

SIP-MI プロジェクトにおける 性能予測システムの開発

榎 学*

1. はじめに

構造物の多くは長期間使用され、人々の安心・安全に直接関わる。そのため材料および構造物の特性・性能評価は時間とコストをかけて行われている。例えば、繰り返し荷重下で長期に使われる構造材料では、様々な試験法を用いて入念に評価され、実使用期間に相当する時間をかけて疲労特性が評価され、実構造体に近いスケールでも評価されてきた。これらは構造物の信頼性を確保する上で必要であるが、材料開発が長期化・高コスト化する主要因となっており、計算手法を駆使して性能予測をいかに効率的かつ正確に行うかが、今後の構造材料の開発において強い競争力を維持するため重要である。

内閣府の戦略的イノベーション創造プログラム(SIP)「革新的構造材料」(マテリアルズインテグレーション)プロジェクトでは、疲労強度・クリープ強度・水素脆化・脆性破壊等の性能に関して、理論式、経験式を網羅した順解析を行う計算モジュールを開発するとともに、性能に関する膨大なデータを解析して得られるデータベースモジュールの開発も行い、実際の構造材料開発に役立つような性能予測システムの開発を目指した。また、多様な素材、プロセスから製造されて部材や構造体に用いられる構造材料の組織と時間依存の性能の予測を、理論や経験則、数値モデリング、データベース、データ駆動予測などの融合(インテグレーション)から可能とするマテリアルズインテグレーションシステムの構築を目的とした。その取り組みの一部を紹介する。

2. 性能予測システムの概要

本システムでは、組織予測システムを用いて得られた組織情報から、疲労強度・クリープ強度・水素脆化・脆性破壊等の構造材料における時間依存の性能を予測するシステムの開発を行った。性能予測システムは大きく分けて、理論的な物理モデルを用いて順解析を行う計算モジュール群と、これま

で蓄積されてきた性能データを用いるデータベースモジュール群から成る。また、予測された性能の妥当性を評価するための検証も行うことにより、性能予測システムの有効性の確認を行った。また、組織情報が必ずしも得られない場合においても、材料・溶接条件・溶接構造を用いて、ある使用条件下における時間依存の性能を予測するモジュールに関しても開発を行った。

疲労性能予測モジュールにおいては、図1に示したような計算を連続的に行うことにより、鉄鋼材料の溶接部の疲労特性をばらつきも含めて予測を可能としている⁽¹⁾。疲労性能予測モジュールは、三次元組織情報を入力データとして、例えばき裂発生モデル等を用いて高精度な予測をするモジュールと、抽出された組織パラメータから得られる比較的単純な構造体モデルを用いることにより、高速で予測をするモジュールから構成される。開発されたそれぞれのモジュールを用いた予測結果を比較することにより、各モジュールの最適化を図っている⁽²⁾⁻⁽⁴⁾。図2に示したクリープ性能予測モジュールでは、各種クリープ構成則によるクリープ変形解析、損傷力学・破壊力学・拡散方程式等によるクリープ損傷と破壊の計算解析を行う。厚肉構造部材や溶接継手のクリープ寿命予測では、多軸応力場の影響が重要になるが、これを考慮した計算コードの開発を行っている⁽⁵⁾⁽⁶⁾。図3の水素脆化予測モジュールにおいては、応力誘起水素拡散を支配する構成方程式の解析を行うことにより、構造体での水素拡散輸送に関する計算を行う。この結果を溶接部の三次元の応力場と連成させることにより水素脆化割れを予測する。また溶接部の不均一組織による水素トラップ効果の違いから、拡散現象も組織に依存する。そのため、組織予測システムで得られた情報を参照しながらこれら影響も考慮する⁽⁷⁾。図4で示した脆性破壊予測モジュールにおいては、溶接部での熱影響部や溶接金属内の位置によって異なるマイクロ組織から靱性を予測し、さらにこれまでに得られているシャルピー衝撃試験結果などのデータを有機的に組み合わせることにより溶接部の靱性を予測することを試みている⁽⁸⁾。

* 東京大学大学院工学系研究科；教授(〒113-8656 東京都文京区本郷7-3-1)

Development of Performance Prediction System on SIP-MI Project; Manabu Enoki(The University of Tokyo, Tokyo)

Keywords: materials integration, materials informatics, structural materials, welding, performance prediction, integrated computational materials engineering, data driven approach, fatigue, creep, hydrogen embrittlement, fracture toughness

2019年5月20日受理[doi:10.2320/materia.58.498]

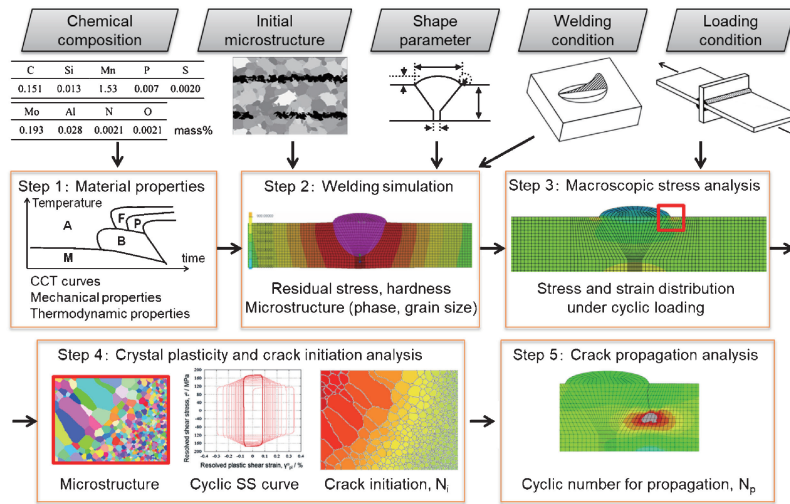


図1 疲労性能予測モジュールのワークフロー。(オンラインカラー)

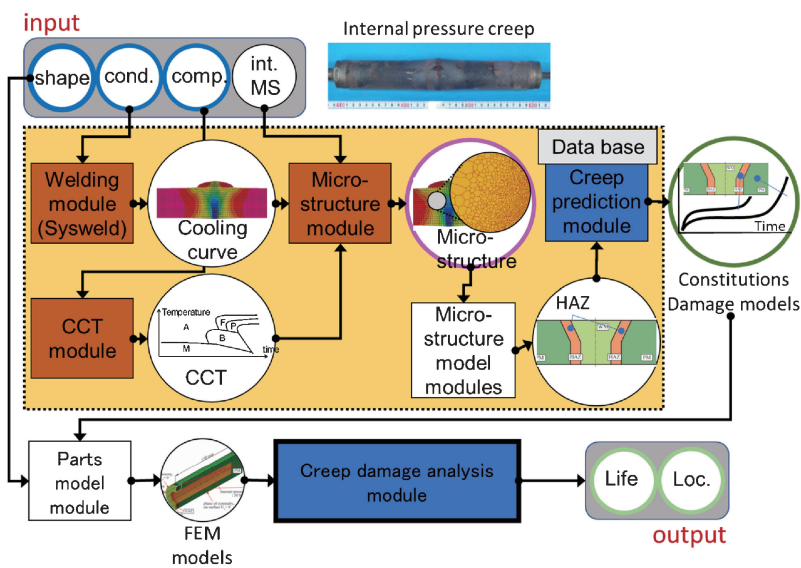


図2 クリープ性能予測モジュールのワークフロー。(オンラインカラー)

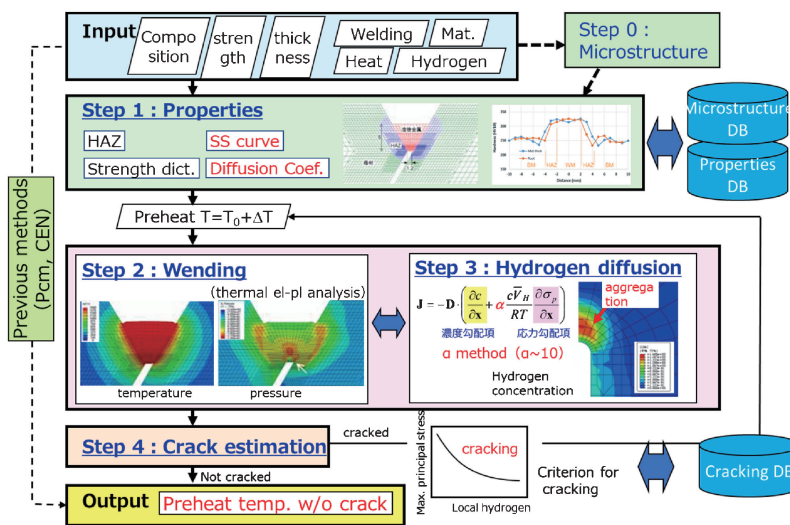


図3 水素脆化予測モジュールのワークフロー。(オンラインカラー)

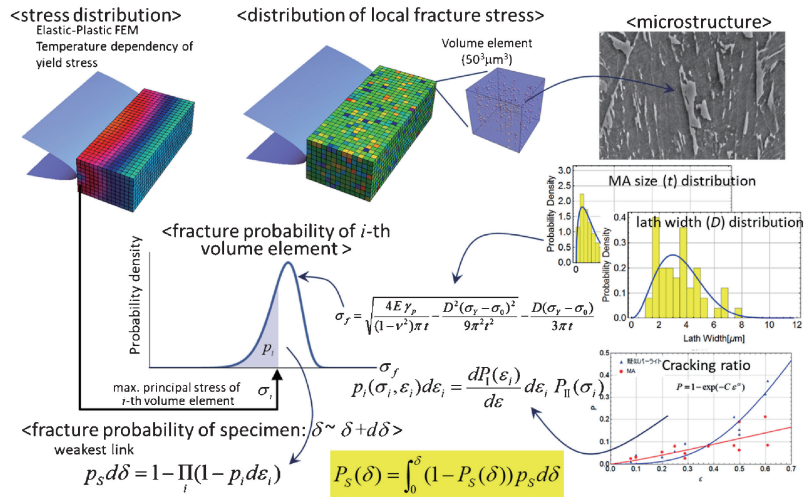


図4 脆性破壊予測モジュールのワークフロー。(オンラインカラー)

3. 疲労性能予測

(1) 概要

以下での疲労性能予測の例について述べる⁽¹⁾。新しい材料や構造の開発においては、その性能を評価するためにしばしばかなりの時間とコストを要する。溶接構造物の疲労特性の場合、疲労破壊の統計的挙動を検証するために、膨大な量の疲労試験を実施する必要がある。したがって、より短時間で疲労特性の評価は非常に重要になる。従来の疲労評価では、S-N 曲線に基づく疲労設計曲線(応力範囲と破断回数との関係に対する逆べき乗則)が用いられている。このアプローチでは、主に接合の形状が考慮され、ほとんどの場合残留応力と微細構造の影響は無視される。一方、疲労特性を改善するためのいくつかの新しい材料が開発されている。例えば、低変態温度溶接材料は残留応力を低減し、二相鋼は微細構造を制御することによって疲労特性を改善する。したがって、残留応力および微細構造の影響の評価がますます重要になってきている。

このような背景から、溶接継手の疲労に関する数値シミュレーション技術が提案されている。フェイズフィールド法は、複雑な微細構造を予測する有望な方法の1つであり、また結晶すべりや双晶などの物理的変形メカニズムを考慮した結晶塑性モデルが近年注目されている⁽⁹⁾。微視組織と結晶の塑性に基づく疲労き裂発生寿命の予測が精力的に行われている⁽¹⁰⁾。また拡張有限要素法(X-FEM)は、疲労き裂の進展を予測するための強力かつ広く使用されているツールであり、更なる改良も進められている。

この研究の目的は、溶接継手の疲労性能を予測するために、先に説明した最新の計算技術を統合して包括的な枠組み(フレームワーク)を開発することである。溶接継手の疲労寿命予測法の概要を図1に示す。この方法は、市販のソフトウェアとデータベースを用いて、以下の手順からなる。(1) CCT 曲線を含む材料特性と鋼の機械的および熱的特性の推定、(2)熱応力有限要素法(FEM)による巨視的モデル上で溶接プロセス中に生じる温度場、残留応力およびひずみの計

算、(3)硬化構成モデルを用いた FEM による繰り返し荷重下での巨視的応力場の計算、(4)巨視的モデルにおける応力集中領域の検出および微細多結晶構造モデルの作成、Tanaka-Mura モデルによる疲労き裂発生寿命(Ni)の解析、(5)拡張有限要素法(X-FEM)による初期き裂からの疲労き裂伝播寿命(Np)の解析、最終的な Ni と Np の合計による破断寿命の推定。前述のステップを自動的に実行する計算のフレームワークが構築された。一例として、低炭素鋼(0.15%C)を用いて広く使用されている突合せ継手における疲労寿命を提案された方法によって評価した。

(2) 解析方法

提案された方法の第1段階では、市販のソフトウェア JMatPro v9.0 を使用して化学組成から様々な材料特性を計算した。化学組成から、連続冷却変態(CCT)図、密度、比熱、熱伝導率、ヤング率、ポアソン比、熱膨張率、降伏応力、硬化勾配を求めた。最大加熱温度1350°C、旧オーステナイト粒径500 μm の計算を行った。ソフトウェアの計算手順は、CALPHAD(状態図の計算)方法と関連する経験式に基づいている。応力-ひずみ曲線は、SYSWELD の混合物の規則によって計算した。降伏応力は、個々の相の降伏応力の平均として計算した。

提案手法の第2ステップは、残留応力と微細構造分布を解析する溶接シミュレーションである。Abaqus CAE で、板厚や止端半径などの形状パラメータに基づいて、2次元の有限要素モデルを作成した。幾何形状は、測定された止端半径と余盛角の平均値に対応するように選択された。有限要素モデルでは、最小サイズ0.005 mm の4ノード平面ひずみ要素(CPE4)を使用した。前節で計算された材料特性がモデルに適用された。母材の初期組織は75%のフェライトと25%のパーライトで構成されていた。溶接部の材料特性は、単純化のために母材の材料特性と同じであると仮定した。

熱入力分布は Goldak の二重楕円熱源モデルによって定義された。Goldak の熱源モデルは、三次元の二重楕円体のガウス熱分布関数であり、アーク溶接プロセスの熱伝達解析に広く使用されている。前楕円体の長さ、後楕円体の長さ、熱

源の深さ、熱源の幅は、それぞれ10, 20, 10, および7.5 mm に設定した。幅および深さの値は、溶接金属のすべての元素が溶融するように選択された。熱源は板の中心線に沿って1 mm/s の速度で移動した。熱入力合計量は1.5 kJ/mm とした。シングルパス溶接が完了した後、突合せ継手を室温まで冷却させた。

一般に、熱伝導解析、相変態解析および応力解析が、溶接プロセス中の微細構造および応力-ひずみ状態を得るために必要である。このシミュレーションでは、熱伝達と相変態の問題は強結合法によって解かれた。熱伝達の問題はフーリエ方程式と潜熱を考慮して計算した。相変態解析では、拡散タイプとマルテンサイトタイプの変態がそれぞれ予測された。ビッカース硬さの分布は、実験式に従って、700°C(Vr)における化学組成および冷却速度からも導出された。オーステナイト結晶粒度はまた、Leblondらによって提案された増分方程式によって計算された。相転移に伴う熱伝達解析後、伝熱解析により算出された温度分布及び相変態履歴に基づいて、熱弾塑性解析を行い、残留応力を算出した。この解析では、弾性ひずみ、塑性ひずみ、熱ひずみ、変形ひずみを考慮した。これらの計算は、市販のFEMコードSYSWELDによって実行された。

第3のステップは、巨視的な応力解析である。この段階の入力データは、硬度分布、前のステップから得られた残留応力分布、荷重条件である。この硬度分布から、前のステップで用いた有限要素モデルを10領域に分割し、各領域に異なる応力-ひずみ曲線を与えた。応力-ひずみ曲線は、SYSWELDの混合則によって計算した。負荷する前に残留応力のすべての成分がモデルに導入された。このモデルは、応力比 $R = -1$ および7つの異なる応力振幅、すなわち100, 150, 200, 300, 400, 500および600 MPa で10回の繰返し負荷を受けた。巨視的応力解析の後、最大主応力の最大値を有する要素の位置を記録し、次のステップで使用した。

第4ステップは、結晶塑性有限要素法(CP-FEM)を用いたメソスコピック応力場の解析とき裂発生である。このステップでは、第2ステップおよび第3ステップの結果を入力値として使用した。微視構造モデルの形状とメッシュが図5に示めされている。モデルの形状は、巨視的モデルの最も高い応力位置周辺の領域から切り取られた。この領域は、マルテンサイトの体積分率が第2段階で約100%と予測されたため、マルテンサイト単相であると推定した。旧オーステナイトの平均粒径は、第2ステップで算出した粒度分布を参考にして求めた。再構築された粒の形態は、以前の研究(2)で説明したテッセレーション手法によって生成された。微細構造モデルのサイズは、約40個の粒子を含むように選択された。モデルは、平均サイズ50 μm の4ノード平面ひずみ要素(CPE4)のメッシュで、結晶方位はランダムに割り当てられた。

微視構造モデルの弾性-塑性変形挙動を計算するために、Hutchinsonらによって提案された現象論的構成則を考慮した先進材料シミュレーションキット(DAMASK)⁽¹¹⁾を使用した。非直線的な硬化は、Armstrong-Frederick硬化法によってモデル化されている。ここで、塑性せん断ひずみ速度、分解せん断応力、臨界分解せん断応力(CRSS)、すべり系の

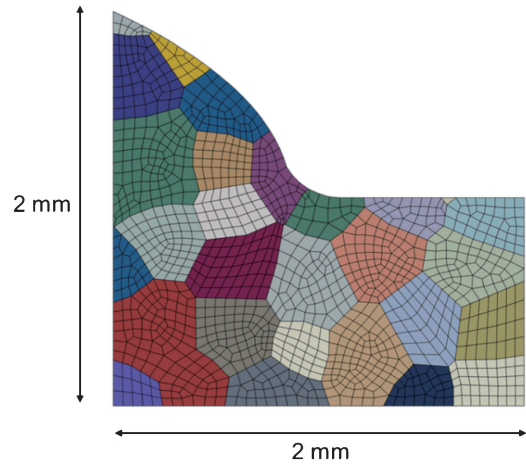


図5 メソスコピックモデルの幾何形状とメッシュ。(オンラインカラー)

背応力などこのシミュレーションで使用された結晶塑性パラメータの一部は文献から得られた。このシミュレーションの境界条件は、巨視的モデルの変位場によって定義された。

き裂発生解析は、すべり帯に蓄積された不可逆的エネルギーを考慮したTanaka-Muraモデル⁽¹²⁾に基づいて行った。Niの値は、すべり線に平行に定義された潜在的なき裂経路を平均して評価した。最初のき裂のみが計算コストを節約するために考慮された。さらに、7つの異なる微細構造モデルを、き裂発生寿命のばらつきを評価するために、同じ手順および同じ平均粒径を用いてランダムに作成した。

最後のステップは、X-FEMを用いた疲労き裂進展解析である。この方法では、き裂はジャンプ関数によって表され、有限要素メッシュはき裂経路に従う必要はない。前のステップで得られた初期き裂の位置と長さを巨視的モデルに導入した。き裂成長速度は、パリズ則から計算された。応力拡大係数は、Abaqus内のバーチャルクラック閉鎖法によって計算された。これらの定数は、溶接鋼構造物の疲労設計指針にしたがったものが用いられた⁽¹³⁾。第1ステップから第5ステップまでの一連の計算を自動的に実行するpythonスクリプトが開発された。

(3) 結果

JMatProで熱伝導率、降伏応力、CCT図が計算された。熱伝導率と降伏応力を各相の温度の関数として求めた。CCT曲線は、溶接に用いられた低炭素鋼(C 0.1~0.2%)の実験的に求められたCCT図と定性的に類似していた。密度、比熱、ヤング率、ポアソン比、熱膨張係数、硬化勾配も化学組成から求めた。これらの特性を用いて溶接シミュレーションを実施した。フェライト、パーライト、ベイナイトの体積分率も計算した。熱源から遠い母材は、初期微細構造(フェライト75%およびパーライト25%)と同じであった。HAZの旧オーステナイト粒径は約1 mmと推定された。ビッカース硬さは143~377に分布していた。母材と同じ材料特性が溶接材料に割り当てられているので、溶接金属と母材との間の界面で分布が連続していた。実際の溶接では、HAZの硬度の低下がしばしば見られるが、硬度は溶融帯からほぼ単調に減少する。正確な残留応力と微細構造分布を得

