 3: & \left\{ 1 + \left(\frac{r_{(i)}(f)}{\beta} \right)^2 \right\}^{-1/2} \\ n_\psi = 4: & \left\langle 1 - \frac{r_{(i)}(f)}{\beta} \right\rangle \\ n_\psi = 5: & \exp \left\{ - \left(\frac{r_{(i)}(f)}{\beta} \right)^2 \right\} \end{cases} \quad (20)$$

式(18)の η と式(20)の β はハイパーパラメータであり， n_ψ と同様に教師データに応じて最適な値を用いる必要がある．これらを理論的に決定することは不可能であ



(a) Distribution of Macro-strain paths



(b) Histories of Macro-strain magnitude

図-5 NMT における負荷条件

表-1 最適化によって得られたハイパーパラメータ

n_ψ	β	η
3	1.150×10^{-2}	1.372×10^{-3}

るため，本研究では図-2に示す差分進化[5]と交差検証[4]を組み合わせたアルゴリズムによって，次式で定義するの損失関数 \bar{e} を最小化するようにハイパーパラメータ (n_ψ, β, η) を最適化する．

$$e_i = \sqrt{\frac{\sum_{k=1}^6 \sum_{i_t=1}^{n_t} (\phi_k(f_{(i_t)}) - \phi_{(i),k})^2}{n_t}} \quad (i = 1, \dots, n_{cv})$$

$$\bar{e} = \sqrt{\sum_{i=1}^{n_{cv}} e_i^2} \quad (21)$$

なお， $n_{cv} \in \mathbb{N}$ は CV におけるデータ分割数， $n_t \in \mathbb{N}$ は教師データを分割して作成した検証用データの数である．

4. 数値計算例

図-3のユニットセルに対して実際に NMT を実施して代理モデルを作成し，図-4に示すマクロ問題の解析を実施することで代理モデルの性能について議論する．また，マクロ解析によって得られたマクロひずみ履歴を用いて局所化解析を実施することでマイクロ応力分布についても算出可能であることを例証する．なお，この計算例では計算コスト削減のためマクロ問題を平面ひずみ条件の二次元問題とする．

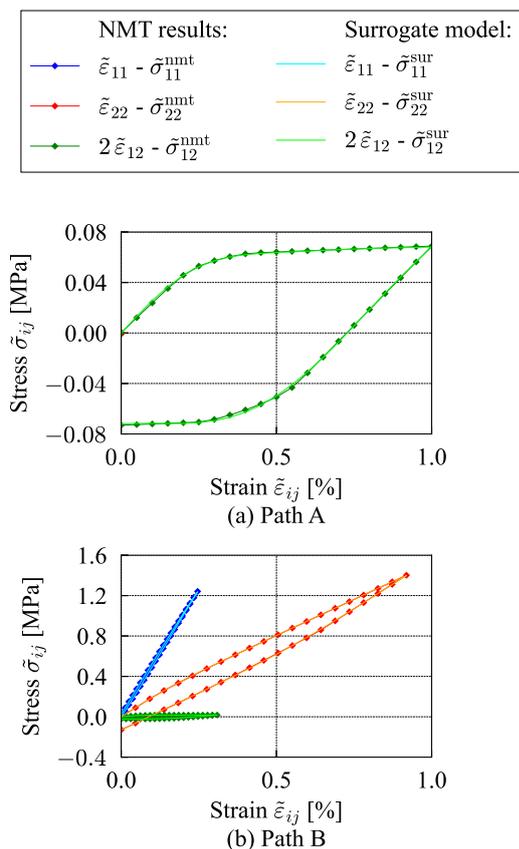


図-6 代理モデルの応答と NMT 結果の比較

(1) NMT による教師データ作成とパラメータ最適化

ユニットセルに対してマクロひずみを負荷し、その後マクロひずみが 0 となるよう除荷する NMT を実施する。その際、負荷するマクロひずみの成分比率 $\left(\frac{\tilde{\epsilon}_{11}}{\|\tilde{\epsilon}\|}, \frac{\tilde{\epsilon}_{22}}{\|\tilde{\epsilon}\|}, \frac{2\tilde{\epsilon}_{12}}{\|\tilde{\epsilon}\|}\right)$ を 110 パターン設定し、各成分比率毎に負荷するマクロひずみのノルム $\|\tilde{\epsilon}\|$ の最大値を変化させ、10 種類の負荷履歴を設定することで、合計 1,110 ケースの NMT を実施する。図-5 (a) のグラフに示す点は実際に使用したマクロひずみ成分比率 $\left(\frac{\tilde{\epsilon}_{11}}{\|\tilde{\epsilon}\|}, \frac{\tilde{\epsilon}_{22}}{\|\tilde{\epsilon}\|}, \frac{2\tilde{\epsilon}_{12}}{\|\tilde{\epsilon}\|}\right)$ を $\tilde{\epsilon}_{11} - \tilde{\epsilon}_{22} - 2\tilde{\epsilon}_{12}$ 空間で示しており、図-5 (b) はこれらの各点で考慮するマクロひずみのノルム $\|\tilde{\epsilon}\|$ の負荷履歴を示している。また、図-5 (b) 上のマーカーは教師データに含めるデータの位置を示している。データ点は各マクロひずみ成分比率 $\left(\frac{\tilde{\epsilon}_{11}}{\|\tilde{\epsilon}\|}, \frac{\tilde{\epsilon}_{22}}{\|\tilde{\epsilon}\|}, \frac{2\tilde{\epsilon}_{12}}{\|\tilde{\epsilon}\|}\right)$ ごとに 131 個あり、従って式 (15), (16) に示される教師データの総数は $n_d = 110 \times 131 = 14,410$ となる。

表-1 は以上の条件で実施した数値材料試験から得られた教師データを用いて最適化したハイパーパラメータを示している。ここで、交差検証のためのデータ分割数は $n_{cv} = 10$ とした。

(2) 代理モデルの精度検証

図-6 のグラフは、図-5 (a) において Path A, B として示す成分比率でノルムが 1% となるまでマクロひずみが

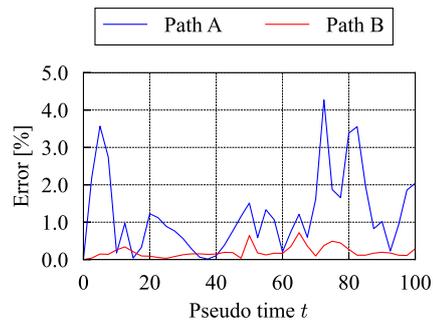


図-7 代理モデルの応答と NMT 結果の誤差

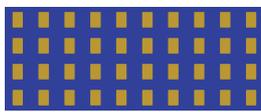
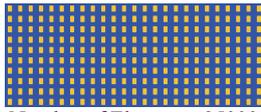
Case name	Material model(s)	Analysis mesh
Surr	Surrogate model	Elem. A Elem. B  Number of Elements: 1000
DA-40	Constitutive models in Figure 4 (b)	 Number of Elements: 4000 Number of unit cells: 40
DA-250		 Number of Elements: 25000 Number of unit cells: 250
DA-1000		Domain A Domain B  Number of Elements: 100000 Number of unit cells: 1000

図-8 解析条件

増加し、その後 0% となるまで減少する履歴を段階的に代理モデルに入力して得られたマクロ応力-ひずみ曲線と、対応する NMT の結果を示している。グラフより、Path A, B で共に代理モデルの応力-ひずみ関係が NMT 結果と概ね一致していることを確認できる。また、図-7 は次式で定義した誤差率を Path A, B それぞれについて時刻歴で示している。

$$\text{Error} = \frac{\|\tilde{\sigma}^{\text{surr}} - \tilde{\sigma}^{\text{nmt}}\|}{\|\tilde{\sigma}^{\text{nmt}}\|} \quad (22)$$

履歴全体にわたって誤差率が 5% を下回っており、作成した代理モデルは NMT 結果と同等のマクロ応力-ひずみ関係を算出可能であると言える。

(3) 有限要素解析への適用

作成した代理モデルを用いて図-4 (a) に示す片持ち梁の曲げ問題の有限要素解析を行う。境界条件として、固定端側の節点変位を拘束し、自由端側には図-4 (b)

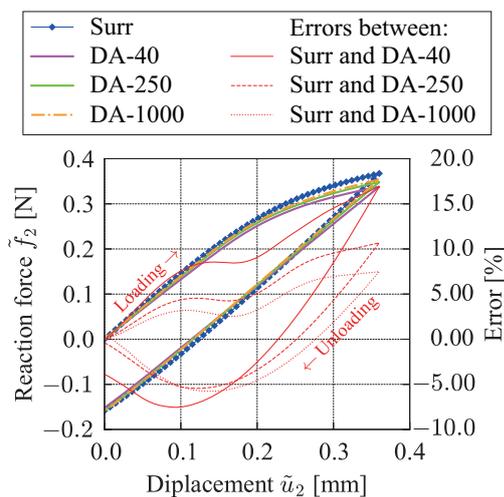


図-9 荷重変位関係の比較

に示す履歴で強制変位を与える。図-8は実施する解析ケースとそれぞれで使用する解析メッシュを示している。ケース Surr では代理モデルを用いて解析を行い、ケース DA-40, 250, 1000 では提案手法の精度を検証するための直接解を実施する。ここで、直接解析とはマクロ構造のメッシュに直接ミクロ構造を反映することで非均質材料の解析を実施する手法である。

図-9は各ケースで得られた、梁の自由端側における垂直方向の荷重変位関係と、ケース Surr の解と他のケースの解との誤差を示している。ここで、誤差は次のように定義した。

$$\text{Error} = \frac{\tilde{f}_{2,(i_s)}^{\text{surr}} - \tilde{f}_{2,(i_s)}^{\text{DA}}}{\sqrt{\frac{1}{n_s} \sum_{i_s=1}^{n_s} (\tilde{f}_{2,(i_s)}^{\text{DA}})^2}} \quad (23)$$

ここに、 n_s は解析ステップ数であり、 $\tilde{f}_{2,(i_s)}^{\text{surr}}$, $\tilde{f}_{2,(i_s)}^{\text{DA}}$ はそれぞれケース Surr と直接解析で得られた第 i_s ステップにおける梁の自由端の反力の垂直方向成分である。図 10(b) より、ケース Surr の結果は直接解析の結果と類似の傾向を示している。一方、誤差率は全てのケースに対して 5% 以上、DA-40 に対しては 15% 以上に達しているが、このような誤差の原因は代理モデルの精度ではなく、数学的均質化理論と直接解析におけるユニットセルの取り扱いの違いであると考えられる。

提案手法の代理モデルはマクロ材料構成モデルを代替しているため、ケース Surr の解析では数学的均質化理論に基づいてユニットセルの寸法は無限小であると仮定されている。一方で、直接解析におけるユニットセルの寸法は有限の大きさである。そのため、均質化理論に基づくマルチスケール解析と等価な結果を直接解析によって得るためには、ユニットセルの寸法をマクロ構造の大きさに対して十分に小さくする必要がある。実際図-9 から、この計算例における直接解析の解がユニットセルのサイズが小さくなるにつれ、ケース Surr の結果に漸近する傾向にあることが確認できる。以上の結果から、提案する代理モデルが分離型マルチスケール解析におけるマクロ材料構成則を代替可能であると考えられる。

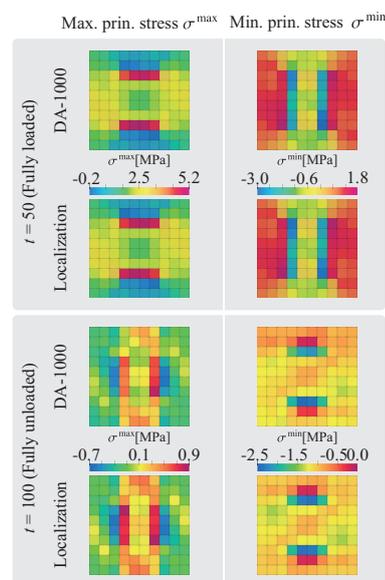


図-10 Domain A における最大/最小主応力分布の比較

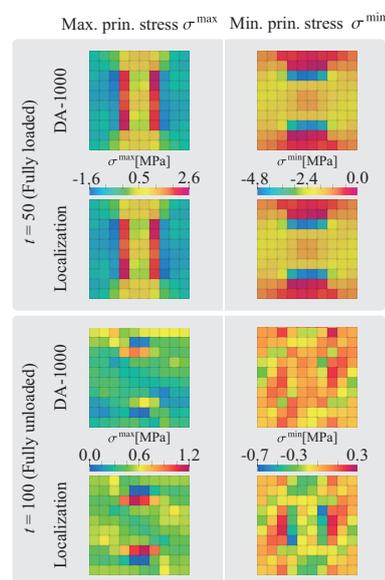


図-11 Domain B における最大/最小主応力分布の比較

(4) 局所化解析

最後に、図-8に示す Elem. A, B においてケース Surr で算出されたマクロひずみ履歴をユニットセルに与えてミクロ応力を計算する局所化解析を実施した。図-10, 11 は局所化解析を行なうことで得られた最大/最小主応力分布と、ケース DA-1000 において得られた Domain A, B 内の主応力分布を示している。ここで、図に示す応力分布は $t = 50$ [s] (強制変位最大時) と、 $t = 100$ [s] (除荷終了時) の値である。図より、各時刻において局所化解析によってと直接解析と類似の応力分布が得られたことを確認できる。表-2 は各領域、各時刻における最大主応力の最大値と最小主応力の最小値の相対誤差を示している。 $t = 50$ [s] における誤差は最大で 5% 程度であり、提案手法が直接解析と同等の結果を算出しているといえる。また、Element A については $t = 100$ [s] にお

表-2 局所化解析で得られた主応力の相対誤差

最大主応力 σ^{\max} の最大値		
Pseudo time	Compared region	Relative error [%]
50 (fully loaded)	Element A and domain A	1.97
	Element B and domain B	5.35
100 (fully unloaded)	Element A and domain A	5.27
	Element B and domain B	29.02
97 ($\tilde{\epsilon}_{12} \approx 0$)	Element B and domain B	7.39
最小主応力 σ^{\min} の最小値		
Pseudo time	Compared region	Relative error [%]
50 (fully loaded)	Element A and domain A	4.78
	Element B and domain B	1.30
100 (fully unloaded)	Element A and domain A	1.73
	Element B and domain B	85.42
97 ($\tilde{\epsilon}_{12} \approx 0$)	Element B and domain B	8.02

いても $t = 50[s]$ と同程度の誤差である。一方, Element B では $t = 100[s]$ で局所化解析と直接解析の誤差が最大主応力に関して 29%, 最小主応力に関して 85% となっている。このような誤差が生じた原因は, $t = 100[s]$ における Element B の変形状態が教師データ空間の外側に存在するためだと考えられる。

図-12 はケース Surr で得られた Element B 内のマクロ応力-ひずみ関係を示している。除荷中に $2\tilde{\epsilon}_{12}$ の値が正から負へと転じているが, 図-5 から明らかにこのような履歴は教師データに含まれていない。すなわち, $t = 100[s]$ における Element B の変形状態は教師データの空間外に存在するため, 教師データの外挿による RBF 補間が行われたことで計算精度が低下したと考えられる。実際, 除荷中に $\tilde{\epsilon}_{12}$ がおよそ 0 となる $t = 97[s]$ では変形状態は教師データの空間内に存在し, このときの主応力の誤差は最大値と最小値の両方について 10% 未満である。以上の結果から, 対象とする変形状態が教師データ空間の範囲内に含まれていることが, 提案する代理モデルを適用可能な条件であることが確認された。

5. 結論

本研究では, 均質化弾塑性構成則の代理モデルを RBF 補間を用いて作成する方法を提案した。提案手法の特徴は以下の 2 点である。1 点目はマクロ累積ひずみと呼ばれる新たな履歴変数を RBF 補間に導入することで弾塑性材料の履歴依存性挙動を精度良く表現可能な補間関数を提案した点であり, 2 点目は放射基底関数の関数形をハイパーパラメータとして考慮し, 最適化によって決定した点である。まず, ユニットセルに対してさまざまな変形履歴を与える数値材料試験を実施することでマクロ応力-ひずみ関係とその履歴に関するデータベースを作成した。このデータベースから作成した教師データを RBF 補間することで, マクロひずみとマクロ累積ひずみを入力としてマクロ応力を算出する均質化弾塑性構成則の代理モデルを作成した。その際, 代理モデルの応答が適切な値となるように 3 つのハイパーパラメータを交差検証と差分進化を用いて最適化した。数値計算例においては, 作成した代理モデルを用いてマクロ解析と局所化を実施し, 得られた結果を直接解

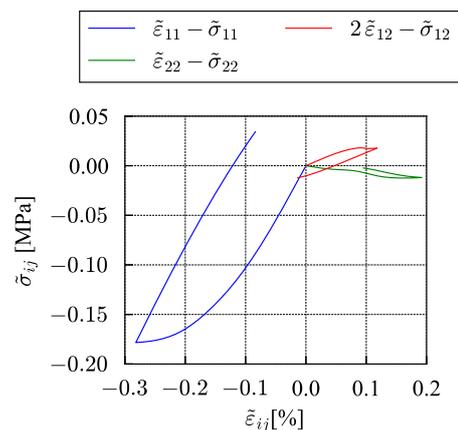


図-12 Element B のマクロ応力-ひずみ履歴

析の結果と比較することで提案手法の性能について検証した。その結果, マクロ解析において発生する変形状態が, 教師データ空間の範囲内に収まる場合, 提案手法が直接解析と同等の結果を得られることが確かめられた。一方で, 教師データ空間の範囲外となる変形状態に対しては, 提案手法の結果は直接解析の結果と乖離することが確認された。そのため, マクロ解析で発生する全ての変形状態を教師データ空間内に含む代理モデルを作成することで, このような誤差は抑制されると考えられる。以上の内容は現在, 原著論文として学術誌に投稿中である [6]。

謝辞: 本研究は JSPS 科研費 22J13235, 22K14142 の助成を受けたものです。

参考文献

- [1] MD Buhmann. Multivariate cardinal interpolation with radial-basis functions. *Constructive Approximation*, 6(3):225–255, 1990.
- [2] R. Hill. The essential structure of constitutive laws for metal composites and polycrystals. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 15(2):79–95, 1967. Cited By :668.
- [3] J.-L. Lions. *Some Methods in Mathematical Analysis of Systems and their Control*. Kexue Chubanshe Science Press and Gordon & Breach Science Pub, Beijing, 1981.
- [4] M Stone. Cross-validators choice and assessment of statistical predictions. *Journal of the Royal Statistical Society. Series B (Methodological)*, 36(2):111–147, 1974.
- [5] Rainer Storn and Kenneth Price. Differential Evolution – A Simple and Efficient Heuristic for global Optimization over Continuous Spaces. *J. Glob. Optim.*, 11(4):341–359, 1997.
- [6] Y. Yamanaka, S. Matsubara, N. Hirayama, S. Moriguchi, and K. Terada. Surrogate modeling for the homogenization of elastoplastic composites based on rbf interpolation. *Preprint*.

非周期ミクロ構造を有する複合材料の代理均質化モデルによるマルチスケール解析

Surrogate Constitution-based Multi-scale Analysis Method for Nonperiodic Microstructures

中村明莉¹⁾ 山中耀介²⁾ 新宅勇一³⁾ 森口周二⁴⁾ 寺田賢二郎⁵⁾
Akari Nakamura, Yosuke Yamanaka, Yuichi Shintaku, Shuji Moriguchi and Kenjiro Terada

¹⁾東北大学 工学研究科 (〒 980-8572 宮城県仙台市青葉区荒巻字青葉 468-1, E-mail: akari.nakamura.q5@dc.tohoku.ac.jp)

²⁾修(工) 東北大学 工学研究科 (〒 980-8572 宮城県仙台市青葉区荒巻字青葉 468-1, E-mail: yosuke.yamanaka.s7@dc.tohoku.ac.jp)

³⁾博(工) 筑波大学 システム情報系 助教 (〒 305-8573 茨城県つくば市天王台 1-1-1, E-mail: shintaku@kz.tsukuba.ac.jp)

⁴⁾博(工) 東北大学 災害科学国際研究所 准教授 (〒 980-8572 宮城県仙台市青葉区荒巻字青葉 468-1, E-mail: s_mori@irides.tohoku.ac.jp)

⁵⁾博(工) 東北大学 災害科学国際研究所 教授 (〒 980-8572 宮城県仙台市青葉区荒巻字青葉 468-1, E-mail: tei@irides.tohoku.ac.jp)

We propose a method for decoupled multiscale analysis of elastoplastic composites with arbitrary microstructures by combining “Numerical Material Test (NMT) allowing nonperiodic distributions of constituent materials” and a method of creating surrogate homogenized constitutive law. First, a constitutive database is constructed of the macroscopic stress-strain responses that are obtained by a series of NMTs with minimal kinematic constraint for nonperiodic microstructures. Next, by using the response database for training, we create a surrogate model of the macroscopic constitutive law whose hyperparameters are identified by optimization methods with cross-validation. Finally, we carry out a numerical simulation in which a macrostructure with the created surrogate model is subjected to tensile loading and subsequent unloading, and discuss the capability of the proposed method.

Key Words : *computational homogenization, multi-scale analysis, minimal kinematical constraint, nonperiodic microstructures, numerical material testing*

1. はじめに

繊維強化プラスチックに代表される複合材料は、そのミクロスケールでの構成材料やその分布特性を制御することで所望のマクロスケールの物性が得られることから、様々な業界で活用されている。均質化法に基づくマルチスケール解析は、複合材料における構成材料分布の幾何学的周期性を仮定したミクロ情報からマクロ物性の特徴付けを行ったうえでマクロ構造の力学挙動を評価するために行われ、一般に分離型のアプローチが採用される。従来の分離型マルチスケール解析では、ミクロ構造に対して数値材料試験 (Numerical Material Test: NMT) [1] を行うことで、仮定したマクロ構成則のパラメータを決定し、マクロ構造の解析を実施する。しかしながら、複合材料の多くは、図1に示す一方GFRPのようにミクロ構造内部で強化材分布にばらつきや非周期性が見られ、周期性の仮定の可否やマクロ物性のばらつきへの影響などの議論が盛んに行われている。また、非線形問題では分離型マルチスケール解析におけるマクロ構成則の同定が実用上の課題として認識されている。そこで本研究では、新宅ら [2] が提案した“ミクロ構造の非周期性を許容する NMT”と山中ら [3] が提案した“代理均質化構成則”の構築法を組み合わせ、任意のミクロ構造を有する弾塑性複合材料の分離型マルチスケール解析手法を提案する。

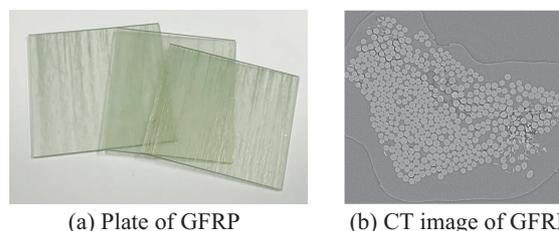


図-1 ガラス繊維強化樹脂 (Glass Fiber Reinforced Plastics, GFRP)

2. 均質化法に基づく数値材料試験

本節では、均質化法に基づくマルチスケール問題について概説する。まず、従来のミクロ構造に周期性を仮定する均質化法について述べ、境界条件に最小運動学的制約 (minimal kinematic constraint) [4] を課す定式化について述べる。

(1) ミクロ構造の周期性を仮定したツースケール問題

非均質体 Ω^ϵ を構成する周期的なミクロ領域 (ユニットセル) を ϵY と表し、等価な均質体の領域 (マクロ領域) を Ω と表す。ここで、 ϵ はマクロ領域に対するミクロ領域の大きさを表すパラメータである。マクロ領域 Ω に導入したマクロ座標系 $\mathbf{x} \in \Omega$ に対応して、この

ϵ を用いて関連付けられるマイクロ座標系

$$\mathbf{y} = \frac{\mathbf{x}}{\epsilon} \quad (1)$$

を導入する。これらの座標系 \mathbf{x}, \mathbf{y} にそれぞれ分布するマクロ、マイクロ変数を用いてユニットセル内の運動を記述する。マクロ変位、マクロ応力、マクロひずみをマクロ座標系に依存する変数として、それぞれ $\tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{x}), \tilde{\boldsymbol{\sigma}}(\mathbf{x}), \tilde{\boldsymbol{\epsilon}}(\mathbf{x})$ と表し、マイクロ変位、マイクロ擾乱変位、マイクロ応力、マイクロひずみをマイクロ座標系の独立変数として、それぞれ $\mathbf{u}, \mathbf{u}^*(\mathbf{x}, \mathbf{y}), \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}, \mathbf{y}), \boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ と表す。なお、ここで \mathbf{x} はマクロ物質点を特定するためのパラメータと見なされる。これらの変数を用いて、マイクロ構造に周期境界条件を課す場合の2スケール境界値問題の支配方程式は以下の式で表される。

マクロ境界値問題 (2)

$$\left\{ \begin{array}{l} \nabla_x \tilde{\boldsymbol{\sigma}}(\mathbf{x}) + \tilde{\mathbf{b}} = 0 \quad \text{in } \Omega \\ \tilde{\boldsymbol{\sigma}}(\mathbf{x}) = \langle \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \rangle \quad \text{in } \Omega \\ \tilde{\boldsymbol{\epsilon}}(\mathbf{x}) = \nabla_x^{(s)} \tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{x}) \\ \tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{x}) = \bar{\mathbf{u}} \quad \text{on } \partial\Omega_u \\ \tilde{\mathbf{i}}(\mathbf{x}) = \bar{\mathbf{i}} \quad \text{on } \partial\Omega_\sigma \end{array} \right. \quad (3)$$

マイクロ境界値問題 (3)

$$\left\{ \begin{array}{l} \nabla_y \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = 0 \quad \text{in } Y \\ \boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \nabla_x^{(s)} \tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{x}) + \nabla_y^{(s)} \mathbf{u}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \quad \text{in } Y \\ \mathbf{u} = \tilde{\boldsymbol{\epsilon}}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{y} + \mathbf{u}^* \quad \text{in } Y \\ \mathbf{u}^*(\mathbf{x}, \mathbf{y})|_{\partial Y_{**}} - \mathbf{u}^*(\mathbf{x}, \mathbf{y})|_{\partial Y_{**}} = \mathbf{0} \quad \text{in } Y \quad \dots(*) \end{array} \right.$$

ここで、 $\tilde{\mathbf{b}}$ は物体力であり、 $\bar{\mathbf{u}}, \bar{\mathbf{i}}$ はそれぞれディリクレ境界 $\partial\Omega_u$ とノイマン境界 $\partial\Omega_\sigma$ における変位と荷重ベクトルである。また、マイクロ応力 $\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ は任意のマイクロ材料構成則を用いて計算される。

$\langle \bullet \rangle$ はマイクロ領域 Y における体積平均であり、

$$\langle \bullet \rangle = \frac{1}{|Y|} \int_Y \bullet dY \quad (4)$$

で定義される。また、 $\nabla_x^{(s)}(\bullet)$ は、 $\nabla_x(\bullet)$ の対称成分であり、次のように定義した。

$$\nabla_x^{(s)}(\bullet) = \frac{1}{2} \left[\left(\frac{\partial \bullet}{\partial x} \right) + \left(\frac{\partial \bullet}{\partial x} \right)^\top \right] \quad (5)$$

(2) 周期境界条件の緩和

本項では、新宅ら [2] が提案した非周期性を許容する NMT について説明する。

まず、マクロひずみ $\tilde{\boldsymbol{\epsilon}}(\mathbf{x})$ はマイクロひずみ $\boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ の体積平均から、次式のように求めることができる。

$$\begin{aligned} \tilde{\boldsymbol{\epsilon}}(\mathbf{x}) &= \langle \boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \rangle \\ &= \langle \nabla_x^{(s)} \tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{x}) + \nabla_y^{(s)} \mathbf{u}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \rangle \\ &= \nabla_x^{(s)} \tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{x}) + \langle \nabla_y^{(s)} \mathbf{u}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \rangle \end{aligned} \quad (6)$$

このマクロひずみが式 (2)₃ のマクロひずみと整合するための必要条件は次式で表される。

$$\langle \nabla_y^{(s)} \mathbf{u} \rangle = 0 \quad (7)$$

新宅らは、周期境界条件 (*) に代わって式 (7) をマイクロ境界値問題の制約条件として用いることを提案した。ただし、式 (7) のみを制約条件とする場合、マイクロ構造の剛体運動が考慮されておらず、2スケール境界値問題の解が不定となるため、その並進運動と剛体回転を抑えるために次式のような制約条件を加える必要がある。

$$\langle \mathbf{u}^* \rangle = 0 \quad (\text{並進運動に関する制約条件}), \quad (8)$$

$$\langle \nabla_y^{(a)} \mathbf{u}^* \rangle = 0 \quad (\text{剛体回転に関する制約条件}), \quad (9)$$

ここで、 $\nabla_y^{(a)}(\bullet)$ は次式で定義される $\nabla_x(\bullet)$ の反対称成分である。

$$\nabla_y^{(a)}(\bullet) = \frac{1}{2} \left[\left(\frac{\partial \bullet}{\partial y} \right) - \left(\frac{\partial \bullet}{\partial y} \right)^\top \right] \quad (10)$$

ここで、式 (7) および (9) を満足する必要十分条件は、

$$\langle \nabla_y \mathbf{u}^* \rangle = 0 \quad (11)$$

である。したがって、2スケール境界値問題は以下のように書き改められる。

マクロ境界値問題 (12)

$$\left\{ \begin{array}{l} \nabla_x \tilde{\boldsymbol{\sigma}}(\mathbf{x}) + \tilde{\mathbf{b}} = 0 \quad \text{in } \Omega \quad \text{in } \Omega \\ \tilde{\boldsymbol{\sigma}}(\mathbf{x}) = \langle \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \rangle \quad \text{in } \Omega \\ \tilde{\boldsymbol{\epsilon}}(\mathbf{x}) = \nabla_x^{(s)} \tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{x}) \\ \tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{x}) = \bar{\mathbf{u}} \quad \text{on } \partial\Omega_u \\ \tilde{\mathbf{i}}(\mathbf{x}) = \bar{\mathbf{i}} \quad \text{on } \partial\Omega_\sigma \end{array} \right. \quad (13)$$

マイクロ境界値問題 (13)

$$\left\{ \begin{array}{l} \nabla_y \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = 0 \quad \text{in } Y \\ \boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \nabla_x^{(s)} \tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{x}) + \nabla_y^{(s)} \mathbf{u}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \quad \text{in } Y \\ \mathbf{u} = \tilde{\boldsymbol{\epsilon}}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{y} + \mathbf{u}^* \quad \text{in } Y \\ \langle \mathbf{u}^* \rangle = 0 \quad \text{in } Y \\ \langle \nabla_y \mathbf{u}^* \rangle = 0 \quad \text{in } Y \end{array} \right.$$

(3) 最小運動学的制約つき2スケール問題

新宅らは最小運動学的制約条件 (8) と (11) の下での2スケール最適化問題を次のように定義した。

$$\{\tilde{\mathbf{u}}, \mathbf{u}\} = \arg \inf_{\tilde{\mathbf{v}} \in \tilde{\mathcal{V}}} \inf_{\mathbf{w} \in \mathcal{V}} \mathcal{F}(\tilde{\mathbf{v}}; \mathbf{w}^*) \quad (14)$$

$$\mathcal{F}(\tilde{\mathbf{v}}; \mathbf{w}^*) = \int_\Omega \langle \mathcal{W} \rangle \Omega - \int_{\partial\Omega_\sigma} \tilde{\mathbf{i}} \cdot \tilde{\mathbf{v}} d\Omega - \int_\Omega \tilde{\mathbf{b}} \cdot \tilde{\mathbf{v}} d\Omega \quad (15)$$

$$\mathcal{W}(\nabla_x^{(s)} \tilde{\mathbf{v}} + \nabla_y^{(s)} \mathbf{w}^*) = \frac{1}{2} (\nabla_x^{(s)} \tilde{\mathbf{v}} + \nabla_y^{(s)} \mathbf{w}^*) : \mathbb{C} : (\nabla_x^{(s)} \tilde{\mathbf{v}} + \nabla_y^{(s)} \mathbf{w}^*) \quad (16)$$

$$\mathcal{V} := \{\mathbf{w}^*(\bullet, \mathbf{y}) \mid \text{Eqs. (8) and (11)}\} \quad (17)$$

$$\tilde{\mathcal{V}} := \{\tilde{\mathbf{v}}(\mathbf{x}) \mid \tilde{\mathbf{v}} = \bar{\mathbf{u}} \text{ on } \partial\Omega_u\} \quad (18)$$

この制約付きマイクロ-マクロ最適化問題について、式 (11) に対応する Lagrange の未定乗数 $\lambda \in \mathbb{R}^{N^{\text{dim}} \times N^{\text{dim}}}$ を導入して、次の Lagrange 関数を定義する。

$$\mathcal{L}(\tilde{\mathbf{v}}^*, \lambda; \mathbf{v}) = \mathcal{F}(\tilde{\mathbf{v}}; \mathbf{w}^*) + \int_\Omega \lambda : \langle \nabla_y \mathbf{w}^* \rangle d\Omega \quad (19)$$

ここで, $\lambda_{ij} \in L_2(\Omega; \mathbb{R})$ である. このとき, 制約付き最適化問題を解くことと, Lagrange 関数の停留値を求めることは同義である. したがって, 各変数についての $\mathcal{L}(\bar{\nu}, \lambda; \nu)$ の停留を取ることで次式のような支配方程式が導出される.

$$D\mathcal{L}[\delta\nu^*] = 0$$

$$\rightarrow \int_{\Omega} \langle \sigma : \nabla_y^{(s)} \delta u^* \rangle d\Omega + \int_{\Omega} \lambda : \langle \nabla_y \delta u^* \rangle d\Omega = 0, \quad \forall \delta u^* \in \mathcal{V} \quad (20)$$

$$D\mathcal{L}[\delta\bar{\nu}] = 0$$

$$\rightarrow \int_{\Omega} \bar{\sigma} : \delta \bar{\varepsilon} d\Omega - \int_{\partial\Omega_r} \bar{t} \cdot \delta \bar{u} d\Omega - \int_{\Omega} \bar{b} \cdot \delta \bar{u} d\Omega = 0, \quad \forall \delta \bar{u} \in \bar{\mathcal{V}}_0 \quad (21)$$

$$D\mathcal{L}[\delta\lambda] = 0$$

$$\rightarrow \int_{\Omega} \delta\lambda : \langle \nabla_y u^* \rangle d\Omega = 0, \quad \forall \delta\lambda \in L_2(\Omega; \mathbb{R}) \quad (22)$$

ここに, $\bar{\mathcal{V}}_0 := \{\delta \bar{u}(x) \mid \delta \bar{u} = \mathbf{0} \text{ on } \partial\Omega_u\}$ である.

3. RBF 補間に基づく代理均質化モデル

本節では, 山中ら [3] が提案した RBF 補間を用いたマクロ構成則の代理均質化モデルについて説明する.

(1) 数値材料試験によるマクロ応力-ひずみ関係の取得

従来の分離型マルチスケール解析において, NMT より得られたマクロ応力-マクロひずみ関係からマクロ構成則の関数形を仮定し, 最適化アルゴリズムなどを用いてパラメータを同定している. この際, 山中らは次のようなマクロ応力とマクロ変形を表す変数の組を取得することを提案した.

$$\bar{\sigma} = \phi(\mathbf{f}) \quad (23)$$

$$\mathbf{f} = \begin{Bmatrix} \bar{\varepsilon} \\ \bar{\varepsilon}^{\text{acc}} \end{Bmatrix} \quad (24)$$

ここで, $\bar{\sigma}$ と $\bar{\varepsilon}$ は, それぞれ Voigt 表記のマクロ応力とマクロひずみであり, $\phi \in \mathbb{R}^{N_o}$ はマクロ構成則を代理するベクトル値関数, $\mathbf{f} \in \mathbb{R}^{N_i}$ は説明変数ベクトルである. 説明変数の一つである $\bar{\varepsilon}^{\text{acc}}$ は, 弾塑性材料の履歴依存性を考慮するために導入されたマクロ累積ひずみであり, その成分は次式のように定義される.

$$\bar{\varepsilon}_j^{\text{acc}} = \int_0^t \dot{\varepsilon}_j \{ H(\dot{\varepsilon}_j - \dot{\varepsilon}_j^{\text{max}}) + H(\dot{\varepsilon}_j^{\text{min}} - \dot{\varepsilon}_j) \} ds \quad (25)$$

ここに, $\dot{\varepsilon}_j$ は擬似時間 t に関するマクロひずみ速度であり, $H(\bullet)$ はヘビサイド関数である. また, $\dot{\varepsilon}_j^{\text{max}}, \dot{\varepsilon}_j^{\text{min}}$ はそれぞれ荷重経路の最大ひずみと最小ひずみであり, 次式のように定義した.

$$\dot{\varepsilon}_j^{\text{min}} = \min_{s \in [0, t]} \{ \dot{\varepsilon}_j(s) \mid s \in [0, t] \} \quad (26)$$

$$\dot{\varepsilon}_j^{\text{max}} = \max_{s \in [0, t]} \{ \dot{\varepsilon}_j(s) \mid s \in [0, t] \} \quad (27)$$

時間増分を Δt とすると, 擬似時刻 t_{n+1} は Δt を用いて次のように表すことができる.

$$t_{n+1} = t_n + \Delta t \quad (28)$$

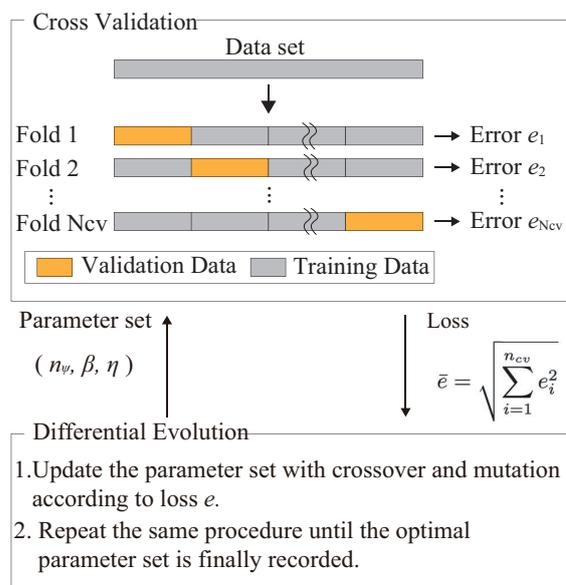


図-2 パラメータ最適化

このとき, マクロ累積ひずみはマクロひずみ増分 $\Delta \bar{\varepsilon}_j = \Delta t \dot{\varepsilon}_j$ を用いて次のように表される.

$$\bar{\varepsilon}_{j,n+1}^{\text{acc}} = \bar{\varepsilon}_{j,n}^{\text{acc}} + \Delta \bar{\varepsilon}_j \{ H(\dot{\varepsilon}_{j,n+1} - \dot{\varepsilon}_{j,n}^{\text{max}}) + H(\dot{\varepsilon}_{j,n}^{\text{min}} - \dot{\varepsilon}_{j,n+1}) \} \quad (29)$$

ここで, \bullet_n, \bullet_{n+1} はそれぞれ擬似時刻 t_n, t_{n+1} における値である.

(2) RBF 補間

RBF 補間とは, データ点 \mathbf{f} に対する応答 ϕ を放射基底関数 (radial basis function, RBF) で補間する方法である. 既知のデータ点 $\mathbf{f}_{(i)}$ における応答 $\phi_{(i)}$ を次のように定義する.

$$\phi_{(i)} = \phi(\mathbf{f}_{(i)}) = \{ \phi_{(i)1} \quad \phi_{(i)2} \quad \phi_{(i)N_o} \}^T \quad (30)$$

また, 任意の入力 \mathbf{f} と $\mathbf{f}_{(i)}$ の距離をユークリッドノルムを用いて次のように定義する.

$$r_{(i)}(\mathbf{f}) := \|\mathbf{f} - \mathbf{f}_{(i)}\| = \sqrt{\sum_{j=1}^{N_i} (f_j - f_{(i)j})^2} \quad (31)$$

放射基底関数 ψ は距離 r を独立変数とするスカラー値関数であり, 山中らは ψ をパラメータ n_ψ の値によって識別される次の関数で定義した.

$$\psi(r_{(i)}(\mathbf{f})) = \begin{cases} n_\psi = 1: & \left\{ 1 + \left(\frac{r_{(i)}(\mathbf{f})}{\beta} \right)^2 \right\}^{1/2} \\ n_\psi = 2: & 1 + \frac{r_{(i)}(\mathbf{f})}{\beta} \\ n_\psi = 3: & \left\{ 1 + \left(\frac{r_{(i)}(\mathbf{f})}{\beta} \right)^2 \right\}^{-1/2} \\ n_\psi = 4: & \left\{ 1 + \frac{r_{(i)}(\mathbf{f})}{\beta} \right\} \\ n_\psi = 5: & \exp \left\{ - \left(\frac{r_{(i)}(\mathbf{f})}{\beta} \right)^2 \right\} \end{cases} \quad (32)$$

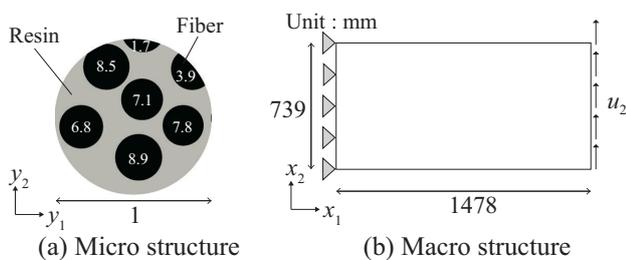


図-3 ミクロ構造とマクロ構造

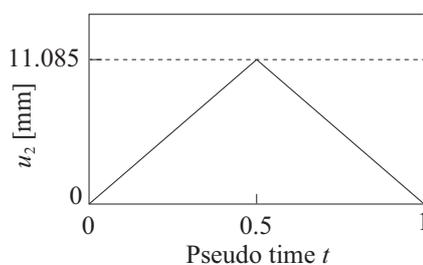


図-4 マクロ構造に与える強制変位

ここで、 β はハイパーパラメータである。

この放射基底関数を用いて、マクロ構成則を代理するベクトル値関数 ϕ を次のように定義する。

$$\phi = \sum_{i=1}^{N_c} \omega_{(i)} \psi(r_{(i)}(f)) \quad (33)$$

ここで、 N_c は補間データの数である。また、 $\omega_{(i)} \in \mathbb{R}^{N_c}$ は重み係数であり、線形方程式

$$\mathbf{W} = \mathbf{\Psi}^{-1} \cdot \mathbf{P} \quad (34)$$

の解として得ることができる。ここで、 \mathbf{P} 、 \mathbf{W} はそれぞれ次のように定義される応答行列と重み係数行列である。

$$\mathbf{P} = \left\{ \phi_{(1)} \quad \dots \quad \phi_{(N_c)} \right\}^T \in \mathbb{R}^{N_c \times N_c} \quad (35)$$

$$\mathbf{W} = \left\{ \omega_{(1)} \quad \dots \quad \omega_{(N_c)} \right\}^T \in \mathbb{R}^{N_c \times N_c} \quad (36)$$

また、 $\mathbf{\Psi}$ はカーネル関数であり、次式で定義される。

$$\mathbf{\Psi} = \begin{bmatrix} \psi(r_{(1)}(f_{(1)})) & \dots & \psi(r_{(N_c)}(f_{(1)})) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi(r_{(1)}(f_{(N_c)})) & \dots & \psi(r_{(N_c)}(f_{(N_c)})) \end{bmatrix} \quad (37)$$

ここで、式 (33) の代理モデル ϕ は放射基底関数と重みの線型結合であることから、 f に関して連続である。しかし、式 (34) の重みを用いた場合、応答局面に局所的な振動が見られることが知られている。そこで山中らは、応答局面の振動を抑制するために正則化パラメータ η を用いてカーネル関数を次のように置き換えている。

$$\mathbf{\Psi} \approx \mathbf{\Psi} + \eta \mathbf{I} \quad (38)$$

代理モデルの応答が適切な値となるためには、教師データに応じて n_ψ 、 β 、 η の値を適切に定める必要がある。これらの値は理論的に決定不可能であるため、図 2 に示す差分進化 [5] と交差検証 [6] のアルゴリズムを用いて次式の誤差を最小化するようにパラメータを最適化する。

$$\bar{e} = \sqrt{\sum_{i=1}^{n_{cv}} e_i^2} \quad (39)$$

$$e_i = \sqrt{\sum_{i_o=1}^{N_o} \sum_{i_t=1}^{N_t} \frac{(\phi_{i_o}(f_{(i_t)}) - \phi_{(i),i_o})^2}{N_t}} \quad (i = 1, \dots, n_{cv}) \quad (40)$$

なお、 $n_{cv} \in \mathbb{N}$ は差分検証におけるデータ分割数、 $N_t \in \mathbb{N}$ は教師データを分割して作成した検証用データの数である。

4. 数値計算例

本節では図 3 (a) に示す非周期性を有するミクロ構造の代表体積要素モデル (以下、RVE モデル) に対して、第 2 節で述べたミクロ構造の非周期性を許容する NMT を実施し、代理均質化モデルを作成する。ここで、図中の各繊維部分に示す数字は、それぞれの体積分率である。その後、図 3 (b) に示すマクロ構造に対して、図 4 の強制変位を与えて解析を行うことで提案手法の性能を例示する。

(1) RVE モデル

RVE モデルは、図 5 (a) に示す GFRP の CT (Computed Tomography) 画像の円部分を切り出して作成した。本研究では、樹脂と繊維の変形は十分に小さいものとする。微小変形理論を採用する。樹脂は von Mises の降伏基準に非線形硬化則を加えた弾塑性モデルで表現し、繊維には炭素繊維を仮定して等方性の線形弾性体とした。それぞれの材料モデルの具体形を以下に示す。

材料モデル

樹脂

$$\text{Cauchy 応力} \quad \sigma = \mathbb{C} : (\varepsilon - \varepsilon^p)$$

$$\text{降伏関数} \quad \phi_y(\sigma, \alpha) = \sqrt{J_2(\sigma(s))} - \sigma_y(\alpha)$$

$$\text{硬化関数} \quad \sigma_y(\alpha) = \sigma_{y0} + H_y \alpha + R_y \{1 - \exp(-\beta \alpha)\}$$

$$\text{流れ則} \quad \varepsilon^p = \gamma N$$

$$\text{硬化則} \quad \dot{\alpha} = \gamma$$

$$\text{流れベクトル} \quad N = \frac{\partial \phi}{\partial \sigma}$$

$$\text{Kuhn-Tucker 条件} \quad \gamma \geq 0, \phi \leq 0, \gamma \phi = 0$$

炭素繊維

$$\text{Cauchy 応力} \quad \sigma = \mathbb{C} : \varepsilon$$

材料パラメータを表 1 に示す。なお、樹脂の材料パラメータは山本らが同定した値 [7] を使用した。

(2) オフライン計算

RVE モデルに対して様々なパターンのマクロひずみを与えて非周期性を許容する NMT [2] を行い、式 (35) の説明変数行列 \mathbf{P} を作成する。その後、ハイパーパラメータを最適化して重み係数を求めることで、代理均質化モデルを作成する。

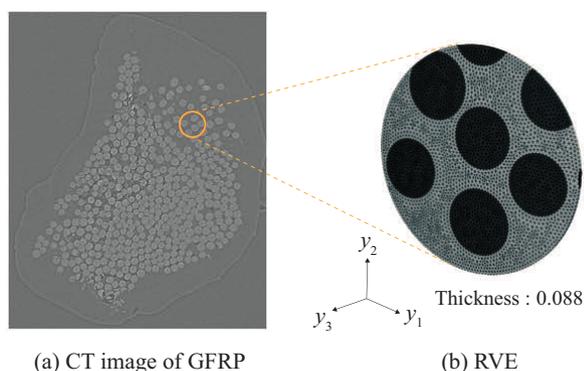


図-5 RVE モデルの作成

表-1 材料パラメータ

Material parameter (Matrix)		Value
Young's modulus	E [MPa]	2.3×10^5
Poisson's ratio	γ [-]	0.20
Initial yield strength	σ_{y0} [MPa]	19.306
Linear hardening modulus	H_y [MPa]	2.466
Non-linear hardening modulus	R_y [MPa]	24.68
Exponential hardening parameter	β [-]	60.7
Material parameter (Fiber)		Value
Young's modulus	E [MPa]	3.9×10^3
Poisson's ratio	γ [-]	0.35

説明変数行列 \mathbf{P} を作成するために、様々なマクロひずみの負荷除荷経路を用意する。その際、載荷するマクロひずみ比率 $(\frac{\tilde{\epsilon}_{11}}{\|\tilde{\epsilon}\|}, \frac{\tilde{\epsilon}_{22}}{\|\tilde{\epsilon}\|}, \frac{\tilde{\epsilon}_{12}}{\|\tilde{\epsilon}\|})$ を 110 パターン用意し、各パターンごとにマクロひずみのノルム $\|\tilde{\epsilon}\|$ の最大値を 0.1% から 1% まで 0.1% 刻みで変化させて 10 種類の載荷履歴を設定する。よって、合計 1100 経路のマクロひずみを用意し、NMT を行う。また、データ点 f は各マクロひずみ比率ごとに 131 点取得しており、教師データ点 f の数は合計 $110 \times 131 = 14,400$ である。得られた教師データを全て用いてパラメータ n_ψ, β, η を最適化し、代理均質化モデルを作成する。以下に、最適化により得られたハイパーパラメータを示す。

$$\begin{pmatrix} n_\psi \\ \beta \\ \eta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3 \\ 9.981 \times 10^{-3} \\ 9.349 \times 10^{-6} \end{pmatrix}$$

(3) 代理均質化モデルの精度検証

得られた代理均質化モデルの精度検証のため、教師データと異なるマクロひずみ履歴を 1190 種作成して代理モデルに与え、対応する NMT の結果と比較すると、代理モデルの平均絶対誤差率は以下のように算出された。

$$\text{Error} = \frac{1}{N_v} \sum_{i=1}^{N_v} \frac{\|\tilde{\sigma}_{(i)}^{\text{surr}} - \tilde{\sigma}_{(i)}^{\text{nmt}}\|}{\|\tilde{\sigma}_{(i)}^{\text{nmt}}\|} = 0.1093[\%] \quad (41)$$

ここで、 N_v は検証に用いたデータ数であり、今回は 15,589 個使用した。また、 $\tilde{\sigma}_{(i)}^{\text{nmt}}$ 、 $\tilde{\sigma}_{(i)}^{\text{surr}}$ はそれぞれデータ点 (i) における NMT 結果と代理モデルの応答として

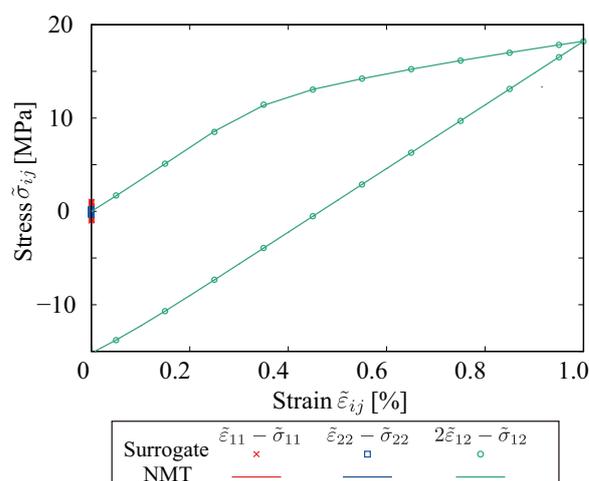


図-6 代理モデルの応答の検証

得られたマクロ応力であり、 $\|\tilde{\sigma}_{(i)}^{\text{nmt}}\|$ はデータ点 (i) が存在する経路の $\tilde{\sigma}_{(i)}^{\text{nmt}}$ のノルムの平均値である。

比較検証の一例として、RVE モデルに対してマクロひずみ $\tilde{\epsilon} = [0 \ 0 \ 0 \ 0.01 \ 0 \ 0]$ を増分的に負荷し、その後マクロひずみが 0 になるように除荷する NMT により得られたマクロ応力-マクロひずみ曲線と、同じマクロひずみ履歴を与えた際の代理均質化モデルの応答の比較を図 6 に示す。図より、代理モデルと NMT の結果が概ね一致していることが確認でき、作成した代理均質化モデルは NMT と同等のマクロ応力-マクロひずみ応答を表現可能であるといえる。

(4) オンライン計算

作成した代理均質化モデルを用いて、図 3(b) に示す梁状のマクロ構造の有限要素解析を行う。境界条件として、左端の変位を固定し、右端の y_2 軸方向に図 4 に示す強制変位を与える。解析には図 7(a) に示す 8 節点四角形要素からなるメッシュを用いる。また、比較対象として図 7(b), (c) に示す炭素繊維をランダムに配置したメッシュを 6 節点三角形要素を用いて 2 種類作成し、直接解析を実施する。ここで、直接解析とはミクロ構造の非均質性を直接マクロ構造に反映させて行う解析のことである。

図 9 は右端の強制変位が最大となったときの最大主応力図を示している。図より、いずれの解析ケースにおいても応力が左下に集中していることを確認できる。また、図 8 は各ケースにおける自由端の鉛直方向の荷重-変位曲線を示している。まずグラフから、Direct analysis 1 と 2 の結果が概ね一致しており、直接解析の結果がミクロ構造の寸法に対して収束していることが確認できる。また、代理均質化モデルを使用した解析結果は直接解析と比べて、曲線の傾き、最大値ともに直接解析よりも小さいことが確認できる。このような挙動を示す原因は代理均質化モデルの RBF 補間の精度ではなく、代理均質化モデルを作成するための学習データの特徴が関与していると考えられる。本研究では、学習データを作成する際の NMT において非周期性を許容する制約条件を採用したが、新宅らはこの手法を用いて弾性体の

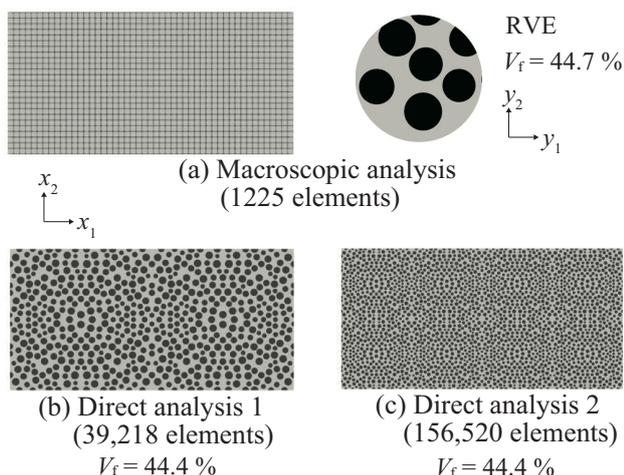


図-7 解析メッシュ

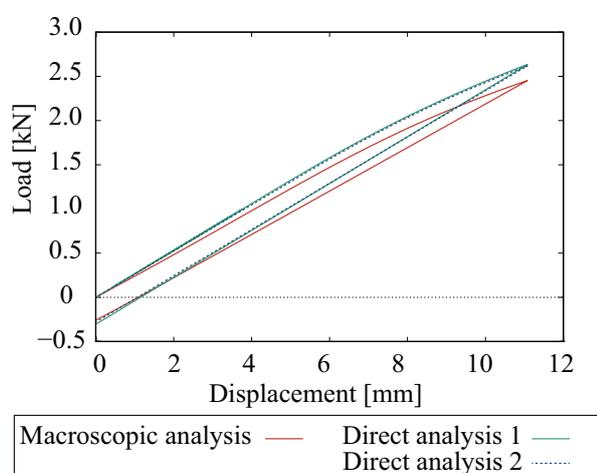


図-8 モデル右端の荷重-変位曲線

複合材料のNMTを実施した結果、得られるマクロ弾性係数が周期境界条件を課した場合よりも0.8%から6%程度小さくなることを報告している[2]。実際、代理モデルの結果は強制変位最大時においてDirect analysis 2の値よりも7%小さく、新宅らの結果と同様の傾向が見られる。このような特徴を有するNMT結果を学習データとして使用したことで、作成した代理均質化モデルに剛性の低下が反映され、荷重-変位曲線が直接解析を下回ったと考えられる。したがって、代理均質化モデルと直接解析の結果の誤差を抑制するためには、制約条件そのものを改良する必要があるが、これらは今後の課題としたい。

5. 結論

本研究では、弾塑性材料からなる非周期的なマイクロ構造を有する複合材料の代理均質化モデルを用いたマルチスケール解析手法を提案した。具体的には、まず繊維強化樹脂のCTスキャン画像から非周期性を有するRVEモデルを作成し、様々なマクロひずみを与えて非周期性を許容するNMTを行った。次に、得られたマクロ応力-マクロひずみ関係のデータにRBF補間を

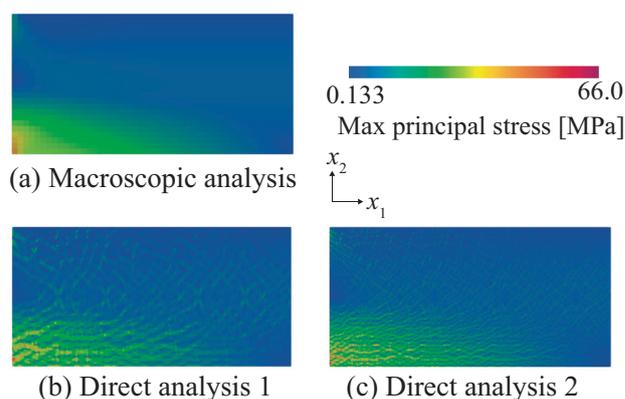


図-9 強制変位が最大のときの最大主応力分布

適用し、代理均質化モデルを構築した。そして、代理均質化モデルの精度検証を行ったあと、マクロ問題として梁の荷重/除荷解析を行い本手法の妥当性を検討した。その結果、代理均質化モデルはNMTの結果と同等のマクロ応力-マクロひずみ応答を表現可能であることが確認できた。一方で、代理均質化モデルを用いたマクロ解析の荷重変位曲線は直接解析の結果を下回ることが確認された。この原因としては本研究で採用したNMTの境界条件が影響していると考えられるため、今後はその解決策を講じる。

参考文献

- [1] 山本晃司寺田賢二郎. 数値材料試験-有限要素法によるマルチスケール解析-. 丸善出版株式会社, Tokyo, 2021.
- [2] 寺田 賢二郎新宅 勇一. 非周期性を許容する均質化法に基づく数値材料試験(マイクロ擾乱変位およびマクロひずみを未知変数とした定式化). 日本機械学会論文集, Vol. 88, No. 909, pp. 22-00049-22-00049, 2022.
- [3] Yosuke Yamanaka, Seishiro Matsubara, Norio Hirayama, Shuji Moriguchi, and Kenjiro Terada. Surrogate modeling for the homogenization of elastoplastic composites based on rbf interpolation. [Preprint](#).
- [4] S. D. Mesarovic and J. Padbidri. Minimal kinematic boundary conditions for simulations of disordered microstructures. *Philosophical Magazine*, Vol. 85, No. 1, pp. 65-78, 2005. Cited By :69.
- [5] M. STONE. Cross-validators choice and assessment of statistical predictions. *Journal of the Royal Statistical Society. Series B (Methodological)*, Vol. 36, No. 2, pp. 111-147, 1974.
- [6] R. Storn and K. Price. Differential evolution - a simple and efficient heuristic for global optimization over continuous spaces. *Journal of Global Optimization*, Vol. 11, No. 4, pp. 341-359, 1997. Cited By :19885.
- [7] 寺田 賢二郎山本 晃司. 数値材料試験データに基づく異方性hill定数の同定. 日本機械学会論文集, Vol. 82, No. 840, pp. 16-00056-16-00056, 2016.

均質化法における接触を伴う周期境界条件のモデル化

Modeling of Periodic Boundary Condition with Contact over the Boundaries on Homogenization Method

木口 裕希¹⁾, 瀧澤 英男²⁾

Yuki Kiguchi and Hideo Takizawa

1) 日本工業大学 大学院 工学研究科 (〒345-5801埼玉県南埼玉郡宮代町学園台4-1, E-mail: 2237011@stu.nit.ac.jp)

2) 博(工) 日本工業大学 基幹工学部 教授 (〒345-5801埼玉県南埼玉郡宮代町学園台4-1, E-mail: htaki@nit.ac.jp)

This study proposes a homogenization analysis model that includes a closing gap. In this method, the flexible membrane elements are placed in the gap, and periodic boundary conditions are applied to these membrane elements. This method can be easily applied to general-purpose codes. To verify the fundamental functions of the proposed model, compaction analyses of spherical particles arranged in 2 types of cubic lattice are carried out. The results of the analyses using conventional symmetry conditions are used as reference solutions. The analysis results using the unit cell modeled by the proposed method are compared with the reference solutions. The results of the proposed model agree with reference solutions.

Key Words: Homogenization, Contact, Membrane, Periodic boundary condition, Particle compaction

1. 緒言

連続体力学における構成則は、力学的性質を特徴づける材料の微視的構造に従い、それぞれ異なる関数で定義される。例えば、金属結晶であれば、光学顕微鏡レベルで観察可能な結晶粒の向きや大きさと、その下部構造である原子レベルの転位の力学によって支配される。このような、原子レベルの力学現象を記述するためには、連続体力学とは異なる力学体系を導入する必要がある。一方、繊維強化複合材料のように、単一材料での材料特性が、何らかの構成式で適切に記述できるのであれば、これらの複合体としてのマクロ特性は、二つ以上の材料の幾何学的な複合形態(モルフォロジー)によって決定される。材料間の接合界面で強い拘束(変位の連続性)が仮定できる場合は、純粋に力学的な問題として、均質化法によりマクロ特性を導出することができる。

均質化法[1]は、微視的な不均質構造をもつ固体のマクロ特性を導出する解析方法であり、複合材料を中心として広く産業上の応用が進んでいる。均質化法解析では、ユニットセルに対して適切な周期境界条件を設定することで、任意の変形状態または応力状態を付与できる。このため、物理的な制約を受ける現実の材料試験よりも、はるかに広範な試験条件の設定が可能である。

繊維強化樹脂のように、下部構造において内部がいくつかの固体材料で満たされており、間隙がない場合、周期境界条件は容易に設定できる。あるいは、間隙があっても、間隙が閉空間になっている場合、周期境界と間隙が重複しないようにユニットセルを定義できれば問題は生じない。しかし、周期境界と間隙が重複し、かつ、周期境界を跨いで接触が生じる場合は、ユニットセル解析において、

かなり複雑な例外処理が必要となる[2]。

このような微視的構造の間隙において周期境界と接触条件が重複するような問題は、繊維の織物や編物の変形、低密度多孔質体の大変形問題、粒子の流動・圧密問題などで生じる。本研究では、このような問題に対する均質化法解析の汎用化・簡略化を目的として、金属粉末粒子の圧密挙動の解析を例に、膜要素による周期境界条件のモデル化を提案する。

2. 問題の所在

(1) 個別要素法とのすみわけ

粉末のような小さな離散粒子の集合体を解析する場合、個別要素法(DEM: Discrete Element Method)が用いられる[3, 4]。個別要素法は、個々の粒子の相対的位置の大きな変化を主な解析対象としている。従って、個々の粒子の変形は考慮されず、粒子は基本的に剛体として扱われる。このため、粒子間の相互作用については、接触時は粒子間のわずかな貫通を許容し、接触面における法線方向と接線方向の特性を粘弾性モデルや非線形バネでモデル化する。つまり、粒子間の相互作用を、粒子の材料特性と表面特性が混在した、解析上の現象論的パラメータとしてモデル化する。これにより、非常に効率的に多数の粒子の流動現象を解析することが可能となる。

以上のように、個別要素法では粒子の相互作用のモデルおよびパラメータを現実との合わせ込みにより決定する作業が必要であり、また、粒子そのものの材料特性の影響を陽な形で導入することができない。これに対して、本研究では、有限要素法を用いて、材料構成則が定義された粒子そのものの変形を解析することを目的とする。

(2) 周期境界条件と接触条件の重複

固体の均質化法解析では、ユニットセルの固体部分を有限要素に離散化し、ユニットセルの外周の節点に周期境界条件を設定する。よって、ユニットセルの外周に間隙を含む場合、節点の存在しない間隙空間には周期境界条件を設定することができない。この間隙は、圧密のような変形の進行によって固体間の接触が生じると、閉塞する。しかし、間隙には周期境界条件が設定されていないため、接触による荷重あるいは拘束を対応する周期境界へ伝達することができず、適切な解析とならない。

この問題を解消するためには、周期境界を跨いで生じる固体同士の接触を、一般的な接触とは別に例外として処理する必要がある。煩雑ではあるがロジックは明確な処理なので、in-houseコードであれば、このような周期境界を跨ぐ接触条件を記述することは不可能ではない。しかし、一般の汎用コードにこの処理を組込むことは、かなり煩雑である。

本研究では、一般の汎用コードにおいて、ユニットセルの外周の間隙に、接触条件と両立できる周期境界条件の設定方法を提案する。

3. 膜要素による接触条件の伝達

(1) 提案モデルの基本概念

図-1に本研究で提案する膜要素による接触条件の伝達モデルを二次元の模式図で示す。簡単のため、図-1(a)に示すように同一形状の粒子が初期状態では二次元で格子状に整列していると仮定する。整列している粒子構造にマクロな体積収縮とゆがみ変形を加えると、それぞれの粒子は、隣接する粒子同士の相互接触により圧縮とせん断が同時に作用して変形が進行する。ここで、整列している粒子から、図-1(b)のようにひとつの粒子をユニットセルとしてモデル化する。この粒子は圧密により、間隙を介して上下左右に配置されている「自身と等価な粒子」に接触して変形する。こうした接触を伝達するために、提案モデルでは、この間隙に膜要素（接触膜もしくは周期境界膜）を配置する。この膜要素には粒子との接触条件を定義すると同時に、周期境界条件を設定する。こうすることで、間隙を介した粒子同士の接触を疑似的に表現する。このとき、膜要素の剛性を解析対象の粒子に比べて十分小さく設定することで、膜要素を力学的に透明な状態とする。

このモデルにより、以下のような挙動を解析することができる。図-1(b)に示すように粒子の右上の節点Aが、膜要素aに接触すると、膜要素aは周期境界条件によって、等価な変形挙動が規定される膜要素a'に変位を伝達する。伝達した変位により、膜要素a'と粒子の右下の節点Bが接触する。このとき、粒子表面の節点Aと節点Bは直接接触していないが、周期境界条件が設定された二つの膜要素aおよびa'が仲介することで接触条件を伝達する。つまり、何も

Node A $\xleftrightarrow{\text{Contact}}$ Mem. a $\xleftrightarrow{\text{Periodic B.C.}}$ Mem. a' $\xleftrightarrow{\text{Contact}}$ Node B

のような周期境界条件を跨いだ接触条件の伝達をモデル化する。

(2) 周期境界条件の設定方法

本研究では、非線形有限要素解析コードMarcを用いる。以下に、Marcにおける周期境界条件の組み込み方法を記載する。なお、これと同等の機能は、ほぼすべての汎用コードで利用可能である。

周期境界上の膜要素の節点変位 $\{u\}$ は以下の式で表される。

$$\{u\} = [S_\varepsilon]\{\varepsilon\} + [S_\gamma]\{\gamma\} + [I]\{u^*\}$$

ここで

$$[S_\varepsilon] = \begin{bmatrix} X_1 & 0 & 0 \\ 0 & X_2 & 0 \\ 0 & 0 & X_3 \end{bmatrix}, \{\varepsilon\} = \begin{Bmatrix} \varepsilon_{11} \\ \varepsilon_{22} \\ \varepsilon_{33} \end{Bmatrix}$$

$$[S_\gamma] = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} X_2 & 0 & X_3 \\ X_1 & X_3 & 0 \\ 0 & X_2 & X_1 \end{bmatrix}, \{\gamma\} = \begin{Bmatrix} \gamma_{12} \\ \gamma_{23} \\ \gamma_{31} \end{Bmatrix}$$

$$[I] = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \{u^*\} = \begin{Bmatrix} u_1^* \\ u_2^* \\ u_3^* \end{Bmatrix}$$

である。 $\{\varepsilon\}$ および $\{\gamma\}$ は、ユニットセル全体に与える垂直ひずみおよびせん断ひずみ（いずれも公称ひずみの定義）を、 X_i は周期境界膜上の節点の初期座標をそれぞれ示す。また、 $\{u^*\}$ は周期境界膜上の対応する等価な節点で共通の擾乱変位を示す。

周期境界条件の定義には、Marcのユーザサブルーチンuformsnを用いる。Tyingを用いて、従属自由度として周期境界膜上の節点を、独立自由度として $\{\varepsilon\}$ 、 $\{\gamma\}$ および $\{u^*\}$ を指定し、ユーザサブルーチンで各Tyingに対して、以下の行列 $[S]$

$$[S] = [[S_\varepsilon], [S_\gamma], [I]]$$

を設定する。

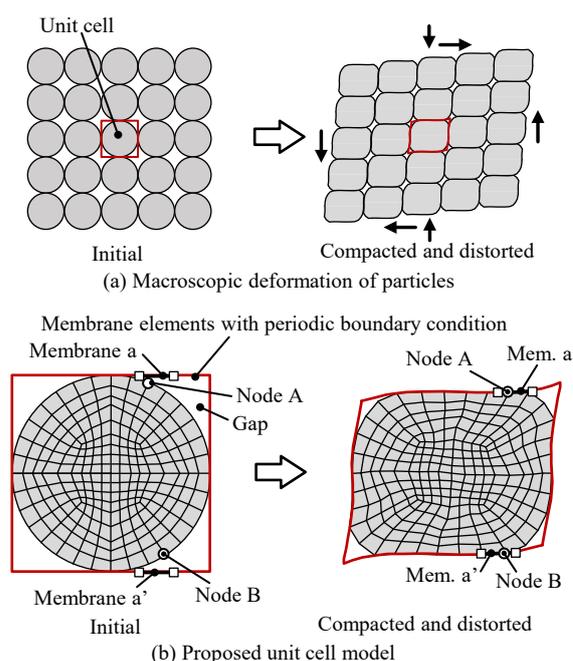


図-1 周期境界膜モデルの二次元模式図

なお、周期境界膜に設定する要素には、解析では、膜要素ではなくシェル要素を用いる。シェル要素の曲げ剛性は今回の解析の意図からすれば不要だが、シェル要素は膜要素に比べて解析機能が充実しており、使用実績も多く、信頼性が高い。このため、十分に薄い厚さを設定した薄肉シェル要素を、膜要素の代替として利用する。このシェル要素は弾性体として定義する。また、圧密の進行とともに接触膜に座屈（しわ）が生じないように、シェル要素には十分大きな初期張力を付与する。なお、実際に使っている要素はシェル要素だが、本文では、機能的な意味で膜要素と呼称する。

4. 接触膜法の数値解析的検証

(1) 検証方法

本章では、提案した接触膜法の基礎的な妥当性を、信頼できる参照解との比較により検証する。接触膜法の基本動作の検証として、立方格子状に配置した球状粒子に対して、垂直ひずみのみによる圧密解析を行う。このような単純な圧密条件であれば、変形は鏡面対称となるため、汎用コードの標準機能である対称境界条件で同様の解析が可能である[5]。この対称境界条件による解析を信頼できる参照解として、提案モデルを検証する。ここでの検証は、V&Vの枠組みでは提案手法のCode to Code Verificationを意味する。

(2) 解析条件

表-1に粒子の材料モデルを示す。粒子は球体としてモデル化し、材料モデルはMisesの降伏条件に従う線形硬化弾塑性体とした。検証のための単純問題として、初期の粒子配置を、面心立方格子 (FCC) および体心立方格子 (BCC) とする。

接触解析手法については、対称境界条件 (対称面) を使った対称モデルではSegment to Segmentモデルを、提案手法を使った接触膜法モデルでは膜要素をマスター面としたNode to Segmentモデルをそれぞれ適用した。

膜要素を力学的に透明な膜とするためには、膜要素は可能な限り薄い厚さと低いヤング率を持つことが望ましい。ここでは、解析の安定性も考慮して、膜の厚さは球状粒子の半径の1/10000、ヤング率は粒子のヤング率の3/4とした。また、接触膜には750MPaの面内等二軸応力を初期張力として付与している。摩擦係数はCoulomb摩擦で $\mu=0.25$ とした。

接触膜法モデル (提案モデル) および対称モデル (参照解) の初期形状を図-2に示す。接触膜法モデルにおいて、球状粒子を覆う接触膜の形状は、FCC配置では菱形十二面体、BCC配置では切頂八面体になる。また、対称モデルでは格子の1/8領域を解析対象とする。

各モデルに対する圧密条件を図-3に示す。図のように、立方格子の垂直方向から一軸圧縮、等二軸圧縮および等三軸圧縮の公称ひずみを与える。

表-1 粒子の材料モデル

Young's modulus E /MPa	1000
Poisson's ratio ν	0.3
Flow curve Y /MPa	$1 + 0.5\varepsilon^p$
Coefficient of friction μ	0.25

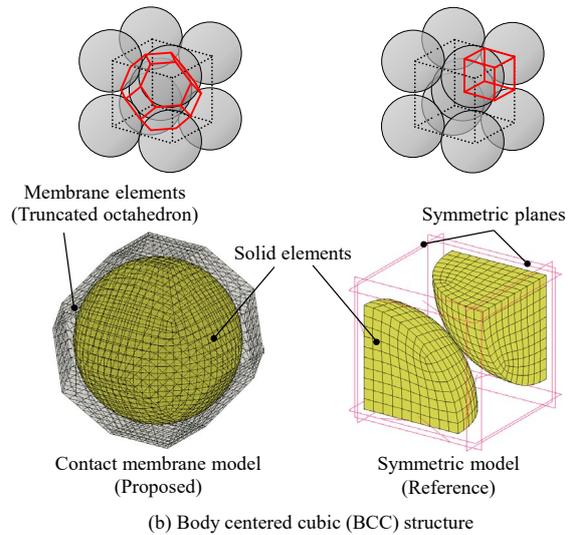
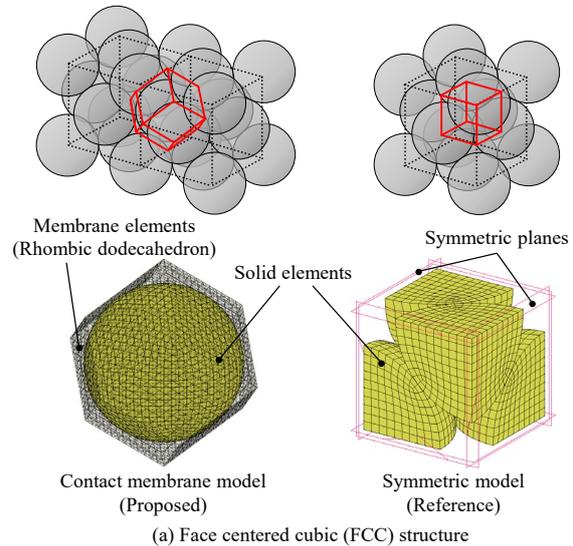


図-2 接触膜法モデルと対称モデル

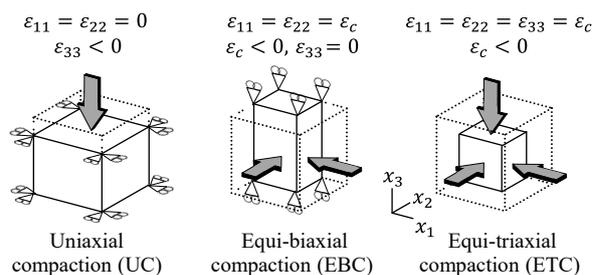


図-3 圧密解析のマクロひずみ条件

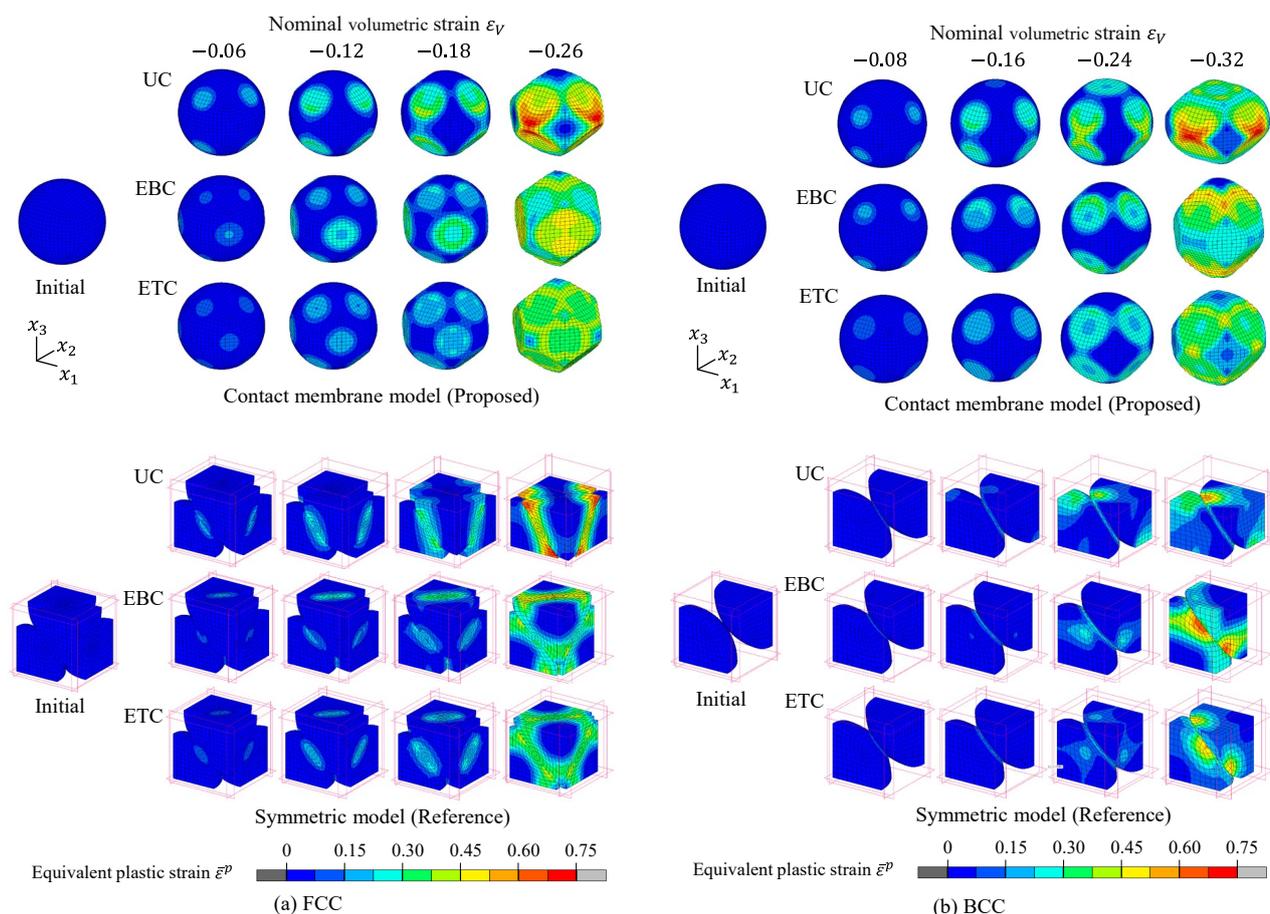


図-4 圧密解析における変形状および相当塑性ひずみ分布の参照解との比較

(3) 検証結果

図-4に、各圧密条件における、接触膜法モデルおよび対称モデルの変形の様子を示す。図では接触膜を非表示にし、変形体には相当塑性ひずみ ε^p の分布を示す。

提案した接触膜法モデルでは、球状粒子は周期境界膜との接触により押し潰され、疑似的な粒子間(周期境界膜を介して対応する粒子の反対側の面)の接触により圧密が進行している。この変形の様子は、参照解である対称モデルの変形の様子と対応している。相当塑性ひずみの値については、完全な一致にはならないが、分布状態はよく対応している。また、図中では省略しているが、接触膜法モデルの周期境界膜は、座屈が生じることなく、圧密と共に収縮している。

図-5に各圧密条件における公称圧密応力 σ と公称体積ひずみ ε_V の関係を示す。ここで、接触膜法モデルについては、接触膜に付与している初期張力の影響を取り除いた値を示している。

いずれの粒子配置および負荷条件においても、接触膜法モデルと対称モデルの公称圧密応力はよく一致している。また、初期状態での粒子の空間充填率は、FCC配置で74%、BCC配置で68%であるため、これに対応する体積圧縮率(FCCで $\varepsilon_V = -0.26$ 、BCCで $\varepsilon_V = -0.32$)で真密度に達する。これ以降も圧縮を加えると、粒子そのものの体積

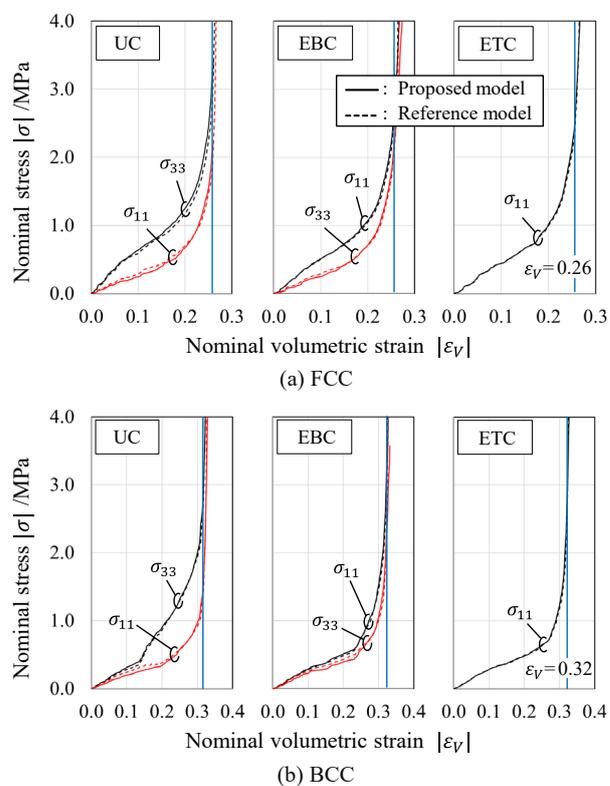


図-5 圧密圧力・公称体積ひずみ関係における比較

変化が生じるため公称圧密応力が垂直に立ち上がる。しかし、いずれのグラフにおいても、この変化は、対応する公称体積ひずみよりも、やや大きな値で生じている。これは、離散化および接触による誤差が原因である。この誤差は、接触膜法モデルと対称モデルのいずれの結果においても確認できるため、本検証では問題ないと判断する。

ここでは、垂直ひずみに限定した条件での解析を示した。限定条件下ではあるものの、本研究で提案した接触膜法モデルによる粒子圧密解析の結果は、汎用コードの標準機能で解析した対称モデルの解析結果とほぼ一致した。以上より、接触膜法モデルの基礎的な妥当性が検証できた。

5. せん断変形を含む圧密解析（参考解析）

前章までの解析例では、鏡面対称条件しか設定できない参照解に条件を合わせるために、接触膜法モデルに対しても垂直圧縮ひずみのみを与えた。本研究で提案した接触膜法では、通常の均質化法と同様に、せん断ひずみを含む任意のひずみ履歴をモデルに負荷することができる。

図-6に、FCCおよびBCC配置の球状粒子に対して、接触膜法を用いて、圧密変形とせん断変形を同時に与えた場合の解析結果を示す。与えたひずみの比は、

$$\varepsilon_{11} : \varepsilon_{22} : \varepsilon_{33} : \gamma_{12} : \gamma_{23} : \gamma_{31} = -2 : -2 : -2 : -1 : -1 : 0$$

である。図より、粒子が圧密されながらせん断変形する解析が可能であることがわかる。

冒頭に述べたように粉末粒子そのものの変形が十分に小さく、粒子同士の相対位置関係が大きく変化するような場合は、個別要素法による解析が適切である。一方、圧密過程の後半では、粒子同士の相対位置変化が小さく、粒子同士の中心間距離が近接する。このような場合は、今回提案した手法により、材料特性や摩擦条件を陽に定義した解析が有効である。

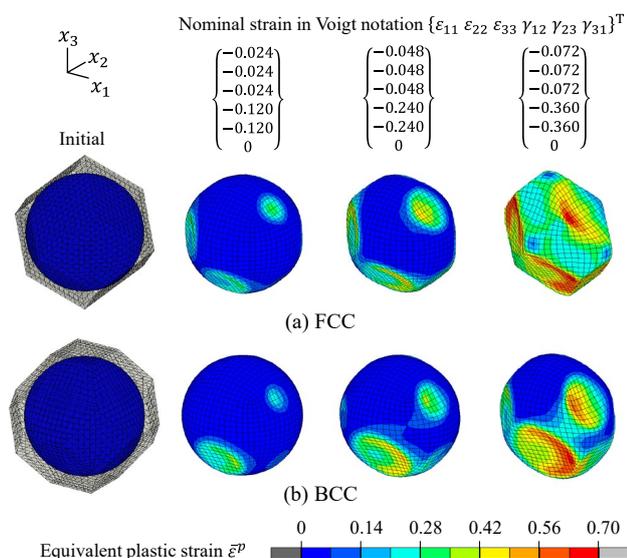


図-6 接触膜法によるせん断変形を含む圧密解析例

今後、今回の提案モデルを拡張し、粉末圧密構成式の精緻化や織物繊維基材の変形解析に取り組む。

6. 結 言

- (1) 均質化法解析において物体のない間隙に周期境界条件を設定する方法として、間隙に力学的に透明な膜要素を配し、この膜要素に周期境界条件を設定する手法を提案した。
- (2) 提案手法の具体例として、面心立方格子および体心立方格子に配置した球状粒子の圧密問題を取り上げ、対称境界条件で解析可能な負荷条件で参照解と比較した。この結果、ほぼ同一の結果が得られることを示した。
- (3) 提案した接触膜法では、圧密と共にせん断変形が生じる場合も解析が可能であり、この手法であれば粒子の材料特性や形状を直接考慮した圧密解析が可能である。

謝辞: 本解析の実施にあたり、Hexagon MI Japanの穴山明寛氏に有益な助言を頂いた。謝意を表する。

参考文献

- [1] 寺田賢二郎, 他: 数値材料試験, 丸善出版, 2021.
- [2] 西紳之介, 他: 繊維束の接触・摩擦を考慮したドライファブリックのアイソジオメトリック均質化解析, 日本機械学会論文集, Vol.84, DOI: 10.1299/transjsme.17-00554, 2018.
- [3] 金子賢治, 他: 非線形均質化理論に基づく粒状体マルチスケール解析法の開発とその応用, 土木学会論文集, No.680/III-55, pp.183-199, 2001.
- [4] 酒井幹夫, 他: 粉体の数値シミュレーション, 丸善出版, 2012.
- [5] Harthong, B. et al.: Modeling of high-density compaction of granular materials by the discrete element method, Int. J. of Solids Struct. Vol.46, pp.3357-3364, 2009.

OS11 マルチスケール解析と材料モデリング

[B-13] OS11 マルチスケール解析と材料モデリング (3)

座長:高橋 昭如(東京理科大学)

Fri. Jun 2, 2023 3:00 PM - 4:15 PM Room B (1F Conference Room 102)

[B-13-01] SPHによる弾塑性マルチスケール解析の一方向分離型解法

*全 世原¹、呂 学龍¹、松井 和己¹、山田 貴博¹ (1. 横浜国立大学)

3:00 PM - 3:15 PM

[B-13-02] 隣接ボイド距離が延性損傷に与える影響のマルチスケールモデリングによる評価

*伊本 咲矢¹、松井 和己¹、山田 貴博¹ (1. 横浜国立大学)

3:15 PM - 3:30 PM

[B-13-03] FTMP場の理論に基づく多結晶 Bauschinger効果モデリング

*長谷部 忠司¹、橋本 泰生²、塚本 巧海³ (1. 神戸大学、2. IHI、3. 神戸大学大学院)

3:30 PM - 3:45 PM

[B-13-04] FTMP場の理論に基づく疲労モデリング

*長谷部 忠司¹、尤 心平²、武部 亮裕² (1. 神戸大学、2. 神戸大学大学院)

3:45 PM - 4:00 PM

[B-13-05] 押し込み試験による局所力学特性の推定

*渡邊 育夢^{1,2}、陳 達徳^{1,3}、劉 大元^{2,1} (1. 物質・材料研究機構、2. 筑波大学、3. 名古屋大学)

4:00 PM - 4:15 PM

SPHによる弾塑性マルチスケール解析の一方向分離型解法

Development of elastic-plastic decoupling multi-scale simulation method using SPH

全世原¹⁾, 呂学龍²⁾, 松井和己³⁾, 山田貴博⁴⁾

Sewon JEON, Xuelong LYU, Kazumi MATSUI and Takahiro YAMADA

1) 横浜国立大学 環境情報学府情報環境専攻 (〒240-8501 横浜市保土ヶ谷区常盤台 79-7, E-mail: jeon-sewon-yk@ynu.jp)

2) 博(工) 横浜国立大学 環境情報研究院 (〒240-8501 横浜市保土ヶ谷区常盤台 79-7, E-mail: lu-xuelong-tc@ynu.ac.jp)

3) 博(工) 横浜国立大学 環境情報研究院 准教授 (〒240-8501 横浜市保土ヶ谷区常盤台 79-7, E-mail: kzm@ynu.ac.jp)

4) 学博 横浜国立大学 環境情報研究院 教授 (〒240-8501 横浜市保土ヶ谷区常盤台 79-7, E-mail: tyamada@ynu.ac.jp)

The purpose of this study is to develop a decoupling multi-scale method using Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH) for analysis of elastic-plastic deformation which can also deal with Severe Plastic Deformation (SPD). It is well known that Finite Element Method (FEM) has weakness in simulating SPD such as Equal Channel Angular Pressing. If FEM is used to handle elastic-plastic materials, which are highly dependent on deformation history, the meshes of material get tangled and it leads to stopping computation. To overcome this problem, the mesh of material should be re-meshed and historical data must be mapped for several times. However, repeated enforcing of such operation results in accumulation of computational error. On the other hand, SPH is a meshless method, and it preserves historical deformation data for every individual particle. In this paper, a decoupling multiscale method will be introduced, which is composed of macro-scale simulated by SPH, micro-scale simulated by FEM.

Key Words : *Micro-Macro Analysis, Decoupling, Smoothed Particle Hydrodynamics, Severe Plastic Deformation*

1. はじめに

現在、SPH は主にコンピュータを用いた流体解析に使用されていて、材料や構造などの解析にも適用が広まっている。SPHは有限要素法と違い、メッシュを使用せず、パーティクルを置いて近似を行うメッシュレス手法であるため、ECAP(Equal Channel Angular Pressing)加工のようなSPD(Severe Plastic Deformation)を伴う現象のように、FEMではメッシュが潰れてしまうような問題に強みを発揮することが期待されている。

FEMのメッシュつぶれ(凸性の喪失)による計算停止を回避する方法として、リメッシュなどの手法も提案されているが、弾塑性材料のような履歴依存性の強い場合には、材料レベルの変形履歴を更新後のメッシュにマッピングさせる必要がある。さらに、このマッピングにおいて何らかの近似が介在することになるため、大きな変形を追跡するために何度も繰り返すことは計算誤差が累積することになる。

これに対して、パーティクルそのものに変形履歴を関連付けられるSPHでは、このような煩雑さや解析精度の低下から解放されることが期待される。本研究ではSPHの特徴を活かして、SPDにも対応できる弾塑性マルチスケール解析を実現するために、マクロSPH→マイクロFEMという一方向分離型解法の開発を目標とする。

2. 理論

(1) 非線形マルチスケール解析の2変数境界値問題

マルチスケール解析においてはマイクロ・マクロスケールの2変数境界値問題を解く必要があると知られ、一体型解法と分離型解法と扱いが異なる。一体型解法はFEMの場合、すべての積分点において、2変数境界値問題を同時に解くため、計算コストが非常に高いことが知られている。それに比べ分離型解法ではマイクロモデルの数値材料試験を行い、マクロモデルの構成則を仮定することでマクロスケールとマイクロスケールの解析を分離し、近似されたマクロの変形履歴をマイクロの境界条件として用いる。これによって上記の計算コストの問題が回避できる[3]。

(2) 分離型解法と一方向分離型解法

ここで、分離型解法の手順^[1]について述べる。

①: 解析対象に用いられる適切なマイクロモデルを用意し、必要なパラメータを得るための数値材料試験を行う。数値材料試験によりマクロ材料のパラメータを同定する。これを均質化と呼ぶ。

②: ①によって求められたパラメータをマクロスケールの材料とし、マクロスケールの挙動を近似的に表現できるように構成則を仮定する。これにより作られたマクロモデルを近似構成モデルという。

- ③: マクロスケールの解析を行い, 変形履歴を抽出する.
- ④: 抽出した変形履歴をマイクロ構造解析の境界条件として入力し, ミクロモデルの解析を行う. これを局所化プロセスと呼ぶ.

しかし, 本研究ではマクロスケールの解析対象である ECAP 加工が物性値に関わらず材料に一樣な変形を与える特徴がある. これを考慮し, 現段階において均質化プロセスは行わず, 任意のパラメータを与えてから SPH によりマクロスケールの解析を行う. マクロスケールの変形に相当するマイクロ構造の変形を観察するため, マクロの変形履歴を抽出する. ここで, すべてのパーティクルにおいてマイクロモデルの解析を行うのは計算コストが高くなる. そのため, マクロスケールのひずみを確認し, ミクロ構造を観察するいくつかのパーティクルを決める. 最後に, 選択したパーティクルの変形履歴をマイクロ構造に与え, 有限要素解析を行い, その変形を観察する. このような解析過程を一方方向分離型解法と呼び, そのフローチャートを Fig.1 に示す.

(3) CSPHについて

本研究で扱う解析対象が連続体であることより, ミクロ構造に与える変形履歴は変形勾配とした. しかし, 既存の SPH では変形勾配を定義することに難しさがある. ここで, Bonetら^[2]により定式化された CSPH での変形勾配を用いることとした. この CSPH は既存の SPH で用いられるカーネル関数にラグランジュ補正をかけることでパーティクルの運動量を保存するようにしたものである.

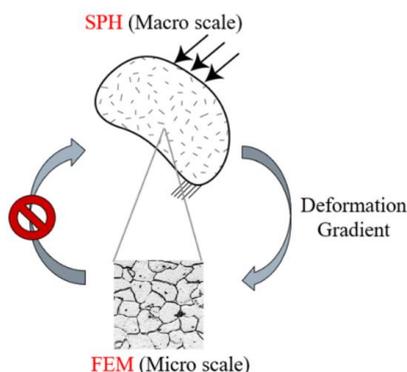


Fig.1 Flow of decoupling multi-scale method (one way)

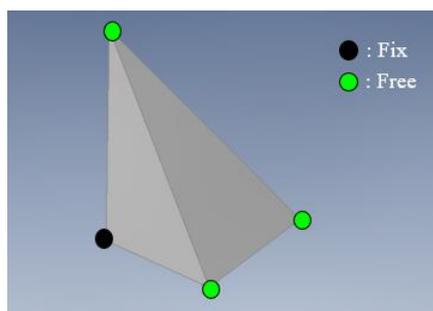


Fig.2 Virtual macro-scale model to input deformation gradient

(4) 変形勾配の入力について

上記でも述べたよう選択したマクロスケールのパーティクルの変形履歴をマイクロ構造に与えることで有限要素解析を行う. これはマルチスケール解析の局所化プロセスに相当する.

決めたパーティクルのステップ毎の変形勾配を作成したマイクロ構造に与えると, マクロの解析結果に応じたマイクロ構造の挙動が計算できる. しかし, 局所化プロセスにおいてはマイクロ構造だけの計算はできなかったため, 一体型解法を実装したマルチスケール解析プログラムを用いて解析を行った.

直接変形勾配をマイクロスケールの計算に用いることができなかったため, Fig.2 のような原点固定の直角, 各軸に長さ 1 の辺を持つ四面体要素 1 つの仮想のマクロモデルを用意する. その後, (3) で得られた CSPH の解析結果より変形勾配を仮想のマクロモデル初期配置の座標にかけて初期座標の差をとる. すなわち, 四面体モデルの変位を求める. このような作業で得られたすべての変形勾配に対して行うことで, 一体型マルチスケール解析プログラムの変位制御の入力値とする. この過程を式 (1) に示す.

F: Deformation gradient, **I:** Coordinates from initial configuration of tetrahedral model

$$F = \begin{bmatrix} \frac{\partial x}{\partial X} & \frac{\partial x}{\partial Y} & \frac{\partial x}{\partial Z} \\ \frac{\partial y}{\partial X} & \frac{\partial y}{\partial Y} & \frac{\partial y}{\partial Z} \\ \frac{\partial z}{\partial X} & \frac{\partial z}{\partial Y} & \frac{\partial z}{\partial Z} \end{bmatrix}, \quad I = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$FI - I = \begin{bmatrix} \frac{\partial x}{\partial X} - 1 & \frac{\partial x}{\partial Y} & \frac{\partial x}{\partial Z} \\ \frac{\partial y}{\partial X} & \frac{\partial y}{\partial Y} - 1 & \frac{\partial y}{\partial Z} \\ \frac{\partial z}{\partial X} & \frac{\partial z}{\partial Y} & \frac{\partial z}{\partial Z} - 1 \end{bmatrix} \quad (1)$$

$$= [\{\text{disp1}\}, \{\text{disp2}\}, \{\text{disp3}\}]$$

3. モデルの作成

(1) マクロモデルの作成

一方方向分離型解法を用いて解析を行うため, Fig.3 のような ECAP 加工のマクロモデルを用意した. 押し方向は $-z$, 出し方向は $+y$ 方向である. その後, SPH を用いて解析を行う事前作業として離散化し, パーティクルにおいて近似を行った. また, ECAP 加工の場合, 加工後のひずみの理論値が存在するため, 今回は応力の評価を行わず, ひずみだけを評価し, ひずみ履歴の違うパーティクルを選択する.

(2) ミクロモデルの作成

ECAP 加工には金属材料が用いられるため, 解析対象である金属のマイクロ構造とみなせる多結晶モデルが必要である. また, ミクロ構造の解析にはマイクロ構造内のつり合い式を用いて行われる. そのため, ミクロ構造のモデルには 3 軸 (x, y, z) において同様な節点, 要素を持つ必要があり, このような特性を周期性という.

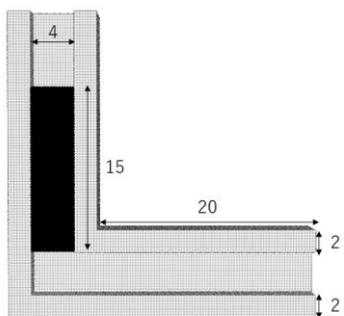


Fig.3 ECAP model for SPH simulation

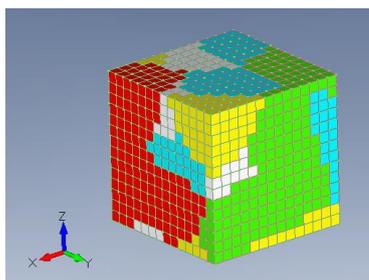


Fig.4 Poly-crystalline model(30 grains)

本研究では Neper というプログラムを用いて結晶粒 30 個が含まれたモデルを作成し、5 パターンの異なるパラメータセットを割り振った。その後、Fig.4 のようなボクセルメッシュモデルを作成することで強制的に周期性を持たせた。

4. 解析結果

まず、マクロスケールの解析結果を Fig.5 に示す。また、マクロスケールの変形履歴に従ったマイクロ構造の挙動を確認するため、ひずみ履歴の違うパーティクル 4 つを任意で選択する。選択したパーティクルのおおよその位置を Fig.6 に示す。また、それらのひずみの履歴を Fig.7 に示す。Fig.8 に 50, 80, 100 ステップでのマイクロ構造の有限要素解析結果を示す。ここで、せん断変形は 50 ステップ頃から生じる。

各図の左側はマクロモデルの金属材料の各ステップでの変形の様子を表して、右側は各ステップでのマクロの変形を反映するマイクロ構造の変形挙動を表す。

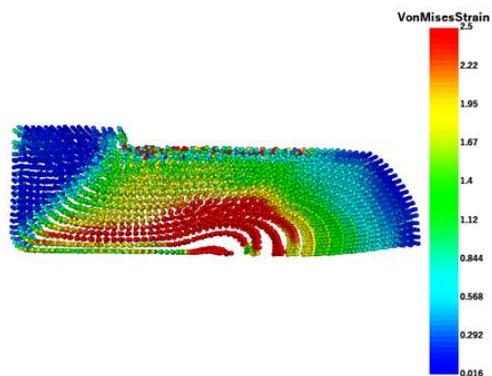


Fig.5 Macro-scale simulated using CSPH

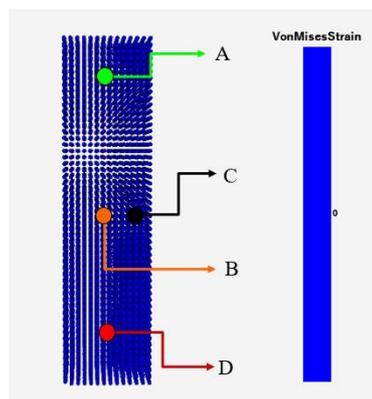


Fig.6 Approximate position of selected particles

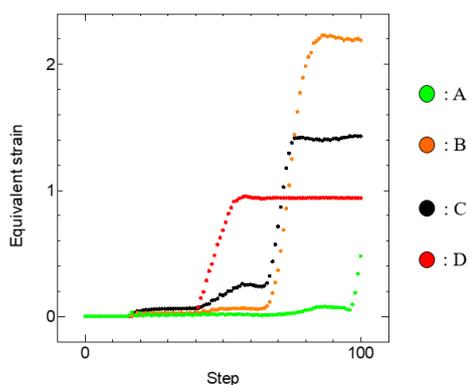


Fig.7 Historical data(Equivalent strain) of selected particles

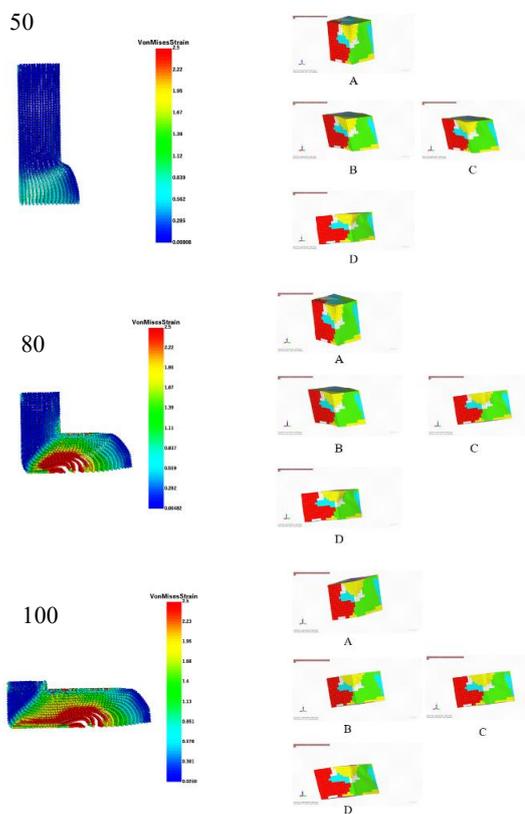


Fig. 8 Microstructures of selected particles of each step

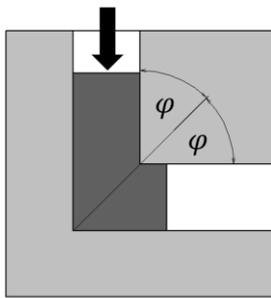


Fig9. Figure to explain theoretical modeled function of ECAP

ここで、ECAP加工後の相当ひずみの理論値を式(6)とFig.9に示す。本研究で設定したマクロモデルの形状より、ひずみの理論値³⁾を求めると、約1.155である。

n: Number of passes, ε : Equivalent strain

$$\varepsilon = n \frac{2}{\sqrt{3}} \cot \varphi \quad (6)$$

マクロスケールにおいてはECAP加工のポイントであるせん断変形は表現できている。しかし、せん断変形が起きた部分での相当ひずみが理論値を上回っていることが観察できる。また、材料の下面に隙間が生じていることが見られる。

ミクロ構造においてもせん断変形が起きていることが確認できるが、回転の影響が少ないと思われる。また、パーティクルAについて述べると、材料を-z方向で圧縮しているため、同様にミクロ構造も-z方向で圧縮されると予想していた。しかし、逆に+z方向で伸びているような変形をすることが見られる。

5. 考察

(1) ミクロスケールの解析について

パーティクルAはマクロスケール上-z軸方向で圧縮されるため、ミクロ構造も同様に-z軸方向で圧縮されると予想したが、+z方向に伸びている。これは、SPHが動解析であって、応力やひずみなどが十分に伝播せず、変形を進行させたためだと思われる。パーティクルAの50, 80, 100ステップでの解析結果をFig.10、マクロスケールでのひずみ伝播が確認できるひずみコンター図をFig.11に示す。また、ECAP加工のシミュレーションで押し出し時間は2秒だったため、押し出し時間と速度の調節が必要だとと思われる。

すべてのパーティクルにおいてせん断変形が表現できていると思われるが、ECAP加工にはミクロ構造の回転が少ないと思われる。おそらく、マクロスケールでの解析で、パーティクルの回転があまり反映できず、すべてをせん断変形として扱ってしまったのではないかと考えられる。

最後に、現段階においては結晶塑性論が適用していないため、今後実装する必要がある。

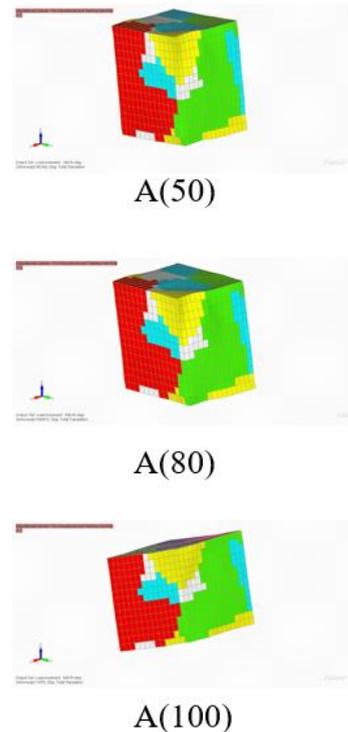


Fig.10 Behavior of particle A's microstructure

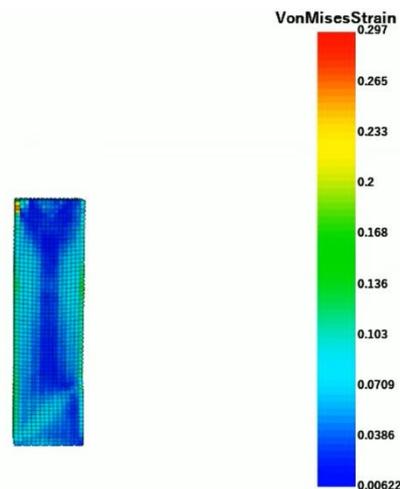


Fig.11 Equivalent strain contour before shear deformation

(2) マクロスケールの解析について

得られた相当ひずみが理論値を上回ることについて述べる。本来、ECAP加工は先端を抑えるが、今回行ったマクロスケールの解析では先端を抑えていないため、相当ひずみが予想より大きくなったと思われる。また、材料下面の隙間が生じていることについても同様な原因が考えられ、境界条件の修正も必要だと思われる。

次に、今回は一方向分離法で、マクロのパラメータ任意で決め、マクロの変形に応じてミクロ構造の挙動を確認したが、両スケールにおいてより正確な材料挙動を得るためには今後均質化プロセスを行う必要がある。

6. 結論

本研究では SPH による一方向分離解法の開発を目的とした。解析対象としては SPD を伴う ECAP 加工のマイクロ・マクロ解析を行った。SPH を用いることで、ECAP 加工のように一般的な有限要素法ではメッシュの潰れにより解析が停止するような大変形問題においても解を導出することができた。また、マクロスケール解析結果を反映するマイクロ構造の変形挙動を確認することで、SPH を用いて一方向分離解法でマイクロ・マクロの解析を行い、SPH を用いた弾塑性マルチスケール解析の可能性を示した。

最後に、ECAP 加工に限らず、SPH が適用できる現象は数多く存在すると考えられる。そのため、本研究で行ったマイクロ・マクロ解析が今後の材料開発に貢献できる可能性を示した。

参考文献

- [1] 渡邊育夢, 寺田賢二郎: ミクロ - マクロ非連成解析による多結晶金属の加工後降伏強度の評価手法, 日本機械学会論文集76巻766号, 2010.
- [2] J. Bonet, T. -S.L. Lok, Variational and momentum preservation aspects of smooth Particle Hydrodynamic formulations. *Computer Methods in applied mechanics and engineering*, Vol. 180, No. 1, pp. 97-115, 1999.
- [3] Sheik Hassan M. "A Review of Severe Plastic Deformation." *International Refereed Journal of Engineering and Science (IRJES)* 6.7 (2017): 66-85.

隣接ボイド距離が延性損傷に与える影響の マルチスケールモデリングによる評価

FE2 Evaluation of the Effect of Distance Between Adjacent Voids on Ductile Damage

伊本 咲矢¹⁾, 松井 和己²⁾, 山田貴博³⁾

Sakuya Imoto, Kazumi Matsui and Takahiro Yamada

¹⁾修(学) 横浜国立大学大学院環境情報学府 (〒240-8501 横浜市保土ヶ谷区常盤台79-7)

²⁾博(工) 横浜国立大学大学院環境情報研究院 准教授(E-mail:kzm@ynu.jp)

³⁾学博 横浜国立大学大学院環境情報研究院 教授 (〒240-8501 横浜市保土ヶ谷区常盤台79-7)

Various papers have pointed out that the distance between micro voids affects the macroscopic damage behavior of materials. In this study, multiscale analysis is used to evaluate the effect of micro voids spacing on macroscopic ductile failure. The macroscopic loading conditions are transformed by the multiscale method. By changing the macroscopic stress direction in FE2 simulations, evaluate the anisotropic responses in macro-scale, which are caused by their microscopic structure. In addition, the effects of micro-void distances are also evaluated in their macroscopic failure behaviors.

Key Words : Damage, Void Growth, Void Adjacent, Multi-scale Simulation, Anisotropic Material

1. はじめに

金属材料における延性損傷の素過程として材料内の微視レベルに存在するマイクロボイドの発生・成長・連結現象が指摘されている[1]. 一般的に損傷解析などで用いられる損傷モデルはボイドの挙動を想定したボイド分率などに代表される損傷変数を導入することで材料の損傷挙動を再現している. また損傷モデルにおいてもボイド同士の間隔や発生頻度については材料の強度に影響を与えることは知られている[2]. そのためボイド同士の間隔やボイドに対する載荷方向を変化させての材料実験が行われているが, 試験装置の制約やマイクロボイドの観察が困難であるため, 数値解析で使用される損傷変数やボイド分率などの損傷“量”と応力状態の関係を定量的に評価することは難しい[3][4].

そこで本研究では, 異なるボイド間距離を有するマイクロモデルを使用したマルチスケール解析を用いて, ボイド間距離に対するマクロの延性損傷を評価する. マルチスケール解析とは, Global-Local 的モデル化手法として工学分野に紹介された数学的均質化法であり, 構造物の巨視的な挙動と非均質性が定義される微視領域での力学現象を数値的に関連づける手法である[5]. 本研究ではマイクロ構造にボイドを直接モデル化してマルチスケール解析を行うことで, 微視領域におけるボイドの変形を直接再現し, ミクロ構造とマクロ応答との関連を定量的に評価する. マクロの載荷方向を変化させることで, ミクロ構造によって生じるマクロスケールにおける異方的な応答について評価を行う. 更に, 異なるボイド間距離を内部に有する3次元セルモデルを用い, 微視ボイド同士の距離がマクロの損傷挙動に与える影響を評価する.

2. 異方性材料への載荷方向の定義

ミクロ構造の構成材料の弾塑性挙動については等方的であることを仮定しているが, ミクロの構造が異方的であるとき, 荷重の載荷方向によってマクロの力学的応答に差異が生じる. そのため本研究では異方性材料を扱うときと同様に, 材料の向きに対する力学的応答で表現し評価を行う. 異方性材料は物理的特性が材料の向きによって異なる材料であり, その向きを表すものとして材料座標軸を定義する. 材料座標軸に対する載荷方向により力学的応答は変わることから, 応力やひずみなどを表すとき, **Fig.1**で示すように, 全体座標系ではなく材料座標軸で表して議論を行うべきである. そのため全体座標系と材料に定義されている座標系の関係を表す方法について述べる. 本研究ではマクロの全体座標系とミクロの座標系の関係を, Z-X-Yオイラー回転角を用いて表す.

はじめに全体座標系を定義する基底ベクトルを, 全体座標系で表記すると以下ようになる.

$$\mathbf{e}_x = \begin{Bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{Bmatrix}_{XYZ}, \quad \mathbf{e}_y = \begin{Bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{Bmatrix}_{XYZ}, \quad \mathbf{e}_z = \begin{Bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{Bmatrix}_{XYZ} \quad (1)$$

Fig.2で示すように, 座標軸を全体座標系のZ軸を中心に θ_z 回転して定義した $X_1Y_1Z_1$ 座標系で, 全体座標系の基底ベクトルを表記すると以下のように表せる.

$$\begin{aligned} \mathbf{e}_x &= \begin{Bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{Bmatrix}_{XYZ} = \begin{Bmatrix} \cos \theta_z \\ -\sin \theta_z \\ 0 \end{Bmatrix}_{X_1Y_1Z_1} \\ \mathbf{e}_y &= \begin{Bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{Bmatrix}_{XYZ} = \begin{Bmatrix} \sin \theta_z \\ \cos \theta_z \\ 0 \end{Bmatrix}_{X_1Y_1Z_1} \\ \mathbf{e}_z &= \begin{Bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{Bmatrix}_{XYZ} = \begin{Bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{Bmatrix}_{X_1Y_1Z_1} \end{aligned} \quad (2)$$

これより、任意のベクトル v_{XYZ} は $X_1Y_1Z_1$ 座標系で、以下のように表せる。

$$v_{X_1Y_1Z_1} = \begin{bmatrix} \cos \theta_z & \sin \theta_z & 0 \\ -\sin \theta_z & \cos \theta_z & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} v_{XYZ} = Q_{\theta_z} v_{XYZ} \quad (3)$$

where. $Q_{\theta_z} = \begin{bmatrix} \cos \theta_z & \sin \theta_z & 0 \\ -\sin \theta_z & \cos \theta_z & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$

次に、 X_1 軸周りに局所座標系を θ_{X_1} 回転して定義した $X_2Y_2Z_2$ 座標系で任意の $v_{X_2Y_2Z_2}$ を表すと、

$$v_{X_2Y_2Z_2} = \begin{bmatrix} \cos \theta_z & \sin \theta_z & 0 \\ -\sin \theta_z & \cos \theta_z & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} v_{XYZ} = Q_{\theta_z} v_{XYZ} \quad (4)$$

where. $Q_{\theta_z} = \begin{bmatrix} \cos \theta_z & \sin \theta_z & 0 \\ -\sin \theta_z & \cos \theta_z & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$

以上より、全体座標系で定義した任意のベクトル v_{XYZ} は $X_2Y_2Z_2$ 座標系で以下のように表せる。

$$v_{X_2Y_2Z_2} = Q_{\theta_z} v_{X_1Y_1Z_1} = Q_{\theta_z} Q_{\theta_{z_1}} v_{XYZ} \quad (5)$$

同様にして、 X_2 軸周りに局所座標系を θ_{X_2} 回転して定義した $X_3Y_3Z_3$ 座標系で任意のベクトル v_{XYZ} を表すと以下のようになる。

$$v_{X_3Y_3Z_3} = Q_{Y_3} v_{X_2Y_2Z_2} = Q_{\theta_{Y_3}} Q_{\theta_{X_2}} Q_{\theta_{z_1}} v_{XYZ} \quad (6)$$

$$\text{where. } Q_{Y_3} = \begin{bmatrix} \cos \theta_{Y_2} & 0 & -\sin \theta_{Y_2} \\ 0 & 1 & 0 \\ \sin \theta_{Y_2} & 0 & \cos \theta_{Y_2} \end{bmatrix}$$

$$Q_{\theta_{Y_3}} Q_{\theta_{X_2}} Q_{\theta_{z_1}} = Q_{\theta_{z_1}\theta_{X_2}\theta_{Y_3}} \quad (7)$$

以上より、全体座標系で定義した任意のベクトルを新たに定義した座標系で定義することができる。全体座標系で定義された任意の2階テンソル P_{XYZ} と4階テンソル C_{XYZ} をそれぞれ、 $Q_{\theta_{z_1}\theta_{X_2}\theta_{Y_3}}$ を用いて新たに定義した $X_3Y_3Z_3$ で表すと、以下の通りとなる。

同様にして、 X_2 軸周りに局所座標系を θ_{X_2} 回転して定義した $X_3Y_3Z_3$ 座標系で任意のベクトル v_{XYZ} を表すと以下のようになる。

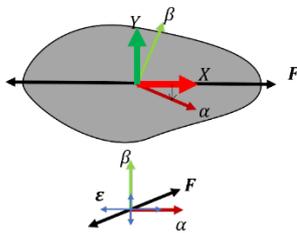


Fig.1 Loading Direction in Material Coordinates

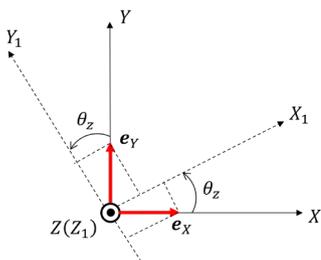


Fig.2 $X_1Y_1Z_1$ -Coordinates in Global Coordinates

Table1 Material Parameters in microstructure

ヤング率	E [GPa]	200
ポアソン比	ν	0.3
初期降伏応力	σ_Y [MPa]	200
加工硬化係数 1	H [MPa]	100
加工硬化係数 2	δ	3
最大降伏応力	σ_Y^∞	800

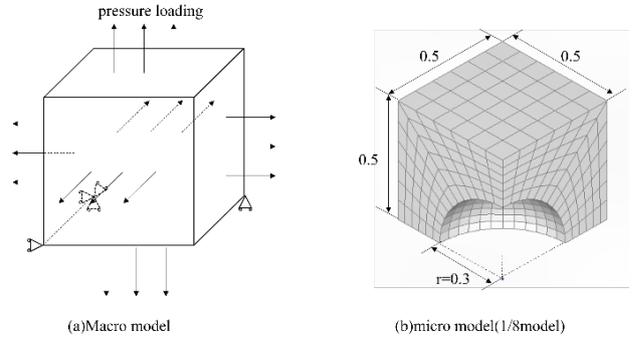


Fig.3 Macro & micro FE models

$$P_{X_3Y_3Z_3} = Q_{\theta_{z_1}\theta_{X_2}\theta_{Y_3}} P_{XYZ} Q_{\theta_{z_1}\theta_{X_2}\theta_{Y_3}}^T$$

$$C_{X_3Y_3Z_3} = Q_{\theta_{z_1}\theta_{X_2}\theta_{Y_3}} Q_{\theta_{z_1}\theta_{X_2}\theta_{Y_3}} C_{XYZ} Q_{\theta_{z_1}\theta_{X_2}\theta_{Y_3}}^T Q_{\theta_{z_1}\theta_{X_2}\theta_{Y_3}}^T$$

これをもとに全体座標系に対する材料座標系を表すことで、材料座標系で応力やひずみを評価する。

3. マルチスケールモデリングを用いた、マクロ強度の载荷方向への依存性

本節では、延性材料内部におけるボイドを直接モデル化し、载荷方向を変化させたときに延性損傷過程における真応力-真ひずみ関係の軟化挙動がどのように変化するかを明らかにすることを目的とする。本節では有効断面積の変化によりマクロの最大応力がどのように変化するか検討する。

(1) ミクロ領域における初期ボイドのモデル化

マルチスケール解析で使用するモデルをFig.3に示す。微視ボイドの成長挙動を表すために球状の空隙を含んだマイクロモデルを用いる。このとき、マイクロ構造に対する载荷方向によって有効断面積が変わり、マクロの最大応力が変化することが考えられる。そのため本章では3次元空間で格子状に等間隔にボイドがならんで含むマイクロモデルに対して、载荷方向を変化させて解析する。

(2) 数値解析結果

Fig.3に示したマクロ・マイクロモデルを作製し、マクロ構造に対して三軸応力状態を与えるマルチスケール解析を実施した。得られたマクロ応力とマクロひずみ、マイクロ構造におけるボイド分率の関係、各特徴点におけるマイクロ構造の変形と相当塑性ひずみ分布をFig.4に示す。

マクロ構造最大応力を迎える前の領域では、マクロの応答は近い応答を示している。加えてボイドの体積分率はどちらも近い値を示している。しかしマイクロ構造の内部では、Fig.4の(a)のように、载荷方向を変化させたモデルにひずみの大きい領域が広く表れている。

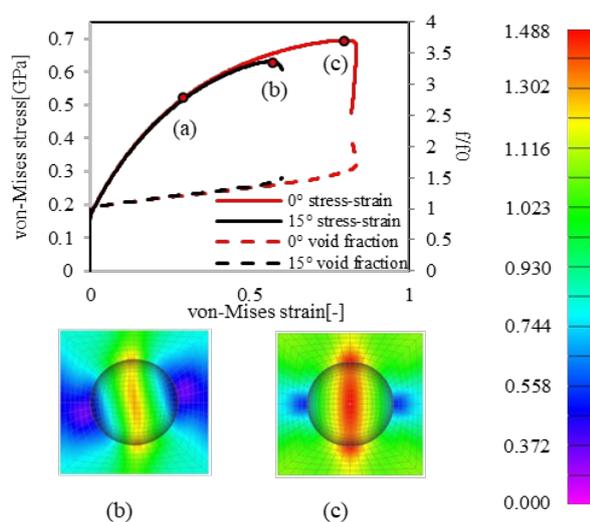


Fig.4 Macroscopic Stress-Strain Curve and Representative Microscopic Strain Distribution

それぞれの荷状態の最大応力におけるマイクロ構造の相当塑性ひずみ分布は、それぞれFig.4の(b), (c)で示すとおりである。座標系を一致させたモデルでは変形が全体的に生じているが、座標系を $\theta_z = 15^\circ$ 回転して定義したモデルでは先ほど応力が集中していた領域に変形が集中している。

以上より、マイクロ構造に対して荷方向を変化させることで有効断面積に変化が生じ、マイクロ構造の変形の局所化が小さいひずみでも起き、マクロの最大応力に差が生じることが確認できた。

(3) 荷方向によるマクロの最大応力の変化

Fig.3のモデルを基本として、マイクロ構造に対する荷方向を $\theta_z = 5^\circ, 10^\circ, 11.125^\circ, 15^\circ, 20^\circ, 22.5^\circ, 30^\circ, 45^\circ$ と定義してマルチスケール解析した。材料特性はTable 1と同様である。荷角度に対するマクロの最大相当応力をFig.5に示す。 $0^\circ \leq \theta_z \leq 15^\circ$ の領域では変化させる角度が大きくなるほど最大応力が小さくなる傾向が見える。しかし、 $\theta_z = 20^\circ$ より大きな角度をとるとマクロの力学的応答は軟化の挙動を示さなくなる。また、マイクロ構造内部で最も変形の大きな要素の、マクロ応力に対するマイクロ応力をプロットした曲線をFig.6に示す。マクロ応力が584[MPa]までは $\theta_z = 15^\circ$ と近い応答を示すが、 $\theta_z = 30^\circ$ ではマクロ応力に対してマイクロの応力はあるマクロ応力を超えても一定の割合で上昇した。このことからマイクロ構造内部の応力が広い領域で高くなることで局所的な変形が生じ

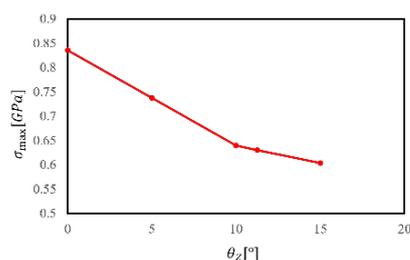


Fig.5 Change in Macroscopic Maximum Stress

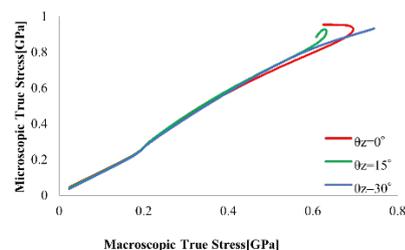


Fig.6 Relation between Macro & Micro Stresses

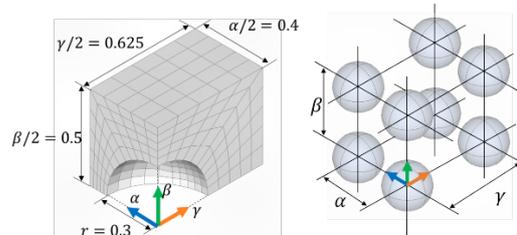


Fig.7 Anisotropic microstructures with micro voids

4. 隣接ボイド間距離が延性損傷に与える影響

本節ではマルチスケール解析を用いて、隣接ボイドの距離と荷方向がマクロの応答に与える影響について検証する。ボイド壁の厚さを変化させ、ボイド間距離を変化させたマイクロモデルに対して荷を行うことで、マイクロの構造の変形とマクロの最大応力がどのように変化するか検討する。

(1) ボイド間距離を変化させたモデル

マルチスケール解析で用いるモデルをFig.7に示す。ユニットセルの辺の長さをそれぞれ α, β, γ とし、軸方向のボイド間距離はそれぞれの辺の長さに対応する。ユニットセルの体積を一定とすることで、ユニットセルに対するボイド分率に差が生じないように定める。また、材料特性はTable.1と同様である。以降より、ボイド同士を結ぶ軸を α 軸, β 軸, γ 軸とする。このときのボイドの配列の概略もFig.7に示す。

(2) ボイド間距離による応答の変化

ユニットセルの α 軸, β 軸, γ 軸に一致する方向に、一軸引張応力状態となるマルチスケール解析を実行したときの結果を比較する。等間隔にボイドを配置したモデルの結果を含めた解析結果をFig.8に示す。このとき全てのモデルで初期ボイド分率は等しいが、マクロの応答には差異が生じている。特に α 軸に垂直な軸方向に一軸引張状態となっているとき、最大応力と最大ひずみは低く出ている。これは荷方向に対しての有効断面積が異なることが要因だと考える。またユニットセルの体積と、 $\beta = 1.0$ を一定に保ち、 α の長さを変化させて解析を行った。このとき最も変形しているマイクロ構造の要素のマクロ応力に対するマイクロ応力をFig.9に示す。ボイド同士の距離が近く、壁の厚さが薄くなることで、構造の一部の応力がより大きくなり局所的な変形が生じ、マクロの最大応力が低下した。

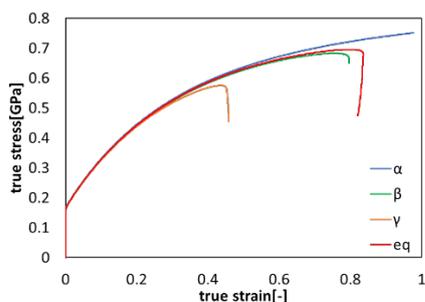


Fig.8 Macroscopic Stress & Strain Relations

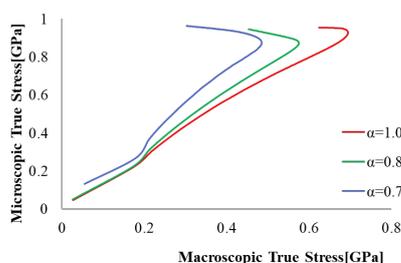


Fig.9 Macroscopic & Micro Stresses

5. まとめ

本研究では、マルチスケール解析における荷重方向の強度への依存性と、ポイド間距離が強度に与える影響について評価した。結論は以下のようにまとめられる。

- ミクロ構造に対して荷重方向を変化させてマルチスケール解析をすることで、荷重に対する有効断面積が変化し、ミクロ構造内部の応力に差異が生じ、材料内部の変形の仕方やマクロの力学的応答が異なることを確認した。
- また、ポイド間距離を変化させたマイクロモデルに対して荷重を行い、ポイド間距離がマクロの最大応力に与える影響について評価した。様々な応力三軸度、Lode Parameter で荷重することで、応力状態に対してポイド同士の距離が影響をあたえることについて確認した。

参考文献

- [1] A.L.Gurson :Continuum Theory of Ductile Rupture by Void Nucleation and Growth: Part I—Yield Criteria and Flow Rules for Porous Ductile Media, *J.Eng.Mat.Tech.*,99, 1977.
- [2] Zhang, K.S., Bai, J.B., Francois, D.: Ductile fracture of materials with high void volume fraction, *International Journal of Solids and Structures*, Vol.36, 23, 3407-3425, 1999.
- [3] Bai, Y., Teng, X.,Wierzbicki, T., On the application of stress triaxiality formula for plane strain fracture testing, *Journal of Engineering Materials and Technology*, Vol.131, 021002-1-021002-10,(2009).
- [4] Danas, K., Castañeda, P.P., Influence of the Lode parameter and the stress triaxiality on the failure of elasto-plastic porous materials, *International Journal of Solids and Structures*, Vol.49, 1325-1342,(2012).
- [5] Terada, K., Saiki, I., Matsui, K. and Yamakawa, Y.: Two-scale kinematics and linearization for simultaneous two-scale analysis of periodic heterogeneous solids at finite strain, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol.192, 3531-3563, 2003.

FTMP場の理論に基づく多結晶Bauschinger効果モデリング

FTMP-based Modeling of Bauschinger Behavior for Polycrystals

長谷部忠司¹⁾, 橋本泰生²⁾, 塚本巧海³⁾

Tadashi Hasebe, Xinping You and Akihiro Takebe

1) 博(工) 神戸大学 工学部 准教授 (〒657-8501 神戸市灘区六甲台町1-1, E-mail: hasebe@mech.kobe-u.ac.jp)

2) IHI

3) 神戸大学大学院 工学研究科 (〒657-8501 神戸市灘区六甲台長1-1, E-mail: tsukamoto.takumi@mail.mm4.scitec.kobe-u.ac.jp)

Modeling Bauschinger behavior, a typical softening stress response, is complicated than it seems, because its sources are distributed over evolving nonhomogeneous fields at various scale levels. The present study tackles the fundamental aspects afresh based on FTMP (Field Theory of Multiscale Plasticity). Specifically, two representative scales of grain aggregates (Scale C) and dislocation substructures evolved intra-granularly (Scale B) are systematically scrutinized, together with their interactions.

Key Words : Bauschinger effect, Polycrystal plasticity, Crystal plasticity, Field theory, FEM

1. はじめに

Bauschinger 効果の精密な評価はプレス成形時のスプリングバック予測における重要な因子の一つである。Bauschinger 挙動には、永久軟化に加えて遷移軟化という過渡応答が含まれており、その発現機構は複雑で必ずしも明らかではない。それゆえこれまでには詳細な機構を問わないで済むよう、主として古典塑性論に基づく現象論が用いられてきた。多結晶金属における Bauschinger 効果の原因として、大きくは結晶粒内の転位下部組織と結晶粒集合体それぞれのオーダーからの背応力が考えられる(後者には結晶粒界からの寄与も含まれる)。これらを陽に考慮したシミュレーション・モデルはまだ確立しておらず、現象論を越えた評価には大きな困難が未だ存在している。本研究では、変形誘起の不均質場の発展を容易に扱うことのできる FTMP(Field Theory of Multiscale Plasticity) [1-11]を駆使したアプローチについて論じる。

2 単結晶モデルの場合

多結晶体の議論の前に単結晶材に対して得られた既報 [5,6]での結果の概要を Fig.1 に示す。ここでは純鉄の代表的 γ 方位に対する単純せん断変形下での実験結果との比較を行っており、双対線図についても併せて示している。最初のせん断においてはほぼ同様の応力-ひずみ応答を示したのち、反転せん断では大きな差が生じることが示されており、とくに応力停滞の傾向が認められるのが特徴的である。シミュレーションではこの傾向を定性的であるが再現しており、しかもその機構として形成される転位下部組織の違いに伴う弾性ひずみエネルギーの蓄積→解放挙動差異に起因することが、双対線図(図中右下に示す)によって明確に示されている。

本一連の研究では主として引張-圧縮変形下における

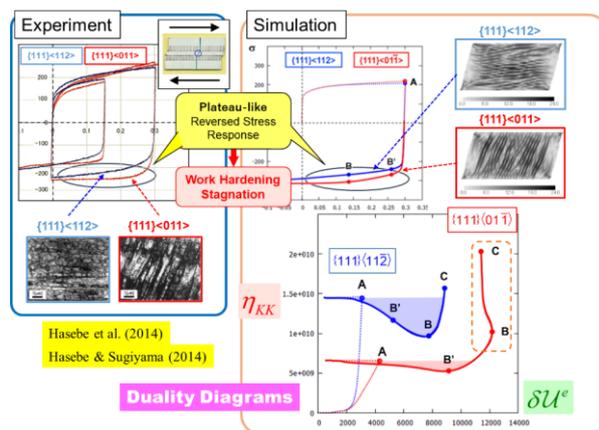


Fig.1 Summary of simple shear load reversal tests for γ -oriented α -Fe single crystal samples, comparing experiment and simulation.

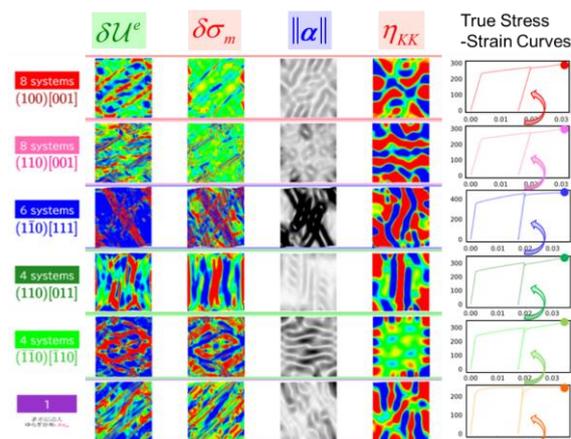


Fig.2 Single crystal Bauschinger behaviors.

Bauschinger 効果[10]を議論する。改めて代表的結晶方位に対する単結晶モデルの結果を Fig.2 に示す。ここでは負

荷反転後の最大圧縮時における各種分布図を転位密度 $\|\alpha\|$ 図とともに併記しているが、ほとんど Bauschinger 効果は生じていない。比較的大きな Bauschinger ひずみ ϵ_B が認められる(111)[123]方位に対する結果を改めて Fig.3 に示す。この場合、引張時に形成されたバンド状の転位下部組織(A点)が、除荷後の反転圧縮時(C点)で一旦解消され、さらなる圧縮変形で別途再構築される様子が $\|\alpha\|$ 分布図において確認でき、それに伴って比較的不規則な応力停滞が生じていることがわかる。これは Fig.1 で示した例と同様、Scale B 起源による遷移軟化の発現である。

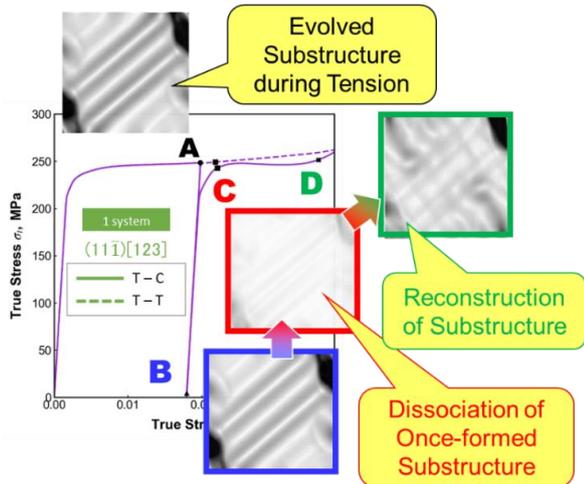


Fig.3 An example of single crystal simulation for (111)[123].

3 多結晶モデルの場合

3.1 勾配半径の影響と Scale B/C の区別

多結晶の議論において、勾配半径 r_{GR} の選び方によって種々のスケール(例えば Scale B および Scale C)の不均質場からの寄与を議論することができる。7 結晶粒モデルにおいて r_{GR} を系統的に増加させた場合の不適合分布 (η_{KK})を Fig.4 に示す。図中左上に示すように、勾配計算では r_{GR} で規定される円(2D)もしくは球(3D)内に含まれる有限要素の情報から最小二乗近似により超平面の方程式を決定することで各方向の微係数を評価している。

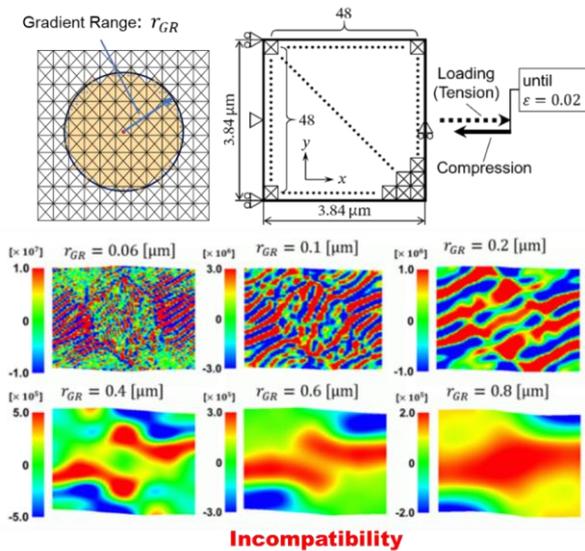


Fig.4 Variation of incompatibility distribution with various gradient evaluation range for 7-grained multigrain model.

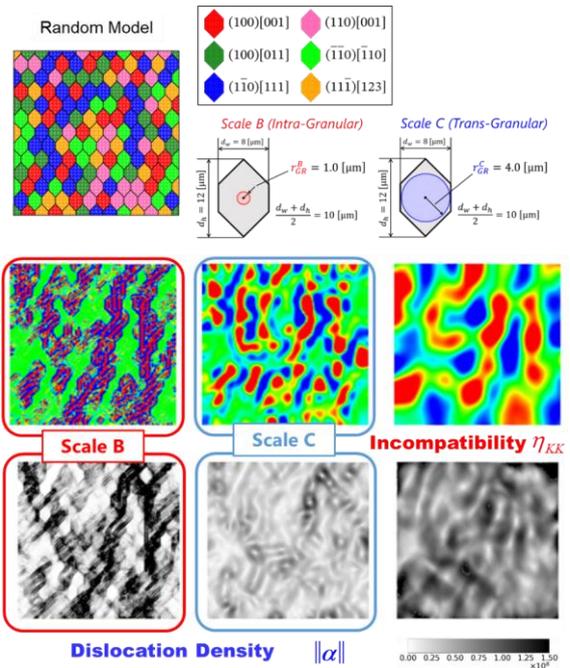


Fig.5 Polycrystal model with 167 grains, together with incompatibility contours with three gradient ranges, including for Scale B/Scale C conditions.

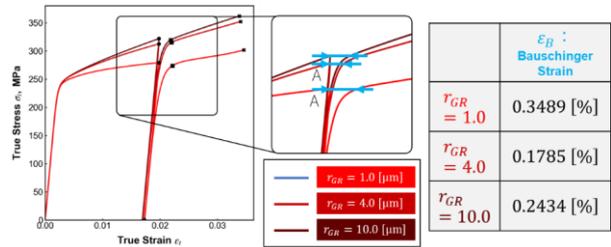


Fig.6 Comparison of stress-strain curves among three r_{GR} conditions, where Bauschinger strains are also compared.

本研究では、Fig.5に示す167結晶粒(代表6結晶方位をランダムに配置)より成る多結晶モデルを考え、 $r_{GR} = 1.0\mu\text{m}$ (Scale B)および $4.0\mu\text{m}$ (Scale C)の2種を設定する。同図には両者を含む3レベルの r_{GR} に対する η_{KK} および $\|\alpha\|$ 分布を比較しており、各結晶粒内の下部組織から結晶粒を跨ぐ領域での不均質場がそれぞれ捉えられている様子が確認できる。なお、負荷方向(引張→除荷→圧縮)は紙面の水平方向であるとする。Fig.6に、Fig.5の各 r_{GR} 条件において得られた応力-ひずみ曲線の比較を示す。同図より、いずれの条件下においても遷移軟化が自然に生じており、系としての応力レベル自体は r_{GR} が大きいほど大きく、Bauschingerひずみ ϵ_B は減少する傾向にある。この点については3.4において詳しく調べる。

3.2 転位密度・不適合度テンソルの役割について

転位密度テンソル α はいわゆる”幾何学的に必要な(GN)転位”と等価な概念であり、本研究においては転位密度項 $F(\alpha)$ により考慮されている。同項の寄与を明確にすることを目的に、Fig.7に不適合度項 $F(\eta)$ の有無という文脈で $\|\alpha\|$ 分布図および応力-ひずみ応答を比較する。前者

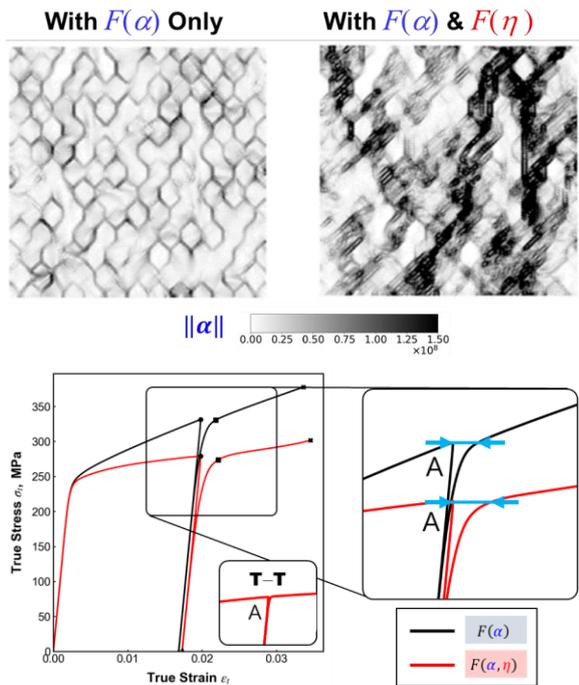


Fig.7 Comparison of dislocation density contour and S-S responses between with/without $F(\eta)$.

より、 $F(\alpha)$ の影響は予想通り結晶粒界に選択的に現れており、同項の導入に伴い、主として結晶粒界からの背応力が考慮されることがわかる。一方、不適合度項 $F(\eta)$ を導入した場合には、各結晶粒内に転位下部組織が発展している様子が確認できる。これは変形のアコモデートを促進する役割を担う。したがって、応力-ひずみ線図を比べると、 $F(\eta)$ の寄与によって系の応力レベルは低下するとともに、主として下部組織(Scale B)からの背応力に伴って遷移軟化がより促進されていることがわかる。

3.3 相互作用場に関する検討

FTMP場の理論の特徴の一つとして、不適合度テンソル場を通じてスケール間相互作用を顕わに表現・評価できる点がある[1,8,9]。ここでは、上記Scale BとScale Cを同時に考慮しつつ、加えて相互作用場 η_{BC} (Scale CからBへの相互作用)の寄与を考える。

この場合の不適合度テンソル場は次式で表現される。

$$\tilde{\eta}_B = \eta_B + e_{BC}^{-1} \eta_{BC} \quad (1)$$

$$\eta_{BC} = -(\nabla_B \times \alpha_C)_{\text{sysm}} \quad (2)$$

ここではScale Bを観測スケールとした場合を示しており、Scale Cにおける転位密度テンソル場に対し、Scale Bにおいてcurl演算を施すことによって算出される。本研究では、空間相互作用のみを考え、時空混合成分は考えないこととする。なお、後者は回復過程などを表現する際に用いることができる[11]。ちなみに、逆の過程、すなわちScale BからScale Cへの相互作用は次式で評価される。

$$\eta_{CB} = -(\nabla_C \times \alpha_B)_{\text{sysm}} \quad (2)$$

上記相互作用場を不適合度項に加え、得られた結果を

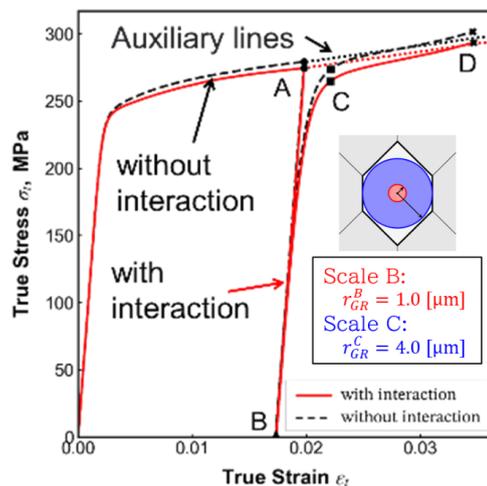


Fig.8 Comparison of S-S curves between with/without contribution of interaction field.

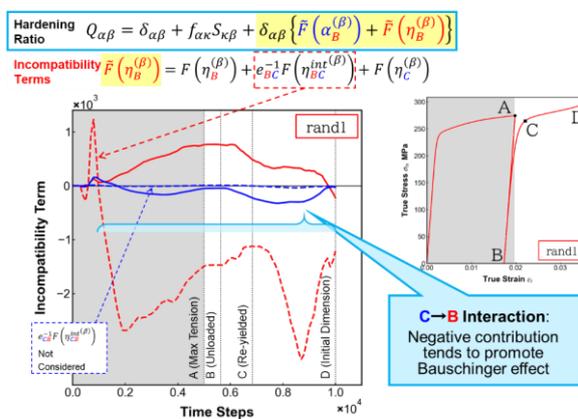


Fig.9 Variation of incompatibility terms with time steps showing breakdown of incompatibility terms.

Fig.8およびFig.9に示す。Fig.8は相互作用考慮の有無に関する応力-ひずみ応答、Fig.9は $F(\eta_{BC})$ を含む各項の変化をそれぞれ比較している。これらより、相互作用により ϵ_B は増加すること、さらにその原因として $F(\eta_{BC})$ 項が大きく負方向に発展することで遷移軟化を促進していることが確認される。

3.4 スケール・フリー性と相互作用場の関係

これまで、応力分布等にスケール・フリー的な傾向がみられることを指摘[1]していたが、同時にスケール間相互作用との因果関係については不明なままであった。3.3では同相互作用場を考慮した場合についても検討しているが、ここではあえて同寄与がない場合を考える。改めて、Scale BとScale Cを同時に考慮した場合(相互作用は陽に考えない)とScale Cのみを考慮した場合について比較を行った。系の応答としては、Fig.10に示すように一般にScale B“のみ”を考慮した場合に比べ、Scale Cのみを考慮した場合の方が遷移軟化への寄与は大きい。ここでは定量比較のためにA点において基準化したものを併記(右図)している。

Fig.11に負荷方向に対する偏差応力のスペクトル強度

分布を両条件の結果に対して示すが、上述のように、スケール・フリー的傾向を示すことがわかる。ここで横軸は結晶粒あたりの波数 k/d を表しており、 $k/d < 1$ の領域は結晶粒内、 $k/d > 1$ は粒を越えたスケールをそれぞれ示す。同図より、 $k/d > 1$ でスペクトル強度は両条件下ではほぼ一致しているのに対し、Scale Bを考慮した場合では $k/d < 1$ において比較的大きくなっており、結晶粒内の転位下部組織形成を反映していることがわかる。

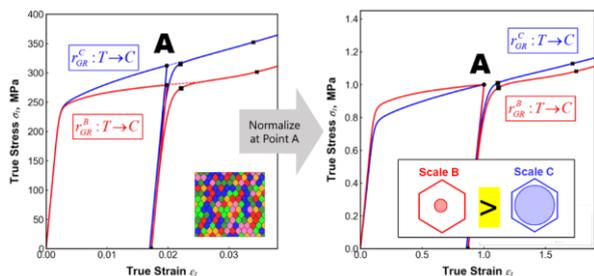


Fig.10 Comparison of stress-strain response between Scale B and Scale C conditions for polycrystal model.

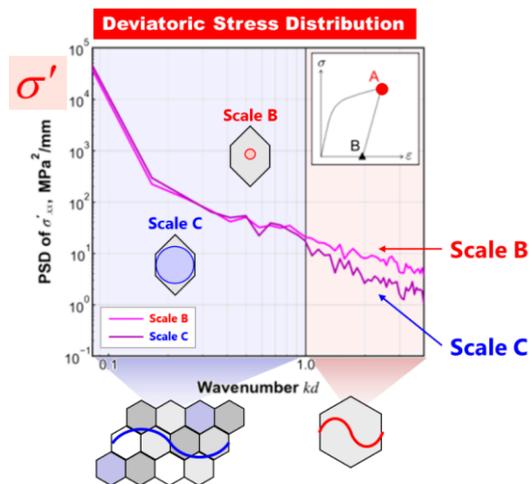


Fig.11 Spectral distribution of deviatoric stress comparing two conditions.

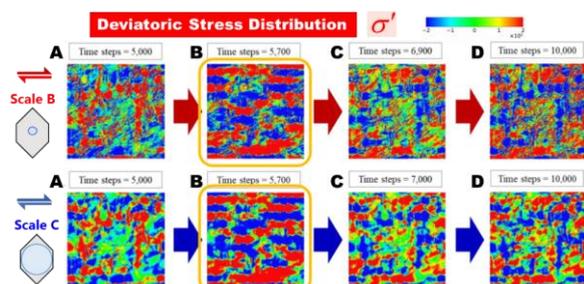


Fig.12 Variation of snapshots of deviatoric stress contours at A through D, comparing Scale B/ Scale C conditions.

このような応力におけるスケール・フリー的傾向は、負荷方向に形成される応力支持構造(SSS: stress supporting structure)によるものと理解される。Fig.12に変形各段階における偏差応力分布を示す。いずれの条件に対しても、ほぼ同様の分布傾向を示すが、とくにB点において顕著なSSSの発達が確認できる。なお、このSSSはいわゆる遠隔効果を誘起することがわかっており、SSSを辿って

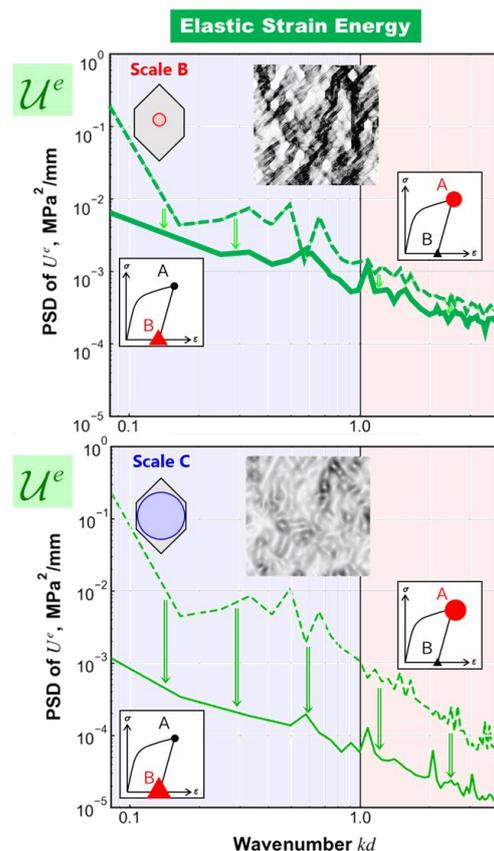


Fig.13 Recovery of spectral distribution for elastic strain energy during unloading, comparing conditions with Scale B (above) and Scale C (bottom).

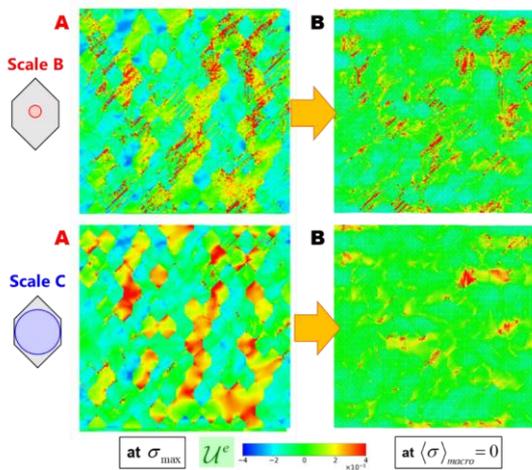


Fig.14 Recovery of elastic strain energy contour during unloading, comparing conditions with Scale B (above) and Scale C (bottom).

局所的な応力状態(情報)が遠方へと伝達される。

遷移軟化の大小関係とこのスケール・フリー性の関係を調べるために、弾性ひずみエネルギーのスペクトル分布をFig.13において比較する。ここでは、最大引張時(A点)と系の応力が0となる除荷時(B点)を各条件に対して比較している。一般に除荷に伴い弾性ひずみエネルギーは解放され、そのスペクトル分布も減少すると考えられる。Scale Cのみを考慮した場合(下図)では確かにそのような結果となっているが、Scale Bを考慮した上図では減少量は著し

く小さく抑えられていることがわかる。すなわち除荷後にも拘わらず弾性ひずみエネルギーが蓄積されたまま残存していることを意味している。Fig.14にAおよびB点における弾性ひずみエネルギーの分布図をそれぞれの条件に対して示すが、同図よりその様子が確認できる。すなわち、Scale Bを考慮した上図において、最大引張時A点で発達した転位下部組織に蓄積された弾性ひずみエネルギーが除荷時B点においても同組織形態に沿った形で微細に残存している様子が観察される。一方、Scale Cのみを考慮した場合の下図においても、弾性ひずみエネルギーは多少残存しているものの、各結晶粒内において一様に近い分布となっており、同スケールの背応力源としては前者と比べあまり機能しない。

上記の結果に基づき、本題について現時点で次のような解釈が可能である。前提として、弾性ひずみエネルギー分布にスケール・フリー的性質が発現し、かつそれが応力分布における負荷方向への応力支持構造(SSS)の発達と対応している状態を考える。同条件下では、SSSを通じてミクロ-マクロ間の情報が自然に相関することになる。したがって、Scale Bすなわち結晶粒内での転位下部組織発展の影響が、同SSSを通じてScale Cすなわち粒集合体オーダーの不均質場と自発的に連動することになる。言い換えると、この場合にはスケール間相互作用がスケール・フリー性として自然に現れており、系の応答として自動的に連携するという意味を意味する。

3.3においてはScale BからScale Cへの相互作用 η_{BC} を頭わに用いた計算を行った。この場合、逆に若干ではあるがBauschingerひずみは小さくなっている。これは同相互作用を二重に考慮したことが却って負の影響をもたらした可能性を示唆している。

以上のことを総括すると、以下ようになる。すなわち、応力分布にスケール・フリー性が自然に生じるような場合においては、転位下部組織オーダーの不均質場発展を正しくシミュレートすることによって、上位スケールとのスケール間相互作用は自動的に考慮される。このとき、不適合度場に基づく相互作用場、例えば η_{BC} は、その様子を可視化・モニタリングするためのパラメータとして活用することができる。

3.5 二層組織(DP)鋼への応用についてのコメント

本稿で展開した議論は、結晶粒形状やサイズに分布のある場合(UFG材や調和組織材など)や、複相組織を有する場合など、より複雑な条件に対して容易に拡張することが可能である。紙面の都合で表記について硬質粒を体積分率50%含むDP鋼モデルに対する結果[1,12]について簡単に言及するととどめる。

Fig.15は3種の硬質粒分布形態(青色)に対して得られた引張-除荷-圧縮解析の結果を比較したものであり、分布および強度比の違いにより生じるBauschingerひずみ ϵ_B に大きな違いが見られる。なお、ここでは2すべり系モデル

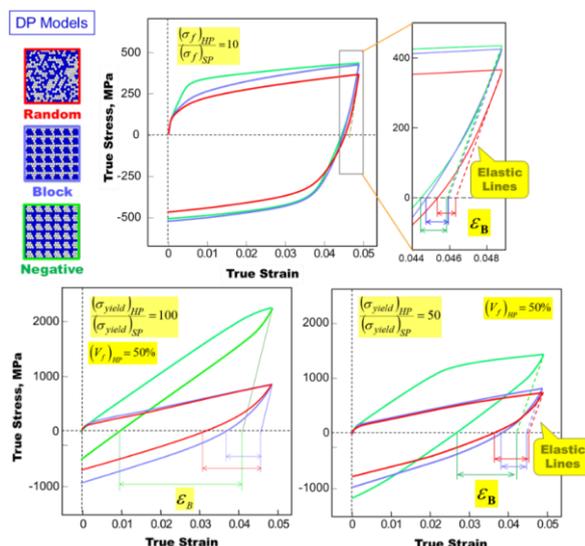


Fig.15 Summary of CP-FE simulations for three typical DP alloy models, comparing transient softening behaviors manifested as Bauschinger strain.

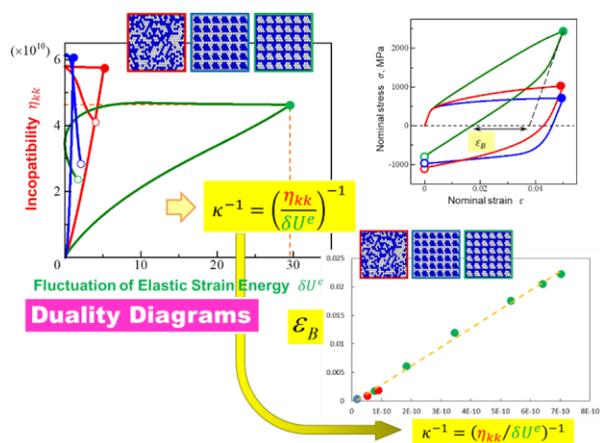


Fig.16 Representative duality diagrams for the three DP models corresponding to the results in Fig.17, together with a correlation of the Bauschinger strain with reciprocal of duality coefficient.

を仮定しており、硬化則中に不適合度項を考慮していない。Fig.16は、この ϵ_B が、それぞれに対応する双対線図上での、最大引張時において評価される双対係数(の逆数) $\kappa^{-1} \equiv (\eta_{kk} / \delta U^e)^{-1}$ によって、硬質粒分布形態の違いや強度比に拘わらず一本の直線で統一的に整理できることを示している。

4. 結言

本稿では、多結晶金属材料におけるBauschinger挙動の中でもその自然な表現が難しい遷移軟化現象について、FTMP場の理論に基づく結晶塑性有限要素法(CP-FEM)解析を行い、転位下部組織(Scale B)および結晶粒集合体(Scale C)という2つのスケールにおける変形誘起不均質場が及ぼす影響を詳細に調べた。単独では後者(Scale C)の影響が比較的大きいものの、応力分布に負荷方向に発達する応力支持構造に起因するスケール・フリー(SF)性が自発

的に構築される場合には, 前者(Scale B)の影響がSFを通じてScale Cと有機的に相互作用することで, 後者単独の場合よりも大きな遷移軟化が生じることを明らかにした。

参考文献

- [1] Hasebe, T.: *Field Theory of Multiscale Plasticity*, Cambridge Univ. Press, 2023.
- [2] Hasebe, T.: Multiscale crystal plasticity modeling based on field theory, *CMES*, Vol.11, pp.145-155, 2006.
- [3] Hasebe, T.: Continuum description of inhomogeneously deforming polycrystalline aggregate based on field theory, in meso-scale simulation and modeling of strength and fracture of materials, *IUTAM Symp. Mesoscopic Dynamics of Fracture Process and Materials Strength* (eds. Kitagawa, H. and Shibutani Y.), pp. 381–390, Kluwer, 2004.
- [4] Hasebe, T.: Field theoretical multiscale modeling of polycrystal plasticity, *Trans. MRS-J*, Vol.29, pp.3619–3624, 2004.
- [5] Hasebe, T. et al.: Modeling and simulations of experimentally observed dislocation substructures based on Field Theory of Multiscale Plasticity (FTMP) combined with TEM and EBSD-Wilkinson method for FCC and BCC poly/single crystals, *Materials Transactions*, Vol. 55, pp.779 -787, 2014.
- [6] Hasebe, T. and Sugiyama, M.: FTMP-based simulation for self-evolving dislocation substructures under simple shear for steel single crystals having BCC structure, *Proc. 35th Riso Inter. Symp. on Materials Science: New Frontiers of Nanometals*, (Eds: Fæster, S., Jensen, D. J., Hansen, H., Ralph, B. and Sun, J.), pp.313-320, 2014.
- [7] Ihara, S. Uematsu, M. and Hasebe, T., FTMP-based simulation and evaluation of apparent reduction in elastic modulus, *Int. J. Multiphysics*, Vol.15, pp.151-167, 2021.
- [8] Hasebe, T.: Interaction fields based on incompatibility tensor in Field Theory of Plasticity, Part I: Theory, *IMMIJ*, (*Interaction and Multiscale Mechanics: An Int. J.*), Vol.2, pp.1-14., 2009.
- [9] Hasebe, T. Interaction fields based on incompatibility tensor in Field Theory of Plasticity, Part II: Application,” *IMMIJ*, (*Interaction and Multiscale Mechanics: An Int. J.*), Vol.2, pp.15-30., 2009.
- [10] 橋本, FTMP 場の理論に基づく FCC 金属材料のバウシंगा挙動に関する研究, 神戸大学大学院工学研究科修士論文, 2023.
- [11] 長谷部, 高島 : FTMP 場の理論に基づく 3D 汎用シミュレータについて第 72 期通常総会・学術講演会講演論文集, 2023.
- [12] Takeuchi, K., Hasebe, T. and Tomita, Y.: Effect of trans-granular inhomogeneity on Bauschinger behavior of dual phase polycrystalline aggregates, *Proc. APCOM'07*, 2007.

FTMP場の理論に基づく疲労モデリング

FTMP-based Modeling of Fatigue

長谷部忠司¹⁾, 尤心平²⁾, 武部亮裕²⁾

Tadashi Hasebe, Xinping You and Katsuhiko Takebe

1) 博(工) 神戸大学 工学部 准教授 (〒657-8501 神戸市灘区六甲台町1-1, E-mail: hasebe@mech.kobe-u.ac.jp)

2) 神戸大学大学院 工学研究科 (〒657-8501 神戸市灘区六甲台1-1, E-mail: you.xinping@mail.mm4.scitec.kobe-u.ac.jp)

Modeling fatigue crack initiation process has been one of the long-standing difficult-to-solve problems, in the sense it should involve numerical representations of (i)PSB-ladder pattern formation and (ii)“intrusion/extrusion-crack” transition processes. FTMP (Field Theory of Multiscale Plasticity) -based FE simulation enables the both in a practically-feasible manner, just by additively introducing incompatibility tensor-related underlying degrees of freedom into the hardening law. With extended use of the incompatibility rate can further allow us to express vacancy formation process associated with the PSB ladder structure. Dislocation dynamics simulations that mimic ladder wall-mediated vacancy formation processes are examined in the light of the incompatibility rate, with which the subsequent diffusion analyses are combined to the FTMP-based FE simulations.

Key Words : Fatigue crack, Multiscale, PSB ladder, FEM, Crystal plasticity, Field theory

1. はじめに

FTMP場の理論[1-5]を通常の結晶塑性理論と組み合わせた有限要素シミュレーションでは、これまで単結晶材において単一すべり方位の繰返し変形中に自然にPSBラダー組織が再現され、さらに試料表面には”入り込み”に相当する”溝”が形成されることを報告している。この”入り込み”が”き裂”へと遷移したと見做すには、十分な特異性を有する応力場の発展、およびそれと連動した入り込み深さの進展速度の急峻な増加(Fig.1[6,7])、の2点が再現される必要がある。前報[5]では、”入り込みにおける応力集中”というこれまでの”純力学的”な因子に加え、ラダー組織において動的に生じる転位間相互作用に伴う原子空孔の生成と続く表面への拡散という”化学的”な因子についての検討を加えた。本稿ではこれまでに得られた結果を概観しつつ、少し視点を変えて、離散転位動力学によるシミュレーションを通じて得られた原子空孔生成に関する新たな知見とその導入法について検討を加え、き裂発生過程への一連の流れの再現を試みる。

2. 本研究の背景と概要

本研究の最終目標は、Cu添加等に基づく鋼材における転位下部組織制御とそれに伴う疲労特性の制御(Fig.2参照[8])に資するマルチスケールシミュレーションモデルの構築であり、セル状形態を含む一般の転位下部組織に対する「すべり帯→き裂」遷移過程のモデル化である。したがって、いわゆるPSBラダーを伴うすべり帯からのき裂発生過程の再現はその一里塚に過ぎない。しかしながら、2D解析で等軸セル状形態を再現することは現時点で

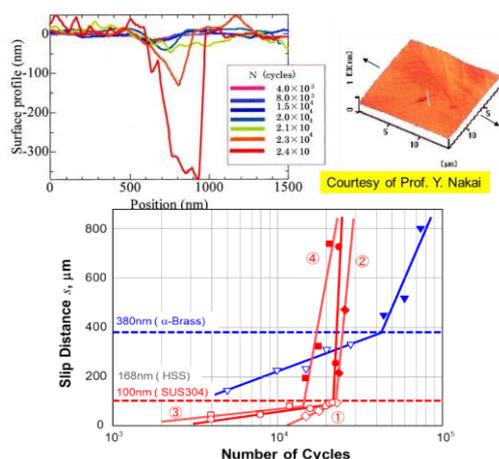


Fig.1 Experimental results for “intrusion-to-crack” transitions by Nakai and his colleagues [6,7].

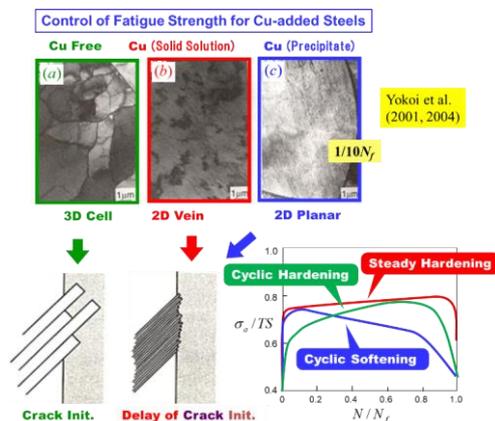


Fig.2 Dislocation substructure-dependent fatigue properties observed for Cu-added steels [Yokoi et al (2001, 2004)[8]].

難しく、別途推進している3D汎用化[9]の文脈で最近緒に就いたばかりであるため、当面は上述のPSBラダーからのき裂発生過程が主たる対象となる。この最も基本的な課題に対して、改めて注目すべき複数の重要な項目が含まれている。

3. PSBラダー組織の再現について

1で述べた通り、FTMPに基づく結晶塑性有限要素(CP-FE)解析では、PSBラダー組織は自発的に形成され、さらに試料表面との交接箇所において入り込みに相当する”溝”がその結果として自然に形成される(Fig.3a)。一旦同組織が形成されれば、その情報は不適合度テンソル場に集約されるため、同場を再現するための塑性ディストーションテンソル β^p 分布に関する情報を引き継ぐことで、”切り取り&リスタート”解析を行うことができる。その様子をFig.3に示す。

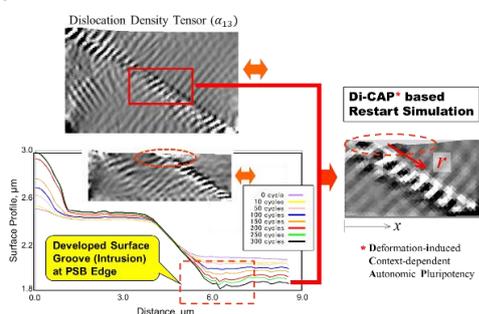


Fig.3a Overview of PSB ladder – fatigue crack simulation.

なお、筆者らはFTMPに基づく上記の情報移設法をDi-CAP法 (Deformation-induced Context-dependent Autonomic Pluripotency)と呼んでおり、上述の通り基本的に β^p 分布を移設することで不適合度テンソル情報を移設先で再現することが可能となるため、モデリングの様々な局面で容易かつ柔軟に活用することができる。必要に応じて他の情報(例えば方位回転量)を移設することも可能である。Di-CAP法による他の移設例をFig.3bに示す。この場合、親モデルの三カ所からそれぞれ不適合度情報を移設した後、平面応力あるいは平面ひずみ条件下でリスタート解析を行った結果である。試料採取箇所による被移設組織の微妙な差異が適切に移設されていることや、平面応力条件下では、元の組織に加え新たなPSBラダー組織が右上方に形成されていること、などが確認できる。本研究では基本的に平面ひずみ条件を採用する。

ところで、シミュレーションによって得られたPSBラダー組織の転位密度テンソル分布を詳細にみると、Fig.5aに示すように刃状成分とらせん成分が正負に跨りかつ交互に並んでおり、実際と同組織に対応した構造をしていることが確認される。また、同部では、周囲すなわちマトリックス部と比べて約3倍の塑性ひずみ振幅を担っており、それゆえに比較的大きな弾性ひずみエネルギーがラダー組織に沿って蓄積されていることがFig.5bより確認できる。この弾性ひずみエネルギーの蓄積が後述の原子空孔拡散の際においても重要な役割を果たすことになる。

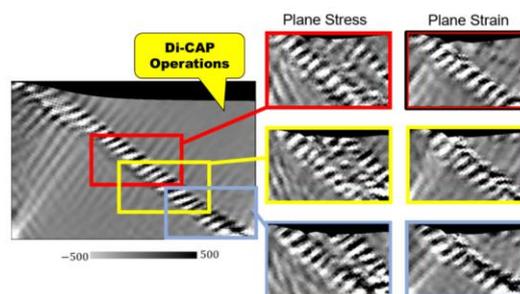


Fig.3b Di-CAP-based restart analysis for PSB ladder structure.

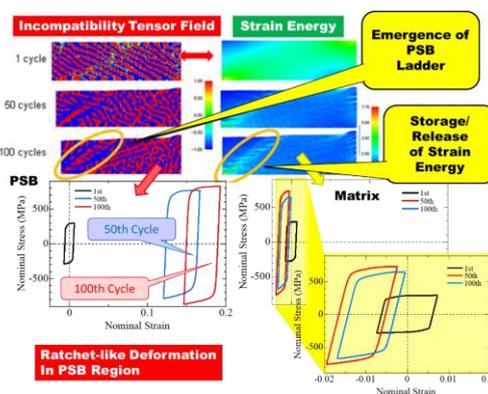


Fig.4 Summary of FTMP-based simulation results for PSB ladder patterning via contours of incompatibility tensor (a) and elastic strain energy (b), together with the corresponding hysteresis behaviors.

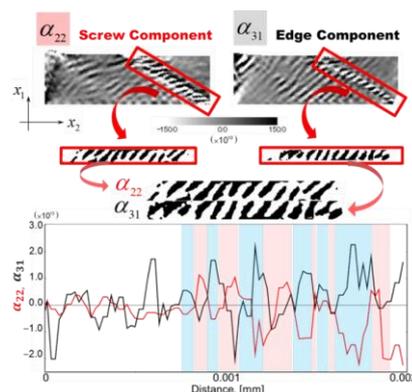


Fig.5a Associated alternating edge/screw wall structures to the simulated PSB ladder structure, commensurate with experiments.

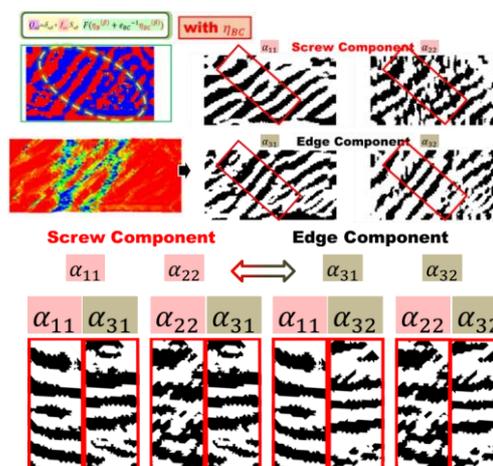


Fig.5b An example of strain energy contour under monotonic tension, showing instability-induced localization initiating along ladder wall/channel boundaries, which demonstrate “extra-softening” of the region.

4. 離散転位モデルによる動力学シミュレーションと原子空孔形成のモデル化について

き裂発生においては、上記の“力学的”な観点よりもむしろ空孔拡散に伴う溝形成促進を重視する見解[10]もあり、筆者らは同観点についても並行して議論している。原子空孔形成については、離散転位動力学(DD)法によるシミュレーションに基づく幾つかの有益な知見[11]が得られており、その概要を Fig.6a に示す。ここでは、wall 部から channel 部に張り出したらせん転位間の、交差すべりを伴う相互作用により刃状デブリループが多数形成され得る(同図(b))ことを明らかにしている。なお、形成されるデブリループの数は交差すべりの頻度に比例している。同デブリループは針状で二つのすべり面に跨る空孔型を含んでおり、空孔形成に寄与することが強く示唆される。解析モデルを上部から見た際のスナップショットおよび対応する応力分布を Fig.6a(c)に示す。同図には同一すべり面状に形成されるいわゆる glide ループも含まれるが、原子空孔生成には寄与しないため、上記デブリスープとは区別して扱うものとする。

こうしたプロセスにおける不適合度 η_{KK} と不適合度速度 $\dot{\eta}_{KK}$ の関係(Ph-S (phase-space)トラジェクトリー)、および応力サイクルに伴う $\dot{\eta}_{KK}$ の変化を Fig.6b 上段にそれぞれ示す。一方 Fig.6b 下段は、FEM シミュレーションで得られた Ph-S トラジェクトリーおよび $\dot{\eta}_{KK}$ 変化図であり、PSB 部の平均応答を示している。いずれにおいても、Ph-S トラジェクトリーは転位の往復運動を反映したリミットサイクル的な応答を示すが、上記の転位間相互作用に対応するように、1/2 サイクル毎に $\dot{\eta}_{KK}$ が大きな値をとる傾向がみられる。シミュレート対象となるスケールおよび現象の詳細が異なるにも関わらず、互いに類似した結果が得られていることは非常に興味深い。

一方、このときの 1/2 サイクル毎に計測した $\dot{\eta}_{KK}$ の振幅を用いて生成したデブリループ数を整理すると、Fig.6c に示すように両者の間に正の相関が確認される。同結果は、サイクル中の $\dot{\eta}_{KK}$ の増加が主としてデブリループ形成に起因していることを強く示唆している。なお、データに比較的大きなばらつきが存在するのは、wall 部を構成する刃状転位との対消滅に伴う $\dot{\eta}_{KK}$ の変化を考慮していないためと推察される。この結果(両者の相関)と Fig.6b における類似性は、転位間相互作用に伴う原子空孔生成という上記マイクロ過程を、 $\dot{\eta}_{KK}$ を介して連続体モデルに取り込む際の根拠を与えてくれる。なお、後述するように、不適合度速度 $\dot{\eta}_{KK}$ は刃状転位対の生成・消滅速度と関係しており、同モデル化は理にかなったものであると言える。

5. 拡散解析における拡散方程式について

本研究では、FTMP に基づく CP-FEM 解析において得られた PSB ラダー組織に対するリスタート解析(Fig.3)において、上記 4 の結果を考慮した上で拡散解析を組み合わせる。Fig.7 に拡散方程式等[10]の詳細を示す。ここでは

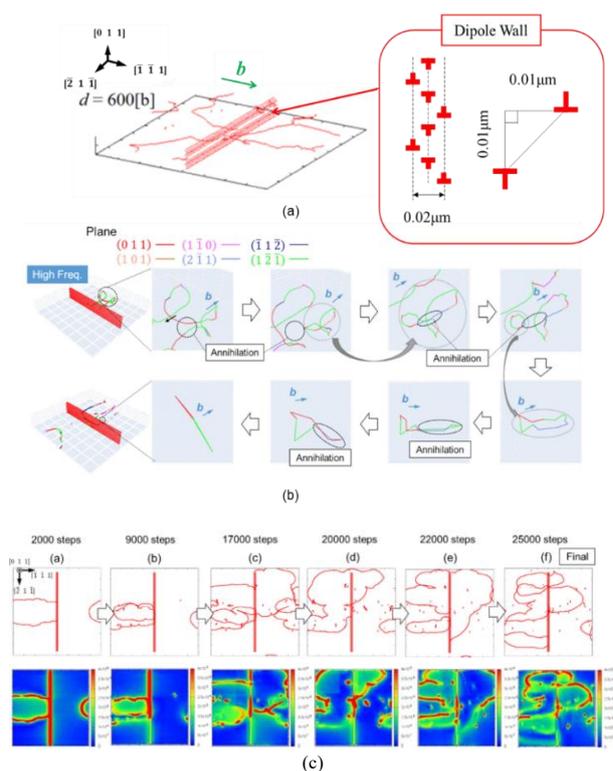


Fig.6a Representative results of dislocation dynamics simulations for PSB ladder wall model, exhibiting debris loop formations considered to be responsible for vacancy formations, together with correlation of its formation frequency with incompatibility rate.

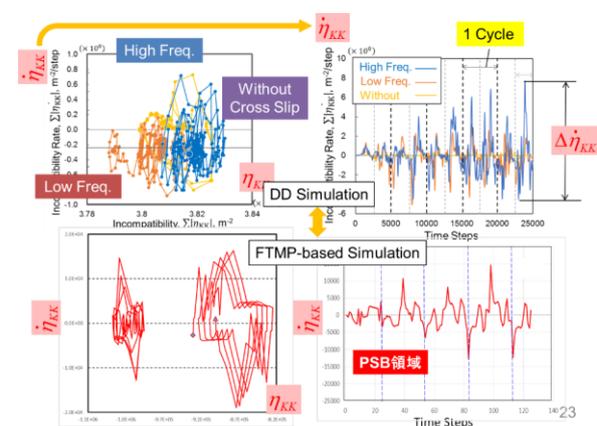


Fig.6b Comparison of Ph-S trajectories for incompatibility and variation of incompatibility rate between DD and CP-FE simulations

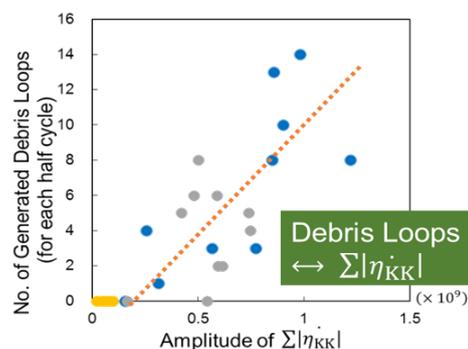


Fig.6c Correlation of number of debris loops (anticipated No. of vacancies) with incompatibility rate measured at each half cycle.

ラダー組織と関連して①ひずみエネルギー勾配, ②原子空孔生成率, および③パイプ拡散による各寄与が重要な役割を担う。とりわけ②の空孔生成率は, 上述の DD 法による詳細シミュレーションで得られた知見から,

$$s_v = a \left| \dot{\eta}_{KK}^{(\alpha)} \right| \quad (1)$$

の関係を仮定する。このモデル化は, 不適合度速度 $\dot{\eta}_{KK}$ が刃状転位対の生成・消滅フラックスを表す, すなわち,

$$\dot{\eta}_{KK} = 2 \text{div}(\alpha_{BC})_{skew} \quad (2)$$

であることからその物理的意味は明確である。原子空孔の濃度勾配から算出されるフラックスを用いて, 試料表面における後退速度は,

$$v_n = J_v \cdot n \quad (J_v = \sum_{\alpha} J_v^{(\alpha)}) \quad (3)$$

により算出される。 $J_v^{(\alpha)}$ は各すべり系毎の原子空孔フラックスである(Fig.7 参照)。

6. 入り込みからき裂への遷移解析

続いて, 上記の結果を変形解析における解析ステップ数に対応させて逐次導入した解析を行った。式(1)に基づいて計算した原子空孔生成とそれに続く拡散の結果として得られた空孔濃度分布の一例を Fig.8 に示す。PSB ラダー組織と連動した原子空孔形成と, その後の同組織に沿った拡散が確認される。

得られた表面プロファイルの変化をFig.9に示す。ここでは同後退速度の繰返し数に伴う変化を示しており, 図中の破線は試料表面の形状を表している。同図より, 最深部(入り込み先端)においてとくに大きな表面後退が促進されていることがわかる。原子空孔の流出に伴う表面後退の影響を反映し, 大きく入り込みが進展していることがわかる。

以上の結果より, 形成されたPSBラダー組織が原子空孔の形成に限らず, 続く拡散においても大きな寄与を果たすことが理解できる。Fig.10に拡散解析に関連する解析結果のまとめを示す。上記5の冒頭で示した①~③のすべてがPSBラダー組織と関連しており, 原子空孔の発生・拡散を支配するとともに, その結果試料表面における溝の進展を促進する決定的に重要な役割を担うことが改めて確認される。

7. 原子空孔発生とその拡散による影響について

繰り返しに伴う入り込みの進展速度を, すべり面に投影した”すべり距離 s ”に対してプロットした結果を Fig.12 に示す。比較のために, 表面後退を考慮していない場合 (Without V_n) の結果を併記している。図より, すべり距離 s が $0.2271 \mu\text{m}$ (227.1nm) に達した時点で進展速度が急速に増加している様子が見てとれる。一方, 表面後退を考慮していない場合ではそのような傾向は見られない。中井ら[7,8]によると, すべり帯からき裂への遷移は, 応力条件等に依らず臨界すべり距離に達した場合に生じることを報告しており, 同距離は材料に依存して決まると結論づけている。Fig.1 下段に示した中井らの実験結果では, α

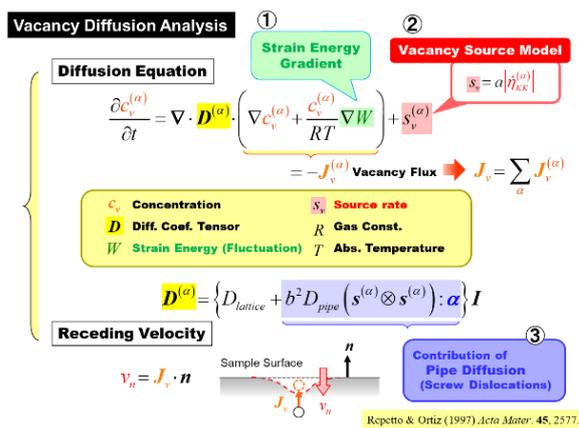


Fig.7 Summary of diffusion equation [10].

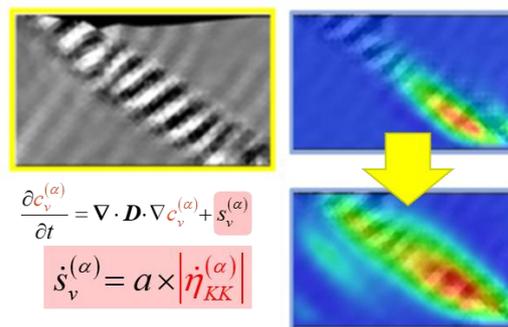


Fig.8 Variation of vacancy concentration contours with proceeding straining cycles.

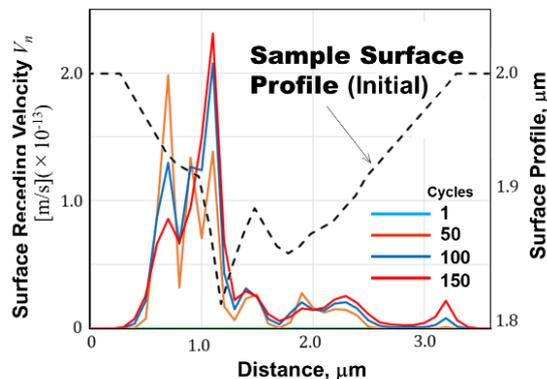


Fig.9 Variation of velocity for surface to recede due to vacancy outflow, together with corresponding sample surface profile.

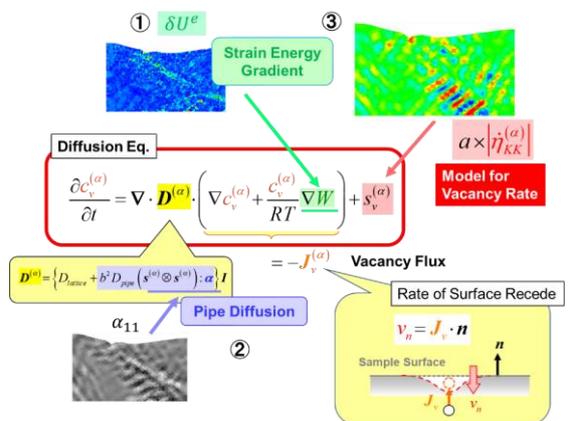


Fig.10 Diffusion equation accommodated with three additional contributions of PSB ladder-related factors.

黄銅(青)およびSUS304鋼材(赤)の結果が示されており、それぞれ臨界すべり距離は380nmおよび100nmである。なお、ここでは図示されていないが高強度鋼(HSS)については168nmとなっている。

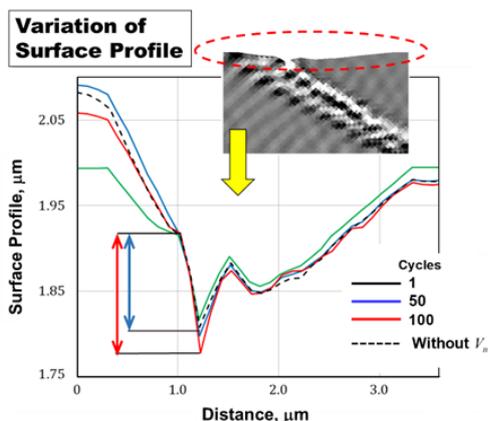


Fig.11 Variation of surface profile mainly due to vacancy outflux.

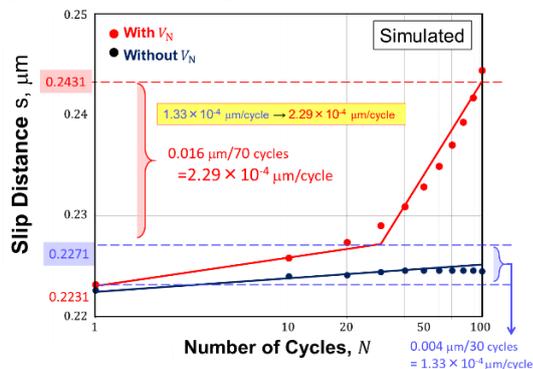


Fig.12 Simulated variation of slip distance with number of cycles, comparing with/without vacancy flux.

8. PSBラダー組織の役割について

本報告ではとくに同組織の”化学的側面”について調べた。すなわち、再度Fig.2より、①”ラダー組織に伴うひずみエネルギー勾配による拡散の促進、②同組織内における転位間相互作用の結果としての原子空孔生成、および③同組織(中のらせん転位群)に沿ったパイプ拡散によるさらなる拡散の律速効果、の3点が対象であった。とりわけ原子空孔生成とパイプ拡散の付加的影響は顕著である。これら3つはいずれも”ラダー状の転位組織ありき”の因子、言い換えると同組織が存在して初めて機能する諸機構である。このことは、ラダー形態を再現できないシミュレーションではそもそも検討することすら、少なくとも直接的にはできない対象であることを意味している。FTMP場の理論的には、原子空孔生成過程が不適合度速度 $\dot{\eta}_{KK}$ により表現できるということの意義は極めて大きく、結果として、PSBラダーの形成から、試料表面の入り込み形成とその発展という”力学的側面”から、上述のように、同組織に伴う3つの”化学的側面”のすべてが、極言すれば「不適合度テンソル」の記述能力に基づいてすべてシームレスにシミュレートできる、ことが今回改めて示され

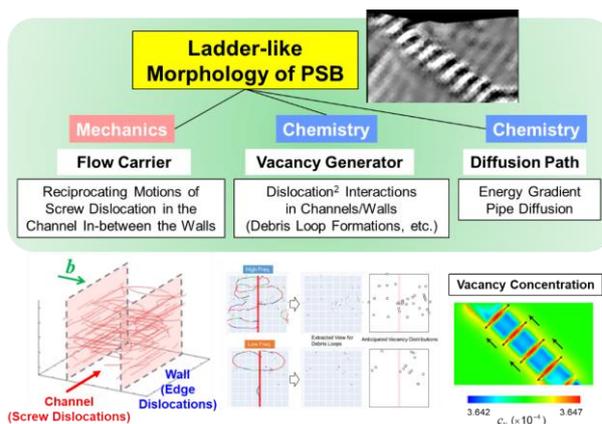


Fig.13 Grand summary showing FTMP-based perspective of modeling/simulating fatigue crack initiation process.

たことになる。

9. 結言

本一連の研究において、少なくとも定性的には PSB ラダー/入り込み形成からき裂への遷移に至る一連の過程が再現された。臨界すべり距離の値なども同様のオーダーが得られている。今後、どの程度精密化・精緻化が可能かについての検討・追及が必要となる。

参考文献

- [1] Hasebe, T.: Field Theory of Multiscale Plasticity, Cambridge Univ. Press, 2023.
- [2] Hasebe, T.: Multiscale crystal plasticity modeling based on field theory, *CMES*, Vol.11, pp.145-155, 2006.
- [3] Hasebe, T. et al.: Modeling and simulations of experimentally observed dislocation substructures based on Field Theory of Multiscale Plasticity (FTMP) combined with TEM and EBSD-Wilkinson method for FCC and BCC poly/single crystals, *Materials Transactions*, Vol. 55, pp.779 -787, 2014.
- [4] Ihara, S. Kojima, N. and Hasebe, T., FTMP-based approach toward dislocation dynamics of PSB, *Int. J. Multiphysics*, Vol.15, pp.151-167, 2021.
- [5] 長谷部, 黒田, FTMP 場の理論に基づく疲労き裂発生過程シミュレーション, *CMD2021 講演論文集*.
- [6] 岸本学, 鉄鋼材料における疲労き裂発生条件に関する研究, (2004), 神戸大学大学院修士論文.
- [7] Nakai, Y.: Evaluation of fatigue damage and fatigue crack initiation process by means of atomic-force microscopy, *Maters. Sci. Res. Int.* (Japan Soc. Maters. Sci., Japan.), Vol.7, pp.73-81, 2001.
- [8] Yokoi, M. et al.: Cyclic stress response and fatigue behavior of Cu added ferritic steels, *J. Maters. Sci.*, Vol.36, pp.5757-5765, 2001.
- [9] 長谷部, 高島: FTMP 場の理論に基づく 3D 汎用シミュレータについて第 72 期通常総会・学術講演会講演論文集, 2023.
- [10] Repetto, E. A. and Ortiz, M.: A micromechanical model of cyclic deformation and fatigue crack nucleation in FCC single crystals, *Acta Mater.*, Vol.45, pp.2577-2595, 1997.
- [11] Ihara, S. Kojima, N. and Hasebe, T., FTMP-based approach toward dislocation dynamics of PSB, *Int. J. Multiphysics*, Vol.15, pp.151-167, 2021.

押し込み試験による局所力学特性の推定

Characterization of Local Mechanical Properties using Instrumented Indentation Test

渡邊 育夢¹⁾ 陳 達徳²⁾ 劉 大元³⁾

Ikumu Watanabe, Ta-Te Chen, and Dayuan Liu

¹⁾博士 (工学) 物質・材料研究機構/筑波大学大学院 主幹研究員/准教授

(〒 305-0047 茨城県つくば市千現 1-2-1, E-mail: WATANABE.Ikumu@nims.go.jp)

²⁾博士 (工学) 名古屋大学 助教 (〒 464-8603 愛知県名古屋市千種区不老町)

³⁾博士 (工学) 筑波大学大学院/物質・材料研究機構 (〒 305-0047 茨城県つくば市千現 1-2-1)

Instrumented indentation test is an extension technique of hardness test, which measures the load-depth relationship. Based on the technique, approaches have been developed to estimate the stress-strain curve instead of tensile or compression test. A load-depth curve using a sharp indenter such as Berkovich indenter does not contain enough information to estimate a unique solution of stress-strain curve. Therefore, dual-indenter approaches using two sharp indenters with different apex angles were developed. In this study, we developed estimation methods using a single indenter, where data-driven approach based on response surface produced by computational simulations was proposed.

Key Words : Instrumented Indentation test, Mechanical Properties, Inverse Analysis

1. はじめに

近年、データから新たな知見を得るデータ駆動型アプローチが様々な分野で活用されている。材料研究・開発では、新材料開発に必要な時間と労力を短縮することを目的として、米国では Materials Genome Initiative, 我が国では内閣府主導で Materials Integration プロジェクトなどが取り組まれた。また、先進的なインフォマティクスを活用した材料研究・開発支援のための人工知能の開発が進められている [1-3]。

一般に、機械学習に代表されるデータ科学アプローチを活用するためには、膨大なデータセットが必要となる。よって、材料データベースの重要性が認識され、上記のプロジェクトでは、材料データベースの整備およびハイスループットな実験・計算手法の開発も並行して進められた。第一原理計算のような原子論計算に基づくアプローチでは、変形を伴う構造材料の塑性特性を評価することは難しく、実験的アプローチが必要となる。しかし、構造材料の基礎的材料特性である応力-ひずみ関係の評価に使用される引張試験や圧縮試験は、単一の試料から取得できるデータがひとつである上、試料の作成に多大な労力が必要となるため、データベース整備には適していない。一方、硬さ試験は単一の試料から複数のデータを取得でき、材料データベースの整備において有効なアプローチとして採用されている。このアプローチでは、荷重を微小とすることで単結晶粒などの小さな構成要素の力学特性を評価できる。また、組成傾斜のある試料に硬度試験を適用することで、単一試料から合金組成と硬度を関係づける膨大なデータを取得する取組も行われている [4-6]。

計装化押し込み試験は、硬度試験を拡張した評価手法であり、荷重 P と押し込み深さ h の関係を計測するアプローチで、得られた P - h 関係から弾性剛性と硬さ

を評価できる [7-9]。計装化押し込み試験は、力学挙動を評価するために広く活用されており、例えば、結晶方位依存性 [10]、転位メカニズム [11, 12] および相境界強化 [13] などの評価が報告されている。また、数値シミュレーションを組み合わせることで、引張試験に対応する応力-ひずみ曲線を推定するためのさまざまなアプローチが提案されている [14-16]。標準的な圧子を使用したアプローチでは、一般に2つの材料定数を含むべき乗硬化モデルが採用されるが、この2つの材料定数を適切に決定し、固有の応力-ひずみ関係を推定するには、 P - h 関係だけでは不十分であることが知られている [17, 18]。そのため、異なる頂角を持つ2つの圧子を使用するアプローチ [19] や既存の押し込み試験に近接して再度押し込み試験を実施して、相互作用から塑性特性を抽出するアプローチ [20] などが提案されている。しかし、この単純な構成モデルは、特に鉄鋼のように加工硬化率の高い合金において、応力-ひずみ関係の表現に適さない。より複雑な構成モデルを適用することは可能であるが、一般に、唯一解として応力-ひずみ関係を得るためには追加の実験データが必要となってしまう。

そこで本研究では、べき乗硬化則と線形硬化則を組み合わせた構成モデルを用いて、計装化押し込み試験からの塑性特性を推定するアプローチを開発する [21]。開発アプローチでは追加の材料定数はべき乗硬化則および線形硬化則により記述される応力-塑性ひずみ関係の上・下界性を用いて、実験データの追加なしに決定できる。また、既存の材料定数の推定アプローチを使用できる。ここでは、著者らが開発した P - h 関係と圧痕のパイルアップ高さの応答曲面から推定するアプローチ [22, 23] を拡張する。また、検証のために開発アプローチを鉄鋼材料へ適用する。

2. 構成モデル

本研究では、等方性弾塑性構成モデルを用い、弾性構成モデルについて、ヤング率 E とポアソン比 ν の2つの材料定数を含む等方性形式の St. Venant モデルが適用する。また、塑性構成モデルについて、von Mises 応力 σ^* を応力基準として、次式で記述される加工硬化則を用いる [14].

$$\begin{cases} \sigma^* = E^* \varepsilon^* & \text{if } \sigma^* < \sigma_Y \text{ (elasticity)} \\ \sigma^* = K (\varepsilon^*)^n + H_p \xi & \text{if } \sigma^* = \sigma_Y \text{ (elastoplasticity)} \end{cases}, \quad (1)$$

ここで、 σ_Y, K, n, H_p, ξ は相当弾性剛性、相当ひずみ、降伏強度、塑性係数、加工硬化指数、線形硬化係数、相当塑性ひずみである。相当ひずみ ε^* 、相当弾性剛性 E^* は次式で定義した。

$$\varepsilon^* = \sqrt{\frac{2}{3} \text{dev} [\boldsymbol{\varepsilon}] : \text{dev} [\boldsymbol{\varepsilon}]} \quad \text{and} \quad E^* = \frac{3E}{2(1+\nu)},$$

ここで、 $\boldsymbol{\varepsilon}$ はひずみテンソルである。式 (1) において、初期降伏強度 σ_0 は次式のように表される。

$$\sigma_0 = K \left(\frac{\sigma_0}{E^*} \right)^n \quad \therefore K = \sigma_0 \left(\frac{E^*}{\sigma_0} \right)^n. \quad (2)$$

式 (1) と式 (2) から、降伏強度 σ_Y は次式となる。

$$\sigma_Y = \sigma_0^{1-n} (\sigma_Y + E^* \xi)^n + H_p \xi, \quad (3)$$

ここで、単調負荷を仮定し、 $\xi = \varepsilon^* - \sigma^*/E^*$ とした。以上のように、構成モデルは5つの材料定数 E, ν, σ_0, n, H_p を含んでいる。

式 (3) の特殊ケースとして、次式のように、べき乗硬化則と線形硬化則を設定できる。

$$\sigma_Y^{\text{PH}} = (\sigma_0^{\text{PH}})^{1-n} (\sigma_Y^{\text{PH}} + E^* \xi)^n \quad \text{if } H_p = 0 \quad (4)$$

$$\sigma_Y^{\text{LH}} = \sigma_0^{\text{LH}} + H_p^{\text{LH}} \xi \quad \text{if } n = 0, \quad (5)$$

ここで、 $\{\sigma_Y^{\text{PH}}, \sigma_0^{\text{PH}}, n^{\text{PH}}\}, \{\sigma_Y^{\text{LH}}, \sigma_0^{\text{LH}}, H_p^{\text{LH}}\}$ はべき乗硬化則と線形硬化則の材料定数のセットである。既存のアプローチ [20, 22, 23] に基づいて、それぞれ2つの材料定数は、 P - h 曲線を $P = Ch^2$ と近似したときの負荷曲率 C と追加の実験データから決定できる。べき乗硬化は、微小ひずみ領域における応力-ひずみ関係を記述することに適しているが、有限ひずみ領域において、高い加工硬化率を示す鉄鋼などの応力-ひずみ関係の表現には適していない。他方、線形硬化則は、中間的なひずみ領域の応力-ひずみ関係の記述に適しているものの、微小ひずみ領域および大ひずみ領域において、その非線形応答を表現することはできない。本研究では、この2つの構成モデル、べき乗硬化則と線形硬化則を組み合わせることで、両者の弱点を補って表現力を改善することを考える。

3. 材料定数の推定方法

本研究では、線形硬化係数 H_p を有限ひずみ領域における硬化率の近似値として、2つの加工硬化則の応力-塑性ひずみ曲線から決定する。ここでは、有限ひずみ

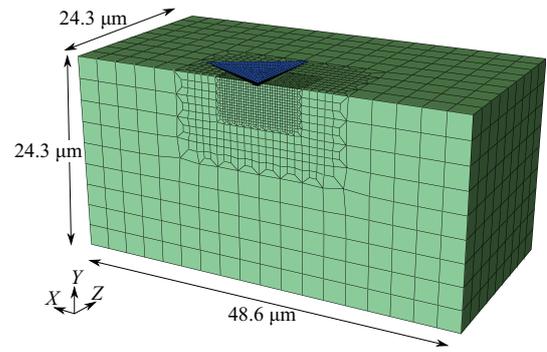


図-1 計装化押し込み試験の有限要素モデル

領域におけるべき乗硬化則と線形硬化則の応力-塑性ひずみ曲線の交点に注目する。この交点を、これら2つの加工硬化則が再現性を失う臨界ひずみレベルと考える。すなわち、この点より大きいひずみ領域では、べき乗硬化則では応力を過小評価、線形硬化則では過大評価する。したがって、適切な硬化率は交点の等価塑性ひずみ ξ_{int} において、両者の中間にあると想定できる。そこで、式 (3) の線形硬化係数 H_p をべき乗硬化則と線形硬化則の応力-塑性ひずみ曲線から次式で決定する。

$$H_p = \alpha \left. \frac{\partial \sigma_Y^{\text{PH}}}{\partial \xi} \right|_{\xi=\xi_{\text{int}}} + (1-\alpha) H_p^{\text{LH}} \quad \alpha \in [0, 1], \quad (6)$$

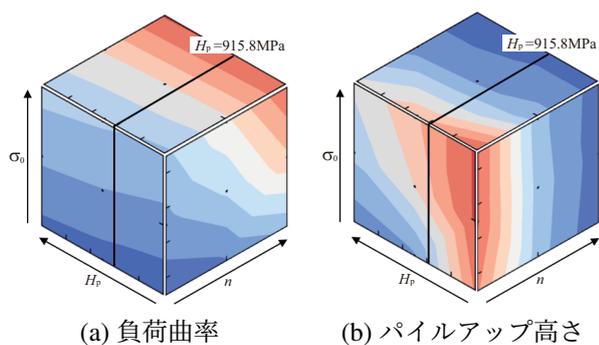
ここで、 α は構成モデルの特徴を制御する重み係数である。例えば、 $\alpha = 1$ または低加工硬化材料 ($H_p^{\text{LH}} \approx 0$) の場合、構成モデル (3) はべき乗硬化則となる。式 (6) によって、式 (3) の塑性構成モデルの材料定数の1つを決定できるので、残りの2つの材料定数 σ_0 と n は、既存のアプローチと同じ方法で実験データを基に決定できる。

(1) データベース生成

本研究では、有限要素法に基づくハイスループット数値シミュレーションによって作成された材料データベースの応答曲面から、実験で計測した P - h 曲線と圧痕のパイルアップ高さ [22] に対応する加工硬化モデルの材料定数を読み取ることで決定する。最急降下法を用いたアプローチ [22] と比較して、このデータ駆動アプローチでは、事前にデータベースを作成しておくことで、反復計算なしで適切な材料定数のセットを瞬時に提供できる。

a) 有限要素モデル

計装化押し込み試験の数値シミュレーションのために、図-1 に示した三次元有限要素モデルを作成した (14,138 完全低減積分 8 節点六面体要素)。ここで、試料下部の垂直方向の変位を固定し、 X - Y 平面において鏡面对称境界条件を設定した。圧子と試料間の接触領域は、他の領域よりも細かく離散化した。本研究では、ダイヤモンド製 Berkovich (三角錐) 圧子を使用し、圧子を剛体と仮定する。また、圧子の摩擦の影響は小さいことから [15]、ここでは考慮しない。最大深さ h_{max} は $1.0 \mu\text{m}$ と定義した。有限要素解析は圧子の上部を変位制御

図-2 σ_0, n, H_p の応答曲面

することで実行され、準静的境界値問題として陰解法スキームを用いて解析した。このモデルを用いて、定量的に実験結果を再現できることは過去研究 [22] において検証済である。

b) 応答曲面

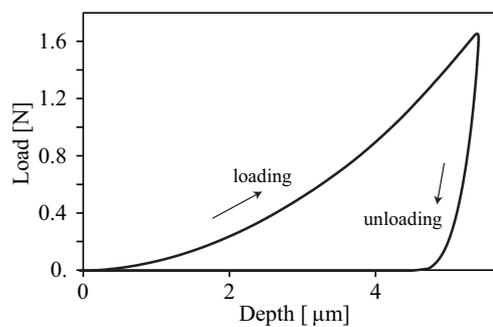
本研究では、鉄鋼の弾性特性を $E = 200 \text{ GPa}$, $\nu = 0.3$ と仮定する。構成モデル (3) における未定の材料定数は σ_0, n, H_p である。P-h 曲線の負荷曲率 C と圧痕のパイルアップ高さ Z_{\max} を 3 つの材料定数によって特徴付けられる 応答変数として考え、ハイスループット数値シミュレーションを $\sigma_0 [50\text{MPa}, 650\text{MPa}]$, $n \in [0.0, 0.4]$, $H_p \in [0, 2500]$ において、実行した。ここで、押し込み深さが $0.2 \mu\text{m}$ 以上と十分に深い領域において、 Z_{\max}/h_{\max} は試験中にほぼ一定とみなすことができる [26]。計算結果を用いて、応答曲面は三次補間関数 (または断面での双一次補間関数) を用いて図-2 のように描かれる。

4. 開発アプローチの検証

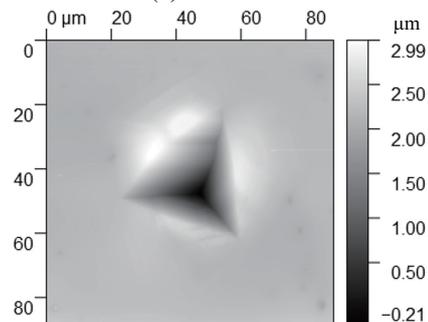
SUS304 ステンレス鋼の計装化押し込み試験を実施し、応力-ひずみ関係を推定するとともに、引張試験結果と比較することで、開発アプローチを検証する。

(1) 実験

Berkovich 圧子と走査型プローブ顕微鏡が実装された TI950 TriboIndenter (Bruker Co., USA) を用いて、計装化押し込み試験と試験後の圧痕周囲の形状計測を行う。装置の最大荷重を考慮して、最大押し込み深さ $h_{\max} = 5.3 \mu\text{m}$ と設定し、準静的負荷となるように、変位制御モードを用いて負荷および除荷速度を $0.1 \mu\text{m/s}$ として、押し込み試験を実施した。試料の表面は、機械研磨後、残留塑性ひずみを除去するために電気研磨によって仕上げた。P-h 曲線と圧痕の周辺性状の実験結果を図-3 に示す。この実験データから、負荷曲率 C と最大パイルアップ高さ Z_{\max} を計算する。最大パイルアップ高さは、圧痕の 3 つのエッジに沿ったパイルアップ高さの最大値を計測し、評価にはその平均値を用いる。実験誤差を低減するために、計装化押し込み試験を 12 回実施し、その平均値を応力-ひずみ関係の推定に使用する (表-1)。



(a) P-h 曲線



(b) 表面性状

図-3 実験結果

表-1 負荷曲線と最大パイルアップ高さの実験結果

Material	C [GPa]	Z_{\max}/h_{\max}
SUS304 stainless steel	57.63 ± 2.31	0.155 ± 0.025

(2) 材料定数の推定

開発アプローチを用いて実験結果から構成モデルの材料定数 (3) を決定する。

まず、2 つの単純な加工硬化則の材料定数を図-4, 5 から決定する。図中の黒線は実験結果に対応する。2 本の線の交点が推定された材料定数を示し、図中にひし形マークで示している。べき乗硬化則 ($H_p = 0$) および線形硬化則 ($n = 0$) の材料定数のセットは次のように推定された。

$$\{\sigma_0^{\text{PH}}, n^{\text{PH}}\} = \{447.5\text{MPa}, 0.1433\}$$

$$\{\sigma_0^{\text{LH}}, H_p^{\text{LH}}\} = \{582.9\text{MPa}, 1295\text{MPa}\}$$

これらの材料定数を用いた応力-塑性ひずみ曲線から交点の相当塑性ひずみは $\xi_{\text{int}} = 0.24$ と求められる (図-6)。

$$\left. \frac{\partial \sigma_Y^{\text{PH}}}{\partial \xi} \right|_{\xi=\xi_{\text{int}}} = 536.3\text{MPa}. \quad (7)$$

であるので、両者の上・下界性に基づいて、線形硬化係数 H_p は 915.8 MPa と計算される。ここでは、 $\alpha = 0.5$ としたが、 α の値を最適化して、より良い推定を行うこともできる。

$H_p = 915 \text{ MPa}$ での応答曲面 (図-7) から、残りの材料定数は $\sigma_0 = 540.9 \text{ MPa}$ および $n = 0.0444$ と求められる。推定された材料定数を用いた数値シミュレーション

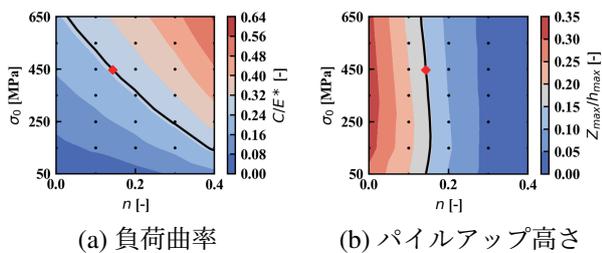


図-4 べき乗硬化則の応答曲面 ($E = 200 \text{ GPa}$, $\nu = 0.3$, $H_p = 0 \text{ MPa}$)

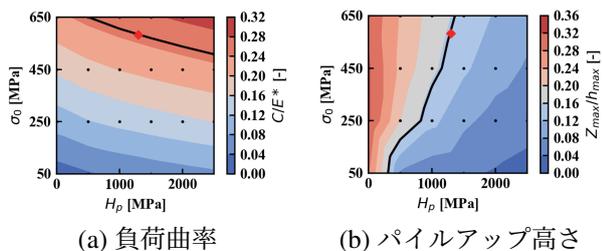


図-5 線形硬化則の応答曲面 ($E = 200 \text{ GPa}$, $\nu = 0.3$, $H_p = 0 \text{ MPa}$)

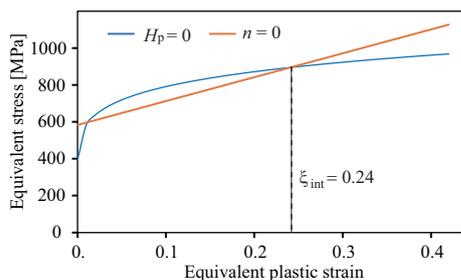


図-6 単純な加工硬化則で推定された応力-塑性ひずみ関係

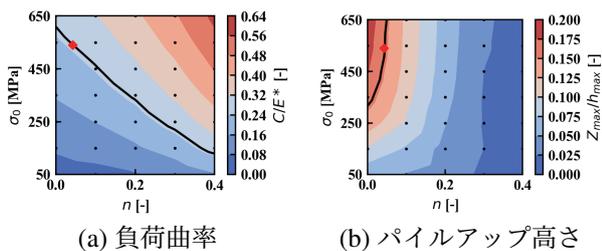
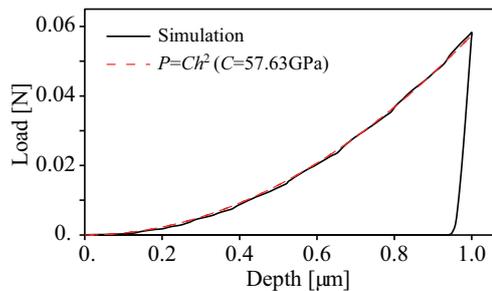


図-7 応答曲面 ($E = 200 \text{ GPa}$, $\nu = 0.3$, $H_p = 915.8 \text{ MPa}$).

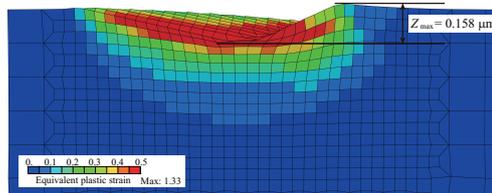
の結果 ($P-h$ 曲線および圧痕周辺の変形状態) を図-8に示す。この数値解析結果から、対応する実験の負荷曲率とパイルアップ高さが再現されていることを確認できる。

(3) 引張試験との比較

推定した材料定数で記述される応力-ひずみ関係と SUS304 ステンレス鋼の引張試験結果を図-9に示す。ここでは、比較のために既存のアプローチ [20] で推定



(a) $P-h$ 曲線



(b) 変形状態

図-8 数値シミュレーション結果

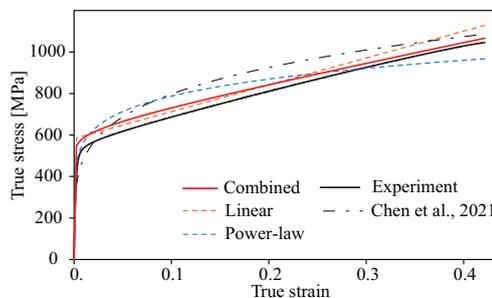


図-9 開発アプローチで推定した応力-ひずみ関係

した結果も示した。この比較から、開発アプローチでは構成モデルの表現力が改善されていることがわかる。3変数の応答曲面(図-2)から数理最適化法を用いて求める場合、追加の実験データが必要となるが、開発手法では、2つの単純な加工硬化則の上・下界性を拘束条件として活用することで、追加の実験データなしに、構成モデルの表現性能を改善することができた。

5. おわりに

本研究では、高強度金属材料の塑性特性を計装化押し込み試験を用いて推定するアプローチを開発した [21]。開発アプローチを鉄鋼材料へ適用し、有効性を検証した。このアプローチでは、べき乗則と線形硬化則を組み合わせて表現性能が改善された構成モデルを定義し、その材料定数を追加の実験データなしで推定できる。また、推定のために使用する応答曲面を事前にハイスループット数値シミュレーションによって準備することで、実験評価と同時に材料定数を求めることができる。

計装化押し込み試験では荷重を微小に設定することで材料微視構造中の構成相単独の力学特性を評価することができる [27, 28]。開発アプローチでは評価対象を等方弾塑性体と仮定したが、一般に微小構成相は異方的な力学挙動を示すため、手法の拡張が必要である。ま

た、本研究では、塑性特性において、ひずみ速度非依存性可塑性を仮定した。近年、高温での計装化押し込み試験が注目されており [29, 30]、クリープに代表されるひずみ速度依存性の評価方法の確立が期待されている [31–33]。

謝辞: 本研究の一部は、科学研究費補助金基盤B[21H01220]の助成を受けた。

備考: 本原稿は出版済の論文 [21] を基に作成した。

参考文献

- [1] Onishi, T., Kadohira, T., Watanabe, I., Relationship extraction with weakly supervised learning based on process-structure-property-performance reciprocity, *Sci. Technol. Adv. Mater.* 2018; 19: 649-659.
- [2] Yamanaka, A., Kamijyo, R., Koenuma, K., et al. Deep neural network approach to estimate biaxial stress-strain curves of sheet metals, *Mater. Des.* 2020; 195: 108970.
- [3] Zheng, X., Chen, T., Guo, X., Samitsu, S., Watanabe, I., Controllable inverse design of auxetic metamaterials using deep learning, *Mater. Des.* 2021; 211: 110178.
- [4] Kadambi, S.B., Divya, Y.D., Ramamurty, U., Evaluation of solid-solution hardening in several binary alloy systems using diffusion couples combined with nanoindentation, *Metall. Mater. Trans. A* 2017; 48: 4574-4582.
- [5] Ikeda, A., Goto, K., Osada, T., et al. High-throughput mapping method for mechanical properties, oxidation resistance, and phase stability in Ni-based superalloys using composition-graded unidirectional solidified alloys, *Scr. Mater.* 2021; 193: 91-96.
- [6] Goto, K., Ikeda, A., Osada, T., et al. High-throughput evaluation of stress-strain relationships in Ni-Co-Cr ternary systems via indentation testing of diffusion couples, *J. Alloys Compd.* 2022; 910: 164868.
- [7] Van Landingham, M.R., Review of instrumented indentation. *J Res Natl Inst Stand Technol.* 2003; 108: 249-265.
- [8] Oliver, W.C., Pharr, G.M., An improved technique for determining hardness and elastic modulus using load and displacement sensing indentation experiments. *J. Mater. Res.* 1992; 7: 1564-1583.
- [9] ISO-14577, Metallic materials – instrumented indentation test for hardness and materials parameters, ISO Central Secretariat Geneva, Switzerland (2002).
- [10] Li, T.L., Gao, Y.F., Bei, H., et al. Indentation Schmid factor and orientation dependence of nanoindentation pop-in behavior of NiAl single crystals. *J. Mech. Phys. Solids* 2011; 59: 1147-1162.
- [11] Dahlberg, C.F.O., Saito, Y., Oztop, M.S., et al. Geometrically necessary dislocation density measurements at a grain boundary due to wedge indentation into an aluminum bicrystal. *J. Mech. Phys. Solids* 2017; 105: 131-149.
- [12] Lu, S., Zhang, B., Li, X., et al. Grain boundary effect on nanoindentation: A multiscale discrete dislocation dynamics model. *J. Mech. Phys. Solids* 2019; 126: 117-135.
- [13] Matsuno, T., Ando, R., Yamashita, N., et al. Analysis of preliminary local hardening close to the ferrite-martensite interface in dual-phase steel by a combination of finite element simulation and nanoindentation test, *Inter. J. Mech. Sci.* 2020; 180: 105663.
- [14] Dao, M., Chollacoop, N., Van Vliet, K.J., et al. Computational modeling of the forward and reverse problems in instrumented sharp indentation, *Acta. Mater.* 2001; 49: 3899-3918.
- [15] Bucaille, J.L., Stauss, S., Felder, E., et al. Determination of plastic properties of metals by instrumented indentation using different sharp indenters, *Acta. Mater.* 2003; 51: 1663-1678.
- [16] Fernandez-Zelaia, P., Joseph, V.R., Kalidindi, S.R., et al. Estimating mechanical properties from spherical indentation using Bayesian approaches. *Mater. Des.* 2018; 147: 92-105.
- [17] Cheng, Y., Cheng, G., Can stress-strain relationships be obtained from indentation curves using conical and pyramidal indenters? *J. Mater. Res.* 1999; 14: 3493-3496.
- [18] Alkorta, J., Martinez-Esnaola, J.M., Sevillano, J.G., Absence of one-to-one correspondence between elastoplastic properties and sharp-indentation load-penetration data. *J Mater Res.* 2005; 20: 432-437.
- [19] Futakawa, M., Wakui, T., Tanabe, Y., et al. Identification of the constitutive equation by the indentation technique using plural indenters with different apex angles. *J. Mater. Res.* 2001; 16: 2283-2292.
- [20] Chen, T., Watanabe, I., Liu, D., et al. Data-driven estimation of plastic properties of alloys using neighboring indentation test, *Sci. Technol. Adv. Mater. Methods* 2021; 1: 143-151.
- [21] Chen, T., Watanabe, I., Data-driven estimation of plastic properties in work-hardening model combining power-law and linear hardening using instrumented indentation test, *Sci. Technol. Adv. Mater. Methods* 2022; 2: 416-424.

- [22] Goto, K., Watanabe, I., Ohmura, T., Determining suitable parameters for inverse estimation of plastic properties based on indentation marks. *Int. J. Plast.* 2019; 116: 81-90.
- [23] Goto, K., Watanabe, I., Ohmura, T., Inverse estimation approach for elastoplastic properties using the load–displacement curve and pile-up topography of a single Berkovich indentation. *Mater. Des.* 2020; 194: 108925.
- [24] Antunes, J.M., Menezes, L.F., Fernandes, J.V., Three-dimensional numerical simulation of Vickers indentation tests, *Inter. J. Solids Struct.* 2006; 43: 784-806.
- [25] Kang, J.J., Becker, A.A., Sun, W., Determining elastic–plastic properties from indentation data obtained from finite element simulations and experimental results, *Inter. J. Mech. Sci.* 2012; 62: 34-46.
- [26] Kucharski, S., Jarzabek, D., Depth dependence of nanoindentation pile-up patterns in copper single crystals, *Metall Mater Trans A* 2014; 45: 4997-5008.
- [27] Watanabe, I., Sun, Z., Kitano, H., et al. Multiscale analysis of mechanical behavior of multilayer steel structures fabricated by wire and arc additive manufacturing, *Sci. Tech. Adv. Mater.* 2020; 21: 461-470.
- [28] Watanabe, I., Chen, T., Taniguchi, S., et al. Heterogeneous microstructure of duplex multilayer steel structure fabricated by wire and arc additive manufacturing, *Mater. Charact.* 2022; 191: 112159.
- [29] Ruzic, J., Watanabe, I., Goto, K., et al. Nano-indentation measurement for heat resistant alloys at elevated temperatures in inert atmosphere, *Mater. Trans.* 2019; 60: 1411-1415.
- [30] Minnert, C., Oliver, W.C., Durst, K., New ultra-high temperature nanoindentation system for operating at up to 1100 °C. *Mater. Des.* 2020; 192: 108727.
- [31] Ginder, R.S., Nix, W.D., Pharr, G.M., A simple model for indentation creep. *J. Mech. Phys. Solids* 2018; 112: 552-562.
- [32] Chen, T., Watanabe, I., Funazuka, T., Characterization of the strain- rate-dependent plasticity of alloys using instrumented indentation tests, *Crystals* 2021; 11: 1316.
- [33] Phani, P.S., Oliver, W.C., Pharr, G.M., Influences of elasticity on the measurement of power law creep parameters by nanoindentation. *J. Mech. Phys. Solids* 2021; 154: 104527.