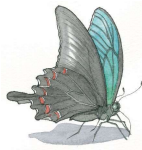


計算材料力学によるマルチフィジックスき裂解析手法の開発



特 集

筑波大学 システム情報系
助教 新 宅 勇 一 氏

1. はじめに

材料科学および計算工学は工業製品の性能向上のみならず、安全性確保の観点からその重要性は今日では周知のものとなっており、産業技術の展開において広く活用されている。一方、化学的作用が力学特性に及ぼす影響を評価する計算手法は未だに確立されておらず、その強度特性を予測することは困難となっている。特に、PC鋼棒や高力ボルトなどの高強度鋼を長期間使用した場合、金属表面における腐食反応によって、水素が侵入することで水素脆化を引き起こすことが知られている^[1]。また、エネルギー分野においては、現代社会に必要不可欠な石油産業では、腐食性ガスである硫化水素が原油に多く含まれているために配管などの水素脆化がしばしば問題となる。さらに、将来的に水素エネルギーに移行した場合、安全性を確保するために、点検時期や損傷箇所の交換時期を決める目安として水素脆化による強度低下を予測する必要がある。

水素脆化による破壊は、水素が多結晶体金属の粒界を集中的に拡散することで局所的な強度低下を引き起こすことで生じる。具体的には、まず電気化学的反応により発生した水素が金属内部に流入する。次に、流入した水素は結晶粒界に沿って拡散し、結晶粒界を優先的に脆化させる。一方、この多結晶体金属に変形が生じる場合、材料界面である結晶粒界は応力集中部となる。そのため、結晶粒界の強度が水素脆化によって低下し、最終的に応力集中に耐えられなくなり、破壊が誘起される。したがって、水素脆化の力学特性を評価するには、水素の粒界拡散と結晶粒の変形とを考慮する必要がある。

また、水素による金属が脆化するメカニズムに関する研究は旧来より盛んに行われており、水素ガス圧説、水素吸着説、格子脆化説などの多くの仮説が提唱されている。水素ガス圧説は、金属内部に存在する水素によって圧力が高まった結果、水素脆化が生じると説明している。しかし、水素以外の原子でも同様に靱性の低下が生じる点や圧縮時について、

実現象と矛盾することが指摘されている^[2]。これに対して、水素吸着説では水素によって表面エネルギーが低下することで、破壊靱性値が低下すると考えられている。また、前述のように水素は結晶粒内部よりも結晶粒界を速く拡散するため、水素吸着説に従えば粒界が優先して脆化することになる。このことは水素によって粒界の結合が低下すると仮定した格子脆化説とも整合するため、水素吸着説は有力な説と考えられている。

そこで、本研究では著者らが提案した金属材料の疲労破壊を表現可能な「損傷変数を導入した結合モデル」^[3]に対して、水素吸着説に基づいて水素濃度に依存した強度低下を考慮する。また、結晶粒界と粒内における水素の拡散とその結果生じる結晶粒界での破壊を表現するために、結晶粒スケールにおける水素拡散解析および、提案モデルと結晶塑性モデルを用いた構造解析によるマルチフィジックスき裂進展解析を実施する。

2. 水素吸着説に基づく結合モデル

本研究では、損傷変数を熱力学的方法によって導入した結合モデルに、水素濃度に伴う臨界エネルギー解放率の変化を考慮する。ここで、結合モデルとは、き裂進展に伴って連続体内部で新たな自由表面が形成されることで応力が解放される過程を表現した数理モデルである。まず、Riceらの原子間結合に基づく結合モデル^[4]に、損傷変数を導入した次式の結合ポテンシャル Ψ を採用する。

$$\Psi = (1-D)G_c \left[1 - \left(1 + \frac{\delta}{\delta_c} \right) \exp \left(-\frac{\delta}{\delta_c} \right) \right] \quad (1)$$

ここで、 D は損傷変数、 G_c は臨界エネルギー解放率、 δ は有効き裂開口量をそれぞれ表し、 δ_c はき裂面の分離が開始される δ の臨界値である。さらに、結合ポテンシャルをき裂開口量で微分すると、結合力は

$$\sigma = \frac{\partial \Psi}{\partial \delta} = (1-D) \frac{G_c}{\delta_c} \left(\frac{\delta}{\delta_c} \right) \exp \left(-\frac{\delta}{\delta_c} \right) \quad (2)$$

となる。この式より、 $\delta = \delta_c$ のときに結合力 σ は最大値 σ_c となることがわかる。また、結合ポテンシャルを D で微分すると、 D と同伴な熱力学的力 Y は

$$Y = -\frac{\partial \Psi}{\partial D} = G_c \left[1 - \left(1 + \frac{\delta}{\delta_c} \right) \exp \left(-\frac{\delta}{\delta_c} \right) \right] \quad (3)$$

となる。ただし、 Y は損傷が進行することによって生じる散逸したエネルギーを意味する。また、損傷の発展方程式には Bouvard ら^[5]によって提案された次式を採用する。

$$\dot{D} = B(1-D)^m \left\langle \sqrt{Y} - \sqrt{Y_{th}} \right\rangle^n \left\| \frac{\dot{\delta}}{\delta_c} \right\| \quad (\text{if } \dot{Y} \geq 0) \quad (4)$$

$$\dot{D} = 0 \quad (\text{otherwise}) \quad (5)$$

ここで、 B 、 m および n は材料定数であり、 Y_{th} は閾値である。 Y が Y_{th} を超えると、き裂の開口に伴い徐々に損傷が蓄積される ($\dot{Y} \geq 0$)。

Griffithの理論によると臨界エネルギー解放率 G_c は、き裂進展に伴い新たに形成される表面における表面エネルギー ω_s と、表面を形成するのに必要な塑性仕事 ω_p に分けられる ($G_c = 2(\omega_s + \omega_p)$)。前述のように ω_s は水素濃度に依存して低下することが知られており、Rimoli ら^[7]はJiang らの結果^[6]から水素濃度の変化に伴う ω_s の変化を次式で近似した。

$$\omega_s(\theta) = (1 - 1.0467\theta + 0.1687\theta^2) \omega_{s0} \quad (6)$$

ここで、 $\theta = C/C_s$ であり、 C は表面における水素濃度、 C_s はその収束濃度、 ω_{s0} は水素が存在しない時の ω_s である。一方、 ω_p は ω_s のわずかな低下によって急激に低下することが示唆されている^[8]。そこで、簡単に ω_p も ω_s と同様な式(8)で低下すると仮定することで、これらの和である G_c は、

$$G_c(\theta) = (1 - 1.0467\theta + 0.1687\theta^2) G_{c0} \quad (7)$$

で表わされる。ここで、 G_{c0} は水素が存在しない時の G_c である。

3. 多結晶金属における解析例

3.1. 水素拡散解析

時刻 T における水素の拡散は、

$$\frac{\partial C}{\partial T} = \nabla \cdot (k \nabla C) \quad (8)$$

で表される。ここで、 k は拡散係数である。また、水素の拡散速度は結晶粒界と結晶粒内部で異なり、粒界の方が粒内よりも速いことが知られているため、粒界での拡散係数は参考文献^[7]より $2.53 \times 10^{-9} \text{m}^2/\text{s}$ とし、粒内は十分に小さい値として $2.53 \times 10^{-13} \text{m}^2/\text{s}$ を用いた。水素は初期き裂面上から侵入することを想定して、その濃度は既に収束値に達していると仮定する。すなわち、試験片左端部に設けた初期き裂面上で $\theta = 1$ とする。解析の結果、図1のように水素は暴露時間400sで結晶粒界に沿って拡散し、3200sで結晶粒の内部に侵入していることが確認できる。

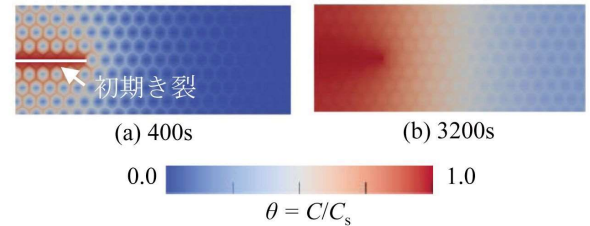


図1 暴露時間の経過に伴う水素の濃度分布

3.2. き裂進展解析

拡散解析を行った後の暴露時間400, 800, 1600, 3200sのそれぞれの濃度分布における試験片の上下端面に引張変位を加えて、き裂進展解析を実施した。材料モデルには結晶塑性モデル^[9]を採用し、各結晶方位は乱数で与えた。結合力モデルの各パラメータは $G_{c0} = 502 \text{kJ/m}$ 、 $\delta_c = 2 \mu\text{m}$ 、 $B = 180$ 、 $m = 1.5$ 、 $n = 0.01$ および $Y_{th} = 0.0$ とした。上端面の全節点反力の合計を断面で割った値を縦軸とし、変位に対する試験片長さの比を横軸とした応力ひずみ曲線は図2のようになった。この図より、水素濃度に応じて引張強さと破断伸びが低下していることが確認でき、実験の傾向と定性的に一致している。また、図3のように暴露時間の違いによってき裂の進展経路が異なる挙動を示した。具体的には、図3(a)のように水素が影響しない場合にはき裂は結晶粒内を直進する

のに対して、図3(b)および(c)のように水素が拡散すると結晶粒界をき裂が進展した。これは結晶粒界を優先して水素が拡散するのに起因して、前述のように結晶粒界の強度が低下するためである。

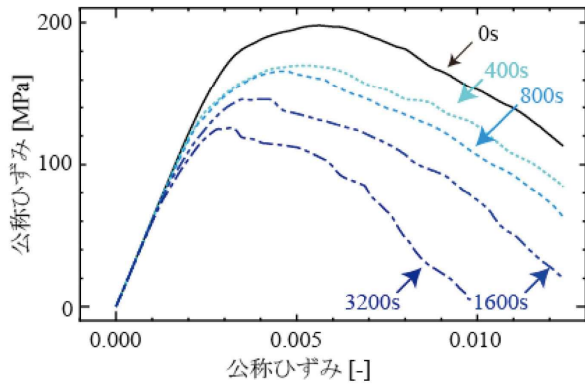


図2 暴露時間毎の応力ひずみ曲線

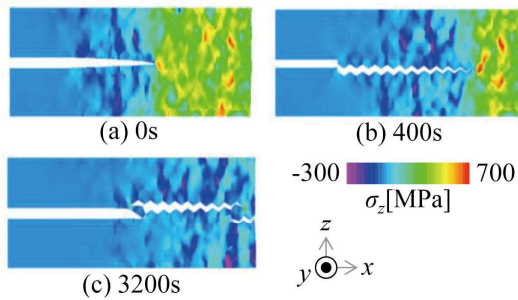


図3 暴露時間毎のき裂の進展挙動

4. おわりに

本研究では水素吸着説に従って水素濃度依存性を考慮可能とするために既存の「損傷変数を導入した結合モデル」を拡張した。さらに、結晶粒界と粒内における水素の拡散解析および、提案モデルと結晶塑性モデルを用いた構造解析によるマルチフィジックスき裂進展解析を例示した。今後は、水素脆化と疲労破壊が複合的に生じる問題などに提案モデルおよび開発した解析手法の枠組みを適用したいと考えている。なお、任意の結合モデルを結晶塑性モデルに組み込むことが可能な結合力埋込型損傷構成則^[10]を用いることで、通常の損傷モデルのように任意箇所におけるき裂の発生や任意方向へのき裂の進展を提案した結合モデルでも可能になると考えている。

参考文献

- [1] 石井浩司, 関博, 福手勤, 井川一弘, 杉橋直行, “PC 鋼材の水素脆化に関する実験的研究”, 土木学会論文集, Vol. 30, No. 532 (1996), pp. 131-140.
- [2] 大谷南海男, “金属の塑性と腐食反応”, 産業図書 (1972).
- [3] 新宅勇一, 村松真由, 堤成一郎, 寺田賢二郎, 京谷孝史, 加藤準治, 森口周二: 損傷変数を導入した結合モデルによる多結晶金属の疲労き裂進展解析, 日本計算工学会論文集, 20140014, 2014年.
- [4] J. Rice and J. Wang, “Embrittlement of interfaces by solute segregation”, Mater. Sci. Eng., A102(1989), pp. 23-40.
- [5] J. L. Bouvard, J. L. Chaboche, F. Feyel and F. Gallerneau, “A cohesive zone model for fatigue and creep-fatigue crack growth”, Int. J. Fatigue, Vol. 53(2009), pp. 1193-1196.
- [6] E. A. Jiang and E. A. Carter, “First principles assessment of ideal fracture energies of materials with mobile implications for hydrogen embrittlement of metals”, Acta. Mater, Vol. 52 (2004), pp. 4801-4807.
- [7] J. J. Rimoli and M. Ortiz, “A three dimensional multiscale model of intergranular hydrogen-assisted cracking”, Philos. Mag., Vol. 90(2010), pp.2939-2963.
- [8] M. L. Jokl, V. Viek, and C. J. McMahon, “A Microscopic theory of brittle fracture in deformable solids: A relation between ideal work to fracture and plastic work”, Acta. Metall., Vol. 28(1980), pp. 1479-1488.
- [9] J. R. Asaro, “Crystal plasticity”, J. Appl. Mech, Vol. 50 (1983), pp. 921-934.
- [10] Y. Shintaku, K. Terada and S. Tsutsumi, “Anisotropic damage constitutive law for cleavage failure in crystalline grain by cohesive zone model”, Quarterly Journal of The Japan Welding Society, Vol. 35(2017), No. 2, pp.165s-168s.