

現代塑性論としてのFTMP場の理論 に基づくマルチスケールシミュレーション

FTMP (Field Theory of Multiscale Plasticity) as Contemporary Theory of Plasticity
Multiscale Modeling & Simulations based on FTMP

長谷部忠司¹⁾

Tadashi Hasebe

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

Field Theory of Multiscale Plasticity (FTMP) is a comprehensive theoretical framework that facilitates the deformation-induced evolution of inhomogeneities. It explicitly describes the energy conversion process from elasticity to local plasticity expressed by incompatibility tensor field, offering a novel perspective for multiscale materials modeling and opening up new avenues for multiscale modeling of materials. This article presents a typical example of modeling, simulation, and evaluation using the FTMP approach, showcasing how it differentiates itself from many other alternatives.

Key Words : Multiscale, Crystal Plasticity, Dislocation, FEM

1. はじめに

FTMP場の理論 (Field Theory of Multiscale Plasticity)[1-10]は筆者により独自に構築された新たな理論体系であり、変形によって誘起され形成される不均質場(秩序場)とその発展を自然に表現し得る、筆者の知る限り現時点で唯一の塑性理論である。FTMPの背景、発展過程さらに適用事例については近刊の拙書[1]を参照されたい。"不均質場の発展"を標榜する理論も他にはあるものの、その具体的な適用事例が顕わに示されたものは無く、数学的枠組みのみ提示や"これこれ云々のことを表しているに違いない"と宣言するのみに留まっている。そうした状況下において、連続体力学ベースのFEM解析は、その結晶塑性版を含め、近年進歩の著しい実験観察結果を"補助"的に支援するという脇役的な立場に甘んじている、という極めて残念かつ憂うべきな現状にある。一方でMD法や*ab initio*法を駆使した数値アプローチ界限も黎明期を過ぎていまや成熟期にあり、ミクロをミクロで見るだけの視点では「自分たちはこれから一体何を目指すべきか?」が明確に見えず、関連分野内に一種の閉塞感が伺える。そこでは"マルチスケール"を謳いながら、実は単に電子論から原子間ポテンシャル評価への橋渡しに過ぎなかったり、評価対象もマクロ応力-ひずみ関係(しかも例えば単軸引張り下)という"静的"で本来は多様な力学特性を内包する材料の単なる"一側面"に限定されていたりする。

FTMPはその優れた記述能力に関連して、上記の多くのジレンマを解消し得る多くのヒントを与えてくれる。本稿では、FTMPに基づく新たな観点から展開される"マルチスケール"描像を具体的に提示する目的で、代表的適用例の一つである「高Crフェライト系鋼のクリープ破断」過程のモデリング&シミュレーションを取り上げ、FTMP独

自の評価法である双対線図法[1,3]を中心に議論を行う。そこでは、ミクロの視点でローカル事象を見るだけでは到達できないマルチスケール描像が焙り出されることになる。

2. FTMPについて

(1) FTMPに基づく新しいMMMの風景

理論が新しくなるとできることも変わり、それに伴って見える風景も大きく変化する。FTMPに基づく新たなマルチスケールの描像をFig.1に示す。そこでは、余剰弾性ひずみエネルギー δU^e が不適合度場 η_{ij} に転化されることで秩序(パターン)場が自発的に形成・発展し、かつ同秩序場にさらに δU^e がいかに蓄積されるのか、あるいは η_{ij} へ解放される若しくは再配分されるのか、という過程が変形解析中に時々刻々繰り返し生じ、その結果によって強度発現に繋がるのか破壊へ向かうのかが大きく左右されることになる。加えてこうした過程の情報は階層間で常にやり取りされる。すなわち、階層間の相互作用を含むひずみエネルギーの蓄積・解放過程に関する正負フィードバックを基盤に、系全体の安定・不安定がダイナミックに決定される。したがって、必然的にマルチスケール解析のターゲットが、従来の(マクロ)応力-ひずみ曲線(応答)から、複数階層に跨るこうした一連の複雑な過程に伴う対象システムの安定性/不安定性評価へとシフトする。このシフトに伴って評価方法についても新たな視点や方法論が必要となる。そのための可視化・評価法の代表的なものがFlow-Evolutionary仮説[1]に基づく双対線図や相空間トラジェクトリ(PhS-T)であり(これらもFTMP独自の方法論である)、同法に基づいて新しい定性/定量法が与えられることになる。こうした記述能力と新たな視点に基づいてこれまで多様な応用を図ってきた。その一覧をFig.2に示す。

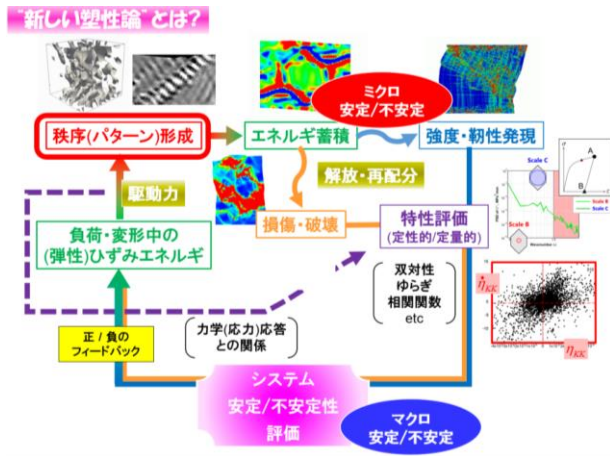


Fig.1 FTMP-based perspective of materials system evaluation in stability/instability contexts.

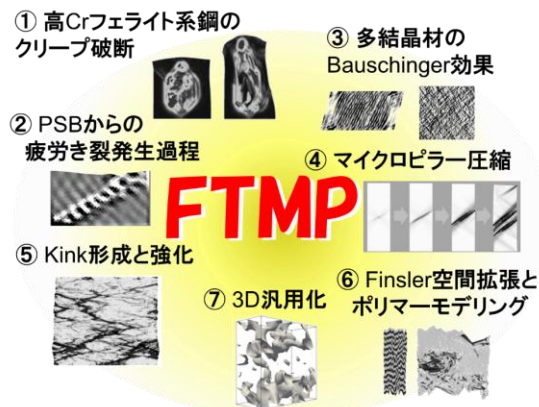


Fig.2 Application examples of FTMP.

(2) FTMPにおける不適合度テンソルの役割

不適合度テンソルはFTMPにおいて中心的な役割を担うが、そのための拡張された概念は大きくは3つあり[1], その概要をFig.3aに示す[1]. すなわち, (i)定義の四次元時空への拡張, (ii)(i)の拡張定義を用いたFlow-Evolutionary(F-E)則(作業仮説), および(iii)不適合度テンソル場のみに存在する相互作用場の表現, である. 従来の三次元空間における定義との違いは交代記号が $\epsilon_{ijk} \rightarrow \epsilon_{ijkl}$ と四次元になったことと最後の指標がdummyになったことの2点のみである[1,2]. この定義によると, 純時間成分 η_{44} は空間トレース η_{KK} となり, F-E則の右辺のエネルギー・モーメントテンソルの $\delta T_{44} = \delta \mathcal{H}$ すなわちエネルギーゆらぎに対応することになる. 加えて(i)に付随した拡張保存則, すなわち四次元時空における無発散性から不適合度速度に関して,

$$\dot{\eta}_{KK} = \text{div}(\alpha_{BC})_{skew} \quad (1)$$

が得られる. その導出過程はFig.4に示す通りである. これにより不適合度速度が転位対の生成や消滅などの転位素過程のモデリングなどに応用することが可能となる.

ところで, 実際の計算においては, 不適合度の寄与を用いる構成式の硬化則(より正確には硬化比 $Q_{\alpha\beta}$)に加えるだけでよい. そうすることで, 各計算ステップごとに余

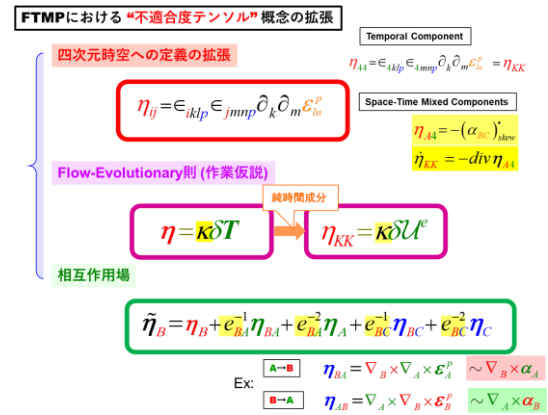


Fig.3 Augmented usages of incompatibility tensor concept.

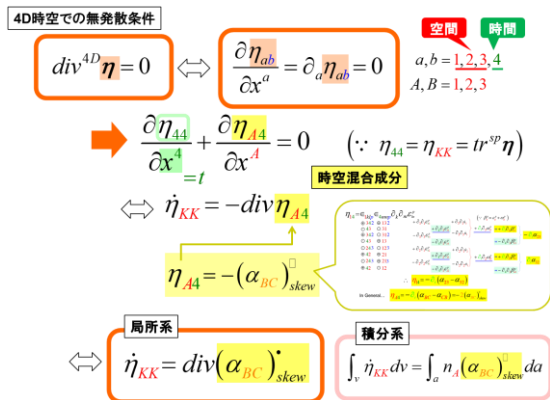


Fig.4 Derivation overview of Eq.(1) from 4D divergence free condition for incompatibility tensor.

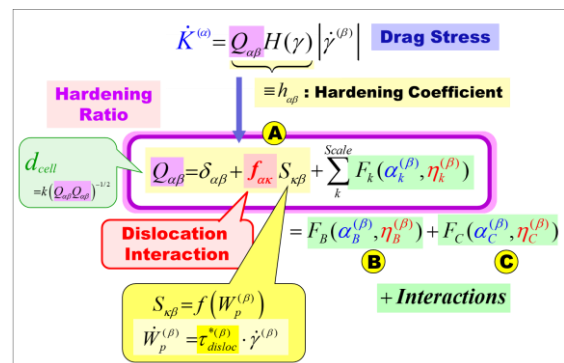


Fig.5 Hardening ratio in the hardening model for FTMP-based constitutive equation, accommodated with contributions of incompatibility tensor fields in multiple scales, together with definition of the effective cell size [1].

剰弾性ひずみエネルギーの再配分が解析対象とする系全体で行われる(Fig.5参照). なお, 硬化発展の度合いは有効セルサイズ $d_{cell} \equiv k(Q_{\alpha\beta} Q_{\alpha\beta})^{-1/2}$ に集約して評価することが可能である[1].

Fig.6aに双対線図の模式図を示す. 同図では典型的な例として弾性ひずみエネルギーが蓄積される場合と解放される場合が示されている. 同図にはFig.6bに例示するような派生型があり, 通常用いる系全体(global)に対するもの他に(a)領域毎(semi-local)および(b)要素毎(local)が考えられる. さらに両量の変化率をプロットしたRate Formもあ

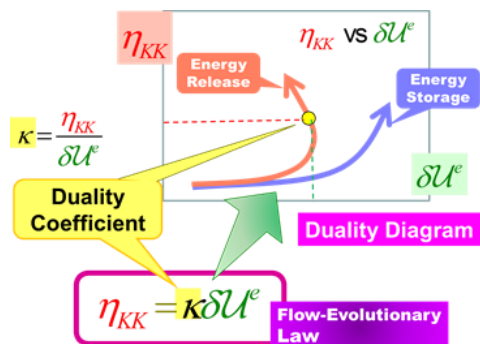


Fig.6a Schematics of duality diagram representation scheme.

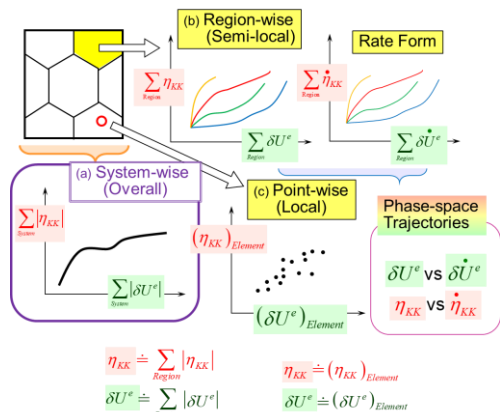


Fig.6b Variation of duality diagram representations, together with corresponding phase-space trajectories (PhS-Ts).

り、縦軸同士あるいは横軸同士を比較すると所謂相空間トラジェクトリ(PhS-T)が得られる。

3. FTMPの適用例について

Fig.2に示したこれまでの代表的な適用例のうち、②および③は結晶方位に依存して自発的に形成される転位下部組織の発展を再現できる能力を活用した研究課題であり、②は別報[10]で報告するように、PSBラダー組織から疲労き裂発生に至る一連の過程のシームレス再現を目指すものである。③では単結晶レベルでの転位下部組織からの背応力場に加え多結晶レベルでの不均質場の影響および両者の相互作用が不可逆応答の典型であるBauschinger効果に及ぼす影響に着目することで、とくにモデル化の難しい遷移軟化挙動の表現を目指している[1,2,3]。

本稿で取り上げる対象は①であるが、いずれの課題も変形誘起不均質場の再現なくしては成り立たないことは容易に理解できよう。

4. ラス・マルテンサイト組織のモデル化

(1) “強度”の階層表現について

高Crフェライト系耐熱鋼はラス・マルテンサイト組織から構成される複雑な階層構造を有し優れた高温強度特性を有する(Fig.7)。同材を計算機上でモデル化するに際して施した工夫は複数あるが、中でも特筆すべきはその階層性を考慮した強度表現(Fig.8)である。すなわち、基底強度からの強化機構を階層間の相互作用(Fig.9)を含め”積み上げる(Fig.8)”ことで表現することが必須であり、そうし

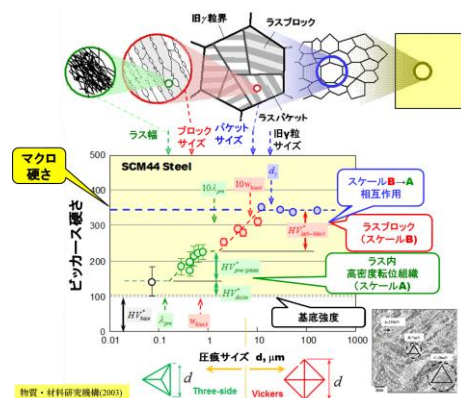
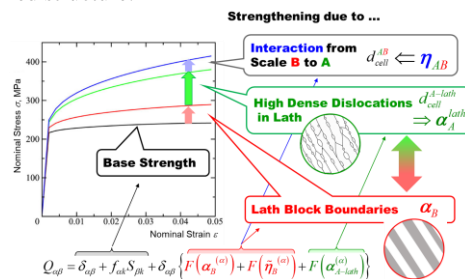
Fig.7 Hierarchically-emerging strengths in high Cr ferritic steel organized into lath martensite, block, packet and prior- γ grained structure.

Fig.8 Lath block modeling process [1].

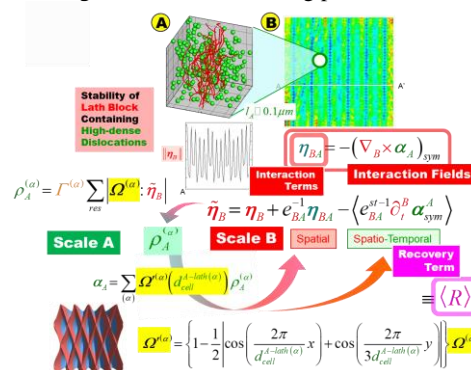


Fig.9 Interaction field-based recovery modeling [1,5].

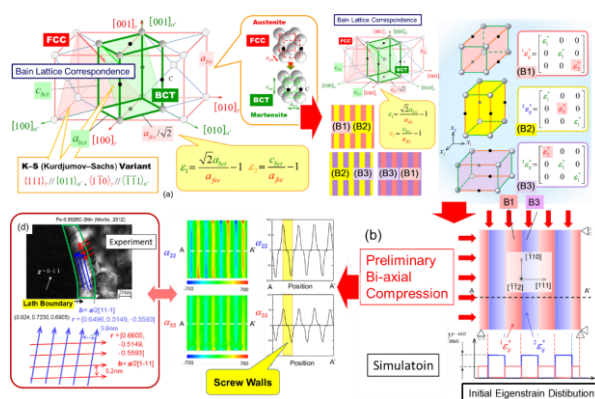


Fig.10 Overview of FTMP-based lath block modeling process [1,5].

て初めて劣化の自然かつ合理的表現が可能となる。

(2) ラス・ブロックモデルの構築

連続体モデルの基本単位として複数ラス・ブロック(以

後LBと称す)で構成されるLBモデル(Scale B)を予備解析にて構築し、それを任意に組み合わせることで上位階層のラス・パケットモデルおよび埋込みパケットモデルを構築する。

ラス・ブロック作成過程では、 $\gamma \rightarrow \alpha'$ 変態時のBain格子対応に基づく変態固有ひずみの組合せ(例えばB1-B2など)の各種分布を予め与えた上で予変形(等二軸圧縮)を加えることで、らせん転位壁に対応したねじれ界面(例えばV1-V4界面)が自発的に発展する。その概略をFig.10に示す。こうして得られたLBモデルの段階でFig.11中に示すようにFig.9の回復モデルに基づくブロック界面におけるクリープ破壊が再現されている。

(3) 相互作用場に基づく回復モデルの導入

炭素化合物の粗大化に伴う回復過程を表現するには、上記(2)のLBモデルのさらに下位スケールである高密度転位を伴うラス組織(Scale A)を考慮する必要がある[4]。本研究ではScale Aに対する α_A 場を、相互作用の寄与を含むScale Bの不適合度場 $\tilde{\eta}_B$ から分布情報を、有効セルサイズ $d_{cell} \equiv k(Q_{\alpha\beta} Q_{\alpha\beta})^{-1/2}$ から局所的な空間変動情報をそれぞれ評価する方法(Fig.4c)を用いている[1,5]。こうすることで、Scale Bとの相互作用場を考え、空間成分を正の相互作用 $\eta_{BA} \equiv -(\nabla_B \times \alpha_A)_{sym}$ として、さらに時空混合成分を負の相互作用、すなわち回復項 $\langle R \rangle \equiv \langle \partial_t^B \alpha_A \rangle$ として構成式中の硬化則に導入することができる。これまでの研究により、不均質回復の再現には両者の寄与が必要であることがわかっている。

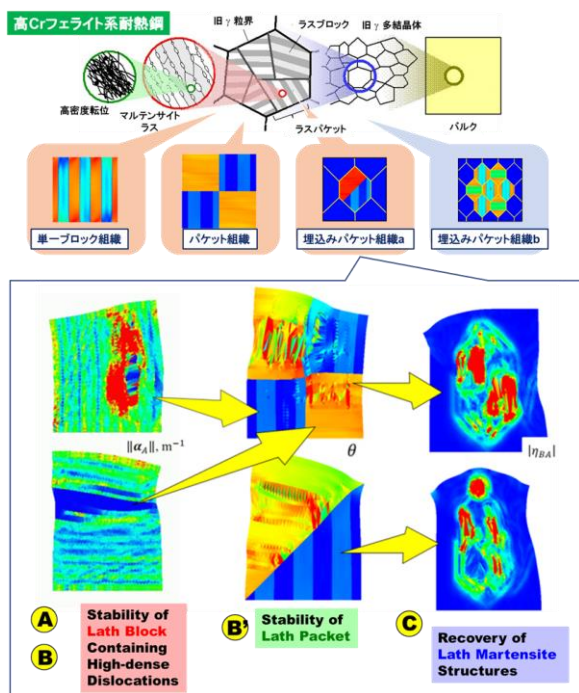


Fig.11 Assembling-type hierarchical-modeling schematics for lath martensite-based structures [1,5].

(4) ラス・パケットモデルの構築

上記(2)で作成したLBモデルを組み合わせることでラ

ス・パケット(以後LPと略記)モデル、さらに多結晶モデル内に埋め込むことで上位モデルを作成することができる。本研究では”埋め込みLP”モデルとして2種、すなわち(a)7結晶粒および(b)23結晶粒、を考え、同モデルに対する一定応力下でのクリープ変形解析を実施した。とくに以下ではモデル(a)に対する結果を詳述した後に、モデル(b)との比較を行う。

5. FTMPに基づく新しい評価法と評価結果

(1) 7結晶粒埋込みLPモデルa

クリープ解析結果をFig.12およびFig.13に示す。Fig.9に高低2種の一定応力下でのクリープ曲線を示す。同図中、相互作用場 η_{BA} 考慮の有無による比較をしており、低応力条件下(100MPa)において大きな差異が生じ、Fig.10における”腰折れ現象”の再現が達成されている。以下では同条件下の結果に対する評価例を示す。

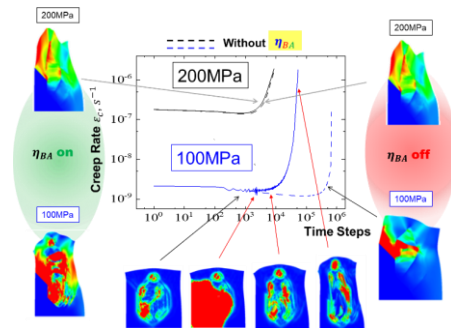


Fig.12 Simulated creep curves comparing with and without spatial interaction field [1,5].

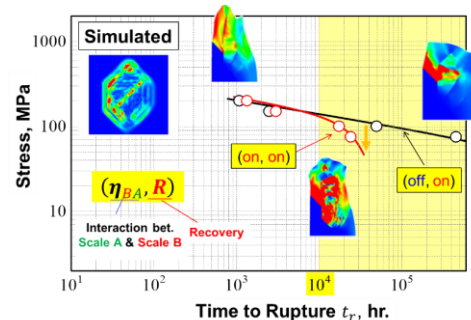


Fig.13 Simulated creep rupture diagram, comparing with and without spatial interaction field [1,5].

Fig.14に要素毎の双対線図を①～⑦の7領域それぞれに対して示す。同図より、領域④および⑥において初期にひずみエネルギー δU^e が急速に蓄積され、引き続き生じるその解放に伴ってLP領域である②および⑦において不適合度 η_{KK} の爆発的増加が生じている。

ここで注目すべきは、不適合度の爆発的増加に伴う不均質回復および加速的クリープ破壊が非局所的な2段階で生じている点であり、LP部の局所領域のみを対象としていたのでは表現できないことである。実はこの数値表現には、 δU^e の領域④および⑥への前駆的な蓄積が不可欠であり、本モデルの構成においては同領域を意図的に

硬く(初期分解せん断応力 τ_0 を大きく)しておかなければならない。言い換えると、同埋込みモデルでは、LB単独では生じるクリーブ破壊(Fig.8参照)の加速が抑制されること、および周囲にエネルギー溜まりが存在することで、同破壊がLP部で促進されること、の両者を意味している。

参考までにFig.15aに対応するPhS-Tsを示す。とくに領域②を例に、対応する領域毎PhS-Tと、別途行った1D簡易解析における結果(図中左上)との比較をFig.15bに示す。

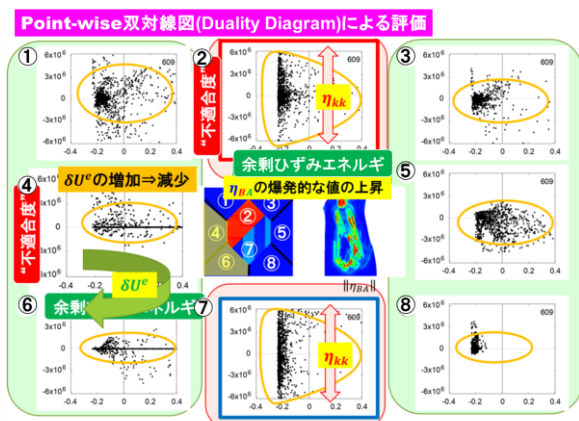


Fig.14 Point-wise duality diagrams for embedded-packet model (c) in Fig.11.

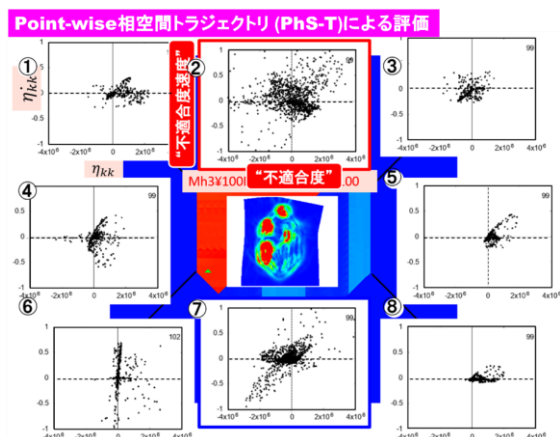


Fig.15a Point-wise PhS-Ts corresponding to Fig.14.

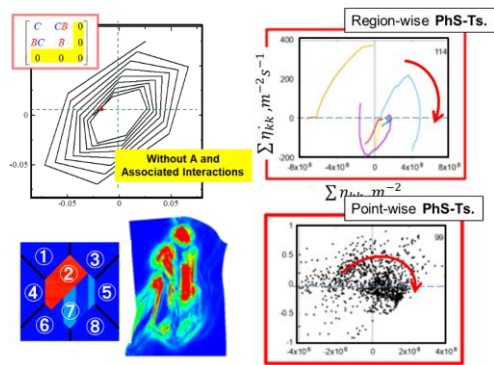


Fig.15b Selected comparison of point-wise PhS-T for region ② in Fig.15a with region-wise and that obtained in 1D analysis.

(2) 23結晶粒埋込みラス・パケットモデルb

上記(1)の結果は、7結晶粒埋込みモデルでは不均質回復に伴う加速的クリーブ破壊を再現するには対象領域が不足していることを強く示唆している。そこで同様のクリーブ変形解析をモデル(b)に対して行った。このモデルにおいては、さらに上位スケールであるLP集合体レベルのScale Cとの相互作用を考慮すること、すなわち3スケール解析が可能となる。

得られた結果をFig.16aおよび16bに示す。ここでも(1)と同様の加速的クリーブ破壊が生じているが、意図的な硬化領域は設けていない。すなわち、解析対象領域を大きくすることで、域内に自然にエネルギー溜まりが形成され、LP部での不均質劣化が再現されている。本結果では緑枠の領域(周囲域)に前駆的にエネルギーが蓄積され、赤枠の領域において急速な不適合度増加が生じている。

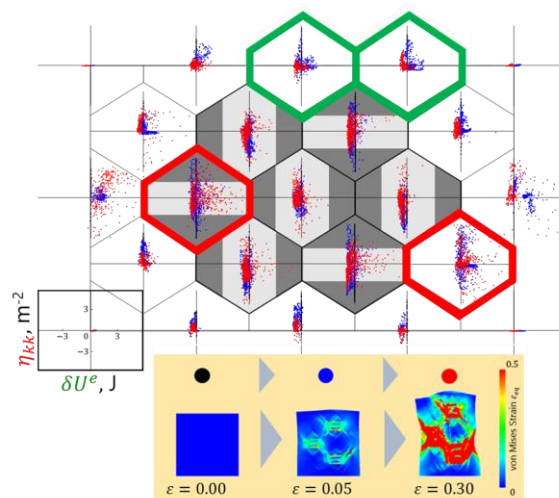


Fig.16a Variation of point-wise duality diagrams with increasing creep strain for 23 embedded-packet model (d) in Fig.11, accommodated with Scale B/C interactions.

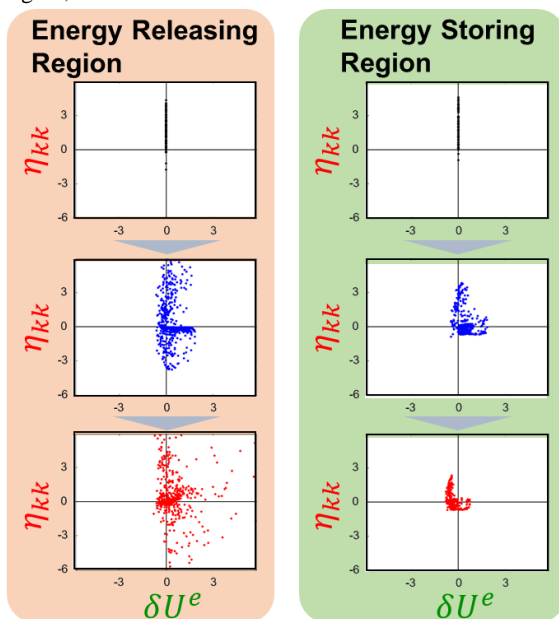


Fig.16b Selected variation of point-wise duality diagram for energy releasing/storing regions in Fig.16a.

6. 23粒埋込みLPモデルにおける相互作用の役割

Fig.17に上記の3スケール解析のイメージ図を示す．図よりわかるように，相互作用場 η_{BA} および η_{CB} によりそれぞれScale A→Scale BおよびScale B→Scale Cへと回復に伴う劣化情報が伝わり， η_{BC} および η_{AB} によりそれぞれパケット組織およびブロック組織による締め付け効果が伝わる．このフィードバック(FB)ループが正の場合には系のクリープ変形は均一に進行するが，例えば η_{BC} と η_{CB} の均衡が崩れて局所的にFBが負に転じると系全体の不安定化を誘発し，加速的な破壊へと繋がることになる．Fig.18下段に $\|\eta_{BC}\|$ と $\|\eta_{CB}\|$ の分布図および両者の差分図を示す．両分布は互いに酷似しているが，その差分をとることで両者の均衡が部分的に崩れていることが確認でき，同領域はクリープ破断が生じた箇所に対応していることがわかる．

Fig.18上段には，Scale Cとの相互作用を考慮した場合(右分布図)と考慮しない場合(同左)を示しており，後者では破断箇所が埋込みパケット上部における周囲域との境界部に移動することがわかる．これは，上述した η_{BC} による締め付け効果の喪失によるものであると解釈することができる．

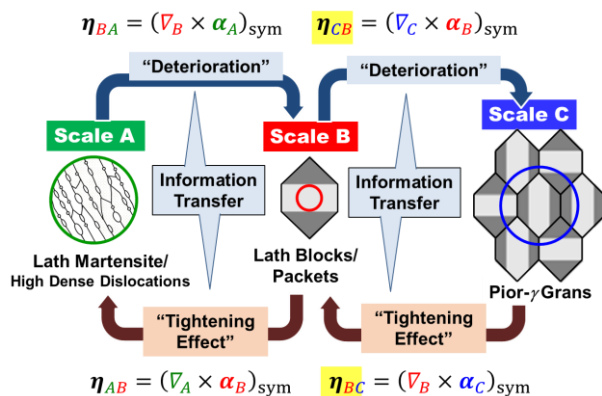


Fig.17 Schematics illustrating 3-scale interactions based on incompatibility tensor field.

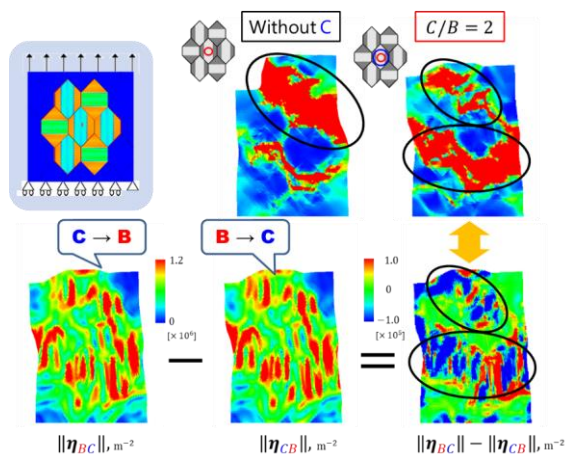


Fig.18 Process of obtaining a differential contour for extracting the net interaction between C-to-B and B-to-C information transfers.

7. 結言

FTMPに基づく新しいマルチスケールの観点を体現する例として，ラス・マルテンサイト強化耐熱鋼のクリープ破断過程を取り上げ，双対線図法(要素毎)による可視化法に基づく評価例について検討を加えた．複雑な階層組織のモデル化自体，FTMPによって初めて可能となるという基本的事項も当然であるが，本稿でより強調したいのは，モデル化対象領域の大小（本例では”埋込みパケット組織”の**a**と**b**）の違いによる差異であり，人工的に”ひずみエネルギー溜まり”を導入する必要のあった小さな系としての”モデル**a**”と，不要であったより大きな系としての”モデル**b**”の違いに伴うものである．このことは，階層構造を有する複雑な系の不均質挙動に関する問題では，ローカルな事象をローカルのみでは捉えることができないことを強く示唆しており，新しいマルチスケールの観点が不可欠であることを雄弁に物語っている．

参考文献

- [1] Hasebe, T.: *Field Theory of Multiscale Plasticity*, Cambridge Univ. Press, 2024.
- [2] 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.
- [3] Hasebe, T. and Sugiyama, M.: FTMP-based simulation for self-evolving dislocation substructures under simple shear for steel single crystals having BCC structure, *Proc. 35th Riso Inter. Symp. on Materials Science; New Frontiers of Nanometals*, (Eds: Fæster, S., Jensen, D. J., Hansen, H., Ralph, B. and Sun, J.), pp.313-320, 2014.
- [4] Yamada, M., Hasebe, T., Tomita, Y. and Onizawa, T., Dislocation dynamics simulation on stability of high dense dislocation structure interacting with coarsening defects, *IMMIJ, (Interaction and Multiscale Mechanics: An Int. J.)*, Vol.1, pp.437-448., 2008.
- [5] Matsubara, Y. and Hasebe, T.: FTMP-based modeling and simulations of creep damage and rupture in lath martensite structures, Part 2: Simulation Results and Evaluations”, *Proc. 56th Symp. High Temp. Strength of Maters.* (2018).
- [6] Hasebe, T.: Interaction fields based on incompatibility tensor in Field Theory of Plasticity, Part I: Theory, *IMMIJ*, Vol.2, pp.1-14., 2009.
- [7] Hasebe, T. Interaction fields based on incompatibility tensor in Field Theory of Plasticity, Part II: Application, ” *ibid.* Vol.2, pp.15-30., 2009.
- [8] Mizutani, K., Nawa, Y. and Hasebe, T.: Kink modeling and simulations based on Field Theory of Multiscale Plasticity (FTMP), Part I: Explicit kink model and double compression Test, ” *Mater. Trans.*, Vol.64, pp.785-794, 2023.
- [9] Hasebe, T. and Mizutani, K.: Kink modeling and simulations based on Field Theory of Multiscale Plasticity (FTMP), Part II: Implicit kink model and scale-free treatment, ” *Mater. Trans.*, Vol.64, pp.795-804, 2023.
- [10] 尤心平, 長谷部忠司: FTMP場の理論に基づく各種条件下での転位組織自発的形成シミュレーションに関する研究, 計算工学講演会論文集, Vol.29, 2024.