

**科学研究費助成事業 研究成果報告書**

平成 29 年 6 月 8 日現在

機関番号：82108

研究種目：若手研究(B)

研究期間：2015～2016

課題番号：15K18205

研究課題名(和文) 金属組織学と連続体力学の連携を目指した構成モデル研究

研究課題名(英文) Microstructure-based elastoplastic constitutive modeling in metals

研究代表者

渡邊 育夢 (Watanabe, Ikumu)

国立研究開発法人物質・材料研究機構・構造材料研究拠点・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) 3,100,000円

研究成果の概要(和文)：本研究では、金属材料の主要な変形機構である結晶すべり・マルテンサイト変態・双晶変形を統一して扱う力学モデルの構築に取り組み、結晶学的異方性を考慮したモデルとして定式化を行った。結晶塑性構成モデルの計算手法を流用して、定義した有限ひずみ弾塑性構成モデルの陰解法計算アルゴリズムを導出するとともに有限要素解析プログラムへ実装した。開発モデルでは自由エネルギーに基づき散逸エネルギー最大化を考える定式化を採用している。よって、弾性・塑性ともにそれぞれポテンシャルを関数として定義しており、熱力学データベースとの関連付けの足がかりを築いた。

研究成果の概要(英文)：A constitutive framework coupling with crystal slip, martensitic transformation and twinning for metals was developed on the basis of finite strain elastoplastic constitutive theory, where these deformation modes are characterized by crystal structure. The implicit stress update algorithm was derived within a standard approach of multi-surface plasticity and integrated into a finite element program. The developed constitutive model is formulated in the manner of thermodynamic formulation, which contains potentials of each deformation modes. Therefore the mathematical structure will be a basis to associate with CALPHAD data-base in the further study.

研究分野：計算力学

キーワード：結晶塑性論 金属組織学 非線形計算力学 連続体力学 有限要素解析

## 1. 研究開始当初の背景

### (1) 構成モデル研究

構造設計のデジタル化・計算機シミュレーションによる仮想実験は開発サイクルの短縮に大きく貢献しており、製造業において無くてはならないものとなっている。有限要素解析に代表される連続体力学に基づく数値シミュレーションにおいて、材料は材料挙動を表現する構成モデルとその材料定数として表現される。すなわち、構成モデルは材料と力学をつなぐインターフェイスである。近年、数値シミュレーションの応用分野は多岐に渡り、複雑な材料挙動を少ない変数と材料パラメータで記述できる構成モデルに対するニーズは高い。

入り組んだ非線形関数で現象を記述しようとする古典的アプローチから一歩進んで、2000年代に素過程から記述することを目指したマルチスケールモデリングに関する研究が進められた。数学的均質化法として知られるスケール連成アプローチは、マクロ構造物に対する有限要素解析における構成関係をミクロ材料組織の変形解析から得る枠組みを有し、平均場理論・マイクロメカニクスといった先駆的アプローチを発展させた数値解析手法として期待された。しかしながら、このようなマルチスケールアプローチは計算コストが非常に高く、現状では産業的な問題への応用は先端的なスーパーコンピュータを活用したとしても難しい。

### (2) 金属材料を対象とした構成モデル研究

古典的金属塑性構成モデルは基本的に結晶すべりを想定した変形モードを対象としているが、近年の金属材料はマルテンサイト変態・双晶変形といった変形モードを有効に利用した材料開発が顕著である。ひずみ誘起マルテンサイト変態を対象とした構成モデルはその工学的な重要性に反して、開発が遅れている。金属組織学の見地からのマルテンサイト変態の研究は古くから進められており、多くの知見が蓄積されているが、その力学応答の数理的記述への展開は2000年代に入り本格的に研究が進められはじめた新しい分野である。特に、形状記憶効果は温度依存性が高いことから、エネルギー原理に基づく先進的な構成モデルの定式化を用いた理論開発が進められており、研究レベルでは既に有限要素解析プログラムへの実装もなされているが、転位集積は扱わ

ないなど理想的な状況を対象とした報告が多い。

近年、物質・材料研究機構では形状記憶効果を利用した制震ダンパー材料を開発し、既往のダンパー鋼材と比較して10倍以上の長寿命化に成功した。実用化に際して構造部材実装のための数値シミュレーションを実施したが、既往の形状記憶効果の構成モデルでは応力-ひずみ関係を再現することができず、現象論的な構成モデル(非線形移動硬化則)が適用された。このような構成モデルを用いて対象とする応力-ひずみ関係を再現することは可能であるが、組織情報を一切有しておらず、材料開発へフィードバックできる情報は乏しい。

## 2. 研究の目的

本研究では、金属組織学の知見に基づき金属材料の主要な変形モードである結晶すべり・マルテンサイト変態・双晶変形を統合して扱う構成モデルの開発に取り組む。組織因子を含む形で構成モデルを定式化することで、構造・プロセス設計と材料開発の橋渡しに資する新たな力学理論の構築を目指す。また、エネルギー原理に基づく有限ひずみ弾塑性構成モデルの定式化方法を採用し、近年工学利用上の重要性が高まっている熱力学データベースとの連携を試みる。

## 3. 研究の方法

古典的な金属塑性構成モデルは結晶すべりを想定して定義されており、本研究では、これにマルテンサイト変態、続いて、双晶変形に関する構成式を金属組織学の知見を基に追加する形で拡張する。ここで、構成モデルは有限ひずみ論の枠組みで定式化し、陰解法応力計算アルゴリズムに基づき、有限要素解析プログラムへ実装する。また、開発した構成モデルにおいて熱力学データベースと内部変数・材料パラメータを関連付けるように工夫する。

### (1) ひずみ誘起マルテンサイト変態の有限ひずみ弾塑性構成モデルの定式化

既往の研究 [1, 2] を参考に熱・ひずみ誘起マルテンサイト変態を扱うための有限ひずみ弾塑性構成モデルの定式化と応力計算アルゴリズムの導出を行い、有限要素解析プログラムへ実装する。本研究では、応力場の拘束条件の下で、自由エネルギー関数を含む散逸関数を最大とするような状態を考えることで、各内部変数の発展方程式を導出するアプローチ

を採用する。ここでは、自由エネルギー関数を熱変数と状態を記述する内部変数を用いて定義し、応力場の拘束条件式を結晶すべり・マルテンサイト変態の発生・発展基準として定義する。

(2) 陰解法応力計算アルゴリズムの導出と有限要素解析プログラムへの実装

定式化した構成モデルに対して、応力計算アルゴリズムを導出するとともに有限要素解析プログラムへの実装を行う。応力計算には Newton-Raphson 法を用いた陰解法アルゴリズムを採用する。本研究では、複数の応力場の拘束条件を有する上に、高度な平均場理論を採用するので、場合によっては唯一解が得られない可能性がある。この種の問題は結晶塑性構成モデルで多くの研究がなされており、そのアプローチが転用できると考えられる。ここでは、計算の安定化のために Levenberg-Marquardt 法を、唯一解が得られない場合の対応として一般化逆行列を採用する。

(3) 双晶変形を考慮した構成モデルへの拡張

開発した構成モデルへ双晶変形を追加することで結晶すべり・マルテンサイト変態・双晶変形という金属材料における主要な変形モードを扱う有限ひずみ弾塑性構成モデルを開発する。力学的な扱いとしては双晶変形は結晶すべりとマルテンサイト変態の中間的な特徴を持つため、枠組みとしては類似の扱いが可能と考えられる。双晶変形における応力場の拘束条件と他の変形モードとの干渉作用のモデル化に関しては金属組織学においても未解明な部分が多く、数理モデルとしては特定の理論に限定することなく一般化した枠組みとして整備する。

(4) 熱力学データベースとの連携

エネルギー原理に基づく有限ひずみ弾塑性構成モデルでは、各内部変数に対するエネルギーを内包している。それらと熱力学データベースの関連付けを検討し、構成モデルへ導入する。

#### 4. 研究成果

(1) ひずみ誘起マルテンサイト変態の有限ひずみ弾塑性構成モデルの定式化

本研究では、研究代表者が取り組んでいる有限ひずみ弾塑性構成モデルの一般化した定式化 [1] に、共同研究者である米国 Northwestern 大学 L.C. Brinson 教授の提案した形状記憶合金の構成モデル [2] を参

考に定義した構成モデルを当てはめることとした。

まず定式化において、変形勾配の弾塑性乗算分解と超弾性構成モデル

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}^e \mathbf{F}^{tr}, \quad \hat{\mathbf{S}} = 2 \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{C}^e}$$

を用いる。ここで、 $\mathbf{F}^e$  は弾性変形勾配、 $\mathbf{F}^{tr}$  はマルテンサイト変態による変形勾配、 $\hat{\mathbf{S}}$  は中間配置における第二 Piola-Kirchhoff 応力、 $\Psi$  は自由エネルギー、 $\mathbf{C}^e = \mathbf{F}^{eT} \mathbf{F}^e$  は弾性 Cauchy-Green テンソルである。自由エネルギーを内部変数である弾性変形勾配とマルテンサイト変態の履歴変数  $\zeta$  で記述できるとすると

$$\Psi(\mathbf{F}^e, \zeta^{(1)}, \dots, \zeta^{(n_{\text{var}})}) = \Psi(\mathbf{F}^e, \zeta)$$

となる。 $\zeta$  にはひずみ量の拘束条件を次式で与える。

$$\sum_{\alpha=1}^{n_{\text{var}}} \zeta^{(\alpha)} = \zeta \in [0, \zeta_{\text{max}}]$$

次に、マルテンサイト変態の発生条件を弾塑性降伏関数と同様に応力ノルムと基準応力の差として

$$\phi^{(\alpha)} = \Sigma^{(\alpha)} - q^{(\alpha)} = 0 \quad \alpha \in \{1, \dots, n_{\text{var}}\}$$

と考える。ここで、マルテンサイト変態開始強度を次式で定義する。

$$q^{(\alpha)} := \tau_L^{(\alpha)} - \Omega^{(\alpha)} \Delta \tau$$

また、 $\Omega^{(\alpha)}$  は応力ノルムの進展方向に関する変数で

$$\Omega^{(\alpha)} = \frac{1}{2} \left( 1 - \text{sign} \left[ \dot{\Sigma}^{(\alpha)} \right] \right)$$

と定義した。以上の式を基に散逸エネルギーが最大となるような内部変数の発展則を導出する。

$n_{\text{var}} = 1$  のケースとして Mises 応力を応力ノルムとして定式化したところ、除荷時に計算不安定に陥ることを確認した。これは負荷時と除荷時で同じ拘束条件が付与されるに当たり、負荷時は凸な関数であるが除荷時は逆に凹となり、変形モードの移行が不安定状態となることに起因すると推察される。この問題の解決には拘束条件の追加が有効であるが関数形状を工夫することでも回避可能である。そこで、本研究では応力ノルムを結晶学的変形モード、すなわち Bain ひずみを用いて定義することで物理に則したアプローチで回避する。

結晶学的アプローチでは応力ノルムを次式で定義する。

$$\Sigma^{(\alpha)} = (\mathbf{C}^e \hat{\mathbf{S}}) : \mathbf{M}^{(\alpha)}$$

ここで、 $M^{(\alpha)}$  は Bain ひずみモードであり、材料によって異なる。例えば、Fe-Ni-C 系では  $n_{\text{var}} = 3$  であり、

$$M^{(1)} = \begin{bmatrix} \beta & 0 & 0 \\ 0 & \alpha & 0 \\ 0 & 0 & \alpha \end{bmatrix} \quad M^{(2)} = \begin{bmatrix} \alpha & 0 & 0 \\ 0 & \beta & 0 \\ 0 & 0 & \alpha \end{bmatrix}$$

$$M^{(3)} = \begin{bmatrix} \alpha & 0 & 0 \\ 0 & \alpha & 0 \\ 0 & 0 & \beta \end{bmatrix}$$

$$(\alpha, \beta) = (0.1241, -0.1941)$$

となる。また、Ni-Ti-Cu 系では  $n_{\text{var}} = 6$  であり、次式となる [3]。

$$M^{(1)} = \begin{bmatrix} \alpha & 0 & \gamma \\ 0 & \beta & 0 \\ \gamma & 0 & \alpha \end{bmatrix} \quad M^{(2)} = \begin{bmatrix} \alpha & 0 & -\gamma \\ 0 & \beta & 0 \\ -\gamma & 0 & \alpha \end{bmatrix}$$

$$M^{(3)} = \begin{bmatrix} \alpha & \gamma & 0 \\ \gamma & \alpha & 0 \\ 0 & 0 & \beta \end{bmatrix} \quad M^{(4)} = \begin{bmatrix} \alpha & -\gamma & 0 \\ -\gamma & \alpha & 0 \\ 0 & 0 & \beta \end{bmatrix}$$

$$M^{(5)} = \begin{bmatrix} \beta & 0 & 0 \\ 0 & \alpha & \gamma \\ 0 & \gamma & \alpha \end{bmatrix} \quad M^{(6)} = \begin{bmatrix} \beta & 0 & 0 \\ 0 & \alpha & -\gamma \\ 0 & -\gamma & \alpha \end{bmatrix}$$

$$(\alpha, \beta, \gamma) = (0.0292, -0.0421, -0.0292)$$

(2) 陰解法応力計算アルゴリズムの導出と有限要素解析プログラムへの実装

ひずみ誘起マルテンサイト変態の構成モデルに対して、結晶塑性構成モデルと同様に陰解法応力計算アルゴリズムとコンシステント接線行列を導出した。双方共通して拘束条件に対するひずみ増分  $\gamma^{(\beta)}$  の微分  $\frac{\partial \phi^{(\alpha)}}{\partial \Delta \gamma^{(\beta)}}$  を導出することで得られる。図 1 に Fe-Ni-C 系  $N_{\text{var}} = 3$  のケースにおいて、結晶座標の [100] 方向へ単軸引張応力を負荷・除荷した場合の応力-ひずみ関係を示す。形状記憶効果に特有の応力-ひずみ関係を得られていることが確認できる。上記のアルゴリズムに基づき、構成モデルを商用有限要素解析プログラムへユーザー拡張機能を用いて実装した。

(3) 双晶変形を考慮した構成モデルへの拡張

双晶変形は結晶すべりおよびマルテンサイト変態

と同様に結晶学的に変形モードが規定される。したがって、他の変形機構と同様の手続きで定式化・実装が可能である。

次の段階として変形機構間の相互作用を考える必要がある。本研究課題は理論モデルの構築だけでなく実験的検証も難しく、研究実施期間では困難である。そこで、結晶塑性構成モデルで利用されている硬化特性において行列形式で相互作用を考える簡便なアプローチを採用した。

(4) 本研究のまとめと今後の展開

本研究では、

① 金属材料の主要な変形機構である結晶すべり・マルテンサイト変態・双晶変形を統一して扱う力学モデルの構築に取り組み、結晶学的異方性を考慮したモデルとして定式化を行った。

② 結晶塑性構成モデルの計算手法を流用して、定義した構成モデルの陰解法計算アルゴリズムを導出するとともに有限要素解析プログラムへ実装した。

③ 開発モデルでは自由エネルギーに基づき散逸エネルギー最大化を考える定式化を採用している。よって、弾性・塑性ともにそれぞれポテンシャルを関数として定義しており、熱力学データベースとの関連付けの足がかりを築いた。

④ 開発手法は数学モデルとしての定義はできるが多くの拘束条件を含むマルチサーフェイス塑性問題となり、安定的な計算が難しく、実験と比較するような段階の計算まで研究期間では至らなかった。モデルの簡素化と計算方法の両面からの改善が必要である。

<引用文献>

[1] 渡邊育夢, 岩田徳利, 中西広吉, テンソル内部変数を持つ有限ひずみ弾塑性構成モデルの定式化, 日本計算工学会論文集, 論文番号 20100005, 2010.

[2] M. Panico, L.C. Brinson, A three-dimensional phenomenological model for martensite reorientation in shape memory alloys, Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 55 (2007) 2491-2511.

[3] K. Bhattacharya, Microstructure of Martensite, Oxford press, 2004.

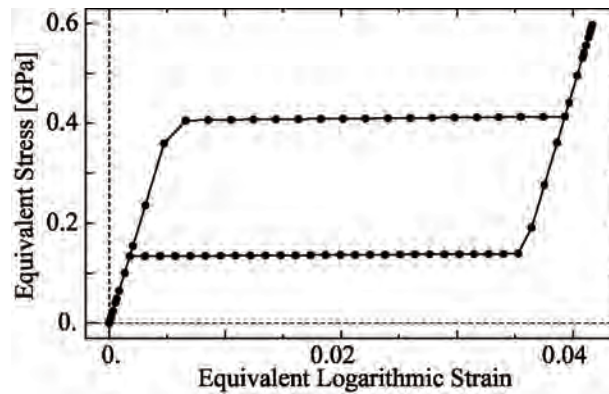


図 1: 形状記憶合金構成モデルの応力-ひずみ関係

## 5. 主な発表論文等

[雑誌論文] (計 6 件)

① A. Ibrahim, K. Nakahata, H. Yamawaki, I. Watanabe, One dimensional EFIT modeling and experimental validation of dynamic interfacial bonding, Mechanical Engineering Letters, Bulletin of the JSME, pp.1-9, No.16-00605, Vol.3, 2017, 査読有.

DOI:10.1299/mel.16-00605

② 大村孝仁, 原徹, 渡邊育夢, 界面の微視的組織・力学解析とマクロ特性予測, 金属, pp.37-44, Vol.87, 2017, 査読無.

③ I. Watanabe, D. Setoyama, Multiscale characterization of a polycrystalline aggregate subjected to severe plastic deformation with the finite element method, Materials Transactions, pp.1404-1410, Vol.57, 2016, 査読有.

DOI:10.2320/matertrans.MH201514

④ V.A. de Souza, I. Watanabe, A. Yanagida, Numerical estimation of frictional effects in equal channel angular extrusion, Materials Transactions, pp.1399-1403, Vol.57, 2016, 査読有.

DOI:10.2320/matertrans.MH201513

⑤ S.K. Vajpai, H. Yu, M. Ota, I. Watanabe, et al., Three-dimensionally gradient and periodic harmonic structure for high performance advanced structural materials, Materials Transactions, pp.1424-1432, Vol.57, 2016, 査読有.

DOI:10.2320/matertrans.MH201509

⑥ H. Yu, I. Watanabe, K. Ameyama, Deformation

behavior analysis of harmonic structure materials by multi-scale finite element analysis, Advanced Materials Research, pp.853-857, Vol.1088, 2015, 査読有.

DOI:10.4028/www.scientific.net/AMR.1088.853

[学会発表] (計 11 件)

① I. Watanabe, et al., Computer Aided Material Development (CAMaD) using text mining, NU/NIMS Materials Genome Workshop, Evanston, U.S.A., March 28, 2017 (invited).

② I. Watanabe, Scale-coupling approaches using finite element analysis of microstructure in structural materials, International Symposium on Plasticity, Puerto Vallarta, Mexico, January 4, 2017 (keynote).

③ I. Watanabe, et al., Study of strengthening effect of microscopic morphology using finite element analysis of periodic microstructure, Asia-Pacific Symposium on Engineering Plasticity and Its Applications 2016, Higashi Hiroshima Arts & Culture Hall Kurara, Higashi-Hiroshima, Japan, December 6, 2016 (invited).

④ I. Watanabe, Finite element modeling of microstructure as an interface between deformation mechanisms and bulk properties, 3mE seminar, Delft, Netherlands, June 14, 2016 (invited).

⑤ I. Watanabe, Multi-scale finite element modeling in structural materials, ZCCE seminar, Swansea, Wales, U.K., June 10, 2016 (invited).

⑥ I. Watanabe, Maximization of strengthen-

ing effect of microscopic morphology in duplex steels, NU/NIMS Materials Genome Workshop, Evanston, U.S.A., March 24, 2016 (invited).

⑦ I. Watanabe, Characterization of strength-ductility relationship with finite element analysis of periodic microstructure, International Symposium on Plasticity, Hawaii, U.S.A., January 5, 2016 (keynote).

⑧ I. Watanabe, Multi-scale finite element modeling in structural materials, Taishan Scholar Forum, Qingdao, China, October 30, 2015 (invited).

⑨ I. Watanabe, et al., Multi-scale modeling and characterization in multi-constituent steels, International Workshops on Advances in Computational Mechanics, KFC Hall, Tokyo, Japan, October 13, 2015 (invited).

⑩ I. Watanabe, Multi-scale finite element modeling in structural metals, CHiMaD seminar, Evanston, U.S.A., August 20, 2015 (invited).

⑪ I. Watanabe, Control of heterogeneous mi-

crostructure to improve mechanical properties in structural materials, NIST seminar, Gaithersburg, U.S.A., July 20, 2015 (invited).

[図書・産業財産権]

なし

[その他]

ホームページ

<http://www.nims.go.jp/personal/ikumu/>

## 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・構造材料研究拠点  
・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