

マルチレベルモデリングによる微細組織変化を  
考慮した高温変形解析法の開発

(核燃料サイクル公募型研究に係わる共同研究報告書)

2003年5月

核燃料サイクル開発機構  
大洗工学センター

本資料の全部または一部を複写・複製・転載する場合は、下記にお問い合わせください。

〒319-1184 茨城県那珂郡東海村村松4番地49  
核燃料サイクル開発機構  
技術展開部 技術協力課  
電話：029-282-1122 (代表)  
ファックス：029-282-7980  
電子メール：[jserv@jnc.go.jp](mailto:jserv@jnc.go.jp)

Inquiries about copyright and reproduction should be addressed to :  
Technical Cooperation Section,  
Technology Management Division ,  
Japan Nuclear Cycle Development Institute  
4-49 Muramatsu , Tokai-mura , Naka-gun , Ibaraki 319-1184 ,  
Japan

© 核燃料サイクル開発機構  
(Japan Nuclear Cycle Development Institute)  
2003

## マルチレベルモデリングによる微細組織変化を考慮した

## 高温変形解析法の開発

(核燃料サイクル公募型研究に係わる共同研究報告書)

相澤 龍彦\*1)

## 要旨

原子力構造・機器の安全性、特に長期間にわたる安全保障を説明するための高信頼性・統一的評価手法開発の第1段階として、均質化法に基礎を置くマルチレベルモデリングによる実材料組織を考慮・記述した高温変形、損傷現象評価手法を開発した。この手法の特徴は以下の5点にまとめられる。

- (1) 階層化：試験片・部材レベルの高温変形と材料組織レベルの高温変形・破壊とを独立して解析することで、材料固有の構成関係および高温破壊マイクロメカニクスのみでマクロな損傷も評価できる。
- (2) 連成化：階層化の各レベルにおいて、変形場－温度場－拡散場の相互作用を考慮することが可能となる。
- (3) 実組織モデル：組織写真から画像処理－自動要素分割機能を併用することで、多相の物質の連続体力学挙動を記述できる。特にボイド発生なども適切に取り扱うことが可能となった。
- (4) 高温破壊マイクロメカニクス：従来のマイクロメカニクスと異なり、ボイド生成・ボイド合体・クラック形成を直接取り扱うことで、無損傷の材料から破断直前の材料までを表現することができるようになった。
- (5) 試験片・部材損傷：材料組織上の力学量から、均質化した力学特性を解析し、損傷を受けた組織の損傷度を推定することができた。

これらの特徴により、これまで全くといってよいほど利用されてこなかった材料組織データと、試験片レベルでの実験データならびに部材レベルでの実験データとを結合することが可能となった。

---

\*1): 東京大学国際・産学共同研究センター

Coupled, macro-micro modeling based on real microstructure for  
hot deformation

Tatsuhiko Aizawa \*1)

Abstract

Coupled, macro-micro modeling based on real microstructure have been developed for hot deformation of structures and equipments of nuclear plant. This modeling method is based on the homogenization method and related computational and theoretical mechanics for materials. Its features are summarized below.

- (1) Hierarchical modeling: Hot deformations of structural members and specimens as well as deformation of microstructure are evaluated independently. Therefore, macro-level damage can be evaluated only with the constitutional relations among materials and micro-mechanics of hot deformation.
- (2) Coupled modeling: Models for deformation, thermal conduction and diffusion are strongly coupled in each level of hierarchy.
- (3) Real microstructure: Automatically modeling based on real microstructure taken from optical microscope enabled to describe the continuum mechanics of polycrystalline materials. Especially void generation can be treated appropriately.
- (4) Micro-mechanics of hot deformation: Degradation procedure of materials from virgin materials to failure can be expressed because void generation, void coalescence and crack formation are treated directly.
- (5) Damage of structural members and specimens: Damage of structural members and specimens could be evaluated from homogenized mechanical properties calculated from mechanical properties of micro-structure.

Developed modeling method makes full use of the micro-structure obtained from microscopic observation and experimental data of mechanical properties of structural members and specimens toward the quantitative evaluation of material and structural integrity.

---

\*1): Center for Collaborative Research, The University of Tokyo

## 目次

1. はじめに	1
2. 本論	3
2-1 研究開発の方法	3
(1) マルチレベルモデリング	3
(2) 均質化法の基礎	6
(3) 均質化法の一般的定式化	7
(4) 線形弾性問題に対する均質化法の定式化	10
(5) 拡散場における均質化法の定式化	12
(6) 温度場における均質化法の定式化	14
2-2 研究開発の結果	16
(1) 実組織のモデリング	16
(2) 連続体力学からのメゾスコピックモデル	18
(3) 高温変形の基礎	19
(4) 組織レベルモデリングにおけるマイクロメカニクス	23
(5) シミュレーション方法	26
(6) 温度場における均質化法の定式化	14
2-3 結果の考察・評価	30
(1) 一定応力条件	30
(2) 一定変位条件	30
(3) A パラメータ及び TRD508 によるシミュレーション結果の評価	31
(4) 均質化法を用いたクリープ進展に伴う剛性率低下現象の評価	31
3. おわりに	41
[謝辞]	41
参考文献	41

## 図表一覧

## 表一覧

- 表 1 場の変数と支配方程式  
 表 2 三重点及び通常界面における、幾何学要素パラメータ  $f(a)$  の比較  
 表 3 幾何学要素パラメータと荷重方向との成す角による界面要素の分類  
 表 4 シミュレーションに用いた代表的パラメータ (SUS304, 538°C)

## 図一覧

- 図 1 計算対象スケールと解析手法の関係  
 図 2 全体構造物と微細構造  
 図 3 代表的なクリープ曲線  
 図 4 自己拡散の活性化エネルギーとクリープ活性化エネルギーの比較  
 図 5 変形機構図の一例 A-転位すべり, B-べき乗則クリープ (拡散+転位), C-Coble クリープ, D-Nabarro-Herring クリープ, E-弾性変形  
 図 6 粒界におけるボイドの形状  
 図 7 304 ステンレス合金の通常粒界で観察されるボイドのサイズ及び形状 (550°C, 定常ひずみ 0.5%)  
 図 8 シミュレーション方法のフローチャート  
 図 9 荷重との成す角に基づき粒界の分類を行う (boundary mapper)  
 図 10 一定荷重条件におけるシミュレーション結果の概略 (横軸: クリープ寿命で規格化した時間、縦軸ひずみ) - 計算時間 90000 時間、最小臨界エネルギー  $G^*=4.0e^4 \text{ J/m}^3$ 、一定荷重 70MPa  
 図 11 クリープ進展に伴う組織の時間変化 (相当応力分布)  
 図 12 クリープ進展に伴うボイド領域 (面積) の時間変化 (一定荷重条件)  
 図 13 一定変位条件におけるシミュレーション結果の概略 (横軸: クリープ寿命で規格化した時間、縦軸ひずみ) - 計算時間 90000 時間、最小臨界エネルギー  $G^*=4.0e^4 \text{ J/m}^3$ 、一定変位 0.05%、0.25%  
 図 14 クリープ進展に伴うボイド領域 (面積) の時間変化 (一定変位条件)  
 図 15 TRD によるボイドの定量的評価  
 図 16 パラメータ A 法による評価の概略 (全粒界に対する損傷粒界の割合)  
 図 17 シミュレーション結果に対して用いた直線群  
 図 18 クリープ進展に伴うパラメータ A 値の変化  
 図 19 クリープ進展に伴う、無損傷状態で規格化した剛性率の時間変化

## 1、はじめに

原子力工学では、これまでに、さまざまな事故・問題点が報告され、論じられてきた。最近の課題の根本は、情報公開性・技術倫理とも関係した、安全性の認識論と深く関わっており、単なる技術論では終端できない領域にまで深く浸透している。これからの原子力構造・機器の安全性、特に長期間にわたってその安全性を保証する保全工学においては、この根幹の問題意識を十分に自覚しつつ、新たな手法により高信頼度の保全のあり方を示していく必要がある。

これまでの原子炉容器の安全性に関わる安全性の議論においても、事故時における Severity に応じて、評価対象部位に想定クラックを考え、その外部応力評価などに破壊力学を積極的に適用することで、論理的に議論を行ってきた。これからの保全工学においても、この事実を踏まえ、現実を直視し、説明責任を果たすことができる技術フレームを作ることが、新しく展開しようとする手法が不可欠と思われる。ただし、国民に広く安全・安全安心を保証するには、クラックなどのように「見える材質変化」を予測するだけでは十分な説明責任を果たす手法とはなり得ない。クラックが生じる前に対処すべき手法はないのか、クラックを許容しつつ原子炉をどのように運転するのかなど、「見える材質変化」予測のみでは、想定される事故への対応、生じたクラックを含む構造機器の安全性保証を信頼性ある手法で説明することは困難と思われるからである。

「見えない内部変化」を伴う異常をどのように定量化し、事前に評価を行うかが、安全安心への信頼度を向上する上で重要となる。従来の超音波・磁気探傷などの手法をさらに凌駕する手法も一方では検討されており、原子力構造物あるいは機器の構成材料の内部変化を、非破壊でしかも定量的に評価する手法も格段のスピードで開発されている。したがって、「見えない材質変化」を、非破壊定量評価手法における物理的あるいは化学的データとして位置づけられることは可能になりつつある。したがって今後は、それらの膨大なデータと材質変化、さらにはその変質からの材料組織レベルの欠陥生成、そして最終的には構造物・機器における破損・損傷進展までを、科学的に説明する基盤整備が課題となる。

従来の非破壊評価では、例えば超音波により構造材中の欠陥を検出する場合、検出限界・プレクラックなど破壊力学的議論が多々行ってきた。その議論では、技術的に検知できる合理的な欠陥をいかに探査すべきか、潜在クラックの大きさをいかに設定すべきなどに終始し、統一的な評価フレームでの体系化が大きく遅れた経緯もある。さらに、これまでの工学手法では、検出、発見された欠陥の個別事象に応じて、破壊のメカニズムとしての疲労・クリープ・相互作用など個別の知識で説明しようとしてきたが、実際の損傷・クラックが特定のア

ルゴリズムのみで生じるとは考えられず、また個々の破壊メカニズムによる説明で現実の事故事象が説明された例はむしろ少ない。

今日にいたるまで同様な事故・報告は続いており、社会にとっては国民の安全安心の担保はほとんどなされていない感をぬぐい得ない。個別知識の累積ではなく、非破壊定量評価の格段の進歩をさらに促進するデータ駆動の知識として、使用中材質変化を予測する材料科学を構築する方向性が必要である。

米国金属学会が新しい国際的雑誌として Practical Failure Analysis を発刊した理由も、メカニズム・アルゴリズムの進展を駆動力とする材料科学・材料工学とは別に、現実の事故・損傷破壊事象をいかに記述、説明するかの重要性に留意したことによる。特に、実際の材料情報をどこまで考慮して、損傷、破壊を記述するかは、最近の論文例でもきわだっている。本共同研究は、保全工学で求められる材質変化予測の統一フレームを目標として、その第1段階として、マルチレベルモデリングによる材質評価の可能性を考える。対象としては、もんじゅで使用されるステンレス配管とし、その配管材料の高温変形、損傷現象を、実材料組織を考慮して記述する方法を開発する。すなわち、使用前の材料組織写真から、配管・部材レベルの高温変形特性を記述する客観的なユニットセルを抽出し、その上で、実験室規模で行われた組織観察などを基に、高温損傷メカニクスを構築する。多結晶材料組織をそのまま取り扱い、主として粒界で生じるポイド形成、ポイド合体、クラック形成を予測する。一方、上記の材質変化を時刻暦解析することで、試験片、部材レベルでの構成関係の変化ならびに損傷度の変化を予測する。

この方法では、高温損傷メカニクスを実組織上で行うことができるため、応力・変位条件などを合致させれば、実際の組織写真の情報・データと比較検討しながら、材料組織レベルでの高温変形、高温損傷メカニクスのより実際に近い形で整備することができる。同時に、試験片・部材レベルの損傷進展などに関する情報の比較から、目標とする材質予測による損傷評価を定量化することが可能である。さらに、少なくとも理論的には、上記の材料組織レベルの損傷進展と、試験片・部材レベルの負荷履歴とを階層化して解析することも可能であり、部材レベルでの力学条件と部位ごとの材料組織変化との対応も考察することも期待できる。



## 2、本論

ここでは、開発した解析手法の内容を中心にまとめるとともに、解析手法の高温変形シミュレーションへの適用ならびに高温損傷評価への適用性について考察する。

### 2-1 研究開発の方法

#### (1)マルチレベルモデリング

材料を対象としたシミュレーションモデルは、組織・構造を媒体にして材料特性を予測するものであるが、図 1 に示すとおり、対象とする系の原子数に応じて、ミクロ（原子レベル）、メゾスコピック（中間レベル、組織の構成因子）、マクロ（平均的組織因子）の三つの階層に分けられる。

マクロモデルでは対象となる原子数がアボガドロ数以上で、熱力学を基礎とし、物質間に働く力として相互作用係数を考え、拡散方程式を用いて物質の動きを平均場理論により解析する方法や、連続体力学に基づき、適切な構成方程式を用いて有限要素法などによる応力分布を解析することが主体となる。

一方ミクロモデルは原子単位の動きを追跡し、その平均としてマクロ現象を理解しようというものである。そこでは、非経験的な計算が指向される。すなわち、原子間の相互作用を各原子の電子状態を考慮して量子力学的に計算し、原子の運動は古典力学である Newton の運動方程式により計算するという第一原理分子動力学によるシミュレーションが行われる。ミクロモデルによるシミュレーションは、実験的に決められるパラメータが必要無いので、仮想的な材料でもその材料の挙動（現象）を予測することが原理的には可能であるが、マクロモデルに比べて計算量が膨大であり、現在のスーパーコンピュータをもってしても、数百原子程度しか扱うことが出来ないため、非常に限られた問題にしか適応できない。さらに、扱える時間幅も限られており最大でも pico 秒オーダーを扱えるに留まる。

そこで、中間的なモデルとしてメゾスコピックモデルが考えられている。この領域では、原子単位またはセル単位の挙動を扱い、原子間の相互作用として経験的あるいは半経験的なポテンシャルを用いる。これにより計算量を著しく軽減できるため、適応できる問題範囲が広くなり、実用的なシミュレーションの可能性も拡大する。また、セルを単位とした場合、連続体力学や Phase Field 法などの広義の連続体モデルも適用することが可能であり、マクロ領域と同等の時間スケールでのシミュレーションが可能であると考えられる。

ここで注目すべきは、今日用いられている「材料」は一般に不均質であることである。すなわち、マクロレベルにおいては均一として扱われている材料も非

常に微細なスケールにおいては、複数の材料（組織）が構成する複合構造を成している。例えば、最も古くから使用されている鋼にしても、純鉄と炭化鉄を混ぜ合わせた非均質体であることはよく知られている。このことは、設計対象である構造物（全体構造）のスケールとは異なるスケール（微視あるいはミクロスケール）において別の構造領域が存在し、そこでの力学挙動を平均化したものがその全体構造の材料特性を決定していることを意味する。そこで、より正確な材料設計、力学特性の評価を行うためには、メゾスコピック領域を含め、空間に対して階層的にモデリングし、各層で得られた情報を相互に反映させながらシミュレーションを行うこと「マルチスケールモデリング」が重要となる。現在、連続体モデルの視点から、変形場、温度場、拡散場などをそれぞれの保存則に代入することで連成して解き、加えて、適切なユニットセルに対して均質化法を用いて得られる、等価物理量を介して、組織レベル（メゾスコピックレベル）での連続体モデルと構造体レベル（マクロスコピックレベル）での連続力学モデルを結びつける方法で、「マルチスケールモデリング」を行おうと研究を進めている。

本研究では、オーステナイト系ステンレス合金のクリープ寿命予測を題材とし、ボイド形成・成長という組織レベルの現象と、クリープ損傷という構造体レベルでの現象を連結させたモデリングの構築を試みた。ここで、両者を結びつけるために、実際の組織写真より抽出したユニットセルを選択することにより、ボイド形成の観察と試験片レベルでの損傷という、メゾ、マクロ双方のレベルで、実験との比較が可能となった。定常クリープ条件下で、一定荷重条件（定常クリープ）、一定変位条件（クリープ緩和）を用いてシミュレーションを行い本手法の有用性を検証する。

スケール	現象	解析手法
<b>m(0)</b> マクロ スケール	塑性変形 再結晶	連続体力学に基づく 有限要素法 現象論的モデル (物理冶金学)
<b>mm(-3)</b>		
<b><math>\mu</math> m(-6)</b>	キャビティ発生	セルオートマトン フェーズフィールド法 モンテカルロ法
メゾ スケール	析出、粒界	
<b>nm(-9)</b>	転位	分子動力学法 第一原理計算
ミクロスケール		

図 1 : 計算対象スケールと解析手法の関係

## (2)均質化法の基礎

今日の材料科学および材料力学の分野における理論あるいは実験的研究の成果は、高い品質の材料を生産することを可能にしている。また、用いられる対象製品／構造物が何であれ、材料そのもの特性に注目することで微視的な構造まである程度制御できるまでになってきており、使用目的にあった材料性能を得るための高度な製造技術が提供されている。

ここで注意すべきは、今日用いられている「材料」は一般に不均質であることである。すなわち、マクロレベルでは均一とみなされるような材料であっても非常に微細なスケールにおいては、複数の組織が折り重なった、複合材料としての構成を成しているのである。例えば、最も古くから使用されている鋼にしても、純鉄と炭化鉄を混ぜ合わせた非均質体であることはよく知られている。この事実は、設計対象である構造物（全体構造）のスケールとは異なるスケール（微視あるいはミクロスケール）において別の構造領域が存在し、そこでの力学挙動を平均化したものがその全体構造の材料特性を決定していることを意味する。

1970年代中頃、構成材料の構成関係とそれらの微視領域における分布や幾何学的情報から非均質材料の巨視的な力学特性を導く数学理論が、均質化法として注目され始めた。その最も代表的な誘導の過程において導入される微視的スケールと巨視的スケールは、微視構造の大きさで関連づけられており、それぞれを独立変数とした場の変数（例えば変位）の漸近展開形を保存則に代入することで、微視および巨視的な変数の分離が可能になり、異なるスケールに関して整合性のとれた支配方程式を導出できるという特徴を持つ。これによって、場を支配する方程式が各々のスケールの変数で書き直されることになるので、微視的な幾何形状と全体構造体の変形特性との関係を明確にするだけでなく、微視と巨視スケールの2つの空間測度についての極限操作によって境界値問題の導出までもが可能であることが示される。このように均質化法は、理論力学的なアプローチによる解と連続体の巨視的な場の理論から得られる支配方程式を同時に導くという意味で、整合性の取れた力学理論の一つとみなすことができ、現在 N. Kikuchi らの研究<sup>[1]</sup>をはじめとして、不均質体を扱うさまざまな工学分野への適用がなされている。

以下では、まず均質化法の一般的構造について概説し<sup>[2]</sup>、その後、一般的な線形弾性問題を対象とした、仮想仕事の原理による均質化法の定式化<sup>[3]</sup>を始め、拡散、熱伝導<sup>[4]</sup>の各々の現象についての定式化を示す。

## (3)均質化法の一般的定式化

ここでは、文献 2)に基づいて、均質化法の一般的な定式化について述べる。均質化法では、図 2 に示すような周期性 (Y-周期性) を持った微細構造からなる複合材料を解析対象にしている。ここで、微細構造の一周期にあたる構成単位を単位セルと呼ぶ。全体構造物を記述する巨視的座標を  $x$ 、また、微視構造の単位セルを記述する微視的な座標系を  $y$  とすると、全体構造物と微細構造との大きさの比を表す  $\varepsilon$  を介して次式が成り立つ。

$$y = \frac{x}{\varepsilon} \quad (1)$$

上式の関係をもとに、微細構造の構成要素である単位セルと全体構造物の座標系をそれぞれ独立に選ぶことが出来る。周期性を持つ微細構造からなる構造物の変位を次式のように漸近展開する。

$$u^\varepsilon = u(x, y) = u_0(x, y) + \varepsilon u_1(x, y) + \dots, \quad y = \frac{x}{\varepsilon} \quad (2)$$

もしくは

$$u^\varepsilon \approx u^0(x, y) + \varepsilon u^1(x, y) \quad (3)$$

上式において、 $\{u^0, u^1\}$  は、 $\{x, y\}$  座標系においてそれぞれ平均部分と揺らぎ部分を表している。

ここで、 $u_0, u_1, \dots, u_j$  に関して次式が成り立つ。

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \Phi \left( x, y = \frac{x}{\varepsilon} \right) = \frac{\partial \Phi}{\partial x_i} + \frac{1}{\varepsilon} \frac{\partial \Phi}{\partial y_i} \quad (4)$$

また Y-周期関数  $\Psi(y)$  に関して次式が成り立つ。

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \int_{\Omega^\varepsilon} \Psi \left( \frac{x}{\varepsilon} \right) d\Omega = \frac{1}{|Y|} \int_{\Omega} \int_Y \Psi(y) dY d\Omega \quad (5)$$

ここで、 $|Y|$  は単位セルの体積をあらわす。(1)式もしくは(2)式を任意の凸変分方程式もしくは弱形式  $A(u, v) = F(v)$  for  $v \in H(v)$  に代入し、式(4)に注意して  $\varepsilon$  について整理し、摂動法を適用すると以下の各式を得る。

$$A'(u^0, v) = F'(v) \quad \text{for } v \in H(V) \quad (6)$$

$$A''(u^1, v) = F''(v) \quad \text{for } v \in H(Y) \quad (7)$$

上記の  $A'$  および  $A''$  は  $A(u, v)$  から、 $F'$  および  $F''$  は  $F(v)$  より数学的操作により各々導くことが出来る。連成マルチモデリングでは、様々な場の変数に関し、支配方程式を弱形式化し連成させて同時に解く必要がある。表 1 に例として弾性クリープ解析に用いる典型的な変数と支配方程式を示す

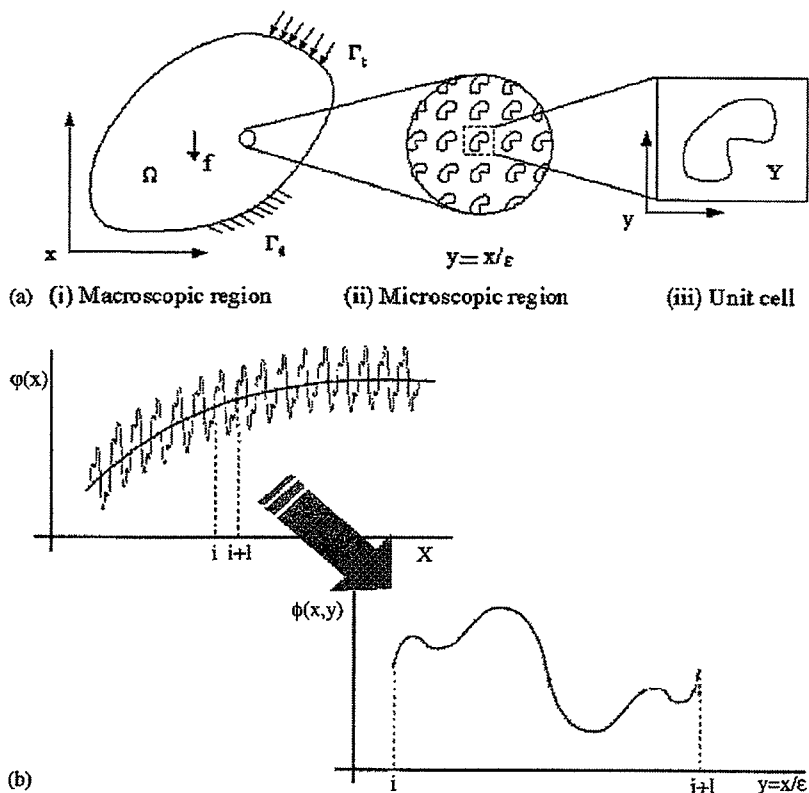


図 2：全体構造物と微細構造

表 1：場の変数と支配方程式

	変形	熱伝導	拡散
場の変数	変位 ( $u_i$ ) ひずみ ( $e_{ij}$ ) 応力 ( $\sigma_{ij}$ )	温度 ( $T$ )	物質濃度 ( $C$ )
支配方程式	$\sigma_{ij,j} = 0$ $e_{ij} = \frac{1}{2}(u_{i,j} + u_{j,i})$ $e_{ij}^e = e_{ij} - e_{ij}^c$ $e_{ij}^c = \frac{3\bar{e}^c}{2\bar{\sigma}} S_{ij}$ in $V$	$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} = \kappa \frac{\partial^2 T}{\partial x_i^2}$ in $V$	$\frac{\partial T}{\partial C} = \kappa \frac{\partial^2 C}{\partial x_i^2}$ in $V$
境界条件	$u_i = \bar{u}_i$ on $S_u$ $T_i \equiv \sigma_{ij} n_j = \bar{T}_i$ on $S_T$	$T = \bar{T}$ on $S_T$ $-\kappa \frac{\partial T}{\partial x_n} = \bar{q}$ on $S_q$	$C = \bar{C}$ on $S_C$ $-D \frac{\partial C}{\partial x_n} = \bar{q}$ on $S_q$
初期条件	$\sigma_{ij} = e_{ij} = u_i = 0$ at $t = 0$	$T = T_0(x)$ at $t = 0$	$T = C_0(x)$ at $t = 0$

(4)線形弾性問題に対する均質化法の定式化<sup>[3]</sup>

先ほどと同様、全体構造物を記述する巨視的座標を  $x$ 、また、微視構造の単位セルを記述する微視的な座標系を  $y$  とすると、全体構造物と微細構造との大きさの比を表す  $\varepsilon$  を介して次式が成り立つ。

$$y = \frac{x}{\varepsilon} \quad (1)'$$

上式の関係をもとに、微細構造の構成要素である単位セルと全体構造物の座標系をそれぞれ独立に選ぶことが出来る。

複合材料からなる構造物の仮想仕事の原理は、 $V^\varepsilon$  を変位の許容集合とすると次式となる。

$$\int_{\Omega^\varepsilon} D_{ijkl}^\varepsilon \frac{\partial u_k^\varepsilon}{\partial x_l} \frac{\partial v_i}{\partial x_j} d\Omega = \int_{\Omega^\varepsilon} f_i^\varepsilon v_i d\Omega + \int_{\Gamma_f^\varepsilon} t_i v_i d\Gamma \quad \forall v \in V^\varepsilon \quad (8)$$

なお、ここでは次のひずみ-変位関係式と、応力-ひずみ関係式を仮定する。

$$e_{kl}^\varepsilon = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_k^\varepsilon}{\partial x_l} + \frac{\partial u_l^\varepsilon}{\partial x_k} \right) \quad (9)$$

$$\sigma_{ij}^\varepsilon = D_{ijkl}^\varepsilon e_{kl}^\varepsilon \quad (10)$$

周期性を持つ微細構造からなる構造物の変位を次式のように漸近展開する。

$$u^\varepsilon = u(x, y) = u_0(x, y) + \varepsilon u_1(x, y) + \dots, \quad y = \frac{x}{\varepsilon} \quad (2)'$$

ここで、 $u_0, u_1, \dots, u_j$  に関して次式が成り立つ。

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \Phi \left( x, y = \frac{x}{\varepsilon} \right) = \frac{\partial \Phi}{\partial x_i} + \frac{1}{\varepsilon} \frac{\partial \Phi}{\partial y_i} \quad (4)'$$

また  $Y$ -周期関数  $\Psi(y)$  に関して次式が成り立つ。

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \int_{\Omega^\varepsilon} \Psi \left( \frac{x}{\varepsilon} \right) d\Omega = \frac{1}{|Y|} \int_{\Omega} \int_Y \Psi(y) dY d\Omega \quad (5)'$$

ここで、 $|Y|$  は単位セルの体積をあらわす。

式(2)' を式(8)へ代入した後に式(4)' に注意して  $\varepsilon$  について整理し、摂動法を適用すると以下の各式を得る。



$$\frac{1}{\varepsilon^2} \int_{\Omega^\varepsilon} D_{ijkl}^\varepsilon \frac{\partial u_{ok}}{\partial y_l} \frac{\partial v_i}{\partial y_j} d\Omega = 0 \quad (11)$$

$$\frac{1}{\varepsilon} \int_{\Omega^\varepsilon} D_{ijkl}^\varepsilon \left[ \left( \frac{\partial u_{ok}}{\partial x_l} + \frac{\partial u_{lk}}{\partial y_l} \right) \frac{\partial v_i}{\partial y_j} + \frac{\partial u_{ok}}{\partial y_l} \frac{\partial v_i}{\partial x_j} \right] d\Omega = 0 \quad (12)$$

$$\int_{\Omega^\varepsilon} D_{ijkl}^\varepsilon \left[ \left( \frac{\partial u_{ok}}{\partial x_l} + \frac{\partial u_{lk}}{\partial y_l} \right) \frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \left( \frac{\partial u_{lk}}{\partial x_l} + \frac{\partial u_{2k}}{\partial y_l} \right) \frac{\partial v_i}{\partial y_j} \right] d\Omega = \int_{\Omega^\varepsilon} f_i^\varepsilon v_i d\Omega + \int_{\Gamma_i^\varepsilon} t_i v_i d\Gamma \quad (13)$$

式(11)に、式(5)'と発散定理を適応することにより次式をえる。

$$u_0 = u_0(x) \quad (14)$$

つまり、 $u_0$ は全体構造のみに依存する。

式(12)に、式(5)'、(14)及び発散定理を適応し、式(15)を満たす $\chi$ を導入することにより式(16)を得る。

$$\int_Y D_{ijmn} \frac{\partial \chi_m^{kl}}{\partial y_n} \frac{\partial v_{li}}{\partial y_j} dY = \int_Y D_{ijkl} \frac{\partial v_{li}}{\partial y_j} dY \quad \forall v_i \in V_Y \quad (15)$$

$$u_{li} = -\chi_i^{kl}(x, y) \frac{\partial u_{ok}(x)}{\partial x_l} \quad (16)$$

式(13)に、式(5)'、(14)、(16)及び発散定理を適応することで、全体構造に関する仮想仕事の原理を導くことができる。

$$\int_{\Omega} D_{ijkl}^h \frac{\partial u_{ok}}{\partial x_l} \frac{\partial v_{oi}}{\partial x_j} d\Omega = \int_{\Omega} \left( \frac{1}{|Y|} \int_Y f_i dY \right) v_{oi} d\Omega + \int_{\Gamma_i} t_i v_{oi} d\Gamma \quad \forall v_{oi} \in V_{\Omega} \quad (17)$$

ここで、 $D_{ijkl}^h$ は、次式に示す単位セルの等価な弾性定数を示している。

$$D_{ijkl}^h = \frac{1}{|Y|} \int_Y \left( D_{ijkl} - D_{ijmn} \frac{\partial \chi_m^{kl}}{\partial y_n} \right) dY \quad (18)$$

式(15)を $\chi$ について解いた後に、式(18)を評価することで微細構造の等価な弾性定数を求めることができる。

また、式(14)、(16)より、式(2)'は次式となり、微細構造の微視的な変位 $u^\varepsilon$ を決定できる。

$$u_i^\varepsilon = u_{oi}(x) - \varepsilon \chi_i^{kl}(x, y) \frac{\partial u_{ok}(x)}{\partial x_l} + \dots \quad (19)$$

式(19)を式(9), (10)に代入し、式(5)'を考慮することにより、微視的なひずみ $e^\varepsilon$ と応力 $\sigma^\varepsilon$ を導くことができる。

$$e_{ij}^\varepsilon = \frac{\partial u_{0i}}{\partial x_j} - \frac{\partial \chi_i^{kl}}{\partial y_j} \frac{\partial u_{0k}}{\partial x_l} + \dots \quad (20)$$

$$\sigma_{ij}^\varepsilon = \left( D_{ijkl} - D_{ijmn} \frac{\partial \chi_m^{kl}}{\partial y_n} \right) \frac{\partial u_{0k}}{\partial x_l} + \dots \quad (21)$$

ここで注目すべき点は、均質化法では式(21)で微視的な応力を評価するさいに、あらためて有限要素法等のソルバーを用いる必要がない点である。通常、良く取られる方法に、粗いメッシュで全体構造物の巨視的な境界問題を解いた後に、注目する部分だけ細かなメッシュで再分割し、巨視的モデルで得られた解を境界条件として微視構造の境界条件を解く方法がある。しかし、この方法では微視的な応力評価点を変更するたびに有限要素法で境界値問題を解かねばならない。計算の負担は計り知れない。

一方、均質化法では微細構造の単位セルに関する式(15)と全体構造物に関する式(17)が出発点となる。しかも、線形問題ではこれらの式は連成しないので、それぞれ別々に一度だけ有限要素法で解けばよいことになり、式(21)と組み合わせることで効率的に複合材料のマクロ-ミクロ領域を考慮した、微視的な応力を評価することが可能である。

#### (5) 拡散場における均質化法の定式化

前節と同様に、全体組織を記述する巨視的な座標系を $x$ 、また、微視組織の単位セルを記述する微視的な座標系を $y$ とすると、全体組織と微視組織との大きさを示す $\varepsilon$ を介して次式が成り立つ。

$$y = \frac{x}{\varepsilon} \quad (1)''$$

上式の関係をもとに、微細組織の構成要素である単位セルと全体組織の座標系をそれぞれ独立に選ぶことができる。

Fickの法則より得られる拡散方程式を弱形式であらわすと、以下の式が得られる(固溶物質の拡散のみを考慮する)。

$$0 = \int_{\Omega^\varepsilon} \frac{\partial c^\varepsilon}{\partial t} c^* d\Omega - D \int_{\Omega^\varepsilon} \frac{\partial c^\varepsilon}{\partial x_i} \frac{\partial c^*}{\partial x_i} d\Omega \quad \forall c^* \in V^\varepsilon \quad (22)$$

ここで、拡散係数は等方的で一定値を取るとする。周期性を持つ単位セルから

なる組織の濃度場を次式のように漸近展開する.

$$c^\varepsilon(x) = c^0(x, y) + \varepsilon c^1(x, y) + \dots \quad (23)$$

ここで, 関数  $\phi$  に関して次式が成り立つ.

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \Phi \left( x, y = \frac{x}{\varepsilon} \right) = \frac{\partial \Phi}{\partial x_i} + \frac{1}{\varepsilon} \frac{\partial \Phi}{\partial y_i} \quad (4)''$$

また, Y-周期関数  $\Psi(y)$  に関して次式が成り立つ.

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \int_{\Omega^\varepsilon} \Psi \left( \frac{x}{\varepsilon} \right) d\Omega = \frac{1}{|Y|} \int_{\Omega} \int_Y \Psi(y) dY d\Omega \quad (5)''$$

ここで,  $|Y|$  は単位セルの体積を表す.

式 (23) を式 (22) へ代入した後に式 (4)'' に注意して  $\varepsilon$  について整理し,  $c^0 = c^0(x)$  を適用すると以下の各式を得る.

$$\int_{\Omega} D_{ij} \left( \frac{\partial c^0}{\partial x_i} + \frac{\partial c^1}{\partial y_i} \right) \frac{\partial c^*}{\partial x_j} d\Omega + \int_{\Omega} \frac{\partial c^0}{\partial t} c^* d\Omega = 0 \quad (24)$$

$$\int_Y D_{ij} \left( \frac{\partial c^0}{\partial x_i} + \frac{\partial c^1}{\partial y_i} \right) \frac{\partial c^*}{\partial y_j} dY = 0 \quad (25)$$

ここで, 式 (26) を満たす関数  $\phi$  を導入することにより, 式 (27) を得る.

$$\int_Y D_{ij} \frac{\partial \phi_k}{\partial y_i} \frac{\partial c^*}{\partial y_j} dY = \int_Y D_{ik} \frac{\partial c^*}{\partial y_i} dY \quad (26)$$

$$c^1(x, y) = -\phi^k(x, y) \frac{\partial c^0(x)}{\partial x_k} + \tilde{c}^1(x) \quad (27)$$

ここで  $\tilde{c}^1$  は  $x$  の任意の関数である. 式 (24) に, 式 (5)'', (27) を適用することで, 組織全体に対する弱形式が以下のように書ける (周期性を考えると,  $\tilde{c}^1$  の  $y_i$  による偏微分の領域  $Y$  での積分は 0 となる. ).

$$\int_{\Omega} \left[ \frac{1}{|Y|} \int_Y \left( D_{ij} - D_{ik} \frac{\partial \phi^k}{\partial y_j} \right) dY \right] \frac{\partial c^0}{\partial x_i} \frac{\partial c^*}{\partial x_j} d\Omega - \int_{\Omega} \frac{\partial c^0}{\partial t} c^* d\Omega = 0 \quad (28)$$

したがって, 単位セルの等価拡散係数は次式で表せる.

$$D_{ij}^H = \frac{1}{|Y|} \int_Y \left( D_{ij} - D_{ik} \frac{\partial \phi^k}{\partial y_j} \right) dY \quad (29)$$

式 (26) を  $\phi$  について解いた後に, 式 (29) を評価することで微細組織の等価拡散係

数を求めることが出来る。

また、式 (27) より、式 (23) は次式となり、微細組織の微視的な濃度  $c^\varepsilon$  を決定できる。

$$c^\varepsilon(x, y) = c^0(x) - \varepsilon \phi^k(x, y) \frac{\partial c^0(x)}{\partial x_k} + \dots \quad (30)$$

(6) 温度場における均質化法の定式化<sup>[4]</sup>

形式的には前節の拡散場の場合と全く同様である。全体組織を記述する巨視的な座標系を  $\mathbf{x}$ 、また、微視組織の単位セルを記述する微視的な座標系を  $\mathbf{y}$  とすると、全体組織と微視組織との大きさを示す  $\varepsilon$  を介して次式が成り立つ。

$$\mathbf{y} = \frac{\mathbf{x}}{\varepsilon} \quad (1) \text{ ' ' '}$$

上式の関係をもとに、微細組織の構成要素である単位セルと全体組織の座標系をそれぞれ独立に選ぶことが出来る。

簡単のため領域内での熱の生成は無いとすると、熱伝導方程式は前節の拡散方程式と同様に、以下のように弱形式化できる。

$$0 = \int_{\Omega^\varepsilon} (\rho C_p)^\varepsilon \frac{\partial T^\varepsilon}{\partial t} c^* d\Omega - \int_{\Omega^\varepsilon} k_{ij} \frac{\partial T^\varepsilon}{\partial x_i} \frac{\partial \tau^*}{\partial x_j} d\Omega \quad \forall c^* \in V^\varepsilon \quad (31)$$

ここで、 $k$  は熱伝導係数、 $\rho$  は密度、 $C_p$  は熱容量である。周期性を持つ単位セルからなる組織の熱伝導場を次式のように漸近展開する。

$$T^\varepsilon(x) = T^0(x, y) + \varepsilon T^1(x, y) + \dots \quad (32)$$

ここで、関数  $\Phi$  に関して次式が成り立つ。

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \Phi \left( x, y = \frac{x}{\varepsilon} \right) = \frac{\partial \Phi}{\partial x_i} + \frac{1}{\varepsilon} \frac{\partial \Phi}{\partial y_i} \quad (4) \text{ ' ' '}$$

また、 $Y$ -周期関数  $\Psi(y)$  に関して次式が成り立つ。

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \int_{\Omega^\varepsilon} \Psi \left( \frac{x}{\varepsilon} \right) d\Omega = \frac{1}{|Y|} \int_{\Omega} \int_Y \Psi(y) dY d\Omega \quad (5) \text{ ' ' '}$$

ここで、 $|Y|$  は単位セルの体積を表す。

式 (32) を式 (31) へ代入した後に式 (4) ' ' ' に注意して  $\varepsilon$  について整理し、 $T^0 = T^0(x)$  を適用すると以下の各式を得る。

$$\int_{\Omega} k_{ij} \left( \frac{\partial T^0}{\partial x_i} + \frac{\partial T^1}{\partial y_i} \right) \frac{\partial \tau^*}{\partial x_j} d\Omega + \int_{\Omega} (\rho C_p)^{\varepsilon} \frac{\partial T^0}{\partial t} \tau^* d\Omega = 0 \quad (33)$$

$$\int_Y k_{ij} \left( \frac{\partial T^0}{\partial x_i} + \frac{\partial T^1}{\partial y_i} \right) \frac{\partial \tau^*}{\partial y_j} dY = 0 \quad (34)$$

ここで、式(35)を満たす関数 $\phi$ を導入することにより、式(36)を得る。

$$\int_Y k_{ij} \frac{\partial \phi_k}{\partial y_i} \frac{\partial \tau^*}{\partial y_j} dY = \int_Y k_{ik} \frac{\partial \tau^*}{\partial y_i} dY \quad (35)$$

$$T^1(x, y) = -\phi^k(x, y) \frac{\partial T^0(x)}{\partial x_k} + \tilde{T}^1(x) \quad (36)$$

ここで $\tilde{T}^1$ は $x$ の任意の関数である。式(33)に、式(5)''', (36)を適用することで、組織全体に対する弱形式が以下のように書ける(周期性を考えると、 $T^1$ の $y_i$ による偏微分の領域 $Y$ での積分は0となる。 )。

$$\int_{\Omega} \left[ \frac{1}{|Y|} \int_Y \left( k_{ij} - k_{ik} \frac{\partial \phi^k}{\partial y_j} \right) dY \right] \frac{\partial T^0}{\partial x_i} \frac{\partial \tau^*}{\partial x_j} d\Omega - \int_{\Omega} \left[ \frac{1}{|Y|} \int_Y (\rho C_p)^{\varepsilon} dY \right] \frac{\partial T^0}{\partial t} \tau^* d\Omega = 0 \quad (37)$$

したがって、単位セルの等価拡散係数は次式で表せる。

$$k_{ij}^H = \frac{1}{|Y|} \int_Y \left( k_{ij} - k_{ik} \frac{\partial \phi^k}{\partial y_j} \right) dY \quad (38)$$

式(35)を $\phi$ について解いた後に、式(38)を評価することで微細組織の等価拡散係数を求めることができる。

また、式(36)より、式(32)は次式となり、微細組織の微視的な濃度 $T^{\varepsilon}$ を決定できる。

$$T^{\varepsilon}(x, y) = T^0(x) - \varepsilon \phi^k(x, y) \frac{\partial T^0(x)}{\partial x_k} + \dots \quad (39)$$

## 2-2 研究開発の結果

前節で研究したように、均質化法により、試験片あるいは部材レベルにおける連続体力学モデルと材料組織レベルにおける連続体力学モデルとを階層化することができる。また変形場のみならず温度場・拡散場も同様に階層化できることから、均質場理論を用いることで、階層化と連成化とを行うモデルの構築が可能となった。

本研究では、この開発ツールをもとに、高温変形における損傷解析手法を開発する。すなわち、高温での材料非線形挙動を記述するために、高温クリープ変形場を用い、その上に、粒界におけるボイド形成、合体、クラック形成を記述するマイクロメカニクスを構築する。シミュレーションでは、一定応力条件下でのクリープ試験ならびに一定変位条件下でのクリープ緩和現象を取り上げ、組織レベルでの材質変化と試験片レベルでの構成関係を予測する。

特に、開発したシステムでは、実組織を解析モデルに忠実に反映させるため、画像解析と自動要素分割機能とを連動させ、2次元ではあるが、粒内・粒界の差異、各粒ごとの相などを考慮できる手法を確立した。

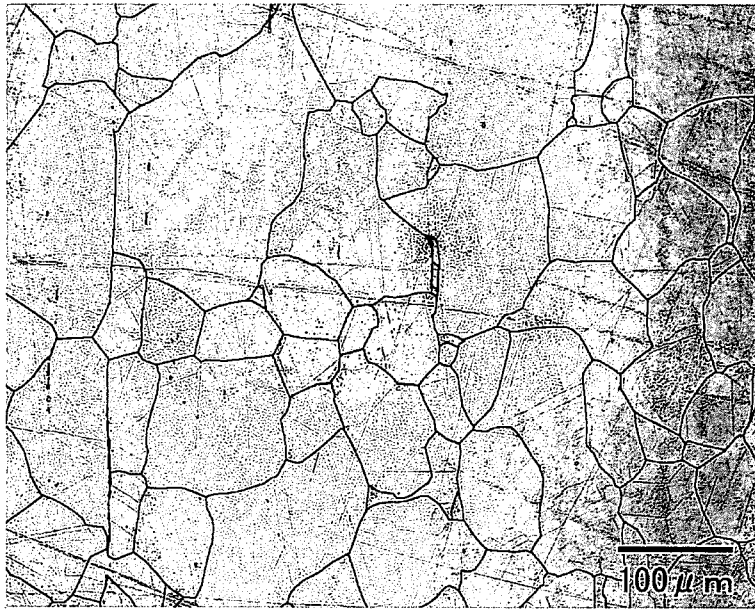
### (1) 実組織のモデリング

クリープ進展中のキャビティの発生、成長過程は結晶の幾何学的構造に大きく依存していると考えられる。従って、実組織の幾何学的構造を明確に反映したモデル作りが必要不可欠である。

しかし、従来の有限要素法では、複雑な幾何学構造の有限要素モデルを作成することはきわめて困難であった。一方で、計算機環境は飛躍的に高速化・大容量化が進んでおり、今後ともその勢いは衰えそうに無い。このような中で S. J. Hollister と N. Kikuchi は従来の手法では数値解析モデルの作成が困難であるような対象に対して代替手法としてCTスキャナーなどの非破壊検査装置からえたデジタル画像を直接に用いたモデルの作成の概念「イメージベース法」<sup>[5]</sup>を提案している。この概念は、複雑な形状を持つ産業部品や複雑繊維の応力解析、あるいは実測することの困難な生体骨の界面組織の成長などに適用され、その有効性が示されている。

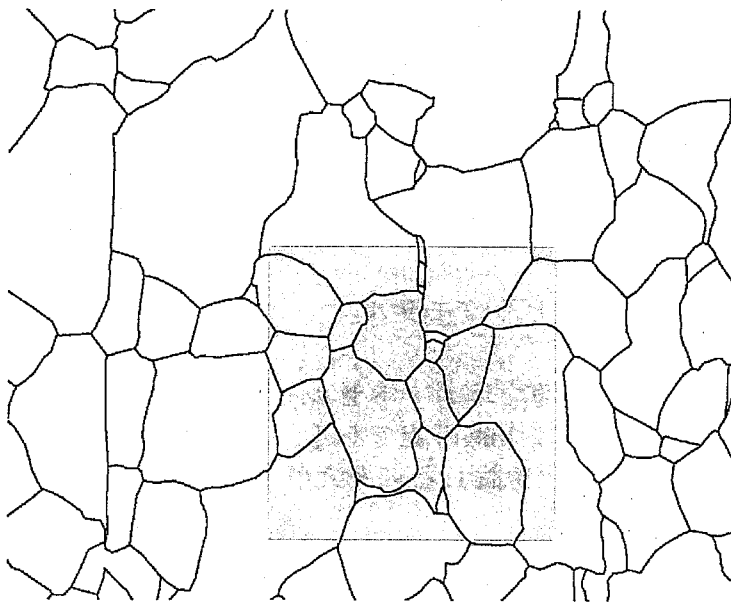
本研究では、このようなデジタル画像に基づくモデル作成の概念を多結晶金属組織のクリープ挙動におけるキャビティの発生成長モデルに適用し、実験との比較を行いながらその有用性を示すことを目的の一つとしている。以下に実組織からシミュレーションに用いる有限要素作成までの手順をしめす。

第1段階：オーステナイト系ステンレスの結晶粒度測定に用いられる標準的方法である、固溶化熱処理法（固溶化熱処理を行った資料を研磨し、電解腐食を実施する）を施した資料のSEM写真に従い、粒界をトレースする。

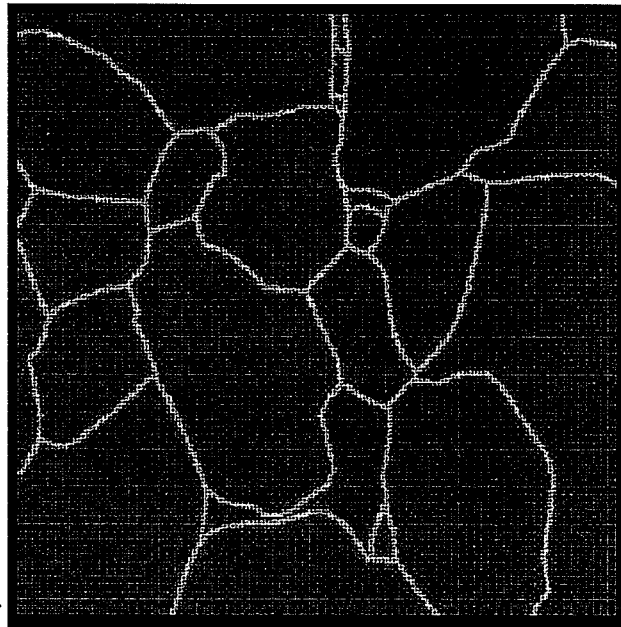


第2段階：

トレースした粒界の一部を取り出し、デジタル画像とする。一般にデジタル画像は、色情報などを均等に張られた格子上で標本化・量子化したもので、可視化のために各格子点から等しい距離にある線で囲まれる微小な要素で定義される。この微小な要素を画素(pixel)と呼び、直交に張られた格子の場合、正方形となる。結晶粒界の幾何学情報は、ある色濃度をしきい値とする on と off の 2 値画像に変換すれば、on 画素の集合として得られる。



第3段階：この二値化されたデジタル画像から、ppm2oof<sup>[6]</sup>を用いて有限要素メッシュを作成する。ppm2oofはアダプティブメッシュ機能(h法)を有しており、領域にあわせて適切なメッシュをきることが可能となっている。近年のコンピュータハードウェアの進化に伴い、2次元問題では要素数の増大に伴う計算効率の低下に対して、神経質なまでの注意を払う必要がなくなりつつある。しかし、クリープ、塑性、大変形などを考慮した非線形解析においては、依然として計算時間の増大が問題となることも少なくない。従って、領域の重要性にあわせて任意の要素サイズでモデリング可能なアダプティブメッシュ法は、必要不可欠であると考えられる。



第4段階：得られた有限要素に解析に必要な前処理を施し、解析ソルバーとしてANSYS<sup>[7]</sup>を用いて解析を行う。

以上の過程により実組織のモデリングが可能となった。

## (2)連続体力学からのメゾスコピックモデル

実組織とも対応できる、適切なユニットセルモデルの導入により、組織レベルの力学応答を表現する方法は作成可能である。すなわち、離散モデルの上において、この組織レベルの変形を論じるにあたり、

- ・ 粒内の方位の影響
- ・ 粒界の特性

などを考慮することは可能であり、また、温度場/拡散場との連成により、



- ・ 組織内での温度分布の影響
- ・ 溶質元素分布の影響

を考えることは出来る。しかし、粒成長、組織レベルでの濃度変化と応力場との相互作用など、本質的な組織変化を記述するためには、

- ・ 変形場/クリープ変形などの非線形性も考慮した、化学ポテンシャルなどの保存場の変化
- ・ 結晶方位などの状態変化を記述する非保存場の変化

を取り扱う必要がある。既に、Phase Field 法では、その検討を始めている。ただし、従来の方法では、保存場、非保存場の支配方程式を解くことに終始するのみであり、均質化法が与えるエネルギー原理/変分原理に基づく階層性との適合性を考慮した新しい定式化が求められる。

### (3) 高温変形の基礎<sup>[8]</sup>

高温における変形では、動的回復や動的再結晶による軟化がさかんに起こるようになり、回復による軟化と変形による加工硬化とが同じ程度で起こる。こうなると、引っ張り試験におけるように試験片に加える応力を増していかななくても、一定応力または一定荷重のもとで変形が進行する。これが材料のクリープ (creep) である。一定の応力 (もしくは荷重) のもとで、時間と共に試験片がどれだけ伸びるかを測定する試験をクリープ試験という。クリープは高温変形の特徴的かつ重要な様式であり、クリープの研究は材料強度研究における最も重要な研究分野の一つである。クリープによって材料が破断することをクリープ破壊といい、ある応力 (荷重) とある温度において破壊に至るまでの時間をクリープ寿命という。これは実用においてきわめて重要な量である。

図3に典型的なクリープ曲線を示す。試験片が所定の温度に達したところで、試験を開始するための荷重を加えると、試験片はその温度と荷重速度 (ひずみ速度) での応力-ひずみ曲線に従って、加えた応力に対応するひずみまで伸びる、これはほとんど瞬間的な変形であり、加工硬化が起こっても、それが回復するだけの時間は無い。この伸びを瞬間ひずみという。その状況で放置されると、試験片内部で回復が起こり、変形が進行する。回復が進めば内部ひずみが減少するから、回復速度は次第に遅くなる。一方変形すれば加工硬化がおこる。やがて回復による軟化と加工硬化がつりあったところで、ひずみ速度が一定となる。ひずみ速度一定の段階に至るまでの、クリープ速度が次第に減少する段階を遷移クリープ (一次)、クリープ速度が一定な状態を定常クリープ (二次) という。さらに変形が進行すると、局部的なくびれや空洞の発生などによって、試験片の有効断面積が減少してクリープが加速される。この段階を加速クリープ (三次) という。クリープ速度は高温になるほど大きくなる。種々の金属や合金について、定常クリープの活性化エネルギーを求めた値を図4に示す。一般に、高温側では定常クリープの活性化エネルギーは、その金属の自己拡散の活性化エネルギーに等しく、温度が下がると活性化エネルギーは低下する。

一口に定常クリープと言っても、温度と応力によってクリープを支配する機構がことなる。そこで、横軸に融点で規格化した温度をとり、縦軸に剛性率で規格化した応力の対数をとって、その中に作用する機構を表示したものを作る。これを変形機構図という。図5に一例を示す。図中Bで示される、工業的に最も利用されている領域（応力、温度）においては、 $n \cong 5$  の乗則クリープがクリープ機構として支配的である。この範囲におけるクリープ挙動は以下の式で書き表すことが可能である<sup>[9][10]</sup>。

$$\dot{\varepsilon}_e^c = A \left( \frac{b}{d} \right)^p \left( \frac{D_0 G b}{kT} \right) \left( \frac{\sigma_e}{G} \right)^n \exp \left( - \frac{Q_c}{RT} \right) \quad (40)$$

ここで  $b$  はバーガスベクトル、 $d$  は粒径、 $D_0$ 、頻度パラメータ、 $G$  は剛性率、 $k$  はボルツマン定数、 $Q_c$  はクリープの活性化エネルギー、 $R$  ガス定数、 $T$  は絶対温度であり  $A$ 、 $p$ 、 $n$  は無次元のパラメータである。先ほども述べたが高温側ではクリープの活性化エネルギー  $Q_c$  は、その金属の自己拡散の活性化エネルギーに等しくなる。従ってこの領域ではクリープのべき乗則は拡散機構を表しているともいえるであろう。この事実に基づくと式(40)は  $Q_c$  の代わりに自己拡散の活性化エネルギー  $Q_{sd}$  を用いて以下のように書き換えられる。

$$\dot{\varepsilon}_{ss}^c = A_2 \exp \left( - \frac{Q_{sd}}{kT} \right) (\sigma_{ss})^{n \cong 5} \quad (41)$$

ここで、添え字  $ss$  は定常状態を表している。工業的利用において (41) 式は

$$\dot{\varepsilon}_e^c = B \sigma_e^n \quad (42)$$

とさらに書き換えられる。ここで  $\sigma_e$  は相当応力である。 $B$  は  $B = A_2 \exp(-Q_{sd}/kT)$  で表される定数となる。また  $n$  は応力乗数である。これらの値は実験で得られた値を用いることが可能である。

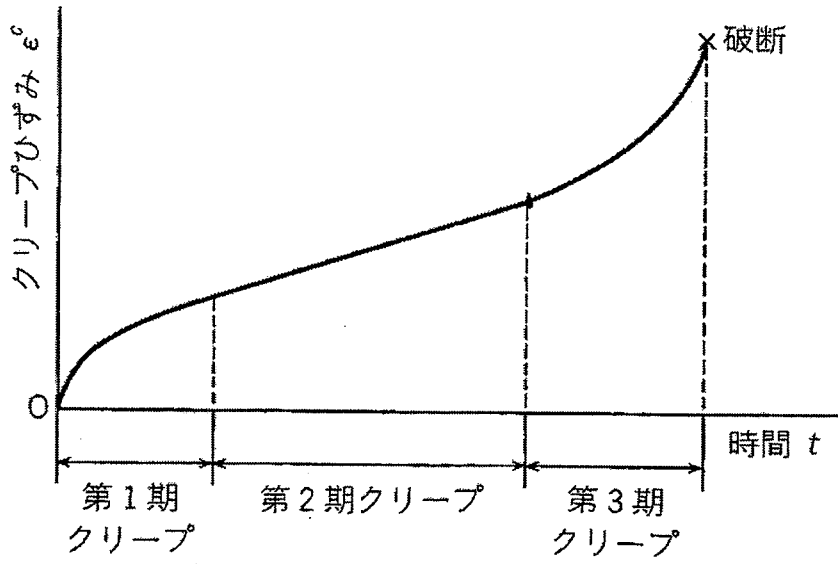


図3 代表的なクリープ曲線

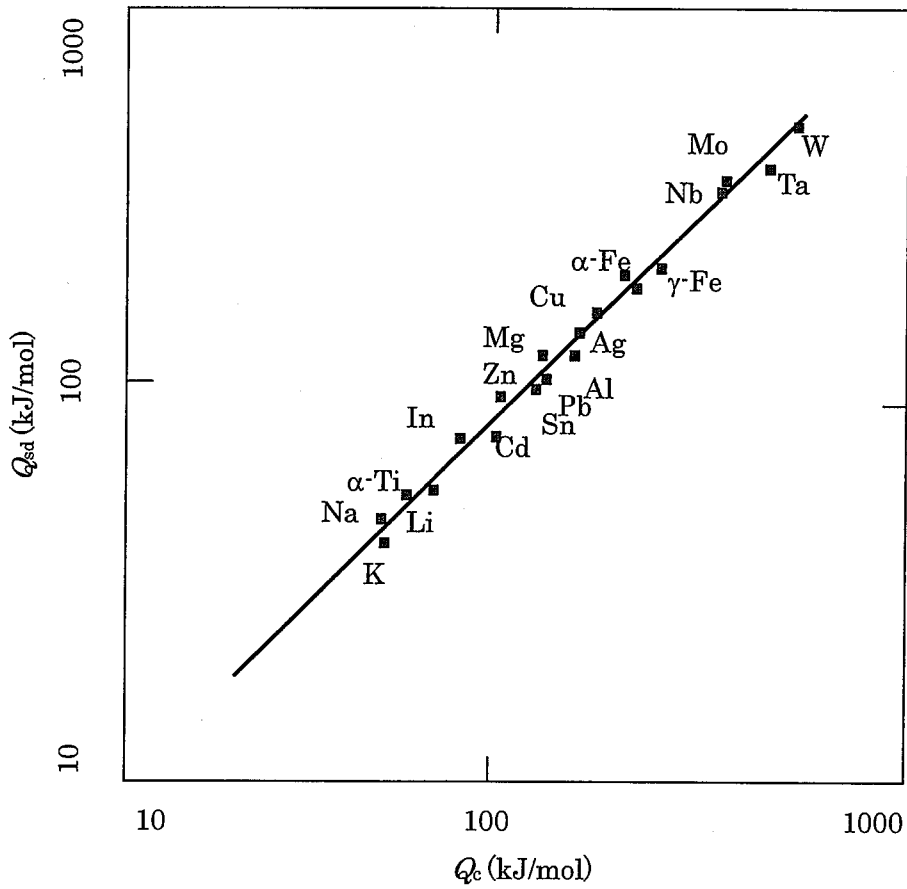


図4. 自己拡散の活性化エネルギーとクリープ活性化エネルギーの比較 [11].

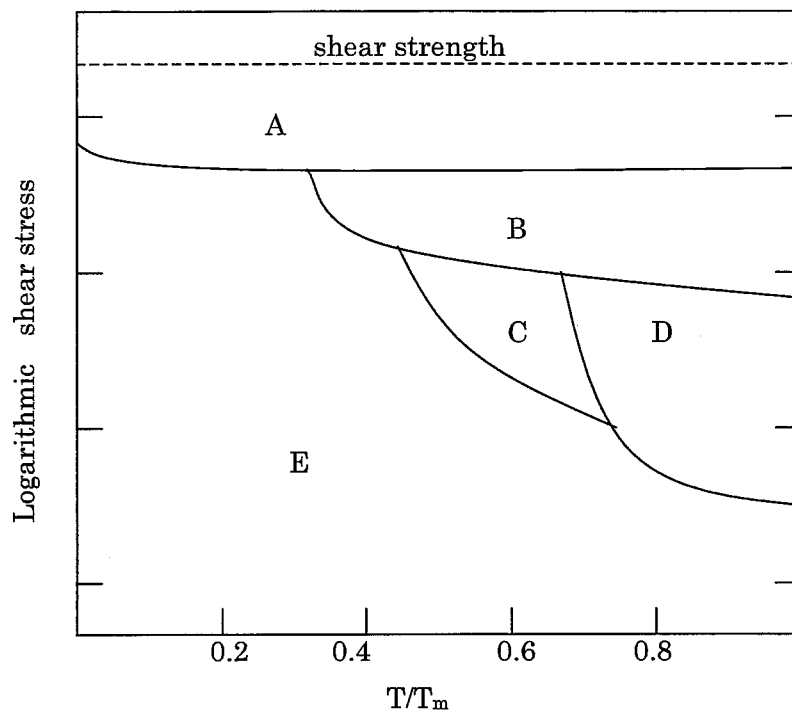


図 5. 変形機構図の一例 A-転位すべり, B-べき乗則クリープ (拡散+転位), C-Coble クリープ, D-Nabarro-Herring クリープ, E-弾性変形<sup>[12]</sup>

## (4) 組織レベルモデリングにおけるマイクロメカニクス

外部負荷をかけた場合の材料の破壊プロセスは、エネルギー消費に関連づけられることが通常である。外力による仕事は弾性媒体中へのひずみエネルギー蓄積という形でなされる。材料の破壊はこの蓄えられたエネルギーの急激な開放と考えられている。このエネルギー基準が現在の破壊力学の基礎概念となっている。連続体力学の観点から Argon<sup>[13]</sup>が平均応力と有効応力の合計が臨界値に達することによりボイドの形成が生じると提唱して以来、いくつかの破壊基準が定義されている。

しかし、クリープ破壊およびクリープボイド形成に関しては、問題はより複雑となる。実験結果に基づく解析では、結晶粒界がボイドの形成・成長に関して、重要な役割を演じていることがわかっている。また、結晶粒界の自己拡散が、ボイドの形成およびクラッキングの駆動力となっていることは広く受け入れられており、負荷された応力に対して垂直方向の粒界にボイドが形成され配列していることが、数多くの研究者により報告されている。<sup>[14][15]</sup>これらのモデルにより、ボイド間隔と粒界の拡散係数  $D_b$  を求めることで、ある程度の厳密さで、破壊に至る時間を計算することが可能となっている。しかしながら、ボイド配列の起源については解明されていない。Riedel<sup>[17]</sup>は「応力分析の結果、応力集中はそれほど大きくなく、理論的核形成応力に達している可能性はほとんどありえない。したがって、ボイド形成の問題は定量的に理解されたとは言えない。」と結論付けた。Argonら<sup>[13]</sup>はクリープ変形中の金属において、粒界介在物の周辺のみが、ボイド形成に十分な応力が得られる場所であると主張した。粒界すべりがある程度継続されると、粒界介在物の近傍にボイド形成にたる応力集中が起こる。しかしこの理論では、実験において三重点と同様、最もボイド形成が起こりやすい場所とされている、外部応力の垂直方向の粒界におけるボイド配列の形成を説明することが出来ない。

クリープ変形中のボイドの形成メカニズムに関する議論は非常に多岐にわたり、様々な研究者により多種多様なメカニズムが提案されている。本研究では、破壊に至るまでのボイドの成長過程において、粒界の幾何学配置と負荷応力の方向の影響を説明するためにボイドの形成モデルを用いる。Shewmon と Anderson<sup>[15]</sup>は、ボイドの形成は臨界形成エネルギーに達した場合に起こるとした。この臨界エネルギーは位置に大きく依存し以下の式で近似できる。

$$G^* \approx \frac{4\gamma_s^3 f(\alpha)}{(S_r + P)^2} \quad (43)$$

この値をそのまま用いるのは困難であるので、ボイド形成過程を記述するために間接的に利用する。ここで、 $\gamma_s$  は界面エネルギー、 $S_p$  は粒界に垂直なリモー  
ト平均応力、 $P$  はボイドの内部ガス圧、 $f(\alpha)$  は幾何学的要素パラメータ、 $f(\alpha)(r^*)^3$   
は核形成の臨界体積を与える。図 6 に示す通り、ボイドを形成する球状セグメン  
トの曲率半径  $r$  は、粒界におけるボイドの半径  $a$  と関係があり、 $a = r \sin \alpha$ 。  
と書ける。したがって  $a$  を用いてボイド体積を表すと  $a^3 f v / \sin^3 \alpha$  となる<sup>[16]</sup>。  
通常粒界（二つの粒が接する界面）に対する幾何学要素パラメータの値は、  
 $f(\alpha) \cong f v = (2\pi/3)(2 - 3\cos\alpha + \cos^3\alpha)$  である。三重点における幾何学要素パラ  
メータの式はさらに複雑になる<sup>[19]</sup>。Clemm<sup>[19]</sup> は粒内における、臨界核形成エネル  
ギー密度は粒内に比べ大きくなり、粒内におけるボイドの形成は阻害されると  
主張した。この理論に従うと、ボイドの形成場所として三重点が好まれる理由  
をある程度定量的に説明することが可能である。表 2 に示す通り、三重点の幾  
何学要素パラメータ  $f(\alpha)$  の値は通常粒界におけるその値よりも低い値をと  
る。この表からボイド形成点として三重点が好まれることが説明できる。

Riedel<sup>[20]</sup>によると、ボイドの初期半径  $a$  は  $0.2-1 \mu\text{m}$  である。われわれの実  
験においては観察された典型的な値は図 7 示されているように、 $2a=0.46 \mu\text{m}$  で  
あった。核形成臨界エネルギーである  $G^*$  の絶対値を決定するのは非常に困難で  
あるので、この値をボイド形成基準として相対的に用いる。つまり、幾何学要  
素パラメータ  $f v$  の値により核形成の臨界エネルギーを決定する事とする。

#### ・ クリープひずみエネルギー

クリープひずみエネルギーは以下のようにかける<sup>[21]</sup>

$$\dot{W} = \int_0^{\epsilon_c} \sigma_c d\epsilon_c \quad (44)$$

添え字の  $c$  はクリープを表しクリープひずみの値は式 (44) に直接従う。式 (44)  
はクリープにおけるクラックの伝達を支配する  $C^*$  積分<sup>[22]</sup> の計算に用いられる。

(44) 式に基づき、エネルギー密度をボイド形成の臨界エネルギーと比較する。  
このエネルギーモデルを用いてシミュレーションをおこなうこととする。

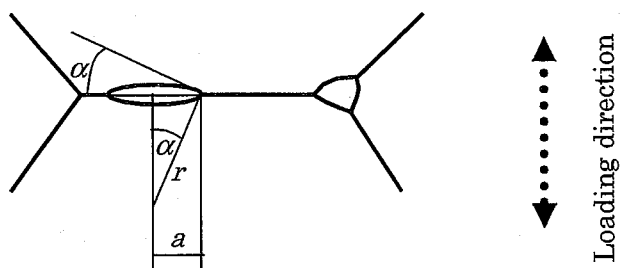


図 6: 粒界におけるボイドの形状

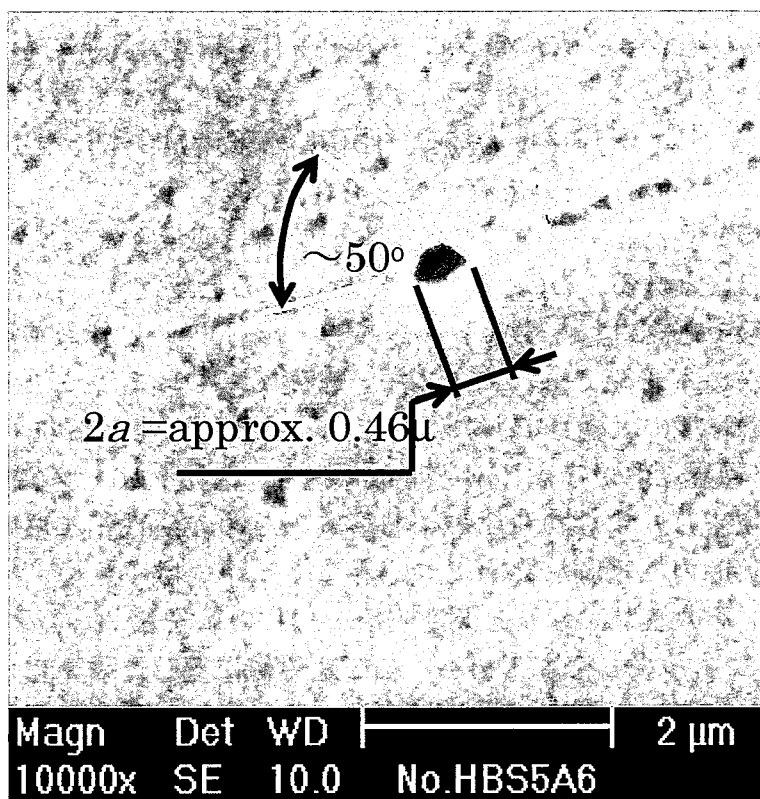


図 7: 304 ステンレス合金の通常粒界で観察されるボイドのサイズ及び形状 (550°C, 定常ひずみ 0.5%)

表 2：三重点及び通常界面における、幾何学要素パラメータ  $f(a)$  の比較 <sup>[18]</sup>

$a$ (°)	$f(a)$ at grain boundaries; $fv1$	$f(a)$ at triple point; $fv3$	$fv1/ fv3$
45	0.4864	0.0974	5.0
50	0.7063	0.2164	3.3
55	0.9801	0.4038	2.4
60	1.3090	0.6718	1.9

## (5) シミュレーション方法

図 8 にシミュレーション方法のフローチャートを示す。7 節でも述べたが、実組織からのシミュレーションを行うために、顕微鏡によって得られた組織写真の粒界をトレースし、デジタル化する。画像の解像度は、 $430 \times 430 \mu\text{m}^2$  のサイズであり、その後 pm200f を用いて有限要素を作成する。アダプティブメッシュを用いて要素を作成した結果、粒界領域において、1 要素当たり約  $4.8 \times 10^{-13} \text{m}^2$  の面積を持つこととなる。この値は要素が円であると仮定すると半径、390nm に相当する。実験で確認されたボイドの標準的半径 300nm に比較すると多少大きいことになるが、本研究では、エネルギー密度に基づいてシミュレーションを行うので、この程度の大きさであれば特に問題は無いと考えられる。

本研究では、粒界におけるボイドの形成機構を、臨界クリープエネルギー密度の差として表現する。すなわち、ボイド形成のための活性化エネルギーが小さい三重点、外部応力に垂直な界面では臨界エネルギーは小さく、外部応力に水平な界面では、その値は大きいと仮定する。詳しい値を表 3 に示す。ここで、 $G^*$  は最小臨界エネルギー密度である。この臨界値に達した要素はボイド形成条件を満たしたとして、システムから削除し、その後の計算に含めない。具体的に述べると、この行為は要素剛性マトリクスにある定数を掛けることにより行う。この値は小さいほど、ボイド形成を明確に表現できるが、あまりに小さいとその後計算が不安定となり遂行不可能となってしまう。従って本研究では、双方の折り合いをとるために  $10^{-3}$  を採択した。 $G^*$  の値は実験において全クリープ寿命の 25% でボイドが始めて発生することから、これを再現するように決定した。

表 3 に従い、粒界 (三重点、通常界面) を負荷方向との角度によって分類する。この作業を行うために、今回われわれは boundary mapper を開発した (図 9)。このアプリケーションにより、要素作成前のデジタル画像に対して、三重点、通常界面を指定しておけば、半自動で要素の分類を行うことが可能となった。



以上の過程によって分類が完了した節点、要素情報を基に ANSYScを用いてク  
リープシミュレーションを行う。

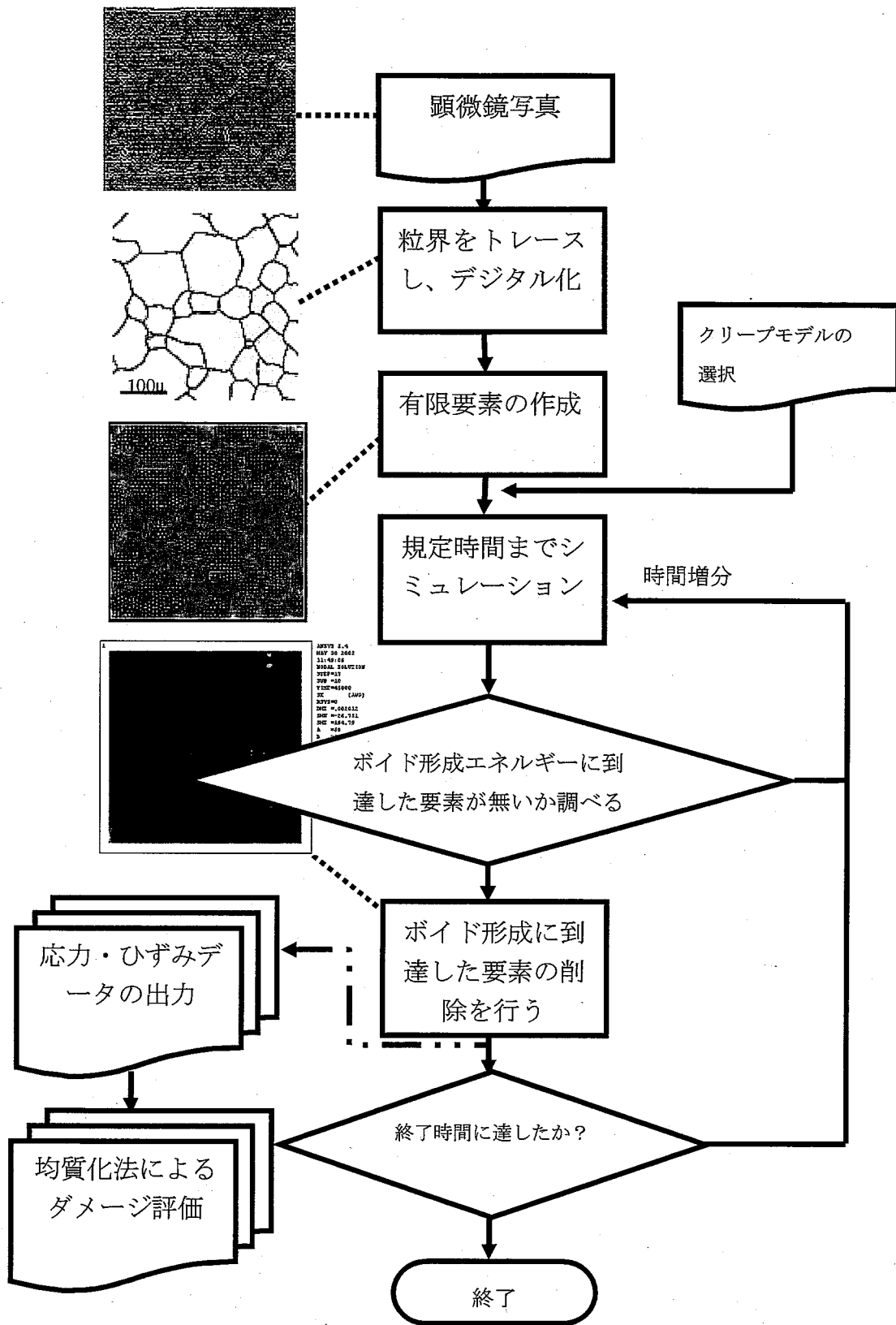


図 8 : シミュレーション方法のフローチャート

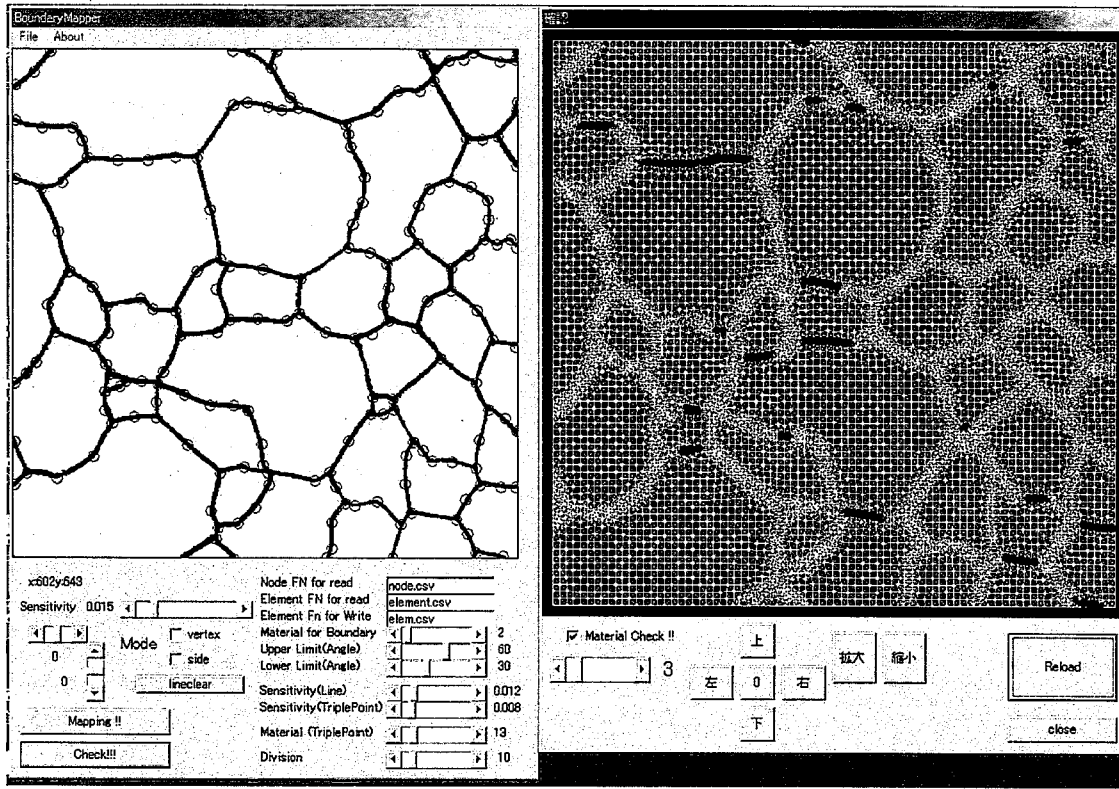


図 9: 荷重との成す角に基づき粒界の分類を行う (boundary mapper)

表 3: 幾何学要素パラメータと荷重方向との成す角による界面要素の分類

ID	$f_v$ 幾何学要素 パラメータ	幾何学要素 パラメータ の値	$\sin \beta$ の 合計値	核形成 エネルギー
三重点 A	$f_v \beta (45^\circ)$	0.0974	2.26-3	$G^*$
三重点 B	$f_v \beta (50^\circ)$	0.2164	1.51-2.25	$2.2 \times G^*$
三重点 C	$f_v \beta (55^\circ)$	0.4038	0.76-1.50	$4.1 \times G^*$
三重点 D	$f_v \beta (60^\circ)$	0.6718	0-0.75	$6.9 \times G^*$
通常界面	$f_v l (50^\circ) / \sin b$	0.7063~	-	$7.2 \sim \times G^*$

$b$  : 荷重方向との成す角

### 2-3 結果の考察・評価

これまで述べた方法を用いて、一定荷重条件（定常クリープ）、一定変位条件（クリープ緩和）を用いてシミュレーションを行い、その結果に関して考察を行った。シミュレーションに用いた各パラメータの値を表 4 に示す。特に、均質化法の特徴である剛性テンソルを用いて、材質変化に伴う損傷を評価する指標としての可能性を検討した。

#### (1) 一定応力条件

図 10-12 に、一定荷重条件でシミュレーションを行ったの結果を示す。図 10 にクリープ寿命で規格化した時間とクリープひずみの関係及び、それに伴う組織変化を相当応力分布により表現した図を示す。また、図 11 にクリープ進展における組織の変化（相当応力分布）を示す。初期状態では、粒界を含め全組織は均一であるので応力の集中は起こっておらず、またボイドの形成も見られない。全クリープ寿命の 25%付近においてクリープによるボイドの形成が始まり、ボイドの形成に伴う、応力集中により系がその均質性を失う様子が見られる。ボイドの形成がさらに進展し結合することに系内の応力の不均一性は加速化され、クリープひずみに加えて塑性変形が系の組織変化を支配することとなる。最終的にはボイドの結合に起因するクラック進展により破壊に至る。

損傷の進展を評価するため、ボイド領域の時間変化を図 12 に示す。クリープ寿命に近づくとつれ、ボイド領域が指数関数的に増加していることが見て取れる。

#### (2) 一定変位条件

図 13 にクリープ寿命で規格化した時間と応力との関係及び、それに伴う組織変化を相当応力分布により表現した図を示す。図 13 では、2つの条件だけ示すが、0.4%を最大値として 0.05%まで系統的に解析を行った。一定荷重の場合と異なり、一定変位（すなわち応力緩和シミュレーション）では、2つの可能性が存在する。つまり、一定変位が十分大きく、クリープエネルギーがボイド形成エネルギー障壁を超えボイドが形成される場合と、一定変位が小さく、最小のエネルギー障壁  $G^*$  を超えるクリープエネルギーが生じずボイドの形成が起らない場合である。図 14 に、各々の変位に対応する、ボイド領域の時間変化を示す。このグラフから、一定変位を 0.175%以上に設定することで、ボイドは形成され、それ以下ではボイドが形成されないことが見て取れる。さらに、一定変位の値が大きいほどボイド形成までの時間が短く、さらにボイド領域が広くなることが理解できる。例えば、一定変位を 0.4%とした場合約 300 時間後に最初のボイドが形成されるが、一定変位を 0.165%とした場合には約 1000 時間後とな

る。さらに、今回のシミュレーション条件下では、一定変位 0.16% がポイド形成の臨界変位であることが伺える。

### (3) A パラメータ及び TRD508 によるシミュレーション結果の評価

パラメータ A 法および TRD 508 は、この分野で最も多用される寿命評価法である。TRD (TRD 508) は、クリープ損傷段階の一般的基準を与える。TRD によると、クリープ進展中の材料は 0~5 まで、6 つの段階に分類される。図 15 に TRD における各段階の基準とそれに対応する組織図を表示す。シミュレーション結果と比較すると、ポイドの形成が開始されるクリープ寿命の 25%-30% が TRD508 レベル 2 に相当する。TRD 基準によるとこの段階は、クリープ損傷を生じているとはみなされない。さらに、クリープが進展しクリープ寿命の 70% 程度に達すると、特定界面にポイドの集合が見られるようになる。この範囲は TRD 基準で、損害レベル 3 とされ、マイクロクラックがみられるようになるクリープ寿命の 90% は損害レベル 4 にあたる。更なるクラック成長をへて破壊に至る。

パラメータ A による寿命評価法を図 16 で示す。パラメータ A は全粒界に対する、損傷を受けた粒界の割合により与えられる変数である。通常は組織図に応力方向の直線を引くことにより数えることが可能であり、この直線と交差する粒界の数を数えその中で損傷を受けている割合をパラメータ A の値とする。シミュレーション結果に対してパラメータ A 法を用いるために引いた直線の例を図 17 に示す。さらに、この値を式 (45) に代入することにより寿命の測定が可能である。

$$\frac{t_{rem}}{t_s} = \frac{1}{\{1 - (1 - A)^{n\lambda/(\lambda-1)}\} - 1} \quad (45)$$

ここで  $t_{rem}$  はクリープ寿命  $t_s$  は計測に用いた時間である。定数  $n$  はクリープ乗数、 $\lambda$  は二次ひずみに対する破壊ひずみの割合である。この値を用いて計算した結果を図 14 に示す。

### (4) 均質化法を用いたクリープ進展に伴う剛性率低下現象の評価

漸近展開に基づく均質化法を用いて、クリープ進展に伴う剛性率の低下に着目し寿命予測を行う。4 節で示した通り、線形弾性体における均質化された合成率は以下の式で表せる。

$$D_{ijkl}^H = \frac{1}{|Y|} \int_Y \left( D_{ijkl} - D_{ijmn} \frac{\partial \chi_m^{kl}}{\partial y_n} \right) dY \quad (46)$$

この式を用いて応力方向の剛性率低下を求める。シミュレーション結果に対し

て、時間変化に伴う剛性率変化を図 19 に、CDM、FEM による応力平均の結果と共に示す。今回のシミュレーションでは、界面における要素のサイズが実際のポイドに比べ多少大きくなっているため剛性率の低下を大きく見積もってしまっている可能性がある。

表 4：シミュレーションに用いた代表的パラメータ (SUS304, 538°C) [10]

Ramberg-Osgood 定数 ( $\varepsilon = \sigma/E + A\sigma^m$ ) :

ヤング率 ( $E$ )	121 Gpa
ポアソン比 ( $\nu$ )	0.3
塑性係数 ( $A$ )	$2.78 \times 10^{-17}$ MPa <sup>-<math>m</math></sup>
塑性指数 ( $m$ )	6.56

上記の値を用いて弾塑性材料を多直線近似によりモデリングした

Norton 乗数 ( $\dot{\varepsilon}_e = B\sigma_e^n$ ) :

クリープ係数 ( $B$ )	$4.20 \times 10^{-19}$ MPa <sup>-<math>n</math></sup> /h
クリープ指数 ( $n$ )	6.05

上記の値を用いてクリープをモデリングした

その他の代表的パラメータ

要素タイプ	6-節点 三角形構造要素
要素サイズ (面積)	$4.8 \times 10^{-13}$ m <sup>2</sup> (粒界)
ポイド要素剛性マトリクスに 掛け合わせる定数	$1 \times 10^{-3}$
収束判定	0.5% (力)
最大クリープ率 (1 ステッ プ)	0.25
一定荷重	70 Mpa
一定変位	0.4%, 0.3%, 0.2%, 0.165%, 0.16%
境界条件	軸対称 (下方向、左方向)

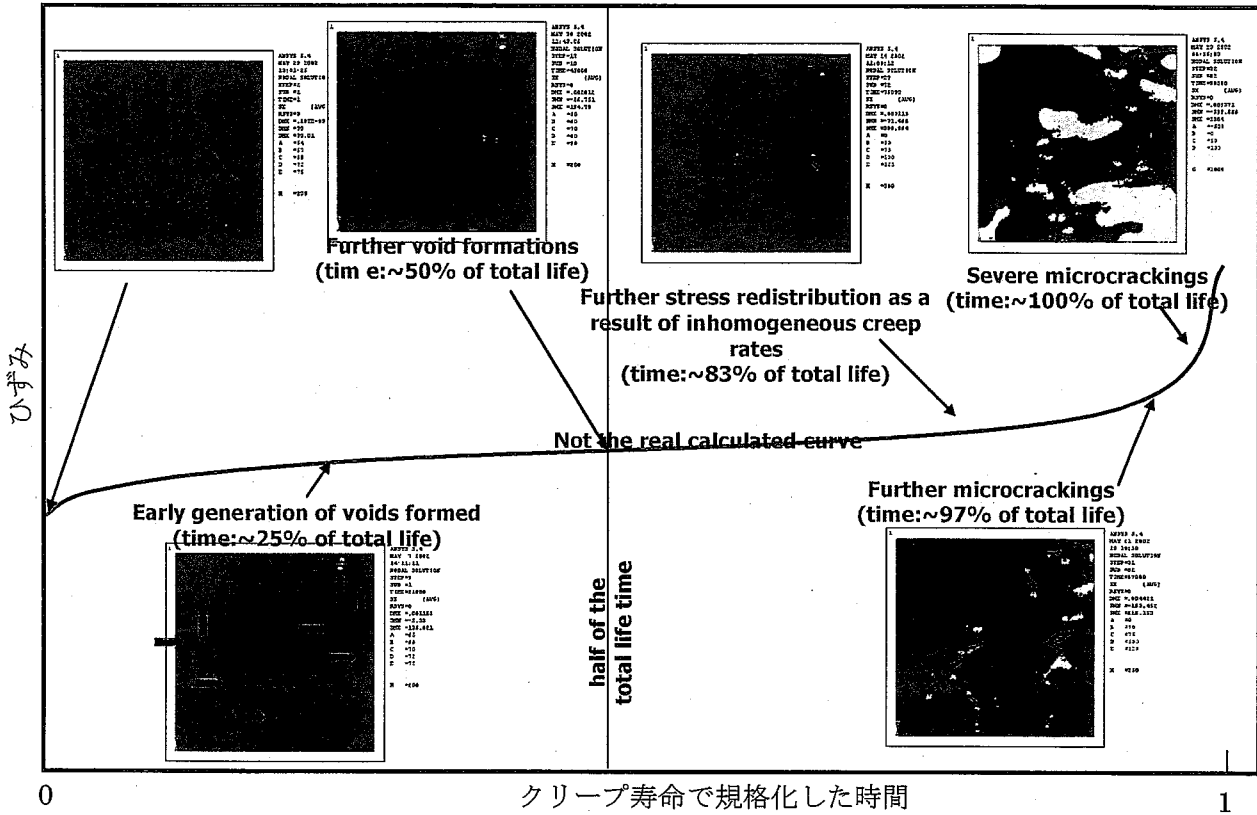


図 10: 一定荷重条件におけるシミュレーション結果の概略 (横軸: クリープ寿命で規格化した時間、縦軸: ひずみ) - 計算時間 90000 時間、最小臨界エネルギー  $G^* = 4.0 \times 10^4 \text{ J/m}^3$ 、一定荷重 70MPa

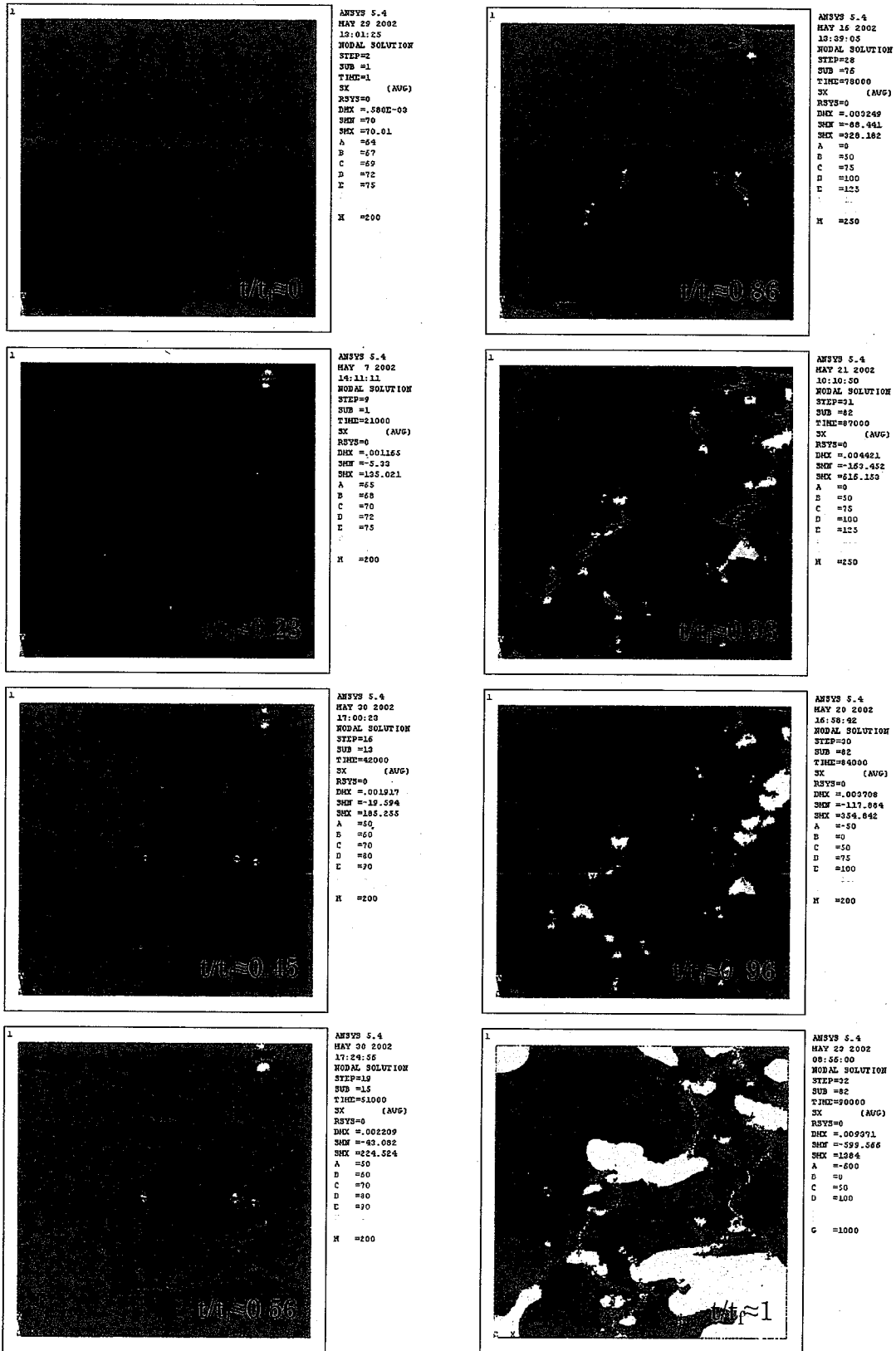


図11：クリープ進展に伴う組織の時間変化（相当応力分布）



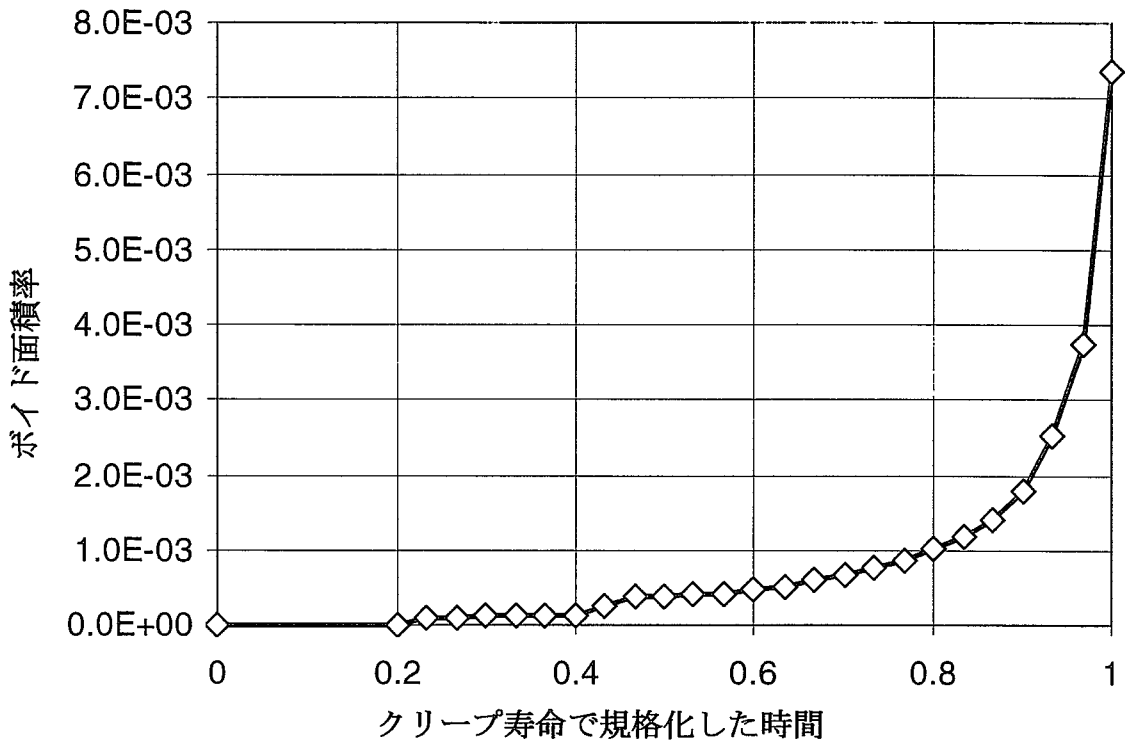


図 12 : クリープ進展に伴うボイド領域 (面積) の時間変化 (一定荷重条件)

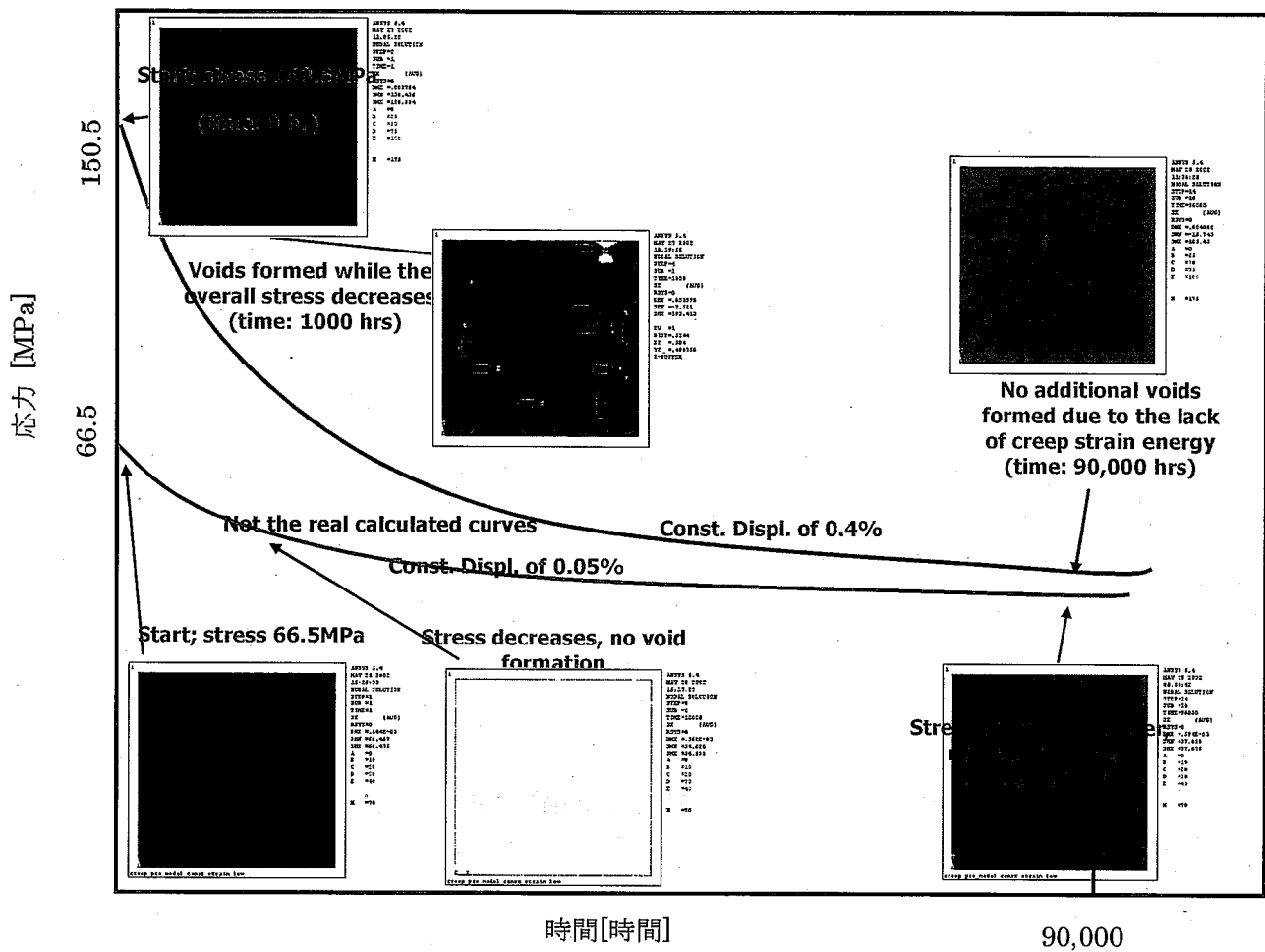


図 13：一定変位条件におけるシミュレーション結果の概略（横軸：クリープ寿命で規格化した時間、縦軸ひずみ）-計算時間 90000 時間、最小臨界エネルギー  $G^* = 4.0 \times 10^4 \text{ J/m}^3$ 、一定変位 0.05%, 0.25%

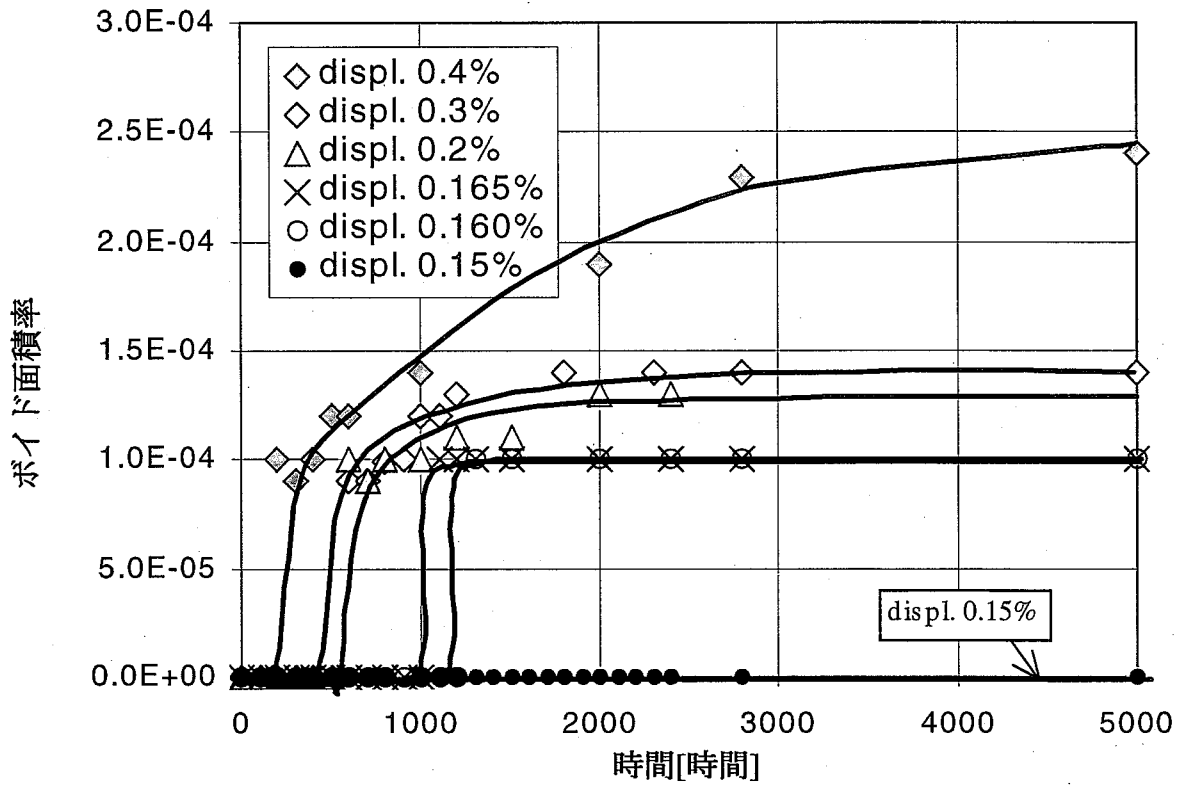


図 14 : クリープ進展に伴うボイド領域 (面積) の時間変化 (一定変位条件)

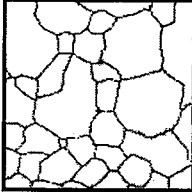
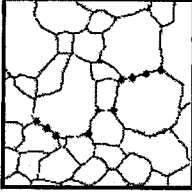
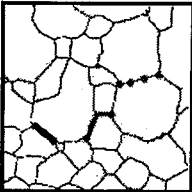
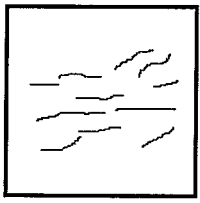
レベル	組織	評価	シミュレーション
0		組織変化は見られない	
1		クリープひずみは存在するがボイドの形成には至らない	
2		孤立ボイドの形成 (TRD508 の定義においてはこの段階は損傷とはみなされない)	クリープ寿命の 25~30%
3		粒界におけるボイドの集合体の形成	クリープ寿命の 70~80%
4		連結したボイドとマイクロクラックの形成	クリープ寿命に対して ~90%
5		mm オーダーのクラックの発生	クリープ寿命

図 15 : TRD によるボイドの定量的評価

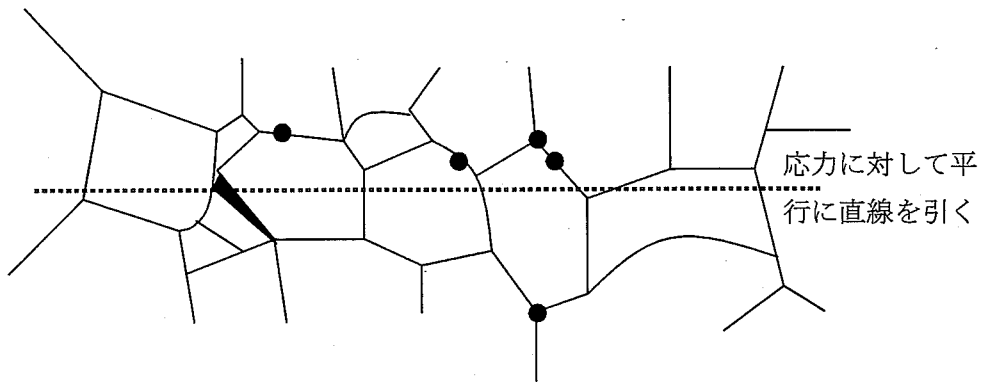


図 16 : パラメータ A 法による評価の概略 (全粒界に対する損傷粒界の割合)

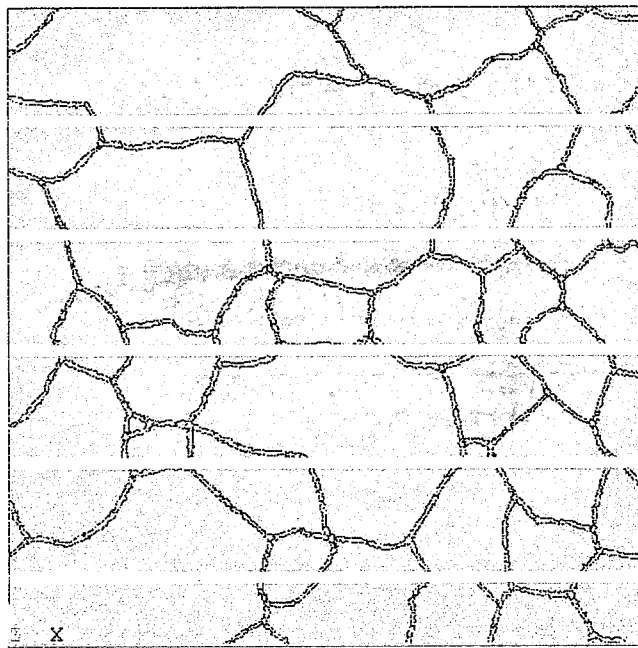


図 17 : シミュレーション結果に対して用いた直線群

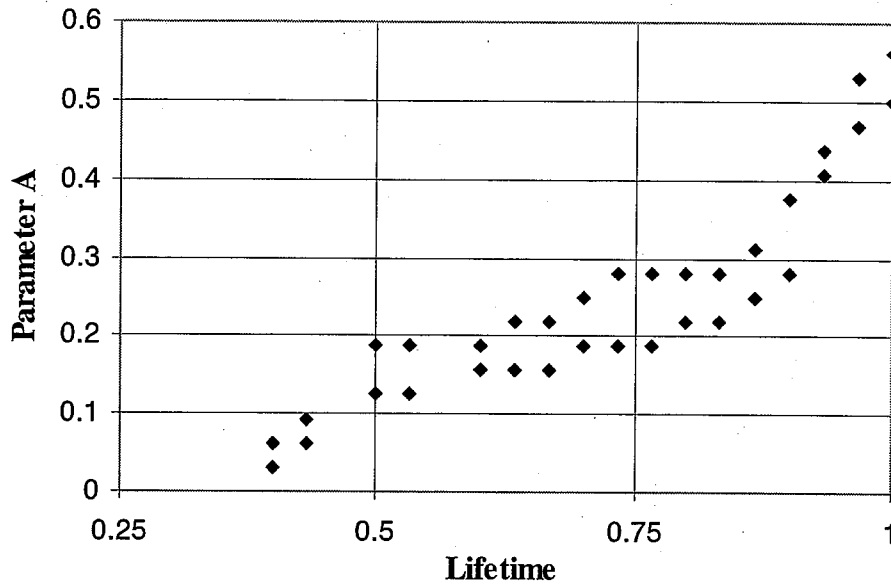


図 18 : クリープ進展に伴うパラメータ A 値の変化

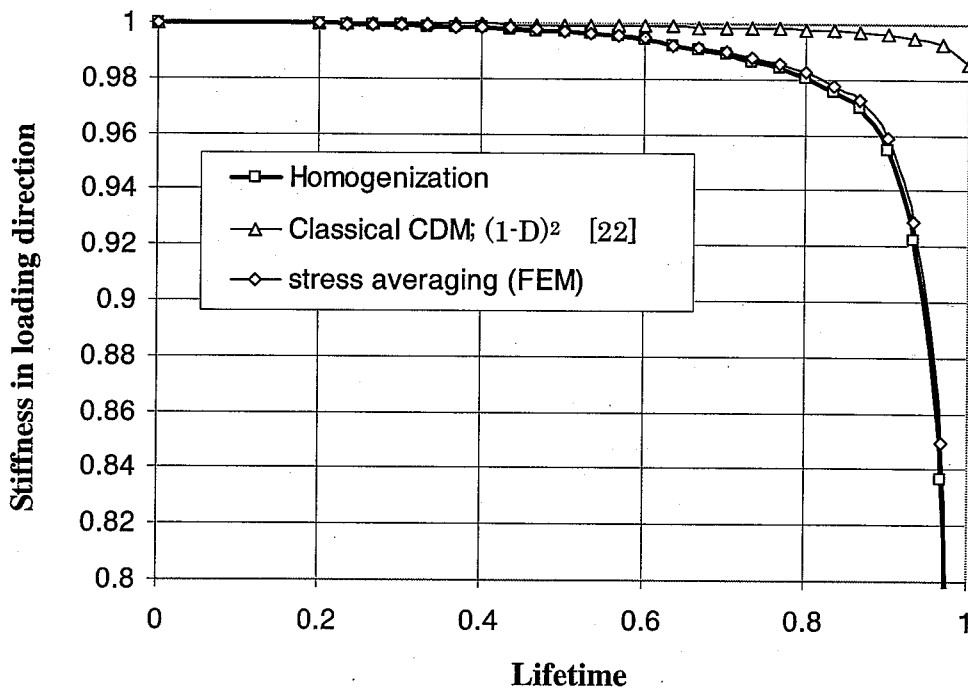


図 19 : クリープ進展に伴う、無損傷状態で規格化した剛性率の時間変化

### 3、おわりに

均質化法に基礎を置くマルチレベルモデリングによって、材料非線形が支配的となる高温変形で進行する損傷、破壊を記述する解析システムを開発した。特徴は、以下の5点にまとめられる。

1)階層化：試験片・部材レベルの高温変形と材料組織レベルの高温変形・破壊とを独立して解析することで、材料固有の構成関係および高温破壊マイクロメカニクスのみで、マクロな損傷も評価できる。

2)連成化：階層化の各レベルにおいて、変形場—温度場—拡散場の相互作用を考慮することが可能となる。

3)実組織モデル：組織写真から画像処理—自動要素分割機能を併用することで、多相の物質の連続体力学挙動を記述できる。特にボイド発生なども適切に取り扱うことが可能となった。

4)高温破壊マイクロメカニクス：従来のマイクロメカニクスと異なり、ボイド生成・ボイド合体・クラック形成を直接取り扱うことで、無損傷の材料から破断直前の材料までを表現することができるようになった。

5)試験片・部材損傷：材料組織上の力学量から、均質化した力学特性を解析し、損傷を受けた組織の損傷度を推定することができた。

これにより、これまで全くといってよいほど利用されてこなかった材料組織データと、試験片レベルでの実験データならびに部材レベルでの実験データと結合することが可能となった。

今後は、開発したシステムを基礎において、核燃料サイクル機構との共同研究をさらに進める考えである。

#### [謝辞]

本研究を推進するにあたり、Dr. Y. Prawato 氏（当時、東京大学先端科学技術研究センター・外国人客員研究員）ならびに諏訪 嘉宏・博士（現、東京大学先端科学技術研究センター・特任助手）の助力を得た。ここに深謝する。

#### 参考文献

- 1) M. P. Bendose and N. Kikuchi: Generating Optimal Topologies in Structural Design Using a Homogenization Method, *Comp. Methods Appl. Mech. Eng.*, Vol. 71, pp197-224, 1988
- 2) T. Aizawa, Y. Prawoto and F. Tsumori: Coupled, macro-micro modeling for hot deformation and sintering, *J. Computational and Applied Mathematics*,

- Vol. 149, pp307-324, 2002
- 3) 小石正隆・加部和幸: 汎用プログラムをベースにした均質化法解析システムの開発, 日本機械学会論文集 (A編), 59巻, 561号, pp. 1395-1400, 1993
  - 4) Shin-Wei Hsino and N. Kikuchi: Global-Local Analysis of Thermoforming Process of Thermoplastic Composite Laminates by the Homogenization Method, 第12回 Quintセミナーノート, pp67-89, 1996
  - 5) S.J.Hollister, J.M.Brennan and N.kikuchi: Homogenization sampling procedure for calculating trabecular bone effective stiffness and tissue level stress, Journal of Biomechanics, Vol.27, No.4, pp433-444, 1994
  - 6) Carter WC, Langer SA, Fuller ER, OOF Manual, NISTIR 6256, November 1, 1998
  - 7) ANSYS, Inc., Theory Reference -- ANSYS Release 6.0, Canonsburg, PA, 2000
  - 8) 木村宏: 材料強度の考え方, アグネ技術センター, 1998
  - 9) Raj SV, Matrls Sci and Eng A322 (2002), p.132.
  - 10) Mukherjee, Matrls Sci and Eng A322 (2002), p.1
  - 11) Nix WD, Ilschner B, in: Haasen P, Gerold V, editors. Strength of metals and alloys. Oxford: Pergamon press, 1980, p.1503.
  - 12) Frost HJ, Ashby ME, Deformation mechanisms maps, the plasticity and creep of metals and ceramics. Oxford: Pergamon press., 1982.
  - 13) Argon AS, Im J, and Moody NR: Metall Trans, 6A, pp825, 1975
  - 14) Vander Burg MW, Vander Giessen, and Brouwer RC: Acta Metall., 44, pp505, 1996
  - 15) Giessen ED and Tvergaard V: Mech Mater. 77, p.47., 1997
  - 16) Riedel, H.: in Material Science Technology, Vol. 6, ed. R. W. Cahn, P. Haasen and E.J. Cramer.: VCH Verlag, New York, p. 565., 1993
  - 17) Shewmon P and Anderson P: Acta Mater, 46, p.4861, 1998
  - 18) Argon, A. S.: in Recent Advances in Creep and Fracture of Engineering Material and Structures, ed. Wilshire B and Owen DRJ., Pineridge Press, Swansea, p. 1, 1982
  - 19) Clemm PJ and Fisher JC: Acta Metall, 3, p.70, 1995
  - 20) Riedel H: ASTM STP 700, ASTM, Philadelphia, p. 112, 1980
  - 21) Kim YJ: Int. Journal of Press. Vess. Piping, 78, p.661, 2000
  - 22) Anderson TL: Fracture Mechanics, CRC press, 1995
  - 23) Hahn and Kim, Eng Fract Mech 68, p.35., 2001