I －36　結晶粒の損傷を考慮した多結晶金属のマルチスケール解析

東北大学大学院　学○ 渡邊育夢　　学　田端大人
正　寺田賢二郎

1. はじめに

高強度鋼の開発でミクロ組織を制御する強化機構が採用されたことで，ミクロ組織の情報からマクロ強度特性を評価する手法の開発が求められている．多結晶金属のマクロ力学特性を結晶粒の集合体として評価するマルチスケールモデリングは古くから行われてきたが，一般に既往の研究で考慮されているのは弾塑性応答のみであり，材料的な延性破壊に伴うマクロ引張強度を評価することはできない．

そこで，本研究では均質化法に基づく多結晶金属のマルチスケール解析手法[1]において，結晶粒の構成モデルで損傷を考慮し，マクロ引張強度を評価できるモデルを提案する．また，提案手法の実証としてマルチスケール解析を実施する．

2. 結晶体の弾塑性・損傷構成モデル

既往の研究で結晶粒の構成モデルとして採用される結晶塑性構成モデルに連続体損傷理論[2]に基づく構成モデルを連成させる．この構成モデルは弾塑性損傷の運動学の提案およびマルチサーフェイス塑性論の適用により定式化される．

2.1 弾塑性と損傷の運動学

本研究では全変形勾配 $\boldsymbol{F}$ は弾性成分 $\boldsymbol{F}^{\mathrm{e}}$，塑性成分 $\boldsymbol{F}^{\mathrm{p}}$，損傷成分 $\boldsymbol{F}^{\mathrm{d}}$ の積として次式で表現する．

$$\boldsymbol{F} := \boldsymbol{F}^{\mathrm{e}}\boldsymbol{F}^{\mathrm{d}}\boldsymbol{F}^{\mathrm{p}} \tag{1}$$

また，損傷変形の変形勾配は弾性部分 $\boldsymbol{F}^{\mathrm{ed}}$ と非弾性部分 $\boldsymbol{F}^{\mathrm{id}}$ の積とすると $\boldsymbol{F}^{\mathrm{d}} := \boldsymbol{F}^{\mathrm{ed}}\boldsymbol{F}^{\mathrm{id}}$ と表されるので，式(1) は損傷を含む変形勾配の弾性部分 $\boldsymbol{F}^{\mathrm{E}}$ と非弾性部分 $\boldsymbol{F}^{\mathrm{I}}$ の乗算分解として書き換えることができる．

$$\boldsymbol{F} = \left(\boldsymbol{F}^{\mathrm{e}}\boldsymbol{F}^{\mathrm{ed}}\right)\left(\boldsymbol{F}^{\mathrm{id}}\boldsymbol{F}^{\mathrm{p}}\right) := \boldsymbol{F}^{\mathrm{E}}\boldsymbol{F}^{\mathrm{I}} \tag{2}$$

この弾性・非弾性乗算分解は一般の弾塑性問題と同様に，基準配置，中間配置，現配置の３つの配置で記述でき，弾塑性論の枠組みで構成モデルの定式化できる．

2.2 構成モデルの基礎式

結晶塑性構成モデル　単結晶のすべりは結晶構造によって決まるすべり系で記述され，すべり系 $\alpha \in \{1,\cdots,n_{\mathrm{slip}}\}$ の降伏関数は次式で定義される．

$$\phi^{(\alpha)} := \left|\tau^{(\alpha)}\right| - \tau_{\mathrm{Y}}^{(\alpha)} - \sum_{\beta=1}^{n_{\mathrm{slip}}} h_{\alpha\beta}\xi^{(\beta)} \leq 0 \quad \forall\alpha \tag{3}$$

ここで，$\tau^{(\alpha)}$ はすべり方向の分解応力，$\tau_{\mathrm{Y}}^{(\alpha)}$ は臨界せん断応力，$h_{\alpha\beta}$ は硬化定数であり，n_{slip} はすべり系の数である．

損傷構成モデル　物体内部に蓄積できるエネルギーに上限があり，これを超えると損傷が開始すると考え，弾性左 Cauchy-Green 変形テンソル $\boldsymbol{C}^{\mathrm{E}}$，損傷パラメータ D を変数として損傷の判定基準を次式で定義する．

$$\phi^{(0)}(\boldsymbol{C}^{\mathrm{E}}, D) := \exp[-D]\Psi^{\mathrm{e}}(\boldsymbol{C}^{\mathrm{E}}, D) - E_D - HD \leq 0 \tag{4}$$

ここで，Ψ^{e} は超弾性ひずみエネルギー関数，E_D は損傷開始のエネルギー値，H は損傷に対する一種の硬化定数である．

損傷の判定基準を結晶塑性構成モデルの降伏関数 $\phi^{(\alpha)}$ と同様に扱うことで，マルチサーフェイス塑性論の枠組みで発展方程式および計算アルゴリズムを導出することができる．

損傷は次式のように超弾性構成モデルに反映される．

$$\hat{\boldsymbol{S}} = 2\exp[-D]\frac{\partial\Psi^{\mathrm{e}}}{\partial\boldsymbol{C}^{\mathrm{E}}} \tag{5}$$

ここで，$\hat{\boldsymbol{S}}$ は中間配置における第 2Piola-Kirchhoff 応力である．

3. 多結晶金属のマルチスケール解析

3.1 2変数境界値問題

均質化法に基づくマルチスケールモデリング[3]では，各スケールの釣合式がミクロおよびマクロスケールの位置ベクトル $\boldsymbol{y} \in \mathcal{Y}$，$\boldsymbol{x} \in \mathcal{B}$ を変数として以下のように与えられる．

- ミクロ構造の境界値問題：

$$\int_{\mathcal{Y}} \boldsymbol{\tau}^0(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}) : \nabla_y\boldsymbol{\eta}^1 \frac{dy}{J_y} = 0, \quad \forall\boldsymbol{\eta}^1 \in \mathcal{V}_{\mathcal{Y}}^{\mathrm{per}} \tag{6}$$

$$\mathcal{V}_{\mathcal{Y}}^{\mathrm{per}} = \left\{\boldsymbol{v} : \mathcal{Y} \mapsto \mathcal{R}^{n_{\mathrm{dim}}} \,\middle|\, v_i \in W^{1,p};\ \mathcal{Y}\text{-periodic}\right\}$$

$$\boldsymbol{\tau}^0(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}) :\quad [\text{任意の構成モデル}] \tag{7}$$

- マクロ構造の境界値問題：

$$\int_{\mathcal{B}} \tilde{\boldsymbol{\tau}}(\boldsymbol{x}) : \nabla_x\boldsymbol{\eta}^0 \frac{dx}{\tilde{J}} - g_{\mathrm{ext}}(\boldsymbol{\eta}^0) = 0, \ \forall\boldsymbol{\eta}^0 \in \mathcal{V}_{\mathcal{B}} \tag{8}$$

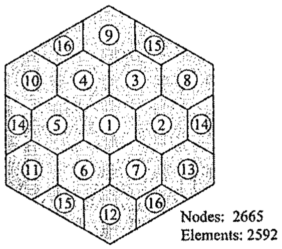
$$\mathcal{V}_{\mathcal{B}} = \left\{\boldsymbol{v} : \mathcal{B} \mapsto \mathcal{R}^{n_{\mathrm{dim}}} \,\middle|\, v_i \in W^{1,p},\ \boldsymbol{v} = \boldsymbol{0} \text{ on } \Gamma_u\right\}$$

$$\tilde{\boldsymbol{\tau}}(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{|\mathcal{Y}|}\int_{\mathcal{Y}} \boldsymbol{\tau}^0(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})\, dy \tag{9}$$

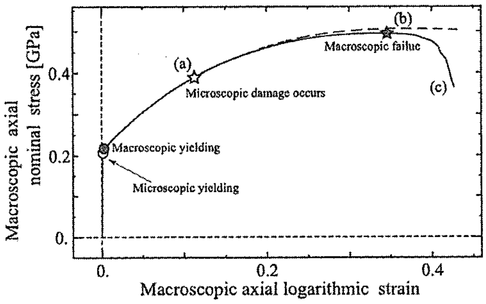
ここで，$J_y, \tilde{J}$ は $dy = J_y dY$, $dx = \tilde{J}dX$ で定義される各スケールにおける体積変化を表し，g_{ext} は外力項，$W^{1,p}$ は１階の導関数が p 乗可積分な空間 L_p に属す関数の空間である．また，$\boldsymbol{\eta}^1$ と $\boldsymbol{\eta}^0$，$\boldsymbol{\tau}^0$ と $\tilde{\boldsymbol{\tau}}$ は，それぞれミクロおよびマクロスケールにおける変分，Kirchhoff

表–1 結晶粒の材料定数

弾性定数	E [GPa]	200
ポアソン比	ν	0.3
降伏応力	$\tau_Y^{(\alpha)}$ [GPa]	0.1
自己硬化定数	$h_{\alpha\beta}$ $(\alpha=\beta)$ [GPa]	0.5
潜在硬化定数	$h_{\alpha\beta}$ $(\alpha\neq\beta)$ [GPa]	0.7
損傷判定値	E_D [kJ]	0.01
損傷硬化定数	H [kJ]	0.01



図–1 2次元ミクロ有限要素モデル（16結晶粒）



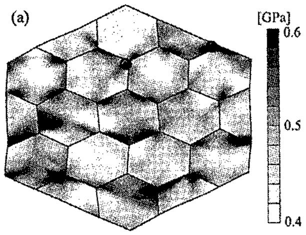
図–2 マクロ応力-ひずみ関係

応力である．ミクロスケールの構成モデルは任意に設定することができる．ここでは，前節で提案した損傷を考慮した結晶体の構成モデルを採用する．

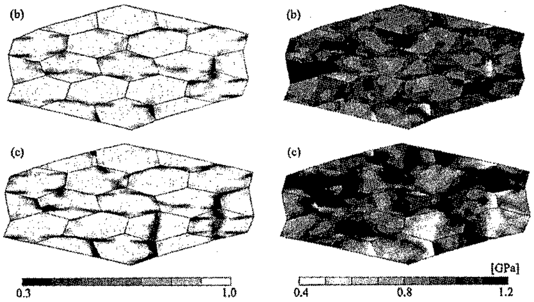
3.2 数値解析

平面ひずみ条件において2次元問題を設定し，図–1に示す16個の結晶粒からなるミクロモデルを用いてマルチスケール解析を実施する．結晶方位は乱数で与え，材料定数は表–1を用いる．すべり系は同一平面内に120度ごとにすべり方向ベクトルが配置された3重2次元すべり系を採用する．

マクロ単軸引張変形を与えた際のマクロ応力-ひずみ関係を図–2に示す．図中の実線は提案手法の応答であり，点線は損傷を考慮しない場合の応答である．結晶粒の損傷を考慮することでマクロ応力の低下，すなわち，マクロ引張強度を再現することができている．図–2中の点a，b，cはそれぞれ損傷開始点，マクロ応力が最大となる点，剛性が $-\infty$ になる状態となる点である．



図–3 ミクロMises応力分布（点a）



損傷パラメータ　　Mises応力

図–4 ミクロ変形状態（点b, c）

点aにおけるミクロスケールのMises応力分布を図–3に示す．各結晶粒の異方性を有するため，粒間および粒内で非均質変形が生じる．特に，結晶粒界付近では局所的な変形が生じ，応力集中が見られる．損傷も結晶粒界周辺の図中の円で囲んだ領域で発生する．点b，cにおけるミクロモデル中の損傷パラメータ（$\exp[-D]$）とMises応力の分布を図–4に示す．点bに至るまで，損傷は結晶粒界に沿って局所的に発生する．その後は結晶粒内に損傷が進展し，点cでは結晶粒内にも損傷とこれによるミクロ構造全体での応力低下が確認できる．

4. まとめ

本研究では，結晶塑性構成モデルと損傷構成モデルを連成させ，損傷を考慮した結晶粒の構成モデルを定式化した．この構成モデルを均質化法に基づくマルチスケールモデリングのミクロ境界値問題に導入してマルチスケール解析を行い，ミクロスケールにおいて結晶粒の弾塑性変形から破壊に至る金属材料の変形過程を再現することで材料のマクロ引張強度を評価できることを示した．

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, 土木学会, Vol.6, pp.239–246, 2003.
2) Kachanov, L.M.: *Introduction to Continuum Damage Mechanics*, M. Nijhoff, Boston, 1986.
3) 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.