

# FTMP場の理論に基づく疲労モデリング

## FTMP-based Modeling of Fatigue

長谷部忠司<sup>1)</sup>, 尤心平<sup>2)</sup>, 武部亮裕<sup>2)</sup>

Tadashi Hasebe, Xinping You and Katsuhiro Takebe

1) 博(工) 神戸大学 工学部 准教授 (〒657-8501 神戸市灘区六甲台町1-1, E-mail: hasebe@mech.kobe-u.ac.jp)

2) 神戸大学大学院 工学研究科 (〒657-8501 神戸市灘区六甲台1-1, E-mail: you.xinping@mail.mm4.scitec.kobe-u.ac.jp)

Modeling fatigue crack initiation process has been one of the long-standing difficult-to-solve problems, in the sense it should involve numerical representations of (i)PSB-ladder pattern formation and (ii)“intrusion/extrusion-crack” transition processes. FTMP (Field Theory of Multiscale Plasticity) -based FE simulation enables the both in a practically-feasible manner, just by additively introducing incompatibility tensor-related underlying degrees of freedom into the hardening law. With extended use of the incompatibility rate can further allow us to express vacancy formation process associated with the PSB ladder structure. Dislocation dynamics simulations that mimic ladder wall-mediated vacancy formation processes are examined in the light of the incompatibility rate, with which the subsequent diffusion analyses are combined to the FTMP-based FE simulations.

**Key Words** : Fatigue crack, Multiscale, PSB ladder, FEM, Crystal plasticity, Field theory

## 1. はじめに

FTMP場の理論[1-5]を通常の結晶塑性理論と組み合わせた有限要素シミュレーションでは、これまで単結晶材において単一すべり方位の繰返し変形中に自然にPSBラダー組織が再現され、さらに試料表面には”入り込み”に相当する”溝”が形成されることを報告している。この”入り込み”が”き裂”へと遷移したと見做すには、十分な特異性を有する応力場の発展、およびそれと連動した入り込み深さの進展速度の急峻な増加(Fig.1[6,7])、の2点が再現される必要がある。前報[5]では、”入り込みにおける応力集中”というこれまでの”純力学的”な因子に加え、ラダー組織において動的に生じる転位間相互作用に伴う原子空孔の生成と続く表面への拡散という”化学的”な因子についての検討を加えた。本稿ではこれまでに得られた結果を概観しつつ、少し視点を変えて、離散転位動力学によるシミュレーションを通じて得られた原子空孔生成に関する新たな知見とその導入法について検討を加え、き裂発生過程への一連の流れの再現を試みる。

## 2. 本研究の背景と概要

本研究の最終目標は、Cu添加等に基づく鋼材における転位下部組織制御とそれに伴う疲労特性の制御(Fig.2参照[8])に資するマルチスケールシミュレーションモデルの構築であり、セル状形態を含む一般の転位下部組織に対する「すべり帯→き裂」遷移過程のモデル化である。したがって、いわゆるPSBラダーを伴うすべり帯からのき裂発生過程の再現はその一里塚に過ぎない。しかしながら、2D解析で等軸セル状形態を再現することは現時点で

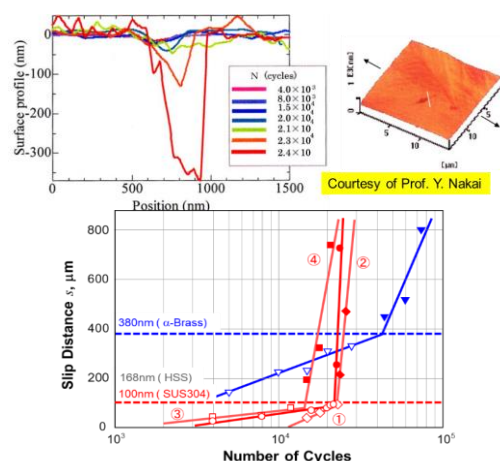


Fig.1 Experimental results for “intrusion-to-crack” transitions by Nakai and his colleagues [6,7].

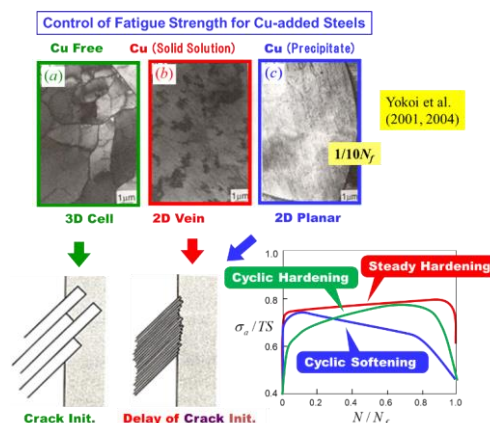


Fig.2 Dislocation substructure-dependent fatigue properties observed for Cu-added steels [Yokoi et al (2001, 2004)[8].

難しく、別途推進している3D汎用化[9]の文脈で最近緒に就いたばかりであるため、当面は上述のPSBラダーからのき裂発生過程が主たる対象となる。この最も基本的な課題に対しても、改めて注目すべき複数の重要な項目が含まれている。

### 3. PSBラダー組織の再現について

1で述べた通り、FTMPに基づく結晶塑性有限要素(CP-FE)解析では、PSBラダー組織は自発的に形成され、さらに試料表面との交接箇所において入り込みに相当する”溝”がその結果として自然に形成される(Fig.3a)。一旦同組織が形成されれば、その情報は不適合度テンソル場を集約されるため、同場を再現するための塑性ディストーションテンソル  $\beta^p$  分布に関する情報を引き継ぐことで、”切り取り&リスタート”解析を行うことができる。その様子をFig.3に示す。

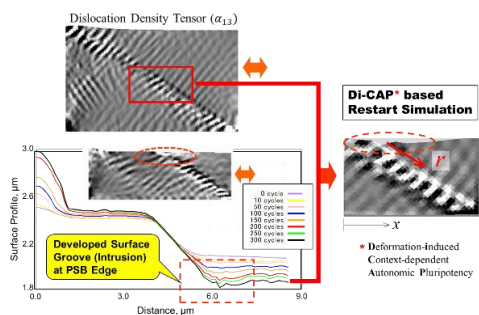


Fig.3a Overview of PSB ladder – fatigue crack simulation.

なお、筆者らはFTMPに基づく上記の情報移設法をDi-CAP法 (Deformation-induced Context-dependent Autonomic Pluripotency)と呼んでおり、上述の通り基本的に  $\beta^p$  分布を移設することで不適合度テンソル情報を移設先で再現することが可能となるため、モデリングの様々な局面で容易かつ柔軟に活用することができる。必要に応じて他の情報(例えば方位回転量)を移設することも可能である。Di-CAP法による他の移設例をFig.3bに示す。この場合、親モデルの三力所からそれぞれ不適合度情報を移設した後、平面応力あるいは平面ひずみ条件下でリスタート解析を行った結果である。試料採取箇所による被移設組織の微妙な差異が適切に移設されていることや、平面応力条件下では、元の組織に加え新たなPSBラダー組織が右上方に形成されていること、などが確認できる。本研究では基本的に平面ひずみ条件を採用する。

ところで、シミュレーションによって得られたPSBラダー組織の転位密度テンソル分布を詳細にみると、Fig.5aに示すように刃状成分とらせん成分が正負に跨りかつ交互に並んでおり、実際と同組織に対応した構造をしていることが確認される。また、同部では、周囲すなわちマトリックス部と比べて約3倍の塑性ひずみ振幅を担っており、それゆえに比較的大きな弾性ひずみエネルギーがラダー組織に沿って蓄積されていることがFig.5bより確認できる。この弾性ひずみエネルギーの蓄積が後述の原子空孔拡散の際においても重要な役割を果たすことになる。

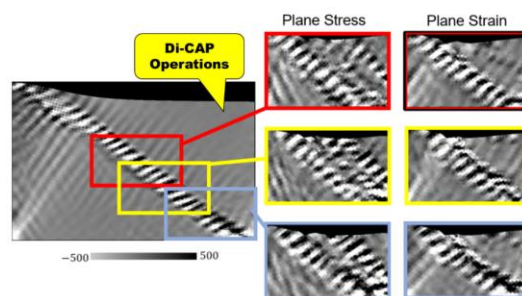


Fig.3b Di-CAP-based restart analysis for PSB ladder structure.

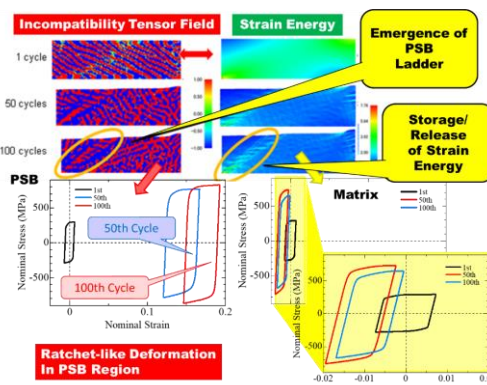


Fig.4 Summary of FTMP-based simulation results for PSB ladder patterning via contours of incompatibility tensor (a) and elastic strain energy (b), together with the corresponding hysteresis behaviors.

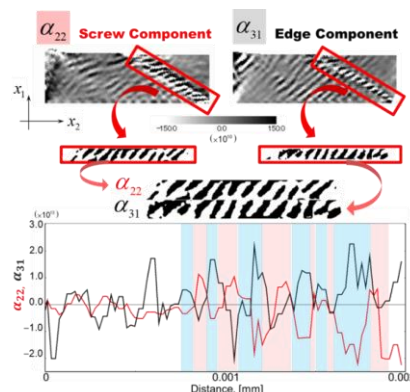


Fig.5a Associated alternating edge/screw wall structures to the simulated PSB ladder structure, commensurate with experiments.

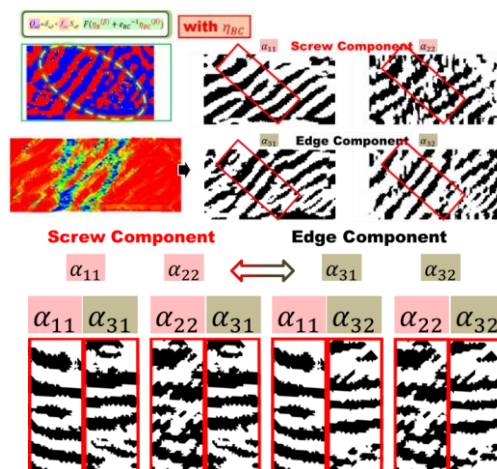


Fig.5b An example of strain energy contour under monotonic tension, showing instability-induced localization initiating along ladder wall/channel boundaries, which demonstrate “extra-softening” of the region.

#### 4. 離散転位モデルによる動力学シミュレーションと原子空孔形成のモデル化について

き裂発生においては、上記の“力学的”な観点よりもむしろ空孔拡散に伴う溝形成促進を重視する見解[10]もあり、筆者らは同観点についても並行して議論している。原子空孔形成については、離散転位動力学(DD)法によるシミュレーションに基づく幾つかの有益な知見[11]が得られており、その概要を Fig.6a に示す。ここでは、wall 部から channel 部に張り出したらせん転位間の、交差すべりを伴う相互作用により刃状デブリループが多数形成され得る(同図(b))ことを明らかにしている。なお、形成されるデブリループの数は交差すべりの頻度に比例している。同デブリループは針状で二つのすべり面に跨る空孔型を含んでおり、空孔形成に寄与することが強く示唆される。解析モデルを上部から見た際のスナップショットおよび対応する応力分布を Fig.6a(c)に示す。同図には同一すべり面状に形成されるいわゆる glide ループも含まれるが、原子空孔生成には寄与しないため、上記デブリスープとは区別して扱うものとする。

こうしたプロセスにおける不適合度  $\eta_{KK}$  と不適合度速度  $\dot{\eta}_{KK}$  の関係(Ph-S (phase-space)トラジェクトリー)、および応力サイクルに伴う  $\dot{\eta}_{KK}$  の変化を Fig.6b 上段にそれぞれ示す。一方 Fig.6b 下段は、FEM シミュレーションで得られた Ph-S トラジェクトリーおよび  $\dot{\eta}_{KK}$  変化図であり、PSB 部の平均応答を示している。いずれにおいても、Ph-S トラジェクトリーは転位の往復運動を反映したリミットサイクル的な応答を示すが、上記の転位間相互作用に対応するように、1/2 サイクル毎に  $\dot{\eta}_{KK}$  が大きな値をとる傾向がみられる。シミュレート対象となるスケールおよび現象の詳細が異なるにも関わらず、互いに類似した結果が得られていることは非常に興味深い。

一方、このときの 1/2 サイクル毎に計測した  $\dot{\eta}_{KK}$  の振幅を用いて生成したデブリループ数を整理すると、Fig.6c に示すように両者の間に正の相関が確認される。同結果は、サイクル中の  $\dot{\eta}_{KK}$  の増加が主としてデブリループ形成に起因していることを強く示唆している。なお、データに比較的大きなばらつきが存在するのは、wall 部を構成する刃状転位との対消滅に伴う  $\dot{\eta}_{KK}$  の変化を考慮していないためと推察される。この結果(両者の相関)と Fig.6b における類似性は、転位間相互作用に伴う原子空孔生成という上記マイクロ過程を、 $\dot{\eta}_{KK}$  を介して連続体モデルに取り込む際の根拠を与えてくれる。なお、後述するように、不適合度速度  $\dot{\eta}_{KK}$  は刃状転位対の生成・消滅速度と関係しており、同モデル化は理にかなったものであると言える。

#### 5. 拡散解析における拡散方程式について

本研究では、FTMP に基づく CP-FEM 解析において得られた PSB ラダー組織に対するリスタート解析(Fig.3)において、上記 4 の結果を考慮した上で拡散解析を組み合わせる。Fig.7 に拡散方程式等[10]の詳細を示す。ここでは

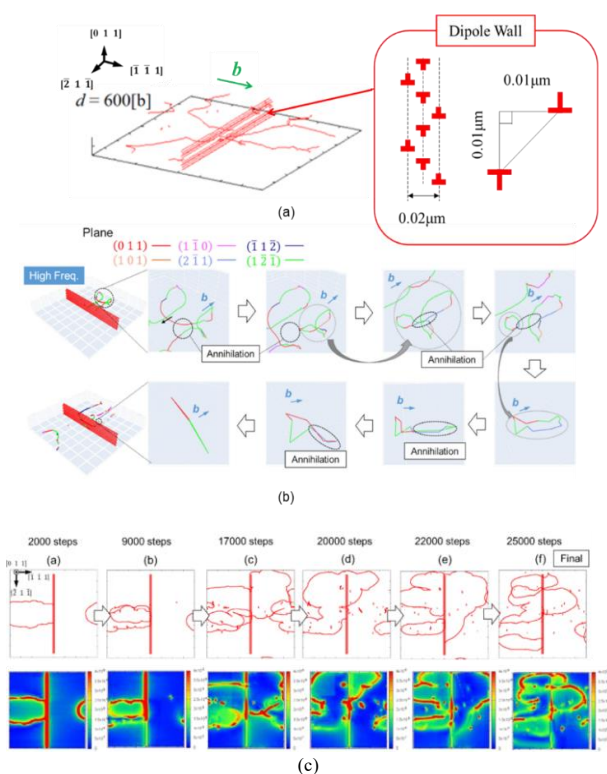


Fig.6a Representative results of dislocation dynamics simulations for PSB ladder wall model, exhibiting debris loop formations considered to be responsible for vacancy formations, together with correlation of its formation frequency with incompatibility rate.

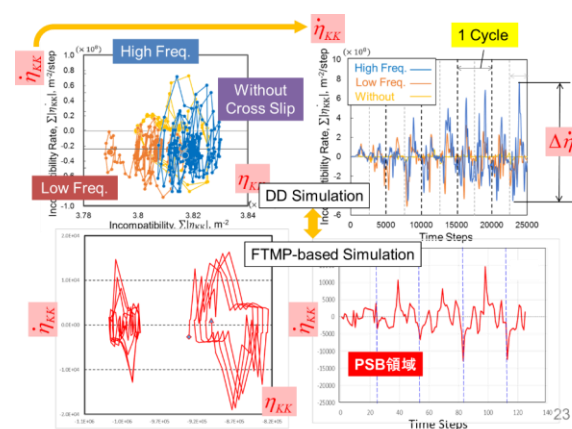


Fig.6b Comparison of Ph-S trajectories for incompatibility and variation of incompatibility rate between DD and CP-FE simulations

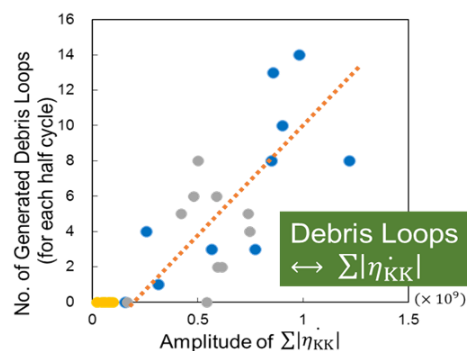


Fig.6c Correlation of number of debris loops (anticipated No. of vacancies) with incompatibility rate measured at each half cycle.



ラダー組織と関連して①ひずみエネルギー勾配, ②原子空孔生成率, および③パイプ拡散による各寄与が重要な役割を担う。とりわけ②の空孔生成率は, 上述の DD 法による詳細シミュレーションで得られた知見から,

$$s_v = a \left| \dot{\eta}_{KK}^{(\alpha)} \right| \quad (1)$$

の関係を仮定する。このモデル化は, 不適合度速度  $\dot{\eta}_{KK}$  が刃状転位対の生成・消滅フラックスを表す, すなわち,

$$\dot{\eta}_{KK} = 2 \text{div}(\alpha_{BC})_{skew} \quad (2)$$

であることからその物理的意味は明確である。原子空孔の濃度勾配から算出されるフラックスを用いて, 試料表面における後退速度は,

$$v_n = \mathbf{J}_v \cdot \mathbf{n} \quad (\mathbf{J}_v = \sum_{\alpha} \mathbf{J}_v^{(\alpha)}) \quad (3)$$

により算出される。 $\mathbf{J}_v^{(\alpha)}$  は各すべり系毎の原子空孔フラックスである(Fig.7 参照)。

## 6. 入り込みからき裂への遷移解析

続いて, 上記の結果を変形解析における解析ステップ数に対応させて逐次導入した解析を行った。式(1)に基づいて計算した原子空孔生成とそれに続く拡散の結果として得られた空孔濃度分布の一例を Fig.8 に示す。PSB ラダー組織と連動した原子空孔形成と, その後の同組織に沿った拡散が確認される。

得られた表面プロファイルの変化を Fig.9 に示す。ここでは同後退速度の繰返し数に伴う変化を示しており, 図中の破線は試料表面の形状を表している。同図より, 最深部(入り込み先端)においてとくに大きな表面後退が促進されていることがわかる。原子空孔の流出に伴う表面後退の影響を反映し, 大きく入り込みが進展していることがわかる。

以上の結果より, 形成された PSB ラダー組織が原子空孔の形成に限らず, 続く拡散においても大きな寄与を果たすことが理解できる。Fig.10 に拡散解析に関連する解析結果のまとめを示す。上記5の冒頭で示した①~③のすべてが PSB ラダー組織と関連しており, 原子空孔の発生・拡散を支配するとともに, その結果試料表面における溝の進展を促進する決定的に重要な役割を担うことが改めて確認される。

## 7. 原子空孔発生とその拡散による影響について

繰返しに伴う入り込みの進展速度を, すべり面に投影した”すべり距離  $s$ ”に対してプロットした結果を Fig.12 に示す。比較のために, 表面後退を考慮していない場合(Without  $V_n$ )の結果を併記している。図より, すべり距離  $s$  が  $0.2271 \mu\text{m}$  ( $227.1 \text{ nm}$ ) に達した時点で進展速度が急速に増加している様子が見てとれる。一方, 表面後退を考慮していない場合ではそのような傾向は見られない。中井ら[7,8]によると, すべり帯からき裂への遷移は, 応力条件等に依らず臨界すべり距離に達した場合に生じることを報告しており, 同距離は材料に依存して決まると結論づけている。Fig.1 下段に示した中井らの実験結果では,  $\alpha$

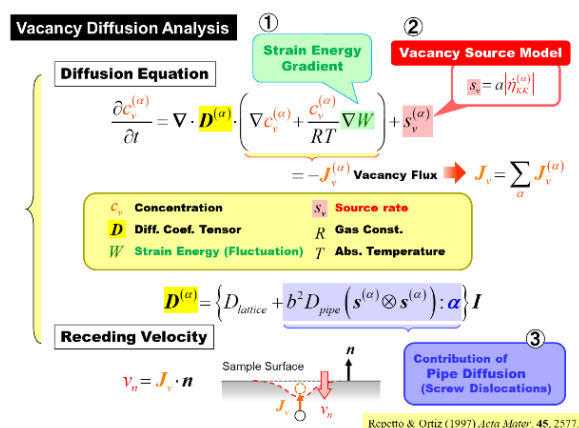


Fig.7 Summary of diffusion equation [10].

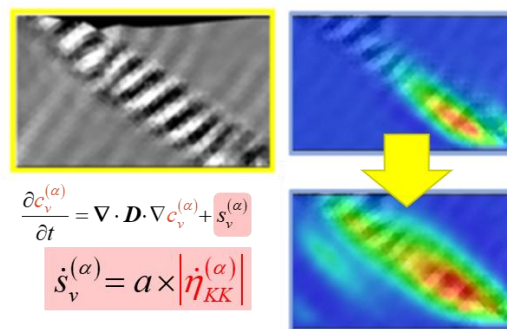


Fig.8 Variation of vacancy concentration contours with proceeding straining cycles.

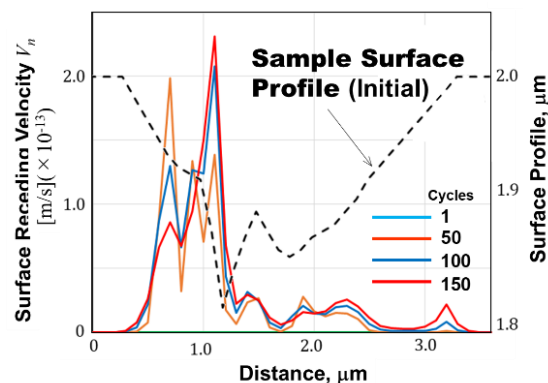


Fig.9 Variation of velocity for surface to recede due to vacancy outflow, together with corresponding sample surface profile.

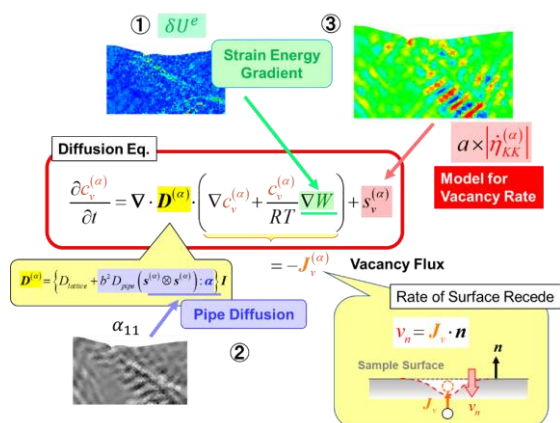


Fig.10 Diffusion equation accommodated with three additional contributions of PSB ladder-related factors.

黄銅(青)およびSUS304鋼材(赤)の結果が示されており、それぞれ臨界すべり距離は380nmおよび100nmである。なお、ここでは図示されていないが高強度鋼(HSS)については168nmとなっている。

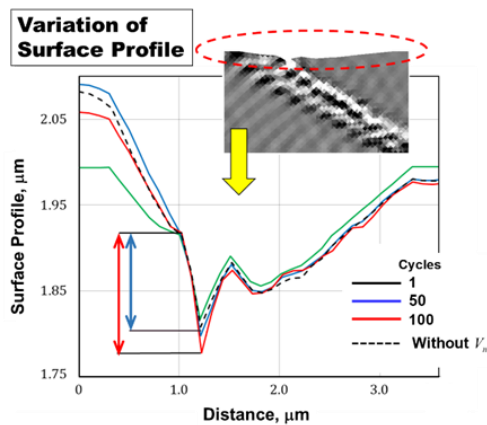


Fig.11 Variation of surface profile mainly due to vacancy outflux.

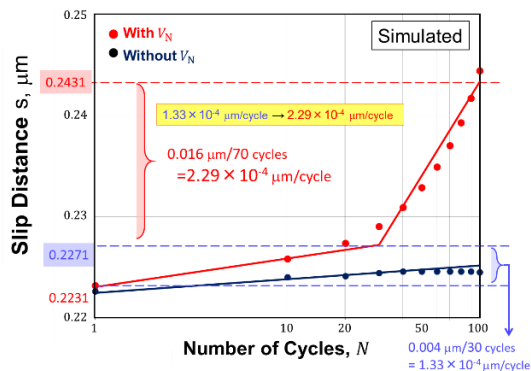


Fig.12 Simulated variation of slip distance with number of cycles, comparing with/without vacancy flux.

## 8. PSBラダー組織の役割について

本報告ではとくに同組織の”化学的側面”について調べた。すなわち、再度Fig.2より、①”ラダー組織に伴うひずみエネルギー勾配による拡散の促進、②同組織内における転位間相互作用の結果としての原子空孔生成、および③同組織(中のらせん転位群)に沿ったパイプ拡散によるさらなる拡散の律速効果、の3点が対象であった。とりわけ原子空孔生成とパイプ拡散の付加的影響は顕著である。これら3つはいずれも”ラダー状の転位組織ありき”の因子、言い換えると同組織が存在して初めて機能する諸機構である。このことは、ラダー形態を再現できないシミュレーションではそもそも検討することすら、少なくとも直接的にはできない対象であることを意味している。FTMP場の理論的には、原子空孔生成過程が不適合度速度  $\dot{\eta}_{KK}$  により表現できるということの意義は極めて大きく、結果として、PSBラダーの形成から、試料表面の入り込み形成とその発展という”力学的側面”から、上述のように、同組織に伴う3つの”化学的側面”のすべてが、極言すれば「不適合度テンソル」の記述能力に基づいてすべてシームレスにシミュレートできる、ことが今回改めて示され

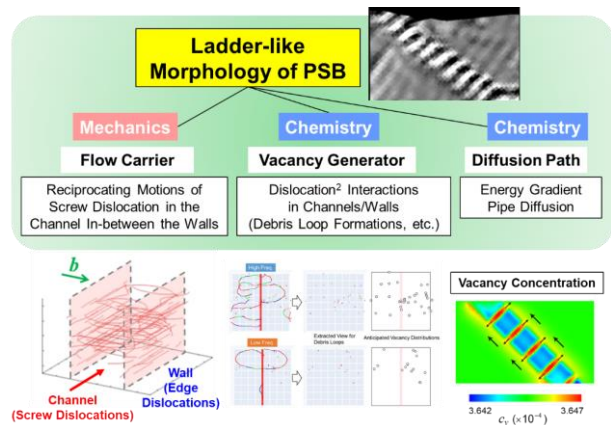


Fig.13 Grand summary showing FTMP-based perspective of modeling/simulating fatigue crack initiation process.

たことになる。

## 9. 結言

本一連の研究において、少なくとも定性的には PSB ラダー/入り込み形成からき裂への遷移に至る一連の過程が再現された。臨界すべり距離の値なども同様のオーダーが得られている。今後、どの程度精密化・精緻化が可能かについての検討・追及が必要となる。

## 参考文献

- [1] Hasebe, T.: Field Theory of Multiscale Plasticity, Cambridge Univ. Press, 2023.
- [2] Hasebe, T.: Multiscale crystal plasticity modeling based on field theory, *CMES*, Vol.11, pp.145-155, 2006.
- [3] Hasebe, T. et al.: Modeling and simulations of experimentally observed dislocation substructures based on Field Theory of Multiscale Plasticity (FTMP) combined with TEM and EBSD-Wilkinson method for FCC and BCC poly/single crystals, *Materials Transactions*, Vol. 55, pp.779 -787, 2014.
- [4] Ihara, S. Kojima, N. and Hasebe, T., FTMP-based approach toward dislocation dynamics of PSB, *Int. J. Multiphysics*, Vol.15, pp.151-167, 2021.
- [5] 長谷部, 黒田, FTMP 場の理論に基づく疲労き裂発生過程シミュレーション, *CMD2021 講演論文集*.
- [6] 岸本学, 鉄鋼材料における疲労き裂発生条件に関する研究, (2004), 神戸大学大学院修士論文.
- [7] Nakai, Y.: Evaluation of fatigue damage and fatigue crack initiation process by means of atomic-force microscopy, *Maters. Sci. Res. Int.* (Japan Soc. Maters. Sci., Japan.), Vol.7, pp.73-81, 2001.
- [8] Yokoi, M. et al.: Cyclic stress response and fatigue behavior of Cu added ferritic steels, *J. Maters. Sci.*, Vol.36, pp.5757-5765, 2001.
- [9] 長谷部, 高島: FTMP 場の理論に基づく 3D 汎用シミュレータについて第 72 期通常総会・学術講演会講演論文集, 2023.
- [10] Repetto, E. A. and Ortiz, M.: A micromechanical model of cyclic deformation and fatigue crack nucleation in FCC single crystals, *Acta Mater.*, Vol.45, pp.2577-2595, 1997.
- [11] Ihara, S. Kojima, N. and Hasebe, T., FTMP-based approach toward dislocation dynamics of PSB, *Int. J. Multiphysics*, Vol.15, pp.151-167, 2021.