

令和 3 年 5 月 28 日現在

機関番号：17201

研究種目：若手研究(B)

研究期間：2017～2020

課題番号：17K14559

研究課題名（和文）メッシュフリー解析技術を応用した高精度・低コストなメソスケール材料モデルの開発

研究課題名（英文）Development of high-precision and low-cost mesoscale material model using meshfree analysis technique

研究代表者

只野 裕一（Tadano, Yuichi）

佐賀大学・理工学部・准教授

研究者番号：00346818

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 3,300,000円

研究成果の概要（和文）：メッシュフリー法に用いられる高精度数値積分法で使用されるボロノイ多角形を、金属多結晶体の幾何形状モデルとしても利用することで、新たな多結晶塑性モデルの枠組みと解析手法の構築を行った。単にボロノイ多角形を利用した幾何形状モデルを作成するだけでなく、解析領域の形状が複雑になった際の境界の取り扱いについても検討を行い、境界の取り扱いに関するアルゴリズムの改良と実装を行った。以上を通じて、解析精度を低下させることなく、従来手法よりも大幅な計算コスト低減を実現できるメソスケール材料モデルを開発し、その定量的な評価までを行うことができた。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本研究課題で得られた材料モデルにより、従来よりも大幅に少ない計算コストで現実的な規模の高精度な結晶塑性解析が実現でき、従来並列計算機による長時間計算が必要だった問題を、デスクトップPC程度の計算機で取り扱うことが可能となる。提案モデルを活用することにより、材料のメソスケール構造に起因する機械特性の予測精度向上や、金属材料のメソスケールにおける変形機構解明に関する理論研究の促進が期待され、これが本研究の学術的意義である。さらに高性能な構造材料創製のためのシミュレーション技術の確立や、種々の塑性加工解析の高精度化にもつながることから、工業的な応用の可能性も秘めていることが、社会的意義である。

研究成果の概要（英文）：A novel polycrystalline plasticity model enhanced by a meshfree analysis technique was developed. In the proposed method, the Voronoi tessellation, which is used for a high-precision numerical quadrature in the meshfree method, is also introduced as a geometrical configuration of polycrystalline structure of metallic material. In addition, a numerical method for treating complex boundary was investigated, and an improved algorithm, which can be applied to the present material model, was proposed. Using this numerical framework, a novel high-precision and low-cost mesoscale material model was developed. The quantitative evaluation of the model was conducted.

研究分野：計算固体力学

キーワード：結晶塑性 メッシュフリー法 材料モデリング 多結晶金属

1. 研究開始当初の背景

構造用金属材料の多くは多結晶材料であり、方位の異なる多数の結晶の集合体というメゾ構造を有するが、その機械的性質を表現するためのメゾスケール材料モデルの一つが多結晶塑性モデルである。Taylor による古典的モデル[1]に始まり、近年では Visco-plastic Self Consistent (VPSC)モデル[2]や ALAMEL モデル[3]、均質化理論に基づくモデル[4,5]など、高精度なモデルが多数提案されている。Taylor モデルに代表される古典的モデルは、実現象と比較すると定量的な精度には限界がある一方で、その簡便さから計算コスト(計算時間およびメモリ使用量)が少なく、実用解析への適用範囲は広い。VPSC モデルなどの近代的モデルは、より実現象に近い高精度かつ合理的なモデルといえるが、一般に計算コストが大きく、現実的な解析には非常に高性能な計算機と長大な計算時間を要することも少なくない。

Reproducing Kernel Particle Method (RKPM)[6]をはじめとする種々のメッシュフリー法は、様々な工学分野でその応用が展開されている。メッシュフリー法は、適用範囲と導入方法に注意を払えば、有限要素法よりも高精度な解が得られると期待される一方で、有限要素法と異なり数値解析のためのメッシュを持たないため、計算過程における数値積分(領域積分)の方法と精度に課題が残されている。これを解決する有力な手法として、Chen et al.により Stabilized Conforming Nodal Integration (SCNI)[7]が提案された。SCNI では、解析に用いる節点配置をもとにボロノイ多角形(3次元問題であれば多面体)を作成し、さらに積分拘束条件と呼ばれる条件を満たすよう数値積分を行うことで、大幅な精度の向上と安定化、計算コストの低減を図ることができる。

報告者は本研究課題開始以前に、結晶塑性モデルと均質化理論を組み合わせた多結晶塑性モデルを構築し、多面的な研究を実施してきた。その結果、均質化理論に基づく結晶塑性モデルの有用性と応用範囲について明らかとする一方で、均質化理論等と比較すれば精度は劣るものの、適用範囲に注意を払えば Taylor モデルも依然として十分に実用的なモデルであることを示した[8]。両モデルによる計算時間は数百～数万倍程度の差があることから、多結晶塑性モデルを実用問題に幅広く展開するためには、均質化理論と Taylor モデルの中間的な解析精度と計算コストを両立することが必要であるとの結論に至った。また報告者は、結晶塑性モデルに対する数値解析手法として広く利用されている有限要素法よりも高精度な解析手法としての、メッシュフリー法の可能性を示してきた[9]。この研究を通じて、多結晶構造の幾何形状モデルとしても使用するというアイデアを得た。ボロノイ多面体は、結晶成長によって生成される多結晶体の形状の良好な近似ともなっており、この仮定は物理的にも合理的と考えられる。このアイデアを導入することで、メッシュフリー法の解析技術を多結晶塑性モデルに融合し、高い解析精度と低計算コストを両立した材料モデルが構築できると考え、本研究課題の着想に至った。

2. 研究の目的

本研究課題は、メッシュフリー法に用いられる数値解析技術を応用することで、高精度と低計算コストを両立した新たなメゾスケール材料モデルを提案することを目的とする。メッシュフリー法に用いられる高精度数値積分法で使用されるボロノイ多面体が、金属多結晶体の幾何形状モデルとしても利用できることに着目し、新たな多結晶塑性モデルの枠組みと解析手法を構築する。提案手法の解析精度および計算コストに関する体系的検討を詳細に実施し、提案手法の妥当性と有用性を明らかにする。これにより、解析精度を低下させることなく、従来手法よりも大幅な計算コスト低減を実現できるメゾスケール材料モデルを開発する。

3. 研究の方法

メッシュフリー法に用いられる高精度数値積分法で使用されるボロノイ多面体が、金属多結晶体の幾何形状モデルとしても利用できることに着目し、新たな多結晶塑性モデルの枠組みと解析手法の構築を行った。まず、メッシュフリー法を用いた結晶塑性解析の理論的な枠組みを構築し、本研究課題の中核であるボロノイ分割を用いた節点積分法の適用可能性と精度についての検証を進めた。さらに、ボロノイ多面体を多結晶体の幾何学的情報として利用する手法についても、検討を行った。具体的な材料モデルとして、本研究課題では結晶塑性モデルとして広く利用されている弾粘塑性形の構成式を基本としたモデル化を実施したが、提案手法は汎用的な多結晶解析手法の提案を目的とするもので、非歪弾性形を有する任意の材料モデルへの適用を想定して定式化を行った。

つぎに、得られた理論的枠組みにおいて、提案手法の解析精度や計算コストに関する検討を中心に研究を推進した。ボロノイ分割を用いた節点積分法(SCNI)の適用可能性と精度についての検証を進め、理論の基本的な枠組みを構築した。SCNIの使用の有無に関わらず、メッシュフリー法による結晶塑性解析の報告例は極めて少ないため、構築したメッシュフリー法に基づく結晶塑性モデルを用いて、複数のベンチマーク解析を実施し、提案手法の解析精度について定量的な検証を行った。これを通じて、提案手法の課題についても抽出した。

提案手法は任意の多結晶形状に対して汎用的に適用可能であることを目指すものであるが、当初実装したアルゴリズムを用いると、解析領域形状に凹な表面が含まれる際に、適切な数値計

算ができない場合があることが明らかになった。提案手法を汎用的な手法とするためには、この点を克服することが不可欠であると考え、境界の取り扱いに関するアルゴリズムの改良と実装を行った。更に、提案アルゴリズムが昨年度までに理論的枠組みにおいて適切に機能することも確認し、提案手法の汎用性と有用性を向上することに成功した。以上により、本研究課題が目指す、低コストかつ高精度なメソスケール材料モデルの構築を達成することができた。

4. 研究成果

本研究課題では、メッシュフリー法に用いられる高精度数値積分法 SCNI で使用されるポロノイ多面体が、金属多結晶体の幾何形状モデルとしても利用できることに着目し、新たな多結晶塑性モデルの枠組みと解析手法の構築を行った。研究期間前半に、モデルの基礎的な定式化を行い、メッシュフリー法における数値解析積分法と多結晶体の幾何モデルの親和性について精査した。研究期間後半には、単にポロノイ多面体を利用した幾何形状モデルを作成するだけでなく、解析領域の形状が複雑になった際の境界の取り扱いについても検討を行い、境界の取り扱いに関するアルゴリズムの改良と実装を行った。さらに、提案アルゴリズムが昨年度までに理論的枠組みにおいて適切に機能することも確認し、提案手法の汎用性と有用性を向上することに成功した。以上を通じて、解析精度を低下させることなく、従来手法よりも大幅な計算コスト低減を実現できるメソスケール材料モデルを開発し、その定量的な評価までを行うことができた。得られた主な研究成果は、以下の通りである。

(1) 既往の節点積分法に基づく研究では、構成式が応力速度とひずみ速度が線形関係となる亜弾性形の方程式を仮定しているが、本研究で対象とする結晶塑性モデルは亜弾性形の方程式とはならず、より非線形性の強い方程式となるため、従来のひずみ平滑化がそのまま適用できる保証はなかった。そこで、非亜弾性形の結晶塑性構成式に対する節点積分法の適用性について検証し、SCNI が非亜弾性形の構成式に対しても適切に機能することを示した。これにより、SCNI を導入した RKPM が、本研究で使用する結晶塑性モデルにも適用可能であることを明らかにするとともに、その解析精度も従来の亜弾性形構成式に対するものと同等であることを示した。

(2) 節点積分法で数値積分のための最小単位として利用するポロノイ多面体を、多結晶体の幾何形状として用いる手法を構築した。これにより、本研究課題で目的とした数値解析手法とリンクした多結晶体の幾何形状を算出できる枠組みを構築することができた。各節点を 1 つの結晶粒とみなしたとき、その節点に対応するポロノイ多面体は数値積分の基本単位となるが、これは従来の結晶塑性有限要素法において、1 つの要素を 1 つの結晶粒とみなすことに対応する。有限要素法では、要素形状は四面体もしくは六面体を用いることが一般的であり、現実的な結晶構造を表現するためには、1 結晶粒を多数の有限要素で表現する必要があるが、提案手法では現実の結晶形態に近いポロノイ多面体で結晶粒を表現するため、1 つのポロノイ多面体でも結晶粒の良好な近似となる。このポロノイ多面体を、メッシュフリー法の積分単位と、結晶形状の表現の両方に用いることで、高精度かつ低計算コストな多結晶塑性モデルが構築可能となった。

(3) (2) で示したポロノイ分割を用いた SCNI について、提案モデルへ適用した際の解析精度および計算コストの両面から検証を行いその有用性が示された一方で、解析領域が複雑になった際、特に領域表面に凹な形状が含まれる場合の、領域境界の取り扱いの難しさが課題として抽出された。現実の材料において、領域内部の多結晶構造はポロノイ多面体で効率よく表現可能であるが、自由表面において提案手法を用いる場合、単純なポロノイ領域分割では適切な数値解析が実施できない。そこで、任意の表面形状を有する解析対象に対して、適切な領域分割が可能となるよう、アルゴリズムの改良を行った。これにより、提案手法をより汎用的なものとすることができた。提案アルゴリズムによって得られた、ポロノイ分割の一例を図 1 に示す。凹な表面形状を有する解析対象に対しても適切な分割が得られており、提案手法を効率よく適用できる解析モデルが得られている。

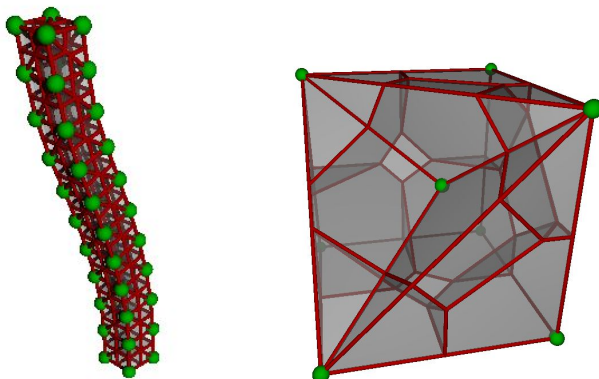


図 1 本研究で構築した手法によるポロノイ多面体の例

< 参考文献 >

- [1] G.I. Taylor, *J. Inst. Met.* 62 (1938) 307–324.
- [2] R.A. Lebensohn and C.N. Tomé, *Acta Metall. Mater.* 41 (1993) 2611–2624.
- [3] P. Van Houtte et al., *Int. J. Plast.* 21 (2005) 589–624.
- [4] E. Nakamachi et al., *Int. J. Plast.* 23 (2007) 450–489.
- [5] Y. Tadano, *Int. J. Mech. Sci.* 52 (2010) 257–265.
- [6] J.S. Chen et al., *Comput. Methods Appl. Mech Eng.* 139 (1996) 195–227.
- [7] J.S. Chen et al., *Int. J. Numer. Methods Eng.* 50 (2001) 435–466.
- [8] Y. Tadano, *Comput. Mater. Sci.* 51 (2012) 290–302.
- [9] Y. Tadano, J.S. Chen, Keynote Lecture at USACM Conference on Isogeometric Analysis and Meshfree Methods (2016).

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計1件（うち査読付論文 1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 Niuro Tota, Tadano Yuichi | 4. 巻 794 |
| 2. 論文標題 Meshfree Analysis of Higher-Order Gradient Crystal Plasticity Using Nodal Integration | 5. 発行年 2019年 |
| 3. 雑誌名 Key Engineering Materials | 6. 最初と最後の頁 214 ~ 219 |
| 掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.4028/www.scientific.net/KEM.794.214 | 査読の有無 有 |
| 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14件（うち招待講演 1件/うち国際学会 6件）

| |
|--|
| 1. 発表者名 只野裕一, 嘉村大二郎, 萩原世也 |
| 2. 発表標題 キンク帯内外の方位差とキンク強化の相関に関する高次勾配結晶塑性解析 |
| 3. 学会等名 第25回計算工学講演会 |
| 4. 発表年 2020年 |

| |
|---|
| 1. 発表者名 Daijiro Kamura, Yuichi Tadano, Seiya Hagihara |
| 2. 発表標題 Higher-order gradient crystal plasticity analysis of plastic deformation around kink band |
| 3. 学会等名 3rd International Conference on Computational Engineering and Science for Safety and Environmental Problems (国際学会) |
| 4. 発表年 2020年 |

| |
|--|
| 1. 発表者名 只野裕一, 嘉村大二郎, 萩原世也 |
| 2. 発表標題 キンク帯が導入されたLPSO相に対する高次勾配結晶塑性解析 |
| 3. 学会等名 第68期日本材料学会学術講演会 |
| 4. 発表年 2019年 |

| |
|--|
| 1. 発表者名 只野裕一, 嘉村大二郎, 萩原世也 |
| 2. 発表標題 高次勾配結晶塑性メッシュフリー法によるキンク帯周辺の応力場解析 |
| 3. 学会等名 第24回計算工学講演会 |
| 4. 発表年 2019年 |

| |
|--|
| 1. 発表者名 只野裕一, 嘉村大二郎 |
| 2. 発表標題 LPSO型マグネシウム合金のキンク形状が巨視的材料応答に及ぼす影響 |
| 3. 学会等名 日本金属学会2019年秋期講演大会 |
| 4. 発表年 2019年 |

| |
|---|
| 1. 発表者名 Yuichi TADANO |
| 2. 発表標題 Higher-order gradient crystal plasticity analysis based on meshfree approach |
| 3. 学会等名 KSME-JSME Joint Symposium on Computational Mechanics & CAE 2019 (国際学会) |
| 4. 発表年 2019年 |

| |
|---|
| 1. 発表者名 只野裕一, 嘉村大二郎 |
| 2. 発表標題 LPSO型マグネシウム合金におけるキンク形態が巨視的材料挙動に及ぼす影響 |
| 3. 学会等名 M&M2019材料力学カンファレンス |
| 4. 発表年 2019年 |

| |
|---|
| 1. 発表者名 Yuichi TADANO, Daijiro KAMURA |
| 2. 発表標題 Higher-order gradient crystal plasticity analysis of magnesium including kink band |
| 3. 学会等名 7th Asian Pacific Congress on Computational Mechanics (招待講演) (国際学会) |
| 4. 発表年 2019年 |

| |
|--|
| 1. 発表者名 只野裕一, 萩原世也 |
| 2. 発表標題 高次勾配結晶塑性メッシュフリー解析における節点積分に関する検討 |
| 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 Yuichi TADANO, Seiya HAGIHARA |
| 2. 発表標題 Assessment of nodal integration for meshfree analysis of higher-order gradient crystal plasticity |
| 3. 学会等名 9th International Conference on Computational Methods (国際学会) |
| 4. 発表年 2018年 |

| |
|--|
| 1. 発表者名 只野裕一, 萩原世也 |
| 2. 発表標題 高次勾配結晶塑性メッシュフリー解析における数値積分手法に関する検討 |
| 3. 学会等名 第31回計算力学講演会 |
| 4. 発表年 2018年 |

| |
|--|
| 1. 発表者名 Tota NIIRO, Yuichi TADANO |
| 2. 発表標題 Meshfree analysis of higher-order gradient crystal plasticity using nodal integration |
| 3. 学会等名 14th Asia-Pacific Conference on Engineering Plasticity and Its Applications (国際学会) |
| 4. 発表年 2018年 |

| |
|--|
| 1. 発表者名 Yuichi Tadano, Jiun-Shyan Chen |
| 2. 発表標題 Meshfree analysis of higher-order gradient crystal plasticity using mixed bases |
| 3. 学会等名 JSME-KSME Joint Symposium on Computational Mechanics & CAE 2017 (国際学会) |
| 4. 発表年 2017年 |

| |
|--|
| 1. 発表者名 只野裕一, 萩原世也 |
| 2. 発表標題 混合基底を導入した高次勾配結晶塑性モデルに対するメッシュフリー解析 |
| 3. 学会等名 第22回計算工学講演会 |
| 4. 発表年 2017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 |
|---------------------------|-----------------------|----|
| | | |

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8 . 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

| 共同研究相手国 | 相手方研究機関 |
|---------|---------|
|---------|---------|