

炭素鋼の微視構造が巨視的な降伏・加工硬化特性に与える影響

Influence of the micro-structure of carbon steel on the yield stress and the properties of strain hardening

松井和己*・寺田賢二郎**・秋山雅義***・久保木孝****

日下桂一†・及川兼司†

Kazumi MATSUI, Kenjiro TERADA, Masayoshi AKIYAMA, Takashi KUBOKI,
Keiichi KUSAKA and Kenji OIKAWA

*学生員 修(工学) 東北大学大学院 工学研究科土木工学専攻 (〒980-8579 仙台市青葉区荒巻字青葉 06)

**正会員 Ph.D. 東北大学大学院助教授 工学研究科土木工学専攻

***Ph.D. 住友金属(株)総合技術研究所 (〒660-0891 兵庫県尼崎市斑鳩町 1-8)

****博(工学)(株)住友金属小倉 商品技術部 (〒802-8686 北九州市小倉北区許斐町 1)

†学生員 学(工学) 東北大学大学院 工学研究科土木工学専攻

The influences of microstructures on the yielding and strain hardening characteristics of carbon steel are examined in the framework of computational homogenization. We first conduct the tensile tests on two kinds of specimens; steel with pearlite and spheroidized cementite structures. Then the numerical two-scale analysis is performed to simulate the tensile tests by the global-local analysis method. Using the numerical results, we clarify the micro-scale mechanisms, which characterize the macroscopic plastic behavior. Finally, the multi-scale inverse analysis method is proposed to show that the experimental facts entail the higher yield stress of ferrite (Fe) for pearlite structures.

Key Words : Carbon steel, Yield stress, Strain hardening, Homogenization method, Response surface methodology

1. はじめに

鉄鋼材料はあらゆる工学分野で使用されており、社会基盤の最も重要な材料の一つである。その力学挙動を表現するための実験あるいは理論的研究が盛んに行われ、数多くの構成モデルが提案されてきた。これら既往の研究成果の多くは、その鉄鋼材料が均質体であるという前提のもとで、供試体に対する材料実験から得られた応力・ひずみ関係に基づいて構築されたものである。ところが、炭素鋼のミクロ組織を電子顕微鏡で観察すると、フェライト(Fe)とセメンタイト(Fe_3C)によって形成される複雑なミクロ構造を有していることも知られている。すなわち、一般的に均質な連続体としてモデル化される「材料」であっても、その微視領域を観察すると複雑なミクロ「構造」を有している一種の複合材料であることが広く認知されている。

このような炭素鋼のミクロ組織、特にセメンタイトの形態は熱処理によって大きく変化することも知られており、このことが材料実験から得られる巨視的な機械特性に大きな影響を与えていることが報告されはじめて¹⁾。すなわち、これまで材料実験から得られていた機械特性は、あくまでもそのミクロ構造、あるいは微視領域で生じている力学現象の影響を受けたものである。このような「材料」の力学挙動をより厳密に表現するためには、全体を均質体と見なした力学モデルだけでは不十分であり、微視領域で生じている力学現象までも考慮する必要がある。

このようなミクロとマクロ(巨視)という異なる空間スケールでの力学挙動をモデル化するための手法として、数学的均質化法^{2)~4)}が挙げられる。これによれ

ば、材料が呈する巨視的な力学挙動と、その微視領域で生じている力学現象を数学的に関連づけることが可能となり、Global-Local 的な視点に立った力学モデルを構築することができる。均質化法に基づくマルチスケール有限要素解析法⁵⁾は、このようなモデル化によりミクロ・マクロが連成した境界値問題を導出し、これを有限要素法によって解くことにより、微視領域での力学現象を反映したマクロ構造解析を可能にするものである。また、実験では観察することが困難とされる微視領域での力学現象についても、容易に数値的な評価が可能となるため、この手法は様々な力学現象の解明に役立つものと期待され、これまでに多くの研究成果が報告されてきた^{6)~11)}。

本研究では、均質化法に基づくマルチスケールモデリングにより、炭素鋼の最も基本的な機械特性である巨視的な初期降伏応力と加工硬化特性について、そのミクロ構造が与える影響を考察し、そのメカニズムの解明を試みる。炭素鋼の代表的なミクロ組織を模擬した周期的なミクロ構造モデル(ユニットセル)に対して弾塑性マルチスケール解析を行い、得られる力学応答と実験結果とを比較・検討する。

2. 均質化法に基づく two-scale 境界値問題

図-1に示すような複数の弾塑性体を構成材料とする非均質体を考える。実数空間を $\mathcal{R}$ としたとき、この構造全体の n_{dim} 次元領域を $\Omega^e \in \mathcal{R}^{n_{\text{dim}}}$ で表す。また、この領域 Ω^e における非均質性は、代表長さ ϵ を有する基本周期構造領域(以下ユニットセルと呼ぶ)内にお

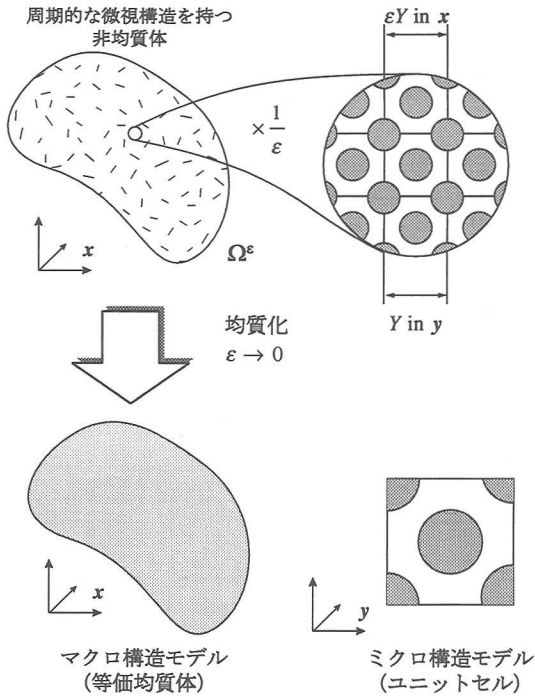


図-1 均質化法に基づくマルチスケールモデリング

る幾何形状および構成材料の物性によって定義されており、全体構造は微小なユニットセルを繰り返し配置することによって覆うことができるものとする。したがって、この非均質体の巨視的な力学挙動はユニットセル内で定義される現象だけでなく、その大きさ ϵ にも依存する。

一般的な均質化理論の記述にしたがって⁴⁾、微視的な非均質性が観察できないマクロスケール $x \in \Omega$ と、非均質性が定義される微視領域を測る尺度であるミクロスケール $y \in \mathcal{R}^{n_{\text{dim}}}$ を導入する。この2つのスケールはミクロ構造の大きさを表すパラメータ ϵ によって、 $y = x/\epsilon$ のように関連づけられている。マクロスケール x はミクロ構造に依存しない全体領域 Ω での力学挙動を表現するための尺度であり、ユニットセル領域内 Y で分布する場の変数を観察するためにはミクロスケール y を用いることになる。こうして非均質材料の占める全体領域 Ω^ϵ は、マクロ領域 Ω と微視領域 $\epsilon\mathcal{R}^{n_{\text{dim}}}$ との積空間と見なすことができ、便宜的に

$$\Omega^\epsilon := \left\{ y \in \mathcal{R}^{n_{\text{dim}}} \mid y = \frac{x}{\epsilon} \right\} := \Omega \times \epsilon Y \quad (1)$$

と表すことができる。このような設定のもとで、変位・応力・ひずみなどの場の関数は2つのスケールを用いてそれぞれ $u(x, y)$, $\sigma(x, y)$, $\epsilon(x, y)$ のように表現される。また、これらの変数はミクロスケール y について「Y-周期的である」と仮定する。

以上のようにミクロ・マクロそれぞれに異なる2つのスケールを導入し、 $\epsilon \rightarrow 0$ の極限をとることによって非均質体のマクロ挙動を支配する方程式を導く数学的な手続きは均質化と呼ばれている⁴⁾。均質化法の数学理論によれば、マクロおよびミクロ変数についての境界値問題を個別に設定することができ、有限要素法などの解析手法を用いてミクロ・マクロの解析を同時に

行うマルチスケール解析が実現される⁵⁾。弾塑性問題に対する定式化の詳細や数値解析アルゴリズムなどは文献⁵⁾を参照することとし、ここでは導出された境界値問題のみを与える。

微視領域において満たすべき境界値問題は次のようになる。

$$\int_Y \nabla_y \eta^1 : \sigma \, dy = 0, \quad \forall \eta^1 \in \mathcal{V}_{\text{per}}, \quad (2)$$

$$\sigma = \frac{\partial W}{\partial \epsilon} \quad (3)$$

$$\epsilon = \text{sym}(\nabla_x u^0 + \nabla_y u^1) \quad (4)$$

ここで、 σ と ϵ はそれぞれミクロ応力とミクロひずみであり、 $\mathcal{V}_{\text{per}}$ は Y-周期的な許容関数空間を表す。また、 $u^1 \in \mathcal{V}_{\text{per}}$ は Y-周期的なミクロ変位であり、これとマクロ変位 u^0 を用いて、ユニットセル内の変位 w は次のように与えられる。

$$w = \text{sym}(\nabla_x u^0(x)) \cdot y + u^1(x, y) \quad (5)$$

さらに、ミクロ構造の構成材料の弾塑性挙動が古典的な J_2 塑性理論に従うものと仮定すると、流れ則および硬化則、Kuhn-Tucker 形式の載荷・除荷条件は次のように与えられる。

$$\dot{\epsilon}^p = \gamma \frac{\partial f(\sigma, q)}{\partial \sigma} \quad (6)$$

$$\dot{\alpha} = -\gamma \frac{\partial f(\sigma, q)}{\partial q} \quad (7)$$

$$f \leq 0, \quad \gamma \geq 0, \quad f\gamma = 0 \quad (8)$$

ここで、 f は微視領域で定義される降伏関数であり、 $\dot{\epsilon}^p$ と γ はそれぞれ塑性ひずみ速度、塑性 consistency パラメータである。また α は、硬化パラメータ q と Legendre 変換を介して共役な塑性硬化に関する内部変数である。

一方で、マクロ構造に関しては、平均密度およびマクロ応力、マクロひずみがそれぞれ次のようなミクロ変数の体積平均

$$\rho^H = \frac{1}{|Y|} \int_Y \rho \, dy \quad (9)$$

$$\Sigma(x) = \frac{1}{|Y|} \int_Y \sigma(x, y) \, dy \quad (10)$$

$$E(x) = \frac{1}{|Y|} \int_Y \epsilon(x, y) \, dy = \text{sym}(\nabla_x u^0) \quad (11)$$

で与えられ、マクロ変位 $u^0 \in \mathcal{U}$ を解とするつりあい式は次のようになる。

$$\int_\Omega \nabla_x \eta^0 : \Sigma \, dx = \int_\Omega \rho^H b \cdot \eta^0 \, dx + \int_{\Gamma_\sigma} T \cdot \eta^0 \, ds, \quad \forall \eta^0 \in \mathcal{V} \quad (12)$$

ここで、 T は境界 Γ_σ 上に作用する表面力、 b は単位質量あたりに働く物体力である。また、 $\mathcal{U}$, $\mathcal{V}$ はそれぞれ変分形式における試行、試験関数の集合である。

以上のように、非均質弾塑性体に対するマルチスケール問題は、式 (2) から式 (8) を満足するようなミクロ状態変数

$$\chi^1 := \{u^1, \epsilon, \epsilon^p, \sigma, \alpha, \gamma\} \quad (13)$$

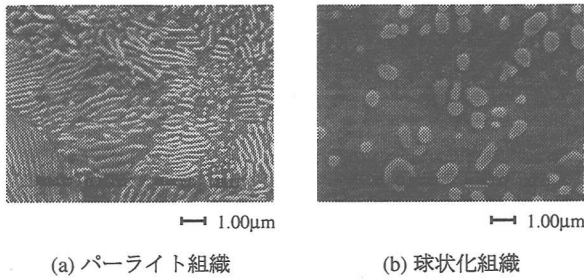


図-2 炭素鋼のミクロ組織

を求め、これらのユニットセル内平均量を含むマクロ状態変数

$$\chi^0 := \{u^0, \Sigma, E\} \quad (14)$$

が式 (12) を満足するような解を求めるという、ミクロ・マクロ両スケールが連成した境界値問題となる。

3. 炭素鋼の材料実験とマルチスケール解析

ここでは、本研究で行った炭素鋼に対する引張試験と、弾塑性マルチスケール解析の結果を与え、巨視的な視点からの比較・考察を行う。

3.1 炭素鋼に対する材料実験

炭素含有量 0.8% (質量分率) の炭素鋼 (1080C 材) に対して、その微視的な炭化物形態が巨視的な機械特性に及ぼす影響を調べることを目的として材料実験および走査型電子顕微鏡 (SEM) によるミクロ組織の観察を行った。

サンプル、熱間圧延上りのまま (パーライト組織)、および球状化熱処理を行ったもの (球状化組織) の 2 つを用意し、それぞれ「熱間加工から冷却」の過程で生じているおそれのある加工硬化 (転移のパイルアップ等) を取り除くための熱処理を行った。これらのミクロ組織の SEM による観察結果を図-2 に示すが、球状化熱処理によってセメンタイト (図中の白い部分) の形態が層状から球状へと変化していることがわかる。

このサンプルから供試体を機械加工によって削り出し、一軸の引張試験を行い、得られた応力・ひずみ関係を図-3 に示す。この図から、同一の炭素含有量であってもその炭化物形態の違いによって、全く異なる機械特性を示す様子がわかる。

3.2 弾塑性マルチスケール解析

SEM によるミクロ組織の観察結果 (図-2) を参考に、パーライト組織、球状化組織それぞれの特徴を反映させた 2 種類のミクロ有限要素モデルを作成した。ここで、パーライト組織がある方位を持った層状セメンタイトの集合体であり、これらがランダムに配置されるという特徴を重視し、さらに周期境界条件を満足するように作成した (図-4)。また、これらのモデルにおけるセメンタイトの含有量は 0.8% (質量比) として、材料実験における供試体と一致させた。となるようにパーライト組織、球状化組織に対応する 2 種類のミクロ有限要素モデルを作成した。フェライト (図-2

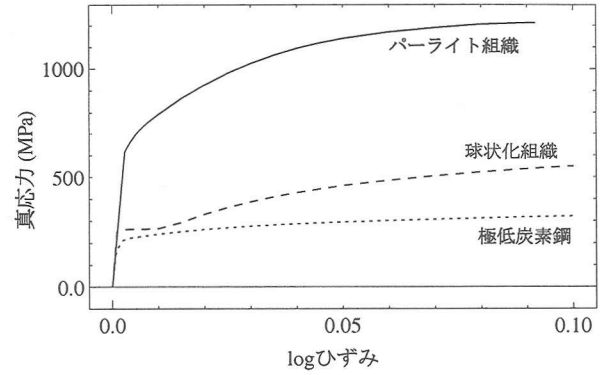


図-3 実験から得られた応力・ひずみ関係

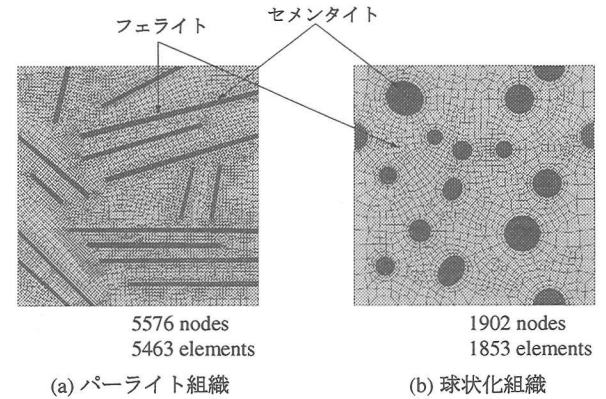


図-4 炭素鋼のミクロ構造モデル

中の黒い部分、図-4 では白い部分; Fe) は、次に示す非線形の等方硬化を仮定し、 J_2 塑性理論に従う弾塑性体であるとした。

$$f(\sigma, \alpha) := \|\text{dev}(\sigma)\| - \sqrt{\frac{2}{3}} (\sigma_Y + K(\alpha)) \quad (15)$$

$$K(\alpha) = H\alpha + (\sigma_Y^\infty - \sigma_Y)(1 - \exp[-\delta\alpha]) \quad (16)$$

ここで σ_Y は初期降伏応力、 H 、 σ_Y^∞ 、 δ はそれぞれ加工硬化に関する材料パラメータである。フェライトと、極低炭素鋼と呼ばれる炭素含有量が非常に小さい (質量分率 0.008%) 鋼材の機械特性が同一であるという仮定のもと、極低炭素鋼に対する一軸引張試験をおこない、この結果とのキャリブレーションによって次のように決定した (図-5)。

$$\begin{aligned} E &= 229.00 \text{ (GPa)}, \quad \mu = 0.30, \\ \sigma_Y &= 172.30 \text{ (MPa)}, \quad H = 351.32 \text{ (MPa)}, \\ \sigma_Y^\infty &= 239.17 \text{ (MPa)}, \quad \delta = 58.66 \end{aligned}$$

一方で、セメンタイトはその単層組織に対する実験が困難なため、用いた材料特性は文献¹²⁾を参照した ($E=177.0$ (GPa), $\nu=0.26$)。また、セメンタイトの初期降伏応力はフェライトに比べてはるかに大きいため、本研究では炭化物を塑性変形しない線形弾性体であると仮定した。このとき、これらのミクロモデルが呈す

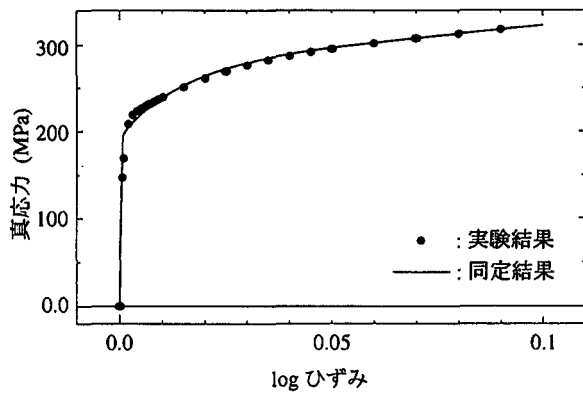


図-5 実験結果と同定結果との比較

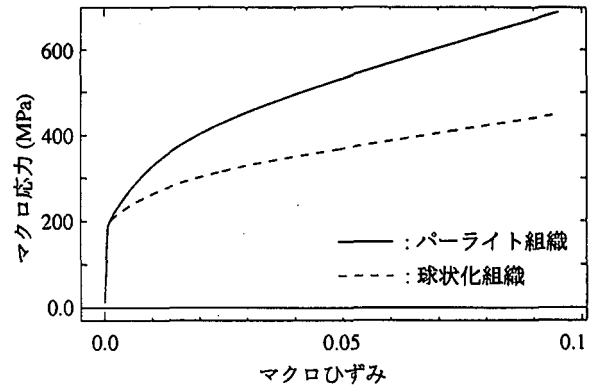


図-6 マルチスケール解析による巨視的な応力・ひずみ関係

る均質化弾性マトリクスはそれぞれ,

$$E_{\text{pearlite}}^H = \begin{bmatrix} 294 & 122 & 6.96 \times 10^{-4} \\ & 293 & 2.86 \times 10^{-5} \\ \text{sym} & & 85.4 \end{bmatrix} \text{ (GPa)}$$

$$E_{\text{spheroidized}}^H = \begin{bmatrix} 294 & 123 & 2.32 \times 10^{-4} \\ & 294 & 3.13 \times 10^{-4} \\ \text{sym} & & 85.5 \end{bmatrix} \text{ (GPa)}$$

となることから、ここで用いたマイクロ構造がほぼ等方的であることがわかる。

マクロ構造における载荷条件を一様引張として弾塑性マルチスケール解析を行った。得られた巨視的な応力・ひずみ関係を図-6に示す。この図から、微視領域におけるセメンタイト形態の違いが、巨視的な降伏後の加工硬化特性に大きく影響を与えていることがわかる。また、この結果は図-3に示した材料実験の結果と定性的に一致するものであり、マルチスケール解析手法がこのようなマイクロ・マクロが連成した力学挙動を評価する手法として有効であることがわかる。しかしその一方で、材料実験では明確に確認できた初期降伏応力の差異がマルチスケール解析ではほとんど見られない。球状化組織における降伏棚の有無に関しては、このような不連続あるいは不安定な挙動を表現する力学モデルが考慮・反映されていないためであると考えられるが、実験で降伏棚が観察されなかったパーライト組織では、マルチスケール解析によって得られた初期降伏応力は実験結果のおよそ半分の値となっている。次節では、このような結果が得られた直接的な要因であるマイクロ構造の影響について議論する。

4. 微視領域における力学挙動の影響

本節では、弾塑性マルチスケール解析から得られたパーライト組織、球状化組織それぞれの微視領域における力学挙動に対して詳細な考察を行い、両者を比較しながらセメンタイトの形態が炭素鋼の巨視的な加工硬化特性に及ぼす影響、およびそのメカニズムを議論する。さらに、実験結果と解析結果において巨視的な初期降伏応力が大きく異なる原因についても考察する。

4.1 セメンタイトの形態が加工硬化特性に及ぼす影響

図-7には、パーライト組織と球状化組織それぞれの微視領域において、巨視的な変形の進行に伴って相当塑性ひずみの分布が変化する様子を示す。

パーライト組織では、セメンタイトの端部のフェライトから塑性変形が始まり、局所的に大きな塑性ひずみを生じていることがわかる。巨視的な変形の増加に伴って塑性域は進展しようとするが、線形弾性体を仮定したセメンタイトの存在によって進展が妨げられるため、局所的な塑性変形がより大きくなる。一方でセメンタイトの側面には端部ほどの応力集中が見られないため、この領域では塑性変形がほとんど生じておらず、特にセメンタイトに挟まれて存在するフェライトではその傾向が顕著である。この結果として、パーライト組織では局所的に大きな加工硬化を受けたフェライトと、降伏していない健全なものが混在して分布することになる。

これに対して球状化組織の場合は、微視領域での塑性変形はセメンタイト近傍のフェライトではなく、周辺にセメンタイトが存在しない領域から始まる。これらの塑性域が変形が進行するに従って、互いにつながるような形で塑性域が進行していく様子が観察できる。結果として球状化組織の場合は、微視領域全域にわたって塑性変形が進行することになる。つまり、パーライト組織ではセメンタイトによって塑性域の進行が妨げられていたが、球状化組織では塑性域がセメンタイトを囲むような形で広がり、ほとんど全てのフェライトが降伏する。

これらの結果の妥当性を検証するため、引張試験後の供試体を透過型電子顕微鏡 (TEM) によって観察した。その結果を図-8に示すが、パーライト組織ではセメンタイトの端部に転位 (塑性ひずみ) が集中しているのに対して、球状化組織では主にセメンタイトの間に転位が生じていることが確認できる。これらを定量的に比較することは困難であるが、定性的にはマルチスケール解析が実際の現象を表現できていることがわかる。

以上のことから、微視領域におけるセメンタイトの形態に起因した、マイクロ応力の分布性状の差異と塑性域の進展の仕方の差異が、降伏後の巨視的な加工硬化特性と密接に関係していることがわかる。つまり、セメンタイトの形態が塑性域の進展を阻むようなもので

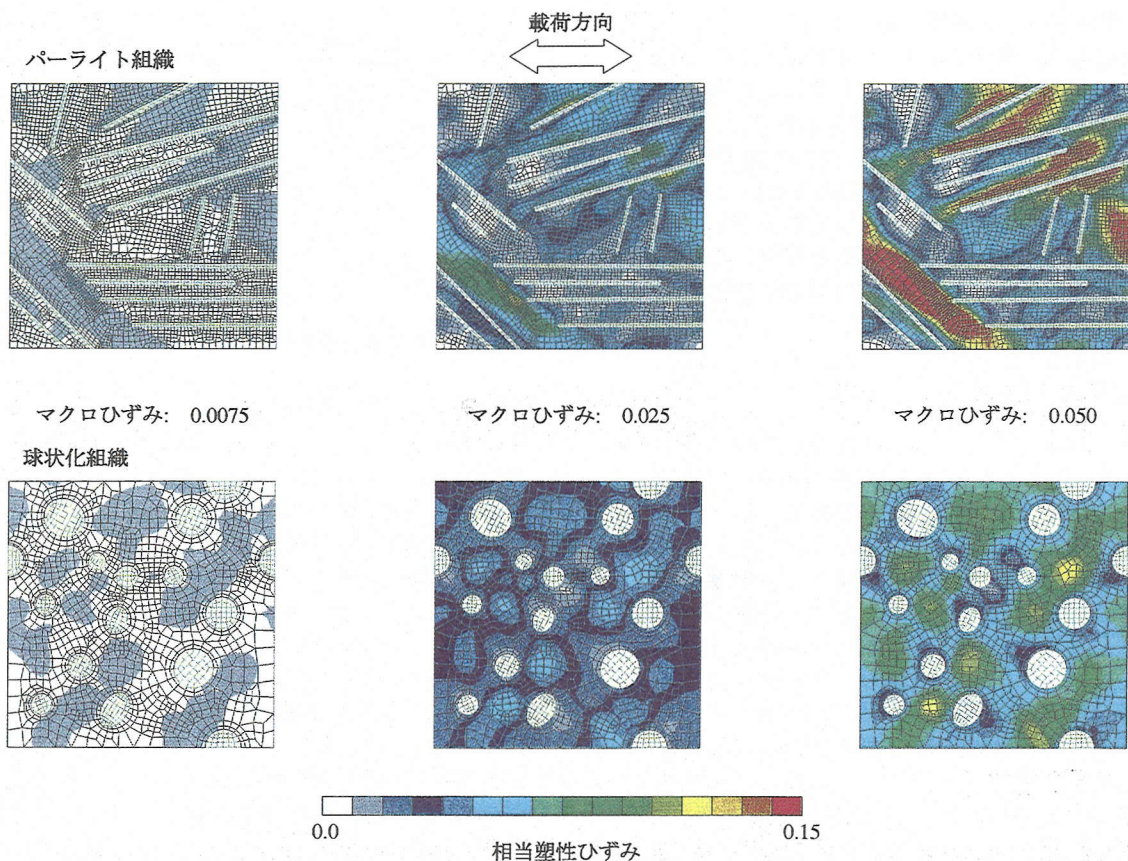


図-7 微視領域における相当塑性ひずみの進展

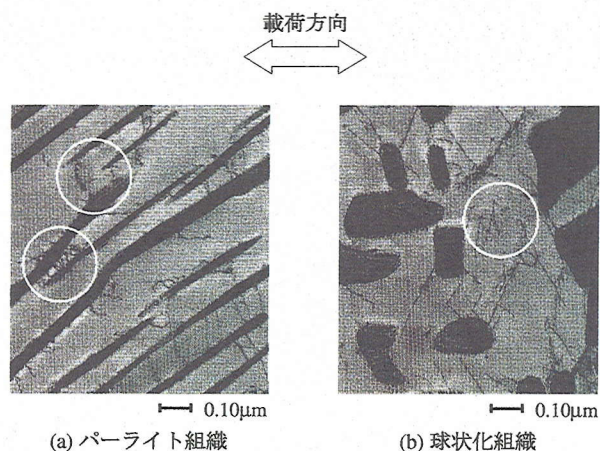


図-8 引張試験後の微視微視領域の観察 (TEM)

あるほど局所的な塑性変形となり、健全なフェライトが多く残ることになるため巨視的には加工硬化係数が大きく、つまり「硬く」観察されることになる。このことは、炭素含有量が増加する（塑性域の進展を阻むセメンタイトの総量が増加する）につれて加工硬化特性が大きくなるという一般的によく知られた現象とも一致することから、このメカニズムについての考察は妥当であるといえる。

4.2 巨視的な初期降伏応力の差異についての考察

前節でも指摘したように、マルチスケール解析から得られた巨視的な初期降伏応力は実験結果の約半分と

いう非常に低い値となっている。また、実験結果に見られた炭素鋼と極低炭素鋼の初期降伏応力の差異（図-3）も表現されておらず、マルチスケール解析から得られた結果は全て初期降伏応力が 200 (MPa) 弱となっている（図-5,6）。

この原因として数値解析の精度の問題、すなわち、本研究で用いたマイクロ構造モデルが人為的に理想化したものであること、2次元平面ひずみ状態を仮定して3次元的效果を無視していることなども考えられる。しかしながら、前述のように加工硬化特性はマイクロ構造の影響を受けて変化していることを考えると、初期降伏応力に明瞭な差異が見られない原因がこれらのモデルに起因しているものとは断定できない。むしろ、本解析で用いたマイクロ構造内部の力学モデルあるいは材料特性が、炭素鋼の初期降伏応力の変化に支配的であると考えするのが自然であろう。つまり、炭素鋼の材料実験で観察される初期降伏応力の変化は、セメンタイトの形態やその体積分率などといった微視領域の「構造」に起因したものではなく、微視領域における力学モデルや構成材料の機械特性などの設定に誤りがあったものと考えられる。

本研究では、マルチスケール解析によって鋼材の引張試験をシミュレートする際に次のような仮定を設けた。

- セメンタイトは塑性変形しない線形弾性体
- フェライトの機械特性は極低炭素鋼と同一

以下ではこれらの妥当性について検討し、巨視的な初期降伏応力が異なる原因を模索する。

セメンタイトは炭素鋼中に存在する準安定な析出物

であるため、単体の作成が困難であるとされてきた。近年技術の発達によりバルク体の作成、材料試験が行われているが、その報告¹⁶⁾によると常温下では脆性破壊を伴うものであり、高温下で塑性変形を示すものの、その初期降伏応力は1GPaを超える非常に高いものである。このことから本研究での仮定は妥当であるといえるが、仮にセメントイトが塑性変形するとしても、フェライトよりもセメントイトが先に降伏すると仮定しなければ巨視的な初期降伏応力の変化としては観察できない。つまり、セメントイトの塑性変形を仮定しても、得られる巨視的な変化は初期降伏応力の低下であり、巨視的な初期降伏応力が上昇することはない。

したがって、図-6に見られる巨視的な塑性変形を支配しているのは、フェライトの塑性挙動であり、フェライトの機械特性が極低炭素鋼と同一であるとした仮定が誤りであると考えるのが妥当であろう。しかしながら、これまで本研究のように微視領域での力学挙動に注目した研究はほとんど行われておらず、暗黙のうちにフェライトと炭素鋼の（巨視的な）機械特性は同じであると考えられていた。このため、フェライト単体の物性を評価しようという試みが行われておらず、微視領域での真の材料特性は未知であるといわざるを得ない。そのため本研究では、フェライトの特性が極低炭素鋼の機械特性と同じであると仮定したが、これまでの結果を見ると両者は全く異なるものであると推測することができる。

しかしながら、「材料」の巨視的な機械特性にその微視領域で生じている力学挙動が影響を与えているにもかかわらず、電子顕微鏡レベルの材料に対して、何らかの材料試験を行ってその物性を求めることがほぼ不可能である。FRPなどの人工的な複合材料であれば、あらかじめ構成材料の特性を知ることができるが、鉄鋼材料のような材料では微視領域での真の材料物性は未知であるといわざるを得ない。このような材料では、我々が得ることのできる情報は、微視領域の幾何学的な形状と材料試験から得られる巨視的な機械特性である。次節では、マルチスケールモデリングの枠組みにおいて、巨視的な応力・ひずみ関係を実験結果と一致させるような微視領域における構成材料の機械特性の同定手法を提案し、フェライトとして妥当な物性の評価を試みる。

5. 微視領域における材料特性の同定

本節では、マルチスケールモデリングで設定されるべき微視領域内の材料物性を同定する手法を提案し、実験と解析で得られる巨視的な初期降伏点の差異についての解釈を模索する。微視領域における材料特性の同定問題は、巨視的な応力・ひずみ関係のカーブフィッティングであると考えることができ、マルチスケール逆問題として最小化問題を設定する。この最小化問題を応答曲面法によって解き、フェライトとして妥当な材料特性を推定する。

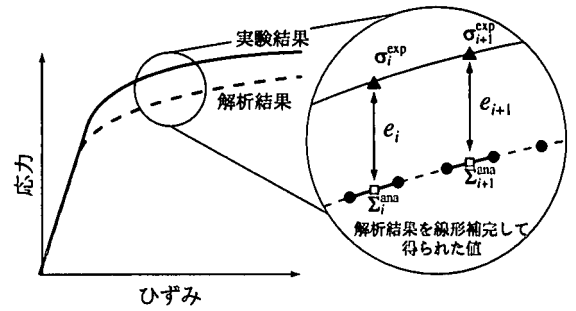


図-9 実験結果と解析結果との誤差の定義

5.1 材料特性の同定問題の設定

鋼材の引張試験によって得られた応力・ひずみ関係から、微視領域における弾塑性材料の力学特性を同定するという問題を考える。すなわち、対象とする弾塑性材料の力学挙動を表現するための構成モデルとして、式(16)のような非線形の等方硬化則を仮定した J_2 塑性モデルを考え、マルチスケール解析によって得られた巨視的な応力・ひずみ関係が実験結果と一致するように材料パラメータ $(\sigma_Y, H, \sigma_Y^\infty, \delta)$ を同定する。

引張試験から、応力・ひずみ曲線上の N 個のデータ $(\epsilon_i^{\text{exp}}, \sigma_i^{\text{exp}}), (i = 1, 2, \dots, N)$ が得られているものとする。このとき、一般的な最小二乗法によるカーブフィッティングの考え方に基くと、この同定問題はマルチスケール解析による推定値 $G(E_i^{\text{ana}})$ との残差 $e_i = \sigma_i^{\text{exp}} - G(E_i^{\text{ana}})$ を用いて目的関数を次のように定義し、この最小化問題として設定することができる。

$$\hat{L} = \sum_{i=1}^N \hat{e}_i^2 = \sum_{i=1}^N (\sigma_i^{\text{exp}} - G(E_i^{\text{ana}}))^2 \quad (17)$$

しかし、一般的には実験結果、解析結果共に連続的な関数ではなく離散的なデータとして与えられることから、両者の応力、あるいはひずみが完全に一致することは考えられない。したがって、本研究では図-9に示すように実験データ $(\epsilon_i^{\text{exp}}, \sigma_i^{\text{exp}})$ に対応する解析データの値 $(E_i^{\text{ana}}, \Sigma_i^{\text{ana}})$ where $\epsilon_i^{\text{exp}} = E_i^{\text{ana}}$ を線形補完して求めることにする。これらを用いて目的関数である実験結果と解析結果の誤差二乗和を次のように定義し、

$$\mathcal{L} = \sum_{i=1}^N e_i^2 = \sum_{i=1}^N (\sigma_i^{\text{exp}} - \Sigma_i^{\text{ana}})^2 \quad (18)$$

この最小化問題として材料パラメータの同定問題を定義する。

$$\underset{\sigma_Y, H, \sigma_Y^\infty, \delta}{\text{minimize}} \mathcal{L} = \underset{\sigma_Y, H, \sigma_Y^\infty, \delta}{\text{minimize}} \sum_{i=1}^N (\sigma_i^{\text{exp}} - \Sigma_i^{\text{ana}})^2 \quad (19)$$

一般にこのような最適化問題を解くための手法として、逐次線形計画法(SLP)をはじめとする非線形計画法に基づく最適化手法が用いられる。これらの最適化手法では、感度と呼ばれる目的関数の設計変数による1階微分、あるいはHessianと呼ばれる2階の導関数が必要となる。しかし、本研究で対象とする同定問題は、目的関数が応力、ひずみなどの状態変数であり、しか

表-1 解析ケースと実験結果との誤差 ($\mathcal{L}$)

$H(\text{MPa})$	$\sigma_Y(\text{MPa})$		
	229.6	275.4	321.3
426.9	2.661	0.605	0.102
4269	0.459	0.112	0.859
8111	0.559	1.318	1.053

も非線形マルチスケール問題であることから、巨視的な目的関数を微視領域における材料定数の陽な関数として表現することが不可能である。そこで本研究では、このような問題を解決するための手段として応答曲面法を用いることにし、その詳細を次にまとめる。

5.2 応答曲面法による最適化

応答曲面法¹³⁾は、複雑あるいは未知の目的関数や拘束条件式を、いくつかのサンプリングポイントでの情報を元にして大域的にある関数で近似しようとする手法である。もともとは品質管理工学の分野で、製品のばらつきを減少させるために各因子の影響度を近似することを目的に開発された手法であるが¹⁴⁾、近年その汎用性の高さや有効性が評価され、様々な最適化問題へ適用されている¹⁵⁾。

本研究では目的関数が2次形式であること、また取り扱いが容易であることから、目的の近似関数(応答曲面)として次のような正規化された設計変数 $X^T = \{x_1, x_2, x_3, x_4\}$ の2次多項式を仮定する。

$$\mathcal{L} \approx \hat{\mathcal{L}}(X) = X^T B X + b^T X + b_0. \quad (20)$$

ここで、 B , b , b_0 はそれぞれ多項式の未知係数であり、これらをサンプリングポイントの値から最小二乗法および統計学的なt検定によって決定する。このサンプリングポイントを効率よく決定する方法として、実験計画法に基づいた直交表がよく用いられるが、本研究では全ての設計変数間の相互作用を考慮するために用いていない。

このようにして求められた応答曲面に対して最適化を行うが、本研究では2次多項式を仮定しているため解析的に最適化を行うことも可能である。つまり、最小二乗法によって求められた係数マトリクス B の固有値によって、応答曲面の形状を次のように分類することができる。

- 全ての固有値が正の場合: 停留値が最小値
- 全ての固有値が負の場合: 停留値が最大値
- 正負の固有値が混在する場合: 停留値が鞍点

もし、得られた係数マトリクス B の固有値が全て正であれば、得られた応答曲面に対して数値的最適化手法を適用しなくても、次の停留条件を満たす X を求めることで最小値を与える設計変数を求めることが可能となる。

$$\frac{\partial \hat{\mathcal{L}}}{\partial X} = 0 \quad (21)$$

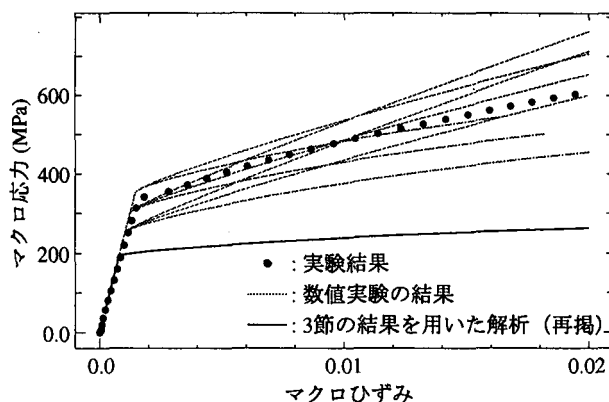


図-10 炭素鋼に対する材料実験結果とマルチスケール解析による数値実験結果

5.3 微視領域における材料パラメータの同定

上で与えた微視領域における材料パラメータの同定手法を用いて、フェライトの機械特性の同定を試みる。すなわち、パーライト組織のミクロ構造を用いたマルチスケール解析から得られる巨視的な応力・ひずみ関係が、図-3に示した実験結果と一致するようなフェライトの機械特性、特に初期降伏応力 σ_Y と加工硬化に関するパラメータ H を同定する。ここで、 $(\sigma_Y - \sigma_Y^\infty)$, δ については3.2節で同定された値を用いる。

応答曲面を作成するためのサンプリングポイントとして、表-1に示すように各設計変数について3水準ずつ用意し、全ての組み合わせ $3^2 = 9$ 通りの弾塑性マルチスケール解析による数値実験を行った。ここから得られた巨視的な応力・ひずみ関係を図-10に示す。得られた各解析結果と実験結果の応力ひずみ関係における誤差 $\mathcal{L}$ をとり(表-1)、最小二乗法およびt検定により応答曲面を作成すると、多項式(20)の各係数が次のように求められ、図-11に示す曲面形状が得られる。

$$B = \begin{bmatrix} 1.001 & 0.703 \\ \text{sym} & 0.698 \end{bmatrix},$$

$$b = \begin{bmatrix} 0.354 \\ -0.151 \end{bmatrix}, \quad b_0 = 0.011$$

この図からもわかるように、得られた応答曲面は下に凸の2次関数であるので、停留点において最小値を与える。この点は停留条件 $(\partial \hat{\mathcal{L}})/(\partial X) = 0$ を解くことにより与えられ、同定すべき材料パラメータが次のように求められる。

$$\sigma_Y = 287.1 \text{ (MPa)}, \quad H = 2.942 \text{ (GPa)}$$

ここで得られたフェライトの特性および3.2節で同定された極低炭素鋼の特性を用いて、マルチスケール解析ではない通常の弾塑性有限要素解析を行った結果、すなわちそれぞれの単層組織が呈する応力・ひずみ関係を図-12に示す。この図から明らかなように、初期降伏応力、加工硬化特性ともに微視領域におけるフェライト部として同定した値が、フェライトと同様であると仮定した極低炭素鋼の物性値を大幅に上回っている。

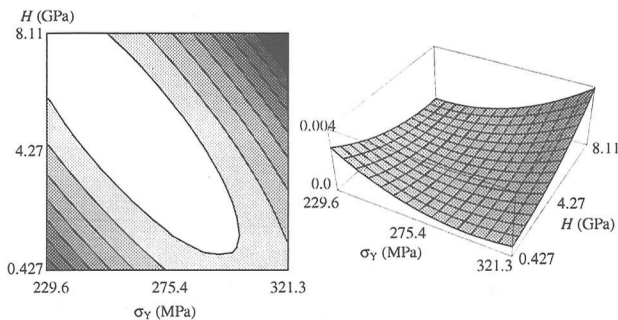


図-11 応答曲面 $\hat{L}$ の関数形

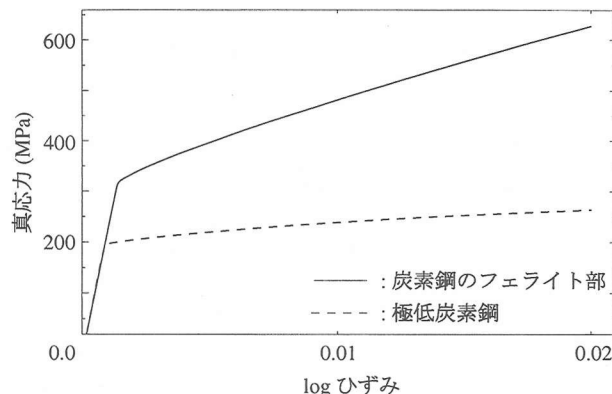


図-12 単層組織の応力・ひずみ関係

つまり、微視領域におけるフェライト部の特性は極低炭素鋼の特性とは全く異なるものであり、図-12に示すように初期降伏応力が高い、すなわち転移が起こりにくい材料に変化したと考えるのが妥当である。これは、ミクロ構造内全てのフェライトの初期降伏応力が同一であるとして同定した結果であり、多少荒い近似ではあるが、少なくとも3節での材料パラメータの設定は誤りであることは明らかである。

このような力学特性の変化が、加工履歴や残留応力が完全に除去されなかった影響によるものなのか、あるいは化学的な作用、つまり炭素原子が固溶したため¹⁷⁾であるのか、その原因は現時点では明らかではない。しかしながら、近年ナノスケールインデンテーション¹⁸⁾などの手法によって、金属材料のミクロ組織の力学特性を測定しようという試みが行われており、近い将来このような傾向を測定・観察することが可能になるものと期待する。

6. まとめ

本研究では、炭素鋼の代表的な微視構造をモデル化したミクロモデルを用いてマルチスケール解析を行い、セメンタイトの形態によって巨視的な加工硬化特性が異なるという実験結果と定性的に一致した結果を得た。このときマルチスケール解析から得られた微視領域における力学挙動を詳細に観察し、このような差異が生じるメカニズムを明らかにした。

層状のセメンタイトが存在する場合は微視領域において塑性域の進展が妨げられ局所的に塑性変形が進行するが、セメンタイトが球状の時はフェライトに生じる塑性変形を妨げることができず、塑性域が微視領域の全域にわたって平均的に広がる。このような微視領域での力学挙動の違いが、巨視的な加工硬化特性の差異となって観察される、つまりパーライト組織のほうが球状化組織よりも加工硬化特性が高くなるということが明らかになった。

一方、巨視的な初期降伏応力に関しては、マルチスケール解析では材料実験で得られたような初期降伏応力の上昇が表現されておらず、微視領域におけるセメンタイトの形態は巨視的な初期降伏応力にほとんど影響しないことを指摘した。また、巨視的な応力・ひずみ関係を一致させるような材料パラメータを同定する

ことによって、微視領域におけるフェライトの特性が極低炭素鋼に比べて初期降伏応力が非常に大きくなっている可能性を示唆した。

これまで炭素鋼に対する材料実験やSEMによる微視領域の観察などから、炭素含有量の増加に伴って初期降伏応力、加工硬化特性ともに上昇すること、炭化物(セメンタイト)の形状によってもこれらの機械特性が変化することが知られていた。本研究で得られた「巨視的な初期降伏応力はフェライトの機械特性の変化に影響され、加工硬化特性を支配するのは微視領域におけるセメンタイトの形態である」という知見は、これらの因果関係を明確にするものであり、今後の材料開発などに有益な情報を与えるものである。

参考文献

- 1) 友田陽, Harjo, S., 蟹江厚臣, Lukas, P., Neov, D., 阿部義男: 高炭素鋼の加工硬化に及ぼすセメンタイト形状の影響, 材料とプロセス, Vol.13, pp.1198, 2000.
- 2) Benssonusan, A., Lions, J.-L. and Papanicoulau, G.: *Asymptotic Analysis for Periodic Structure*, North-Holland, Amsterdam, 1978.
- 3) Lions, J.-L.: *Asymptotic calculus of variations, Singular perturbations and asymptotics*, Academic Press, New York, pp.277-296, 1980.
- 4) Babuska : Homogenization and its application. Mathematical and computational problems, *Numerical solution of partial differential equations III*, Academic Press, New York, pp.89-115, 1976.
- 5) Terada, K. and Kikuchi, N.: A class of general algorithms for multi-scale analyses of heterogeneous media, *Comput. Meths. Appl. Mech. and Engrg.*, Vol.190, pp.5427-5464, 2001.
- 6) Fish, J., Shek, K., Pandheeradi, M. and Shephard, M.: Computational plasticity for composite structures based on mathematical homogenization: Theory and practice, *Comput. Meths. Appl. Mech. and Engrg.*, Vol.148, pp.55-73, 1997.
- 7) Pellegrino, C., Galvanetto, U. and Schrefler, B.A.: Numerical homogenization of periodic composite materials with non-linear material components, *Int. J. Numer. Meth. Engrng.*, Vol.46, pp.1607-1637, 1999.

- 8) Van Rens, B.J.E., Brekelmans, W.A.M. and Baijens, F.P.T.: Homogenization of the elastoplastic behavior of perforated plates, *Comput. and Struct.*, Vol.69, pp.537-545, 1998.
- 9) 寺田賢二郎, 松井和己, 真野篤志: 均質化理論に基づく非線形力学挙動のミクロ・マクロ連成モデリング, 日本機械学会論文集 A 編, Vol.66, pp.516-523, 2000.
- 10) Terada, K., Saiki, I. and Matsui, K.: Kinematically correct formulation for two-scale finite deformation problem, *Transaction of JSCEs*, Vol.2, pp.53-62, 2000.
- 11) 松井和己, 寺田賢二郎, 京谷孝史, 岩熊哲夫: 弾塑性複合材料のミクロ構造を反映した巨視的な降伏曲面の評価, 土木学会論文集 I, Vol.56, pp.335-346, 2001.
- 12) Kosolapova, T.Ya.: *Carbides*, Plenum Press, 1971.
- 13) Myers, R.H. and Montgomery, D.C.: *Response surface methodology*, John Wiley & sons, INC, 1995.
- 14) 田口玄一: 実験計画法, 日本規格協会, 1987.
- 15) 柏村孝義, 白鳥正樹, 干強: 実験計画法による非線形問題の最適化, 朝倉書店, 1998.
- 16) セメントタイトの基本的性質とその理解の現状, 鉄と鋼, Vol.88, pp.117-128, 2002.
- 17) 日本塑性加工学会編: 材料, 塑性加工技術シリーズ II, コロナ社, 1994.
- 18) Bolshakov, A. and Pharr, G.M.: Influences of pileup on the measurement of mechanical properties by load and depth sensing indentation techniques, *J. Mater. Res.*, Vol.13, No.4, pp.1049-1058, 1998.

(2002 年 4 月 19 日 受付)