

レベル集合法を用いた塑性加工中の相変態材料の微視組織予測

広島大学 大学院工学研究科 機械システム工学専攻

助手 岩本 剛

(平成 18 年度奨励研究助成 AF - 2006027)

キーワード：レベル集合法，相変態，微視組織，界面移動，連成解析

1. 研究の目的と背景

近年，レベル集合法は移動界面の形状や位置を予測するための重要な方法になりつつある．この方法では，界面からの符号付距離関数の性質を持つレベル集合関数の時間発展を追跡し，陰的にその関数が 0 の値を示す場所を界面とする．未知関数であるレベル集合関数の場の支配方程式は，移流方程式のような簡単な Hamilton-Jacobi 型の方程式で表される．Osher と Sethian⁽¹⁾ によって端緒を付けられたこの有力な方法は，流体力学から画像処理，ロボティクスに至るまで様々な分野に応用されている．

材料力学や固体力学の分野においては，例えば Ni 系形状記憶合金 (SMA) において応力誘起マルテンサイト変態によりマルテンサイト相が帯状となって生成し，引張試験中の試験片を伝播することが報告されている⁽²⁾．この帯の伝播過程は，その応力-ひずみ曲線において特徴的な平坦部を形成する原因となると考えられているが，詳細については未解明である．このように，圧延等の塑性加工等材料の変形時に発生する相変態に伴って，その微視組織が変化し，応力-ひずみ関係等の巨視的な力学特性に影響を及ぼす例は多数ある．そのため，変形中の微視組織予測が重要視されている．また，複雑な材料非線形性と温度場等の時間変化を伴う場合，組織形成に伴う非線形性も含めて考慮する必要があり，組織形成を捉えるという問題は複雑化する．幸にも，これらの相変態に関連する問題の多くは，組織形成に伴う相界面移動として捉えることが可能と考えられ，まさしくレベル集合法が有用であるものと考えられる．

しかしながら，材料力学や固体力学の分野では，レベル集合法の枠組みで界面移動速度を記述するための応力，濃度場に依存した駆動力の定式化について議論が少なく，適用可能性の検討も十分ではないため，この方法が広く用いられているとは言い難い．加えて，連成問題を対象とする場合，不連続界面理論⁽³⁾で定式化されている拡散方程式や運動方程式がよく用いられおり，レベル集合関数が陽に表現されるような解析手法の提案は極僅かである．また，従来のレベル集合法は，再初期化過程という符号付距離関数の性質を回復させるための繰り返し計算を各時間ステップ後に要する．そのため，計算量は膨大となり，再初期化過程の存在は，レベル集合法の大きな欠点となっている．この欠点を克服するため，

再初期化に対して様々な形式の微分方程式が提案されており^{(4),(5)}，得られた界面位置の情報を用いて距離関数を再計算する方法⁽⁶⁾もある．一方で，再初期化自体を除去するための新しい方法⁽⁷⁾も提案されているが，現状では有力な方法とは言い難い．

レベル集合法を材料力学および固体力学の分野に導入するため，本研究では，熱力学の第 2 法則を記述する散逸関数から熱力学的駆動力を導出し，界面移動速度を関係付ける異方性構成関係式を定義する．また，連成させる濃度場の拡散方程式は，Adalsteinsson と Sethian⁽⁸⁾の考えを発展させ，局所的に界面に対して直交方向に Fick の第 2 法則を満足するものと仮定し，有効拡散濃度を全濃度と不連続濃度の差により表現することで，レベル集合関数が持つ情報をより陽に表現し，定式化を行う．さらに，レベル集合関数を陽に表現した自由エネルギーを超弾性構成式に，導入することによって構成式的具体形を求める．これらを FEM に導入し，拡散場 - 応力 - レベル集合関数の場の連成解析により，レベル集合法に基づいた，応力ならびに拡散場誘起相変態の数値シミュレーションを行う．まず Ni 基耐熱合金に発生する拡散律則相変態の数値シミュレーションを行い，界面移動の応力依存性について検討する．続いて，レベル集合法によりマルテンサイト帯伝播過程の数値シミュレーションを行い，形状記憶合金に特徴的な応力 - ひずみ曲線の平坦部形成と界面移動との関係を検討する．最後に，ペナルティ法による制約条件付き変分原理に基づき，再初期化を必要としない方法を提案する．この方法では符号付距離関数の性質を制約条件として取り扱い，レベル集合法の支配方程式に，ペナルティ法を併用した重み付き残差法⁽⁹⁾を導入する．その後，有限要素により離散化をし，有限要素方程式を得る．この方法の妥当性をチェックするため，簡単な例題計算を行い，結果を検討する．

2. 解析理論

2.1 レベル集合法

レベル集合法において未知数となるレベル集合関数は，界面からの符号付距離関数の性質を持っている．また，次式の簡単な Hamilton-Jacobi 型の方程式の初期値問題を解くことによって，レベル集合関数の時間発展を追跡する．

$$\phi_t - V(\mathbf{n}, f)|\nabla\phi| = 0, \quad (1)$$

$$\phi(x_i, 0) = \pm \min \text{dist}(x_i - x_{r_i}) \quad (2)$$

ここで、 $(\cdot)_{,s}$ は (\cdot) の s に関する偏微分を表し、 t は時間、 V は界面移動速度、 f は散逸関数から導出される界面移動の駆動力、 \mathbf{n} は界面に立てた外向き法線ベクトル、 x_{Γ_i} は $\phi = 0$ により定義される界面 Γ の位置を表す。本研究では界面により囲まれる領域において ϕ が + の符号を持つものとする。

一般に、式 (1) により求解すると、 ϕ が次式に示す符号付距離関数の性質を失うことが知られている^{(1),(4)}。

$$|\nabla\phi| = 1 \quad (3)$$

そのため、再初期化と呼ばれる計算過程が必要となる。ここでは Sussman ら⁽⁴⁾ によって提案された以下の微分方程式を解くことによって再初期化を行う。

$$\phi_{,\tau}^* + \text{Sgn}(\phi_0^*) (|\nabla\phi^*| - 1) = 0, \quad (4)$$

$$\phi^*(x_i, 0) = \phi_0^* = \phi(x_i, t) \quad (5)$$

ここで、 τ は仮想時間、 $\text{Sgn}(x)$ は符号関数を表す。しかしながら、上式によって再初期化処理を行うと、界面が移動することが知られており⁽⁵⁾、再初期化過程の前後で界面によって囲まれた体積の保存過程が必要となる。Chang ら⁽⁵⁾ によればその過程は以下の微分方程式を解くことによって実現される。

$$\hat{\phi}_{,\tau} + \{\Omega_i(\phi) - \Omega(\phi^*)\} (\kappa - P) |\nabla\hat{\phi}| = 0, \quad (6)$$

$$\hat{\phi}(x_i, 0) = \phi^*(x_i, \tau) \quad (7)$$

ここで、 τ は仮想時間、 κ は平均曲率、 $\Omega_i(\phi)$ 、 $\Omega(\phi^*)$ はそれぞれ式 (1) および (3) を解いた直後における界面で囲まれた領域の体積、 P は正の定数である。

2.2 界面移動速度

界面移動速度を導出するため、以下の熱力学第 2 法則に基づく散逸不等式⁽¹⁰⁾ を用いる。

$$D = P_{ext}^{mech} + P_{ext}^{chem} - (\dot{\Psi} + \dot{K} + P^{int} + TS) \geq 0 \quad (8)$$

ここで、 D は散逸関数、 P_{ext}^{mech} 、 P_{ext}^{chem} は外部から供給される力学的および化学的仕事率、 Ψ は Helmholtz の自由エネルギー、 K は運動エネルギー、 P^{int} は界面エネルギーに相当する仕事率、 S はエントロピーを表す。ここでは、2 相材料を対象とし、自由エネルギー関数として、次式の ϕ を陽表現した 2 重井戸ポテンシャル形式を用いる。

$$\psi = \psi^0 + H(\phi)\Delta\psi = \psi^0 + H(\phi)(\psi^1 - \psi^0) \quad (9)$$

$$\psi^k = \frac{1}{2\rho_0^k} S_{ij}^k E_{ij}^{e^k} + \frac{1}{2\rho_0^k} \mu^k C^k - \frac{1}{2} T^k s^k$$

ここで、 ψ は比 Helmholtz の自由エネルギー、 ρ_0 は変形前の密度、 μ は化学ポテンシャル、 s は比エントロピー、 T は絶対温度、 C は濃度、 S_{ij} を中間配置における第 2 Piola - Kirchhoff 応力、 E_{ij}^e は Green ひずみの弾性成分を表す。また、 k は相変態の前後の相に付した番号であり、2 相材料を対象とする場合、それぞれ 1 と 0 の 2 値

を取る。式 (8) に (9) を代入し、第 1 法則を用いて整理すると次式の界面駆動力を得る。

$$f = -\Delta\psi - \sigma\kappa \quad (10)$$

ここで、 σ は界面張力、 κ は曲率を表す。また、界面移動の異方性を考慮するため、次式のような V と f の関係式を用いる。

$$V(\mathbf{n}, f) = M(\mathbf{n}) \langle f - f_R \rangle \quad (11)$$

ここで M は界面易動度を表し、界面移動の異方性を考慮するため \mathbf{n} に依存した形式をとる⁽¹¹⁾。 f_R は駆動力の閾値で、核生成に関連している。 $\langle \rangle$ は Macauley の括弧を表す。

2.3 拡散方程式の定式化

まず、材料中に相変化が発生すると、濃度場に不連続量が存在するため、有効拡散濃度 C^e を定義し、次式により不連続量との関係を表す。

$$C^e = C - H(\phi)\Delta C \quad (12)$$

ここで C は全濃度、 ΔC は相間の濃度不連続量、 $H(x)$ は Heaviside 関数を表す。また、界面に対して直交方向に自然座標 n を設定し、以下の Fick の第 2 法則が成立すると仮定する。

$$C_{,n}^e = [D_d(\phi)C_{,n}^e]_{,n} \quad (13)$$

ここで、 $D_d(\phi)$ は拡散係数を表し、相間で異なる値を取るものと考えられるため、 ϕ の陽関数として表現する。これらの式を総合すると、以下のような保存形移流拡散方程式が導出できる。

$$C_{,t} = (\bar{D}_{ij}C_{,i} - Vn_jC)_{,j} - D_d(\phi)C_{,i}n_i\kappa + b \quad (14)$$

$$b = \{L\delta(\phi)V - [L^2 \{D_d(\phi)\delta'(\phi) + D_{d,\phi}\delta(\phi)\} + \bar{D}_{ij}\delta(\phi)\phi_{,ij}]\} \Delta C, \bar{D}_{ij} = D_d(\phi)n_in_j$$

ここで、 $\delta(x)$ は Dirac のデルタ関数、 κ は界面の平均曲率である。

2.4 構成式

相変態が発生すると格子の不整合による付加的な変形が生じるため、変形勾配を次式のように表す。

$$F_{ij}^1 = F_{ik}^e F_{kj}^c, \mathbf{F}^c = \begin{bmatrix} \eta & 0 & 0 \\ 0 & \eta & 0 \\ 0 & 0 & \eta \end{bmatrix} \quad (15)$$

また、マルテンサイト変態が発生する場合は膨張成分のみを考慮して変形勾配を次式のように表す。

$$\mathbf{F}^c = \begin{bmatrix} \eta & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (16)$$

上述の界面駆動力 f を定式化する際、通常の超弾性体構成式が併せて導出できる。

$$S_{ij} = \rho_0 \frac{\partial \psi}{\partial E_{ij}^e} \quad (17)$$

S_{ij} と E_{ij}^e 間に Hooke の法則が成立すると仮定し、以上を総合すると構成式の具体形が下式のように記述できる。

$$S_{ij} = [1 - H(\phi)] \frac{\rho_0}{\rho_1} D_{ijkl}^e E_{ij}^e + H(\phi) \frac{\rho_0}{\rho_1} D_{ijkl}^1 E_{ij}^1 \quad (18)$$

2.5 変分原理による弱形式表示

上記の再初期化法は一例であり、他に様々な方法が提案されているが、未だ有力な方法は確立されていない。さらに、式(4)のような微分方程式を基礎とした方法を用いると、仮想時間を用いて値が収束するまで繰り返し計算を行う必要があり、計算コストが膨大化する。特に、体積保存過程を要する場合には更なる計算コストが問題となる。そこで、この再初期化過程を除去するため、有限要素方程式を導出する際の変分原理式を考える。一般に式(1)を解く際、数値不安定を抑えるため、SUPG法⁽¹²⁾等の風上法を用いる必要があるが、以下では説明の簡単化のため省略する。まず、式(3)を式(1)の制約条件として取り扱い、ペナルティ法に基づく重み付き残差法⁽⁹⁾に導入すると以下の式を得る。

$$\int_{\Omega} \{ \phi_{,i} - V(n, f) |\nabla \phi| \} \delta \phi d\Omega + \delta \left[\int_{\Omega} \frac{\bar{\lambda}}{2} (|\nabla \phi| - 1)^2 d\Omega \right] = 0 \quad (19)$$

ここで、 Ω は考慮する物体の体積、 δ は変分記号、 $\bar{\lambda}$ はペナルティ数と呼ばれる大きな正の定数である。有限要素による離散化の後、次式のような、ペナルティ法を基礎とした有限要素方程式を得る。

$$C \frac{\partial \varphi}{\partial t} + f + f_p = 0 \quad (20)$$

$$C = \int_{\Omega} N^T N d\Omega, \quad f = - \int_{\Omega} N^T V(n, f) |\nabla \phi| d\Omega,$$

$$f_p = \bar{\lambda} \int_{\Omega} \left(1 - \frac{1}{|\nabla \phi|} \right) B^T B \varphi d\Omega,$$

ここで、 N は形状関数、 φ はレベル集合関数の節点値、 B は N の空間微分を表す。式(20)は未知数 φ に対して非線形であるため、Newton-Raphson法を用いて解析を行い、後退オイラー法による陰的時間積分を採用する。

3. 解析方法

上記3種の場合、すなわち、界面移動を表すレベル集合関数、濃度、応力場に対して連成解析を行う。式(1)はSUPG法を基礎とした安定化有限要素法⁽¹²⁾に導入し、応力場に対しては、式(17)を仮想仕事の原理式に導入し、有限要素定式化を行う。一方、再初期化過程の検討については式(20)にSUPG法を適用した形式の有限要素方程式を用いる。時間積分は後退Euler法による陰解法、非線形解法としてNewton-Raphson法を用いる。

4. 解析結果及び考察

4.1 Ni基耐熱長合金における拡散相変態

解析対象はNi基耐熱合金とし、式中のパラメータは文献(13)に掲載されている値を用いた。解析モデルは0.16 [mm] 四方の矩形領域を対象とし、左境界から文献

(13)と同様な時間依存形のAl濃度流速を与え、上端面に公称ひずみが最大で20%になるよう変位を与えた。

図1は界面位置の時刻暦を応力が作用する場合と作用しない場合について表している。ここで、 η は式(15)中の相変化による付加的な変形量を表している。この図に示すように、放物線形状の曲線が、応力の作用によって直線にその形状を変化させ、劇的に界面移動量が増加していることがわかる。また、 η が増加するとともに若干ではあるが界面移動量が減少している。

図2は応力が作用する場合と作用しない場合における500 [hrs] 経過後のAl濃度形状を表す。この図のように、濃度分布形状には大きな差は認められないが、界面と考えられる濃度が急激に上昇する部分の位置が応力の作用によって大きくなっていることがわかる。

図3は公称応力 - 公称ひずみ関係を、 η をパラメータに示す。この図のように、界面が移動することによって、応力 - ひずみ関係に強い非線形性が表れていることがわかる。また、 η の増加によって、公称応力が小さ

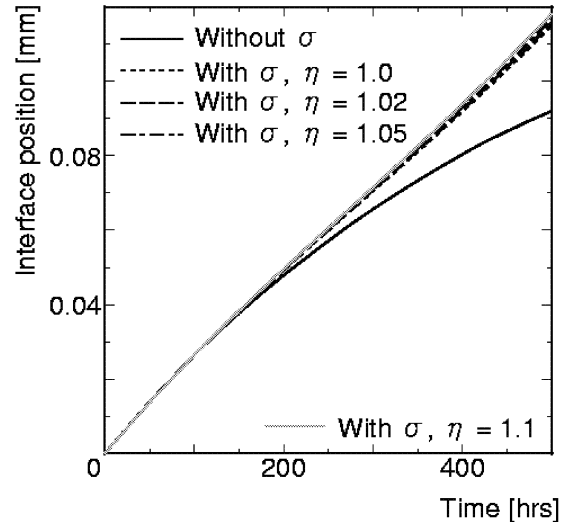


図1 レベル集合関数から計算した界面位置の時間変化

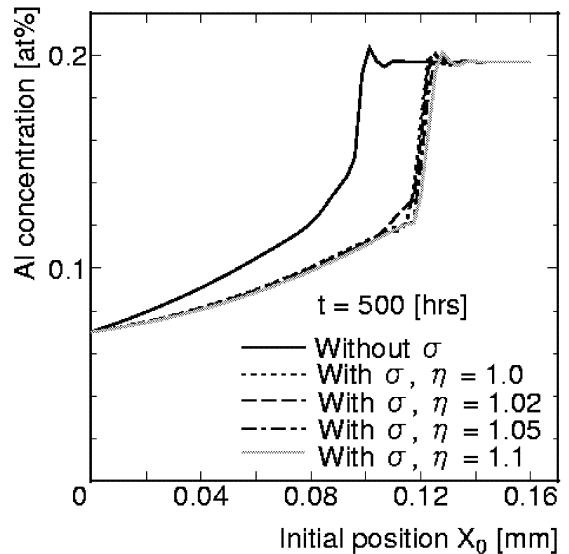


図2 $t = 500$ [hrs] における Al 濃度の分布形状

くなり、 η による応力の緩和現象が現れている。

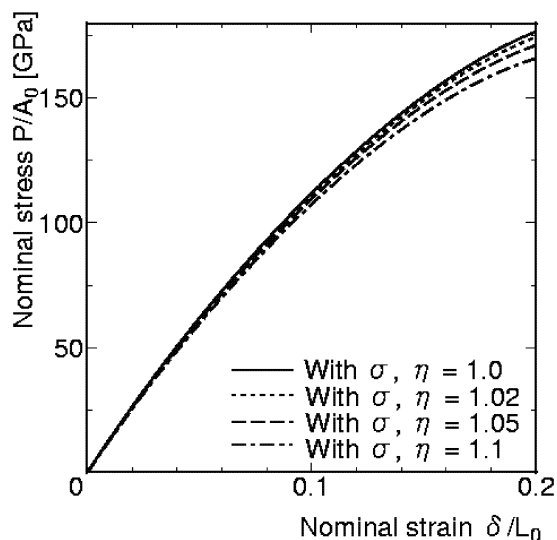
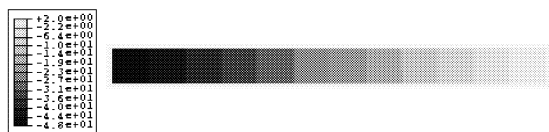
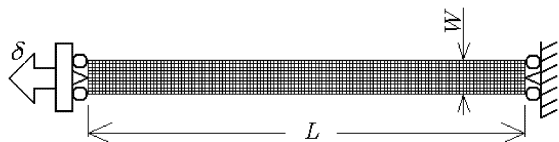


図3 様々な η における変形がある場合と無い場合の公称応力 - 公称ひずみ関係

以上を総合すると、外部から供給される力学的エネルギーが界面速度を増加させ、界面位置が大きくなり、界面移動によって応力 - ひずみ関係に強い非線形性が現れる。相変化後の付加的な変形量が大きくなると、界面速度は減少し、応力が小さくなる。

4.2 SMA におけるマルテンサイト帯の応力誘起界面移動

解析対象は文献(2)の実験とし、式中のパラメータは同文献の値を用いた。図4(a)は用いた解析モデルを表す。形状は文献(2)の実験に用いた試験片と同様のものである。ただし、平面応力を仮定し、用いた要素は8節点2次要素である。図4(b)に示すようなレベル集合関数の初期条件を、公称ひずみ速度 $\dot{\delta}/L$ が $5.0 \times 10^{-5} [s^{-1}]$ となるよう、端面の変位 δ を与えた。式(11)により界面移動速度が決定されるが、ここでは、3種の一定速度、 $V = 0.0245, 0.0508, 0.0762 [mm/s]$ を与えた。



(b)

図4 (a) 計算モデルならびに (b) レベル集合関数の初期分布

図5に公称応力 - 公称ひずみ曲線を示す。この図のように、応力 - ひずみ曲線は界面速度に大きく依存することがわかる。界面速度と移動速度が同様である場合に、形状記憶合金に特徴的な応力 - ひずみ曲線におけ

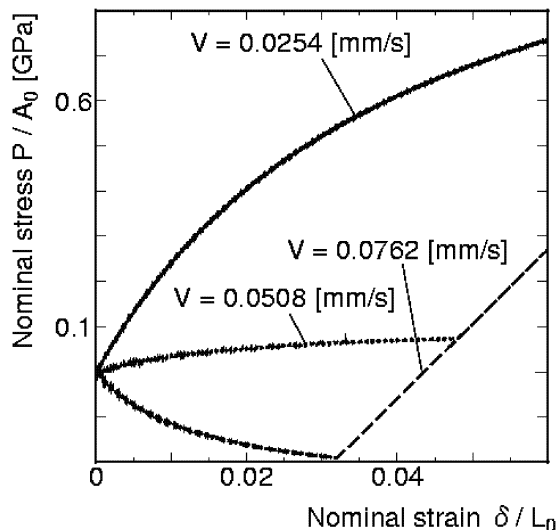
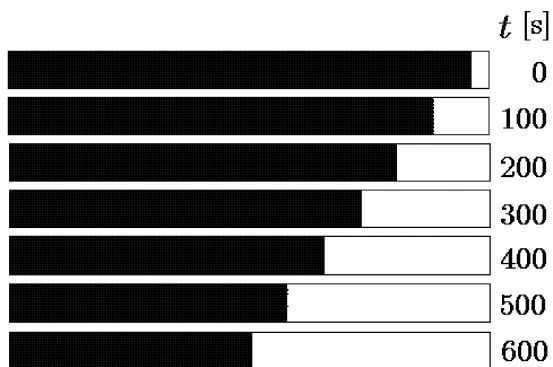
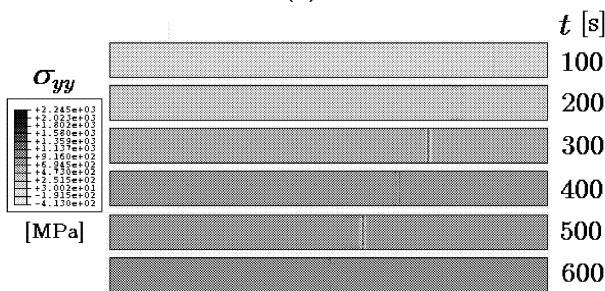


図5 様々な界面速度における公称応力 - 公称ひずみ関係の平坦部が形成されている。また、応力 - ひずみ曲線に不規則な振動が見られる。これは界面移動によって発生する、式(16)によって表される変態による付加的な変形がもたらすものと考えられる。

図6(a)に、界面速度が $V = 0.0254 [mm/s]$ の場合の相の分布、(b)に Cauchy 応力の軸方向成分の分布を示す。図(a)中、黒はオーステナイト、白はマルテンサイト相を表す。この図から、与えた一定速度に従って界面は右から左へ様子が伺える。一方、変形初期段階において、応力は界面付近で高い値を示しているが、界面の移



(a)



(b)

図6 (a) 相分布および (b) Cauchy 応力の軸方向成分 σ_{yy} 分布の時間変化

動に伴って、応力が高い領域は消滅し、再度現れ、また消滅している。

4.3 変分原理に基づく再初期化法の除去

解析対象は一辺が 10 [mm] の正方形領域とし、8 節点 2 次要素を用いて等間隔に 60×60 分割し、解析モデルとした。界面の初期形状は、半径 4 [mm] の円形、長軸径 4 および短軸径 2 [mm] の楕円形であるとし、対称性により 1/4 領域を考慮した。この界面が 2 [mm/s] の一定速度で運動する場合を想定し解析を行った。

図 7 に円形界面を初期条件とした場合の、2 [s] 経過後のレベル集合関数の分布を示す。図 (a) は再初期化過程を、図 (b) は本研究で提案した方法を用いた場合である。この図に示すように、両者とも同様の結果が得られており、本手法が妥当であることがわかる。また、本手法の場合、再初期化過程を導入した場合に比して実計算時間は約 1/4 に減少した。

図 8 に楕円形界面の場合の本手法により解析した結果



図 7 (a) 再初期化手法ならびに (b) 提案した方法を用いて計算した円形界面の場合のレベル集合関数分布

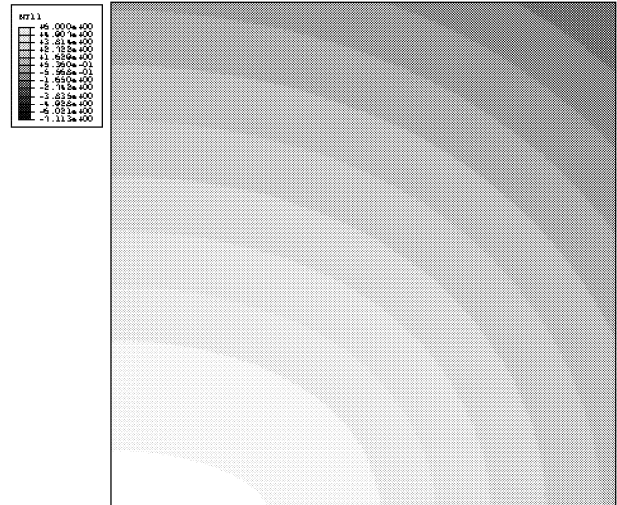


図 8 楕円界面における本手法を用いた場合のレベル集合関数分布

を表す。この場合も同様に良好な解析結果が得られており、図 7 の場合と同様な計算時間であった。これらを総合すると本手法は妥当であると考えられる。

5. おわりに

本研究では、有限ひずみ問題として取り扱い、散逸関数から導出した熱力学的駆動力と界面移動速度を関係付ける異方性構成関係式を定義した。界面に直交方向に Fick の第 2 法則が成立すると仮定し、有効拡散濃度を用いることで、レベル集合関数が持つ情報をより陽に表現した拡散方程式を定式化した。さらに、レベル集合関数を陽に表現した自由エネルギーを超弾性構成式に、導入することによって構成式的具体形を求めた。これらを FEM に導入し、レベル集合法による応力及び拡散駆動界面移動の数値シミュレーションを行い、界面移動の応力依存性について検討した。次に、マルテンサイト帯伝播過程の数値シミュレーションを行い、形状記憶合金に特徴的な応力 - ひずみ曲線の平坦部形成と界面移動との関係を検討した。最後に、ペナルティ法による制約条件付き変分原理に基づき、再初期化を必要としないレベル集合法を提案し、得られた結果の妥当性を示した。

6. 謝辞

本研究は、(財) 天田金属加工機械技術振興財団の補助のもとに行われた。記して謝意を表す。

参考文献

- (1) S. Osher and J. A. Sethian: J. Comput. Phys., 79 (1988), 12.
- (2) J. A. Shaw and S. Kyriakides: J. Mech. Phys. Solids, 43 (1995), 1243.
- (3) Z. Liu, R. Wan, K. Muldrew, S. Sawchuk and J. Rewcastle: Fin. Elem. Anal. Design, 40 (2004), 1641.
- (4) M. Sussman, P. Smereka and S. Osher: J. Comput. Phys., 114 (1994), 146.

- (5) Y. C. Chang, T. Y. Hou, B. Merriman and S. Osher: *J. Comput. Phys.*, **124** (1996), 449.
- (6) 木村正人・野津裕史: *応用数学会誌*, **10** (2000),101.
- (7) H. M. Mourad, J. E. Dolbow and K. Garikipati: *Int. J. Numer. Meth. Engng.*, **64** (2006), 1009.
- (8) D. Adalsteinsson and J. A. Sethian: *J. Comput. Phys.*, **185** (2003), 271.
- (9) H. Ohki, N. Takeuchi and M. Kusabuka: *Proc. 5th WCCM*, (2002), <http://wccm.tuwien.ac.at/>
- (10) M. Cherkaoui, M. Berveiller and H. Saber: *Int. J. Plast.*, **14** (1998), 597.
- (11) T. Y. Hou, P. Rosakis and P. LeFloch: *J. Comput. Phys.*, **150** (1999), 302.
- (12) A. N. Brooks and T. J. R. Hughes: *Comput. Methods Appl. Mech. Engng.*, **32** (1982), 199.
- (13) S. Dumoulin, E. P. Busso, N. P. O'Dowd, D. Allen: *Phil. Mag.*, **83** (2003), 3895.