

接触を伴う周期境界条件による整列した粒子の圧密解析

Compaction Analysis of Regularly Arranged Particle Using Periodic Boundary with Contact Condition

木口裕希¹⁾, 瀧澤英男²⁾

Yuki Kiguchi and Hideo Takizawa

1) 日本工業大学 大学院 工学研究科 (〒345-5801埼玉県南埼玉郡宮代町学園台4-1, E-mail: 2237011@stu.nit.ac.jp)

2) 博(工) 日本工業大学 基幹工学部 教授 (〒345-5801埼玉県南埼玉郡宮代町学園台4-1, E-mail: htaki@nit.ac.jp)

The compaction process of spherical particles was analyzed using the homogenization method. The periodic boundary conditions are defined by using membrane elements to model the simplest unit cell. The uniaxial, equi-biaxial, and equi-triaxial compaction analyses are carried out on spherical particles arranged in the FCC and BCC lattice structures. The compaction properties are strongly influenced by the orientation of compaction and the mechanical properties of the structures exhibit anisotropic. Hill's anisotropic yield function is coupled with Shima's compaction constitutive equation to model the mechanical properties.

Key Words: Homogenization, Membrane, Periodic boundary condition, Anisotropic, Compaction process, Spherical particles, Shima's yield function

1. 緒言

不均質材料のマクロ特性は、材料の微視的構造に強く依存する。実験的にマクロ構成式を求めることができない場合、単純な微視的構造の弾性変形問題であれば力学的な考察によりマクロ構成式を求めることが可能である[1]。しかし、微視的構造内部での複雑な塑性変形や自己接触を伴う場合、正確なマクロ構成式を力学的考察により定式化することは困難である。これに対して、ミクロ構造レベルの有限要素解析にもとづいて模擬的に材料試験を行える均質化法[2]であれば、任意の微視的構造を扱えるためマクロ特性の導出が可能である。

均質化法では、不均質材料の微視的構造に周期性を仮定する。周期的なミクロ構造の単位構造をユニットセルとしてモデル化し、適切な周期境界条件を与えて、マクロ応答を算出する。均質化法は様々な不均質材料を扱えるものの、繊維の編み物や粉末粒子の変形のように構造内部に間隙を含み、さらにこの間隙が変形とともに閉塞するような場合、ユニットセルの定義や周期境界条件の設定が難しい。

この問題に対して著者らは、閉塞する間隙に膜要素を配置し、この膜要素に周期境界条件を定義することで、周期境界を跨いだ自己接触を解析できるモデルを提案した[3]。前報においては、粉末圧密問題を例として、整列した球状粒子の圧密問題に提案モデルを適用し、単純な負荷条件に限定して境界条件モデルの妥当性を検証した。

本研究では、格子状に整列した球状粒子のユニットセルに対して、提案手法により任意の圧密負荷を与える。均質化法により求めた荷重応答から、マクロ圧密構成式のモデル化を試みる。構成式には、Shimaの圧密降伏条件を

適用し、相当応力の項に異方性降伏関数を適用する。これにより、粒子の初期配置に起因する異方性を考慮する。

2. 接触を伴う周期境界条件

図-1に提案手法の模式説明図を示す。本手法では、周期境界条件を設定した膜要素（以下、接触膜と表記）をユニットセル周期境界の間隙上に配置する。これにより、ユニットセルの変形に伴い間隙が閉塞した場合も接触膜を介して周期境界を跨いだ自己接触が考慮できる。このときの接触面での荷重や変位といった相互作用は以下の経路

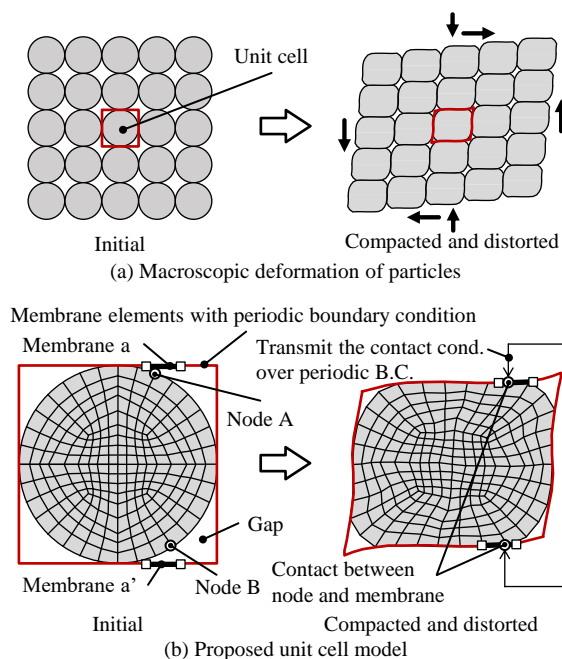
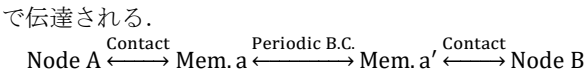


図-1 周期境界膜モデルの二次元模式図



3. 解析モデル

(1) 有限要素モデル

本報告では、圧密構成式モデル化の基礎的な検討を主眼とする。このため、規則性を有する代表的な粒子配列である面心立方格子（FCC）および体心立方格子（BCC）を解析対象とする。図-2に各格子のユニットセルモデルを示す。各格子配列の周期性を考慮して1つの粒子のみをモデル化する。この粒子を覆うように接触膜を配置する。接触膜は、粒子配列において隣接する粒子同士の接触面を含む平面に相当する。接触膜の形状は、FCCでは菱形十二面体、BCCでは切頂八面体となる。

(2) 周期境界条件

接触膜上の節点変位 $\{u\}$ は以下の式で表される。

$$\{u\} = [S_\epsilon]\{\epsilon\} + [S_\gamma]\{\gamma\} + [I]\{u^*\}$$

ここで、

$$[S_\epsilon] = \begin{bmatrix} X_1 & 0 & 0 \\ 0 & X_2 & 0 \\ 0 & 0 & X_3 \end{bmatrix}, \{\epsilon\} = \begin{Bmatrix} \epsilon_{11} \\ \epsilon_{22} \\ \epsilon_{33} \end{Bmatrix}$$

$$[S_\gamma] = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} X_2 & 0 & X_3 \\ X_1 & X_3 & 0 \\ 0 & X_2 & X_1 \end{bmatrix}, \{\gamma\} = \begin{Bmatrix} \gamma_{12} \\ \gamma_{23} \\ \gamma_{31} \end{Bmatrix}$$

$$[I] = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \{u^*\} = \begin{Bmatrix} u_1^* \\ u_2^* \\ u_3^* \end{Bmatrix}$$

である。 $\{\epsilon\}$ および $\{\gamma\}$ は、ユニットセル全体に与える垂直ひずみおよびせん断ひずみ（いずれも公称ひずみの定義）を、 X_i は接触膜上の節点の初期座標をそれぞれ示す。また、 $\{u^*\}$ は対応する接触膜上の等価節点で共通の擾乱変位を示す。

本報告ではMSCソフトウェア社の非線形有限要素解析ソフト Marc (2021) を使用する。周期境界条件の定義には、Marcのユーザーサブルーチンuformsnを用いる。ユーザーサブルーチンでは、以下の行列 $[S]$ を定義する。

$$[S] = \begin{bmatrix} [S_\epsilon] & [S_\gamma] & [I] \end{bmatrix}$$

解析モデルでは、Tyingにおける従属自由度として接触膜上の節点変位 $\{u\}$ を、独立自由度として $\{\epsilon\}$ 、 $\{\gamma\}$ および $\{u^*\}$ をそれぞれ指定する。

(3) 材料特性

表-1に材料モデルを示す。粒子の材料特性は、金属を模擬してヤング率 E_p に対して初期降伏応力 Y_{p0} が $Y_{p0}/E_p = 0.001$ となる弾塑性体とした。接触膜のヤング率 E_m は粒子に比較して十分小さい値として、 $E_m/E_p = 0.01$ とした。また、粒子間の摩擦はCoulomb摩擦で $\mu = 0.25$ とした。

(4) 接触膜モデル

接触膜は、周期境界を介して接触による相互作用を伝達する解析上の仮想モデルであるため、接触膜のモデル化において考慮した内容を以下に記す。

接触膜は解析上の仮想モデルである。接触膜の剛性は粒子の荷重に対して無視できるほど小さく設定すること

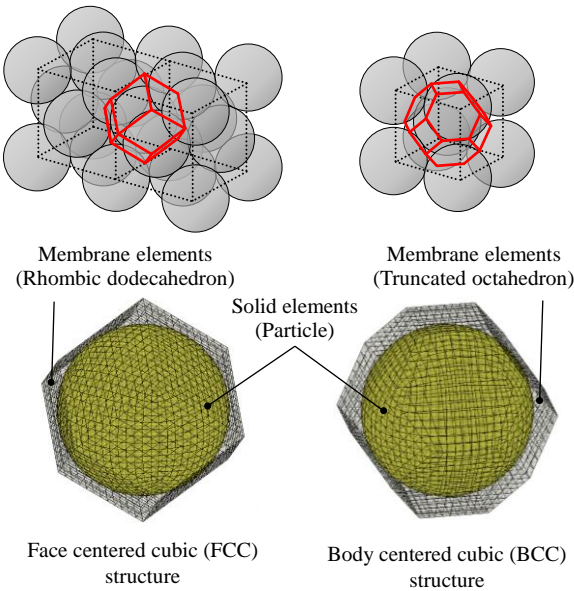


図-2 各格子のユニットセルモデル

表-1 粒子の材料モデル

Young's modulus E_p /MPa	1000
Poisson's ratio ν	0.3
Flow curve Y_p /MPa	$1 + 0.5\bar{\epsilon}^p$
Coefficient of friction μ	0.25

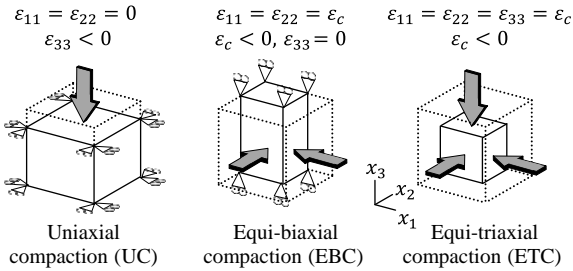


図-3 圧密負荷の模式図

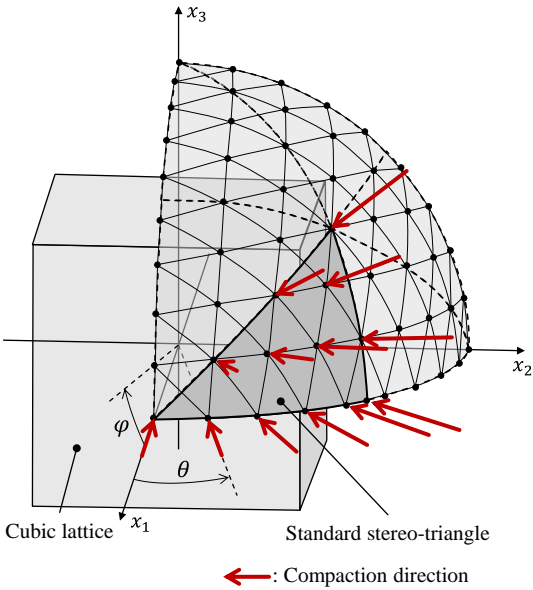


図-4 格子主軸に対する圧密負荷方向の模式図

が望ましい。Marcでは3次元膜要素がUpdated Lagrange型の大変形に対応していない。このため、膜要素を十分薄いシェル要素で代用した。

粒子と接触膜の接触では、境界条件を伝達する膜要素の面上を粒子の表面節点が滑るように設定する。ここでは、接触膜をMaster面としたNode to Segmentモデルを用いる。この接触関係は、物体の持っている構造的な剛性の大小関係とは逆になる。なお、Master面となる接触膜の要素分割は、粒子モデルよりもやや粗く設定する。

また、ユニットセルに圧密変形を与えた際、接触膜が容易に座屈し、しわ状に折れ込まれてしまう場合がある。接触膜が圧密変形に追従できるように、接触膜の面内に初期張力を与える。これにより、圧密時に接触膜が折れ込まれることなく収縮し、間隙の閉塞までの圧密解析が可能となる。

以上のように、接触膜は、付加的に生じる力学的影響を最小限にしつつ、かつ、安定に解析が継続できるようにモデル化した。

(5) 負荷条件

各格子配列のユニットセルに圧密負荷を与えることで、均質化法によりマクロ特性を算出する。図-3に圧密負荷の模式図を示す。各モデルに対して単軸、等二軸、および等三軸圧密による変形を与える。単軸および等二軸圧密については、主ひずみの負荷方向を入れ替えた条件の解析も行う。よって、本解析では単軸および等二軸圧密で各3条件、等三軸圧密1条件の計7条件の圧密変形を与える。

各格子配列の圧密特性の異方性を評価するためには、格子の主軸と圧密負荷方向の主軸が一致しない条件での解析が必要となる。等価な負荷条件の重複を避けるために、図-4の模式図に示すように、格子に対する圧密負荷方

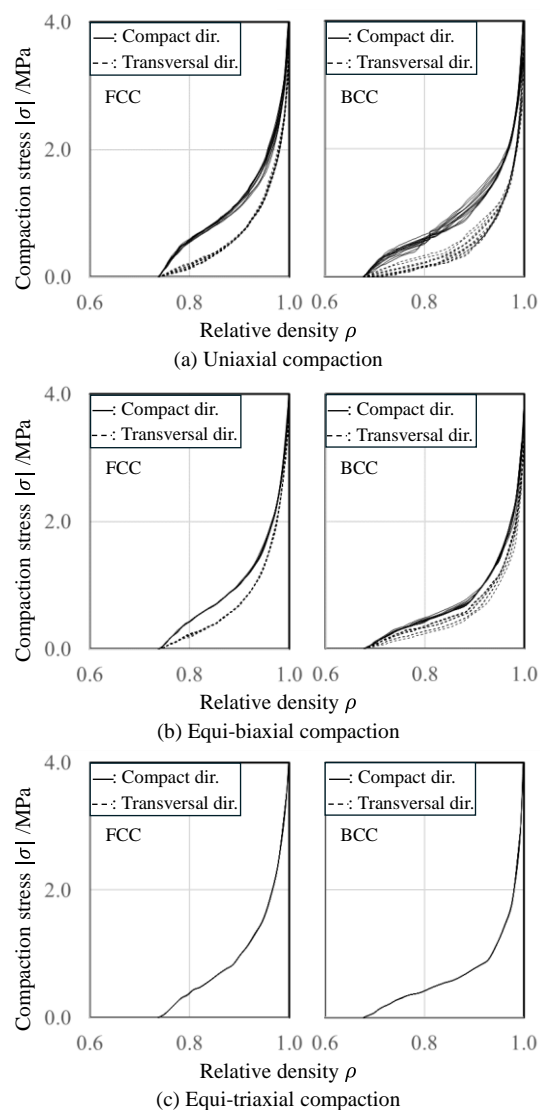


図-5 圧密応力と相対密度の関係

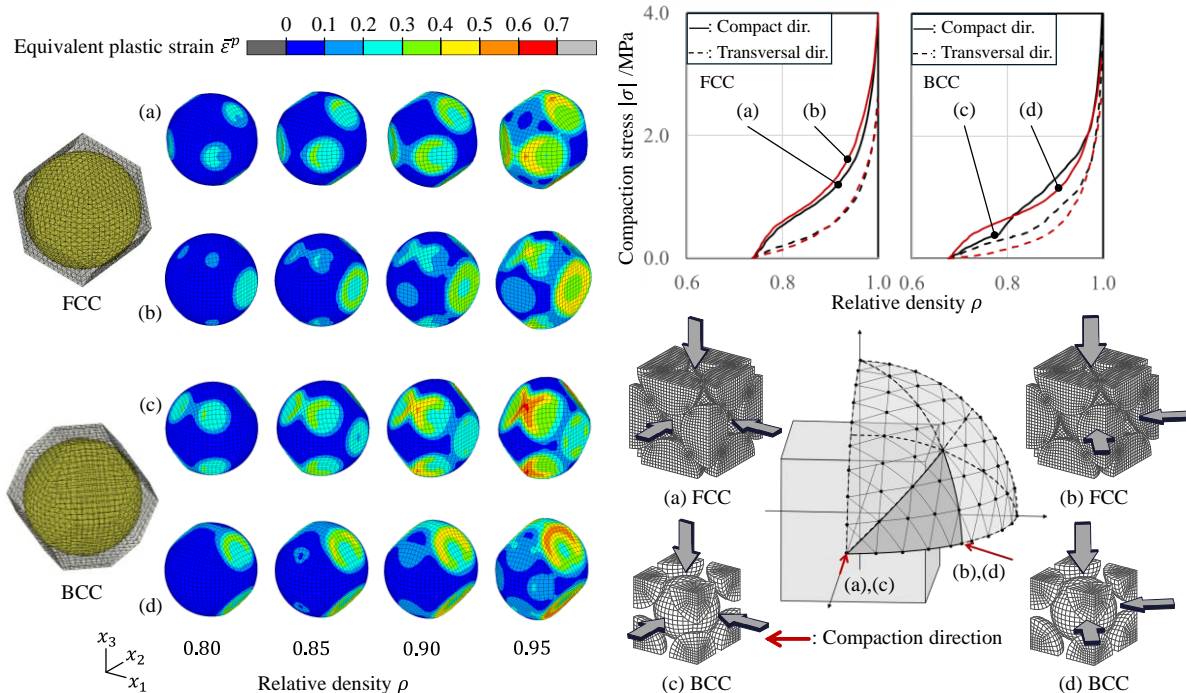


図-6 代表的な圧密負荷方向における各格子の解析結果

向を定義した。図の中心に配置した立方格子に対して、圧密主軸を、 x_3 軸周りに θ , x_1 軸周りに φ だけそれぞれ回転させて主ひずみ（圧密負荷）を与える。この負荷方向は計13 条件となる。各負荷方向に対して前述した7条件の圧密変形を与えることで、各格子の粒子配列に起因する異方性を評価する。

4. 解析結果

図-5に圧密条件ごとの圧密応力 σ （真応力）と相対密度 ρ の関係を示す。単軸圧密では、格子主軸と圧密主軸の差角によって、圧密応力が大きく異なる。このばらつきは、各格子の粒子配列に起因する圧密特性の異方性によって生じる。ばらつきはFCCに比べてBCCの方が大きい。等二軸圧密では、単軸圧密に比べて各曲線のばらつきは小さくなる。また、等三軸圧密は格子を等方的に圧密しているため、圧密方位によらず圧密応力の推移は全ての負荷条件で一致する。

図-6に圧密応力の差が最も大きい2条件について、代表的な相対密度における各格子のユニットセルモデルの変形図、および圧密応力 σ と相対密度 ρ の関係を示す。変形図には、相当塑性ひずみ $\bar{\epsilon}^p$ のコンターマップを示す。各格子ともに、掲載した2条件では全く異なる変形挙動を示す。特にBCCでは変形挙動の違いが顕著であり、圧密応力の推移に大きな差が生じることと対応する。BCCの条件 (c) の、圧密応力の推移に注目すると、相対密度 $\rho = 0.80$ 付近で急激に応力が増加している。この時の解析モデルの変

形図を確認すると、初期状態から接触していた隣接粒子ではなく、(100)方向の粒子間の間隙の閉塞により自己接触が生じている。

このような接触状態の変化によって生じる圧密応力の変化は、格子主軸と圧密主軸の差角によって異なる。特に、BCCの格子配列は、FCCのような最密構造ではないため、各圧密負荷方向から見た粒子間の間隙配置の差が大きい。これにより圧密負荷方向による圧密応力差が生じやすい。

これらの特徴的な解析結果は、各格子の粒子配列に起因する異方性を表している。また、立方格子の対称性により、この異方性は、格子主軸に対して直交性を持つ。従って、圧密構成式のモデル化では直交異方性を考慮する。

5. 構成式のモデル化

(1) 粉末の降伏条件式

圧密構成式のモデル化には、以下に示すShimaの降伏条件式[4]を適用する。

$$F = \bar{\sigma}^2 + \left(\frac{\sigma_m}{f}\right)^2 - (\rho^n Y)^2 = 0$$

$\bar{\sigma}$ は相当応力、 σ_m は静水応力（平均垂直応力）、 ρ は相対密度、 Y は粒子の平均変形抵抗をそれぞれ表す。また、 f は相対密度を変数とする関数であり、次式で表される。

$$f = \frac{1}{a(1-\rho)^m}$$

このうち、 a , m , n は材料固有のパラメータであり、粒子の配列や材料特性によって変化する。この式は、完全な圧密状態を表す $\rho = 1$ を代入すると通常の金属材料の降伏

表-2 降伏条件式のパラメータ

Struct.	Isotropic model (Mises)			Anisotropic model (Hill)				
	a	m	n	a	m	n	F	L
FCC	2.67	0.515	2.80	1.30	0.291	4.75	0.777	1.16
BCC	3.99	0.579	1.88	1.58	0.281	4.18	0.102	11.7

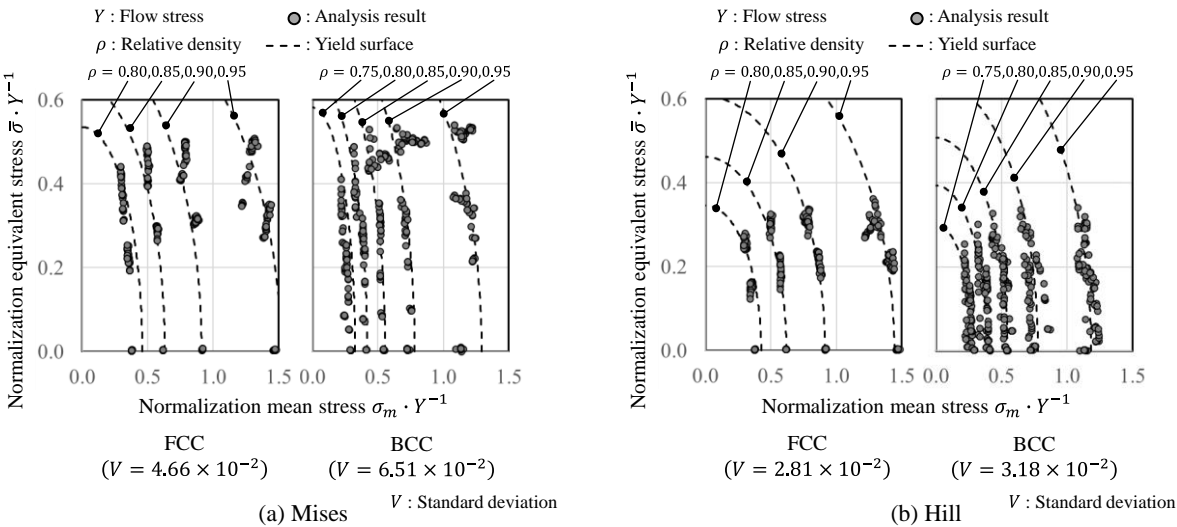


図-7 相当応力と平均応力の関係および降伏条件式による近似曲線

条件式と一致する。

通常の粉末成形プロセスでは、粉末粒子は等方性を仮定できる程度にランダムな初期配置を持つ。このため、Shimaの降伏条件式では、相当応力 $\bar{\sigma}$ にMisesの等方性降伏関数を用いている。これに対して本研究では、各格子の直交異方性を考慮するために、 $\bar{\sigma}$ に異方性降伏関数を用いる。

(2) 異方性降伏関数

各格子のマクロ特性に表れる直交異方性をモデル化するために、以下に示すHillの直交異方性降伏関数[5]を用いる。

$$\bar{\sigma}_{\text{Hill}}^2 = \frac{3}{2} \frac{1}{(F+G+H)} \{ F(\sigma_{22} - \sigma_{33})^2 + G(\sigma_{33} - \sigma_{11})^2 + H(\sigma_{11} - \sigma_{22})^2 + 2(L\tau_{23}^2 + M\tau_{31}^2 + N\tau_{12}^2) \}$$

ここで、 F, G, H, L, M, N は、異方性を表現するためのパラメータである。これら6つのパラメータは、立方格子の対称性により、以下のように2つのパラメータに縮退できる。

$$F = G = H, \quad L = M = N$$

(3) 圧密構成式のモデル化

図-7にユニットセルの数値材料試験から求めた相当応力 $\bar{\sigma}$ と平均応力 σ_m の関係をプロットで示す。それぞれの応力値は、変形後の粒子の平均変形抵抗 Y で正規化している。このプロットを前述の降伏条件式で近似するため、誤差の二乗和を最小化するように材料パラメータを決定した。パラメータの同定にはMicrosoft社のExcelに搭載されているソルバー機能を使用した。同定した圧密構成式による近似曲線および標準偏差 V を図中に併記する。同定した圧密構成式の各パラメータは表-2に示す。

$\bar{\sigma}$ に等方性降伏関数を用いたMisesモデルでは、解析結果のプロット点から近似曲線が乖離している。特にBCCでの乖離が大きい。これに対して、 $\bar{\sigma}$ にHillの異方性降伏関数を用いたモデルでは、各格子ともに解析結果を精度よく近似できている。

BCCの場合、Hillモデルでは、垂直応力差の係数 F とせん断応力項の係数 L はそれぞれ $F = 0.102$, $L = 11.7$ と同定されている。等方性であれば $F = 1$, $L = 3$ となるため、今

回の同定結果では、 L が F に対してかなり大きな値を示している。

$\bar{\sigma}$ が規定の値に達すると塑性変形が生じることを考えると、 L が大きくなることは、より小さなせん断応力であっても降伏しやすくなることを示している。これら係数の関係は、変形方向（圧密主軸）と粒子同士の近接状態の関係から決まる各格子の降伏強度が降伏関数のパラメータに表れた結果である。

以上、圧密構成式にShimaの降伏条件式を利用し、相当応力項に異方性降伏関数を適用した。これにより、各格子の粒子配列に起因する異方性を考慮した圧密構成式をモデル化した。

6. 結 言

接触膜を用いた周期境界条件のモデル化手法を用いて、立方格子状に整列した球状粒子の均質化解析を行った。以下に本報告の知見をまとめる。

- (1) 立方格子の主軸と異なる主ひずみ軸で圧密解析を行った結果、圧密圧力の推移は異方性を示した。
- (2) 圧密塑性構成式にShimaの式を用いて、相当応力に異方性降伏関数を適用することで格子配列に起因する異方性を表現した。

謝辞: 本解析の実施にあたり、Hexagon MI Japanの穴山明寛氏に有益な助言を頂いた。謝意を表する。

参考文献

- [1] 大塚正久, 他: セル構造体 内田老鶴圃, 1993.
- [2] 寺田賢二郎, 他: 数値材料試験, 丸善出版, 2021.
- [3] 木口裕希, 瀧澤英男: 均質化法における接触を伴う周期境界条件のモデル化, 計算工学講演会論文集, Vol.28, 2023.
- [4] 島進: 粉体成形における粉体の力学的挙動に関する研究, 粉体および粉末冶金, Vol42, 1995.
- [5] 吉田総仁, 弾塑性力学の基礎, 共立出版, 1997.