

SPHによる弾塑性マルチスケール解析の一方向分離型解法

Development of elastic-plastic decoupling multi-scale simulation method using SPH

全世原¹⁾, 呂学龍²⁾, 松井和己³⁾, 山田貴博⁴⁾

Sewon JEON, Xuelong LYU, Kazumi MATSUI and Takahiro YAMADA

1) 横浜国立大学 環境情報学府情報環境専攻 (〒240-8501 横浜市保土ヶ谷区常盤台 79-7, E-mail:jeon-sewon-yk@ynu.jp)

2) 博(工) 横浜国立大学 環境情報研究院 (〒240-8501 横浜市保土ヶ谷区常盤台 79-7, E-mail: lu-xuelong-tc@ynu.ac.jp)

3) 博(工) 横浜国立大学 環境情報研究院 准教授 (〒240-8501 横浜市保土ヶ谷区常盤台 79-7, E-mail: kzm@ynu.ac.jp)

4) 学博 横浜国立大学 環境情報研究院 教授 (〒240-8501 横浜市保土ヶ谷区常盤台 79-7, E-mail: tyamada@ynu.ac.jp)

The purpose of this study is to develop a decoupling multi-scale method using Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH) for analysis of elastic-plastic deformation which can also deal with Severe Plastic Deformation (SPD). It is well known that Finite Element Method (FEM) has weakness in simulating SPD such as Equal Channel Angular Pressing. If FEM is used to handle elastic-plastic materials, which are highly dependent on deformation history, the meshes of material get tangled and it leads to stopping computation. To overcome this problem, the mesh of material should be re-meshed and historical data must be mapped for several times. However, repeated enforcing of such operation results in accumulation of computational error. On the other hand, SPH is a meshless method, and it preserves historical deformation data for every individual particle. In this paper, a decoupling multiscale method will be introduced, which is composed of macro-scale simulated by SPH, micro-scale simulated by FEM.

Key Words : Micro-Macro Analysis, Decoupling, Smoothed Particle Hydrodynamics, Severe Plastic Deformation

1. はじめに

現在, SPH は主にコンピュータを用いた流体解析に使用されていて、材料や構造などの解析にも適用が広まっている。SPH は有限要素法と違い、メッシュを使用せず、パーティクルを置いて近似を行うメッシュレス手法であるため、ECAP(Equal Channel Angular Pressing)加工のような SPD(Severe Plastic Deformation)を伴う現象のように、FEM ではメッシュが潰れてしまうような問題に強みを發揮することが期待されている。

FEM のメッシュつぶれ (凸性の喪失) による計算停止を回避する方法として、リメッシュなどの手法も提案されているが、弾塑性材料のような履歴依存性の強い場合には、材料レベルの変形履歴を更新後のメッシュにマッピングさせる必要がある。さらに、このマッピングにおいて何らかの近似が介在することになるため、大きな変形を追跡するために何度も繰り返すことは計算誤差が累積することになる。

これに対して、パーティクルそのものに変形履歴を関連付けられる SPH では、このような煩雑さや解析精度の低下から解放されることが期待される。本研究では SPH の特徴を活かして、SPD にも対応できる弾塑性マルチスケール解析を実現するために、マクロ SPH→ミクロ FEM という一方向分離型解法の開発を目標とする。

2. 理論

(1) 非線形マルチスケール解析の2変数境界値問題

マルチスケール解析においてはミクロ・マクロスケールの 2 変数境界値問題を解く必要があると知られ、一体型解法と分離型解法と扱いが異なる。一体型解法は FEM の場合、すべての積分点において、2 変数境界値問題を同時に解くため、計算コストが非常に高いことが知られている。それに比べ分離型解法ではミクロモデルの数値材料試験を行い、マクロモデルの構成則を仮定することでマクロスケールとミクロスケールの解析を分離し、近似されたマクロの変形履歴をミクロの境界条件として用いる。これによって上記の計算コストの問題が回避できる^[3]。

(2) 分離型解法と一方向分離型解法

ここで、分離型解法の手順^[1]について述べる。

①: 解析対象に用いられる適切なミクロモデルを用意し、必要なパラメータを得るための数値材料試験を行う。数値材料試験によりマクロ材料のパラメータを同定する。これを均質化と呼ぶ。

②: ①によって求められたパラメータをマクロスケールの材料とし、マクロスケールの挙動を近似的に表現できるような構成則を仮定する。これにより作られたマクロモデルを近似構成モデルという。

③: マクロスケールの解析を行い、変形履歴を抽出する。

④: 抽出した変形履歴をミクロ構造解析の境界条件として入力し、ミクロモデルの解析を行う。これを局所化プロセスと呼ぶ。

しかし、本研究ではマクロスケールの解析対象であるECAP加工が物性値に関わらず材料に一様な変形を与える特徴がある。これを考慮し、現段階において均質化プロセスは行わず、任意のパラメータを与えてからSPHによりマクロスケールの解析を行う。マクロスケールの変形に相当するミクロ構造の変形を観察するため、マクロの変形履歴を抽出する。ここで、すべてのパーティクルにおいてミクロモデルの解析を行うのは計算コストが高くなる。そのため、マクロスケールのひずみを確認し、ミクロ構造を観察するいくつかのパーティクルを決める。最後に、選択したパーティクルの変形履歴をミクロ構造に与え、有限要素解析を行い、その変形を観察する。このような解析過程を一方向分離型解法と呼び、そのフローチャートをFig.1に示す。

(3) CSPHについて

本研究で扱う解析対象が連続体であることより、ミクロ構造に与える変形履歴は変形勾配とした。しかし、既存のSPHでは変形勾配を定義することに難しさがある。ここで、Bonetら^[2]により定式化されたCSPHでの変形勾配を用いることとした。このCSPHは既存のSPHで用いられるカーネル関数にラグランジュ補正をかけることでパーティクルの運動量を保存するようにしたものである。

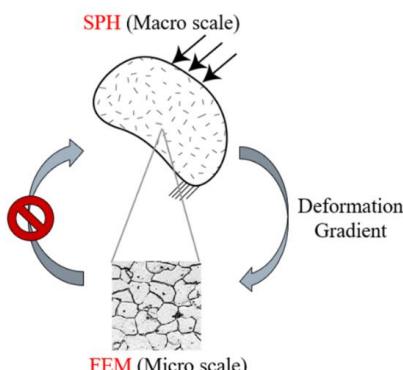


Fig.1 Flow of decoupling multi-scale method (one way)

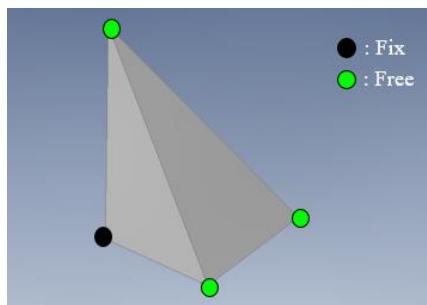


Fig.2 Virtual macro-scale model to input deformation gradient

(4) 変形勾配の入力について

上記でも述べたよう選択したマクロスケールのパーティクルの変形履歴をミクロ構造に与えることで有限要素解析を行う。これはマルチスケール解析の局所化プロセスに相当する。

決めたパーティクルのステップ毎の変形勾配を作成したミクロ構造に与えると、マクロの解析結果に応じたミクロ構造の挙動が計算できる。しかし、局所化プロセスにおいてはミクロ構造だけの計算はできなかったため、一体型解法を実装したマルチスケール解析プログラムを用いて解析を行った。

直接変形勾配をミクロスケールの計算に用いることができなかったため、Fig.2のような原点固定の直角、各軸に長さ1の辺を持つ四面体要素1つの仮想のマクロモデルを用意する。その後、(3)で得られたCSPHの解析結果より変形勾配を仮想のマクロモデル初期配置の座標にかけて初期座標の差をとる。すなわち、四面体モデルの変位を求める。このような作業で得られたすべての変形勾配に対して行うことで、一体型マルチスケール解析プログラムの変位制御の入力値とする。この過程を式(1)に示す。

F: Deformation gradient, **I:** Coordinates from initial configuration of tetrahedral model

$$\mathbf{F} = \begin{bmatrix} \frac{\partial x}{\partial X} & \frac{\partial x}{\partial Y} & \frac{\partial x}{\partial Z} \\ \frac{\partial y}{\partial X} & \frac{\partial y}{\partial Y} & \frac{\partial y}{\partial Z} \\ \frac{\partial z}{\partial X} & \frac{\partial z}{\partial Y} & \frac{\partial z}{\partial Z} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{I} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{FI} - \mathbf{I} = \begin{bmatrix} \frac{\partial x}{\partial X} - 1 & \frac{\partial x}{\partial Y} & \frac{\partial x}{\partial Z} \\ \frac{\partial y}{\partial X} & \frac{\partial y}{\partial Y} - 1 & \frac{\partial y}{\partial Z} \\ \frac{\partial z}{\partial X} & \frac{\partial z}{\partial Y} & \frac{\partial z}{\partial Z} - 1 \end{bmatrix} \quad (1)$$

$$= [\{\mathbf{disp1}\}, \{\mathbf{disp2}\}, \{\mathbf{disp3}\}]$$

3. モデルの作成

(1) マクロモデルの作成

一方向分離型解法を用いて解析を行うため、Fig.3のようなECAP加工のマクロモデル用意した。押し方向は $-z$ 、出し方向は $+y$ 方向である。その後、SPHを用いて解析を行う事前作業として離散化し、パーティクルにおいて近似を行った。また、ECAP加工の場合、加工後のひずみの理論値が存在するため、今回は応力の評価を行わず、ひずみだけを評価し、ひずみ履歴の違うパーティクルを選択する。

(2) ミクロモデルの作成

ECAP加工には金属材料が用いられるため、解析対象である金属のミクロ構造とみなせる多結晶モデルが必要である。また、ミクロ構造の解析にはミクロ構造内のつり合い式を用いて行われる。そのため、ミクロ構造のモデルには3軸(x, y, z)において同様な節点、要素を持つ必要があり、このような特性を周期性という。

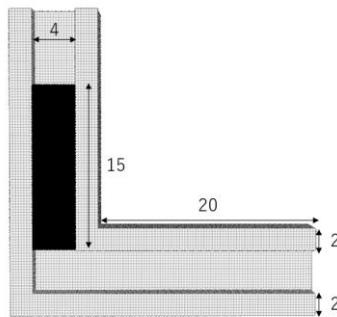


Fig.3 ECAP model for SPH simulation

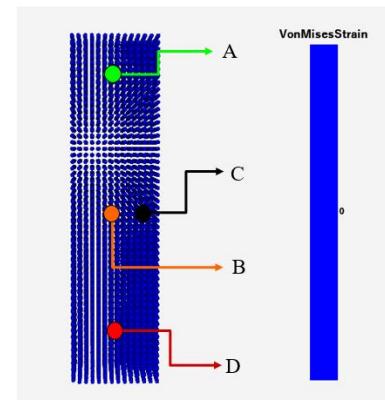


Fig.6 Approximate position of selected particles

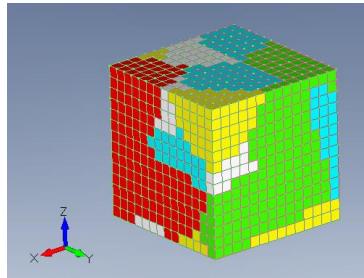


Fig.4 Poly-crystalline model(30 grains)

本研究では Neper というプログラムを用いて結晶粒 30 個が含まれたモデルを作成し、5 パターンの異なるパラメータセットを割り振った。その後、Fig.4 のようなパクセルメッシュモデルを作成することで強制的に周期性を持たせた。

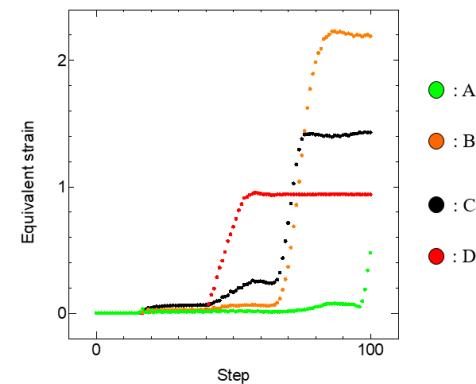


Fig.7 Historical data(Equivalent strain) of selected particles

4. 解析結果

まず、マクロスケールの解析結果を Fig.5 に示す。また、マクロスケールの変形履歴に従ったミクロ構造の挙動を確認するため、ひずみ履歴の違うパーティクル 4 つを任意で選択する。選択したパーティクルのおおよその位置を Fig.6 に示す。また、それらのひずみの履歴を Fig.7 に示す。Fig.8 に 50, 80, 100 ステップでのミクロ構造の有限要素解析結果を示す。ここで、せん断変形は 50 ステップ頃から生じる。

各図の左側はマクロモデルの金属材料の各ステップでの変形の様子を表していて、右側は各ステップでのマクロの変形を反映するミクロ構造の変形挙動を表す。

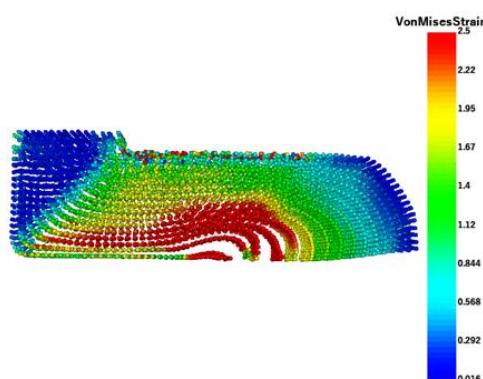


Fig.5 Macro-scale simulated using CSPH

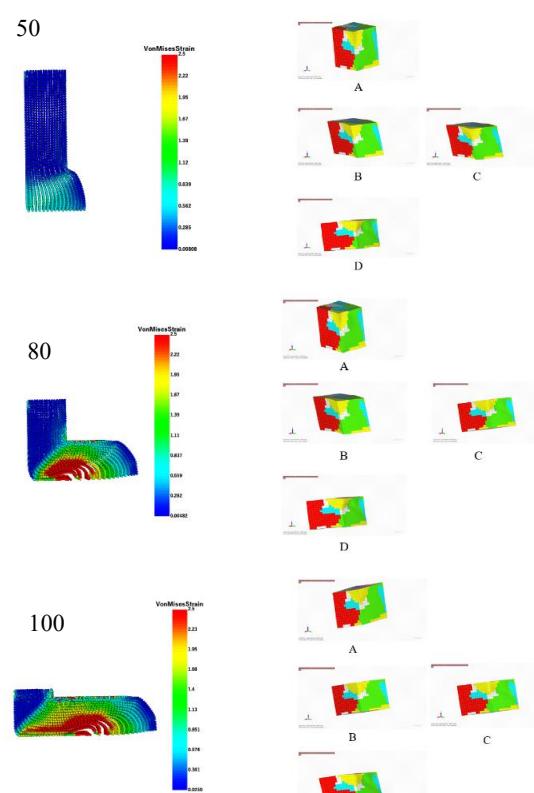


Fig. 8 Microstructures of selected particles of each step

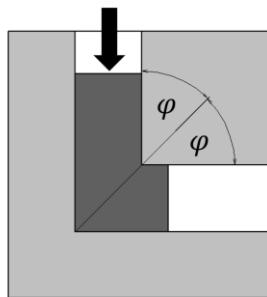


Fig9. Figure to explain theoretical modeled function of ECAP

ここで、ECAP加工後の相当ひずみの理論値を式(6)とFig.9に示す。本研究で設定したマクロモデルの形状より、ひずみの理論値³⁾を求めるとき、約1.155である。

n: Number of passes, ε : Equivalent strain

$$\varepsilon = n \frac{2}{\sqrt{3}} \cot \varphi \quad (6)$$

マクロスケールにおいてはECAP加工のポイントであるせん断変形は表現できている。しかし、せん断変形が起きた部分での相当ひずみが理論値を上回っていることが観察できる。また、材料の下面に隙間が生じていることが見られる。

ミクロ構造においてもせん断変形が起きていることが確認できるが、回転の影響が少ないと思われる。また、パーティクルAについて述べると、材料を $-z$ 方向で圧縮しているため、同様にミクロ構造も $-z$ 方向で圧縮されると予想していた。しかし、逆に $+z$ 方向で伸びているような変形をすることが見られる。

5. 考察

(1) ミクロスケールの解析について

パーティクルAはマクロスケール上 $-z$ 軸方向で圧縮されるため、ミクロ構造も同様に $-z$ 軸方向で圧縮されると予想したが、 $+z$ 方向に伸びている。これは、SPHが動解析であって、応力やひずみなどが十分に伝播せず、変形を進行させたためだと思われる。パーティクルAの50, 80, 100ステップでの解析結果をFig.10、マクロスケールでのひずみ伝播が確認できるひずみコンター図をFig.11に示す。また、ECAP加工のシミュレーションで押し出し時間は2秒だったため、押し出し時間と速度の調節が必要だと思われる。

すべてのパーティクルにおいてせん断変形が表現できていると思われるが、ECAP加工にしてはミクロ構造の回転が少ないと思われる。おそらく、マクロスケールでの解析で、パーティクルの回転があまり反映できず、すべてをせん断変形として扱ってしまったのではないかと考えられる。

最後に、現段階においては結晶塑性論が適用していないため、今後実装する必要がある。

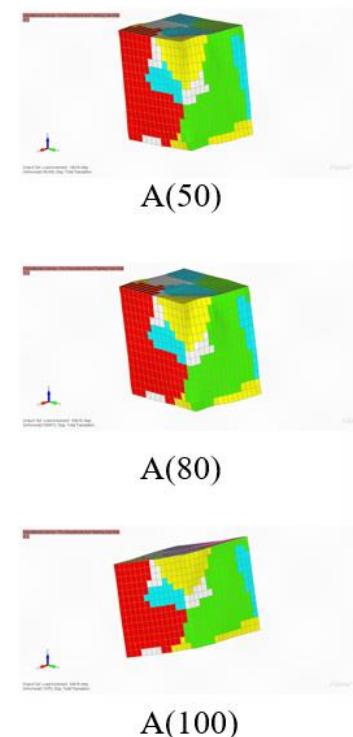


Fig.10 Behavior of particle A's microstructure

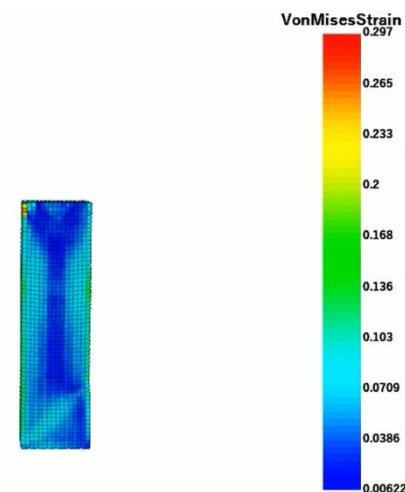


Fig.11 Equivalent strain contour before shear deformation

(2) マクロスケールの解析について

得られた相当ひずみが理論値を上回ることについて述べる。本来、ECAP加工は先端を抑えるが、今回行ったマクロスケールの解析では先端を抑えていないため、相当ひずみが予想より大きくなっていると思われる。また、材料下面の隙間が生じていることについても同様な原因が考えられ、境界条件の修正も必要だと思われる。

次に、今回は一方向分離解法で、マクロのパラメータ任意で決め、マクロの変形に応じてミクロ構造の挙動を確認したが、両スケールにおいてより正確な材料挙動を得るために今後均質化プロセスを行う必要がある。

6. 結論

本研究では SPH による一方向分離解法の開発を目的とした。解析対象としては SPD を伴う ECAP 加工のミクロ・マクロ解析を行った。SPH を用いることで、ECAP 加工のように一般的な有限要素法ではメッシュの潰れにより解析が停止するような大変形問題においても解を導出することができた。また、マクロスケール解析結果を反映するミクロ構造の変形挙動を確認することで、SPH を用いて一方向分離解法でミクロ・マクロの解析を行い、SPH を用いた弾塑性マルチスケール解析の可能性を示した。

最後に、ECAP 加工に限らず、SPH が適用できる現象は数多く存在すると考えられる。そのため、本研究で行ったミクロ・マクロ解析が今後の材料開発に貢献できる可能性を示した。

参考文献

- [1] 渡邊育夢, 寺田賢二郎: ミクロ - マクロ非連成解析による多結晶金属の加工後降伏強度の評価手法, 日本機械学会論文集76巻766号, 2010.
- [2] J. Bonet, T. -S.L. Lok, Variational and momentum preservation aspects of smooth Particle Hydrodynamic formulations. *Computer Methods in applied mechanics and engineering*, Vol. 180, No. 1, pp. 97-115, 1999.
- [3] Sheik Hassan M. "A Review of Severe Plastic Deformation." *International Refereed Journal of Engineering and Science (IRJES)* 6.7 (2017): 66-85.