

その場回折試験と格子ひずみ解析による 塑性パラメータ最適化手法の構築

熊本大学 大学院先端科学研究部

教授 眞山 剛

(2020 年度 一般研究開発助成 AF-2020026-B3)

キーワード： 結晶塑性解析, その場回折試験, 格子ひずみ

1. 研究の目的と背景

計算機の高速化やメモリの大容量化に伴い、結晶塑性構成式を導入した数値解析手法の利用が拡大している。特に塑性異方性が顕著な材料においては、微視的変形機構の活動度を適切に考慮することで、集合組織の発達や巨視的変形挙動の異方性を合理的に表現可能であることから、今後も応用が拡大するものと考えられる。また、材料科学分野においては、結晶塑性有限要素法(CPFEM)^{1, 2)}や結晶塑性高速フーリエ変換(CPFET)^{3~5)}を用いた不均一変形挙動の解析が盛んに行われている。

結晶塑性解析を実施する上で問題になることの 1 つとして、材料パラメータ同定の困難さがある。特に等価ではない複数の変形機構が存在する場合や複相合金の場合は、異なる材料パラメータの組合せで同一の巨視的変形挙動が表現できてしまう場合もあり、付加的なフィッティング対象を用いた系統的なパラメータ同定手法の構築が求められる。付加的なフィッティング対象としては、デジタル画像相関法(DIC)等により取得される不均一変形に関するデータや集合組織発達データ、様々な負荷条件で系統的に実施した材料試験データ、さらに放射光や中性子線を利用したその場回折試験により得られる格子ひずみ発達に関するデータ等がある^{6~9)}。特に格子ひずみ発達は、結晶配向ごとに得られる変形中の塑性変形機構の活動が反映された平均情報であるため、塑性変形に関連する材料パラメータの同定に用いられることが多い。しかしながら、格子ひずみ発達を再現するためのパラメータ同定は未だに試行錯誤的に行われており、多大な時間と労力を要している。

本研究では、より現実的な結晶塑性解析を実施するために必要な材料パラメータ同定を効率的に実施する手法の確立を目的として、格子ひずみ発達をフィッティング対象としたパラメータ同定手法の構築を試みた。具体的には、パラメータ同定における試行錯誤的なプロセスをできるだけ自動化することを目的として、勾配法およびメタヒューリスティックアプローチの 1 つである遺伝的アルゴリズム(GA)による最適化の導入を検討した。

2. 解析方法

2.1 結晶塑性構成式

本研究では Peirce ら¹⁾により提案された速度依存型結晶塑性構成則を導入した大変形有限要素法を用いた。すべり系 α のせん断ひずみ速度 $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$ を次式で仮定する。

$$\dot{\gamma}^{(\alpha)} = \dot{\gamma}_0 \operatorname{sgn}(\tau^{(\alpha)}) \left| \frac{\tau^{(\alpha)}}{g^{(\alpha)}} \right|^{1/m} \quad (1)$$

ここで、 $\tau^{(\alpha)}$ 、 m 、および $\dot{\gamma}_0$ は、それぞれすべり系 α の分解せん断応力、ひずみ速度依存性指数、および参照せん断ひずみ速度を表している。速度依存性が十分に小さいとき、式(1)中 $g^{(\alpha)}$ はすべり系 α の臨界分解せん断応力(CRSS)と近似的に一致する。すべり系レベルでの加工硬化挙動を表現する $g^{(\alpha)}$ の発展則として、本研究では下記の硬化則を用いた。

$$\dot{g}^{(\alpha)} = \sum_{\beta} \frac{d\hat{\tau}^{(\alpha\beta)}}{d\Gamma} \Omega^{(\alpha\beta)} |\dot{\gamma}^{(\beta)}| \quad (2)$$

ここで、 $\Omega^{(\alpha\beta)}$ はすべり系間の相互作用を表現する係数であるが、本研究ではすべての組合せが等価であると仮定して、 $\Omega^{(\alpha\beta)} = 1$ を用いた。また、式(2)中の $\hat{\tau}^{(\alpha)}$ は、全すべり系の累積すべり量 Γ の関数である次式 Voce 則を用いた。

$$\hat{\tau}^{(\alpha)} = \tau_0^{(\alpha)} + \left(\tau_1^{(\alpha)} + \theta_1^{(\alpha)} \Gamma \right) \left\{ 1 - \exp \left(- \frac{\theta_0^{(\alpha)} \Gamma}{\tau_1^{(\alpha)}} \right) \right\} \quad (3)$$

上式中の $\tau_0^{(\alpha)}$ 、 $\tau_1^{(\alpha)}$ 、 $\theta_0^{(\alpha)}$ 、および $\theta_1^{(\alpha)}$ は加工硬化挙動を表現する材料パラメータである。

2.2 解析モデル

本研究では解析対象を複相マグネシウム(Mg)合金である長周期積層(LPSO)型 Mg-Zn-Y 合金^{10, 11)}とした。本合金は α -Mg 相と LPSO 相からなる二相合金であり、 α -Mg 相は商用 Mg 合金と同様、底面すべり系、柱面すべり系、二次錐面 $\langle c+a \rangle$ すべり系および $\{1012\}$ 双晶系が主要な変形機構である。一方、LPSO 相はその複雑な原子構造に起因して錐面すべり系と双晶系の活動が抑制され、底面すべり系が主要な変形機構であり、柱面すべり系もわずかに活動する。以上のことから、本研究では図 1 に模式的に示す変形を考慮した。対象とする合金は LPSO 相を 40%程度含む Mg₉₄Zn₂Y₄ 合金鑄造材^{12~14)}とし、初期ランダム集合組織に対応する初期方位を各結晶に与えた。

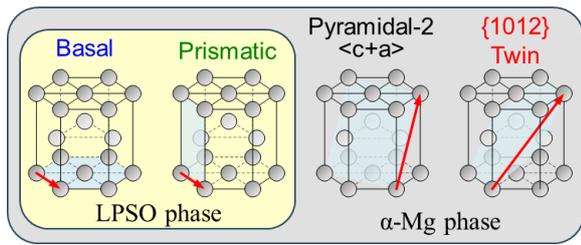


図1 解析に考慮した変形機構.

2・3 格子ひずみの出力

実験的に得られる格子ひずみは放射光や中性子線の回折を利用して得られる結晶学的面の間隔(d-space)の変化より得られる. 一方, 結晶塑性解析では, 変形解析で得られる応力テンソルと弾性係数より算出される弾性ひずみテンソルから求められる, 各結晶学的面の法線方向成分を局所的な格子ひずみと見做すことができるが, 実験的に得られる格子ひずみと等価にするためには, 検出器で測定される結晶粒の平均値とする必要がある. 結晶塑性解析では各結晶の結晶方位に関する情報も保持しているため, 結晶方位に基づき判定すれば良いが, 実験で用いている検出器の配置を考慮して, 理想的な配向からの偏差を許容することにより, 実験と等価な格子ひずみとすることができる.

2・4 材料パラメータの最適化手法

本研究では材料パラメータの最適化手法として, 勾配法とGAを用いた. 勾配法は初期値に依存して局所最適値に陥ることが問題として良く知られているが, 本研究では純Mg単結晶や商用Mg合金多結晶材の結晶塑性解析に関する過去の知見に基づき各パラメータの大小関係を予め定めて最適化を実施したことにより, 明らかな局所最適値への収束はみられなかった. GAについても様々な問題が指摘されており, それらを克服するための手法も各種提案されているが, 本研究では最もシンプルな単純GAを用いることにした. また, 両最適化で用いる目的関数は, 応力-ひずみ曲線および各結晶学的面の格子ひずみ-巨視的ひずみ関係の実験値と計算値の差の二乗和とし, 必要に応じて重み付けすることにより, 極端にどれか1つの関係が最適化に過度な影響を及ぼすことを回避した. 重みの付け方には任意性があり, 決定方法は大きな問題であるため, 本稿では重み付けが同定精度に及ぼす影響について示し, さらに同定結果の初期CRSS依存性に関する結果も示す. なお, 本稿では紙面の都合により勾配法により得られた結果のみを示す.

3. 解析結果

3・1 目的関数依存性

ここでは同定結果に及ぼす目的関数依存性を示すため, (i) 応力-ひずみ曲線のみをフィッティング対象とした場合(図2), (ii) 格子ひずみ発達のみをフィッティング対象

とした場合(図3), および(iii) 応力-ひずみ曲線と格子ひずみ発達の両方をフィッティング対象とした場合(図4)について, 最適化されたパラメータを用いて実施した解析結果の応力-ひずみ挙動と格子ひずみ発達を示し, それぞれの特徴を比較する.

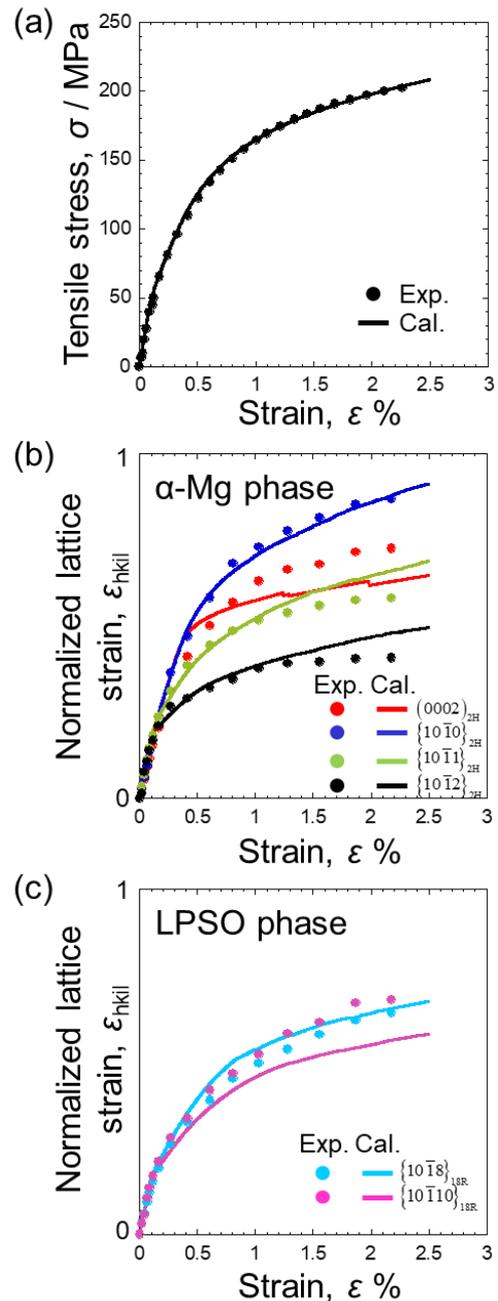


図2 応力-ひずみ曲線のみを目的関数としてパラメータ同定した結果. (a) 応力-ひずみ挙動. (b) α -Mg 相および (c) LPSO 相の格子ひずみ発達.

図2に示した応力-ひずみ曲線のみをフィッティング対象とした場合, 図2(a)の応力-ひずみ曲線は実験と計算がほぼ完全に一致しているが, 格子ひずみ発達については実験と計算の差が大きく, 特に図2(b)に示した α -Mg相の $\{1011\}$ 面格子ひずみは実験と計算で大きく異なる発達

を示している。これに対して図3に示した格子ひずみ発達のみをフィッティング対象とした場合は、図3(b),(c)の格子ひずみ発達は、いずれも実験と計算が良く一致している一方で、図3(a)の応力-ひずみ挙動の計算結果は0.3%以降の加工硬化挙動が十分に再現されていない。

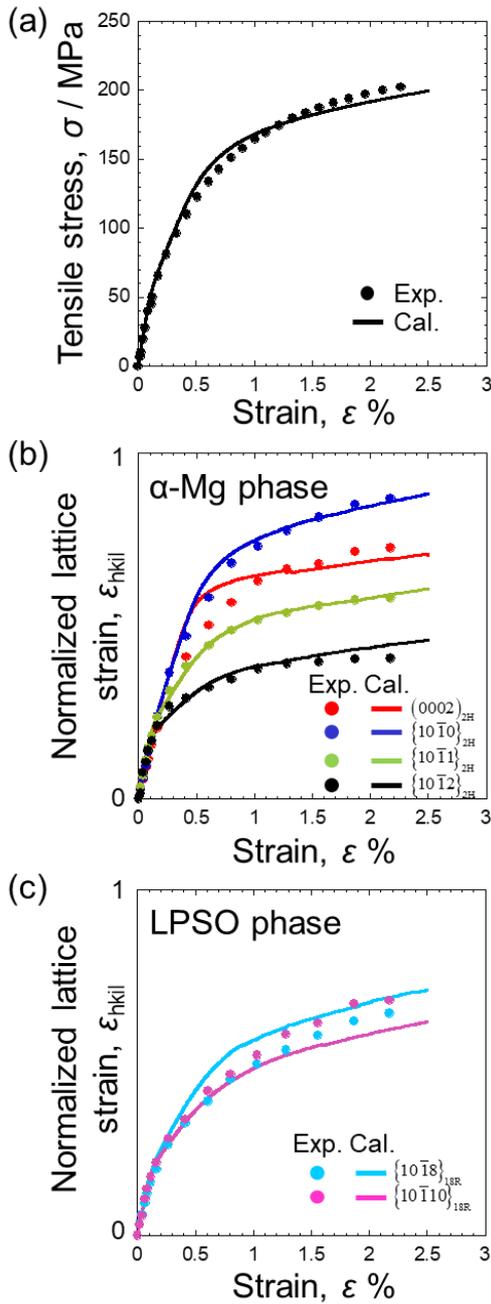


図3 格子ひずみ発達のみを目的関数としてパラメータ同定した結果。(a) 応力-ひずみ挙動。(b) α -Mg 相および (c) LPSO 相の格子ひずみ発達。

図4は、応力-ひずみ曲線と格子ひずみ発達の両方をフィッティング対象とした結果を示しており、図4(a)の応力-ひずみ曲線の実験と計算がよく一致していることに加えて、図4(b),(c)に示した格子ひずみ発達についても図3(b),(c)と同程度により一致を示している。ただし、応力

-ひずみ曲線と格子ひずみ発達の両方を目的関数に取り入れる場合は、その重み付けに任意性がある。今回は試行錯誤的に決定せざるを得なかったが、目的関数の重み付けを半自動的に決定する方法については、今後検討すべき課題である。

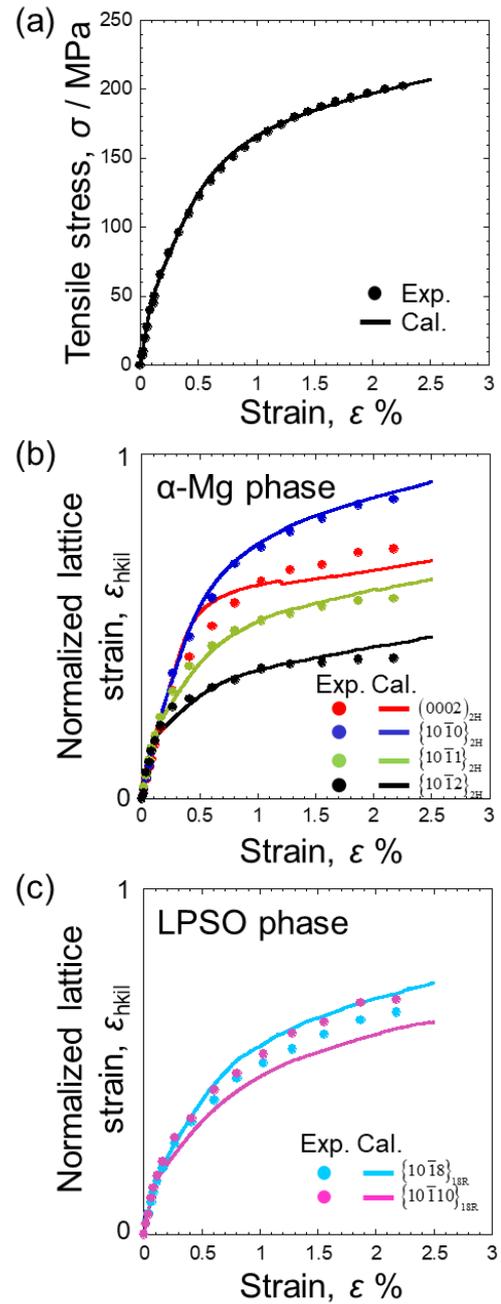


図4 応力-ひずみ挙動と格子ひずみ発達を目的関数としてパラメータ同定した結果。(a) 応力-ひずみ挙動。(b) α -Mg 相および (c) LPSO 相の格子ひずみ発達。

3・2 初期値依存性

2・3 節でも言及したが、局所最適解が存在する問題に対して勾配法を適用した場合、得られる解は初期値依存性を示す。今回は純 Mg 単結晶の実験結果や商用 Mg 合金を対象とした結晶塑性解析などの報告に基づき、底面すべり

系が容易すべり系であるとの前提で初期値を設定した結果、図2～4に示したように応力-ひずみ挙動と格子ひずみ発達の方で極端に外れた計算結果とはならなかった。しかしながら、各変態機構の相対的な活動度が全く未知な材料に対するパラメータ同定を想定した場合、初期値依存性は問題となり得る。ここでは、図4の結果を示すパラメータを最適値として、異なる初期値で得られた結果を比較することで初期値依存性について考察する。

以下では6種類の異なる初期CRSSから最適化を実施した結果について説明する。初期CRSSは α -Mg相の4つの変態機構およびLPSO相の2つの変態機構のうち1つのみを10 MPaとし、残りを100 MPaとした。すなわち、(i) α -Mg相の底面すべり系(α -Mg Basal), (ii) α -Mg相の柱面すべり系(α -Mg Prismatic), (iii) α -Mg相の錐面すべり系(α -Mg $\langle c+a \rangle$), (iv) α -Mg相の双晶系(α -Mg Twin), (v) LPSO相の底面すべり系(LPSO Basal), (vi) LPSO相の柱面すべり系(LPSO相 Prismatic)のいずれか1つが軟質と仮定した初期値でパラメータ同定を実施した。

表1は、異なる初期CRSSで得られた目的関数の最小値を図4で得られた最適値で除して正規化した値を示しており、小さい値ほど最適値に近いことを示している。表1の結果より、 α -Mg相とLPSO相いずれかの底面すべり系初期CRSSを小さくした場合、より最適値に近い収束を示している一方で、 α -Mg相の非底面すべり系と双晶系の初期値を小さくすると最適値とは大きく離れた値で収束することがわかる。図4の解析結果は、 α -Mg相とLPSO相のどちらの底面すべり系初期CRSSも小さくした場合を初期値としていることから、本節で実施したような初期値依存性の調査を予備解析として得られる結果に基づくことにより、パラメータの大域的最適化が実施可能である。

表1 パラメータ収束値の初期CRSS依存性

α -Mg Basal	α -Mg Prismatic	α -Mg $\langle c+a \rangle$	α -Mg Twin	LPSO Basal	LPSO Prismatic
1.418	3.671	3.659	3.439	1.406	1.848

4. 結び

本稿では結晶塑性解析を実施する上で問題となる材料パラメータ同定の困難さを克服するための1手法として、その場回折により得られる格子ひずみ発達データと数理最適化手法を用いる方法を示した。特に最適化の目的関数としては、応力-ひずみ曲線に加えて格子ひずみ発達を考慮することがパラメータ同定に有用であることを最適化されたパラメータによる実験結果と解析結果の比較により明らかにした。また、パラメータ同定における初期値依存性についても示した後、初期値依存性に関する解析自体が初期値を決める上で有用となり得ることが示唆された。

今回のパラメータ同定には、負荷方向の回折から得られるデータのみを使用した。その場回折実験からは半径方向の回折データや集合組織発達に関する情報も得られる。このような情報も総合的に考慮した最適化を実施し、より現実的な材料パラメータを効率的に同定することがこれからの課題である。

謝辞

本研究は、公益財団法人天田財団の一般研究開発助成を受けて実施したものであることを付記して謝意を表します。また、本研究の実施と本稿の執筆に際して、日本原子力研究開発機構の諸岡聡氏、Stefanus Harjo氏、Wu Gong氏、および熊本大学大学院の修了生である高山隼太郎氏との共同研究で得られた実験結果と修士研究成果を使用させて頂きました。御礼を申し上げます。

参考文献

- 1) D. Peirce, R. J. Asaro, and A. Needleman: *Acta Metall.* **31** (1983) 1951-1976.
- 2) F. Roters, P. Eisenlohr, L. Hantcherli, D. D. Tjahjanto, T. R. Bieler, and D. Raabe: *Acta Mater.* **58** (2010) 1152-1211.
- 3) R. A. Lebensohn: *Acta Mater.* **49** (2001) 2723-2737.
- 4) R. A. Lebensohn, A. K. Kanjarla, and P. Eisenlohr: *Int. J. Plasticity* **32** (2012) 59-69.
- 5) P. Eisenlohr, M. Diehl, R. A. Lebensohn, and F. Roters: *Int. J. Plasticity* **46** (2013) 37-53.
- 6) B. Clausen and T. Lorentzen: *Metall. Mater. Trans. A* **28** (1997) 2537-2541.
- 7) T. M. Holden, C. N. Tomé, and R. A. Holt: *Metall. Mater. Trans. A* **29** (1998) 2967-2973.
- 8) S. R. Agnew, C. N. Tomé, D. W. Brown, T. M. Holden, and S. C. Vogel: *Scripta Mater.* **48** (2003) 1003-1008.
- 9) W. Gong, K. Aizawa, S. Harjo, R. Zheng, T. Kawasaki, J. Abe, T. Kamiyama, and N. Tsuji: *Int. J. Plasticity* **111** (2018) 288-306.
- 10) Y. Kawamura, K. Hayashi, A. Inoue, and T. Masumoto: *Mater. Trans.* **42** (2001) 1172-1176.
- 11) S. Yoshimoto, M. Yamasaki, and Y. Kawamura: *Mater. Trans.* **47** (2006) 959-965.
- 12) K. Shiraishi, T. Mayama, M. Yamasaki, and Y. Kawamura: *Mater. Sci. Eng. A* **672** (2016) 49-58.
- 13) K. Shiraishi, T. Mayama, M. Yamasaki, and Y. Kawamura: *Mater. Sci. Eng. A* **790** (2020) 139679.
- 14) T. Mayama, S. R. Agnew, K. Hagihara, K. Kamura, K. Shiraishi, M. Yamasaki, and Y. Kawamura: *Int. J. Plasticity* **154** (2022) 103294.