

マルチスケールモデリングによる多結晶金属のミクロ塑性ひずみの評価

(株) 豊田中央研究所 (研究時 東北大学大学院) 正 員 渡邊 育夢
東北大学大学院 正 員 寺田 賢二郎
九州大学大学院 正 員 堤 成一郎

1. はじめに

多くの分野で構造材料として利用されている金属材料の疲労予測は産業的に重要な課題である。実験事実によると降伏点以下の応力レベルであっても 10^4 回数以上の繰り返し载荷を行うと疲労挙動が発生することが知られている。これはマクロ的には顕在化していないが、ミクロな金属組織中で局所的な非弾性変形が発生しており、これが繰り返し载荷によって蓄積することで疲労挙動に至ると考えられる。本報では、疲労予測に資する情報を抽出することを目的として、多結晶金属のマルチスケールモデリング手法¹⁾を用いて、降伏点以下の微小ひずみ領域における結晶粒スケールの塑性ひずみ量を評価する。

2. 多結晶金属の均質化法に基づくマルチスケールモデリング

2.1 two-scale 境界値問題

均質化法に基づくマルチスケールモデリング²⁾を用いて、マクロな材料特性および多結晶組織の変形挙動を評価する2つのスケールの連成した境界値問題を解析する。各スケールの釣合い式は2変数 $x \in \mathcal{B}, y \in \mathcal{Y}$ により次式で与えられる。

● マクロスケール：

$$\int_{\mathcal{B}} \tilde{\tau} : \nabla_x \eta^0(x) \frac{dx}{J} - g_{\text{ext}}(\eta^0) = 0, \quad \forall \eta^0 \in \mathcal{V}_{\mathcal{B}} \quad (1)$$

$$\tilde{\tau}(x) = \frac{1}{|\mathcal{Y}|} \int_{\mathcal{Y}} \tau^0(x, y) dy \quad (2)$$

● ミクロスケール：

$$\int_{\mathcal{Y}} \tau^0(x, y) : \nabla_y \eta^1 \frac{dy}{J_y} = 0, \quad \forall \eta^1 \in \mathcal{V}_{\mathcal{Y}}^{\text{per}} \quad (3)$$

$$\tau^0(x, y) \text{ [determined by constitutive equations]} \quad (4)$$

ここで、 $J_y, \tilde{J}$ は $dy = J_y dY, dx = \tilde{J} dX$ で定義される各スケールにおける体積変化を表し、 g_{ext} は外力項である。ミクロスケールの応力 τ^0 は次節で与える結晶塑性構成モデルにより評価する。マクロ変数 (例えば、マクロ応力 $\tilde{\tau}$) は式 (2) のようにミクロスケールの対応した変数の体積平均応力として計算される。

2.2 結晶塑性構成モデル

結晶塑性構成モデルは単結晶の結晶構造に依存した塑性変形挙動を表現する。 n_{slip} 個のすべり系を有する結晶構造を想定し、すべり系 α の降伏関数は Kirchhoff 応力 τ , す

表-1 結晶塑性構成モデルの材料定数

弾性係数	C_{11} [GPa]	130.
弾性係数	C_{12} [GPa]	90.
弾性係数	C_{44} [GPa]	40.
臨界分解せん断応力	$\tau_Y^{(\alpha)}$ [GPa]	0.008
自己硬化定数	$h_{\alpha\beta} (\alpha = \beta)$ [GPa]	0.05
潜在硬化定数	$h_{\alpha\beta} (\alpha \neq \beta)$ [GPa]	0.07

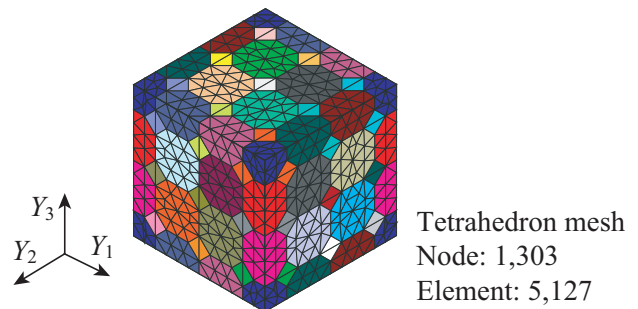


図-1 多結晶組織の有限要素モデル

べり方向ベクトル $s_t^{(\alpha)}$, すべり面の法線ベクトル $m_t^{(\alpha)}$ を用いて次のように定義できる。

$$\phi^{(\alpha)} := |s_t^{(\alpha)} \cdot (\tau m_t^{(\alpha)})| - \tau_Y^{(\alpha)} - \sum_{\beta=1}^{n_{\text{slip}}} h_{\alpha\beta} \xi_t^{(\beta)} \leq 0 \quad (5)$$

ここで、 $\tau_Y^{(\alpha)}$ は降伏応力であり、 $\xi^{(\alpha)}$ は塑性履歴パラメータ (すべり系 α のすべり量)、 $h_{\alpha\beta}$ は硬化定数で自己硬化 ($\alpha = \beta$)、潜在硬化 ($\alpha \neq \beta$) の2種類を考える。それぞれのすべり系は互いに従属関係にある。

3. 数値解析

3.1 解析モデル

ミクロモデルとして端部に周期境界条件が設定された図-1の有限要素モデルを用いる。このモデルは多結晶組織を想定しており、結晶方位を乱数で与えた54個の結晶粒で構成される。各結晶粒の材料特性はステンレス鋼の実験結果を再現するように適当に設定し、表-1で与える。ここで、弾性係数を弾性異方性指数³⁾が

$$A = 2C_{44}/(C_{11} - C_{12}) = 2. \quad (6)$$

となるように設定した。弾性異方性指数は原子軌道、結晶構造などに依存する材料特性である。

マクロモデルは単一の有限要素とし、これに単軸引張変形を与え、ミクロモデルの変形状態を制御する。

キーワード：多結晶金属，均質化法，マルチスケール解析，結晶塑性論，疲労予測

〒480-1192 愛知郡長久手町大字長湫字横道 41-1, TEL 0561-71-7796, FAX 0561-63-5426

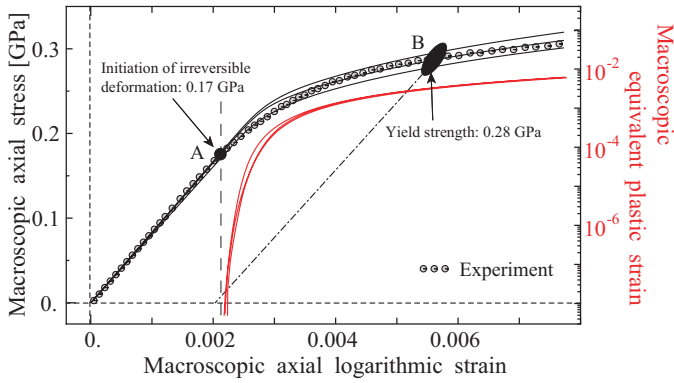
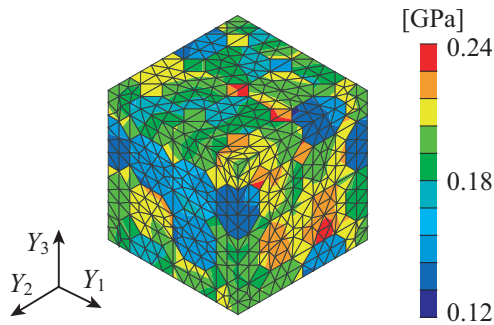
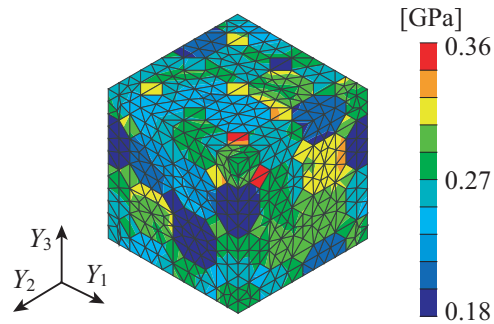


図-2 マクロ応力/相当塑性ひずみ-ひずみ関係



(a) ミクロスケール塑性開始 (点 A)



(b) 降伏応力 (点 B)

図-3 ミクロスケール Mises 応力分布

3.2 塑性ひずみの定義

塑性変形勾配 F^p を用いて塑性ひずみおよび相当塑性ひずみを次式で定義する。

$$E^p := \frac{1}{2} (F^{pT} F^p - \mathbf{1}), \quad (7)$$

$$\varepsilon^{p*} := \sqrt{\frac{3}{2} \text{dev}[E^p] : \text{dev}[E^p]} \quad (8)$$

ここで、 $\mathbf{1}$ は 2 階の単位テンソルである。

3.3 解析結果

図-1 中の直交する Y_1 , Y_2 , Y_3 軸方向にマクロ単軸引張変形を与えた際のマクロ応力/相当塑性ひずみ-ひずみ関係を図-2 に示す。図中に実験で観測したステンレス鋼の応答を示した。

ミクロスケールにおける塑性変形は各方向ともほぼ同

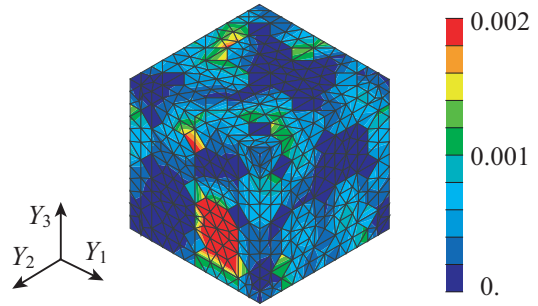


図-4 ミクロスケール相当塑性ひずみ分布 (点 B)

じひずみ量 (点 A) で発生し、ほぼ同じ傾向で増加する。ひずみ 0.2% オフセット耐力 (点 B) を降伏強度と考えると、ミクロスケールで塑性変形が生じる応力と降伏強度は $1.65 = 0.27/0.17$ と 2 倍近い差がある。

ここで、 Y_1 方向に変形させた際の点 A および点 B におけるミクロスケールの Mises 応力分布を図-3 に示す。はじめは弾性異方性により応力状態が非均質となっているが、点 A 以降は塑性変形が局所的に発生し、組織の状態が急激に変化する。このため、点 A と点 B の分布状況は全く異なる。さらに、点 B における塑性ひずみの分布を図-4 に示す。図-4 に見られるように、点 B のひずみ量では塑性状態となっていない結晶粒も見られ、未だ組織の状態は安定していない。

3.4 考察

非弾性変形の開始点はミクロスケールにおいて非均質な変形状態で局所的に発生する。この非均質変形は弾性異方性に起因するものであり、結晶粒の弾性異方性が強いほど、非均質性も高くなるため、非弾性変形の開始点は材料特性に依存する。また、析出物を含むような金属組織では、介在物周辺で応力集中が発生するため、本報の解析結果とは全く異なる傾向が得られる可能性がある。

4. まとめ

多結晶金属のマルチスケールモデリング手法を用いて、降伏点近傍の微小ひずみ領域におけるミクロスケールの塑性ひずみ量を評価した。本報では、降伏強度よりもかなり低い応力でミクロスケールでは非弾性変形が発生していることを示したが、これは組織を構成する結晶や複合相に依存した特性と考えることができる。よって、材料組織と微小ひずみ領域におけるミクロな塑性挙動、さらには疲労予測へつながらせる可能性がある。

参考文献

- 1) 渡邊育夢, 寺田賢二郎, 松井和己, 秋山雅義, 根石 豊: 多結晶金属のマルチスケール解析, 応用力学論文集, Vol.6, pp.239-246, 2003.
- 2) 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, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, Vol. 192, pp.3531-3563, 2003.
- 3) Mason, W.P.: Physical Acoustics and the Properties of Solids, D. Van Nostrand Company, Inc., Princeton, New Jersey, 1958.