209 場の理論に基づくマルチスケール結晶塑性の考え方 Multiscale Crystal Plasticity based on Field Theory

○正 長谷部 忠司(同志社大工)

Tadashi HASEBE, Doshisha University, Kyotanabe, Kyoto 610-0321

1. 緒言

筆者は、これまで結晶塑性構成モデル⁽¹⁾を提案し、さらに新たに提唱している塑性の場の理論⁽²⁾に基づき、ひずみ勾配塑性ならびに転位の集団挙動とパターン形成に関する有力なモデルを提案してきた。最近では、多結晶体への適用も行っている。本稿では、塑性の場の理論の観点から、狭義の結晶塑性論をベースにしたマルチスケールモデリングの考え方について述べる。

2. 実験的知見

2.1 硬化特性について

筆者らは FCC, BCC および HCP 多結晶体材に関して、非比例的ひずみ履歴とひずみ速度の両効果の相互作用に関する系統的な実験を行い、塑性現象の本質を理解する上で有益な情報を数多く得てきた。別報⁽³⁾⁽⁴⁾にて詳細を示すように、加工硬化挙動に対しては、一般にセル組織形成などの結晶粒内の転位挙動の寄与が大きく、同スケールにおける適切な物理モデルの構築がまず重要であることが示唆される。マクロな応力応答を考える限り、集合組織などの粒構造の寄与は二次的なものとなる。

2.2 多結晶体材の応力応答について

多結晶体モデルを考える上で示唆的な実験結果⁽⁵⁾を Fig.1(a)に模式的に示す。これは試験片サイズ(この場合は平板状試験片の厚さ t)に対する結晶粒径 d の比 t/d を縦軸に流動応力レベルをプロットした結果であり、 t/d が大きくなる、すなわち含まれる結晶粒数が増加するに従い応力レベルは増加し、やがて一定値に収束する。これは多結晶体における拘束の効果であり、同図(b)に示すように粒径を越えた影響領域(AZ)の存在を

Fig.1 Grain size and number effect on stress response of polycrystalline material.

示唆している。同傾向は粒径および金属の SFE の大小に強く依存しており、粒の絶対寸法が小さいほど、また材料の SFE が小さいほど、粒数の影響が強く表れる。このことは、粗大結晶粒モデルで多結晶体の挙動を評価することの危険性を示している。また、粒径が例えば数 μm オーダーになればその AZ は大きい場合には 100 個のオーダーに達することになり、現象によっては最低でもその程度の粒数を含む大きさのユニットモデルを考えなければならないことを示唆している。さ

Fig.2 Schematics of concept for multiscale polycrystal plasticity modeling based on field theory of plasticity with SSS hypothesis.

らに、SFE が関係していることは、粒内での下部組織発展などの転位挙動が、多結晶体モデルにとっても重要な因子であることを明確に示している。

3. 微視的不均質性と応力支持構造の仮説

実際の多結晶体では、各粒の変形は周囲の拘束の影響で微視的にも極めて不均質となる。Caillaud ら⁽⁶⁾の大規模 3D 多結晶 FEM 解析によると、粒レベルでは硬化が促進されるものもあれば、逆に軟化を示すものあり(Fig.2 参照)、また単軸負荷下でも非比例的な負荷履歴を受ける。これはセルフコンシステントモデル等で仮定されている状況とは大きく異なる。

こうしたミクロレベルでの不均質性は、一種の自己組織化と考えられる応力支持構造(Stress Supporting Structure: SSS)の形成、すなわちマクロな不均質性に繋がるものと推察される。これを SSS 仮説⁽⁷⁾と呼ぶ。SSS 構造の存在により、2.2 で示した結晶粒の遠隔効果も説明できる。こうした粒の多体効果が密接に関係していると思われる現象として、表面のあれ、Lüders 帯の伝播等が考えられる。変形から誘起される損傷や破壊などを考える上で、こうしたミクロマクロにまたがる不均質性の存在を陽に認識することは重要かつ不可欠であると考えられる。

4. マルチスケール多結晶塑性モデルの考え方

“マルチスケール結晶塑性”と称する限りは、単にミクロとマクロを連成して解くのではなく、階層性のキーとなるスケール効果を陽に考慮する必要がある。前述の実験的知見から、“マルチスケール結晶塑性”モデルには最低限、

(a)転位の集団現象と転位下部組織に関連するスケール効果

(b)結晶粒の集団挙動関連するスケール(数+サイズ)の効果の 2 つのスケール効果が考慮されていることが必要である。これらはいずれも多数の構成要素の多体効果に起因する集団挙動が基本となっており、従来の連続体力学の範疇では表現し得ない。具体的なモデル化に際しては、粒内での転位下部組織発展、粒内での不均質変形に加えて、結晶粒の数とサイズの影響、さらに、粒を越えた領域での不均質変形場も考える必要がある。それぞれを、下部組織レベル(Cell)、結晶粒レベル(Gr)、試験片レベル(Sp)と称し、結晶塑性モデルを硬化係

数で代表させて表すと、形式的には下記のように分類することができる。

- 段階 0: $h=h_0(\gamma \text{ あるいは } \rho)$: メゾ結晶塑性モデル
 段階 I: $h=h_0(\text{下部組織, 結晶粒, 試験片})$: 完全現象論モデル
 段階 II: $h=h_0(\text{結晶粒, 試験片}) + h_{\text{Cell}}$
 段階 III: $h=h_0(\text{試験片}) + h_{\text{Cell}} + h_{\text{Gr}}$
 段階 IV: $h=h_0 + h_{\text{Cell}} + h_{\text{Gr}} + h_{\text{Sp}}$: 完全自立型モデル

上記において段階 III 以上が“マルチスケール”結晶塑性モデルである。は、従来提案されているメゾ塑性モデルのほとんどが段階 0 あるいは段階 I に分類される。

5. 場の理論に基づく粒内不均質変形場におけるセル形成

一応力場、応力分布の影響

筆者⁽²⁾は近年場の理論を提唱し、転位の集団挙動に対して“粗視化”を実行することで、ミクロな理論から厳密にマクロな有効理論を導くことに成功した。そこでは、動的回復過程における転位の対消滅をセル形成の最も重要な素過程と考え、そのエネルギー期待値をマクロな Order Parameter 場とした。場の理論に基づき構築したセル形成モデル⁽²⁾を、外部応力場および結晶粒内の不均質変形場に対し適用した例を次に示す。

Fig.3 は単軸引張り((a)(b)), 単純せん断((c)(d))および等二軸引張り((e)(f))の各種一様応力条件下における解析結果の代表例である。例えば、単軸引張り下では負荷方向に伸びたセル形状を示している。一方 Fig.4 は応力分布のある場合の解析結果の一例である。ここでは、近似的に g_{em} の値を段階的に変化させて解析を行った。同図(a), (b)はそれぞれ Case A および C に対応する。セルサイズに分布ができる様子が示されている。ただし応力場の効果には、活動すべり系の異方性は含まれていない。こうした応力場の影響を陽に考慮できることが、場の理論から導出された本モデルの優れた特徴の一つであり、粒内の不均質変形場をすべり系基準の結晶塑性構成式に反映する際の指針を与える。

6. 結晶塑性構成式の提案

$K^{(a)}$ を抗応力、 $\Omega^{(a)}$ を背応力とすると、結晶塑性理論における微視的構成式の一般形および抗応力の発展式は、

$$\dot{\gamma}^{(a)} = f \left(\frac{\tau^{(a)} - \Omega^{(a)}}{K^{(a)}} \right), \quad \dot{K}^{(a)} = Q_{\alpha\beta} H(\gamma) |\dot{\gamma}^{(a)}| \quad (1)$$

で与えられる⁽¹⁾。ここに $Q_{\alpha\beta}$ は硬化比を表し、この部分に転位下部組織に関するすべての情報が反映される。具体的には、

$$Q_{\alpha\beta} = \delta_{\alpha\beta} + f_{\alpha\kappa} S_{\kappa\beta} + \sum_k F_k(\alpha_k^{(\beta)}, \eta_k^{(\beta)}) \quad (2)$$

結晶粒および試験片オーダーの不均質変形場の影響を考慮するために、新たに関数 $F_k(\alpha_k^{(\beta)}, \eta_k^{(\beta)})$ ($k=Gr, Sp$) を導入した。同関数の具体形は微分幾何学的場の理論に基づき決定でき、ねじれテンソル、曲率テンソルに対応するひずみ勾配項 $\alpha_k^{(\beta)}, \eta_k^{(\beta)}$ の関数で与えられる。それぞれひずみの一次勾配および二次勾配に対応する。具体形として次式を提案する。

$$F_{Gr}(\alpha_{Gr}^{(\alpha)}, \eta_{Gr}^{(\alpha)}) = k \delta_{\alpha\beta} \left(\frac{b |\alpha_{Gr}^{(\beta)}|}{\Delta \gamma_{Gr}^{(\beta)}} + \text{sgn}(\eta_{Gr}^{(\beta)}) \sqrt{\frac{b |\eta_{Gr}^{(\beta)}|}{l_{Gr} \cdot \Delta \gamma_{Gr}^{(\beta)}}} \right) \quad (4)$$

$$\begin{cases} \Delta \gamma_{Gr}^{(\beta)} = (\Delta \gamma)_{Gr}^{\min} + \left(\frac{d_{\alpha}}{D_{\beta}} \right) \cdot \Delta \gamma_{Sp}^{(\beta)} \quad (\text{no sum on } \beta) \\ \Delta \gamma_{Sp}^{(\beta)} = \left(b |\alpha_{Sp}^{(\beta)}| + \text{sgn}(\eta_{Sp}^{(\beta)}) b |\eta_{Sp}^{(\beta)}| \frac{d_{\beta}}{l_{\beta}} \right) \cdot d_{\beta}^{\text{mg}} \end{cases}$$

前述のように、粒を越えての不均質変形場をも同時に考慮する必要があるため、各すべり系でのすべりひずみより勾配項

Fig.3 Effect of external stress on dislocation structure morphology.

Fig.4 Effect of g_{em} distribution on cell morphology simulating heterogeneous intragranular deformation.

を求める方法ではなく、マクロなひずみ分布より α_{ij}, η_{ij} を算出し、その後各すべり系へ分解する方法を採用した。

式(4)の第二項は硬化だけでなくむしろ軟化と関係している⁽⁷⁾と考えられ、SSS等を考える上で重要な役割を果たす。

7. マルチスケール解析手法の候補について

以上述べてきたように、結晶塑性解析を考える上でミクロ-マクロにまたがる変形の不均質性を考慮することが重要かつ不可欠である。既存の手法のうち現時点で最も有効と考えられるものは、最近高野ら⁽⁸⁾により提案されている重合メッシュを用いた方法である。同法では、均質化法と異なりマクロな変形が局在化する箇所や表面なども対象とすることができる。試験片、結晶粒および転位下部組織の各オーダーのメッシュをそれぞれ Sp, Gr および $Cell$ と表すと、剛性方程式は形式的に次のように書ける。

$$\begin{bmatrix} K^{Sp} & K^{Sp-Gr} & K^{Sp-Cell} \\ K^{Sp-Gr} & K^{Gr} & K^{Gr-Cell} \\ K^{Sp-Cell} & K^{Gr-Cell} & K^{Cell} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \dot{u}^{Sp} \\ \dot{u}^{Gr} \\ \dot{u}^{Cell} \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} F^{Sp} \\ F^{Gr} \\ F^{Cell} \end{Bmatrix} \quad (6)$$

ここで、例えば、

$$K^{Sp-Gr} = \int_{Gr} (B^{Sp})^T D^{Gr} B^{Gr} dV^{Gr} \quad (7)$$

であり結晶粒オーダーと試験片オーダーの変形場間の相互作用を担う。実用上は上記 3 オーダーを同時に考慮するのは困難であり、例えば転位下部組織オーダーについては前項で示した場の理論に基づくモデルを併用すればよい。8. 結言 略