

特集

信頼性向上のためのシミュレーション技術①

結晶塑性解析による数値材料試験

Numerical material test using crystal plasticity analysis

浜 孝之 京都大学大学院エネルギー科学研究科

Takayuki Hama Graduate school of Energy Science, Kyoto University



要旨

本稿では、近年注目されている結晶塑性解析についてその考え方と解析事例を概説する。結晶塑性解析は、多結晶金属材料の塑性変形を素過程であるすべり変形からモデル化することで、巨視的な変形特性や集合組織の発展を予測する数値解析技術である。本解析技術が確立されれば、これまで実験的にしか取得する術のなかった金属材料の変形特性を計算機上で数値的に予測可能となり、材料試験を補強するツールあるいは計算機による新しい材料試験法としての利用が期待される。またさらには、次世代の材料構成式として塑性加工の有限要素法解析での活用も可能である。本稿では、結晶塑性解析技術の基本的な考え方を概説するとともに、筆者らによるマグネシウム合金や純チタンを対象とした変形特性予測事例の紹介を通して、本解析技術の現状と今後の可能性を展望する。

1. はじめに

昨今の地球環境問題から、輸送機器の軽量化は喫緊の課題である。例えば自動車のプレス加工部品では、従来から用いられてきた軟鋼板に替わって高張力鋼板やアルミニウム (Al) 合金板、また一部ではマグネシウム (Mg) 合金板など、車体の軽量化を促進する高強度材や低密度材の利用が活発化している。一方、これらの軽量化材料は、従来の軟鋼板とは成形性が大きく異なるため、これまで培われてきた成形ノウハウだけでは対応できない多くの技術的課題が生じている。そのため工程設計に際しては、有限要素法 (Finite-element method, FEM) を用いた成形性の事前予測が不可欠になっている。

高精度な FEM 解析を行うためには、被加工材の変形特性を十分に把握した上で、その特性を適切に表現できる材料構成式を解析で用いることが重要である。ここで、二つの大きな問題にしばしば直面する。一つは、解析に先立って膨大な数の材料試験を行う必要がある点である。すなわち、変形特性を体系的に理解するためには単純引張/圧縮、反転負荷、二軸負荷といった種々の材料試験を行うことが求められ、多くの労力と時間、コストが必要となる。

一方で、仮に変形特性が理解できても、新素材の変形特性を表現可能な構成式の開発が追いついていないため、結果として新素材を想定した FEM 解析が事実上困難な場合も多い。これが、二つ目の問題点である。例えば六方晶金属である Mg 合金やチタン (Ti) は、極めて異方性の強い変形挙動を示す。しかしながら、これら変形異方性を適切に表現しうる実用的な材料構成式が未だ開発されていないため、高精度な FEM 解析の実行が難しいのが現状である。

以上の問題に対する有効な解決策として最近注目されているのが、結晶塑性解析である。これは、結晶粒レベルの微視的変

形を巧みにモデル化することで多結晶金属材料の変形特性を予測する方法である。この方法によれば、これまで実験的にしか得る術のなかった変形特性を計算機上で予測可能である。また、結晶塑性モデルを材料構成式として用いて FEM 解析を行えば、変形特性からプレス成形性までをシームレスに予測できる可能性がある。本稿では、結晶塑性モデルの基本的な考え方とその適用事例の紹介を通して、本解析技術の現状と今後の可能性について展望する。

2. 結晶塑性解析

構造部材として用いられる金属材料は、通常、面心立方格子、体心立方格子、六方最密格子などの構造を持つ結晶粒の集合体として構成される。結晶構造によって、転位が活動できる面 (すべり面) と方向 (すべり方向) が決まっている。塑性変形は転位の運動で生じることを考えると、単結晶における塑性変形は、各すべり系で生じるすべり変形の重ね合わせで表現できると仮定できる。すなわち、すべり系 α におけるすべり面の単位法線ベクトルを m^α 、すべり方向を表す単位ベクトルを s^α とすると、単結晶で生じる塑性変形に関する速度勾配テンソル L_p は $L_p = \sum_{\alpha=1}^N \dot{\gamma}^\alpha (s^\alpha \otimes m^\alpha)$ という関係で与えられる。ここで N はすべり系の総数、 $\dot{\gamma}^\alpha$ はすべり速度である。この関係を弾性構成式に導入して整理することで、単結晶に対する弾結晶塑性構成式が得られる。以上が結晶塑性解析の基本的な考え方であり、1980 年代初頭には既に確立されている¹⁾。その後脈々と続けられてきた解析技術の研究と近年の計算機能力の発展が相まって、本手法は近年になって再び脚光を浴びている。

具体的な活用法としては、例えば、次のように単結晶構成式と FEM 解析を組み合わせれば、多結晶金属材料の塑性変形挙動を予測できる。各有限要素が一結晶粒に相当すると仮定して、

実験により測定された結晶方位を各要素に予め割り当てる。その上で一軸引張のFEM解析を行えば、現実と同じ初期結晶方位分布を持つ多結晶体の応力-ひずみ曲線を予測できる。従来の現象論的な材料構成式は、予め実験的に得られた変形特性をフィッティングすることが主目的である²⁾のに対して、結晶塑性解析では、単結晶構成式が適切に構築されていれば、多結晶金属材料の変形特性そのものを予測できる^{3,6)}ことが大きな特長である。つまり、金属材料の変形を結晶粒レベルの素過程からモデル化することで、数値的に材料試験を行うことができる可能性を秘めている。

3. 解析事例

筆者らはこれまで、Mg合金や純Tiといった六方晶金属を対象として、結晶塑性解析技術の開発を進めてきた。六方晶金属では、すべり系の種類によってその活動度が著しく異なることに加えて、変形に極性を持つ双晶系の活動が活発である。このような結晶レベルでの強い変形異方性に起因して、多結晶材の巨視的な変形特性においても顕著な異方性が発現する。ここでは、筆者らによる六方晶金属における変形異方性の予測事例を紹介する。

図1にMg合金板に対して圧延方向に引張、圧縮、および圧縮から引張への反転負荷を与えた場合の応力-ひずみ線図を示す³⁾。初期の結晶方位分布(極点図)を図中に併せて示す。なお、面内圧縮試験では、圧縮中の座屈発生を抑制するためにクシ菌型治具が用いられている。圧縮時の降伏応力は引張時と比べて低く、またその後の加工硬化挙動も明らかに引張時とは異なる。一方、圧縮から引張へ反転負荷するとS字状の曲線が発現し、強いひずみ経路依存性も観察される。従来の現象論に基づく構成式を用いてこのような加工硬化挙動を表現するのは容易ではなく、また表現できたとしても極めて複雑な数式モデルとなることが避けられない²⁾。一方結晶塑性モデルを用いると、上述の結晶レベルの特性を適切に表現しさえすれば、特別の仮定を設けることなく図1に示すように複雑な加工硬化挙動を高精度に予測することができる。繰り返しになるが、これらの変形挙動はモデル構築に先立って予め想定されたのではなく、結晶レベルのすべり変形/双晶変形をモデル化することで自然に予測できている点を強調したい。このことは、たとえ変形特性が明らかでない素材であっても、結晶塑性解析を用いれば、その変形特性を自

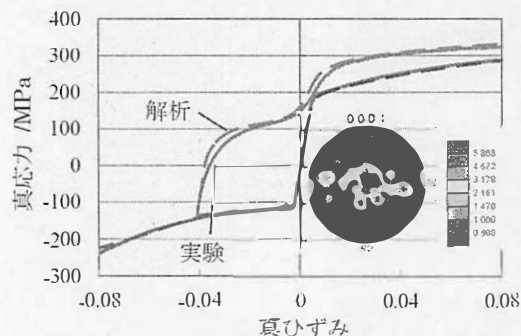


図1 引張、圧縮、および圧縮-引張の反転負荷を受けるMg合金圧延板の応力-ひずみ線図³⁾。図中に初期の極点図を示す。

然に予測できる可能性を示している。

プレス成形性の高精度な予測には、ひずみ経路が変化した場合の変形特性を的確に再現できることも重要である。図2に、図1と同じMg合金板に対して圧延方向に6%の圧縮変形を与えた後に種々の方向へ引張変形を与えた場合の、引張時の応力-ひずみ線図を示す³⁾。一段階目と二段階目の負荷角度差 θ が大きくなるほどS字形態が弱まり、 $\theta=60^\circ, 90^\circ$ では一般的な上に凸の曲線を呈している。このような強い変形異方性は、結晶塑性解析により良好に予測できている。結晶塑性解析では、塑性変形時の結晶レベルの変形挙動も同時に予測できるのが大きな特長である。一段階目の圧縮変形を与えると、圧延方向に強いピークが形成される(図2(b))。その後引張に反転すると、 $\theta=0^\circ$ の場合(図2(c))は圧延方向のピークが消失してほぼ初期(図1)と同様の方位分布に帰着する。一方 $\theta=90^\circ$ の場合(図2(d))は、一段階目終了時から大きく変化していない。以上の結晶方位発展は、結晶塑性解析により良好に予測できている。詳細は省略するが、解析結果から、引張時の変形異方性は角度差 θ によって双晶活動が異なることに起因することが示唆されている。

プレス成形のスプリングバック予測では、除荷時の挙動を適切にモデル化することも重要である。例えばMg合金では、図3に示すように除荷時に顕著な非線形挙動を示す^{4,5)}。現象に基づく

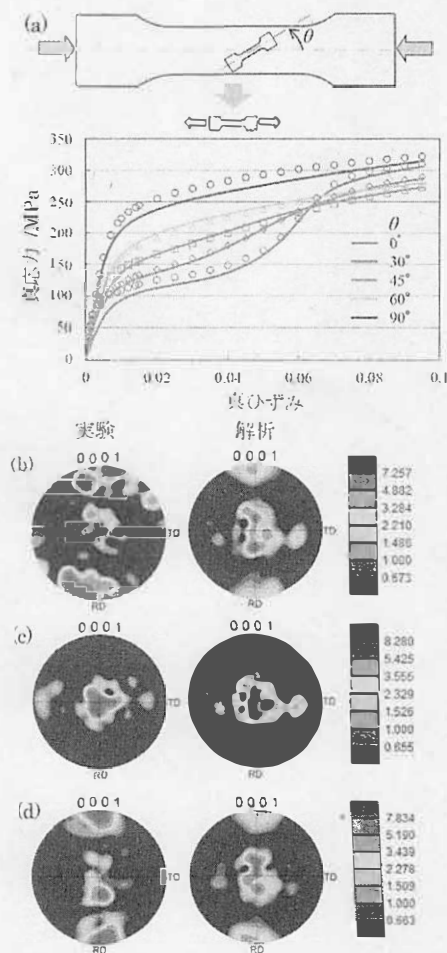


図2 一段回目に圧縮、二段階目に引張変形を受けるMg合金圧延板における二段階目の変形挙動³⁾。(a) 応力-ひずみ線図。実線は解析結果、プロットは実験結果を示す。(b)、(c)、(d)はそれぞれ一段階目終了後、 $\theta=0^\circ$ で二段階目終了後、 $\theta=90^\circ$ で二段階目終了後の極点図。

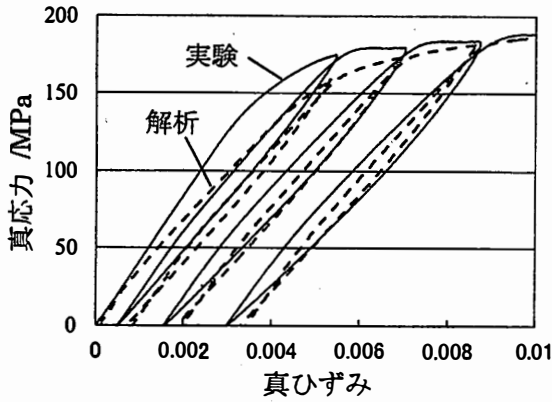


図3 繰り返し引張-除荷を受けるMg合金圧延板の応力-ひずみ線図⁴⁾。

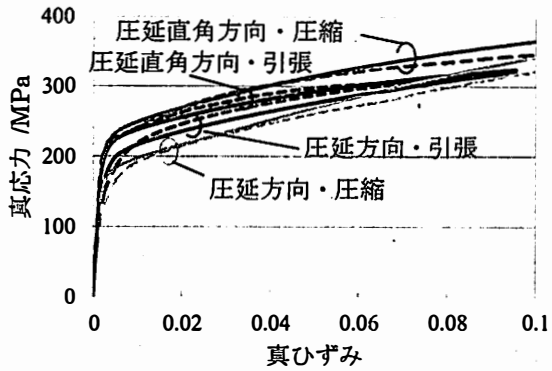


図4 純Ti圧延板における応力-ひずみ線図⁶⁾。実線は実験結果、破線は解析結果を示す。

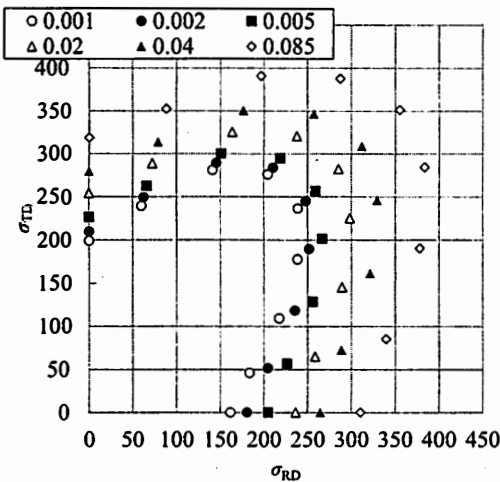


図5 純Ti圧延板における等塑性仕事面の解析結果⁶⁾。凡例中の数字は圧延方向へ一軸引張を与えた時のひずみを示す。

構成式を用いる場合、このような挙動を表現するには除荷時に非線形挙動が生じることを予め仮定する必要がある。一方結晶塑性解析を用いると、自然に除荷時の非線形挙動が予測できている。

続いて、純Ti板における応力-ひずみ線図を図4に示す⁶⁾。加工硬化挙動には強い面内異方性ととも引張-圧縮の非対称性が見られる。これはMg合金板同様に強い底面集合組織を持つことが大きく影響しているが、純Ti板とMg合金板では加

工硬化挙動が大きく異なることが明らかである。これらの挙動は、結晶塑性解析により良好に予測できている。加工硬化の異方性は、図5に示す等塑性仕事面の発展からも明瞭に観察される⁶⁾。初期の等塑性仕事面では、仕事面のピークが等二軸から圧延直角方向側にわずかにずれている。一方、塑性変形の進行に伴って異方性が弱まり、ひずみ8.5%ではほぼ等方的な仕事面に帰着している。この解析結果は実験結果⁷⁾を良好に予測している。

ここで注目すべきは、Mg合金板と純Ti板の解析では同一の解析モデルが使われており、計算で使用する材料パラメータのみを変えることで全く異なる変形特性が表現できている点である。すなわち、六方晶金属の本質的な特性が適切にモデル化できているれば、幅広い六方晶金属に対して適用可能であることを示す。

4. むすび

以上紹介したように、結晶レベルでの変形を適切にモデル化することで、これまでは実験的にしか得られなかった変形特性が計算機上で数値的に予測可能になりつつある。実際のところ、計算コストが大きい問題や結晶塑性解析で用いる材料パラメータ同定の問題、また適用可能な事例に限られている点など、結晶塑性解析の実用的な利用には解決すべき多くの技術的課題があるのが現状である。しかしながら、研究のさらなる発展により近い将来、実機による材料試験を補強するあるいは代替する新しい材料試験法として利用されることが期待される。なお紙面の都合上、結晶塑性解析を用いた塑性加工解析事例については割愛した。また同様の理由から、参考文献の引用は最低限にとどめている点をご容赦いただきたい。

参考文献

- 1) D. Peirce, R. J. Asaro and A. Needleman: Material rate dependence and localized deformation in crystalline solids, *Acta. Metall.*, 31-12 (1983), 1951-1976.
- 2) M. Li, X. Y. Lou, J. H. Kim, and R. H. Wagoner: An efficient constitutive model for room-temperature, low-rate plasticity of annealed Mg AZ31B sheet, *Int. J. Plast.*, 26 (2010), 820-858.
- 3) T. Hama, Y. Tanaka, M. Uratani, and H. Takuda: Deformation behavior upon two-step loading in a magnesium alloy sheet, *Int. J. Plast.*, 82 (2016), 283-304.
- 4) T. Hama and H. Takuda: Crystal-plasticity finite-element analysis of inelastic behavior during unloading in a magnesium alloy sheet, *Int. J. Plast.*, 27 (2011), 1072-1092.
- 5) T. Hama, N. Kitamura, and H. Takuda: Effect of twinning and detwinning on inelastic behavior during unloading in a magnesium alloy sheet, *Mater. Sci. Eng. A*, 583 (2013), 232-241.
- 6) T. Hama, A. Kobuki, and H. Takuda: Crystal-plasticity finite-element analysis of anisotropic deformation behavior in commercially pure titanium Grade 1 sheet, *Int. J. Plast.*, 91 (2017), 77-108.
- 7) M. Ishiki, T. Kuwabara and Y. Hayashida: Measurement and analysis of differential work hardening behavior of pure titanium sheet using spline function, *Int. J. Mater. Form.*, 4 (2011), 193-204.