

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 27 年 6 月 11 日現在

機関番号：82108

研究種目：若手研究(B)

研究期間：2013～2014

課題番号：25820359

研究課題名(和文)複合鉄鋼組織のイメージベース有限要素モデリングによる延性破壊シミュレーション

研究課題名(英文)Ductile fracture simulations of multi-constituent steel microstructure using image-based finite element modeling

研究代表者

渡邊 育夢 (Watanabe, Ikumu)

独立行政法人物質・材料研究機構・元素戦略材料センター・主任研究員

研究者番号：20535992

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)：本研究の目的は、材料組織の変形挙動からマクロ力学特性を評価する数値シミュレーション手法を用いて、引張強度後の剛性低下を含む金属材料の応力-ひずみ関係全体を表現する新たなアプローチを開発することである。特に本研究では、大きく力学特性の異なる複数の相で構成される複合組織鋼を研究対象とし、材料組織の形態を捉えるための有限要素モデリング手法と弾塑性・損傷構成モデルの定式化と計算アルゴリズムを開発した。開発手法を用いて、材料組織の形態が異なる二相材料組織に対して変形シミュレーションを行い、損傷の発生・進展の違いからマクロ応力-ひずみ関係に差が現れることを示した。

研究成果の概要(英文)：Computational simulation approaches were investigated to characterize a macroscopic stress-strain curve from initiation and evolution of damage on a micro-scale. Three types of finite element modeling approaches of metallic microstructure were studied, which are idealized, stochastic-based and image-based modelings. Also a framework of constitutive model coupling with metal plasticity and continuum damage theory was developed on the basis of the principle of maximum dissipation, where its robust implicit algorithm was proposed. As demonstration computational simulations were performed for two finite element models of duplex microstructure characterized by different morphology.

研究分野：計算力学

キーワード：構造・機能材料 機械材料・材料力学 モデル化 シミュレーション工学 マルチスケール 金属物性

1. 研究開始当初の背景

(1) 社会的背景

鉄鋼業は我が国を代表する産業のひとつであり、材料特性を高度に引き出すための基礎・応用研究が多くのプロジェクトで実施されている。JST 産学共創基礎基盤研究プログラム”革新的構造用金属材料創製を目指したヘテロ構造制御に基づく新指導原理の構築”では、特に、材料組織および原子レベルの不均質性を制御することで、強化機構を引き出し、高性能な構造材料を開発することを目的として研究が進められている。ここで、材料の性能とは単に降伏強度の高い材料を意味せず、一般に延性や靱性、加工性、接合性など、複数の特性に対して高い性能を示すことが求められる。鉄鋼材料の延性特性に関して、日本鉄鋼協会において「鉄鋼材料の組織と延性破壊」研究会が企画され、産学協同で研究が進められ、強度-延性バランスの向上には高強度相と低強度高延性相の複合組織化が有効という実験的知見を説明するための技術開発の必要性が指摘された。

(2) 計算工学の利用

材料組織の不均質性とバルク特性を関連付ける上で、計算機シミュレーションは有力なアプローチとして認識されている。特に、有限要素法のような離散化数値解析手法では、複雑な形態であっても数値モデルとして表現でき、適切に境界条件や材料特性を設定できれば、力学に基づいた不均質材料組織の特性評価が可能である。設計図面と対応した形状データが存在する機械部品などに対して、材料組織の有限要素モデルの設定は容易でないが、計測画像データを基に有限要素モデルを作成するイメージベースモデリングのようなアプローチも開発されている。また、延性を表現するための数理モデルは非線形計算力学の分野において10年以上の歴史を有するが、バルク特性を評価することを目的とした材料組織の数値解析への応用研究の報告は少ない。

2. 研究の目的

(1) 数値解析手法の開発

本研究の目的は、複合鉄鋼組織を対象として延性破壊を数値シミュレーションで扱うことのできる材料組織の有限要素解析手法を開発することである。そのために、複合鉄鋼組織の形態を反映した有限要素モデルを作成するアプローチを整備する。また、連

続体損傷理論を基に降伏・加工硬化・剛性低下を表現できる構成モデルの枠組みを開発し、ユーザー拡張機能を利用して商用有限要素解析ソフトウェアへ実装する。

(2) 材料組織形態の影響評価

材料組織の有限要素モデリングおよび延性を評価するための構成モデリングという二つの開発手法を用いて、形態の異なる複合鉄鋼組織の有限要素モデルに対して数値シミュレーションを実施し、材料組織形態の延性特性への影響に関して議論する。

3. 研究の方法

(1) 材料組織の有限要素解析手法

本研究では、研究代表者がこれまで研究を進めてきた材料組織の有限要素解析手法を基盤とする [渡邊・上路, 2012]。このアプローチでは材料組織全体を代表する周期材料組織 (代表体積要素) の有限要素モデルを作成し、マクロ応力または変位勾配で制御によって変形シミュレーションを行う。その数値解析結果として材料組織の変形状態とともにマクロ応力および変位勾配が得られ、これらからマクロ応力-ひずみ関係を描画し、バルク特性を評価する。

(2) 材料組織の有限要素モデリング

有限要素法は任意の形態を扱うことができるが、代表体積要素の表現や有限要素での離散化について確立された技術はない。そこで、本研究では、材料組織の有限要素モデリング手法を以下の3つに分類し、それぞれのアプローチを整備する。

① 理想形態に基づくモデリング

機械部品などの設計と同様にあるコンセプトに基づき計算機上に理想的な形態を描画し、有限要素モデルを作成する。既往技術の転用が可能で、研究対象が明確に定義できているならば、最も有効なアプローチである。

② 計測画像データに基づくモデリング

計測画像データから材料組織の有限要素モデルを作成する。計測した材料組織そのものの評価が可能である。

③ 統計データに基づくモデリング

計測データを統計処理し、乱数などを使って人工的に材料組織の代表体積要素を再構築し、有限要素モデルを作成する。

(3) 延性破壊の構成モデリング

一般的な商用有限要素解析ソフトウェアで利用可能な金属塑性構成モデルでは、引張強度から剛性低下に至るメカニズムが実装されていない。このような損傷進展を考慮する構成モデルとしては、ボイドの影響を塑性加工軟化として表現したボイド損傷モデルと損傷によって弾性剛性を低下させる連続体損傷モデルの2種類がある。研究代表者はすでに連続体損傷モデルと結晶塑性構成モデルを連携させた高度な構成モデルを提案しており [Watanabe et al., 2008], 本研究では、この構成モデルの定式化の枠組みをさらに発展させる。

(4) 数値シミュレーション

商用有限要素解析ソフトウェアのユーザー拡張機能を用いて開発した構成モデルを実装し、延性破壊まで考慮した材料組織の有限要素解析を実行する。ここで、形態の異なる材料組織の有限要素モデルを用意し、形態の差による損傷進展およびマクロ剛性の低下状況を評価・議論する。

4. 研究成果

(1) 計測画像データに基づく有限要素モデリング

計測画像データの画素を有限要素とするボクセルアプローチでは、滑らかな異種材料界面が得られないなどの課題があるため、本研究では材料組織の形態情報を抽出し、有限要素で離散化を行うこととした。評価事例として、二相からなる三次元材料組織の画像を集束イオンビーム-走査型電子顕微鏡観察装置を用いて計測し、有限要素メッシュを作成し、有限要素解析によって応力分布を評価した(図1)。ここで、画像データから有限要素メッシュを作成するために、ハイエンド有限要素メッシングソフトウェア ANSYS ICME CFD を用いた。また、一般に微細な要素分割となり計算コストが高くなる傾向にあり、並列計算が必須である。そこで、数値解析には大規模並列計算を想定して開発されている有限要素解析ソフトウェア Front-ISTR を用いた。

本研究で採用する材料組織の有限要素解析手法では代表体積要素を扱うため、材料組織の有限要素モデルに周期性を仮定する。しかし、計測画像データには周期性がないため、周期組織への変換が必要である。形態抽出時に変換するアプローチを開発したが変換の度合いはケースごとに設定の必要がある。ま

た、このような変換を施す場合、統計データに基づくアプローチともいえる。

(2) 弾塑性・損傷構成モデルの定式化

本研究では、研究代表者の既往の研究 [Watanabe et al., 2008] を基に、散逸最大化の原理に基づき連続体損傷モデルと金属塑性構成モデルを連携させるとともに、ボイド損傷モデルの特徴も取り込んだ新しい構成モデルを開発した。この構成モデルでは、損傷の発生基準として弾塑性仕事を採用し、損傷の進展とともに材料の剛性が低下する。塑性変形と損傷発展が同時に進行する領域では非線形問題において唯一解を見つけることが困難となるが、本研究では、構成式を工夫することで解析解を併用し、一般的な塑性問題と同程度に安定的に計算できるアルゴリズムを開発した。このアプローチはより複雑な結晶塑性構成モデルへも転用でき、様々な材料を扱う構成モデルへの拡張が期待できる。

(3) 材料組織形態の影響評価

材料組織形態の延性特性への影響を評価するために、本研究では、二相からなる材料組織に関して、図2に示す2つの有限要素モデルを用意した。図中の白色部は低強度相(粗大粒)、灰色部は高強度相(微細粒)であり、この有限要素モデルにおいて、各相の体積分率は同一であるが材料組織形態が異なる。一方は、理想形態に基づくアプローチに基づき切頂八面体を基礎としたシェル/コア構造であり、高強度相を連結したシェルとしている。もう一方は、統計データに基づくアプローチに基づき代表体積要素全域に分散させた2,592個のユニットに対して乱数を用いてランダムに高強度相を分布させる。各ユニットは6個の六面体要素で構成されており、切頂八面体を対称性を考慮して48分割した領域をひとつのユニットとしている。ここで、高強度相の体積分率を27.1%とした。

図2の2つの有限要素モデルに対して、図中の Y_1 軸方向へマクロ単軸引張応力を付与する変形シミュレーションを実施した。数値解析結果として、マクロ相当応力-相当ひずみ関係を図3に実線(シェル/コア形態)と一点鎖線(ランダム分布)で示す。また、同図中に数値シミュレーションで使用した各相の応力-ひずみ関係を点線で示した。数値解析結果から、双方の有限要素モデルから得られる応力-ひ

ずみ関係は最大応力まではほぼ同一であり、降伏強度・加工硬化挙動は体積分率の影響が支配的で材料組織形態は二次的な因子であることが確認できる。その後、損傷が進展しマクロ応答において剛性低下が現れる領域では材料組織形態の影響は強く現れ、二つのモデルにおけるマクロ応力-ひずみ関係に差異が顕著に現れる。ここで、最大応力を越えてマクロ応答において剛性低下が開始した直後であるマクロひずみ 0.13 における応力分布および損傷分布を図 4 に示す。シェル/コア形態の材料組織では高強度相において優先的に損傷が発生している一方、ランダム分布の材料組織では主に高強度相において損傷が発生しているが、部分的に低強度相にも損傷が見られる。前者ではその後、低強度相でも損傷が発生し、全領域に広がる。また、後者では複雑に損傷が進展する。最終的に領域全体に損傷が連結することでマクロ応力はゼロに至るが、上記のように材料組織形態によって損傷の進展過程が変化し、その結果、マクロ応力-ひずみ関係の違いとして現れる。

(4) 本研究のまとめと今後の展開

本研究では、① 材料組織形態を材料組織の有限要素モデルとして表現するための手法開発、② 延性

破壊を有限要素解析で考慮するための損傷を考慮した弾塑性・損傷構成モデルの定式化と数値計算アルゴリズムの導出、③ 開発手法を用いた数値シミュレーションに取り組んだ。この過程で「構造材料のマルチスケールモデリング」および「連続体力学に基づく延性破壊の数値シミュレーション手法」に関する解説記事を執筆した。以上は今後の数値シミュレーションを用いた延性破壊に関する研究の基盤となる成果である。実験との比較によってモデリングの高度化を進める予定である。また、金属組織学・計算熱力学や第一原理計算などの原子シミュレーションとの連携も本研究分野において重要な研究課題である。

<引用文献>

- ① 渡邊育夢, 上路林太郎: 複合組織鋼の非均質組織に基づく力学挙動モデリング手法, 鉄と鋼, **98**, 2012, 283-289.
- ② I. Watanabe, K. Terada, E. A. de Souza Neto and D. Peric: Characterization of macroscopic tensile strength of polycrystalline metals with two-scale finite element analysis, *Jour. Mech. Phys. Solids*, **56**, 2008, 1105-1125.

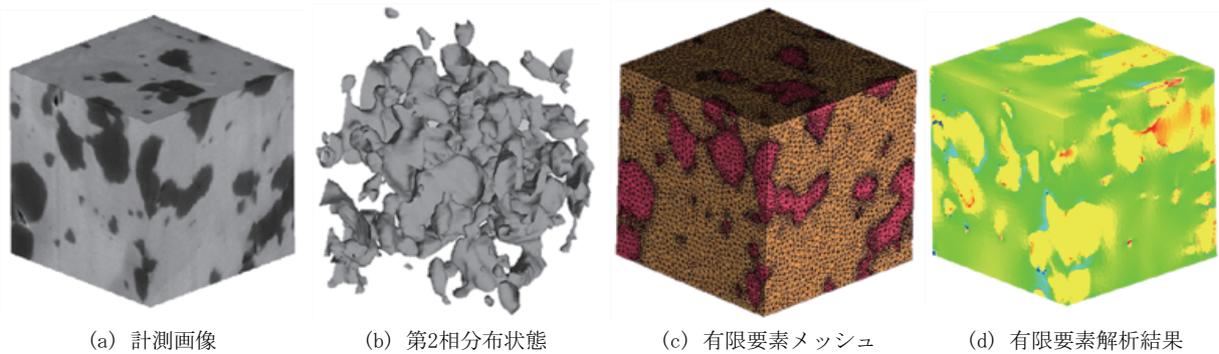


図 1: 計測画像に基づく有限要素モデリングとその数値解析

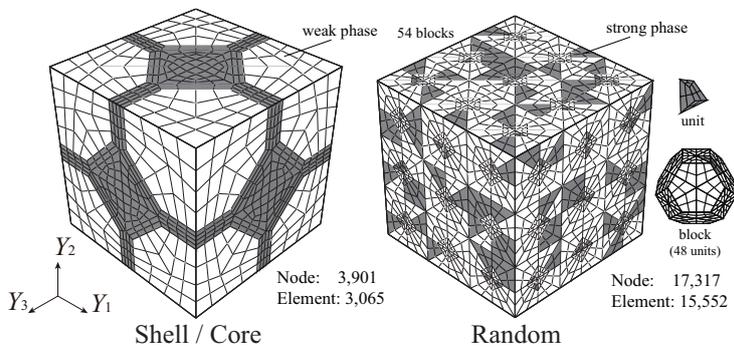


図 2: 二相材料組織の有限要素モデリング

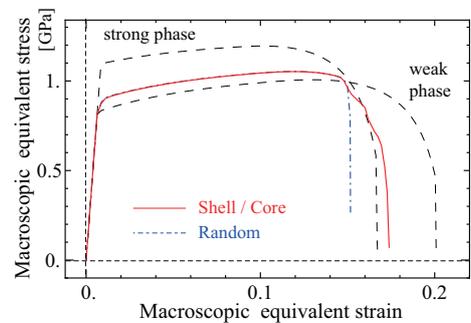
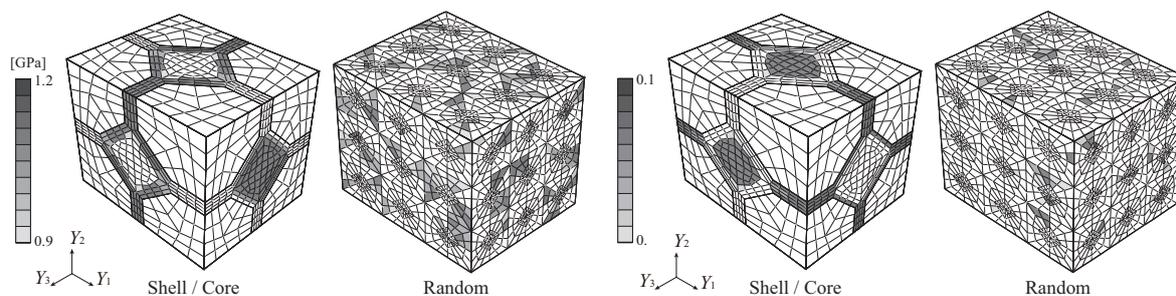


図 3: 延性破壊シミュレーション結果 (マクロ応力-ひずみ関係)



(a) 応力分布

(b) 損傷変数分布

図 4: 延性破壊シミュレーション結果 (材料組織の変形状態)

5. 主な発表論文等

[雑誌論文] (計 7 件)

① 渡邊育夢: 連続体力学に基づく延性破壊の数値解析手法, 鉄と鋼, 印刷中, 査読有.

② S. Bidhar, O. Kuwazuru, Y. Shiihara, Y. Hangai, M. Nomura, T. Utsunomiya, I. Watanabe & N. Yoshikawa: Empirical formulation of stress concentration factor around an arbitrary-sized spherical dual-cavity system and its application to aluminum die castings, *Appl. Math. Model.*, in press, 査読有.

③ S. Bidhar, O. Kuwazuru, Y. Shiihara, Y. Hangai, T. Utsunomiya, I. Watanabe & N. Yoshikawa: Practical application of empirical formulation of the stress concentration factor around equally sized dual spherical cavities to aluminum die cast, *Appl. Math. Model.*, **39**, 2015, 881-893, DOI:10.1016/j.apm.2014.07.005, 査読有.

④ N. Iwata, I. Watanabe, D. Setoyama & T. Iwata: Computational prediction of macroscopic mechanical behavior in multi-constituent steels, *R&D Review of TOYOTA CRDL*, **45**, 2014, 1-10, 査読有.

⑤ 渡邊育夢, 岩田徳利: 降伏点現象の有限ひずみ弾塑性構成モデリング, 鉄と鋼, **100**, 2014, 1232-1237, DOI:10.2355/tetsutohagane.100.1232, 査読有.

⑥ 渡邊育夢: 構造材料のマルチスケール有限要素モデリング, ふえらむ, **19**, 2014, 82-87, 査読有.

⑦ 渡邊育夢: 延性破壊の数値解析手法と空間スケールの階層性, 日本鉄鋼協会“鉄鋼材料の組織と延性破壊 研究会”報告書, 2014, 109-116, 査読無.

[学会発表] (計 6 件)

① I. Watanabe: Application of computational micromechanics to material R&D, NU/NIMS Materials Genome Workshop, Evanston, USA, March 25, 2015(invited).

② I. Watanabe, G. Nakamura, K. Ameyama & K. Yuge: Maximization of morphological strengthening effect in dual-component microstructure, International Symposium on Plasticity, Montego Bay, Jamaica, Jan. 3-8, 2015 (keynote).

③ 渡邊 育夢: 構造材料のマルチスケールモデリング, 日本金属学会 2014 年秋期講演大会, 名古屋, 9/24-26, 2014(基調講演).

④ I. Watanabe: Homogenization analysis based on finite element method at continuum scale, NU/NIMS Materials Genome Workshop, Evanston, USA, March 26, 2014(invited).

⑤ I. Watanabe, V.A. de Souza & A. Yanagida: Finite element analysis of deformed microstructure after multiple-path of equal channel angular extrusion, International Symposium on Plasticity, Freeport, Bahamas, Jan. 3-8, 2014(keynote).

⑥ I. Watanabe: Two-scale finite element analysis of equaled channeling angular extrusion of polycrystalline metal, International Conference on Processing and Manufacturing of Advanced Materials, Las Vegas, USA, Dec. 2-6, 2013(invited).

[図書] (計 1 件)

① I. Watanabe, G. Nakamura, K. Yuge, D. Setoyama and N. Iwata: Maximization of strengthening effect of microscopic morphology in duplex steels, in "Advanced Structured Materials:

From Creep Damage Mechanics to Homogenization Methods”, H. Altembach, T. Matsuda and D. Okumura eds., Springer, Ch.24, in press, 査読有.
[産業財産権・その他]

なし

6. 研究組織

(1) 研究代表者

渡邊 育夢 (Ikumu Watanabe)

物質・材料研究機構・元素戦略材料センター
・主任研究員

研究者番号：20535992

(2) 研究分担者

なし

(3) 研究連携者

なし

(4) 研究協力者

なし