

SPring-8材料構造の解析に役立つ計算科学研究会(第2回)
/第5回SPring-8先端利用技術ワークショップ
—構造材料開発における放射光技術と計算物質科学の新展開—
AP品川京急第2ビル, 7/22(金), (2016)

フェーズフィールド法による 材料組織形成過程の解析 — 組織から力学特性へ —

小山敏幸

名古屋大学大学院工学研究科
マテリアル理工学専攻(材料工学分野)

材料設計計算工学

(a) 単相の物質パラメータ

- ・格子定数、弾性定数、界面エネルギー密度、ギブスエネルギー、飽和磁化、キュリー温度、拡散係数、...

第一原理計算, 原子・分子シミュレーション, Calphad法, 各種データベース, ...

[実験データのデータ同化]



組織シミュレーション内の物質パラメータ

(b) 材料組織形態情報

- ・多結晶粒組織、析出組織、欠陥組織、転位組織、各種ドメイン組織、...

フェースフィールド法, セルオートマター, LLG解析, TDGL解析, ...

[実験データのデータ同化]

組織
情報



組織の定量化[サイズ, 分率, 形状, 配向, 配置, ... (分布も含む)]

(c) 材料特性推定

- ・力学特性、磁気特性、電気特性、

力学特性(ミクロとマクロ)

[実験データのデータ同化]



プロセスシミュレーション内の材料パラメータ

(d) 部材・デバイスの設計

内容

【不均一組織形態と力学特性の関係説明】

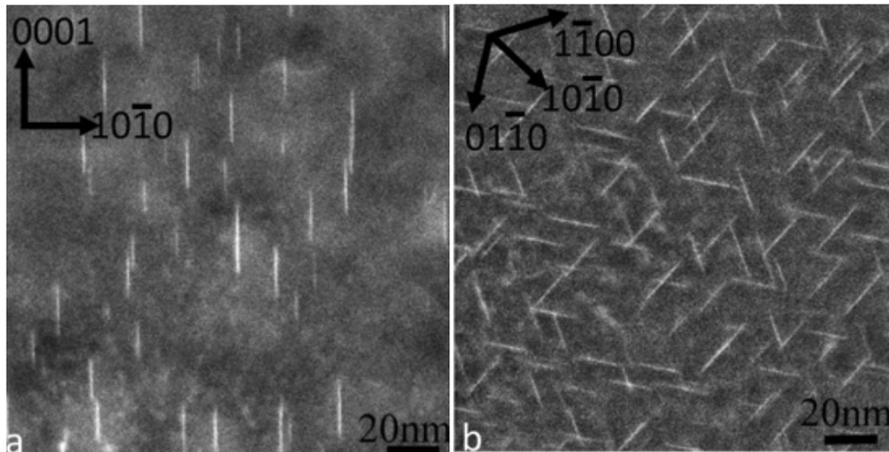
1. GPゾーン組織と時効硬化曲線

(Mg合金の析出硬化に対する3D-PF組織・特性解析)

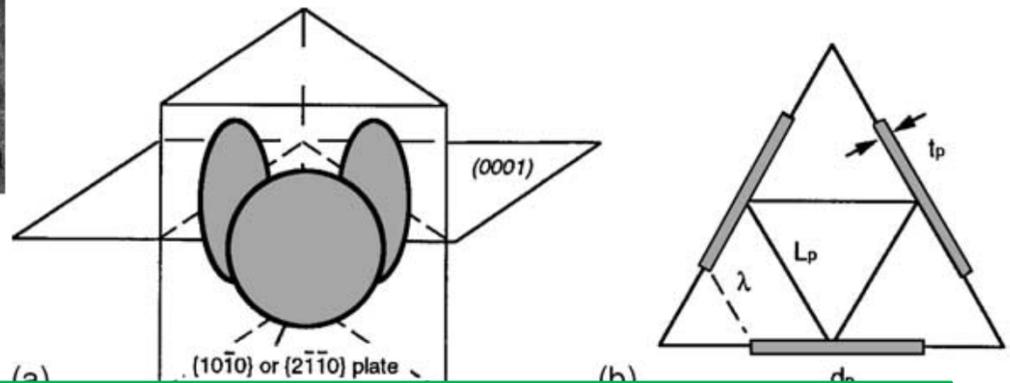
2. マクロ組織形態と応力-ひずみ曲線

(鉄鋼材料の複相組織における応力-ひずみ曲線の計算)

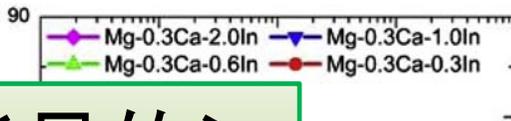
<背景> 従来の時効析出は底面析出 → 強度改善において効果的ではない
(G.P.ゾーン形成)



底面すべりのとき高い時効硬化を示す条件
板状の析出物
{01-10} or {2-1-10} 面上に成長



Mg-0.3at%Ca-1.0at%InにおけるHAADF-STEM図



<目的>

- (1) Mg基hcp合金の相分離に対するPFシミュレーション
- (2) 力学特性と組織形態との定量的関連性の解明
(GPゾーン組織形態変化に基づいた析出硬化曲線の作成)



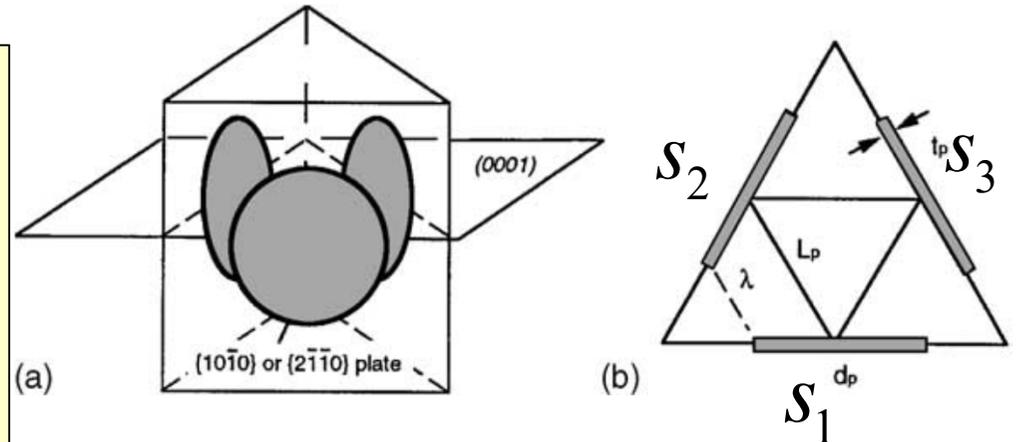
GPゾーン組織形態と力学特性の関係性について解明

<計算方法1> Mg基hcp合金の相分離に対するPFシミュレーション プリズムティックプレート状GPゾーン形成のPFシミュレーション

秩序変数

[Mg-X仮想二元系を仮定]

- ・濃度場: $c(\mathbf{r}, t)$
- ・3つのバリエントを区別するPF:
 $s_1(\mathbf{r}, t), s_2(\mathbf{r}, t), s_3(\mathbf{r}, t)$



Mg母相内のプリズマティックプレート析出物の模式図
 [J.F. Nie, Scripta Mater., 48(2003), 1009-1015.]

全自由エネルギー汎関数

$$G_{\text{sys}} = G_c \{c(\mathbf{r}, t), s_i(\mathbf{r}, t)\} + E_{\text{grad}} \{c(\mathbf{r}, t), s_i(\mathbf{r}, t)\} \\
 + E_{\text{str}} \{c(\mathbf{r}, t), s_i(\mathbf{r}, t)\}$$

発展方程式

$$\frac{\partial c(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \nabla \cdot \left\{ M \nabla \frac{\delta G_{\text{sys}}}{\delta c(\mathbf{r}, t)} \right\},$$

$$\frac{\partial s_i(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = - \sum_j L_{ij} \frac{\delta G_{\text{sys}}}{\delta s_j(\mathbf{r}, t)}$$

G_{sys} : 全自由エネルギー

\mathbf{r} : 空間位置

M : 拡散の易動度

L : 緩和係数

化学的自由エネルギー (KKSモデル)

$$G_c = \int_{\mathbf{r}} \left[G^\alpha(c_\alpha) \left(1 - \sum_{i=1}^3 h(s_i)\right) + G^{\text{GP}}(c_{\text{GP}}) \sum_{i=1}^3 h(s_i) \right. \\ \left. + W_c \sum_{i=1}^3 q(s_i) + W_s g(s_i) \right] d\mathbf{r}$$

$$G^\alpha(c_\alpha) = \frac{1}{2} W_\alpha (c_\alpha - c_\alpha^0)^2, \quad G^{\text{GP}}(c_{\text{GP}}) = \frac{1}{2} W_{\text{GP}} (c_{\text{GP}} - c_{\text{GP}}^0)^2$$

$$h(s_i) \equiv s_i^2 (3 - 2s_i), \quad q(s_i) \equiv s_i^2 (1 - s_i)^2, \quad g(s_i) \equiv s_1 s_2 + s_2 s_3 + s_3 s_1$$

$$c_\alpha = \frac{W_{\text{GP}} c + (W_\alpha c_\alpha^0 - W_{\text{GP}} c_{\text{GP}}^0) s_{\text{GP}}}{W_{\text{GP}} s_\alpha + W_\alpha s_{\text{GP}}}, \quad c_{\text{GP}} = \frac{W_\alpha c + (W_{\text{GP}} c_{\text{GP}}^0 - W_\alpha c_\alpha^0) s_\alpha}{W_{\text{GP}} s_\alpha + W_\alpha s_{\text{GP}}}$$

c : 濃度

c_α : Mgの濃度

c_{GP} : GPゾーンの濃度

s_i : 3つのバリエントを区別するPF

G^α : Mgの化学的自由エネルギー

G^{GP} : GPゾーンの化学的自由エネルギー

W_c : MgとGPゾーン間のエネルギー障壁

W_s : 異なるバリエントの相間のエネルギー障壁

W_α : Mgの化学的自由エネルギーの曲率

W_{GP} : GPゾーンの化学的自由エネルギーの曲率

化学的自由エネルギーの汎関数部分

$$\frac{\delta G_c}{\delta c(\mathbf{r}, t)} = \frac{\delta G^\alpha(c_\alpha)}{\delta c(\mathbf{r}, t)} \left(1 - \sum_{i=1}^3 h(s_i)\right) + \frac{\delta G^{\text{GP}}(c_{\text{GP}})}{\delta c(\mathbf{r}, t)} \sum_{i=1}^3 h(s_i)$$

$$\frac{\delta G^\alpha(c_\alpha)}{\delta c(\mathbf{r}, t)} = \frac{W_\alpha W_{\text{GP}}}{W_{\text{GP}} s_\alpha + W_\alpha s_{\text{GP}}} (c_\alpha - c_\alpha^0)$$

$$\frac{\delta G^{\text{GP}}(c_{\text{GP}})}{\delta c(\mathbf{r}, t)} = \frac{W_\alpha W_{\text{GP}}}{W_{\text{GP}} s_\alpha + W_\alpha s_{\text{GP}}} (c_{\text{GP}} - c_{\text{GP}}^0)$$

$$\frac{\delta G_c}{\delta s_i(\mathbf{r}, t)} = \frac{dh(s_i)}{ds_i} \left(G^{\text{GP}}(c_{\text{GP}}) - G^\alpha(c_\alpha) + (c_\alpha - c_{\text{GP}}) \frac{\partial G^\alpha(c_\alpha)}{\partial c_\alpha} \right) + W_c \frac{dq(s_i)}{ds_i} + W_s \frac{dg(s_i)}{ds_i}$$

勾配エネルギー

$$E_{\text{grad}} = \int_{\mathbf{r}} \frac{1}{2} \sum_{i=1}^3 \kappa_s (\nabla s_i)^2 d\mathbf{r}$$

κ_s : GPゾーンの勾配エネルギー一定数

C_{ijkl} : 弾性定数

s_p : 規則渡場の平均

$s^{(p)} \varepsilon_{ij}^{00}$: 規則渡場のアイゲン歪

$\Omega_{mi}(\mathbf{n})$: 弾性関数

弾性歪エネルギー

$$E_{\text{str}} = \frac{1}{2} \int_{\mathbf{r}} C_{ijkl} \{ \varepsilon_{ij}^c(\mathbf{r}) - \varepsilon_{ij}^0(\mathbf{r}) \} \{ \varepsilon_{kl}^c(\mathbf{r}) - \varepsilon_{kl}^0(\mathbf{r}) \} d\mathbf{r}$$

拘束歪

$$\varepsilon_{ij}^c(\mathbf{r}) = \bar{\varepsilon}_{ij}^c + \delta\varepsilon_{ij}^c(\mathbf{r}),$$

アイゲン歪

$$\varepsilon_{ij}^0(\mathbf{r}) = \sum_{p=1}^3 s^{(p)} \varepsilon_{ij}^{00} s_p(\mathbf{r}),$$

均一歪

$$\bar{\varepsilon}_{ij}^c = \sum_{p=1}^3 s^{(p)} \varepsilon_{ij}^{00} \bar{s}_p,$$

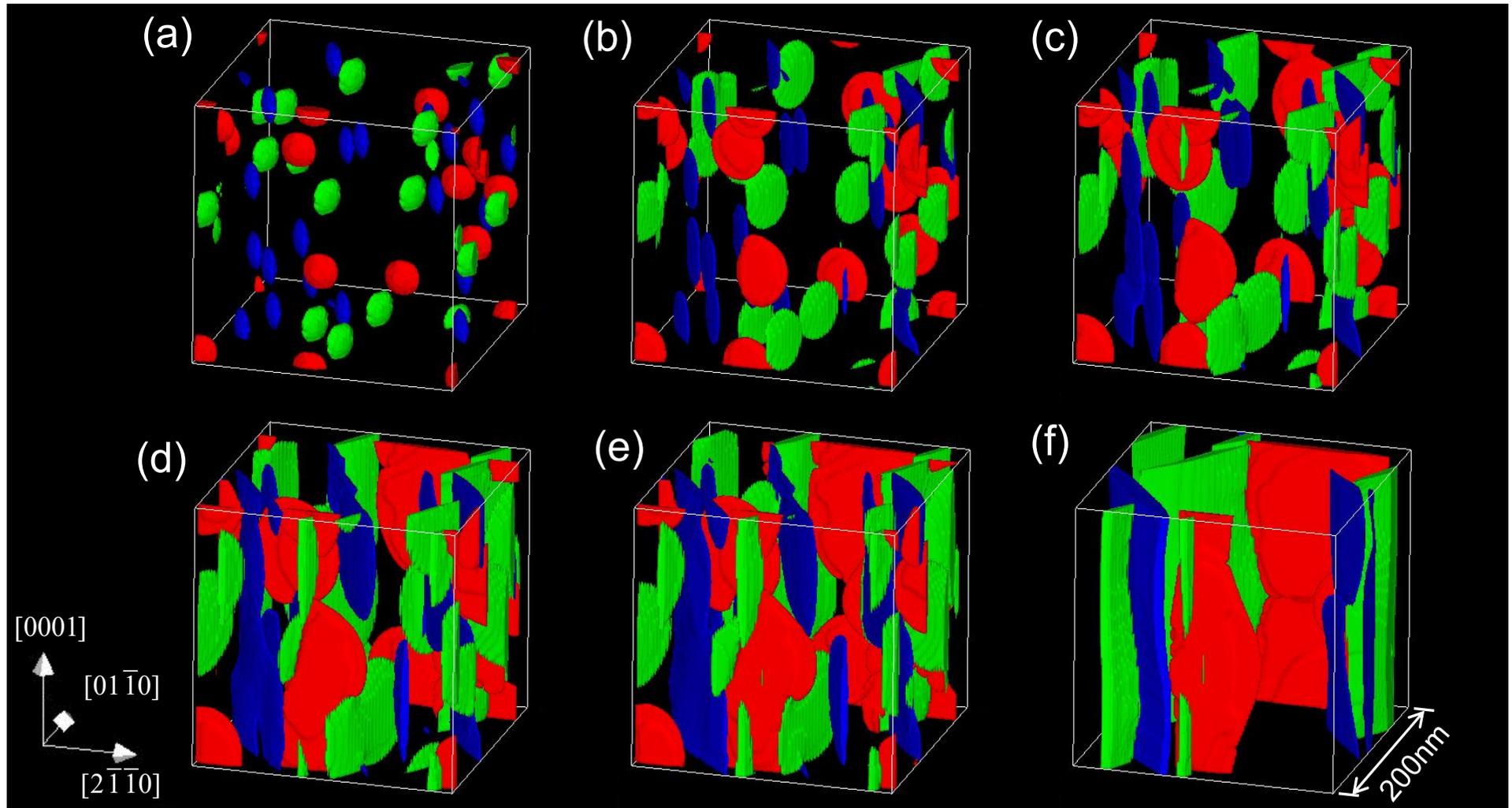
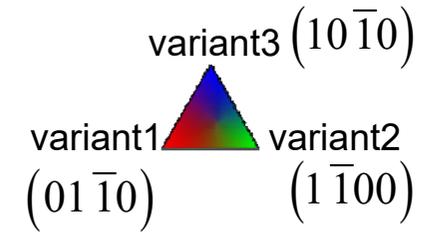
歪変動量

$$\delta\varepsilon_{ij}^c(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} \int_{\mathbf{k}} \left[\sum_{p=1}^3 \left\{ \begin{array}{l} n_j \Omega_{mi}(\mathbf{n}) s^{(p)} \sigma_{mn}^0 n_n \\ + n_i \Omega_{mj}(\mathbf{n}) s^{(p)} \sigma_{mn}^0 n_n \end{array} \right\} \langle s_p(\mathbf{r}) \rangle_{\mathbf{k}} \right] \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3},$$

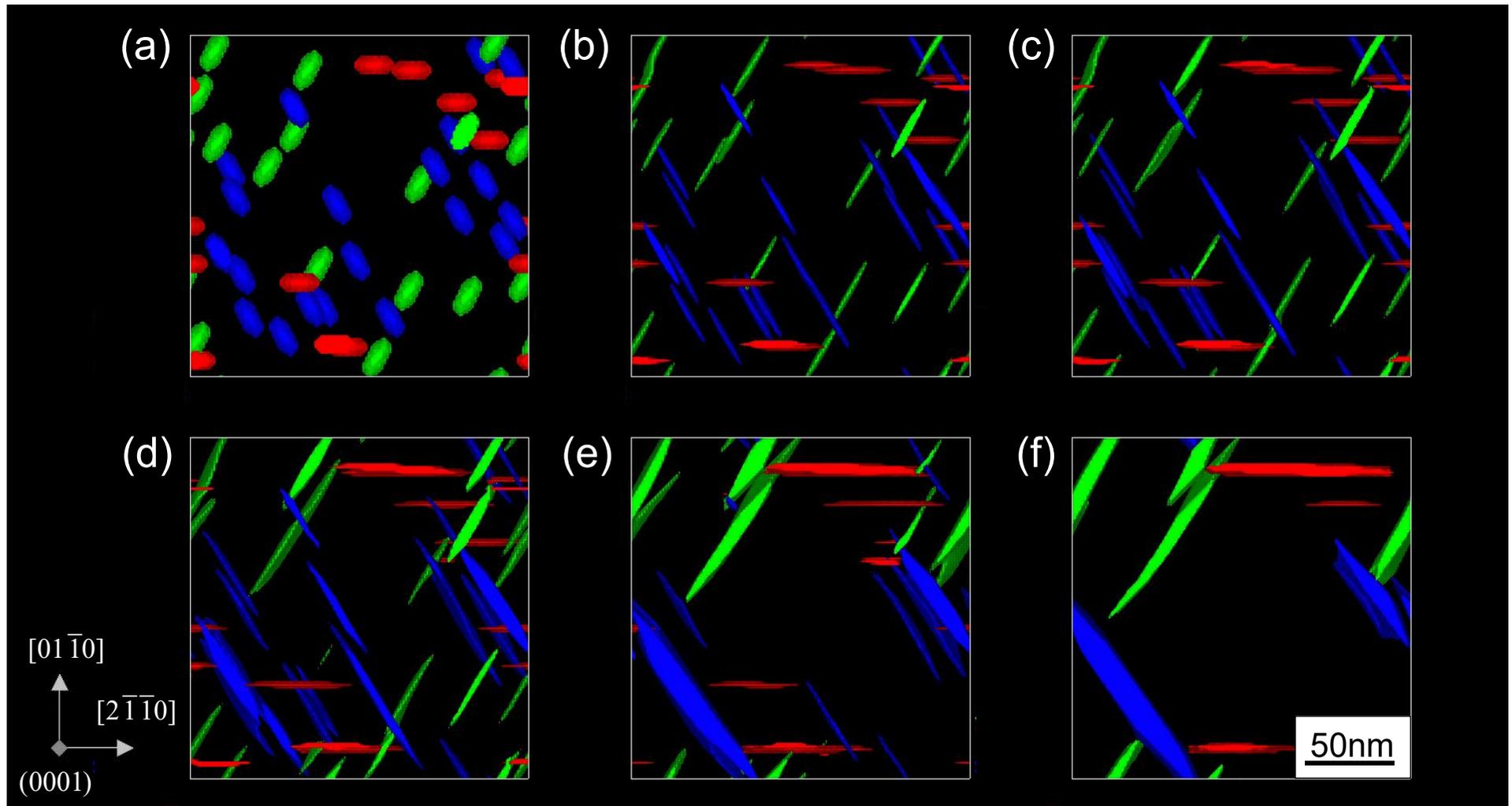
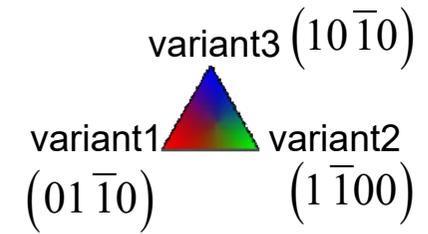
応力

$$s^{(p)} \sigma_{mn}^0 \equiv C_{mnkl} s^{(p)} \varepsilon_{kl}^{00}$$

<結果1>



Mg-1.3at%X 合金の473K等温時効における相分解過程のPFシミュレーション
(a) $t'=2$, (b) $t'=10$, (c) $t'=40$, (d) $t'=100$, (e) $t'=200$, (f) $t'=800$



Mg-1.3at%X 合金の473K等温時効における相分解過程のPFシミュレーション
a) $t'=2$, b) $t'=10$, c) $t'=40$, d) $t'=100$, e) $t'=200$, f) $t'=800$

<計算方法2> 力学特性と組織形態との定量的関連性の解明

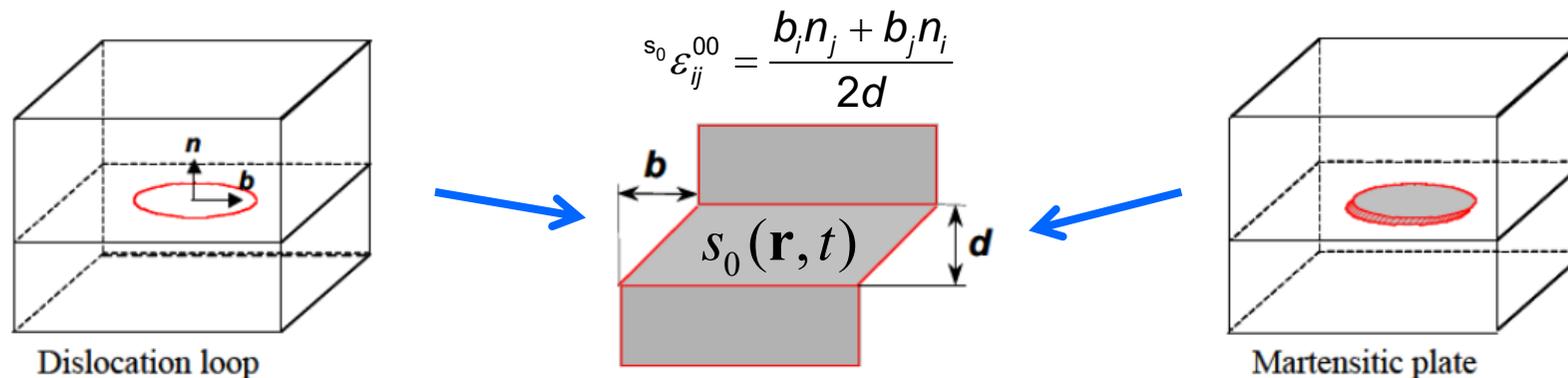
GPゾーン組織上でのPF転位動力学シミュレーション

秩序変数

- ・すべり面のPF: $s_0(\mathbf{r}, t)$ [1本の転位がGPゾーン組織内を移動していく場合を想定]
- ・濃度場: $c(\mathbf{r}, t)$ [Mg-X仮想二元系を仮定]
- ・3つのバリエントを区別するPF: $s_1(\mathbf{r}, t)$, $s_2(\mathbf{r}, t)$, $s_3(\mathbf{r}, t)$

濃度場とバリエントのPFは固定し、転位のPFのダイナミクスを計算

PF転位動力学シミュレーション: すべり面を薄いマルテンサイトとみなした計算法



[Y.U.Wang, Y.M.Jin, A.M.Cuitino and A.G.Khachaturyan, Acta mater., 49(2001), 1847–1857.]

全自由エネルギー汎関数

$$G_{\text{sys}} = G_c \{s_i(\mathbf{r}, t)\} + E_{\text{grad}} \{s_i(\mathbf{r}, t)\} + E_{\text{str}} \{s_i(\mathbf{r}, t)\}$$

発展方程式

$$\frac{\partial s_0(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -L \frac{\delta G_{\text{sys}}}{\delta s_0(\mathbf{r}, t)}$$

G_{sys} : 全自由エネルギー

\mathbf{r} : 空間位置

L : 易動度

化学的自由エネルギー

$$G_c = \int_{\mathbf{r}} \left[16 \left(W_{\text{dis}} + W_{\text{ce}} (s_1(\mathbf{r}) + s_2(\mathbf{r}) + s_3(\mathbf{r})) \right) s_0^2(\mathbf{r}, t) (1 - s_0(\mathbf{r}, t))^2 \right] d\mathbf{r},$$

勾配エネルギー

$$E_{\text{grad}} = \int_{\mathbf{r}} \left[\frac{1}{2} \kappa_{\text{dis}} (\mathbf{n}_0 \times \nabla s_0)^2 \right] d\mathbf{r},$$

W_{dis} : エネルギー障壁

W_{ce} : エネルギー障壁

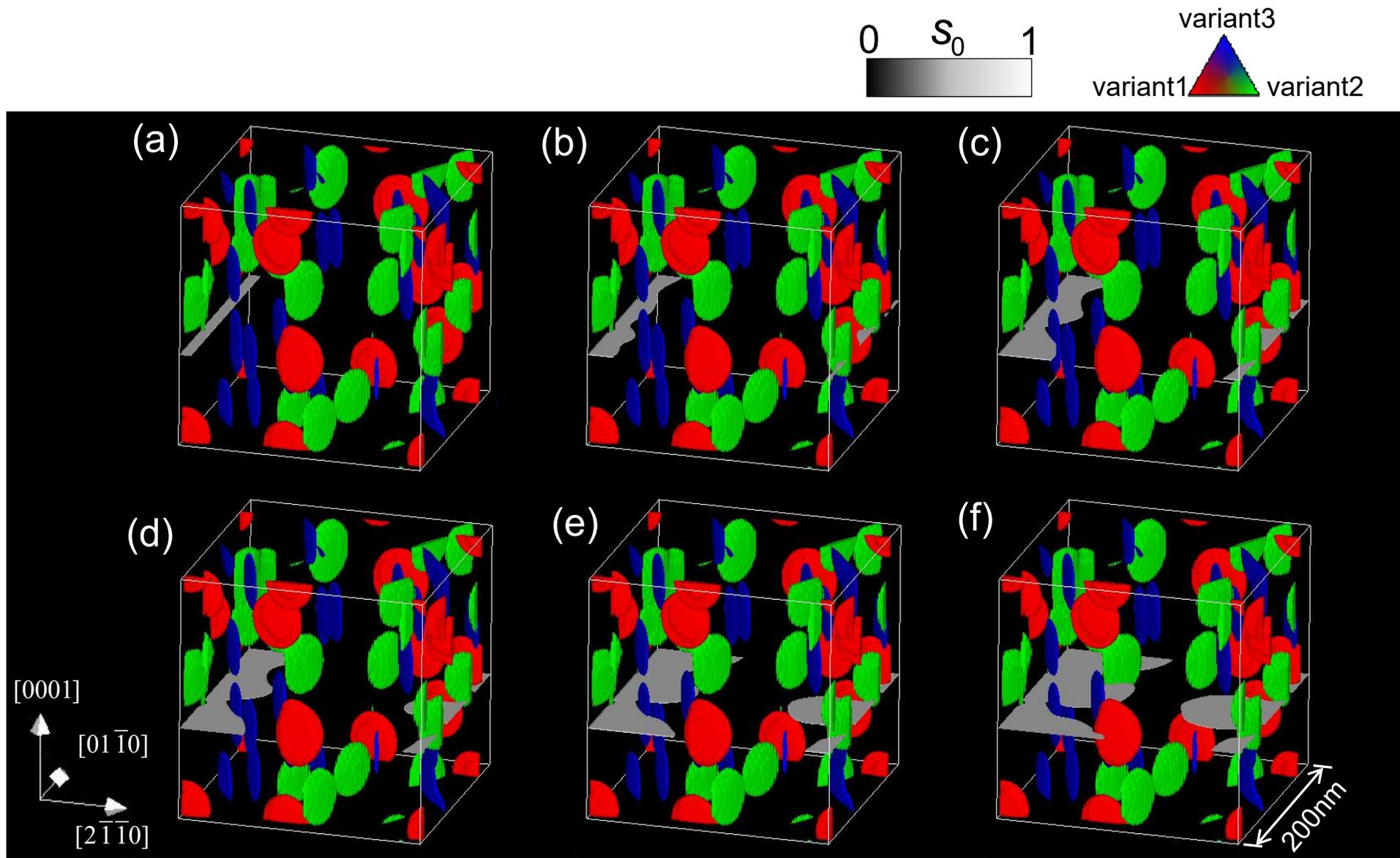
κ_{dis} : 転移の勾配エネルギー定数

\mathbf{n}_0 : 単位ベクトル

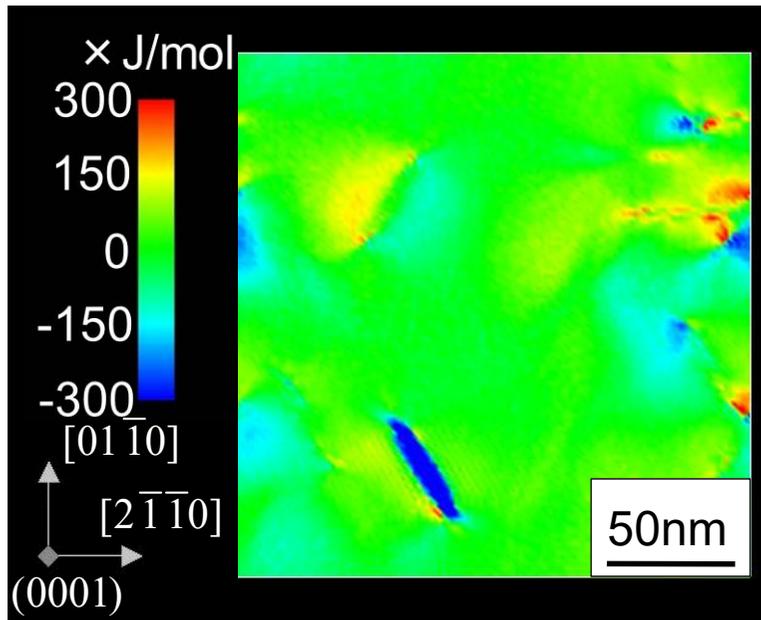
σ_{ij}^A : 外力

弾性歪エネルギー

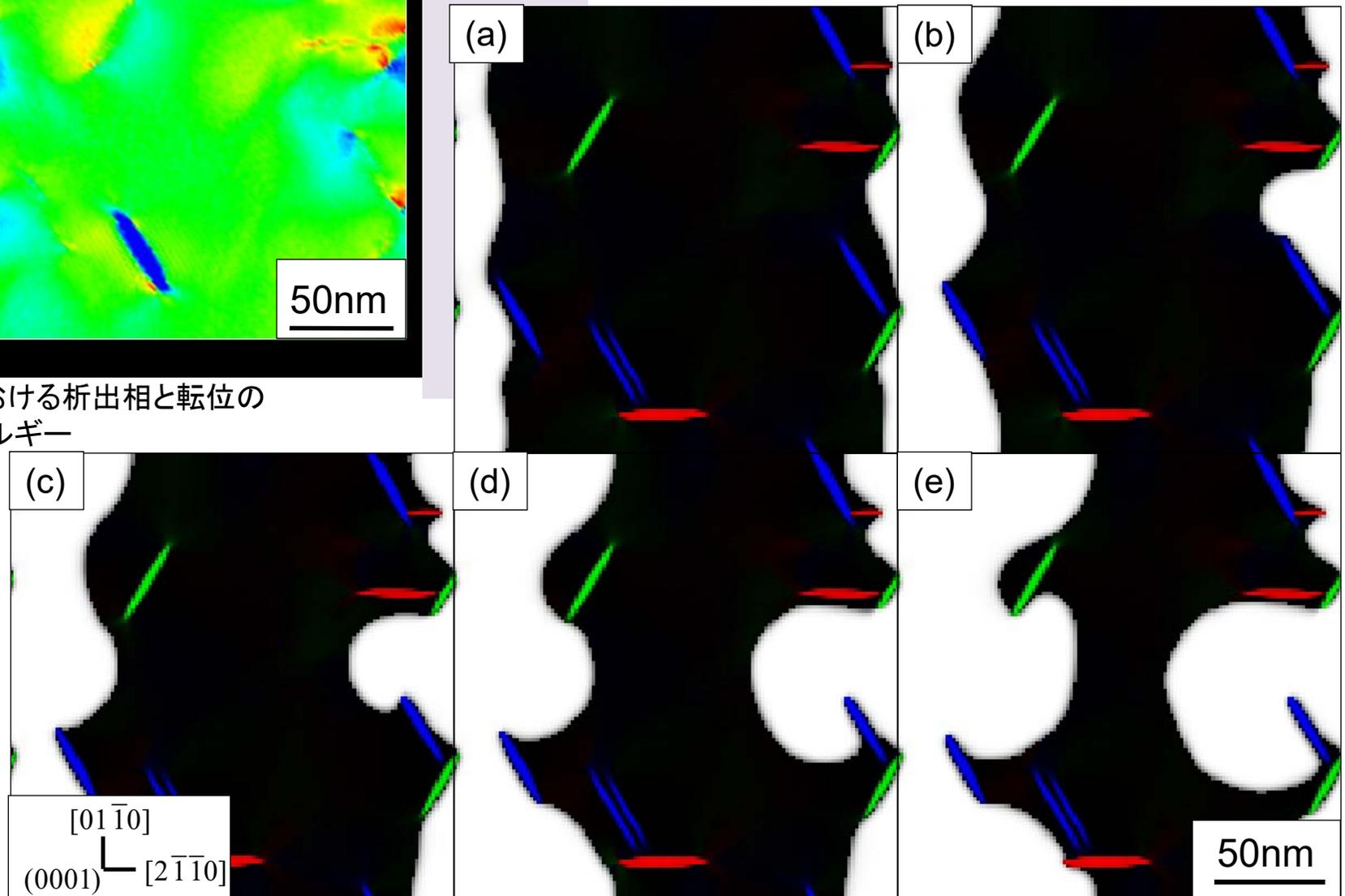
$$E_{\text{str}} = \frac{1}{2} \int_{\mathbf{r}} C_{ijkl} \{ \varepsilon_{ij}^c(\mathbf{r}) - \varepsilon_{ij}^0(\mathbf{r}) \} \{ \varepsilon_{kl}^c(\mathbf{r}) - \varepsilon_{kl}^0(\mathbf{r}) \} d\mathbf{r} - \int_{\mathbf{r}} \sigma_{ij}^A \varepsilon_{ij}^c(\mathbf{r}) d\mathbf{r}$$



$t'=20$ (b)の組織上での転位の移動シミュレーション ($\sigma_{31}^A = 45\text{MPa}$):
 (a) $t'=0$, (b) $t'=200$, (c) $t'=600$, (d) $t'=800$, (e) $t'=1200$ and (f) $t'=1600$.



すべり面上における析出相と転位の相互作用エネルギー



$t'=20$ (b)の組織上での転位の移動シミュレーション ($\sigma_{31}^A = 45\text{MPa}$):
 (a) $t'=200$, (b) $t'=600$, (c) $t'=800$, (d) $t'=1200$ and (e) $t'=1600$.

＜結論＞

(1) Mg基hcp合金の相分離に対するPFシミュレーション

- ・同一バリエーションの相間の弾性相互作用により、GPゾーンが一時的にやや離れて安定化している様子が観察された。
- ・異なるバリエーション間の弾性相互作用により、相成長が長期にわたり停滞している様子が観察された。
- ・GPゾーン形成に伴う弾性拘束が組織形態形成に大きな影響を及ぼす事が示された。

(2) 力学特性と組織形態との定量的関連性の解明

- ・析出硬化曲線を定性的に再現することに成功した。
- ・転位とGPゾーンの弾性相互作用により、転位の移動挙動が変化した。弾性相互作用エネルギーが正の領域では、転位の移動が停止または遅くなる。弾性相互作用エネルギーが負の領域では、転位の移動が速くなる。
- ・プリズマティックプレート状GPゾーンを形成する組織が強度改善において効果的であることが示された。
- ・GPゾーン形状、および転位とGPゾーンとの弾性相互作用が時効硬化挙動に複合的に影響を及ぼすことが示唆された。

謝辞 JST 先端的低炭素化技術開発プログラム(ALCA)
超軽量高性能汎用型マグネシウム合金の創製(代表 鎌土重晴)

内容

【不均一組織形態と力学特性の関係説明】

1. GPゾーン組織と時効硬化曲線

(Mg合金の析出硬化に対する3D-PF組織・特性解析)

2. マクロ組織形態と応力-ひずみ曲線

(鉄鋼材料の複相組織における応力-ひずみ曲線の計算)

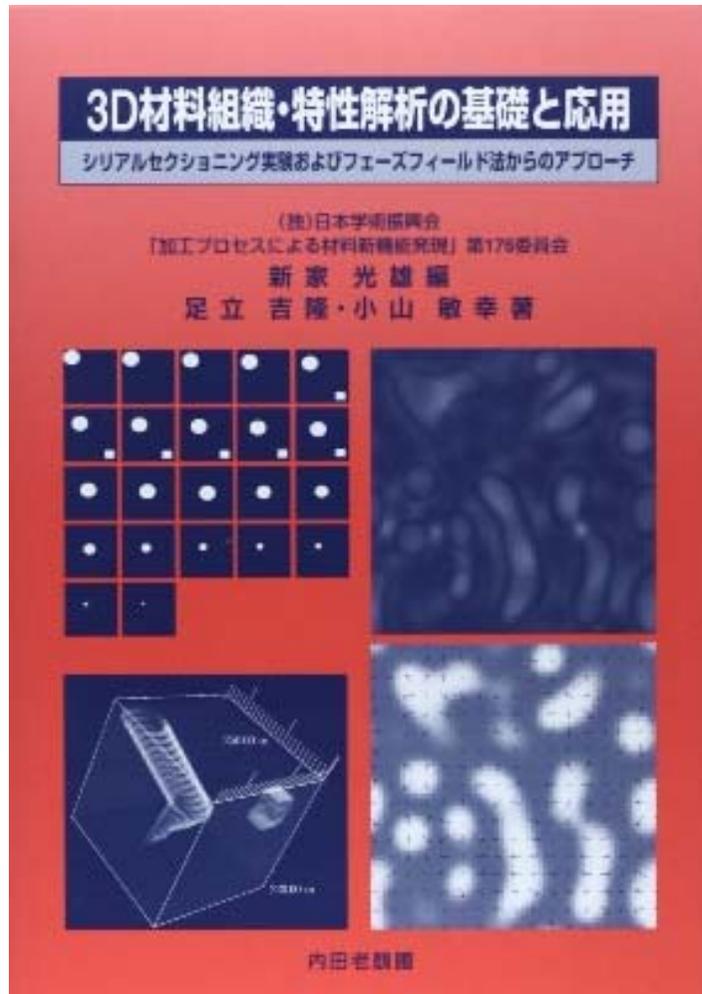
マクロ組織形態と応力-ひずみ曲線

(鉄鋼材料の複相組織における応力-ひずみ曲線の計算)

1. フェースフィールド法を活用した3D組織の構成と改良型セカント法に基づく応力-ひずみ曲線の組織形態依存性
2. 改良型セカント法とデータ同化を用いた单相組織の応力-ひずみ曲線の逆問題的導出

「3D材料組織・特性解析の基礎と応用」

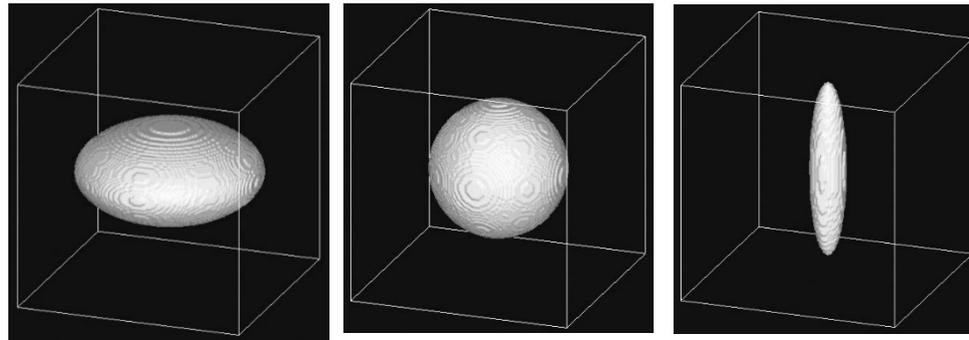
新家光雄(編), 足立吉隆/小山敏幸(著), 内田老鶴圃, (2014).
 (日本学術振興会, 「加エプロセスによる新機能発現」 第176委員会)



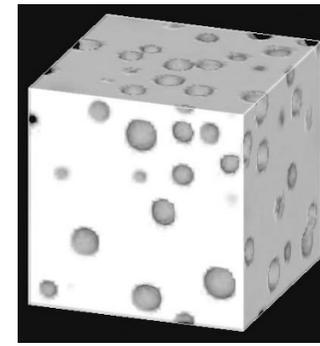
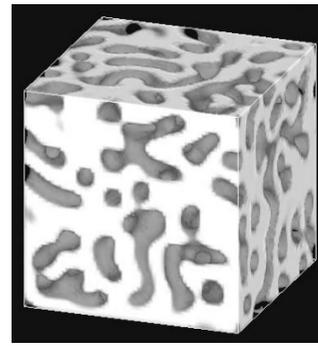
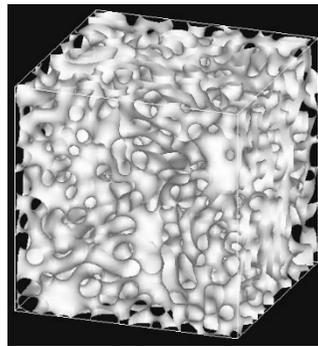
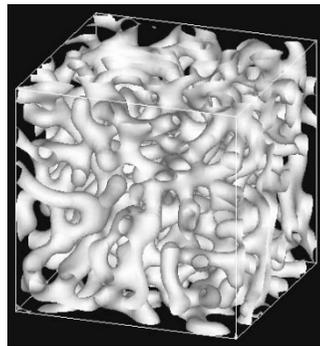
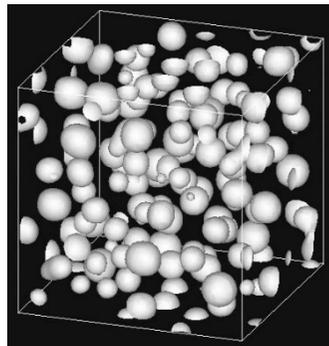
(独) 日本学術振興会 「加工プロセスによる材料新機能発現」 第176委員会 新家光雄 編 足立吉隆・小山敏幸 著	
3D 材料組織・特性解析の基礎と応用	
シリアルセクションング実験およびフェーズフィールド法からのアプローチ	
A5・196頁・定価(本体3800円+税) ISBN978-4-7536-5562-5	
<p>3D材料組織のデジタル(数値)化技術の普及と階層的ひずみ測定技術の拡大、および組織形態情報と力学特性情報の連携を実現すべく、日本学術振興会第176委員会内の「材料ゲノムアーカイブ化WG」において、3D組織のデータベース化(拠点:鹿児島大学)の受け皿づくりが開始されている。</p> <p>本書は、この流れに密接に関連し、「3D4D材料組織ベースのモデリング技術(当該分野は最近、「材料インフォマティクス」と呼ばれている)の基礎と応用」について、広く情報を共有することを意図したものであり、当該分野における3D材料組織解析法および不均一な3D材料組織形態情報を直接考慮したイメージベースの材料特性解析に関する、実験とシミュレーションの両面からの、我国初の入門的解説書である。(本書の背景と目的)より)</p>	
目次	
第I部 実験編	第II部 計算編
<p>I 1. はじめに</p> <p>I 1.1. 参考文献</p> <p>I 2. 三次元材料組織の可視化実験</p> <p>I 2.1. 参考文献</p> <p>I 3. 三次元材料組織の画像処理</p> <p>I 4. 三次元材料組織の定量解析</p> <p>I 4.1. 体積率の評価(統計学的アプローチ)</p> <p>I 4.2. 連結性の評価(位相幾何学的アプローチ)</p> <p>I 4.3. 形態分率の評価(幾分幾何学的アプローチ)</p> <p>I 4.4. 微分幾何学因子と成長速度</p> <p>I 4.5. 埋もれた界面の結晶方位解析</p> <p>I 4.6. 3Dフラクトグラフィ</p> <p>I 4.7. 積層性および周期性の評価</p> <p>I 4.8. 粒界の分岐現象と連結性の解析</p> <p>I 4. 参考文献</p> <p>I 5. 三次元材料組織情報を用いた力学特性解析</p> <p>I 5.1. 有限要素法</p> <p>I 5.2. ニューラルネットワーク予測</p> <p>I 5. 参考文献</p> <p>I 6. 三次元材料組織情報と変形場解析</p> <p>I 6.1. 中性子線による平均弾性ひずみ分布測定</p> <p>I 6.2. EBSD-Wilkinson法による局所弾性ひずみ分布測定</p> <p>I 6.3. DIC法ならびにEBSD-KAM法による局所弾性ひずみ測定</p> <p>I 6.4. ECCI法による転位分布の観察</p> <p>I 6. 参考文献</p> <p>I 7. おわりに</p>	<p>II 1. はじめに</p> <p>II 1.1. 参考文献</p> <p>II 2. 三次元材料組織のフェーズフィールドモデリング</p> <p>II 2.1. フェーズフィールド法</p> <p>II 2.2. 三次元二相分離組織の計算</p> <p>II 2.3. 三次元多結晶粒組織の計算</p> <p>II 2. 参考文献</p> <p>II 3. イメージベース材料特性計算</p> <p>II 3.1. ミクロ組織の弾性解析(フェーズフィールド理論に基づく計算)</p> <p>II 3.2. マクロ力学特性の三次元組織形態依存性</p> <p>II 3.3. 特性計算に関する最近の動き</p> <p>II 3. 参考文献</p> <p>II 4. ま と め</p> <p>II 4. 参考文献</p> <p>付 録</p> <p>A1. 計量形態学基礎</p> <p>A1.1. 線分率、面積率、体積率の算出と計測の方法</p> <p>A1.2. 完全無方向組織における真の面積の算出方法</p> <p>A1. 参考文献</p> <p>A2. シリアルセクションングによる三次元組織データの取得</p> <p>A2. 参考文献</p> <p>A3. 三次元組織データのアーカイブ情報</p> <p>A3. 参考文献</p> <p>A4. 三次元組織モデリングのためのフェーズフィールドシミュレーションプログラム</p> <p>A5. 弾性不均質系におけるフェーズフィールド数値的弾性論</p> <p>A5.1. 算式の導出</p> <p>A5.2. 計算例</p> <p>A5. 参考文献</p>
株式会社 内田老鶴圃 〒112-0012 東京都文京区大塚3-34-3 TEL. 03-3945-6781・FAX 03-3945-6782	http://www.rokakuho.co.jp/

3D組織形態の計算例

回転楕円体

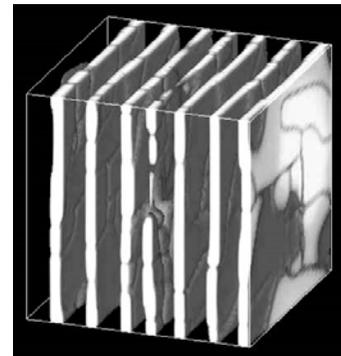
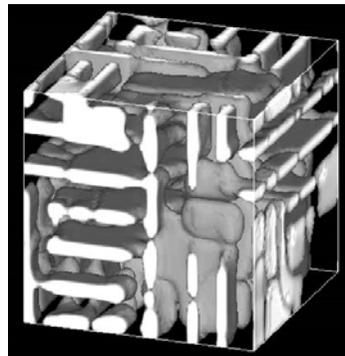


- ・体積分率
- ・介在物形状
- ・全体形態



まだら構造

変調構造

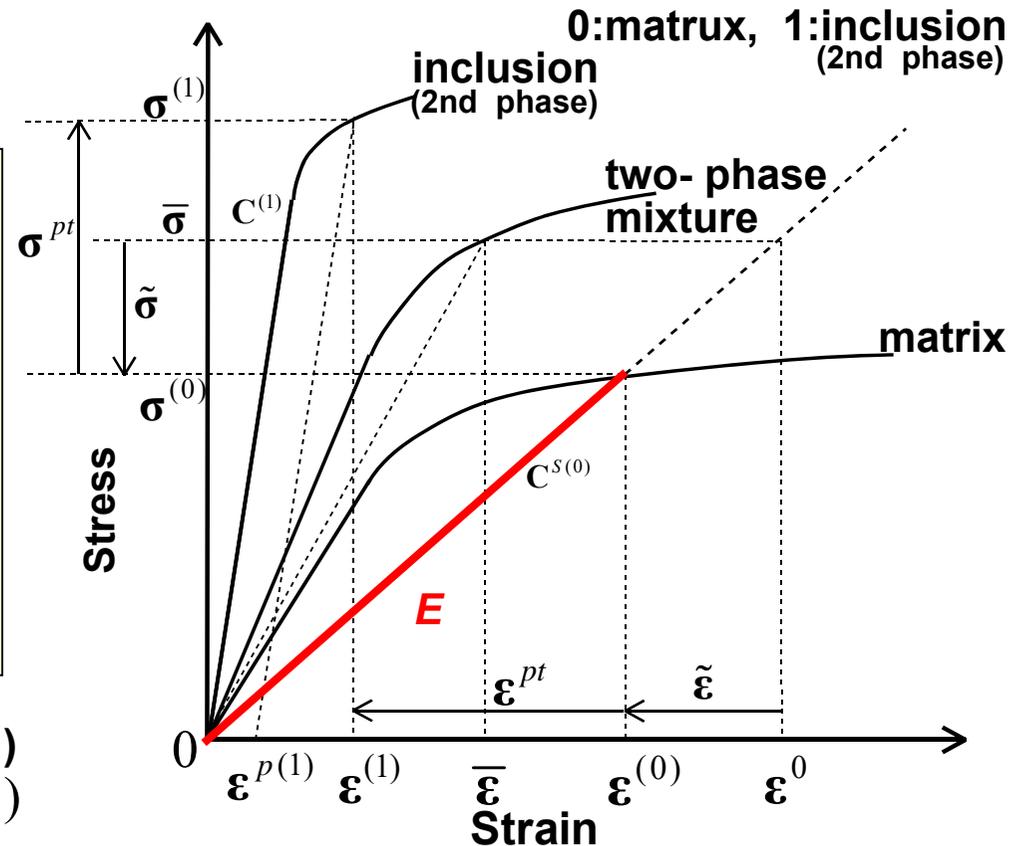


層状構造

Wengのセcant法 (現象論的な、複相組織の応力-歪曲線計算モデル)

前提条件:

- (1) 構成相単相の S-S 曲線は既知
- (2) 森・田中の平均場理論 (マイクロメカニクス)
- (3) セcant弾性率
塑性変形した母相
= セcant弾性率を持つ弾性体と仮定



$$\epsilon^0 = (C^{S(0)})^{-1} \bar{\sigma}, \quad \sigma^{(0)} = C^{S(0)} (\epsilon^0 + \tilde{\epsilon}) \quad (\text{フックの法則})$$

$$\sigma^{(1)} = C^{(1)} (\epsilon^0 + \tilde{\epsilon} + \epsilon^{pt} - \epsilon^{p(1)}) = C^{S(0)} [\epsilon^0 + \tilde{\epsilon} + \epsilon^{pt} - (\epsilon^{p(1)} + \epsilon^*)] \quad (\text{等価介在物})$$

$$\epsilon^{pt} = \underline{S}^{S(0)} (\epsilon^{p(1)} + \epsilon^*) \quad (\text{Eshelbyテンソル} \leftarrow \text{力学的平衡方程式})$$

$$\bar{\sigma} = f_0 \sigma^{(0)} + f_1 \sigma^{(1)}, \quad \rightarrow \quad \tilde{\epsilon} = -f_1 (S^{S(0)} - I) (\epsilon^{p(1)} + \epsilon^*) \quad (\text{平均場理論})$$

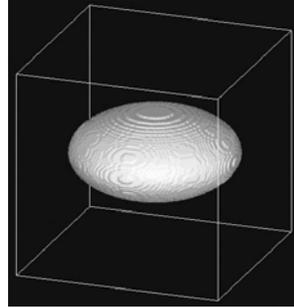
$$\bar{\epsilon} = f_0 \epsilon^{(0)} + f_1 \epsilon^{(1)} = \epsilon^0 + f_1 (\epsilon^{p(1)} + \epsilon^*)$$

Eshelbyテンソルの計算手法

$s(\mathbf{r})$: 形状関数

$s(\mathbf{r}) = 1$: inclusion

$s(\mathbf{r}) = 0$: matrix



全歪 : $\varepsilon_{ij}^c(\mathbf{r})$

eigen歪: $\varepsilon_{ij}^0(\mathbf{r}) \equiv \varepsilon_{ij}^{00} s(\mathbf{r})$

弾性歪 : $\varepsilon_{ij}^{el}(\mathbf{r}) = \varepsilon_{ij}^c(\mathbf{r}) - \varepsilon_{ij}^0(\mathbf{r})$

フック則 : $\sigma_{ij}^{el}(\mathbf{r}) = C_{ijkl} \varepsilon_{kl}^{el}(\mathbf{r}) = C_{ijkl} \{ \varepsilon_{kl}^c(\mathbf{r}) - \varepsilon_{kl}^0(\mathbf{r}) \}$, 微小歪理論: $\varepsilon_{kl}^c(\mathbf{r}) \equiv \frac{1}{2} \left\{ \frac{\partial u_k(\mathbf{r})}{\partial r_l} + \frac{\partial u_l(\mathbf{r})}{\partial r_k} \right\}$

平衡方程式: $\sigma_{ij,j}^{el}(\mathbf{r}) = \frac{\partial \sigma_{ij}^{el}(\mathbf{r})}{\partial r_j} = 0 \rightarrow C_{ijkl} \frac{\partial^2 u_k}{\partial r_j \partial r_l} = C_{ijkl} \varepsilon_{kl}^{00} \frac{\partial s}{\partial r_j} \rightarrow C_{ijkl} k_j k_l u_k(\mathbf{k}) = -i C_{ijkl} \varepsilon_{kl}^{00} k_j s(\mathbf{k})$

$$u_k(\mathbf{k}) = -i G_{ik}(\mathbf{k}) C_{ijkl} \varepsilon_{kl}^{00} k_j s(\mathbf{k}) = -i G_{ik}(\mathbf{k}) \sigma_{ij}^{00} k_j s(\mathbf{k}), \quad \mathbf{n} \equiv \mathbf{k} / |\mathbf{k}|$$

$$\varepsilon_{kl}^c(\mathbf{k}) = i \frac{1}{2} \{ u_k(\mathbf{k}) k_l + u_l(\mathbf{k}) k_k \} = G_{ik}(\mathbf{k}) k_l k_j C_{ijmn} \varepsilon_{mn}^{00} s(\mathbf{k}) = \Omega_{ik}(\mathbf{n}) n_l n_j C_{ijmn} s(\mathbf{k}) \varepsilon_{mn}^{00}$$

$$\varepsilon_{kl}^c(\mathbf{r}) = \int_{\mathbf{k}} \varepsilon_{kl}^c(\mathbf{k}) \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} = \int_{\mathbf{k}} \Omega_{ik}(\mathbf{n}) n_l n_j C_{ijmn} s(\mathbf{k}) \varepsilon_{mn}^{00} \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3}$$

$$= \left[\int_{\mathbf{k}} \Omega_{ik}(\mathbf{n}) n_l n_j C_{ijmn} s(\mathbf{k}) \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \right] \varepsilon_{mn}^{00} = \underline{S_{klmn}} \varepsilon_{mn}^{00}$$

Eshelbyテンソル

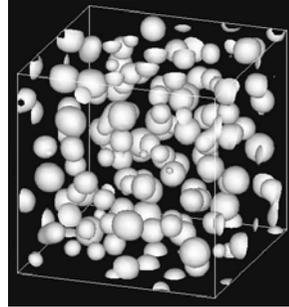
$$\left(G_{ik}^{-1}(\mathbf{k}) \equiv C_{ijkl} k_j k_l, \quad \Omega_{ik}^{-1}(\mathbf{n}) \equiv C_{ijkl} n_j n_l \right)$$

Phase-field微視的弾性論

$S(\mathbf{r})$: phase field

$s(\mathbf{r}) = 1$: inclusion

$s(\mathbf{r}) = 0$: matrix



全歪 : $\varepsilon_{ij}^c(\mathbf{r})$

eigen歪: $\varepsilon_{ij}^0(\mathbf{r}) \equiv \varepsilon_{ij}^{00} s(\mathbf{r})$

弾性歪 : $\varepsilon_{ij}^{el}(\mathbf{r}) = \varepsilon_{ij}^c(\mathbf{r}) - \varepsilon_{ij}^0(\mathbf{r})$

フック則 : $\sigma_{ij}^{el}(\mathbf{r}) = C_{ijkl} \varepsilon_{kl}^{el}(\mathbf{r}) = C_{ijkl} \{ \varepsilon_{kl}^c(\mathbf{r}) - \varepsilon_{kl}^0(\mathbf{r}) \}$, 微小歪理論: $\varepsilon_{kl}^c(\mathbf{r}) \equiv \frac{1}{2} \left\{ \frac{\partial u_k(\mathbf{r})}{\partial r_l} + \frac{\partial u_l(\mathbf{r})}{\partial r_k} \right\}$

平衡方程式: $\sigma_{ij,j}^{el}(\mathbf{r}) = \frac{\partial \sigma_{ij}^{el}(\mathbf{r})}{\partial r_j} = 0 \rightarrow C_{ijkl} \frac{\partial^2 u_k}{\partial r_j \partial r_l} = C_{ijkl} \varepsilon_{kl}^{00} \frac{\partial s}{\partial r_j} \rightarrow C_{ijkl} k_j k_l u_k(\mathbf{k}) = -i C_{ijkl} \varepsilon_{kl}^{00} k_j s(\mathbf{k})$

$$u_k(\mathbf{k}) = -i G_{ik}(\mathbf{k}) C_{ijkl} \varepsilon_{kl}^{00} k_j s(\mathbf{k}) = -i G_{ik}(\mathbf{k}) \sigma_{ij}^{00} k_j s(\mathbf{k}), \quad \mathbf{n} \equiv \mathbf{k} / |\mathbf{k}|$$

$$\varepsilon_{kl}^c(\mathbf{k}) = i \frac{1}{2} \{ u_k(\mathbf{k}) k_l + u_l(\mathbf{k}) k_k \} = G_{ik}(\mathbf{k}) k_l k_j C_{ijmn} \varepsilon_{mn}^{00} s(\mathbf{k}) = \Omega_{ik}(\mathbf{n}) n_l n_j C_{ijmn} s(\mathbf{k}) \varepsilon_{mn}^{00}$$

$$\varepsilon_{kl}^c(\mathbf{r}) = \int_{\mathbf{k}} \varepsilon_{kl}^c(\mathbf{k}) \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} = \int_{\mathbf{k}} \Omega_{ik}(\mathbf{n}) n_l n_j C_{ijmn} s(\mathbf{k}) \varepsilon_{mn}^{00} \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3}$$

$$= \left[\int_{\mathbf{k}} \Omega_{ik}(\mathbf{n}) n_l n_j C_{ijmn} s(\mathbf{k}) \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \right] \varepsilon_{mn}^{00} = \underline{S_{klmn}} \varepsilon_{mn}^{00}$$

Eshelbyテンソル

$$\left(G_{ik}^{-1}(\mathbf{k}) \equiv C_{ijkl} k_j k_l, \quad \Omega_{ik}^{-1}(\mathbf{n}) \equiv C_{ijkl} n_j n_l \right)$$

塑性変形が支配的である場合 (母相:フェライト, 介在物:パーライト)

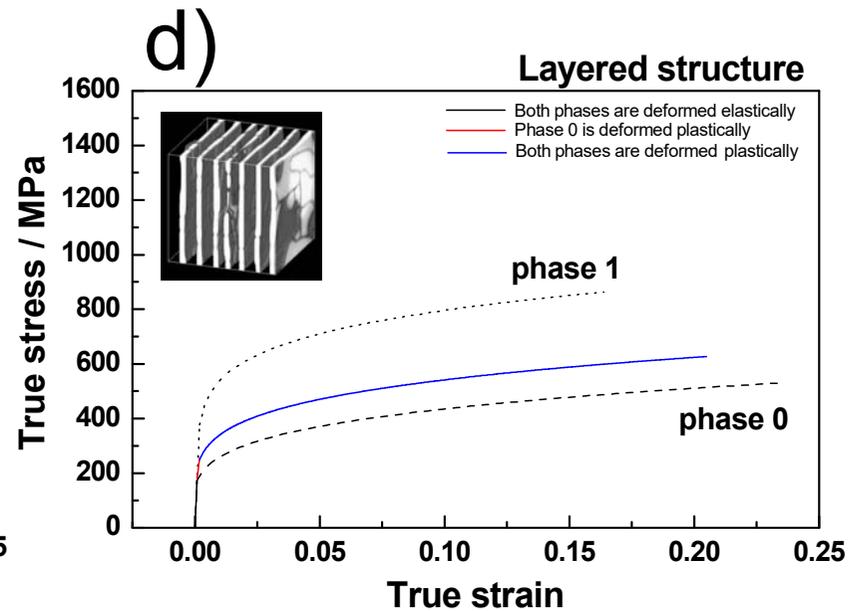
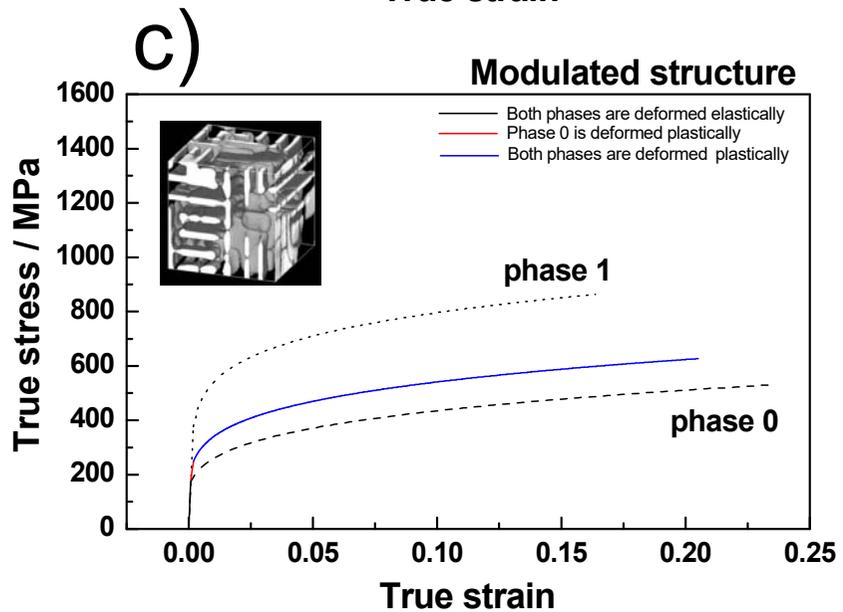
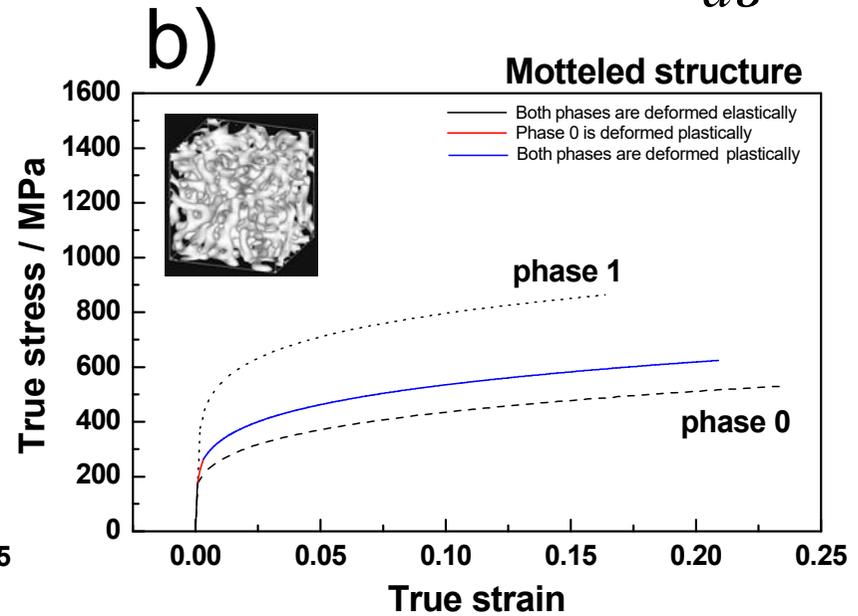
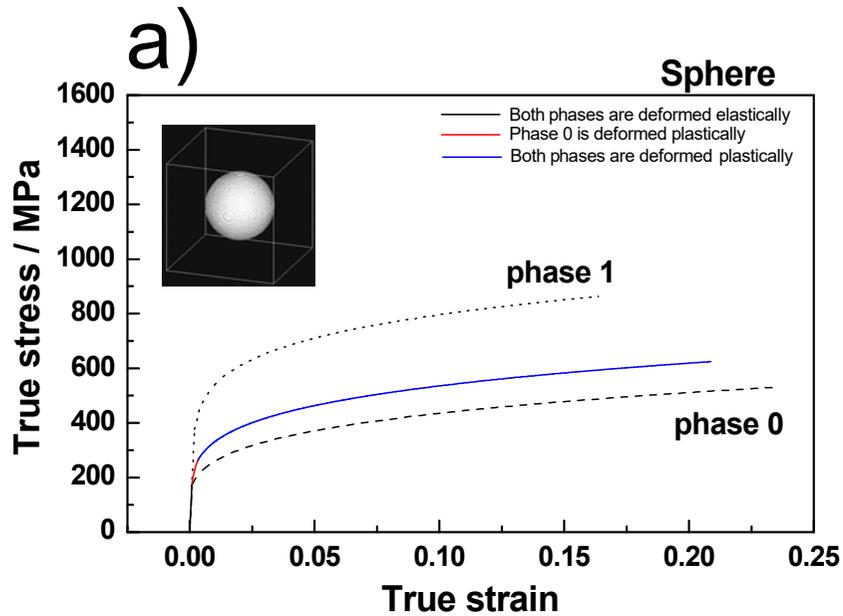
$$\sigma = 744(0.002 + \varepsilon^p)^{0.2345} \quad [\text{MPa}]$$

$$\sigma = 1160(0.001 + \varepsilon^p)^{0.1630} \quad [\text{MPa}]$$

$$E_0 = 200[\text{GPa}], \quad \nu_0 = 0.3$$

[Rudiono and Y.Tomota: Acta Mater., 45(1997), 1923]

$$\begin{array}{l} \text{くびれ} \\ \text{発生条件} \end{array} \frac{d\sigma}{d\varepsilon} = \sigma$$



結論(1)

塑性変形が支配的な場合、複相組織全体の応力-歪曲線は、介在物の形状や全体組織形態にはほとんど依存しないが、体積分率には大きく依存する。

塑性変形が支配 ⇒ 球近似1体問題で、体積分率のみを考慮すれば良い。

また塑性変形の後半で、加工により、介在物形状が変化することも、以上から結果に影響しないことがわかる。

介在物が硬い場合

(母相:フェライト, 介在物:ベイナイト)

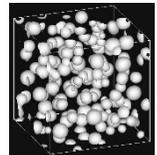
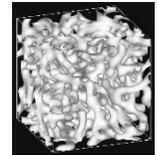
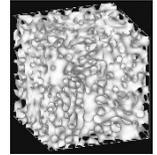
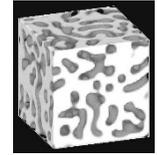
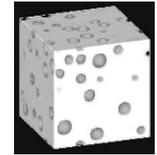
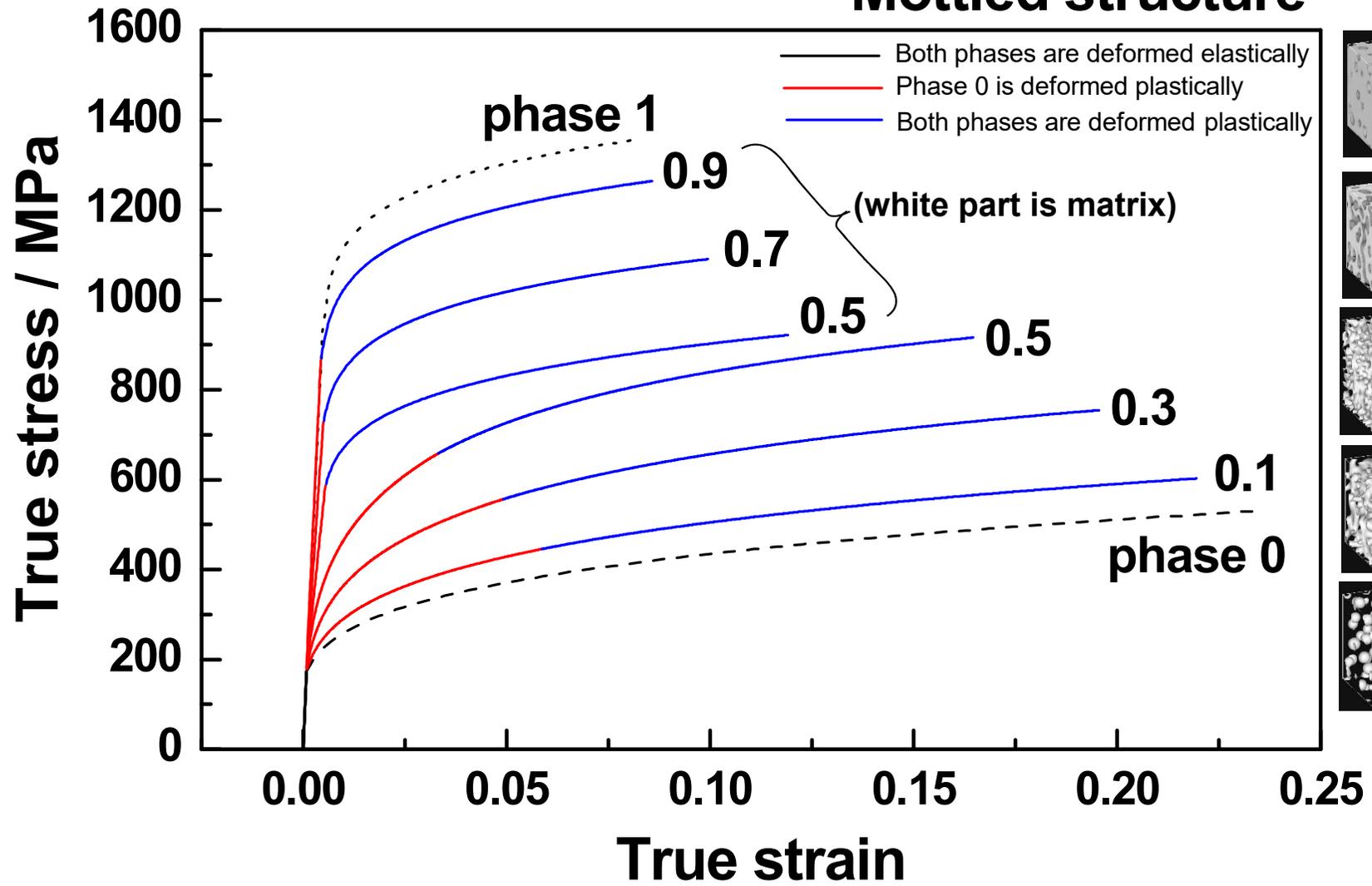
$$\sigma = 744(0.002 + \varepsilon^p)^{0.2345} \quad [\text{MPa}]$$

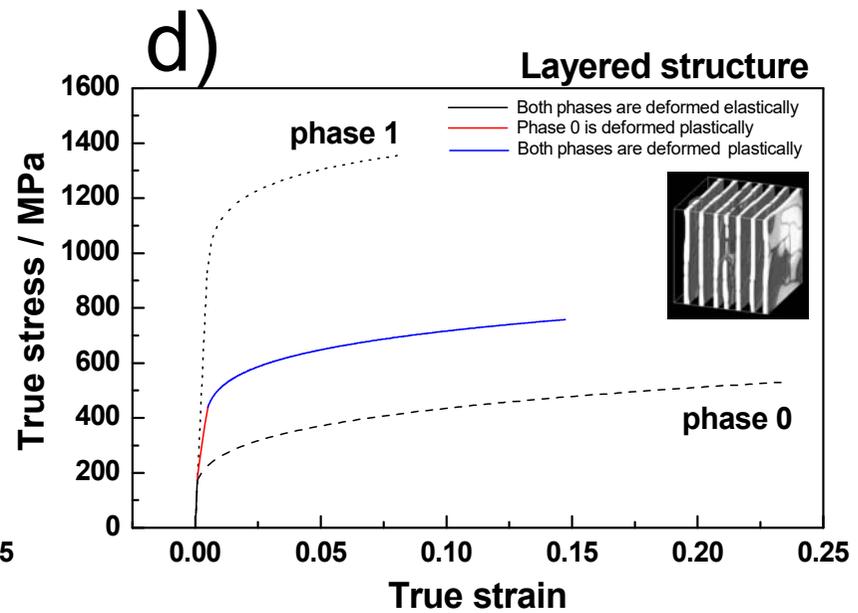
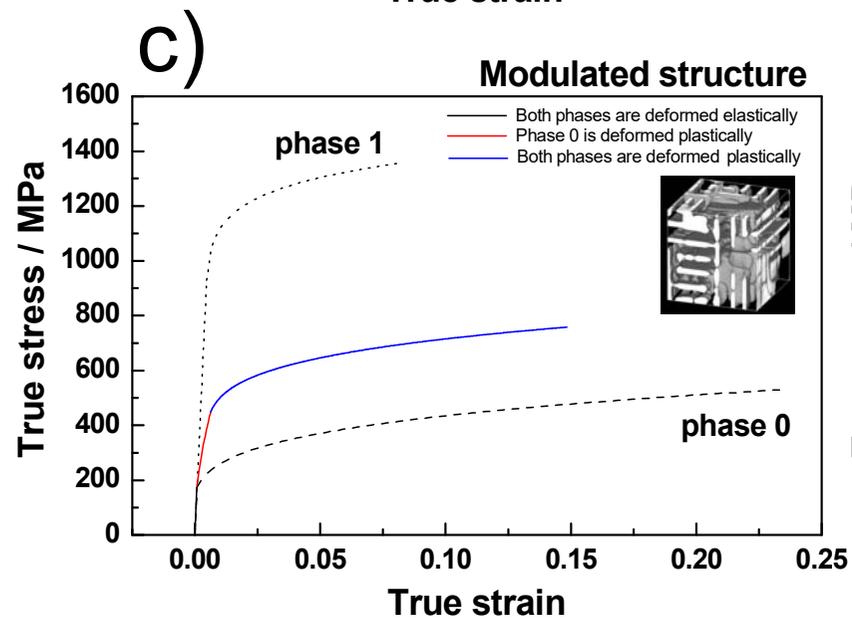
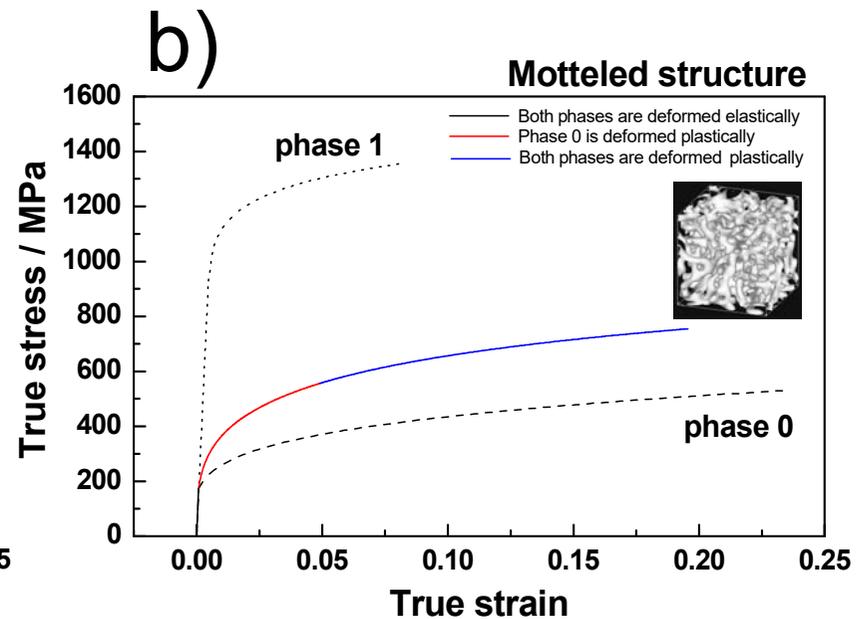
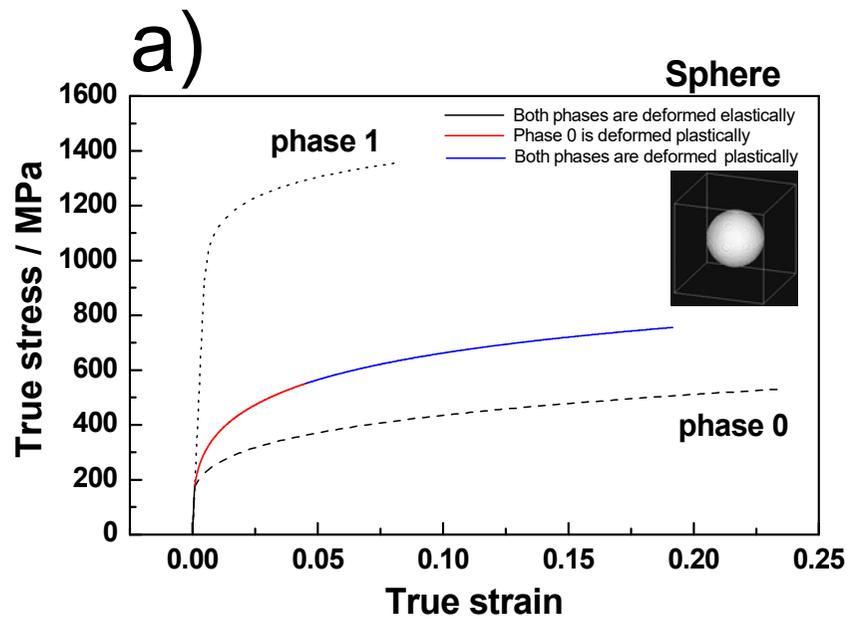
$$\sigma = 1643(0.0005 + \varepsilon^p)^{0.0751} \quad [\text{MPa}]$$

$$E_1 = 200[\text{GPa}], \quad \nu_1 = 0.3$$

[Rudiono and Y.Tomota: Acta Mater., 45(1997), 1923]

Mottled structure



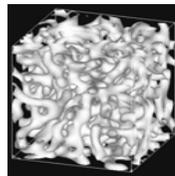


結論(2)

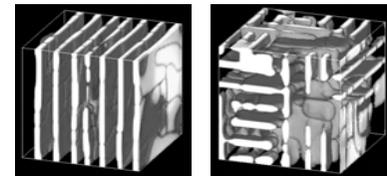
弾性変形の寄与が大きな条件下では、複相組織全体の応力-歪曲線は、体積分率だけでなく、介在物の形状に大きく依存する。

【弾性変形の関与が大きい場合(硬い介在物)】

- 体積分率だけでなく、介在物の形態まで考慮する必要がある。
- 引張り方向に対する組織形態の異方性が、応力-歪曲線に影響を及ぼす。
- ランダム組織と層状組織との差は大きいですが、層状組織間(1次元および3次元層状組織)の差は小さい。



ランダム組織

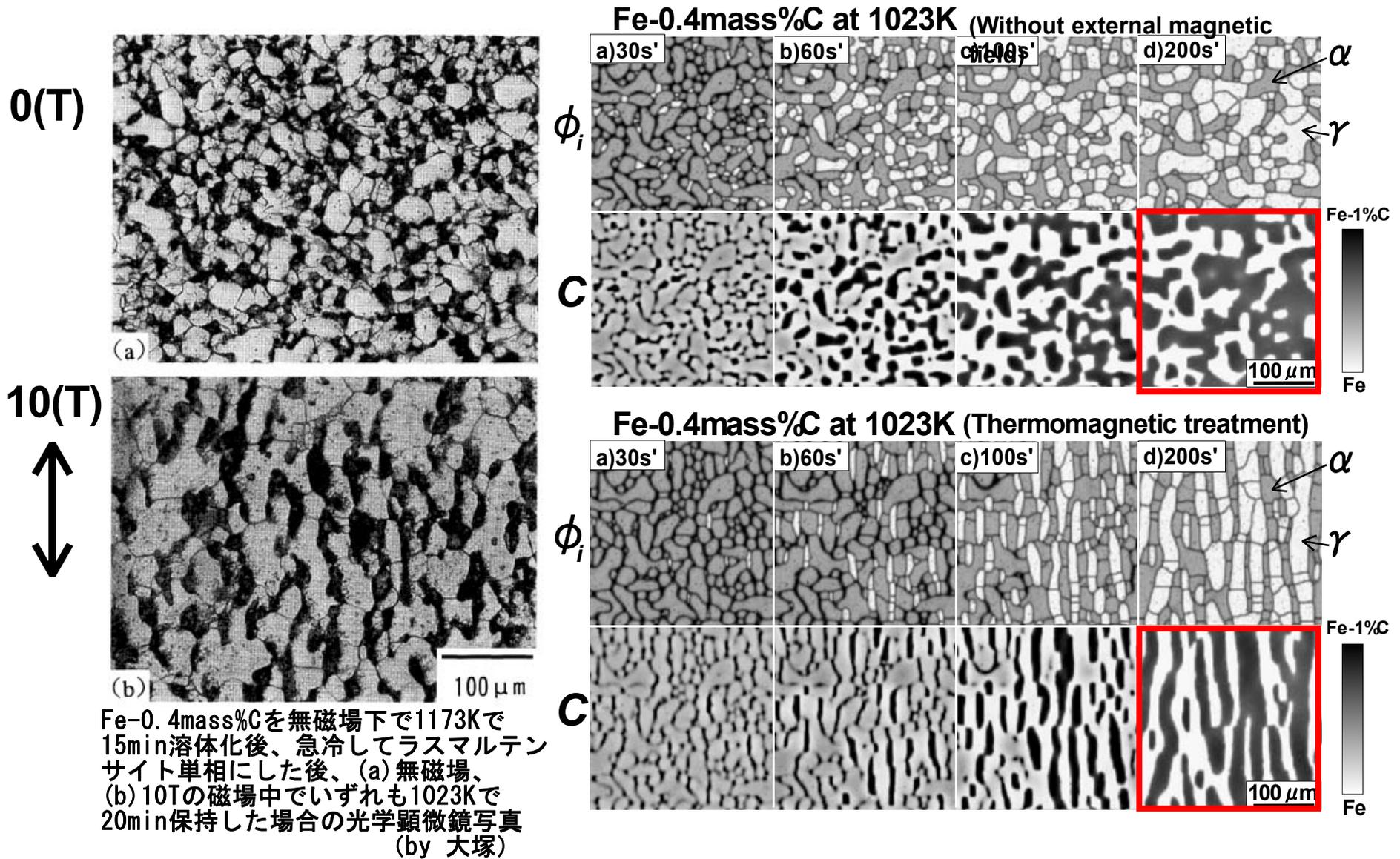


層状組織

上記は変形初期に対応するので、変形による介在物形状の変化は小さいと仮定できる点も重要。

PF法から力学特性までの連続解析

組織形成シミュレーションから力学特性計算へ



改良セカント法に基づく応力-歪曲線の計算

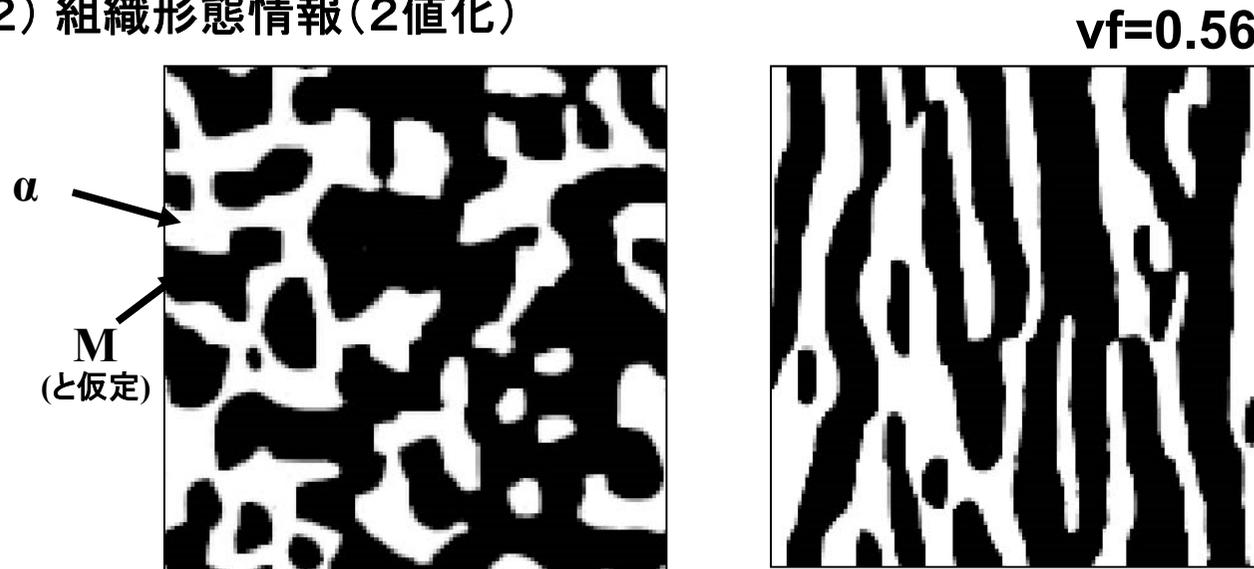
(1) 計算に用いた入力パラメータ (フェライト+マルテンサイト)

$$\sigma^\alpha = 744.5(0.002 + \varepsilon^p)^{0.2334} \quad [\text{MPa}]$$

$$\sigma^M = 1514.0(1.0 \times 10^{-7} + \varepsilon^p)^{0.056} \quad [\text{MPa}]$$

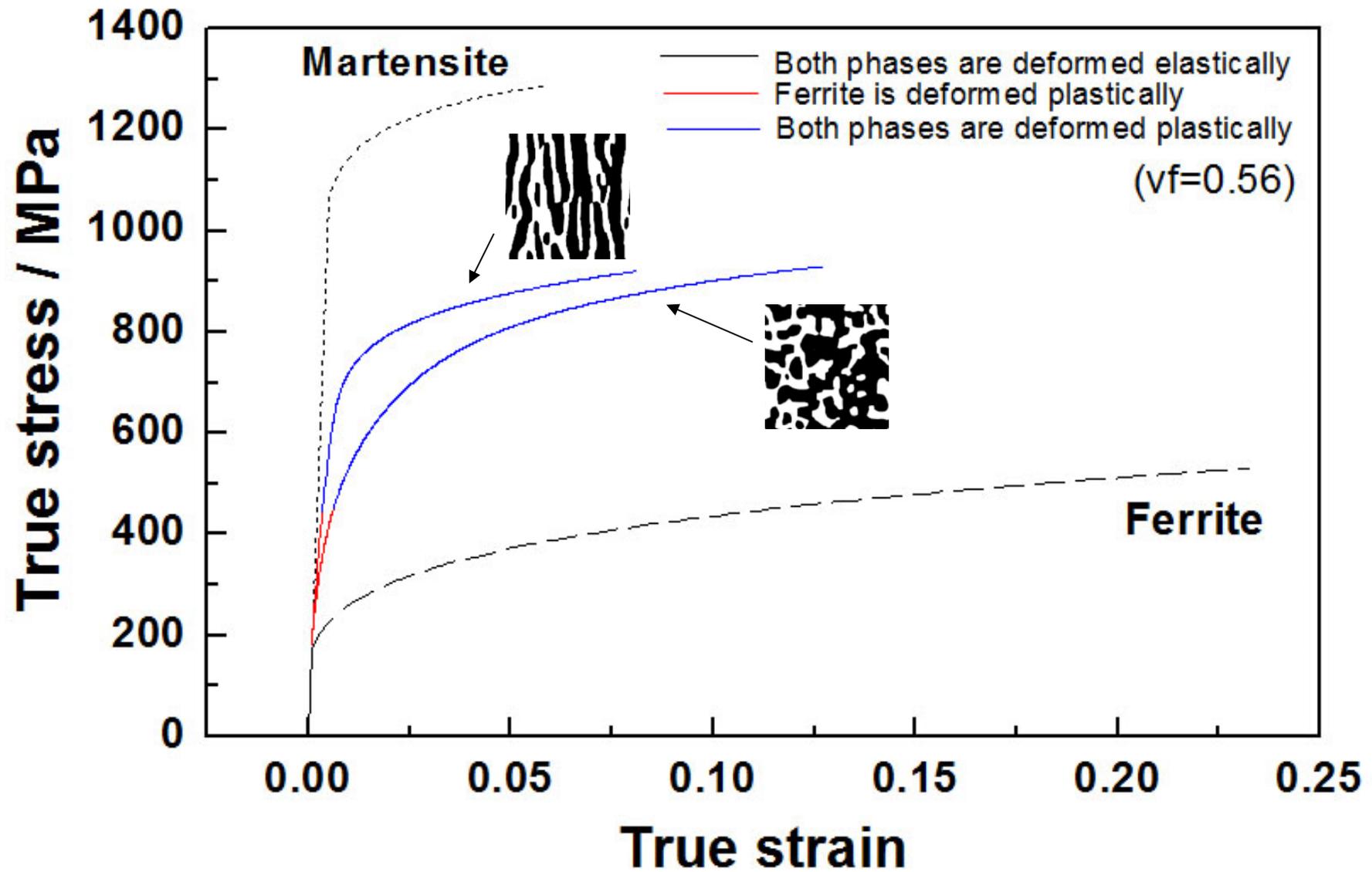
$$E_1 = 200[\text{GPa}], \quad \nu_1 = 0.3 \quad (\text{by Rudiono and Tomota})$$

(2) 組織形態情報(2値化)



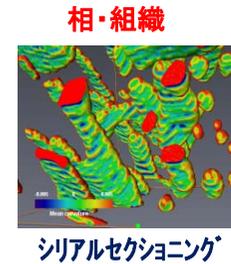
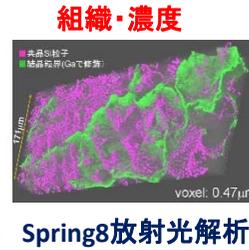
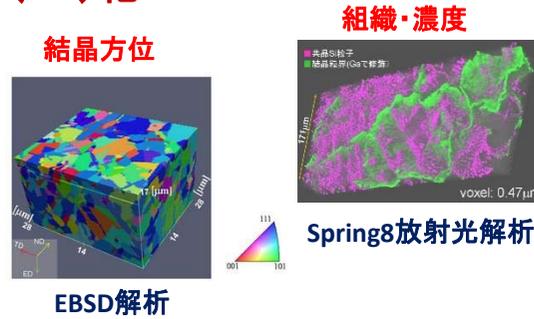
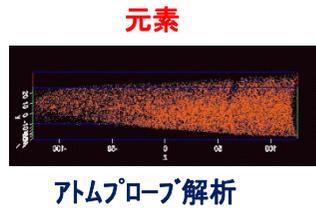
FFT(奥方向は合同と仮定) → Eshelbyテンソル数値解析

Constriction condition: $\frac{d\sigma}{d\varepsilon} = \sigma$



マテリアルズインテグレーションの実現に向けて

【実験】 近年、スケール・次元・変数の種類の拡大が加速
→測定データのビッグデータ化



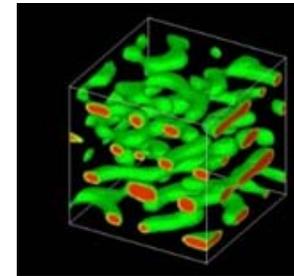
データ氾濫時代の
到来

×

【シミュレーション】 多くの分野において材料計算科学・工学の同時進展が著しい

- ・ 第一原理計算(電子状態計算)
- ・ 計算状態図(CALPHAD法)
- ・ 第一原理計算活用型の状態図解析
- ・ 分子シミュレーション(MD, MC等)
- ・ 古典的核形成-成長モデル(L-Sモデル, Nモデル等)
- ・ 組織形態形成シミュレーション(フェーズフィールド法)
- ・ 組織形態を活用する力学解析法(均質化法やセカント法)
- ・ 転位を直接考慮した力学解析法(結晶塑性理論)
- ・ 集合組織解析法と集合組織を考慮した変形挙動解析
- ・ バウシinger効果までも扱える精緻な塑性ポテンシャル理論

[日本鉄鋼協会「計算工学による組織と特性予測技術II研究会(H22-H24, 主査: 小山敏幸)」より]



シミュレーションの
高度化

||

理論・実験・シミュレーション・ビッグデータを統合する数学的手法の出現:
[CREST「シミュレーション技術の革新と実用化基盤の構築」: 研究課題「先端的データ同化手法と適応型シミュレーション研究」, H16-H22, 代表: 樋口知之]

Data Assimilation
(データ同化)

上記の統合システム = マテリアルズインテグレーション
[部材設計・プロセス設計の圧倒的効率化]

新たな課題

通常、マルテンサイト単相の応力-ひずみ曲線を実験的に決定することは簡単ではない。



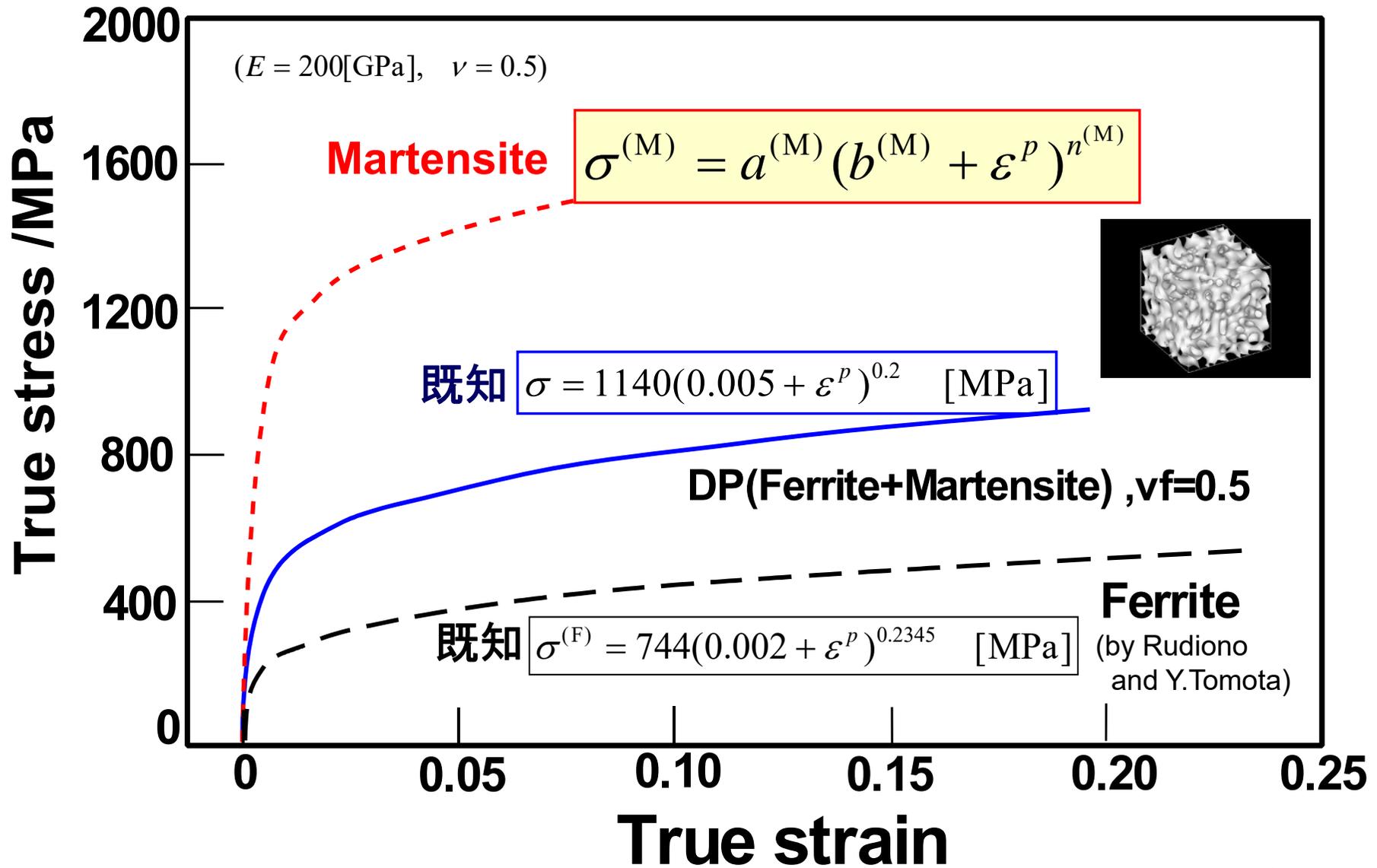
一方、DP鋼自体の応力-ひずみ曲線の実験は比較的容易である。



またフェライト単相の応力-ひずみ曲線についても精度の高いデータが入手しやすい。

⇒マルテンサイト単相の応力-ひずみ曲線を逆問題式に決定できないだろうか？

問題設定: 改良型セcant法と粒子フィルタを用いて、マルテンサイト単相の
スウィフト式のパラメータを推定する。



データ同化(粒子フィルタ)の計算手順(パラメータ推定の場合:MCMCと同じ)

問題設定: マルテンサイト単相の応力-ひずみ曲線: $\sigma = a(b + \varepsilon)^n$ のパラメータ: (a, b, n) を推定

システムモデル: $\mathbf{X}_{t|t-1} = \mathbf{X}_{t-1|t-1} + \mathbf{V}_t$ (最適化対象のパラメータの発展式)

観測モデル: $\sigma_t = h(\mathbf{x}_{t|t-1}) + w_t$ ($h(\mathbf{x})$ はセカント法のプログラム, σ_t は二相鋼の応力)
(観測ノイズ)

$$\mathbf{X} = (a, b, n)^T$$

同化対象のパラメータベクトル

$$\left\{ \mathbf{X}_{0|0}^{(i)} \right\}_{i=1}^N : \text{パラメータセットを分布として表現(ここでは } N=4000 \text{)}$$

$$\mathbf{X}_{t|t-1}^{(i)} = \mathbf{X}_{t-1|t-1}^{(i)} + \mathbf{V}_t^{(i)} : \text{パラメータの分布をノイズにて少し変化させる}$$

(システムノイズ)

$$\begin{matrix} \updownarrow \\ (\varepsilon_t, \sigma_t) \end{matrix}$$

二相鋼全体の
応力-ひずみ
曲線のデータ

$\lambda_t^{(i)} = p(\sigma_t | \mathbf{x}_{t|t-1}^{(i)})$: 個々のパラメータの当てはまり具合を確率分布にて表現(尤度計算)

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi R_t}} \exp \left[-\frac{1}{2} \left(\sigma_t - h(\mathbf{x}_{t|t-1}^{(i)}) \right)^T R_t^{-1} \left(\sigma_t - h(\mathbf{x}_{t|t-1}^{(i)}) \right) \right]$$

(R_t : 観測ノイズの分散)

$$\mathbf{X}_{t|t-1}^{(i)}$$

1~(t-1)までの
データを用
いた時のt番
目の推定値

$$\beta_t^{(i)} = \frac{\lambda_t^{(i)}}{\sum_{i=1}^N \lambda_t^{(i)}} \Rightarrow \left\{ \mathbf{X}_{t|t-1}^{(i)} \right\}_{i=1}^N \rightarrow \left\{ \mathbf{X}_{t|t}^{(i)} \right\}_{i=1}^N$$

尤度の規格化

尤度に合わせてパラメータセットを更新(復元抽出)
(より一致しているパラメータが生き残る)

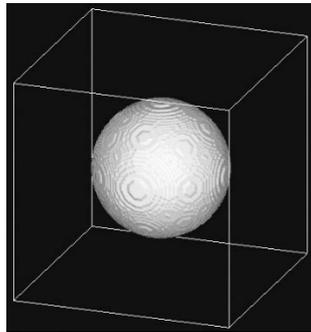
DP600の文献データを用いた解析

DP600: $\sigma = 1140(0.005 + \varepsilon^p)^{0.2}$ [MPa] (by S. Basak *et al.*)

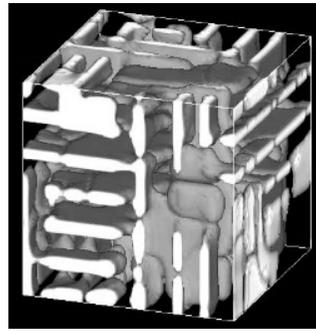
Ferrite: $\sigma^{(F)} = 744(0.002 + \varepsilon^p)^{0.2345}$ [MPa] (by Rudiono and Y. Tomota)

$(E = 200[\text{GPa}], \quad \nu = 0.5, \quad f_0 = 0.3)$

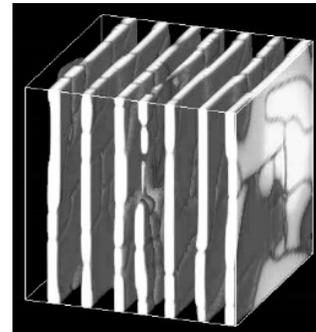
(a) 球



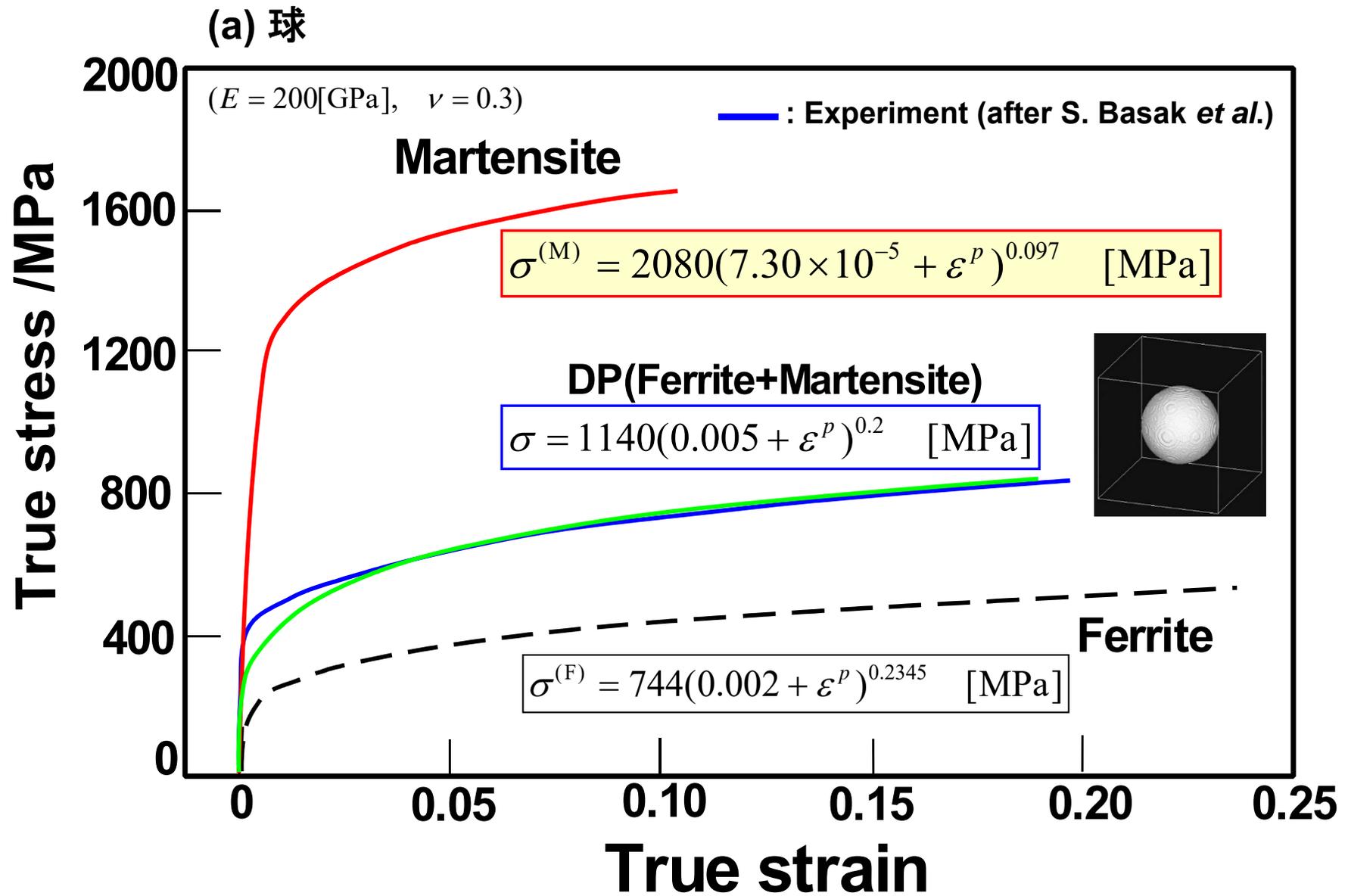
(b) 変調構造



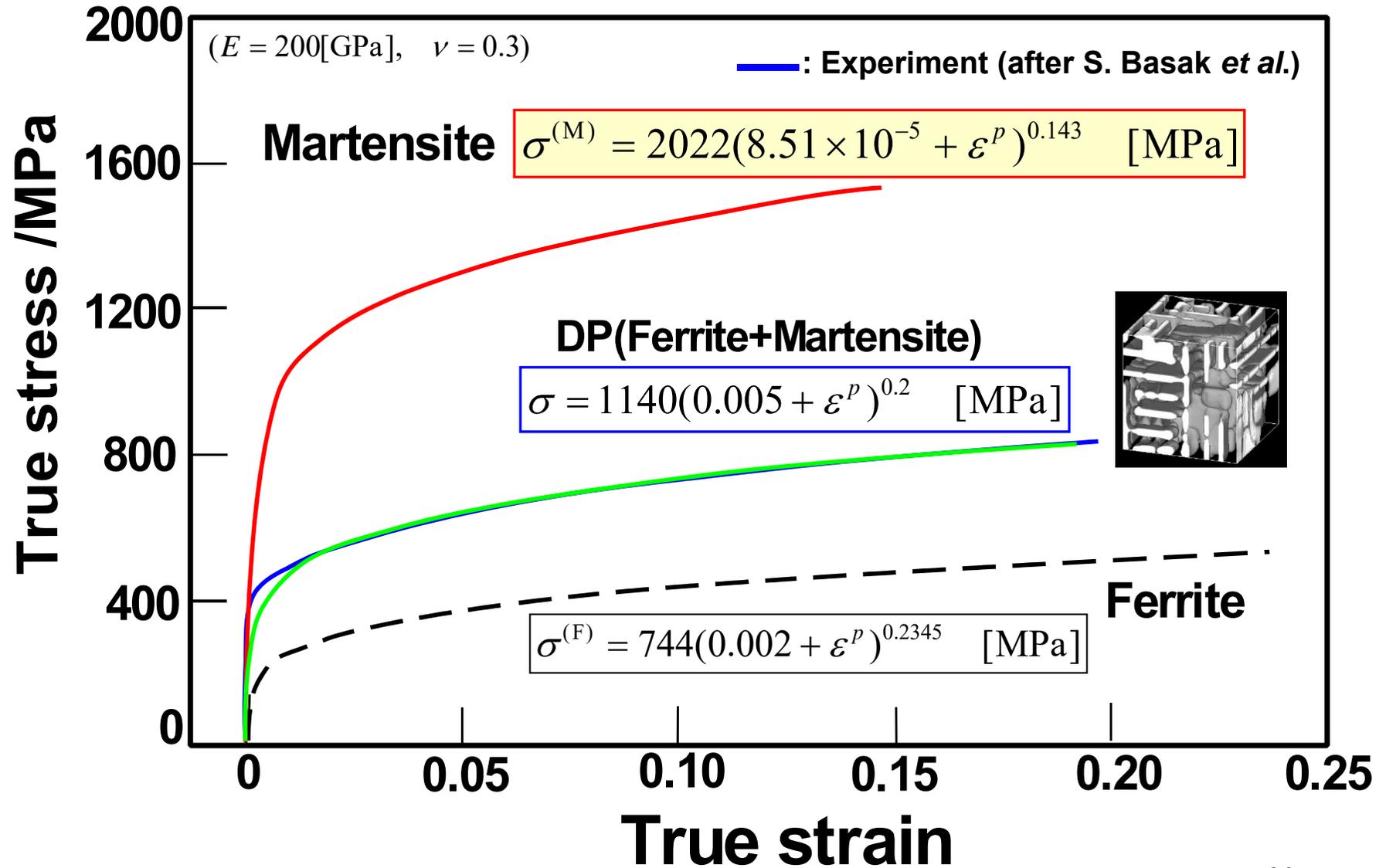
(c) 層状構造



考慮した組織形態



(b) 変調構造



マテリアルズ・インフォマティクス/マテリアルズ・インテグレーション における材料設計のまとめ

1. モデル内の未知定数を逆問題解析にて推定
2. シミュレーションで変化させる因子を選択
 - ・物質定数(粒界相の磁性、結晶粒サイズ、結晶方位、・・・)
 - ・プロセス定数(温度、外部磁場、・・・)
 - ・組織情報(体積分散、界面積、界面形状、配向性、・・・)
3. 因子を変化させたシミュレーション(計算によるデータ取得)
4. 因子とシミュレーション結果との関係をニューラルネット等の非線形階層モデルにより表現
5. 学習済モデルによる各因子の感度解析や広域探索
⇒ **現象の支配因子の重要度・最適条件を迅速定量化**

キーポイント:
未知定数の推定

キーポイント:
重い複雑な計算を軽く表現能力の高い計算に転写し解析

シミュレーションの計算が軽い場合には、ニューラルネット等の近似モデルは不要。しかし計算が重い、もしくは現象が複雑な場合には、上記形式が有効(複雑な現象について近似モデル自体が得られる点も大きなメリット)。以上の方法論は、実験による材料設計の場合も全く同様となる。実験とシミュレーションを合わせて上記手法を進めると、物理的現象理解と因子・感度解析、また広域探索・最適化を同時に進めることができ、同時に簡略定量モデル(つまり学習済近似システム)まで手元に残ることになる。