

ポテンシャルに基づく弾塑性連続体損傷構成モデル を用いたマルチスケール延性破壊シミュレーション

Multiscale ductile fracture simulations using
potential-based elastic-plastic continuum damage constitutive model

渡邊 育夢¹⁾ 譚 添文²⁾
Ikumu Watanabe and Tianwen Tan

¹⁾博(工)物質・材料研究機構 マテリアル基盤研究センター 主幹研究員
(〒 305-0047 茨城県つくば市千現 1-2-1, E-mail: WATANABE.Ikumu@nims.go.jp)

²⁾筑波大学大学院 理工情報生命学術院 数理物質科学研究群 学生
(〒 305-8571 茨城県つくば市天王台 1-1-1, E-mail: TAN.Tianwen@nims.go.jp)

In the field of damage modeling for ductile materials, numerous models have successfully addressed various fracture responses, as well as the need for robust algorithms and solutions to computational challenges. In this study, a ductile fracture constitutive model based on elastic-plastic-continuum damage potential energy was formulated and implemented into implicit nonlinear finite element analysis. The elastic-plastic-continuum damage constitutive equations were obtained through the derivation of potential energy with respect to the corresponding internal variables. The evolution equations for internal variables were derived by dissipation maximization. Lastly, the ductile fracture behavior of a constitutive model was demonstrated through simulations of a heterogeneous microstructure.

Key Words : Constitutive modeling, Ductile fracture, Potential-based formulation, Finite element analysis

1. はじめに

破壊現象は製品の寿命を考える上で不可欠であるが、連続体力学に基づく数値シミュレーションにおいて損傷の蓄積や破壊の進展を再現することは容易でない。特に、鉄鋼材料をはじめとする多くの金属材料が示す塑性変形を伴う延性破壊は、弹性・塑性・損傷の相互作用によって生じるため、メカニズムが複雑であり、材料科学においても依然として重要な研究課題となっている。

代表的な延性破壊を表現する構成モデルとして、多孔体の塑性挙動に加えて、ポイドの生成・成長・結合を表現した Gurson-Tvergaard-Needleman (GTN) モデル [1,2] が知られている。GTN モデルは塑性軟化によって破壊を表現する一方で、ポイドのような内部損傷による剛性・強度低下によって破壊現象を表現する連続体損傷モデルに基づく延性破壊モデルも提案されている。ここでは、塑性と損傷を独立したメカニズムとして定義することができ、より複雑なモデリングが可能となる [3]。これらの構成モデルは有限要素解析プログラムへ実装可能であるが、剛性・強度低下は局所変形を誘発するため、メッシュ依存性が顕著に現れる [4]。この問題を克服するために、内部変数の空間分布による拘束によってメッシュ依存性を緩和する非局所アプローチが提案されている [5,6]。

Watanabe et al. [7] は損傷の発生基準を弹性ポテンシャルエネルギーを基に定義し、結晶塑性構成モデルの降伏関数と連成させた陰解法アルゴリズムを用いて有限要素法へ実装した。さらに、周期多結晶組織の有限

要素解析によって延性破壊が再現できることを示した。また、マクロ応力-ひずみ関係の評価に関しては、要素分割を増やすことで、収束解が得られることを示した。結晶格子が蓄積するエネルギーに限界値を設定する損傷基準は物理的に妥当と考えられるが、この損傷基準は応力を基準とするモデルと等価となる。現象論的には、延性破壊において塑性ひずみまたは仕事が基準として妥当と考えられており、Watanabe et al. [7] のモデルでは実験との整合性が低いと考えられる。

そこで、本研究では、Watanabe et al. [7] の構成モデルを拡張し、弾塑性ポテンシャルエネルギーを用いた損傷の発生基準を定義した延性破壊構成モデルをより汎用性の高い形で再定式化する。また、構成モデルを陰解法有限要素解析プログラムへ実装し、数値解析例を示す。

2. 弹塑性・連続体損傷構成モデル

応力-ひずみ関係を記述する弾塑性・連続体損傷構成モデルを、各メカニズムを記述するための内部変数を用いて定義されるポテンシャルエネルギーに基づいて定式化する。ここでは、散逸エネルギー最大化を考えることによって内部変数の発展方程式を導出する [8]。

(1) 弹塑性乗算分解

有限ひずみ弾塑性問題において、全変形勾配 \mathbf{F} は弹性成分 \mathbf{F}^e と塑性成分 \mathbf{F}^p の積 $\mathbf{F} = \mathbf{F}^e \mathbf{F}^p$ として表現される。構成モデルにおいて、弹性変形勾配 \mathbf{F}^e は内部変

数のひとつとなる。本研究では、損傷による影響は弾性および塑性成分に含まれると考える。

弾性変形勾配 \mathbf{F}^e に含まれる剛体回転の影響を取り除いた中間配置において、構成式を定式化する。中間配置における弾性変形成分 \mathbf{U}^e は弾性右 Cauchy-Green 変形テンソル \mathbf{C} を用いて抽出できる。

$$\mathbf{C}^e = \mathbf{F}^{eT} \mathbf{F}^e = (\mathbf{U}^e)^2$$

定式化とプログラムの簡便化のため、弾性右 Cauchy-Green 変形テンソル \mathbf{C}^e が弾性変形成分 \mathbf{U}^e の代わりに用いられる、また、中間配置における速度勾配 \mathbf{L} は次式となる。

$$\mathbf{L} = \mathbf{F}^{e-1} \dot{\mathbf{F}} \mathbf{F}^{-1} \mathbf{F}^e = \mathbf{F}^{e-1} \dot{\mathbf{F}}^e + \dot{\mathbf{F}}^p \mathbf{F}^{p-1} = \mathbf{L}^e + \mathbf{L}^p \quad (1)$$

ここで、 $\mathbf{L}^e, \mathbf{L}^p$ は中間配置における弾性速度勾配、塑性速度勾配である。

(2) ポテンシャルエネルギーの定義と構成式の導出

本研究では、構成モデルの内部変数を弾性変形 \mathbf{C}^e 、塑性変形履歴 ξ 、損傷履歴 D^e, D^p, ζ と定義し、ポテンシャルエネルギーを次式のように記述する。

$$\begin{aligned} \Psi &= \Psi(\mathbf{C}^e, \xi, D^e, D^p, \zeta) \\ &= f(D^e) \Psi^e(\mathbf{C}^e) + h(D^p) \Psi^p(\xi) + \Psi^d(\zeta) \end{aligned} \quad (2)$$

ここで、 f および h は損傷による剛性・強度低下を表現するための関数である。結晶塑性構成モデルのように複数の塑性変形履歴を含むケースに対応するため、塑性変形履歴をベクトル値として定義した。

ポテンシャルエネルギーを内部変数によって微分することで、エネルギー共役な変数の構成式を得る。

$$\hat{\mathbf{S}} = 2 \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{C}^e} = 2f \frac{\partial \Psi^e}{\partial \mathbf{C}^e} \quad (3)$$

$$\mathbf{q} = \frac{\partial \Psi}{\partial \xi} = h \frac{\partial \Psi^p}{\partial \xi}, \quad \beta = \frac{\partial \Psi}{\partial \zeta} = \frac{\partial \Psi^d}{\partial \zeta} \quad (4)$$

$$g = \frac{\partial \Psi}{\partial D^e} = \frac{\partial f}{\partial D^e} \Psi^e, \quad \chi = \frac{\partial \Psi}{\partial D^p} = \frac{\partial h}{\partial D^p} \Psi^p \quad (5)$$

ここで、 $\hat{\mathbf{S}}$ は中間配置における第2Piola-Kirchhoff 応力、 \mathbf{q} は加工硬化則を含む降伏応力、 β, g, χ は損傷挙動を表現するための関数である。

(3) 内部変数の発展方程式の導出

中間配置において、エネルギー散逸は次式で表現できる。

$$\mathcal{D} = \hat{\mathbf{T}} : \mathbf{L} - \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{C}^e, \xi, D^e, D^p, \zeta) \geq 0 \quad (6)$$

ここで、 $\hat{\mathbf{T}} = \mathbf{C}^e \hat{\mathbf{S}}$ は中間配置における Mandel 応力である。ポテンシャルエネルギーの時間微分は

$$\dot{\Psi} = \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{C}^e} : \dot{\mathbf{C}}^e + \frac{\partial \Psi}{\partial \xi} \dot{\xi} + \frac{\partial \Psi}{\partial D^e} \dot{D}^e + \frac{\partial \Psi}{\partial D^p} \dot{D}^p + \frac{\partial \Psi}{\partial \zeta} \dot{\zeta} \quad (7)$$

となるので、エネルギー散逸(6)は次式となる。

$$\mathcal{D} = \hat{\mathbf{T}} : \mathbf{L}^p - \mathbf{q} \dot{\xi} - g \dot{D}^e - \chi \dot{D}^p - \beta \dot{\zeta} \geq 0 \quad (8)$$

降伏関数 $\phi \leq \mathbf{0}$ および損傷基準 $\psi \leq 0$ の下で、散逸エネルギー最大化を考えることで内部変数の発展方程式を導出する。最適化問題を

$$\underset{\hat{\mathbf{T}}, \mathbf{q}, g, \chi, \beta}{\text{minimize}} [-\mathcal{D}] \quad \text{s.t.} \quad \phi \leq \mathbf{0}, \psi \leq 0 \quad (9)$$

と定義し、Lagrange の未定乗数法を用いて解く。Lagrange 関数は次式で定義される。

$$\mathcal{L} = -\mathcal{D} + \gamma \phi + \lambda \psi \quad (10)$$

ここで、 $\gamma \geq \mathbf{0}, \lambda \geq 0$ は未定乗数であり、次の Karush-Kuhn-Tucker 条件を満たす。

$$\gamma \phi = \mathbf{0}, \quad \lambda \psi = 0 \quad (11)$$

この式は塑性および損傷状態の負荷/除荷条件に対応する。Lagrange 関数を内部変数のエネルギー共役変数で微分することで、内部変数の発展方程式を導出する。

$$\mathbf{L}^p = \gamma \frac{\partial \phi}{\partial \hat{\mathbf{T}}} + \lambda \frac{\partial \psi}{\partial \hat{\mathbf{T}}}, \quad \dot{\xi} = -\gamma \frac{\partial \phi}{\partial \mathbf{q}} - \lambda \frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{q}}, \quad (12)$$

$$\dot{D}^e = -\gamma \frac{\partial \phi}{\partial g} - \lambda \frac{\partial \psi}{\partial g}, \quad \dot{D}^p = -\gamma \frac{\partial \phi}{\partial \chi} - \lambda \frac{\partial \psi}{\partial \chi}, \quad (13)$$

$$\dot{\zeta} = -\gamma \frac{\partial \phi}{\partial \beta} - \lambda \frac{\partial \psi}{\partial \beta} \quad (14)$$

(4) 降伏関数と損傷基準

降伏関数 $\phi \leq \mathbf{0}$ および損傷基準 $\psi \leq 0$ を次式で定義する。

$$\phi = \Sigma(\hat{\mathbf{T}}) - \mathbf{q} \leq \mathbf{0} \quad (15)$$

$$\psi = -g - \chi - \beta \leq 0 \quad (16)$$

ここで、 Σ は応力ノルムである。上式を基に、発展方程式(13)を整理すると次式となる。

$$\mathbf{L}^p = \gamma \frac{\partial \Sigma}{\partial \hat{\mathbf{T}}} = \gamma N, \quad \dot{\xi} = \gamma, \quad (17)$$

$$\dot{D}^e = \lambda, \quad \dot{D}^p = \lambda, \quad \dot{\zeta} = \lambda \quad (18)$$

ここで、 N は塑性流動方向である。 D^e, D^p, ζ の初期値が同一であると仮定すると $D^e = D^p = \zeta$ となり、損傷に関する内部変数は一つに集約できる。この場合、発展方程式は次式となる。

$$\mathbf{L}^p = \gamma N, \quad \dot{\xi} = \gamma, \quad \dot{\zeta} = \lambda \quad (19)$$

(5) 増分化

つり合い状態 t_n からの時間増分 Δt 後の内部変数の状態は次式となる。

$$\mathbf{C}^e = \mathbf{F} \mathbf{F}_{t_n}^{p-1} \exp[-\Delta \gamma N] \quad (20)$$

$$\xi = \xi_{t_n} + \Delta \gamma, \quad \zeta = \zeta_{t_n} + \Delta \lambda \quad (21)$$

ここで、 $\Delta \gamma = \Delta t \gamma, \Delta \lambda = \Delta t \lambda$ と表現した。塑性/損傷負荷状態において、降伏関数 $\phi = \mathbf{0}$ および損傷基準 $\psi = 0$ を満たすように、 $\Delta \gamma, \Delta \lambda$ を求めることで内部変数を更

新する。特に、塑性および損傷が共に負荷状態となるケースでは、Jacobi 行列

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial\phi}{\partial\Delta\gamma} & \frac{\partial\phi}{\partial\Delta\lambda} \\ \frac{\partial\psi}{\partial\Delta\gamma} & \frac{\partial\psi}{\partial\Delta\lambda} \end{bmatrix} \quad (22)$$

が不安定になりやすく、安定に計算することが難しい。有限要素法へ実装するためのコンシスティント接線係数についても一般的な弾塑性構成モデル[?]と同様に導出できる。

3. モデル例

(1) ポテンシャルエネルギー

例えば、弾性構成式は St. Venant 弾性構成モデルでは、ポテンシャルエネルギーを

$$\Psi^e = \frac{1}{8} (\mathbf{C}^e - \mathbf{1}) : \hat{\mathbf{C}}^e : (\mathbf{C}^e - \mathbf{1}) \quad (23)$$

と定義し、次の構成式を得ることができる。

$$\hat{\mathbf{S}} = f \hat{\mathbf{C}}^e : \frac{1}{2} (\mathbf{C}^e - \mathbf{1}) \quad (24)$$

ここで、 $\mathbf{1}$ は 2 階単位テンソル、 $\hat{\mathbf{C}}^e$ は中間配置における弾性接線係数テンソルである。等方金属塑性構成モデルの場合、応力ノルムを偏差成分の L_2 ノルムとする。

$$\Sigma = \sqrt{\frac{3}{2} \text{dev} [\hat{\mathbf{T}}] : \text{dev} [\hat{\mathbf{T}}^T]} \quad (25)$$

Voce 型非線形加工硬化則の場合、塑性ポテンシャルエネルギーは

$$\Psi^p = (\tau_0 + \delta\tau) \xi + \frac{1}{2} H \xi^2 + \frac{\delta\tau}{c} (\exp[-c\xi] - 1) \quad (26)$$

となり、構成式は次式となる。

$$q = h \{ \tau_0 + \delta\tau (1 - \exp[-c\xi]) + H\xi \} \quad (27)$$

ここで、 $\tau_0, \delta\tau, H, c$ は材料定数である。損傷構成モデルに関して、剛性・強度低下の関数を次式で定義する。

$$f = \exp[-\zeta], \quad h = 1 - a(1 - f) \quad (28)$$

ここで、 $a \in [0, 1]$ は損傷への塑性仕事の寄与を調整するパラメータである。この構成式では、

$$g = -f\Psi^e, \quad \chi = -af\Psi^p \quad (29)$$

となり、損傷基準は次式のように弾塑性仕事によって記述される。

$$\psi = f(\Psi^e + a\Psi^p) - \beta \leq 0 \quad (30)$$

損傷履歴に関するポテンシャルエネルギーに関しても任意に定義できる。Watanabe et al.[7] は線形硬化則を定義することで様々な剛性低下曲線を表現できることを示した。

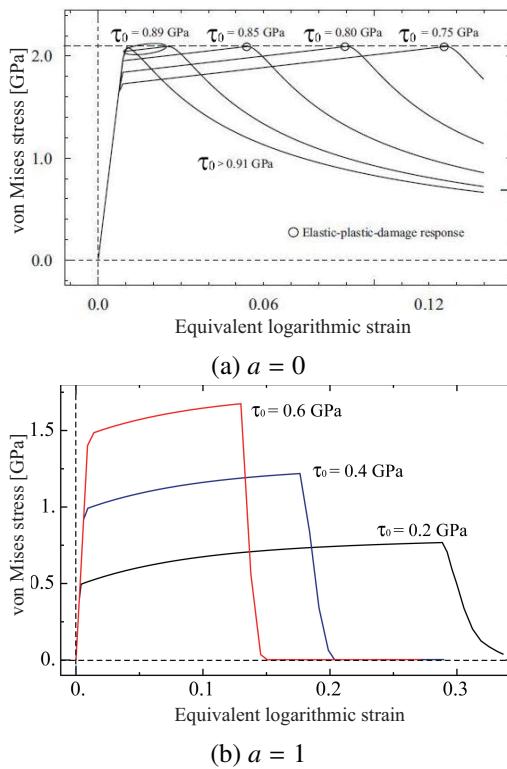


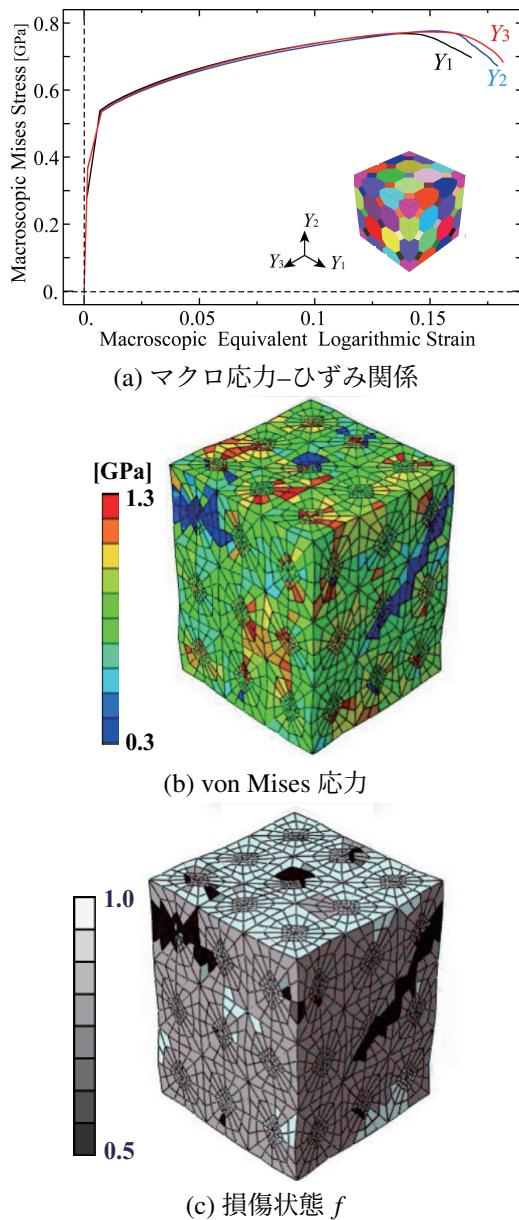
図-1 構成モデルの応答

(2) 構成モデルの応答

損傷モデルの制御パラメータを $a = 0$ (弾性仕事のみ)、 $a = 1$ (弾塑性仕事)とした場合の構成モデルの応答を図-1 に示す。大きな塑性変形を伴う場合、弾性仕事に対して塑性仕事が大きくなるため、式(26)において塑性履歴を基に損傷条件を定義できる。

4. 有限要素解析例

切頂八面体形状の結晶粒 54 個から構成される周期多結晶組織の有限要素モデルに対し、結晶粒の異方性を考慮した弾塑性・連続体損傷構成モデルを用いて、数値シミュレーションを実行した。数値シミュレーションでは、单一引張変形を想定したマクロひずみを与えた。ここでは、塑性仕事の寄与パラメータを $a = 1$ とした。結晶構造として面心立方構造を想定し、12 個のすべり系を考慮し、各結晶粒の結晶方位はランダムに与えた。数値解析結果として、直交三軸方向それぞれにマクロひずみを付与したマクロ応力-ひずみ関係を図-2(a)に示す。弾塑性応答はほぼ一致するものの、マクロ最大強度および損傷によるマクロ剛性低下挙動は各方向で差異が見られた。この結果から、延性破壊を対象とする場合、今回考慮した 54 結晶粒では代表体積要素として結晶粒数が不十分であることがわかる。図-2(b),(c) に Y_3 軸方向へマクロひずみを付与した場合のマクロ最大強度直後の応力および損傷状態分布を示す。損傷によって剛性低下する領域が局所的に結晶粒をまたいで進展している。

図-2 数値解析結果：周期多結晶組織 ($a = 1$)

5. おわりに

本研究では、ポテンシャルエネルギーに基づく弾塑性・連続体損傷構成モデルの定式化の枠組みを提案した。本モデルはポテンシャルエネルギーや損傷基準を定義することで拡張でき、一般的な弾塑性構成モデルと同様に陰解法有限要素解析プログラムへ実装できる。また、メッシュ依存性を緩和するために、micromorphic モデルなどと組み合わせることもできる[9]。ポテンシャルエネルギーに基づいて現象を記述することで力学場だけでなく他の物理現象との連成モデルへも拡張できると期待される。

謝辞：本研究の一部はJST CREST 革新的力学機能材料の創出に向けたナノスケール動的挙動と力学特性機構の解明 (No.JPMJCR1995) の支援を受けた。

参考文献

- [1] Gurson, A.L.: Continuum theory of ductile rupture by void nucleation and growth: Part I—Yield criteria and flow rules for porous ductile media, *J. Eng. Mater. Technol.*, Vol.99, pp.2-15, 1977.
- [2] Tvergaard, V. & Needleman, A.: Analysis of the cup-cone fracture in a round tensile bar, *Acta Metal.*, Vol.32, pp.157-169, 1984.
- [3] Voyatzis, G.Z., et al.: A generalized coupled viscoplastic-viscodamage-viscohealing theory for glassy polymers, *Int. Jour. Plast.*, Vol.28, pp.21-45, 2012.
- [4] Voyatzis, G.Z. & Song, Y.: Gradient-Enhanced Continuum Plasticity, Elsevier, 2020.
- [5] Dimitrijevic, B. & Hackl, K.: A regularization framework for damage-plasticity models via gradient enhancement of the free energy, *Inter. Jour. Num. Meth. Biomedical Engrg.*, Vol.27, pp.1199-1210, 2011.
- [6] Sprave, L. & Menzel, A.: A large strain anisotropic ductile damage model—Effective driving forces and gradient-enhancement of damage vs. plasticity, *Comput. Meth. Appl. Mech. Engrg.*, Vol.416, no.116284, 2023.
- [7] Watanabe, I., et al.: Characterization of macroscopic tensile strength of polycrystalline metals with two-scale finite element analysis, *Jour. Mech. Phys. Solids*, Vol.56, pp.1105-1125, 2008.
- [8] 渡邊育夢, 岩田徳利, 中西広吉: テンソル内部変数を持つ有限ひずみ弾塑性構成モデルの定式化, 日本計算工学会論文集, Vol.2010, No.20100005, 2010.
- [9] Tan, T. & Watanabe, I.: Gradient-enhanced ductile fracture constitutive modeling in implicit two-scale finite element analysis, *Jour. Mech. Phys. Solids*, Vol.196, No.106025, 2025.