アルミニウム板塑性異方性の有限要素多結晶モデルによる予測*

(第1報, 有限要素多結晶モデル)

高橋 寛^{*1}, 斎藤 知子^{*2}, 本橋 元^{*1}
徳田 正孝^{*3}, 阿部 武治^{*4}

Prediction of Plastic Anisotropy in Aluminium Sheet by Finite-Element Polycrystal Model (1st Report, Finite-Element Polycrystal Model)

Hiroshi TAKAHASHI, Tomoko SAITOH, Hajime MOTOHASHI,
Masataka TOKUDA and Takeji ABE

A finite-element polycrystal model is proposed to predict plastic deformations of polycrystal metals. Each element in FEM formulation is assumed to be a crystal of cubic shape, in which plastic strains are assumed to be uniform. For the determination of time-independent slips, a new numerical scheme, the "successive integration method", is proposed on the basis of Schmid's law. The numerical code of the present model is quite simple and can be applied to any arbitrary loading path. A stress-strain curve in simple tension is calculated for a non-workhardening FCC metal and compared with the other theories.

Key Words: Constitutive Equation, Micromechanics, Finite-Element Method, Polycrystal Model, Elastic Plastic Analysis

1. ま え が き

金属の塑性変形挙動を多結晶集合体の挙動として予測しようとする試みは、古くは Taylor⁽¹⁾によって始められた。これは“各結晶粒の塑性ひずみはすべて一定”と言う仮定に基づくものであり、FCC のようにすべり系の多い金属については十分成立する近似理論として、現在でもなお多く適用されている。

しかし六方晶のようにすべり系の少ない金属とか、複合材料のような不均一材料とか、あるいは応力方向が変化し部分的に除荷状態を生ずる場合、Taylor の仮設は成立せず、マトリックスの弾塑性拘束を考慮する必要がある。最初の弾塑性理論は Kröner⁽²⁾, Budiansky-Wu⁽³⁾ のいわゆる KBW モデルである。これは一つの結晶粒が一様なマトリックス中に埋められていると仮定したもので、Self-Consistent Model と呼ばれる。さらにマトリックスの拘束に塑性緩和を導入した Hill⁽⁴⁾ のモデルがある。

いずれも、介在物周囲のマトリックスは一様な剛性

をもっており、介在物は一様な拘束を受けていると仮定したものである。しかし、介在物とマトリックスの変形の食い違いはできるだけ局所的に吸収されるはずであり、このため一つの結晶粒のまわりでも部分的に弾性拘束や塑性拘束が不均一に起こっていると考えられる。そこで本研究では、実際の多結晶体に似せて、さまざまな方位をもつ結晶粒を無数に集積したいわゆる多結晶モデルを考えることにする。

多結晶モデルとして初めに提案されたものは Lin⁽⁵⁾ モデルである。これは、塑性ひずみを等価な仮想外力に置き換え、Kelvin の解を重ね合わせて結晶粒中の応力場を定めたものである。しかし任意の境界条件に対応させることが困難であり、また結晶の回転を考慮することができない。これに対して、有限要素多結晶モデルは各要素を結晶粒に見立てるもので、境界条件の設定が容易である。

有限要素法塑性解析には弾塑性剛性マトリックスを用いる接線係数法と、弾性剛性マトリックスを用いる初期ひずみ法がある。前者を多結晶モデルに適用した例としては宮本⁽⁶⁾, 神馬⁽⁷⁾, 後藤⁽⁸⁾らの研究がある。この場合 FEM の剛性マトリックスを構成するためにはまず単結晶の構成方程式を定式化する必要があり、単結晶の加工硬化則が確立していない現状では汎用性に

* 原稿受付 平成5年10月15日。

^{*1} 正員, 山形大学工学部 (〒992 米沢市城南4-3-16)。

^{*2} 旭光学工業(株) (〒174 東京都板橋区前野町2-36-9)。

^{*3} 正員, 三重大学工学部 (〒514 津市上浜町1515)。

^{*4} 正員, 岡山大学工学部 (〒700 岡山市津島中3-1-1)。

乏しい。後者の例としては Havner⁽⁹⁾, Harren⁽¹⁰⁾, Havlicek⁽¹¹⁾らの研究があるが、全ひずみと塑性ひずみの差としての弾性ひずみから応力を定めるため、塑性ひずみの計算精度に注意を払う必要がある。また Schmid 則を適用する際 active なすべり系をいかに見い出すがが困難な問題となる。Harren⁽¹⁰⁾や Havlicek⁽¹¹⁾らは単結晶にひずみ速度依存形の構成則を仮定してこの問題を回避してきた。

本研究は初期ひずみ法に基づき、ひずみ速度不依存形の解法を考案したのでこれを報告する。

2. 多結晶モデル

さまざまな結晶方位をもつ立方体状の N 個の結晶粒が一ブロックを形成し、これと同じブロックが図 1 に示すように三次元的に無限に積み重ねられた多結晶集合体を考える。巨視的な応力 $\bar{\sigma}_{ij}$ 、ひずみ $\bar{\epsilon}_{ij}$ は、微視的な応力 σ_{ij} 、ひずみ ϵ_{ij} の一ブロック内における平均値で定義する。

$$\bar{\sigma}_{ij} = \frac{1}{N} \sum \sigma_{ij}^{(n)}, \quad \bar{\epsilon}_{ij} = \frac{1}{N} \sum \epsilon_{ij}^{(n)} \quad \dots\dots\dots (1)$$

ブロック表面の変位増分 $\dot{u}_i$ は一様であると仮定し、一様な巨視的なひずみ増分 $\bar{\epsilon}_{ij}$ を与えるように次式で規定されているものとする。

$$\begin{bmatrix} \dot{u} \\ \dot{v} \\ \dot{w} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \bar{\epsilon}_x & \bar{\gamma}_{xy}/2 - \bar{\omega}_{xy} & \bar{\gamma}_{xz}/2 + \bar{\omega}_{xz} \\ \bar{\gamma}_{xy}/2 + \bar{\omega}_{xy} & \bar{\epsilon}_y & \bar{\gamma}_{yz}/2 - \bar{\omega}_{yz} \\ \bar{\gamma}_{xz}/2 - \bar{\omega}_{xz} & \bar{\gamma}_{yz}/2 + \bar{\omega}_{yz} & \bar{\epsilon}_z \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} \quad \dots\dots\dots (2)$$

このとき各ブロックの境界で変位の不連続はなく、仮想仕事の原理より次式が保証される。

$$\bar{\sigma}_{ij} \bar{\epsilon}_{ij} = \bar{\sigma}_{ij} \cdot \bar{\epsilon}_{ij} \quad \dots\dots\dots (3)$$

“各ブロックのひずみ一定”という仮定は、“各結晶

粒のひずみ一定”という Taylor モデルの拡張と考えることができる。

さてここで板の面内における引張りを考える。板の圧延方向、圧延直角方向、板厚方向をそれぞれ x , y , z とする。 x 方向から θ 方向に引張るものとして、その方向を x' 方向、それと直角方向を y' 方向とする。この場合巨視的スピンは次の条件から定めることができる。

$$\frac{\partial \dot{w}}{\partial x} = 0, \quad \frac{\partial \dot{w}}{\partial y} = 0, \quad \frac{\partial \dot{v}'}{\partial x'} = 0 \quad \dots\dots\dots (4)$$

ここで u' , v' はそれぞれ x' , y' 方向の変位である。この条件を入れると式(2)は改めて次のように表される。

$$\begin{bmatrix} \dot{u} \\ \dot{v} \\ \dot{w} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \bar{\epsilon}_x & (\bar{\gamma}_{xy} - g)/2 & \bar{\gamma}_{xz} \\ (\bar{\gamma}_{xy} + g)/2 & \bar{\epsilon}_y & \bar{\gamma}_{yz} \\ 0 & 0 & \bar{\epsilon}_z \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} \quad \dots\dots\dots (5)$$

ただし

$$g = (\bar{\epsilon}_x - \bar{\epsilon}_y) \sin 2\theta - \bar{\gamma}_{xy} \cos 2\theta$$

θ 方向の引張応力を σ_0 とおくと、各応力成分は次式で与えられる。

$$\begin{aligned} \bar{\sigma}_x &= \sigma_0 \cos^2 \theta, \quad \bar{\sigma}_y = \sigma_0 \sin^2 \theta, \\ \bar{\tau}_{xy} &= \sigma_0 \sin \theta \cos \theta, \\ \bar{\sigma}_z &= \bar{\tau}_{xz} = \bar{\tau}_{yz} = 0 \end{aligned} \quad \dots\dots\dots (6)$$

上式を Hooke の法則に適用することにより、全ひずみ増分は塑性ひずみ増分を用いて次式のように表される。ここでの e を変形のパラメータとする。

$$\begin{aligned} \bar{\epsilon}_x &= \bar{\epsilon}_x^p + (\dot{e} - \dot{e}^p)(\cos^2 \theta - \nu \sin^2 \theta), \\ \bar{\epsilon}_y &= \bar{\epsilon}_y^p + (\dot{e} - \dot{e}^p)(\sin^2 \theta - \nu \cos^2 \theta), \\ \bar{\gamma}_{xy} &= \bar{\gamma}_{xy}^p + 2(1 + \nu)(\dot{e} - \dot{e}^p) \sin \theta \cos \theta, \\ \bar{\epsilon}_z &= \bar{\epsilon}_z^p + (\dot{e} - \dot{e}^p), \quad \bar{\gamma}_{yz} = \bar{\gamma}_{yz}^p, \quad \bar{\gamma}_{zx} = \bar{\gamma}_{zx}^p \end{aligned} \quad \dots\dots\dots (7)$$

ただし

$$\dot{e}^p = \bar{\epsilon}_x^p \cos^2 \theta + \bar{\epsilon}_y^p \sin^2 \theta + \bar{\gamma}_{xy}^p \sin \theta \cos \theta$$

これより巨視的塑性ひずみが与えられればブロック表面の境界条件が与えられる。

次に θ 方向の圧延(平面ひずみ圧縮)を考える。巨視的スピンはやはり式(4)で与えられる。変形のパラメータを板厚ひずみ e として、境界条件を次式で与える。

$$\bar{\epsilon}_z = e, \quad \bar{\sigma}_x = 0, \quad \bar{\epsilon}_y = 0, \quad \bar{\tau}_{xy} = \bar{\tau}_{xz} = \bar{\tau}_{yz} = 0 \quad \dots\dots\dots (8)$$

これと Hooke の法則より巨視的ひずみが次式で与えられる。

図 1 多結晶モデル

$$\begin{aligned}\bar{\varepsilon}_x &= [\bar{\varepsilon}_x(1 + \cos 2\theta) - \bar{\gamma}_{xy} \sin 2\theta]/2, \\ \bar{\varepsilon}_y &= [\bar{\varepsilon}_x(1 - \cos 2\theta) + \bar{\gamma}_{xy} \sin 2\theta]/2, \\ \bar{\gamma}_{xy} &= \bar{\varepsilon}_x \sin 2\theta + \bar{\gamma}_{xy} \cos 2\theta, \\ \bar{\varepsilon}_z &= \dot{\varepsilon}, \quad \bar{\gamma}_{zx} = \bar{\gamma}_{zx}^p, \quad \bar{\gamma}_{yz} = \bar{\gamma}_{yz}^p\end{aligned}\quad \dots\dots\dots (9)$$

ただし

$$\begin{aligned}\bar{\varepsilon}_x &= -\frac{\nu}{1-\nu} \dot{\varepsilon} + \frac{1-2\nu}{1-\nu} (\bar{\varepsilon}_x^p \cos^2 \theta + \bar{\varepsilon}_y^p \sin^2 \theta \\ &\quad + \bar{\gamma}_{xy}^p \sin \theta \cos \theta) \\ \bar{\gamma}_{xy} &= -(\bar{\varepsilon}_x^p - \bar{\varepsilon}_y^p) \sin 2\theta + \bar{\gamma}_{xy}^p \cos 2\theta\end{aligned}$$

3. 有限要素法の定式化

現在の時刻 t および一段階前の時刻 t^1 における変形状態をそれぞれ C , C^1 と表す。さらにそれぞれの時刻において除荷状態を考え、これを C^* , C^{*1} と表すことにする。各状態における座標、面積ベクトル、応力ベクトルを表1のように定義する。

各時刻における応力テンソルは次式で定義される。

$$f_i = n_j \sigma_{ji}, \quad f_i^1 = n_j^1 \sigma_{ji}^1 \quad \dots\dots\dots (10)$$

弾性変形の変位こう配テンソルを、負荷時から除荷時への変形状態の変換として定義する。

$$F_{ij}^e = \frac{\partial x_i^*}{\partial x_j}, \quad F_{ij}^{e1} = \frac{\partial x_i^{*1}}{\partial x_j^1} \quad \dots\dots\dots (11)$$

さらに前の時刻 t^1 から現在の時刻 t への変位こう配テンソルを現在の時刻 t の変形状態を基準に定義する。

$$F_{ij} = \frac{\partial x_i^1}{\partial x_j}, \quad F_{ij}^* = \frac{\partial x_i^{*1}}{\partial x_j^*} \quad \dots\dots\dots (12)$$

連結則より次の関係式を得る。

$$F_{ij} = \frac{\partial x_i^1}{\partial x_k^{*1}} \cdot \frac{\partial x_k^{*1}}{\partial x_j^*} \cdot \frac{\partial x_j^*}{\partial x_j} = [F_{ik}^{e1}]^{-1} F_{ki}^* F_{ij}^e \quad \dots\dots (13)$$

ただし

$$[F_{ij}^{e1}]^{-1} = \frac{\partial x_i^1}{\partial x_j^{*1}}$$

ここで変位ベクトルを次のように定義する。

$$\begin{aligned}\dot{u}_i &= x_i - x_i^1, \quad \dot{u}_i^* = x_i^* - x_i^{*1} \\ u_i^e &= x_i - x_i^*, \quad u_i^{e1} = x_i^1 - x_i^{*1}\end{aligned}\quad \dots\dots\dots (14)$$

さらにひずみテンソル (Almansi strain) およびスピンテンソルを次のように定義する。

表1 変形状態

	Loading		Unloading	
	t	t^1	t	t^1
Coordinates	x_i	x_i^1	x_i^*	x_i^{*1}
Area vector	$n_i dA$	$n_i^1 dA^1$	$n_i^* dA^*$	$n_i^{*1} dA^{*1}$
Stress vector	f_i	f_i^1		

$$\begin{aligned}\dot{\varepsilon}_{ij} &= \delta_{ij} - (F_{ij} + F_{ji})/2 = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \dot{u}_j}{\partial x_i} + \frac{\partial \dot{u}_i}{\partial x_j} \right), \\ \dot{\omega}_{ij} &= (F_{ij} - F_{ji})/2 = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \dot{u}_j}{\partial x_i} - \frac{\partial \dot{u}_i}{\partial x_j} \right)\end{aligned}\quad \dots\dots\dots (15)$$

同様に $\dot{\varepsilon}_{ij}^*$, $\dot{\omega}_{ij}^*$, ε_{ij}^e , ω_{ij}^e , ε_{ij}^{e1} , ω_{ij}^{e1} を定義する。これを用いて変位こう配テンソルを次のように表すことができる。

$$\begin{aligned}F_{ij} &= \delta_{ij} - \dot{\varepsilon}_{ij} + \dot{\omega}_{ij}, \quad F_{ij}^* = \delta_{ij} - \dot{\varepsilon}_{ij}^* + \dot{\omega}_{ij}^* \\ F_{ij}^e &= \delta_{ij} - \varepsilon_{ij}^e + \omega_{ij}^e, \quad F_{ij}^{e1} = \delta_{ij} - \varepsilon_{ij}^{e1} + \omega_{ij}^{e1}\end{aligned}\quad \dots\dots\dots (16)$$

ここで弾性ひずみおよび弾性スピンは十分小さいものとして次の近似を行う。

$$[F_{ij}^{e1}]^{-1} = \delta_{ij} + \varepsilon_{ij}^{e1} - \omega_{ij}^{e1} \quad \dots\dots\dots (17)$$

式(16), (17)を式(13)に代入し、対称成分と反対称成分に分ける。高次の微小項を無視できると仮定すると次式が得られる。

$$\dot{\varepsilon}_{ij} = \dot{\varepsilon}_{ij}^* + \varepsilon_{ij}^e - \varepsilon_{ij}^{e1}, \quad \dot{\omega}_{ij} = \dot{\omega}_{ij}^* + \omega_{ij}^e - \omega_{ij}^{e1} \quad \dots\dots\dots (18)$$

ここで $\dot{\varepsilon}_{ij}^*$ は除荷状態におけるひずみ増分であるが、これを塑性ひずみ増分 $\dot{\varepsilon}_{ij}^p$ と解釈することができる。一方 $\dot{\omega}_{ij}^*$ には結晶のすべり変形による塑性スピン $\dot{\omega}_{ij}^p$ と、結晶格子の回転すなわち剛体回転 $\dot{\omega}_{ij}^r$ が含まれる。そこで式(18)を改めて次のように表す。

$$\dot{\varepsilon}_{ij} = \dot{\varepsilon}_{ij}^p + \varepsilon_{ij}^e - \varepsilon_{ij}^{e1}, \quad \dot{\omega}_{ij} = \dot{\omega}_{ij}^p + \dot{\omega}_{ij}^r + \omega_{ij}^e - \omega_{ij}^{e1} \quad \dots\dots\dots (19)$$

上式で ε_{ij}^e , ε_{ij}^{e1} はそれぞれ時刻 t , t^1 で定義されたテンソルであるが、その差 $\dot{\varepsilon}_{ij}^e = \varepsilon_{ij}^e - \varepsilon_{ij}^{e1}$ はもはや物理的意味をもたない。同様に σ_{ij} , σ_{ij}^1 も式(10)で定義されたテンソルであるが、その差 $\dot{\sigma}_{ij} = \sigma_{ij} - \sigma_{ij}^1$ はやはり明確な物理的意味をもたない。そこで本研究では弾性ひずみ増分、応力増分というものを考えないことにする。

次に弾性定数マトリックスを D_{ijkl} において Hooke の法則を次のように表す。

$$\sigma_{ij} = D_{ijkl} \varepsilon_{kl}, \quad \sigma_{ij}^1 = D_{ijkl}^1 \varepsilon_{kl}^1 \quad \dots\dots\dots (20)$$

時刻 t^1 から時刻 t の間に弾性的な性質が変化したとすれば D_{ijkl} は当然変化することになる。また材質的な変化がなくても、異方性弾性体が剛体回転した場合 D_{ijkl} が見掛け上変化することになる。式(19), (20)より

$$\sigma_{ij} = D_{ijkl} (\dot{\varepsilon}_{kl} - \dot{\varepsilon}_{kl}^1) + D_{ijkl} [D_{klmn}^1]^{-1} \sigma_{mn}^1 \quad \dots\dots (21)$$

本研究では等方弾性体を考える。この場合たとえ剛体回転があつたとしても D_{ijkl} は不変と考えてよい。このとき式(21)は簡単に次のように表すことができる。

$$\sigma_{ij} = D_{ijkl} (\dot{\varepsilon}_{kl} - \dot{\varepsilon}_{kl}^1) + \sigma_{ij}^1 \quad \dots\dots\dots (22)$$

さてブロック表面上で変位増分が規定されているとすると、現在の時刻における変形状態 C を基準とする仮想仕事の原理は次式で与えられる。

$$\delta\Phi = - \int_V (\sigma_{ij,j} \delta u_i) dV = \int_V (\sigma_{ij} \delta \dot{\epsilon}_{ij}) dV = 0 \quad \dots\dots\dots (23)$$

これを基に有限要素法の定式化を行う。

本研究では図1に示すように六面体要素を用いる。変位関数としてさまざま考えられるが、本研究では六面体要素を5個の三角すい要素(四面体要素)の組合せと考えることにした。ひずみおよびスピン増分を次のようにマトリックス表現する。

$$\dot{\epsilon} = B\dot{u}, \quad \dot{\omega} = C\dot{u} \quad \dots\dots\dots (24)$$

ただし

$$\dot{\epsilon} = [\dot{\epsilon}_x, \dot{\epsilon}_y, \dot{\epsilon}_z, \dot{\gamma}_{yz}, \dot{\gamma}_{zx}, \dot{\gamma}_{xy}]^T$$

$$\dot{\omega} = [\dot{\omega}_{yz}, \dot{\omega}_{zx}, \dot{\omega}_{xy}]^T$$

式(22)もマトリックス表現する。

$$\sigma = D(\dot{\epsilon} - \dot{\epsilon}^p) + \sigma^1 \quad \dots\dots\dots (25)$$

ただし

$$\sigma = [\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z, \tau_{yz}, \tau_{zx}, \tau_{xy}]^T$$

式(24)(25)を式(23)に代入して剛性方程式を得る。

$$K\dot{u} = P \quad \dots\dots\dots (26)$$

ただし

$$K = \int B^T D B dV, \quad P = \int B^T (D \dot{\epsilon}^p - \sigma^1) dV$$

塑性ひずみ増分が与えられれば上式より変位増分および応力を求めることができる。塑性ひずみ増分は初め零と仮定し、4章で述べる方法で逐次修正することになる。

マトリックス B は本来現在の形状を基に評価すべきである。したがって K も繰返し計算の過程でその都度修正する必要がある。くびれや座屈などの不安定問題を扱う場合には形状の変化が力の釣合いに敏感に効くので、このことは必須のことと思われる。

しかし通常の安定な問題にはそれほど厳密である必要はないと思われる。本研究では計算時間を節約するために各時間ステップ内では B や K を一定と仮定し、 $\dot{\epsilon}^p$ を決めるための繰返し計算の過程で P だけを修正した。しかし時間ステップが変わるときには節点座標を更新し、それに伴って B や K を修正した。

4. 塑性ひずみの決定

r 番めのすべり系におけるせん断ひずみ増分を $\dot{\gamma}^{(r)}$ 、すべり面の単位法線ベクトルを $a_i^{(r)}$ 、すべり方向の単位ベクトルを $b_i^{(r)}$ とすると、単結晶の塑性ひずみ増分は次式で与えられる。

$$\dot{\epsilon}_{ij}^p = \sum L_{ij}^{(r)} \dot{\gamma}^{(r)} \quad \text{または} \quad \dot{\epsilon}^p = \sum L^{(r)} \dot{\gamma}^{(r)}$$

$$\dot{\omega}_{ij}^p = \sum W_{ij}^{(r)} \dot{\gamma}^{(r)} \quad \text{または} \quad \dot{\omega}^p = \sum W^{(r)} \dot{\gamma}^{(r)} \quad \dots\dots\dots (27)$$

ただし

$$L_{ij}^{(r)} = (a_i^{(r)} b_j^{(r)} + a_j^{(r)} b_i^{(r)})/2$$

$$W_{ij}^{(r)} = (a_i^{(r)} b_j^{(r)} - a_j^{(r)} b_i^{(r)})/2$$

$$L^{(r)} = [L_{xx}^{(r)}, L_{yy}^{(r)}, L_{zz}^{(r)}, 2L_{yz}^{(r)}, 2L_{zx}^{(r)}, 2L_{xy}^{(r)}]^T$$

$$W^{(r)} = [W_{yz}^{(r)}, W_{zx}^{(r)}, W_{xy}^{(r)}]^T$$

各すべり系の分解せん断応力は次式で与えられる。

$$\tau^{(r)} = L_{ij}^{(r)} \sigma_{ij} \quad \text{または} \quad \tau^{(r)} = [L^{(r)}]^T \sigma \quad \dots\dots\dots (28)$$

各すべり系の降伏せん断応力を $k^{(r)}$ とおくと、降伏条件は次のように表される。

$$\zeta^{(r)} \tau^{(r)} = k^{(r)} \quad \text{ならば} \quad \zeta^{(r)} \dot{\gamma}^{(r)} > 0$$

$$\zeta^{(r)} \tau^{(r)} < k^{(r)} \quad \text{ならば} \quad \zeta^{(r)} \dot{\gamma}^{(r)} = 0 \quad \dots\dots\dots (29)$$

ただし

$$\zeta^{(r)} = \text{sign}(\tau^{(r)})$$

一般にどのすべり系が活動するかすなわち active なすべり系をいかに見い出すかという問題は、Simplex 法を適用するなど理論的に不可能ではないが、非常に煩雑で実用的ではない。

Harren⁽¹⁰⁾、Havlicek⁽¹¹⁾らは速度依存形の構成式を提案した。これは負荷応力が降伏応力以下でもわずかなすべりを許容するもので、活動すべり系選択の煩わしさが無い。また実際の金属はすべてひずみ速度依存形であることがその根拠となっている。一方これを用いるには材料定数としてひずみ速度指数を実験的に定める必要がある。しかし常温における変形を考える場合、ひずみ速度不依存形の構成式による解は一つの極限として必要であると思われる。本研究ではこのための実用的な解法として次の逐次積分法を提案する。

今式(26)において塑性ひずみ増分を零として解いた解は弾性解を意味する。この弾性解による分解せん断応力がそのすべり系の降伏応力を越えているならば多少のすべりが発生するはずである。すべりが起こると応力が緩和され、各すべり系のせん断応力が変化する。このような変形過程を数値計算のアルゴリズムとして実現するために、次の微分方程式を考える。

$$2\mu \frac{d(\zeta^{(r)} \dot{\gamma}^{(r)})}{d\rho} = \zeta^{(r)} \tau^{(r)} - k^{(r)} \quad \dots\dots\dots (30)$$

ここで ρ は単調増加のパラメータで、仮想的な時間と考えてもよい。上式を次の条件のもとで逐次積分をする。

- (1) 初期条件； $\dot{\gamma}^{(r)} = 0$ at $\rho = 0$,
- (2) 拘束条件；積分の途中で $\zeta^{(r)} \dot{\gamma}^{(r)} < 0$ となっ

表2 マトリックス R_{ij} の成分

	x	y	z
x'	$\cos\varphi\cos\theta\cos\psi - \sin\theta\sin\psi$	$-\cos\varphi\cos\theta\sin\psi - \sin\theta\cos\psi$	$\sin\varphi\cos\theta$
y'	$\cos\varphi\sin\theta\cos\psi + \cos\theta\sin\psi$	$-\cos\varphi\sin\theta\sin\psi + \cos\theta\cos\psi$	$\sin\varphi\sin\theta$
z'	$-\sin\varphi\cos\psi$	$\sin\varphi\sin\psi$	$\cos\varphi$

図2 オイラー角(φ, θ, ψ)

図4 従来の理論との比較

(a) $N=27$ (b) $N=125$

図3 応力-ひずみ曲線

たら、そのすべり系については $\dot{\gamma}^{(r)}=0$ として積分を続行する。

式(30)の逐次積分と式(26)を解くことを交互に繰返し、塑性ひずみ増分が一定に収束したとすると、各すべり系は次のいずれかの群に属する。

$$\xi^{(r)} \dot{\gamma}^{(r)} > 0 \quad \text{かつ} \quad \frac{d(\xi^{(r)} \dot{\gamma}^{(r)})}{d\rho} = 0$$

または

$$\xi^{(r)} \dot{\gamma}^{(r)} = 0 \quad \text{かつ} \quad \frac{d(\xi^{(r)} \dot{\gamma}^{(r)})}{d\rho} < 0 \quad \dots\dots\dots (31)$$

上式と式(29)を比較すると、前者は活動すべり系、後者は非活動すべり系に対応していることがわかる。したがって本手法によれば各すべり系が活動か非活動かを事前に判断する必要がなく、計算が収束した結果として自ずからいずれかの群に定まることになる。

実際に計算してみると、 $\Delta\rho$ を過大にとると積分が発散するが、 $\Delta\rho=0.5$ 程度で最も効率よく収束することがわかった。

5. 結 晶 粒 の 回 転

すべりが起こってもそのすべり系のすべり面法線ベクトル $\mathbf{a}$ およびすべり方向ベクトル $\mathbf{b}$ は不変である。したがって式(27)で定義される塑性スピン $\dot{\omega}_{ij}^p$ は結晶格子の回転に寄与しない。

次に弾性スピン $\dot{\omega}_{ij}^e$ は除荷過程における変位こう配テンソルの反対称成分であるが、個々の結晶粒についてこれを求めることはほとんど不可能である。本研究では弾性変形は十分小さいとして弾性スピンを無視することにする。このとき格子回転 $\dot{\omega}_{ij}$ は式(19)より次のように求めることができる。

$$\dot{\omega}_{ij} = \dot{\omega}_{ij} - \dot{\omega}_{ij}^p \quad \dots\dots\dots (32)$$

さらにすべり方向ベクトル $\mathbf{b}$ の変化は次式で与えられる。

$$\dot{\mathbf{b}}_i = \mathbf{b}_j \dot{\omega}_{ji}^e \quad \dots\dots\dots (33)$$

一方、巨視的座標系 x_i から微視的座標系 x'_i への変

換を次式で定義する。

$$x'_i = R_{ij} x_j \quad \dots\dots\dots (34)$$

R_{ij} の具体的な形は図2のオイラー角を用いて表2のように表される。

ベクトル b_i の座標変換も次のように表される。

$$b_i = R_{ji} b'_j \quad \dots\dots\dots (35)$$

格子回転により b_i および R_{ij} は変化するが、 b'_i は不変である。したがって

$$b_i + \dot{b}_i = (R_{ji} + \dot{R}_{ji}) b'_j \quad \dots\dots\dots (36)$$

式(33), (35), (36)より次式が得られる。

$$\dot{R}_{ij} = R_{ik} \dot{\omega}_{kj} \quad \dots\dots\dots (37)$$

この式を基にオイラー角の変化を計算することができる。

$$\begin{aligned} \dot{\phi} &= -(\dot{\omega}_{yz} \sin \phi + \dot{\omega}_{zx} \cos \phi) \\ \dot{\theta} &= (\dot{\omega}_{yz} \cos \phi - \dot{\omega}_{zx} \sin \phi) / \sin \phi \\ \dot{\psi} &= -(\dot{\omega}_{yz} \cos \phi - \dot{\omega}_{zx} \sin \phi) \cot \phi - \dot{\omega}_{xy} \\ &\dots\dots\dots (38) \end{aligned}$$

6. 計算例および結論

非硬化材 FCC 金属の単純引張応力ひずみ曲線を計算する。各すべり系の降伏せん断応力は一定で $2k/E = 10^{-3}$ (ここで E は Young 率), ポアソン比 $\nu = 1/3$, 時間ステップ $\dot{\epsilon} = 0.05\%$ とする。

図3に $N = 3 \times 3 \times 3 = 27$ および $N = 6 \times 6 \times 6 = 216$ の場合の計算結果を示す。結晶方位を乱数で与え, それぞれ10とおりの方位配列について計算した。 N が多いと方位配列に無関係にほぼ一定の応力ひずみ曲線に落ち着くことがわかる。

本研究の有限要素多結晶モデル FEPM による結果

と従来の他の理論による結果を比較したのが図4である。ひずみの小さなうちは KBW モデルより高く, ひずみが大きくなると Lin モデルに一致してくる。

本研究で提案した有限要素多結晶モデルの特徴をまとめると, 以下のようになる。

- (1) 単結晶構成式は単純に Schmid 則に基づくもので, ひずみ速度指数のような材料定数を考える必要がない。
- (2) 有限要素法プログラムのアルゴリズムが極めて簡単で, 弾性解析のプログラムから容易に拡張できる。
- (3) 任意の負荷経路に対して境界条件を設定できる。
- (4) 結晶格子の回転を取り入れることができるので, 異方性の追跡が可能である。異方性の追跡に関しては本研究第2報でその応用例を示す。

文 献

- (1) Taylor, G. I., *J. Inst. Met.*, **62** (1938), 307.
- (2) Kröner, E., *Acta Met.*, **9** (1961), 155.
- (3) Budiansky, B. and Wu, T. T., *Proc. 4th Congr. Appl. Mech.*, **2** (1962), 1175.
- (4) Hill, R., *J. Mech. Phys. Solids*, **13** (1965), 89.
- (5) Lin, T. H. and Ito, Y. M., *Int. J. Eng. Sci.*, **4** (1966), 545.
- (6) 宮本・石島・三好, 機誌, **75** (1972), 575.
- (7) 神馬・室田・一柳, 機誌, **75** (1972), 602.
- (8) 後藤, 機論, **43** (1977), 3723.
- (9) Havner, K. S. and Varadarajan, R., *Int. J. Solids Struct.*, **9** (1973), 379.
- (10) Harren, S. V. and Asaro, R. J., *J. Mech. Phys. Solids*, **37** (1989), 191.
- (11) Havlicek, F., Kratochivil, J., Tokuda, M. and Lev, V., *Int. J. Plasticity*, **6** (1990), 281.