

令和 2 年 6 月 4 日現在

機関番号：32680

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2017～2019

課題番号：17K05378

研究課題名(和文)水素による脆化現象を反映したき裂進展に関する研究

研究課題名(英文)Study of a crack growth model with Hydrogen-embrittlement effect

研究代表者

高石 武史(Takaishi, Takeshi)

武蔵野大学・工学部・教授

研究者番号：00268666

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 2,500,000円

研究成果の概要(和文)：水素脆化を伴うき裂進展現象の解明のために、水素原子の拡散による材料の脆化を伴う3次元弾性体のフェーズフィールドき裂進展数理モデルを構築した。そのモデルを用いて水素原子の拡散に伴い材料の物理的性質(例えば脆性、弾性)が変化することによってき裂進展現象へどのような影響が及ぼされるかを解明数値シミュレーションで調べた。開口モードにおける初期き裂の進展については、き裂表面と材料内の水素原子の拡散係数の大きさと比率により、水素原子濃度分布がき裂先端近傍で高くなり、き裂進展を加速する場合があることを見出した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

吸収された水素による鋼材強度の低下は、ロケットエンジン、水素燃料自動車エンジンの設計・開発において大きな問題となってきた。特に、燃料電池車の普及に伴い、水素燃料タンク、水素ガスステーションの安全性の確保は非常に重要となる。高圧水素ガスの注入放出の繰り返しによる疲労破壊の危険性は高く、この複雑な現象を解明することは急務である。

フェーズフィールドを用いた材料破壊の数理モデルは、構成のシンプルさから近年注目が集まっている。水素脆化のような複雑な現象においてシンプルな数理モデルを構築することは、現象の解明への道筋をつける1歩であるとともに、応用範囲を検討するうえで重要だと考えられる。

研究成果の概要(英文)：Introduce a phase field model of crack growth with hydrogen embrittlement effect. It includes effects that hydrogen atoms diffuse in a material and decrease its toughness. This model is investigated numerically by changing the materials properties related to the diffusivity of Hydrogen atoms. The numerical results of the crack growth in opening mode show that crack growth is accelerated when we set some value of diffusivity of hydrogen atoms on the crack surface and in body.

研究分野：応用数学

キーワード：水素脆化 フェーズフィールド 数理モデル 数値シミュレーション

1. 研究開始当初の背景

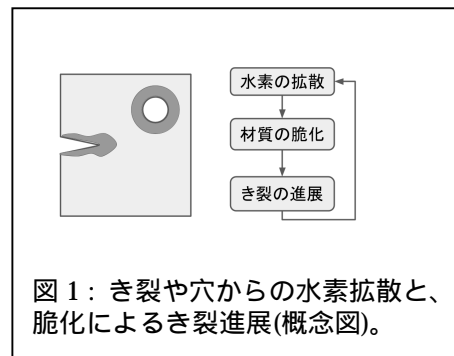
鋼材中に吸収された水素による鋼材の強度（延性または靱性）の低下は、ロケットエンジン、水素燃料自動車エンジンの設計・開発において大きな問題となってきた。特に、燃料電池車の普及に伴い、水素燃料タンク、水素ガスステーションの安全性の確保は非常に重要となる。なぜならば、高圧水素ガスの注入放出の繰り返しによる疲労破壊の危険性は高く、脆性破壊は避けなければならないからである。鋼材中に吸収された水素による鋼材の強度（延性または靱性）の低下は、ロケットエンジン、水素燃料自動車エンジンの設計・開発において大きな問題となってきた。特に、燃料電池車の普及に伴い、水素燃料タンク、水素ガスステーションの安全性の確保は非常に重要となる。なぜならば、高圧水素ガスの注入放出の繰り返しによる疲労破壊の危険性は高く、脆性破壊は避けなければならないからである。

鋼材中の水素拡散現象から引き起こされる破壊現象について、これまでに次のような知見が得られている。

- ・ 拡散性水素の局在化に関連した現象（転移、欠陥への局在）
- ・ 水素量、拡散（時間・温度）、応力状態（応力 3 軸度）の影響

水素脆化を伴う破壊現象では、水素原子がどのように拡散し、どの領域にトラップされているかが解明の鍵になると考えられている(図 1)が、実験において材料中の拡散性水素原子の挙動の把握が困難であることから、未だ解明されておらず、モデルとしても応力集中領域に水素原子が凝集する効果を付与することで現象を再現している例が多い。

一方、申請者は金沢大学木村正人氏と準静的なき裂進展のモデルを導出し、数値シミュレーションによって検証してきた[1]。このモデルは、連続関数であるフェーズフィールドを用いてき裂を表現することで近似したエネルギー関数をもとに導出した、き裂進展の時間発展方程式である。計算時の有限要素の形状やサイズにき裂形状が直接依存することなく解析可能で、複雑なき裂形状への対応が容易であり、き裂先端応力の集中を緩和するなど、数値シミュレーションに都合の良い性質を備えている。さらに、エネルギー関数の拡張や、他の現象の方程式と連成することで、新たなき裂進展現象のモデルを導出できる可能性}を持っている。また、申請者らの不可逆なき裂進展モデルにおいて、フェーズフィールドの値は応力集中の履歴を損傷として表現しているため、水素原子の拡散速度と関係させることで、凝集項を用いずに水素原子の局在化を再現するシンプルなモデル}を構築できる可能性も有している。申請者は、水素拡散脆化き裂を念頭に置き、このフェーズフィールドなき裂進展モデルと化学物質の拡散方程式を連成させたシンプルなモデルを提案し、いくつかの設定で数値シミュレーションを行った結果について、平成 27 年 3 月の応用数理学会研究部会連合会等で発表した[2,3]。



2. 研究の目的

本研究では、数理モデルを用いた水素脆化を伴うき裂進展現象の解明のために、水素による脆化を伴う弾性体のき裂進展数理モデルの構築し、そのモデルを用いて水素原子の拡散による材料脆化のき裂形状への影響解明のための基礎研究を目的とする。具体的には、前者は、水素原子の拡散に伴い材料の物理的性質(例えば脆性、弾性)が変化することによってき裂進展現象へどのような影響が及ぼされるかを解明するための、マクロスケール数理モデルの構築を行う。後者は、このモデルを用いた数値シミュレーションによって水素脆化を伴うき裂進展現象の解明のための基礎研究を行う。

3. 研究の方法

まず 1 年目は、3 次元数理モデルを導出し、主としてき裂面を開口するような変位を与えるモード I き裂進展に注目し、既に提案したモデルにおいて、き裂先端近傍での水素密度上昇が再現できるか検証する。また、同時に実験データの収集に努め、モデルの改良にフィードバックする。

- ・ [き裂面と水素原子の拡散、水素原子の濃度と脆化のモデル化に関する検討]

拡散された水素原子の濃度と破壊靱性値について、き裂及び損傷を表すフェーズフィールドの値と拡散係数の関係を考慮した 3 次元モデル化を行う。水素脆化では、水素が局在することで材料強度を下げていると考えられるため、どのように記述すれば現象の再現が可能であるか検討する。

- ・ [フェーズフィールドモデルを用いた数値シミュレーションによる、水素原子拡散に伴うモード I き裂進展の検証]

上記モデルを用いて数値シミュレーションを行い、き裂先端近傍に水素原子が局在しうるか検討する。また、そこから得られる知見をフィードバックしながらモデルを修正していく。

モデル化とその数値シミュレーションによる検証とともに、変更に伴うコードの修正を迅速に行う必要があるため、既存の計算サーバ上でできるだけ高速な数値計算を行うために Linux 用インテルコンパイラを購入する。また、HDD 等のデータバックアップ用メディアを購入し、広い範囲のパラメータでの数値計算を開始し、次年度の解析の準備を行う。連携研究者らとモデルの構築等について議論を進め、ここで得られた研究成果は国内の研究会等で発表する。

2 年目は、板面に水平な変位を与えるモード I, II き裂進展に注目し、水素原子の拡散に伴う材質の脆化とき裂進展速度およびき裂形状の関係を解明する。

・ [フェーズフィールドモデルを用いた水素脆化き裂進展の検証と、き裂面における拡散条件の検討]

上記モデルを用いて数値シミュレーションを行い、実験結果から得られたき裂進展に伴う変位-応力特性とき裂面形状をフェーズフィールドモデルで再現できるか検証する。その結果から水素原子の拡散のモデル化について再度検討する。

・ [モデルの数理構造の解明の検討]

平衡状態でのき裂断面の方程式を導出し、そこから得られるき裂断面解から水素濃度分布の解明を試みる。

・ [3 次元数値シミュレーションコードの開発]

次年度における 3 次元数値シミュレーションでの大規模数値計算のために、既に開発した 3 次元フェーズフィールドき裂進展シミュレーションコードから水素脆化対応コードを開発する。

多くのパラメータの数値計算結果を解析するために、データ解析用 PC とデータバックアップ用メディアを購入する。また、3 次元数値シミュレーションコード開発等のためにコンパイラライセンスを更新する。連携研究者らとモデルの数理構造、数値シミュレーションコードの開発等について議論を進め、研究成果は国内の学会等で発表する。

3 年目は、3 次元材質におけるき裂進展に注目し、水素拡散に伴う材質の脆化とき裂進展速度およびき裂形状の関係を解明する。

・ [3 次元数値シミュレーションコードの開発]

前年度に引き続き、3 次元フェーズフィールドき裂進展シミュレーションコードの水素脆化対応を行う。

・ [フェーズフィールドモデルを用いた数値シミュレーションによる、3 次元水素脆化き裂進展の検証]

上記 3 次元コードを用いてシミュレーションを行い、き裂先端近傍での水素原子濃度分布とき裂進展の関係を調べる。また、そこから得られる知見をフィードバックしながらモデルを修正していく。

多くのパラメータの数値計算結果を解析するためにデータバックアップ用メディアを購入し、数値シミュレーションコード開発のためにコンパイラライセンスを更新する。連携研究者らとモデル化の正当性、数値シミュレーションコードの高速化等について議論を進め、ここまで得られた研究成果を国内の学会等および国外の研究会で発表する。

4. 研究成果

2017 年度は、モード III き裂進展用に導出された数理モデルと同様の手法を用い、拡散された水素原子の濃度と破壊靱性値の関係と、き裂及び損傷を表すフェーズフィールドの値と拡散係数の関係を考慮した、水素脆化き裂進展数理モデルの 3 次元化を行った。また、この 3 次元数理モデルを用いて、主としてき裂面を開口するような変位を与えるモード I き裂進展に注目し、既に提案した、水素拡散による材質の脆化と、き裂の進展に伴う拡散現象の加速をとりこんだモデル化で、き裂先端近傍での水素密度上昇が再現できるか検証した。ここでは、1 本の初期き裂からのモード I き裂進展において、開口側の面から 1 本の初期き裂を通り水素原子が拡散する設定で数値シミュレーションを行った。計算結果においてき裂進展方向における水素濃度分布に注目すると、拡散係数の上限値と下限値の比率が 1000 程度の場合にはき裂進展開始直前に先端近傍に局所的に水素原子濃度が高くなる領域が発生し、き裂進展に伴いその領域が置き去りにされていることがわかった。一方、拡散係数の上限値と下限値の比率が 100000 程度の場合には水素原子はき裂先端近傍まで速やかに拡散しており、水素原子濃度の分布はき裂先端に向かって単調減少していることがわかった。これらの結果より、ここで採用された数理モデルによりき裂先端近傍において水素原子が局所的に高濃度になる現象を再現する可能性があることがわかった。また、材料内での拡散の速度差により高濃度領域が再現するかどうかが決まる可能性を示唆している[4]。

3 次元数理モデルの導出については、モード III き裂進展モデルと同様の方針で行い、予定通り出来上がった。また、このモデルを利用したモード I き裂進展の数値シミュレーションにおいては、き裂進展が開始する直前に水素原子の局所的な高濃度領域ができる場合と、そうでない場合が、水素原子の拡散係数の変化と対応していることがわかり、このモデルでき裂先端近傍における水素原子濃度の分布を再現できる可能性があることが予想される。

2018 年度は、前年度に作成した、板面に水平な変位を与えるモード I, II き裂進展のシミュ

レーションコードを用い、水素原子の拡散に伴う材質の脆化とき裂進展速度の関係について調べた。開口モードのき裂進展の過程における水素濃度分布の変化を、き裂面に沿って水素原子が拡散する場合についてフェーズフィールドを用いた水素脆化き裂進展モデルを用いて数値シミュレーションで調べた結果、拡散した水素がき裂先端の靱性を下げることにより、より小さな境界変位によりき裂進展が引き起こされる様子が再現された。また、水素の拡散係数の大きさと、き裂領域と材料領域の拡散係数の比とのバランスにより、き裂先端近傍に水素原子濃度が局所的に高い領域が現れる場合があることがわかった。この場合にはき裂進展が開始するとこの高濃度領域を追い越すようき裂が進展することがわかった。さらに、き裂領域での水素原子拡散を非常に速くすると局所的な高濃度領域は現れず、き裂から供給された水素原子が常にき裂先端へ溜まっている状態でき裂進展が起きることがわかった。一方、初期き裂先端の斜め前方に開けた穴からのみ水素を拡散させた場合には、水素拡散による脆化により穴からき裂が発生し、初期き裂へ連結する形でき裂が進展する場合があることがわかった[5]。

さらに、次年度における3次元数値シミュレーションでの大規模数値計算のために、既に開発済みの FreeFEM 用3次元フェーズフィールドき裂進展シミュレーションコードを水素脆化対応コードに書き直し、実際に計算できることを確認した。2次元開口モードの数値シミュレーションによる水素脆化き裂進展の検証と、き裂面における拡散条件の検討はほぼ実施できた。モデルの数理解の解明の検討として平衡状態でのき裂断面の方程式を導出したが、そこから得られるき裂断面解から水素濃度分布の解明はまだ半ばである。3次元数値シミュレーションコードの開発として、既に開発した FreeFEM 用3次元フェーズフィールドき裂進展シミュレーションコードを水素脆化対応コードに書き直す作業は、予定より早くほぼ終了した。

2019年度は前年度行った、水素脆性を伴った開口き裂の数理解モデルにおいて、数値シミュレーションによる水素の拡散分布とそのき裂進展への影響の検証を行った。その結果、拡散係数の大きさとバランスにより、き裂先端近傍に水素濃度の高い領域が現れなくてもき裂進展は加速されることが示され、材料表面や損傷箇所では水素原子濃度の上昇に伴う破壊靱性の低下により拡散が加速することが確認された(図2)。また、これまで用いていたモデルではき裂先端近傍での水素濃度分布上昇の効果があまり明確に出なかったため、数理解モデルに静水圧による水素凝集効果の項を加えてその影響について数値シミュレーションで調べたところ、水素の凝集効果が有効になるパラメータ範囲は非常に狭い可能性が示唆された。この結果については2019年9月の応用数学会年會にて発表した[6]。また、材料中の穴から水素原子が拡散する場合の開口モードき裂進展など、ここまでの研究成果をまとめて2019年12月のAPCOMにおいて発表した(Keynote speech)[7]。また、開口モードのき裂進展に関する成果は、金沢大学木村氏らと共著の論文の一部として投稿中である[8]。

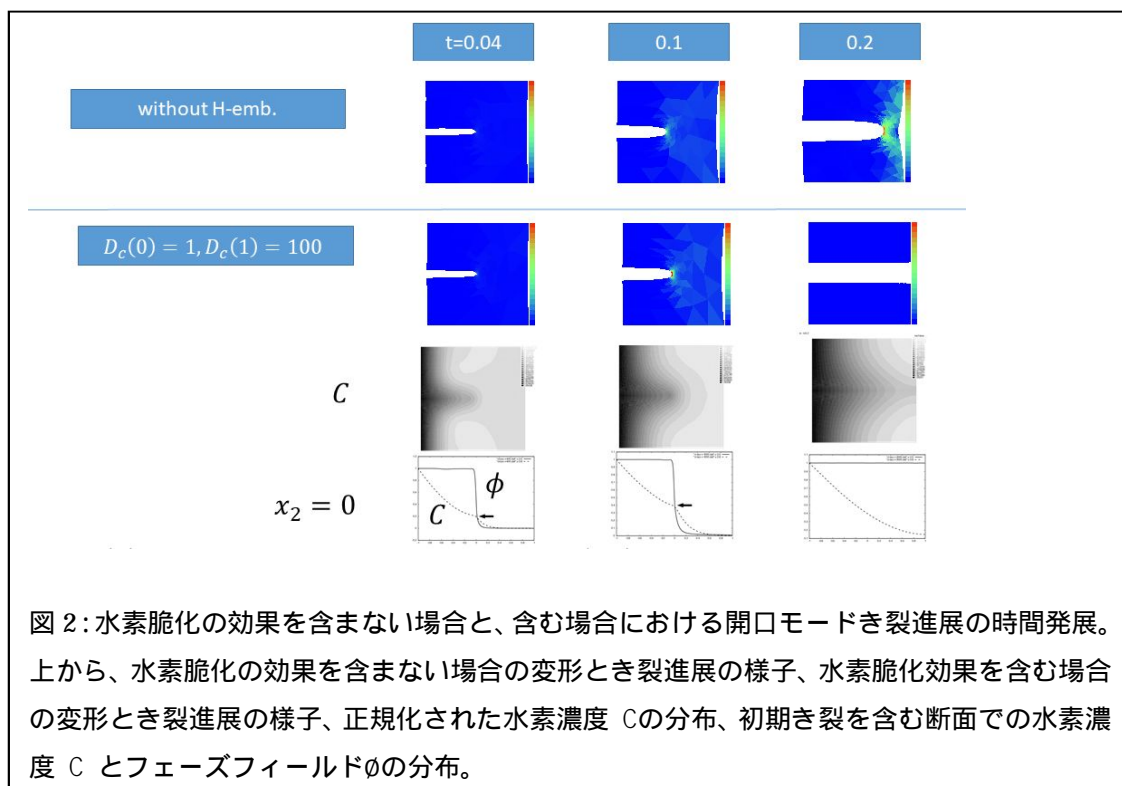


図2: 水素脆化の効果を含まない場合と、含む場合における開口モードき裂進展の時間発展。上から、水素脆化の効果を含まない場合の変形とき裂進展の様子、水素脆化効果を含む場合の変形とき裂進展の様子、正規化された水素濃度 C の分布、初期き裂を含む断面での水素濃度 C とフェーズフィールド ϕ の分布。

本研究において FreeFEM を用いた 3 次元のき裂進展数値シミュレーションを効果的に行うために、大阪大学鈴木氏の助言を受けて、領域分割モジュール hpddm を用いたシミュレーション

ンコードの開発を行った。単純な脆性破壊モデルの3次元コードの書き直しは進み、テストランを行いながら効果を調べている。

並列計算コードの開発と実行、およびデータの解析のために、2018年度にデータ解析用PCを購入し、2019年度にはCPUとメモリを追加し、さらに大容量データ保存用のディスクサーバも購入して計算機環境を整えながら研究を進めた。

[1] T.Takaishi and M.Kimura, "Phase field model for mode III crack growth in two dimensional elasticity", *Kybernetika* 45, pp.605-614, 2009.

[2] 高石 武史「水素拡散による脆化を伴う開口き裂進展モデル」, 計算工学講演会論文集 21 F-4-4, 2016.

[3] T.Takaishi, "Phase Field Crack Growth Model with Hydrogen Embrittlement", *Mathematical Analysis of Continuum Mechanics and Industrial Applications* 26, pp.27-34, 2017.

[4] 高石 武史, "水素脆化き裂進展モデルにおける水素濃度分布の解析", 計算工学講演会論文集, Vol.23, D-10-03, 2018.

[5] T.Takaishi, "Density profile of H-atom in crack growth problem with H-embrittlement", *Czech-Japanese Seminar in Applied Mathematics 2018(Noto)*.

[6] 高石 武史「水素脆化効果を考慮したき裂進展モデルの解析」, 日本応用数理学会 2019年度 年会 (東京大学駒場キャンパス) .

[7] T.Takaishi, "Dynamic Fracture Model of Hydrogen-assisted Crack with Phase Field Approach", *APCOM 2019 (Taipei)*.

[8] M.Kimura, T.Takaishi, S.Alfat, T.Nakano, Y.Tanaka, "Irreversible phase field models for crack growth", to be submitted.

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計1件（うち査読付論文 0件 / うち国際共著 0件 / うちオープンアクセス 0件）

1. 著者名 高石 武史	4. 巻 23
2. 論文標題 水素脆化き裂進展モデルにおける水素濃度分布の解析	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 計算工学講演会論文集	6. 最初と最後の頁 D-10-03
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） なし	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

〔学会発表〕 計8件（うち招待講演 2件 / うち国際学会 2件）

1. 発表者名 高石 武史
2. 発表標題 水素脆化き裂進展モデルにおける水素濃度分布の解析
3. 学会等名 第23回計算工学講演会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 T.Takaishi
2. 発表標題 Density profile of H-atom in crack growth problem with H-embrittlement
3. 学会等名 Czech-Japanese Seminar in Applied Mathematics 2018（国際学会）
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 高石武史
2. 発表標題 フェーズフィールドを用いたき裂進展モデルとその拡張
3. 学会等名 第30回計算力学講演会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 高石武史
2. 発表標題 Maxwell粘弾性き裂モデルとその数値シミュレーション
3. 学会等名 第22回計算工学講演会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Takeshi Takaishi
2. 発表標題 Two types of extended model of crack growth with phase field approach
3. 学会等名 International Seminar series on Time Dependent Multiscale Phenomena of Materials (招待講演)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Takeshi Takaishi
2. 発表標題 To extend the phase field model to non-brittle crack growth
3. 学会等名 CoMFoS 17 (招待講演)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 高石 武史
2. 発表標題 水素脆化効果を考慮したき裂進展モデルの解析
3. 学会等名 日本応用数学会 2019年度 年会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Takeshi Takaishi
2. 発表標題 Dynamic Fracture Model of Hydrogen-assisted Crack with Phase Field Approach
3. 学会等名 APCOM 2019 (国際学会)
4. 発表年 2019年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
--	---------------------------	-----------------------	----