非局所結晶塑性を考慮した均質化理論の構築と有限要素離散化[†]

奥 村 大^{*} 東 洋 一^{**} 大 野 信 忠^{*}

A Homogenization Theory and Its Finite Element Discretization for Nonlocal Crystal Plasticity

by

Dai OKUMURA^{*}, Youichi HIGASHI^{**} and Nobutada OHNO^{*}

In this study, we develop a homogenization theory and its finite element discretization based on the nonlocal crystal plasticity theory of Gurtin (J. Mech. Phys. Solids 48 (2000) ; J. Mech. Phys. Solids 50 (2002)), which includes slip gradients and additional slip boundary conditions with respect to microforce balances for each slip system. Although it is difficult to determine slip boundary conditions, the development of the homogenization theory for the nonlocal crystal plasticity makes it possible to obtain the unified treatment of slip boundary conditions on the periodic boundary in periodic materials. Furthermore, by applying a tangent modulus method to the finite element discretization of rate-dependent small deformation, a strong coupling boundary value problem is derived from homogenization equations which consist of the stress balance, the microforce balances and the macroscopic relation. Finally, the effectiveness of the proposed theory and method is confirmed through finite element analyses of a double slip single crystal model with periodic obstacles.

Key words : Homogenization theory, Nonlocal crystal plasticity, Finite element discretization, Strain gradient, Size effect

1 緒 言

古典的な結晶塑性理論¹⁾では塑性変形の寸法依存性を評価できない。このため、寸法効果を表現できる非局所結晶塑性の理論構築が盛んに行われている。^{2)~8)}これらの結晶塑性理論は、いずれも幾何学的に必要な転位 (GN 転位) 密度とせん断塑性ひずみの 1 次勾配との関係^{9), 10)}に着目して理論構築されており、硬化則に GN 転位密度を導入する理論^{2), 3), 6)~8)}と仮想仕事の原理にせん断塑性ひずみの 1 次勾配を導入する理論^{4), 5)}に分けられる。両者を比較すると、硬化則に GN 転位密度を導入する方法は、有限要素解析への組込みが容易であるが、逆負荷時の GN 転位の再可動化に伴うバウシinger 効果の発生を表現できない。一方、Gurtin によって提案された後者の理論^{4), 5)}は上述の挙動を表現できる特徴を有している。

Gurtin の理論の妥当性を調べるために単純な単結晶複合材料の周期単位の有限要素解析が行われ、解析結果は離散転位動力学計算の結果とよく一致することが示された。¹¹⁾ただしこの解析では、せん断塑性ひずみの 1 次勾配の導入に伴って生じる周期単位境界上でのせん断塑性ひずみの境界条件を解析モデルや負荷条件の対称性に基づいて与えている。この方法は単純な問題には適用できるが、より一般的な問題の解析を行うためには周期単位境界上での各すべり系のせん断塑性ひずみの境界条件を系統的に取扱うための理論の拡張が必要となる。

さて、周期材料の微視的特性と巨視的特性を数学的に

厳密に評価できる理論として均質化理論がある。¹²⁾微小変形の弾性問題に対して構築された均質化理論^{13)~15)}は、最近では著者らによっても弾粘塑性問題^{16), 17)}や有限変形問題、微視的分岐座屈問題^{18), 19)}に対して拡張された。均質化理論では変位を巨視的成分とそれからのずれを表す擾乱成分に分離することによって理論展開を行う。このため、周期単位の境界では擾乱成分の周期性 (均質化理論ではこの周期性を Y 周期性と呼ぶ) を考えればよく、周期単位境界での境界条件を一意的に決定できる利点を有している。したがって、Gurtin の非局所結晶塑性理論に対しても均質化理論に基づく理論構築を行えば、非局所結晶塑性を考慮した周期材料の有限要素解析を行う上で大変有用である。

そこで本研究では、Gurtin の理論に基づく非局所結晶塑性の均質化理論を構築するとともに、有限要素法を用いた離散化の方法を示す。このため、時間依存微小変形の場合について理論展開を行い、均質化理論における応力の釣合いとすべりの駆動力の釣合いに関する弱形式の導出を行う。つづいて接線係数法の考え方を応用して、これら 2 つの弱形式と巨視的関係式から増分形式のマトリックス連成された有限要素方程式が得られることを示す。さらに解析例として 2 すべり系を有する単結晶周期複合材料の解析を行い、本研究で構築した理論と解析手法が非局所結晶塑性を考慮した周期単位の解析に対して有効であることを示す。

[†] 原稿受理 平成 17 年 2 月 4 日 Received Feb. 4, 2005

^{*} 正 会 員 名古屋大学大学院工学研究科計算理工学専攻 〒464-8603 名古屋市千種区不老町, Dept. of Comput. Sci. Eng., Nagoya Univ., Chikusa-ku, Nagoya, 464-8603

^{**} 名古屋大学大学院 〒464-8603 名古屋市千種区不老町, Graduate Student, Nagoya Univ., Chikusa-ku, Nagoya, 464-8603

2 非局所結晶塑性の基礎式

本研究では, 時間依存微小変形の問題について Gurtin の非局所結晶塑性理論^{4), 5)}を考える. このため, 直交座標系 x_i ($i = 1, 2, 3$) を設け, 物体力は作用しないとする.

このとき, 応力 σ_{ij} の釣合いとフックの法則は,

$$\sigma_{ij,j} = 0 \quad (1)$$

$$\sigma_{ij} = c_{ijkl}(\varepsilon_{kl} - \varepsilon_{kl}^p) \quad (2)$$

と表される. ここで, $(\cdot)_{,i}$ は x_i に関する偏微分を意味し, c_{ijkl} は $c_{ijkl} = c_{klij} = c_{jikl} = c_{jilk}$ を満足する弾性係数, ε_{kl} と ε_{kl}^p はひずみと非弾性ひずみを表す. ひずみ ε_{kl} は変位 u_i を用いて次式のように書ける.

$$\varepsilon_{kl} = \frac{1}{2}(u_{k,l} + u_{l,k}) \quad (3)$$

また, 非弾性ひずみ ε_{kl}^p は各すべり系 ($\beta = 1, 2, \dots, N$) でのせん断塑性ひずみ $\gamma^{(\beta)}$ の総和として,

$$\varepsilon_{kl}^p = \sum_{\beta} \gamma^{(\beta)} \mu_{kl}^{(\beta)} \quad (4)$$

と表される. 上式において $\mu_{kl}^{(\beta)}$ はシュミットテンソルと呼ばれ, すべり面の単位法線 $m_i^{(\beta)}$ とすべり方向 $s_i^{(\beta)}$ を用いると次のように書ける.

$$\mu_{kl}^{(\beta)} = \frac{1}{2}(s_k^{(\beta)} m_l^{(\beta)} + m_k^{(\beta)} s_l^{(\beta)}) \quad (5)$$

各すべり系のせん断塑性ひずみ速度 $\dot{\gamma}^{(\beta)}$ は, すべり面上のすべり方向に作用するすべりの駆動力を $\pi^{(\beta)}$ として, 時間依存のべき乗型構成式

$$\dot{\gamma}^{(\beta)} = \dot{\gamma}_0 \frac{\pi^{(\beta)}}{\pi_0} \left| \frac{\pi^{(\beta)}}{\pi_0} \right|^{(1/n-1)} \quad (6)$$

に従うとする. ここで, $\dot{\gamma}_0$, π_0 , n はそれぞれ参照ひずみ速度, 参照駆動力, ひずみ速度指数と呼ばれる材料定数である. なお本研究では, 簡単のためどのすべり系においても $\dot{\gamma}_0$ と π_0 を一定とする.

Gurtin の理論^{4), 5)}では, 仮想仕事の原理を出発点として, 各すべり系のせん断塑性ひずみの 1 次勾配 $\gamma_{,i}^{(\beta)}$ が仕事共役 $\xi_i^{(\beta)}$ によって仕事をするという仮定のもと, すべりの駆動力 $\pi^{(\beta)}$ の釣合い式

$$\pi^{(\beta)} - \tau^{(\beta)} - \xi_{i,i}^{(\beta)} = 0 \quad (7)$$

が導かれる. 上式において $\tau^{(\beta)}$ は分解せん断応力であり, シュミットテンソル $\mu_{kl}^{(\beta)}$ を用いて次のように表される.

$$\tau^{(\beta)} = \sigma_{ij} \mu_{ij}^{(\beta)} \quad (8)$$

また, せん断塑性ひずみの 1 次勾配 $\gamma_{,i}^{(\beta)}$ の仕事共役 $\xi_i^{(\beta)}$ は, 材料の特性長さ ℓ ^{3)~5), 11), 20), 21)} と交代記号 e_{ipq} を用いて,

$$\xi_i^{(\beta)} = \ell^2 \pi_0 e_{ipq} m_p^{(\beta)} \alpha_{rq} s_r^{(\beta)} \quad (9)$$

と表されるとする.^{4), 5), 11)} ここで α_{ij} は, GN 転位密度テンソルと呼ばれ, 各すべり系のせん断塑性ひずみの 1 次勾配 $\gamma_{,i}^{(\beta)}$ との間に次式の関係有する.⁹⁾

$$\alpha_{ij} = \sum_{\kappa} e_{jkl} \gamma_{,k}^{(\kappa)} s_l^{(\kappa)} m_l^{(\kappa)} \quad (10)$$

なお, 仕事共役 $\xi_i^{(\beta)}$ は GN 転位の応力場によって生じるピーチ・ケラーの力として理解できることが示されており,⁵⁾ 材料の特性長さ ℓ の実体については離散転位動力学計算との比較によって議論が行われている.¹¹⁾

Gurtin の理論の特徴は, GN 転位の自由エネルギーか

ら導出される仕事共役 $\xi_i^{(\beta)}$ (式 (9)) と, その項によって GN 転位密度 α_{ij} と特性長さ ℓ の影響が組み込まれたすべりの駆動力の釣合い式 (7) である. 式 (7) の左辺第 3 項の $\xi_{i,i}^{(\beta)}$ には式 (9), (10) の関係より GN 転位密度テンソルが符号を有した形で導入されるため, GN 転位の堆積に伴う硬化挙動だけでなく, 逆負荷での GN 転位の再可動化によるバウシinger 効果を表現することができる.

3 均質化理論の構築

この章では, 前章で示した非局所結晶塑性の基礎式を用いて均質化理論の構築を行う. このため, 巨視的に一様変形している周期材料の周期単位を Y とし, Y の境界を ∂Y と表す. このとき, ∂Y では変位の擾乱成分のほか各状態量が Y 周期性¹²⁾ を満足する. この条件を用いて, 応力とひずみの巨視的関係を示すとともに, 応力の釣合い式 (1) とすべりの駆動力の釣合い式 (7) に関する弱形式を導く.

3.1 巨視的關係

均質化理論では, 変位 u_i を巨視的変位 u_i^0 とそれからのずれを表す擾乱変位 u_i^* を用いて,

$$u_i = u_i^0 + u_i^* \quad (11)$$

と分離する. ここで, 擾乱変位 u_i^* は周期単位の境界 ∂Y において Y 周期性を満足する. この関係を式 (3) に代入すると, ひずみも巨視的成分と擾乱成分に分離できる.

$$\varepsilon_{kl} = \varepsilon_{kl}^0 + \varepsilon_{kl}^* \quad (12)$$

$$\varepsilon_{kl}^0 = \frac{1}{2}(u_{k,l}^0 + u_{l,k}^0) \quad (13)$$

$$\varepsilon_{kl}^* = \frac{1}{2}(u_{k,l}^* + u_{l,k}^*) \quad (14)$$

上式において, 巨視的ひずみ ε_{kl}^0 は Y 内で一様となり, ε_{kl}^* は u_i^* と同様に Y 周期性を満足する.

次に巨視的関係を導入するため, $|Y|$ を周期単位 Y の体積として, Y 内の体積平均を次式のように定義する.

$$\langle \# \rangle = |Y|^{-1} \int_Y \# dY \quad (15)$$

このとき, 式 (12) に式 (15) を適用すると巨視的ひずみ ε_{kl}^0 と微視的ひずみ ε_{kl} の関係 $\varepsilon_{kl}^0 = \langle \varepsilon_{kl} \rangle$ が得られる.¹⁴⁾ また, 巨視的応力 Σ_{ij} と微視的応力 σ_{ij} を結び付ける巨視的関係は次式となる.

$$\Sigma_{ij} = \langle \sigma_{ij} \rangle \quad (16)$$

3.2 弱形式

応力の釣合い式 (1) とすべりの駆動力の釣合い式 (7) に関する弱形式を求めるために, Y 周期性を満足する任意の変分 δu_i^* , $\delta \gamma^{(\beta)}$ を考える. このとき, それぞれの積分形式は,

$$\langle \sigma_{ij,j} \delta u_i^* \rangle = 0 \quad (17)$$

$$\langle (\pi^{(\beta)} - \tau^{(\beta)} - \xi_{i,i}^{(\beta)}) \delta \gamma^{(\beta)} \rangle = 0 \quad (18)$$

となり, 上式 (17), (18) に部分積分と発散定理を用いることによって,

$$\langle \sigma_{ij} \delta u_{i,j}^* \rangle - |Y|^{-1} \int_{\partial Y} n_j \sigma_{ij} \delta u_i^* dS = 0 \quad (19)$$

$$\langle (\pi^{(\beta)} - \tau^{(\beta)}) \delta \gamma^{(\beta)} + \xi_{i,i}^{(\beta)} \delta \gamma_{,i}^{(\beta)} \rangle - |Y|^{-1} \int_{\partial Y} n_i \xi_i^{(\beta)} \delta \gamma^{(\beta)} dS = 0 \quad (20)$$

と展開できる。これらの式において、均質化理論では周期単位境界における外向き単位法線 n_j の反 Y 周期性と、 σ_{ij} , δu_i^* , $\xi_i^{(\beta)}$, $\delta \gamma^{(\beta)}$ の Y 周期性から境界積分項は零となる。^{16)~19)}したがって、応力の釣合式 (1) とすべりの駆動力の釣合式 (7) の弱形式は次式のようになる。

$$\langle \sigma_{ij} \delta \varepsilon_{ij}^* \rangle = 0 \quad (21)$$

$$\langle (\pi^{(\beta)} - \tau^{(\beta)}) \delta \gamma^{(\beta)} + \xi_i^{(\beta)} \delta \gamma_{,i}^{(\beta)} \rangle = 0 \quad (22)$$

なお、式 (21) の導出には σ_{ij} の対称性を利用した。

周期単位境界上での Y 周期性を考慮しないと、式 (19), (20) 中の境界積分を消去することはできない。式 (20) の境界積分におけるせん断塑性ひずみ $\gamma^{(\beta)}$ とその 1 次勾配の仕事共役 $\xi_i^{(\beta)}$ に関する境界条件として、Gurtin はすべり自由条件 ($n_i \xi_i^{(\beta)} = 0$) とすべり拘束条件 ($\gamma^{(\beta)} = 0$) を提案した。^{4), 5)} また、Bittencourt らは 1 すべり系を有する単結晶複合材料の周期単位境界の境界条件を、解析モデルの対称性を参考にして、上述の 2 つの境界条件を用いて与えた。¹¹⁾ これに対して、本研究で導いた式 (21), (22) の周期単位境界での境界条件は Y 周期性に基づいている。したがって、どのような問題に対しても周期単位境界の境界条件を系統的かつ一意的に定めることができる。

4 有限要素離散化

巨視的關係式 (16) と 2 つの弱形式 (21), (22) を有限要素法に基づき離散化する。このため、時刻 t における変形状態を既知として $t + \Delta t$ における変形状態を求める。このとき、増分区間での変化量を $\Delta(\cdot)$ と表し、式 (2), (4), (8), (12) の関係を代入すると、式 (16), (21), (22) は次式のように時間的に離散化される。

$$\Delta \Sigma_{ij} = \langle c_{ijkl} \rangle \Delta \varepsilon_{kl}^0 + \langle c_{ijkl} \Delta \varepsilon_{kl}^* \rangle - \langle c_{ijkl} \Delta \varepsilon_{kl}^p \rangle \quad (23)$$

$$\langle \delta \varepsilon_{ij}^* c_{ijkl} \rangle \Delta \varepsilon_{kl}^0 + \langle \delta \varepsilon_{ij}^* c_{ijkl} \Delta \varepsilon_{kl}^* \rangle - \langle \delta \varepsilon_{ij}^* c_{ijkl} \Delta \varepsilon_{kl}^p \rangle = 0 \quad (24)$$

$$\langle \delta \gamma^{(\beta)} \Delta \pi^{(\beta)} \rangle - \langle \delta \gamma^{(\beta)} \Delta \tau^{(\beta)} \rangle + \langle \delta \gamma_{,i}^{(\beta)} \Delta \xi_i^{(\beta)} \rangle = 0 \quad (25)$$

ここで、

$$\Delta \varepsilon_{kl}^p = \sum_{\beta} \Delta \gamma^{(\beta)} \mu_{kl}^{(\beta)} \quad (26)$$

$$\Delta \tau^{(\beta)} = \mu_{ij}^{(\beta)} c_{ijkl} (\Delta \varepsilon_{kl}^0 + \Delta \varepsilon_{kl}^* - \Delta \varepsilon_{kl}^p) \quad (27)$$

$$\Delta \xi_i^{(\beta)} = \sum_{\kappa} R_{ik}^{(\kappa \beta)} \Delta \gamma_{,k}^{(\kappa)} \quad (28)$$

であり、式 (28) の $R_{ik}^{(\kappa \beta)}$ は、式 (9) に式 (10) を代入し、クロネッカーのデルタ δ_{ij} を用いて整理することによって、

$$R_{ik}^{(\kappa \beta)} = \ell^2 \pi_0 s_j^{(\kappa)} s_j^{(\beta)} \left(m_l^{(\kappa)} m_l^{(\beta)} \delta_{ik} - m_i^{(\kappa)} m_k^{(\beta)} \right) \quad (29)$$

と表される。ただし、式 (25) は式 (26)~(28) の関係より変化量 $\Delta \gamma^{(\beta)}$ と $\Delta \pi^{(\beta)}$ を含んでおり、 $\dot{\gamma}^{(\beta)}$ と $\pi^{(\beta)}$ は式 (6) に示されるような非線形関係を有する。

式 (25) に含まれる $\Delta \gamma^{(\beta)}$ と $\Delta \pi^{(\beta)}$ の非線形関係を線形化するため、接線係数法の考え方を応用してせん断塑性ひずみの増分 $\Delta \gamma^{(\beta)}$ を時刻 t での $\dot{\gamma}^{(\beta)}(t)$ と時刻 $t + \Delta t$ での $\dot{\gamma}^{(\beta)}(t + \Delta t)$ を用いて次式のように表す。

$$\Delta \gamma^{(\beta)} = \{(1 - \theta) \dot{\gamma}^{(\beta)}(t) + \theta \dot{\gamma}^{(\beta)}(t + \Delta t)\} \Delta t \quad (30)$$

ここで、 θ は 0 ~ 1 の係数であり、 $\theta = 0$ のときが前進オイラー法、 $\theta = 1$ のときが後退オイラー法にそれぞれ対応し、 $0.5 \leq \theta \leq 1$ とするとき増分計算は安定化する。²²⁾ $\dot{\gamma}^{(\beta)}(t + \Delta t)$ は時刻 t において不定であるが、式 (6) の関係をテイラー展開することによって 1 次近似を行い式 (30) に代入すると、

$$\Delta \gamma^{(\beta)} = \left\{ \dot{\gamma}^{(\beta)}(t) + \theta \frac{\partial \dot{\gamma}^{(\beta)}}{\partial \pi^{(\beta)}} \Delta \pi^{(\beta)} \right\} \Delta t \quad (31)$$

が得られる。本研究では、上式における $\Delta \gamma^{(\beta)}$ と $\Delta \pi^{(\beta)}$ の線形関係に着目して、

$$\Delta \pi^{(\beta)} = \Theta^{(\beta)} \{ \Delta \gamma^{(\beta)} - \dot{\gamma}^{(\beta)}(t) \Delta t \} \quad (32)$$

と展開する。ここで、 $\Theta^{(\beta)} = \theta^{-1} \Delta t^{-1} (\partial \dot{\gamma}^{(\beta)} / \partial \pi^{(\beta)})^{-1}$ である。これより、 $\Delta \pi^{(\beta)}$ は $\Delta \gamma^{(\beta)}$ を用いて線形化されるため、式 (32) を代入して整理すると、式 (25) は、 $\Delta \varepsilon_{kl}^0$, $\Delta \varepsilon_{kl}^*$, $\Delta \gamma^{(\beta)}$ を変数とする弱形式に書き換えられる。したがって、式 (23) の巨視的關係と式 (24) と (25) に示される 2 つの弱形式は、 $\Delta \Sigma_{ij}$ を与え、 $\Delta \varepsilon_{kl}^0$, $\Delta \varepsilon_{kl}^*$, $\Delta \gamma^{(\beta)}$ を求める連立方程式に帰着する。なお、式 (32) の線形関係は $\theta = 0$ や $\partial \dot{\gamma}^{(\beta)} / \partial \pi^{(\beta)} = 0$ の場合に不定となることに注意が必要である。

この問題を解くため、各有限要素内において Δu_i^* と $\Delta \gamma^{(\beta)}$ を次のように表す。

$$\Delta u_i^* = \sum_{k=1}^M N^{(k)} \Delta U_i^{*(k)} \quad (33)$$

$$\Delta \gamma^{(\beta)} = \sum_{k=1}^M N^{(k)} \Delta \Gamma_{(k)}^{(\beta)} \quad (34)$$

ここで、 $N^{(k)} (k = 1, 2, \dots, M)$ は形状関数を表し、 $\Delta U_i^{*(k)}$ と $\Delta \Gamma_{(k)}^{(\beta)}$ は各有限要素を構成する節点値である。

このとき、周期単位全体における Δu_i^* の節点値ベクトルを $\Delta \mathbf{U}^*$ 、全すべり系 ($\beta = 1, 2, \dots, N$) で $\Delta \gamma^{(\beta)}$ をまとめた節点値ベクトルを $\Delta \mathbf{\Gamma}$ とすると、式 (23)~(25) は、

$$\langle \mathbf{C} \rangle \Delta \boldsymbol{\varepsilon}^0 + \langle \mathbf{CB} \rangle \Delta \mathbf{U}^* - \langle \mathbf{CPN} \rangle \Delta \mathbf{\Gamma} = \Delta \boldsymbol{\Sigma} \quad (35)$$

$$\langle \mathbf{B}^T \mathbf{C} \rangle \Delta \boldsymbol{\varepsilon}^0 + \langle \mathbf{B}^T \mathbf{CB} \rangle \Delta \mathbf{U}^* - \langle \mathbf{B}^T \mathbf{CPN} \rangle \Delta \mathbf{\Gamma} = 0 \quad (36)$$

$$-\langle \mathbf{N}^T \mathbf{P}^T \mathbf{C} \rangle \Delta \boldsymbol{\varepsilon}^0 - \langle \mathbf{N}^T \mathbf{P}^T \mathbf{CB} \rangle \Delta \mathbf{U}^* + \left\langle \mathbf{N}^T \boldsymbol{\Theta} \mathbf{N} + \mathbf{N}^T \mathbf{P}^T \mathbf{CPN} + \frac{\partial \mathbf{N}^T}{\partial \mathbf{x}} \mathbf{R} \frac{\partial \mathbf{N}}{\partial \mathbf{x}} \right\rangle \Delta \mathbf{\Gamma} = \langle \mathbf{N}^T \boldsymbol{\Theta} \dot{\gamma} \Delta t \rangle \quad (37)$$

と空間的に離散化される。ここで、 $\mathbf{C}$, $\mathbf{P}$, $\mathbf{R}$, $\boldsymbol{\Theta}$ のマトリックスはそれぞれ c_{ijkl} , $\mu_{kl}^{(\beta)}$, $R_{kl}^{(\kappa \beta)}$, $\Theta^{(\beta)}$ に対応し、 $\mathbf{B}$ はひずみ-変位マトリックス、 $\mathbf{N}$ はせん断塑性ひずみ成分に対応した形状関数のマトリックスである。なお、 $(\cdot)^T$ は転置記号である。

式 (35)~(37) をマトリックス形式で整理すると、マトリックス連成された有限要素方程式が得られる。

$$\begin{bmatrix} \mathbf{K}_{00} & \mathbf{K}_{0*} & \mathbf{K}_{0\Gamma} \\ \mathbf{K}_{*0} & \mathbf{K}_{**} & \mathbf{K}_{*\Gamma} \\ \mathbf{K}_{\Gamma 0} & \mathbf{K}_{\Gamma*} & \mathbf{K}_{\Gamma\Gamma} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \Delta \boldsymbol{\varepsilon}^0 \\ \Delta \mathbf{U}^* \\ \Delta \mathbf{\Gamma} \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \Delta \boldsymbol{\Sigma} \\ \mathbf{0} \\ \Delta \mathbf{F} \end{Bmatrix} \quad (38)$$

上式において、マトリックスを構成する対角成分は式 (35)~(37) と $\mathbf{C} = \mathbf{C}^T$, $\boldsymbol{\Theta} = \boldsymbol{\Theta}^T$, $\mathbf{R} = \mathbf{R}^T$ の関係から $\mathbf{K}_{00} = \mathbf{K}_{00}^T$, $\mathbf{K}_{**} = \mathbf{K}_{**}^T$, $\mathbf{K}_{\Gamma\Gamma} = \mathbf{K}_{\Gamma\Gamma}^T$ を満足する。また、それ

以外の成分についても, $\mathbf{K}_{0*} = \mathbf{K}_{*0}^T$, $\mathbf{K}_{0\Gamma} = \mathbf{K}_{\Gamma 0}^T$, $\mathbf{K}_{*\Gamma} = \mathbf{K}_{\Gamma*}^T$ となるため, この有限要素方程式のマトリックスは対称性を有することが示される. また, 式 (38)において, $\Delta \varepsilon_{kl}^0$ を与えて $\Delta \Sigma_{ij}$, Δu_i^* , $\Delta \gamma^{(b)}$ を解くことも可能であり, どちらの場合も式 (38) を時間ステップ毎に解き, 各状態変数を更新して増分解析を行う.

5 解析例

この章では, 前章までで構築した理論と解析手法を検証するために, 2つのすべり系を有する2次元単結晶モデル¹⁾の解析を行う.

5.1 解析条件

Fig. 1 に示すように, x_1 - x_2 面内に2つのすべり系を有し, 周期的に障害物が存在する2次元単結晶モデルを考える. 単結晶の材料特性には, 弾性係数を等方であるとしてヤング率 70GPa, ポアソン比 0.3, $\dot{\gamma}_0 = 0.001\text{s}^{-1}$, $\pi_0 = 35\text{MPa}$, $n = 0.05$ を与える. また, 障害物はヤング率 350GPa, ポアソン比 0.3 の等方弾性体とし, 単結晶と障害物の界面には個々のすべり系にすべり拘束条件 ($\gamma^{(b)} = 0$) を付加する. 障害物の周期間隔 L は単結晶の特性長さ ℓ を用いて $L^* = L/\ell$ と無次元化し, 定性的な比較のため周期間隔が大きい場合 ($L^* = 1$) と小さい場合 ($L^* = 0.05$) を解析する.

Fig. 1 の解析モデルにおいて斜線を施した部分が実際に有限要素解析を行うための周期単位である. この周期単位の有限要素分割を Fig. 2 に示す. x_3 方向には一般化平面ひずみ条件 ($\partial u_i^*/\partial x_3 = 0$)¹⁷⁾ を適用し, 要素分割には

Fig. 1. Double slip 2D single crystal model with periodic obstacles; $\mathbf{s}^{(i)}$ and $\mathbf{m}^{(i)}$ ($i = 1, 2$) represent slip systems.

Fig. 2. Periodic unit and finite element mesh ($w = L/6$, 264 elements, 841 nodes).

2次元のアイソパラメトリック8節点2次要素²³⁾を用いる. なお, 周期単位境界におけるY周期境界条件はペナルティ法²⁴⁾により課した.

5.2 解析結果

巨視的せん断ひずみ速度 $\dot{\varepsilon}_{12}^0$ ($\dot{\varepsilon}_{12}^0 = 0.1\%/s$, $\Delta t = 0.05s$) を加えたときの巨視的応力-ひずみ線図を Fig. 3 に示す. また Fig. 4 は最大引張り負荷点でのせん断塑性ひずみ $\gamma^{(1)}$ とその1次勾配の仕事共役 $\xi_1^{(1)}$ の分布である. 代表寸法の大きな場合 ($L^* = 1$) と小さな場合 ($L^* = 0.05$) を比較すると, $L^* = 1$ の場合 (Fig. 4 (a), (b)) には周期単位内部にGN転位の堆積と再可動化を表す $\xi_1^{(1)}$ の変化はほとんど現れないことがわかる. これに対して $L^* = 0.05$ の場合 (Fig. 4 (c), (d)) には, $\xi_1^{(1)}$ の発生に伴い降伏直後の硬化と逆負荷時のバウシinger効果が現れる (Fig. 3). これらの挙動は Bittencourt ら¹¹⁾ の計算結果とよく対応する.

つづいて, 周期単位境界での境界条件の検討を行った. Fig. 4 に示されるせん断塑性ひずみ $\gamma^{(1)}$ とその1次勾配の仕事共役 $\xi_1^{(1)}$ の周期単位境界上での値に着目すると, これらの結果はすべり自由条件 ($n_i \xi_i^{(b)} = 0$) やすべり拘束条件 ($\gamma^{(b)} = 0$) のどちらにも属していないことがわかる. すなわち今回の解析モデルは比較的単純であるにもかかわらず, 従来の理論の枠組み^{4), 5)} ではこの境界条件を設定することができない. これに対して本研究で構築した均質化理論を用いれば, このような境界条件をY周期境界条件に基づき系統的に与えることができる.

最後に本研究で構築した有限要素離散化の増分安定性を検討するため, 大きな時間増分 ($\Delta t = 0.25s, 0.5s$) の場合についても同様の解析を行った. Fig. 5 はこのときの巨視的応力-ひずみ線図であり, 図中の実線は Fig. 3 と同じ時間増分 ($\Delta t = 0.05s$) の結果である. この図が示すように, 時間増分が大きくなると若干の計算誤差が現れるが, いずれの場合も計算は発散することなく安定な結果が得られた. これに対して, 著者らが以前に提案した前進オイラー法に基づく逐次連成解析手法²⁵⁾ では, $L^* = 0.05$ の場合には時間増分を $\Delta t = 10^{-6}s$ としても, 計算は発散し, 安定な解析を行うことができなかった. したがっ

Fig. 3. Macroscopic stress-strain relation for $L^* = 1$ and 0.05 at $|\dot{\varepsilon}_{12}^0| = 0.1\%/s$.

Fig. 4. Distribution of slip $\gamma^{(1)}$ and microforce $\xi_1^{(1)}$ for $L^* = 1$ and 0.05 at $\varepsilon_{12}^0 = 0.6\%$.

Fig. 5. Macroscopic stress-strain relation with time steps $\Delta t = 0.05$ s, 0.25 s, and 0.5 s ($\dot{\varepsilon}_{12}^0 = 0.1\%/s$).

て、本計算手法は L^* の値にかかわらず非常に高い増分安定性を有していると言える。この理由として、今回の有限要素離散化には接線係数法に基づく増分安定化手法が組み込まれており、さらにマトリックス連成された有限要素方程式を解くことにより増分区間での未知量の変化を整合的に評価していることが挙げられる。なお、以上の結果は $\theta = 1$ の場合であるが、 $\theta = 0.5, 0.7$ としても安定な結果が得られたことを付記しておく。

6 結 言

本研究では、Gurtin の非局所結晶塑性を考慮した均質化理論の構築と有限要素離散化の方法を示した。また解析例を示すことにより、今回構築された理論と解析手法の有用性について検討した。得られた知見は以下のようにまとめられる。

非局所結晶塑性を考慮した均質化理論の構築を行い、巨視的関係と応力の釣合いの弱形式およびすべりの駆動力の釣合いの弱形式をそれぞれ導出した。均質化理論では周期単位境界での境界条件は Y 周期性に基づいている。このため、周期単位境界における各すべり系のせん断塑性ひずみの境界条件を系統的かつ一意的に与えることができる。したがって今回構築した理論は、解析モデルや負荷条件の対称性を考慮することなく、どのような周期材料の問題に対しても適用可能である。

また、上述の巨視的関係と2つの弱形式に対して接線係数法を応用した有限要素離散化を行うことによって、1つのマトリックス連成された有限要素方程式を導いた。この方程式は対称性を有しているだけでなく、接線係数法に基づく増分安定化手法が組み込まれている。2すべり系を有する単結晶モデルの有限要素解析を行うことによって増分安定性を調べたところ、本解析手法は大きな時間増分に対しても安定かつ妥当な結果を示すことがわかった。

なお、本研究では理論と解析手法の妥当性を検証するために単結晶モデルの解析を行ったが、今後は多結晶金属の問題に理論を拡張し、特性長さや結晶粒界の取扱いが多結晶金属の巨視的特性に及ぼす影響の検討を行う予定である。

最後に、本研究の一部は文部科学省科学研究費補助金「若手研究 (B) 課題番号 16760064」の援助を受けたことを付記し、謝意を表する。

参 考 文 献

- 1) R. J. Asaro, *Adv. Appl. Mech.*, **23**, 1 (1983).
- 2) A. Acharya and J. L. Bassani, *J. Mech. Phys. Solids*, **48**, 1565 (2000).
- 3) J. L. Bassani, *J. Mech. Phys. Solids*, **49**, 1983 (2001).
- 4) M. E. Gurtin, *J. Mech. Phys. Solids*, **48**, 989 (2000).
- 5) M. E. Gurtin, *J. Mech. Phys. Solids*, **50**, 5 (2002).
- 6) 大橋鉄也, 日本機械学会論文集, **A-68**, 1490 (2002).
- 7) 黒田充紀, 志澤一之, 塑性と加工, **43**, 299 (2002).
- 8) 比嘉吉一, 澤田幸秀, 富田佳宏, 日本機械学会論文集, **A-69**, 523 (2003).
- 9) J. F. Nye, *Acta Metallurgica*, **1**, 153 (1953).
- 10) M. F. Ashby, *Phil. Mag.*, **21**, 399 (1970).
- 11) E. Bittencourt, A. Needleman, M. E. Gurtin and E. Van der Giessen, *J. Mech. Phys. Solids*, **51**, 281 (2003).
- 12) 寺田賢二郎, 菊池 昇 (日本計算工学会編), “均質化法入門” (2003) 丸善.
- 13) A. Bensoussan, J. L. Lions and G. Papanicolaou, “Asymptotic Analysis for Periodic Media” (1978) North-Holland.
- 14) E. Sanchez-Palencia, *Non-Homogeneous Media and Vibration Theory, Lecture Notes in Physics*, No.127 (1980) Springer-Verlag.
- 15) N. Bakhvalov and G. Panasenko, *Homogenisation : Averaging Processes in Periodic Media* (1984) Kluwer Academic Publishers.
- 16) X. Wu and N. Ohno, *Int. J. Solids Struct.*, **36**, 4991 (1999).
- 17) N. Ohno, X. Wu and T. Matsuda, *Int. J. Mech. Sci.*, **42**, 1519 (2000).
- 18) N. Ohno, D. Okumura and H. Noguchi, *J. Mech. Phys. Solids*, **50**, 1125 (2002).
- 19) D. Okumura, N. Ohno and H. Noguchi, *J. Mech. Phys. Solids*, **52**, 641 (2004).
- 20) N. A. Fleck and J.W. Hutchinson, *J. Mech. Phys. Solids*, **41**, 1825 (1993).
- 21) 長谷部忠司, 材料, **48**, 963 (1999).
- 22) D. Peirce, C. F. Shih and A. Needleman, *Comp. Struc.*, **18**, 875 (1984).
- 23) 富田佳宏, “数値弾塑性力学” (1990) 養賢堂.
- 24) O. C. Zienkiewicz and R. L. Taylor, “The finite element method, 4th. ed.” (1987) McGraw-Hill.
- 25) 奥村 大, 大野信忠, 日本機械学会第 16 回計算力学講演会講演論文集, 437 (2003).