



特集記事 • 12

鉄鋼におけるマルチスケール・マルチフィジックス計算材料科学

構造材料のマルチスケール有限要素モデリング

Multi-Scale Finite Element Modeling for Structural Materials

渡邊育夢

Ikumu Watanabe

 (独) 物質・材料研究機構
 元素戦略材料センター 構造材料ユニット
 主任研究員

1 はじめに

計算機性能の飛躍的な発展を受けて、数値シミュレーションの産業利用は特に製品設計およびプロセス設計分野において普及し、製品開発サイクルの短縮に大きく貢献している。CAD (Computer Aided Design; コンピュータ支援設計) ソフトウェアで描かれたデータを直接的に用いて、有限要素法に代表される離散化数値解析手法で基礎的な物理法則に基づき数値シミュレーションを実施する明快な評価プロセスは、ユーザーフレンドリーなインターフェイスを備えた商用ソフトウェアの整備によって急速に普及が進んだ。一般にCAE (Computer Aided Engineering; コンピュータ支援工学) と呼ばれる潮流は製造業に新たな指導原理を提起したといえる。

製品設計のようなマクロスケールにおいて開発されてきた連続体近似に基づく数値シミュレーションは材料組織の評価にも適用可能であり、近年、微視スケールへの応用研究が増えている。併せて数学的均質化法¹⁾のようなスケール連成理論を用いて、大きく異なる複数のスケールを関連付けて扱う数値シミュレーションも産業利用が可能な段階にきている。

本稿では、力と変形をにう構造材料、特に鉄鋼材料を対象に、材料組織の有限要素解析とその応用研究を紹介する。

2 材料組織の有限要素モデリング

数値シミュレーションにおいて、モデリングの適切性は数値解析結果の信頼性と同義である。一般に有限要素解析では、数値解析前にCAD ソフトウェアで構造形態を描画し、有限要素メッシュを作成、次いで境界条件と構成モデルを設定というプリプロセスと呼ばれる工程が実施される。本節では、材料組織の有限要素解析におけるプリプロセスについて言及する。

2.1 材料組織形態の表現

鉄鋼材料に代表される金属材料組織は非常に複雑であるが、数値モデルとして忠実に再現する必要があるかどうかは議論があり、その形態表現は解析者に依存する。形態表現における代表的なコンセプトとして以下の3つが挙げられる。

■理想形態として表現：最も一般的なコンセプトは、楕円体介在物のように理想化して材料組織を表現することである。この場合、製品・部品の設計工程と同様に、CAD ソフトウェアなどで描画する。

■画像ベースモデリング：三次元CTで再構成されたデジタルデータが利用可能な場合は、計測データに忠実に形態を表現することもできる。この分野でよく知られたアプローチはデジタル画素をそのままひとつの六面体有限要素とするボクセル有限要素法である。このアプローチではデジタルデータからメッシュ作成まで一貫して行えるが、異種材料界面が凸凹になってしまったり、必要以上に微細な要素分割となり、計算コストが膨大となるなどの課題がある。

■統計データを用いた表現：三次元計測データでなくとも、第二相の体積分率・分布状況・平均アスペクト比といった材料組織の形態に関する統計データが利用可能な場合、この情報を基に確率分布と乱数を使って擬似的に材料組織を作成することもできる。

2.2 有限要素メッシング

次の段階として、定義された材料組織の形態を基に有限要素メッシュを生成し、境界条件を設定する。有限要素解析では有限要素形状や要素分割数によって、数値解析結果が変わる。また、複雑な形態に対して高品質な有限要素メッシュを発生させることは容易ではなく、有限要素メッシュ作成は数

値解析プロセス全体において多くの労力を費やすパートであることが知られている²⁾。

2.3 代表体積要素と境界条件の設定

材料組織の数値解析から平均的なマクロ特性を評価する場合、領域全体を代表する部分領域を抽出して解析対象とする。この部分領域を一般に代表体積要素 (Representative Volume Element; RVE) と呼ぶ。

変位場の有限要素解析では、境界条件として一般に節点に変位/荷重の拘束条件を与えることとなり、材料組織の有限要素モデルでも、端面の変位/荷重を制御することが最も単純であるが、境界条件を設定したことによる拘束の影響を興味しなければならない。

代表体積要素の数値解析では、このような境界条件付近の拘束効果を排除できる周期境界条件が適切と考えられている。この場合、変位場 u は一様変位 $\bar{u}$ と周期変位 $\tilde{u}$ で分離され、 $u = \bar{u} + \tilde{u}$ のように表現される。一様変位 $\bar{u}$ はマクロ変位勾配 $\bar{H}$ と材料組織中の座標系 Y を用いて $\bar{u} = \bar{H}Y$ と表すことができ、マクロ変位勾配 $\bar{H}$ を制御して周期変位 $\tilde{u}$ について解く、数値解析を実施することとなる。周期境界条件を用いた場合、材料組織の実寸法は存在しない。スケール依存性を考慮するためには材料組織の有限要素モデルのどこかに特性長さを定義しなければならない。

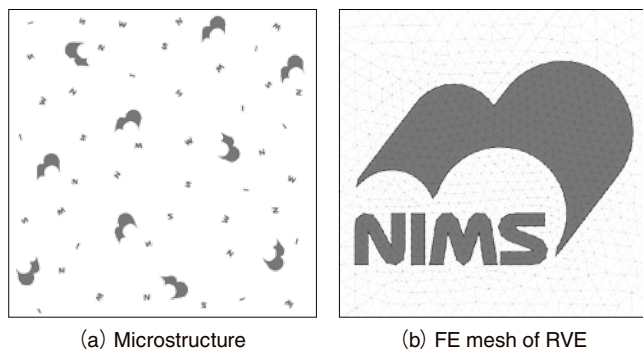
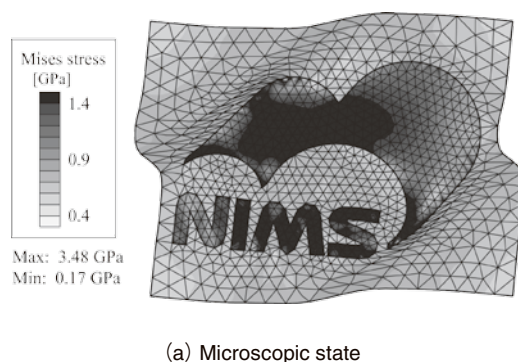
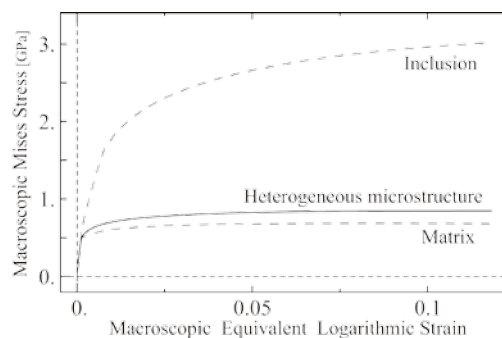


Fig.1 Finite Element Modeling of Microstructure.



(a) Microscopic state



(b) Macroscopic response

Fig.2 Finite Element Analysis for Periodic Microstructure.

一般に、画像から抽出した形態は周期的でないため、このアプローチの対象外である。また、形態が周期的であっても、周期境界条件が設定できるように有限要素メッシュを発生させることは容易ではない。

例として、Fig. 1 (a) のような析出物を含む材料組織 (介在物の体積分率 30.4%) から代表体積要素の有限要素メッシュを Fig. 1 (b) のように作成した。この有限要素モデルの水平方向へ単軸引張試験に対応するマクロ変位勾配を付与する数値解析結果を Fig. 2 に示す。Fig. 2 (b) において、材料組織のマクロ応力-ひずみ関係を実線で、この数値解析で使用した介在物および母相の応力-ひずみ関係を点線で示した。

2.4 構成モデル

変位場の有限要素解析において、材料は応力-ひずみ関係を表現する構成モデルとその材料定数として定義される。微視スケールの力学挙動は未解明な部分が多く、適切な構成モデルの選定は困難である。

結晶塑性構成モデルは代表的な微視スケールを対象とした塑性構成モデルである。この構成モデルでは単結晶体のすべり挙動に基づき、すべり系ごとに塑性降伏関数が定義され、結晶構造および結晶方位に依存した異方性を表現する。体心立方格子の Ferrite 結晶の場合、3 種類 48 個のすべり系を有し、各すべり系の初期臨界分解せん断応力や塑性硬化および干渉作用を考慮した構成式が定義され、その構成式に含まれる材料定数を設定しなければならない。現状、これらの材料定数を設定するためには、大幅な単純化が必要であり、仮定を設けずに同定する方法論は存在しない。

物理現象を表現するために複雑な構成式を定義することは可能であるが、材料定数の設定方法まで考えて設計されなければ、産業利用は難しい。物理量や既存のデータベースが利用できる形式で現象を記述するとともに、ナノ/マイクロインデンテーションのような局所力学挙動を評価する材料試験や分子動力学解析、離散転位動力学解析のような数値シミュレーション手法との連携が課題克服につながると期待される。

3 ミクロ-マクロ有限要素解析

本節では、数学的均質化法に基づくミクロ-マクロ有限要素解析手法¹⁾とこれを基に産業利用へ適用するために開発されたミクロ-マクロ非連成近似解法^{3,4)}について言及する。

3.1 数学的均質化法

有限要素法を用いたマルチスケール解析手法として知られる数学的均質化法は1990年代を中心に精力的に研究がなされた。この手法では、数学的にマクロとミクロという2つのスケールが連成した境界値問題が導出される (Fig. 3)。このスケール連成境界値問題を有限要素法で解くことで、ミクロ境界値問題がマクロ境界値問題の応力-ひずみ関係、すなわち、構成関係を与えるという特徴的な数理構造のスケール連成シミュレーションが可能となる。このアプローチでは数学的に材料組織の周期性が導出され、マクロ境界値問題をマクロ応力-ひずみ関係まで縮退させると前述の周期境界条件を用いた代表体積要素の有限要素解析と一致する。

数学的均質化法に基づくミクロ-マクロ有限要素解析手法は理論的に洗練された枠組みを持つが、マクロ有限要素モデル全体の応力評価点において、材料組織の有限要素解析を並行して実行しなければならないため、計算コストが非常に高く、大規模非線形有限要素解析には適さない。この課題に対して、並列計算の利用⁵⁾やサブステップ法⁶⁾といった数値計算アルゴリズムの工夫による対応が報告されている。

3.2 ミクロ-マクロ非連成近似解法

ミクロ-マクロ非連成近似解法^{3,4)}はマクロ応答を構成モデルで置き換えることで、ミクロ-マクロ境界値問題の解を近似するアプローチである。

数学的均質化法に基づくミクロ-マクロ有限要素解析手法における均質化 (Homogenization)、局所化 (Localization)

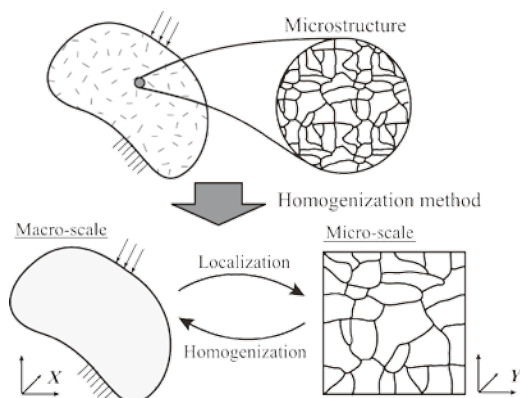


Fig.3 Mathematical Homogenization Method.

プロセスを念頭にミクロ-マクロ非連成近似解法は次の手順で進める。

■1) マクロ構成モデルの設定と材料パラメータの同定 (均質化) : はじめに、解析対象の材料組織の有限要素モデルに対して、単軸引張や純せん断など、材料試験に対応する有限要素解析を実施し、マクロ応答を評価する。そして、マクロ構成モデルを選択し、評価された材料挙動を再現する材料定数を同定する。商用有限要素解析ソフトウェアでは、有限要素解析で扱われる多くの工業材料に対して、その非線形材料挙動を表現するための特別な構成モデルを用意されており、これらの中から適切な構成モデルを採用すれば、良好な近似が可能である。

■2) マクロ構成モデルを用いたマクロ有限要素解析 : 前項で設定したマクロ構成モデルを用いて、対象とするマクロ境界値問題の有限要素解析を実施する。ここで、マクロ有限要素モデルから材料組織の変形状態を評価したい物質点を選択し、続くミクロ有限要素解析のために、マクロ変位勾配の履歴をサンプリングする。

■3) マクロ変形履歴を用いたミクロ有限要素解析 (局所化) : 前項のマクロ有限要素解析で得たマクロ変形履歴を用いて、均質化プロセスで用いた材料組織の有限要素モデルに対して、ミクロ有限要素解析を行う。これによりマクロ有限要素解析の結果を反映したミクロ材料組織の変形挙動を評価できる。

ミクロ-マクロ連成有限要素解析では“(マクロ有限要素モデルの応力評価点数) × (ミクロ有限要素解析に要する時間) × (時間増分) × (収束計算の反復回数)”のように計算コストが増加するが、ミクロ-マクロ非連成近似解法では各スケールを別々に、かつ知りたいマクロ物質点のみのミクロ有限要素解析を行うため、製品形状を考慮した詳細な有限要素メッシュに対しても現実的な計算時間でミクロ-マクロ境界値問題の解を近似できる。

4 応用研究例

本節では、材料組織の有限要素解析を用いた応用研究例を紹介する。

4.1 多結晶金属のマルチパスECAE加工シミュレーション

ミクロ-マクロ非連成近似解法ではマクロ変形履歴を用いてミクロ有限要素解析を行うため、塑性加工のように変形を強制的に付与する問題との相性が良く、実用的な塑性加工問題において実験と整合した結果を得ている⁷⁾。ここでは、微

細粒化加工プロセスのひとつとして知られるECAE (Equal Angular Channel Extrusion) 加工への適用例を示す。材料組織の有限要素モデルとしてFig. 4のような切頂八面体形状の54個の結晶粒で構成された周期多結晶組織を用意し、結晶方位を乱数で与える。材料は純銅を想定し、材料試験のデータを基に、ミクロおよびマクロ有限要素解析のための結晶塑性構成モデルと金属塑性構成モデルの材料定数を同定する。直交型のECAE加工のマクロ有限要素解析を実施し、得られた単純せん断主導のマクロ変形履歴を多結晶組織の有限要素モデルへ付与する。さらに、除荷プロセスとしてマクロ応力を解放する。以上のようなECAE加工1パスの数値解析によって得られた各応力評価点の方位情報を極点図上に示す (Fig. 5)。ここでは、54結晶粒と比較的少ない結晶粒を初期条件としているが、各結晶粒を80六面体有限要素で分割していることから、粒間相互作用による粒内不均一変形の結果として、粒内で不均一な方位回転が生じ、無数の結晶粒が存在しているように見える単純せん断特有の集合組織が得られた。ただし、この数値解析結果で微細粒化を再現できているとは一概に言えず、微細な要素分割により結晶粒内の変位場の表現性能を高めるなどの検討が不可欠である。

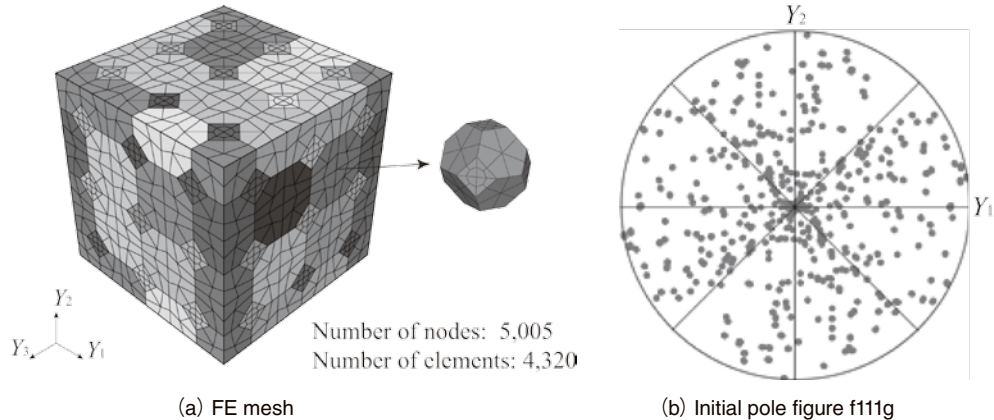


Fig.4 Finite Element Model of Polycrystalline Aggregate.

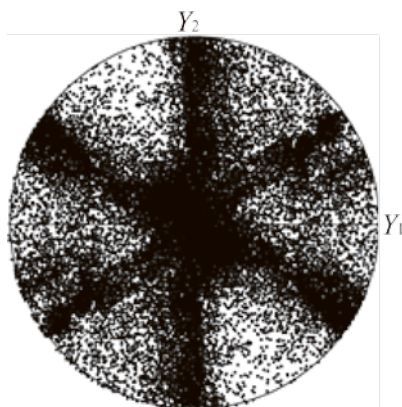


Fig.5 Pole Figure f111g after 1 Path of ECAE Process.

次に1パスのマクロ変形履歴を利用して4パスECAE加工の数値解析を行う。ここでは、各パスにおいて試験片を押し出し方向に対して90度回転させるBルートと180度回転させるCルートと比較する。数値解析結果としてFig. 6にマクロ相当応力-相当塑性ひずみ関係を示す。BルートおよびCルートで異なる履歴を経ているが4パスではほぼ同じ相当塑性ひずみが付与されていることが確認できる。このアプローチでは塑性加工プロセスと材料組織の状態の双方を関連付けて議論が可能である。

4.2 Pearlite コロニーの構成モデリング

材料組織の有限要素解析は微視スケールの構成モデルの開発にも利用できる。Pearlite組織はCementite相が層状に析出したPearliteコロニーの集合体である。そこで、Watanabeら⁸⁾はPearliteコロニーを想定した層状組織の材料応答を有限要素解析で評価し、層方向依存性を表現した異方塑性構成モデルを開発した。

Pearliteコロニーの有限要素モデルにおいてCementite相とFerrite相は並行と考え、共析組織であることから体積比をCementite相 : Ferrite相 = 0.116 : 0.884とした。Cementite

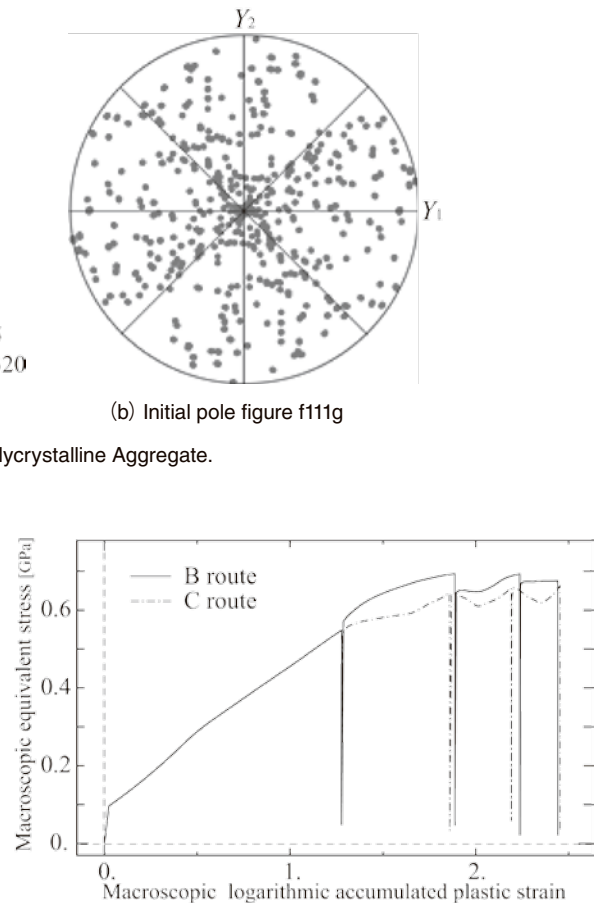


Fig.6 Macroscopic Stress-Strain Relationships after 4 Paths of ECAE Processes.

相は準安定相であることから結晶体の弾性定数は第一原理計算によって評価した。方位関係や他の材料定数も文献などから引用し、完全ではないが可能な限り知り得る情報を集約して材料組織のモデル化を行い、マクロ力学応答を評価した。構成モデルは実験の応力-ひずみ関係にフィッティングするための未知材料定数を含みつつも、一部はPearlite 層状組織の有限要素解析結果より引き継ぐことができる。

開発した構成モデルを用いて、Pearlite 組織の変形解析を行った。Pearlite 組織の有限要素モデルはFig. 4 の有限要素モデルにおいて切頂二十面体を8分割して1つのPearlite コロニーとし、領域を432分割した。そして、各Pearlite コロニーの方位は乱数で与えた。数値解析結果としてマクロ応力-ひずみ関係と材料組織のMises 応力分布をFig. 7 に示す。実験に整合した応力-ひずみ関係とともにPearlite 組織中の不均質な応力状態を再現している。

4.3 Dual-Phase 鋼の組織形態最適化

強度の異なる相・組織で構成される複合組織鋼では、各相の力学特性および体積分率だけでなく、幾何学的な形態も強化機構として機能する⁹⁾。ここでは、数値最適化手法と材料組織の有限要素解析手法を組み合わせることで二相鉄鋼組織形態を最適化する数値解析例を紹介する。

高強度な材料組織形態の探索を念頭に、あるマクロ変位勾配 $\bar{H}_0$ を付与した数値解析をいくつかのひずみモードに対して実施し、数値解析結果として得られたマクロ外力仕事の和を最大化する最適化問題を考える。ひずみテンソルは一般に6種類の独立成分を持つので、正規化された6種類のひずみモードに対するマクロ外力仕事の和を最大化する数値解析を実施すれば、等方な材料組織が得られると期待される。二相の体積分率に関する拘束条件と共にLagrange 未定乗数法を用いて最適化問題を解く。数値解析終了時に二相は完全に分

離するが、最適化計算中は混合状態を扱わなければならないため、Voigt 型混合則を用いる。

Martensite 相の体積分率が50 パーセントのDual-Phase 鋼の材料組織を解析対象として数値解析例を示す。各相の力学特性は単相の応力-ひずみ関係で表現できると考え、Ferrite相とMartensite 相の塑性硬化挙動をSwift 硬化則で定義し、材料定数は実験データより与える。また、設計領域として $17 \times 17 \times 17$ の立方体で構成された領域を考える。

単軸引張変形モードを付与した場合の最適化材料組織（設計領域中のMartensite 相のみを表示）とこの材料組織に対して6種類のひずみモードを付与した際のマクロ応力-ひずみ関係をFig. 8 に示す。この場合、最適化計算時に付与した引張変形の軸方向（Fig. 8 中のX 軸方向）に強度が発現するような異方的な材料組織が得られる。また、マクロ応答からも対応した異方性が確認できる。

Fig. 8 (b) に示した6種類のひずみモードを想定して最適化計算を行った結果をFig. 9に示す。少々複雑な材料組織形態となっており、解釈は難しいが、マクロ応答から等方で高強度な材料組織が得られたことを確認できる。

周期材料組織の非線形有限要素解析手法と数値最適化手法を組み合わせることで、マクロ強度特性を最大化する材料組織形態を探索する数値解析アルゴリズムを開発した。本アプローチは充填された二相材料組織を想定しているが基本的に考え方はトポロジー最適化手法¹⁰⁾と同一である。この種のアプローチは最適化条件の定義次第で、異方性、剛性や硬化特性の制御など様々な用途に応用でき、材料開発の指針を示す新たなツールに発展する可能性を秘めている。

5 おわりに

本稿では、連続体力学に基づく数値シミュレーションの材料組織への応用研究例を紹介した。

ミクロ-マクロ有限要素解析手法は巨視的な構造設計と微視的な材料設計を関連付ける高度設計手法のプロトタイプであり、発展性の高い研究テーマである。このアプローチは材料組織の評価・制御を通して製品設計とプロセス設計を統合し、新材料開発のみならず、製品の高性能化へも寄与する。また、その核となる材料組織の有限要素解析は拡張性が高いものの、モデル化および数値解析結果の検証などに、多くの課題が残されており、周辺技術との連携が不可欠である。第一原理計算や分子動力学計算のような原子レベルを対象とした数値シミュレーション側から考えても、そこで評価される現象の素過程とバルク特性を関連付けるスケール連成アプローチとしての産業ニーズは非常に高い。電子顕微鏡やナノインデンテーションによる先進的な計測技術、フェーズ

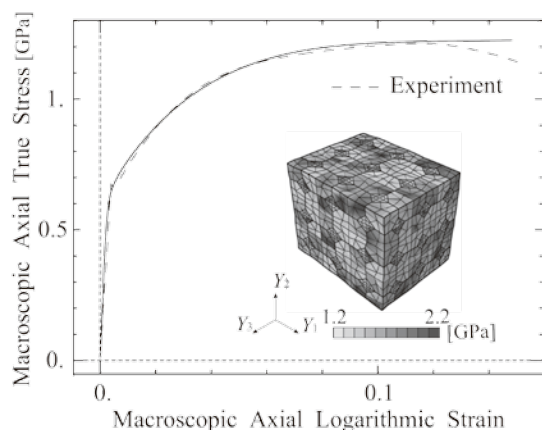


Fig.7 Finite Element Analysis of Pearlite Microstructure.

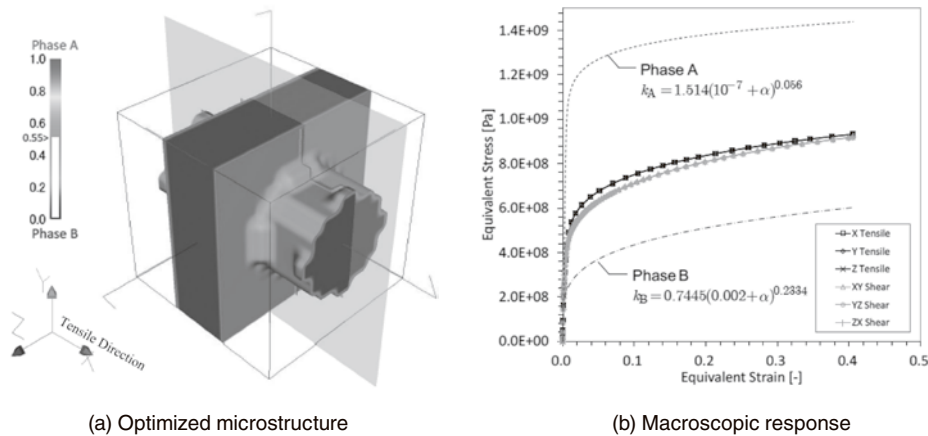


Fig.8 Morphology Optimization for Uniaxial Tension.

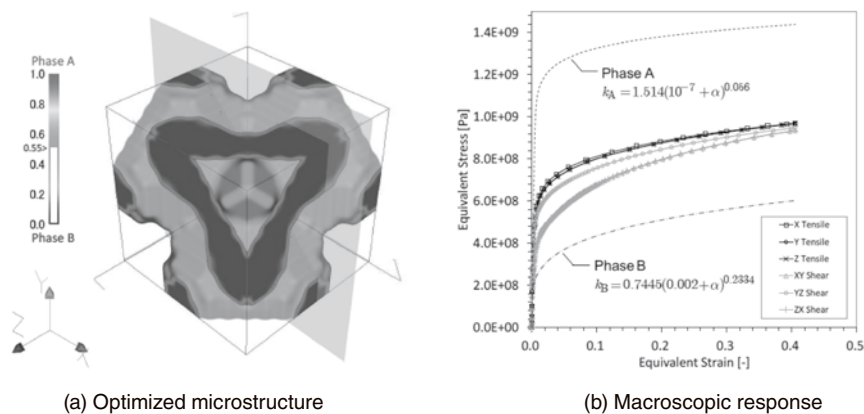


Fig.9 Morphology Optimization for 6 Independent Strain Modes.

フィールド法による熱力学データベースに基づく材料組織の形成シミュレーションなども含めて、総合的に情報を相互利用して、有用な情報へ変換する枠組みの整備がこの分野における大きな課題であり、今後の研究発展を期待する。

謝辞：本研究の一部は(株)豊田中央研究所、成蹊大学教授弓削康平先生との共同研究として実施した。また、本研究の一部は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」および科学研究費補助金25102711, 25820359の支援を受けた。

参考文献

- 1) 寺田賢二郎, 菊池昇: 均質化法入門 (計算力学レクチャーコース), 丸善, (2003)
- 2) 土木学会応用力学委員会計算力学小委員会: いまさら聞けない計算力学の常識, 丸善, (2008)
- 3) 渡邊育夢, 寺田賢二郎: 応用力学論文集, 8 (2005), 277.
- 4) I.Watanabe and K.Terada: International Journal of Mechanical Science, 52 (2010), 343.
- 5) K.Matsui, K.Terada and K.Yuge: JSME International Journal, Series A, 44 (2001), 584.
- 6) 仲村岳, 弓削康平: 日本計算工学会論文集, 20100011 (2010)
- 7) K.Terada, I.Watanabe, M.Akiyama, S.Kimura and K.Kuroda: Advanced Computational Materials Modeling: From Classical to Multi-Scale Techniques, Vaz and deSouza Neto eds., Wiley & Sons Inc., Ch.10, (2010), 379.
- 8) I.Watanabe, D.Setoyama, N.Nagasako, N.Iwata and K.Nakanishi: International Journal of Numerical Methods in Engineering, 89 (2012), 829.
- 9) 渡邊育夢, 上路林太郎: 鉄と鋼, 98 (2012), 283.
- 10) 西脇眞二, 泉井一浩, 菊池昇: トポロジー最適化 (計算力学レクチャーコース), 丸善, (2013)

(2014年7月9日受付)