結晶均質化有限要素法によるマルチスケール塑性変形解析*

仲 町 英 治^{*1}, 飯 星 真 治^{*2}, 陳 貽 平^{*3}
上 田 整^{*1}, 上 辻 靖 智^{*1}, 藤 田 宏 平^{*2}Multi-Scale Plastic Deformation Analyses
By Using A Crystallographic Homogenization Finite Element MethodEiji NAKAMACHI^{*4}, Shinji IIHOSHI, Yiping CHEN,
Sei UEDA, Yasutomo UETSUJI and Kouhei FUJITA^{*4} Department of Mechanical Engineering, Osaka Institute of Technology,
5-16-1 Omiya, Asahi-ku, Osaka-shi, Osaka, 535-8585 Japan

In this study, a multi-scale finite element modeling procedure, based on a crystallographic homogenization method, has been developed to estimate a macroscopic plastic properties, such like an anisotropic yield behavior and a plastic hardening evolution, caused by its microscopic plastic deformation. In this homogenization procedure, a particular scale value to specify the sizes of macro and microstructures has been introduced for physical understanding the compatibility between two scales. Especially, the micro crystal structure, which consists a unit cell to obey the periodicity of deformation, has consistency with a macrostructure deformation, and has been determined by employing the experimental observation results. ODF analyses to identify the texture of polycrystal structure were carried out through SEM and EBSD measurements. It is confirmed that this homogenized FE analysis code can predict a macroscopic anisotropic yield and inhomogeneous deformation in the microstructure.

Key Words: Crystalline Plasticity, Polycrystal, Texture, Homogenization Method, Multi-Scale Modeling, Finite Element Method

1. 緒 言

高強度、高成形性を有する多結晶金属材料の開発には、結晶の格子構造、粒形状・寸法、粒界構造および結晶方位という微視結晶形態因子と硬化発展という微視力学特性を考慮した巨視塑性特性評価手法の確立が要求される。これまで、微視構造を考慮した巨視特性評価手法が数多く提案されてきた。その代表的なものは、Eshelby の等価介在物理論^①、あるいは等価介在物理論を有限領域の unit cell の問題に拡張した Nemat-Nasser^②らの手法がある。しかしながら、これらは介在物形状を楕円形、多角形などに限定し、その含有率およびその配置パターンに応じた固有ひずみ場を基本解として採用するために、現実の多結晶体の結晶微視構造観察結果との整合性に疑問が残る手法と考える。

一方、Guedes および Kikuchi らは均質化法に基

づく有限要素解析手法を提案し、より精緻な微視構造のモデル化手法と微視・巨視マルチスケール解析の可能性を示した^③。最近、この均質化法の応用研究が活発になっている。高野らの複合材料の弾性解析^④、寺田らの時間非依存型の弾塑性解析^⑤、あるいは大野らの時間依存型の弾塑性解析^⑥がある。また、比嘉、富田^{⑦⑧}らは均質化有限要素法に結晶塑性構成式を導入することにより弾塑性異方特性解析手法の提案を行っている。これは異なる材料の含有率および結晶方位に依存した微視的な非均質性が巨視的な変形応答に及ぼす影響を調べたものである。しかし、塑性異方特性と強く関連する結晶方位分布、つまり集合組織を考慮した微視構造モデリングを採用した均質化法による巨視塑性異方特性・変形解析の例はほとんど見られない。

本研究では、非均質な微視結晶構造の特性を基に巨視塑性変形特性を記述する結晶均質化有限要素解析手法を開発する。微視結晶形態因子として結晶方位を採用し、単結晶体の巨視的降伏曲面の記述が可能であることを示した上で、多結晶集合体の巨視異方降伏特性のマルチスケール解析を行う。その際、微視結晶構造

* 原稿受付 2003 年 1 月 20 日。

^{*1} 正員、大阪工業大学 (〒535-8585 大阪市旭区大宮 5-16-1)。^{*2} 大阪工業大学大学院。^{*3} 大阪工業大学。

E-mail: nakamati@med.oit.ac.jp

の有限要素モデリングで採用した有限要素数, つまり結晶方位数が巨視的塑性降伏特性に及ぼす影響を検討し, 本手法の有効性を検討する.

2. 結晶均質化法に基づく有限要素定式化

2.1 巨視・微視構造の定義

図1に示すような周期構造を有する微視結晶構造を考え, 巨視構造の座標系 x , 微視構造の座標系 y の二つの座標系を採用する. また, 微視構造と巨視構造のスケール比 λ を次式で定義する.

$$\lambda = x_i / y_i \quad (1)$$

Fig.1 Micro and macro-structures

2.2 微視結晶構造の弾／結晶粘塑性構成式⁹⁾

図1のユニットセルの微視結晶構造に適用される構成式を示す. $m^{(\alpha)}$ と $s^{(\alpha)}$ を, それぞれすべり面の単位法線ベクトルとすべり方向の単位ベクトルとする. 添字 (α) はすべり系の識別番号を示す. すべり系の数は結晶構造に依存し, fcc 構造では 12 個, bcc 構造では 48 個となる. 上付添字 * および P により剛体回転を含む結晶の回転. 結晶のすべり面上におけるせん断変形を示すものとした場合, 変形勾配 $F = \partial x / \partial X$ は図2に示すような中間配置を持つ変形に分解できると考える.

Fig.2 Decomposition of deformation gradient

2つのベクトル $m^{(\alpha)}$ および $s^{(\alpha)}$ は変形勾配 $F \cdot$ によって変化するが変形後も両者は直交するのでつぎの関係を有する.

$$s_i^{(\alpha)} = F_{ij}^* \cdot s_j^{(\alpha)}, \quad m_i^{(\alpha)} = m_j^{(\alpha)} \cdot F_{ji}^{*-1} \quad (2)$$

速度勾配テンソル L , 変形速度テンソル D , スピンテンソル ω はつぎの関係を持つと仮定する.

$$L_{ij} = D_{ij} + \omega_{ij} \quad (3)$$

$$D_{ij} = D_{ij}^* + D_{ij}^P, \quad \omega_{ij} = \omega_{ij}^* + \omega_{ij}^P \quad (4)$$

また, 速度勾配テンソル L の塑性部分は各すべり系でのせん断ひずみ速度 $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$ の総和であり, 次式で与えられる.

$$L_{ij}^P = D_{ij}^P + \omega_{ij}^P = \sum_{(\alpha)} \dot{\gamma}^{(\alpha)} s_i^{(\alpha)} m_j^{(\alpha)} \quad (5)$$

ここで,

$$D_{ij}^P = \sum_{(\alpha)} \dot{\gamma}^{(\alpha)} P_{ij}^{(\alpha)}, \quad \omega_{ij}^P = \sum_{(\alpha)} \dot{\gamma}^{(\alpha)} W_{ij}^{(\alpha)} \quad (6)$$

$$P_{ij}^{(\alpha)} = (s_i^{(\alpha)} m_j^{(\alpha)} + m_i^{(\alpha)} s_j^{(\alpha)}) / 2 \quad (7)$$

$$W_{ij}^{(\alpha)} = (s_i^{(\alpha)} m_j^{(\alpha)} - m_i^{(\alpha)} s_j^{(\alpha)}) / 2 \quad (8)$$

非圧縮の仮定を採用し, 結晶で定義された異方弾性係数テンソル C_{ijkl}^e を用いた. 上付き添字 e は弾性成分を示す. 結晶格子と共回転する Cauchy 応力の客観性のある速度と変形速度の関係を求めるとつぎのようになる.

$$\dot{\sigma}_{ij}^* = C_{ijkl}^e D_{kl}^* \quad (9)$$

Cauchy 応力の結晶座標系における共回転速度から Cauchy 応力の Jaumann 速度への変換後の構成式は

$$\dot{\sigma}_{ij} = C_{ijkl}^e D_{kl} - \sum_{(\alpha)} R_{ij}^{(\alpha)} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \quad (10)$$

となる. ここで,

$$R_{ij}^{(\alpha)} = C_{ijkl}^e P_{kl}^{(\alpha)} + \beta_{ij}^{(\alpha)}, \quad \beta_{ij}^{(\alpha)} = W_{ik}^{(\alpha)} \sigma_{kj} - \sigma_{ik} W_{kj}^{(\alpha)} \quad (11)$$

である. また, せん断ひずみ速度の導出には基準せん断応力 $g^{(\alpha)}$, せん断応力 $t^{(\alpha)}$, および基準せん断ひずみ速度 $\dot{\gamma}_0^{(\alpha)}$ を採用した Pan-Rice の指数則を用いる.

$$\dot{\gamma}^{(\alpha)} = \dot{\gamma}_0^{(\alpha)} [t^{(\alpha)} / g^{(\alpha)}] \left[|t^{(\alpha)} / g^{(\alpha)}| \right]^{1/m - 1} \quad (12)$$

ここで, 基準せん断応力 $g^{(\alpha)}$ は, 全すべり量 γ に依存しており,

$$g^{(\alpha)} = g^{(\alpha)}(\gamma), \quad \gamma = \sum_{(\alpha)} |\gamma^{(\alpha)}| \quad (13)$$

と表され则认为. $g^{(\alpha)}$ の発展方程式としては, 以下の関係を仮定する.

$$\dot{\gamma}^{(\alpha)} = \sum_{\beta} h_{\alpha\beta} |\dot{\gamma}^{(\beta)}| \quad (14)$$

ここで、硬化係数 $h_{\alpha\beta}$ は γ の関数であり、つぎのように表される。

$$h_{\alpha\beta} = qh(\gamma) + (1-q)h(\gamma)\delta_{\alpha\beta} \quad (15)$$

ここで、 $\delta_{\alpha\beta}$ はクロネッカーのデルタであり、 $h(\gamma)$ は $h(\gamma) = h_0 \text{sech}^2 [h_0 \gamma / (\tau_s - \tau_0)]$ (16) である。 h_0 は初期硬化係数、 τ_0 および τ_s は臨界分解せん断応力、飽和分解せん断応力、 q は潜在硬化の大きさを示す。式(10)の構成式を仮想仕事の原理式へ代入する前に、比較的大きな時間ステップ Δt に対して安定な数値計算が可能とされる接線係数法を導入し構成式を書き換える。このときの各関係量を以下に示す。

$$\sum_{\beta} N_{\alpha\beta} \Delta \gamma^{(\beta)} = (\dot{\gamma}_i^{(\alpha)} + Q_{ij} D_{ij}) \Delta t \quad (17)$$

$$\dot{\gamma}_i^{(\alpha)} = \dot{\alpha}^{(\alpha)} \tau^{(\alpha)} / g^{(\alpha)} \left(\tau^{(\alpha)} / g^{(\alpha)} \right)^{1/(m-1)} \quad (18)$$

$$Q_{ij}^{(\alpha)} = (\partial \Delta t \dot{\gamma}_i^{(\alpha)} / m \tau^{(\alpha)}) R_{ij}^{(\alpha)} \quad (19)$$

$$N_{\alpha\beta} = \delta_{\alpha\beta} + (\partial \Delta t \dot{\gamma}_i / m) \cdot \left[(R_{ij}^{(\alpha)} P_{ij}^{(\beta)} / \tau^{(\beta)}) + \text{sig}(\tau^{(\beta)}) h_{\alpha\beta} / g^{(\alpha)} \right] \quad (20)$$

式(17), (18)を解くことにより、 $\Delta \gamma^{(\alpha)}$ を求めることができる。ここで $N_{\alpha\beta}$ の逆を $M_{\alpha\beta}$ で表すと次式を得る。

$$\Delta \gamma^{(\alpha)} = (\dot{f}^{(\alpha)} + F_{ij}^{(\alpha)} D_{ij}) \Delta t \quad (21)$$

ここで、

$$\dot{f}^{(\alpha)} = \sum_{\beta} M_{\alpha\beta} \dot{\gamma}_i^{(\beta)}, \quad F_{ij}^{(\alpha)} = \sum_{\beta} M_{\alpha\beta} Q_{ij}^{(\beta)} \quad (22)$$

であり、最終的に式(21)を式(10)に代入すると、つぎに示す構成式的具体形を得る。

$$\begin{aligned} \hat{\sigma}_{ij} &= C_{ijkl}^e D_{kl} - \sum_{\alpha} R_{ij}^{(\alpha)} (\dot{f}^{(\alpha)} + F_{kl}^{(\alpha)} D_{kl}) \\ &= C_{ijkl}^v D_{kl} - \sum_{\alpha} R_{ij}^{(\alpha)} \dot{f}^{(\alpha)} \end{aligned} \quad (23)$$

$$C_{ijkl}^v = C_{ijkl}^e - \sum_{\alpha} R_{ij}^{(\alpha)} F_{kl}^{(\alpha)} \quad (24)$$

2・3 巨視・微視構造の支配方程式⁴⁾

スケール比 λ を用いて式(1)に示す微視結晶構造と巨視構造とのスケール依存性を明示すると、以下の微視結晶構造を考慮した全体構造の構成式を得る。上付き添字 λ はスケール依存を示す。

$$\hat{\sigma}_{ij}^{\lambda} = C_{ijkl}^{\lambda} D_{kl}^{\lambda} - \sum_{\alpha} R_{ij}^{(\alpha)\lambda} \dot{f}^{(\alpha)\lambda} \quad (25)$$

$$C_{ijkl}^{\lambda} = C_{ijkl}^e - \sum_{\alpha} R_{ij}^{(\alpha)\lambda} F_{kl}^{(\alpha)\lambda} \quad (26)$$

図1に示すように現変形状態の物体の体積を Ω 、表面 Γ 上に表面力 t が作用しているとし、物体力を無視すると仮想仕事の原理式は次式で与えられる。

$$\int_{\Omega} \left(\hat{\sigma}_{ij}^{\lambda} - \sigma_{ij}^{\lambda} D_{kl}^{\lambda} - \sigma_{ik}^{\lambda} D_{kj}^{\lambda} + \sigma_{ik}^{\lambda} \frac{\partial v_k^{\lambda}}{\partial x_j} \right) \frac{\partial \delta v_i^{\lambda}}{\partial x_j} d\Omega = \int_{\Gamma} t_i \delta v_i^{\lambda} d\Gamma \quad (27)$$

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} C_{ijkl}^{\lambda} \frac{\partial v_k^{\lambda}}{\partial x_i} \frac{\partial \delta v_l^{\lambda}}{\partial x_j} d\Omega \\ = \int_{\Gamma} t_i \delta v_i^{\lambda}(x) d\Gamma + \int_{\Omega} \sum_{\alpha} R_{ij}^{(\alpha)\lambda} \dot{f}^{(\alpha)\lambda} \frac{\partial \delta v_i^{\lambda}}{\partial x_j} d\Omega \end{aligned} \quad (28)$$

$$C_{ijkl}^{\lambda} = C_{ijkl}^{1/2} - H_{ijkl}^{\lambda} \quad (29)$$

$$H_{ijkl}^{\lambda} = \frac{1}{2} (\sigma_{ik}^{\lambda} \delta_{jl} + \sigma_{il}^{\lambda} \delta_{jk} + \sigma_{jk}^{\lambda} \delta_{il} - \sigma_{ji}^{\lambda} \delta_{ik}) \quad (30)$$

周期性をもつ微視構造に依存する変位速度を次の漸近展開式で表す。

$$v_i^{\lambda} = v_i^0(x) + \eta v_i^1(x, y) + \dots \quad (31)$$

$v_i^0 \equiv v_i^0(x)$ は巨視的構造に対する変位速度である。

$v_i^1 \equiv v_i^1(x, y)$ は微視構造に対する変位速度であり次式のように変数分離できると仮定する。

$$v_i^1 = -\chi_i^{mn} \frac{\partial v_m^0}{\partial x_n} + \phi_i \quad (32)$$

$$\frac{\partial v_i^1}{\partial y_j} = -\frac{\partial \chi_i^{mn}}{\partial y_j} \frac{\partial v_m^0}{\partial x_n} + \frac{\partial \phi_i}{\partial y_j} \quad (33)$$

ここで、 $\chi_i^{mn} \equiv \chi_i^{mn}(x, y)$ 、 $\phi_i \equiv \phi_i(x, y)$ は特性変位速度を表す。式(31)の関係をを用いて式(28)を整理し、平均化定理を適用すると微視構造を考慮したつぎの全体構造の平衡方程式を得る。 Y は微視構造の体積を示す。

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \frac{1}{|Y|} \int_Y C_{ijkl}' \left(\frac{\partial v_k^0}{\partial x_i} + \frac{\partial v_l^1}{\partial y_j} \right) \left(\frac{\partial \delta v_i^0}{\partial x_j} + \frac{\partial \delta v_l^1}{\partial y_j} \right) dY d\Omega \\ = \int_{\Omega} \frac{1}{|Y|} \int_Y \sum_{\alpha} R_{ij}^{(\alpha)} \dot{f}^{(\alpha)} \left(\frac{\partial \delta v_i^0}{\partial x_j} + \frac{\partial \delta v_l^1}{\partial y_j} \right) dY d\Omega \end{aligned} \quad (34)$$

巨視構造、微視結晶構造における仮想変位速度が、それぞれ独立して作用すると考えると、微視結晶構造に対する平衡方程式は、

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \frac{1}{|Y|} \int_Y C_{ijkl}' \left(\frac{\partial v_k^0}{\partial x_i} + \frac{\partial v_l^1}{\partial y_j} \right) \frac{\partial \delta v_i^1}{\partial y_j} dY d\Omega \\ = \int_{\Omega} \frac{1}{|Y|} \int_Y \sum_{\alpha} R_{ij}^{(\alpha)} \dot{f}^{(\alpha)} \frac{\partial \delta v_l^1}{\partial x_j} dY d\Omega \end{aligned} \quad (35)$$

であり、微視結晶構造の変位速度を変数分離した式(33)の関係より微視結晶構造の平衡方程式は以下のよう記述できる。

$$\int_{\Omega} \frac{1}{|Y|} \int_Y C'_{ijkl} \left(\frac{\partial v_k^0}{\partial x_i} + \frac{\partial \chi_k^{mn}}{\partial y_i} \frac{\partial v_m^0}{\partial x_n} + \frac{\partial \varphi_k}{\partial y_i} \right) \frac{\partial \delta v_i^1}{\partial y_j} dY d\Omega$$

$$= \int_{\Omega} \frac{1}{|Y|} \int_Y \sum_{(\alpha)} R_{ij}^{(\alpha)} \dot{f}^{(\alpha)} \frac{\partial \delta v_i^1}{\partial y_j} dY d\Omega \quad (36)$$

$$\int_{\Omega} \frac{1}{|Y|} \int_Y \left(C'_{ijmn} - C'_{ijkl} \frac{\partial \chi_k^{mn}}{\partial y_i} \right) \frac{\partial v_m^0}{\partial x_n} \frac{\partial \delta v_i^1}{\partial y_j} dY d\Omega$$

$$= \int_{\Omega} \frac{1}{|Y|} \int_Y \left(\sum_{(\alpha)} R_{ij}^{(\alpha)} \dot{f}^{(\alpha)} - C'_{ijkl} \frac{\partial \varphi_k}{\partial y_i} \right) \frac{\partial \delta v_i^1}{\partial y_j} dY d\Omega \quad (37)$$

したがって、微視結晶構造の解くべき方程式は

$$\int_Y C'_{ijmn} \frac{\partial \delta v_i^1}{\partial y_j} dY = \int_Y C'_{ijkl} \frac{\partial \chi_k^{mn}}{\partial y_i} \frac{\partial \delta v_i^1}{\partial y_j} dY \quad (38)$$

および、

$$\int_Y \sum_{(\alpha)} R_{ij}^{(\alpha)} \dot{f}^{(\alpha)} \frac{\partial \delta v_i^1}{\partial y_j} dY = \int_Y C'_{ijkl} \frac{\partial \varphi_k}{\partial y_i} \frac{\partial \delta v_i^1}{\partial y_j} dY \quad (39)$$

となる。得られた特性変位速度より、均質化された特性値は次式で与えられる。

$$C_{ijmn}^H = \frac{1}{|Y|} \int_Y C'_{ijmn} - C'_{ijkl} \frac{\partial \chi_k^{mn}}{\partial y_i} dY \quad (40)$$

$$R_{ij}^H = \frac{1}{|Y|} \int_Y \sum_{(\alpha)} R_{ij}^{(\alpha)} \dot{f}^{(\alpha)} - C'_{ijkl} \frac{\partial \varphi_k}{\partial y_i} dY \quad (41)$$

ここで、上付添字 H は均質化された値であることを意味する。同様に、巨視構造に関する平衡方程式を導出すると、

$$\int_{\Omega} \frac{1}{|Y|} \int_Y C'_{ijkl} \left(\frac{\partial v_k^0}{\partial x_i} + \frac{\partial v_k^1}{\partial y_i} \right) \frac{\partial \delta v_i^0}{\partial y_j} dY d\Omega$$

$$= \int_{\Omega} i_i \delta v_i^0 d\Gamma + \int_{\Omega} \frac{1}{|Y|} \int_Y \sum_{(\alpha)} R_{ij}^{(\alpha)} \dot{f}^{(\alpha)} \frac{\partial \delta v_i^0}{\partial y_j} dY d\Omega \quad (42)$$

となり、式(33)を用いると以下のように記述できる。

$$\int_{\Omega} \frac{1}{|Y|} \int_Y C'_{ijkl} \left(\frac{\partial v_k^0}{\partial x_i} + \frac{\partial \chi_k^{mn}}{\partial y_i} \frac{\partial v_m^0}{\partial x_n} + \frac{\partial \varphi_k}{\partial y_i} \right) \frac{\partial \delta v_i^0}{\partial y_j} dY d\Omega$$

$$= \int_{\Omega} i_i \delta v_i^0 d\Gamma + \int_{\Omega} \frac{1}{|Y|} \int_Y \sum_{(\alpha)} R_{ij}^{(\alpha)} \dot{f}^{(\alpha)} \frac{\partial \delta v_i^0}{\partial y_j} dY d\Omega \quad (43)$$

$$\int_{\Omega} \frac{1}{|Y|} \int_Y \left(C'_{ijmn} - C'_{ijkl} \frac{\partial \chi_k^{mn}}{\partial y_i} \right) \frac{\partial v_m^0}{\partial x_n} \frac{\partial \delta v_i^0}{\partial y_j} dY d\Omega$$

$$= \int_{\Omega} \frac{1}{|Y|} \int_Y \left(\sum_{(\alpha)} R_{ij}^{(\alpha)} \dot{f}^{(\alpha)} - C'_{ijkl} \frac{\partial \varphi_k}{\partial y_i} \right) \frac{\partial \delta v_i^0}{\partial y_j} dY d\Omega \quad (44)$$

ここで均質化された特性値を用いて式(44)を改めると

$$\int_{\Omega} C_{ijmn}^H \frac{\partial v_m^0}{\partial x_n} \frac{\partial \delta v_i^0}{\partial y_j} d\Omega = \int_{\Omega} i_i \delta v_i^0 d\Gamma + \int_{\Omega} R_{ij}^H \frac{\partial \delta v_i^0}{\partial y_j} d\Omega \quad (45)$$

と記述できる。さらに、式(32)を式(31)に代入することにより全体構造の変位はつぎようになる。

$$v_i^{\eta} = v_i^0 + \eta \left(-\chi_i^{mn} \frac{\partial v_m^0}{\partial x_n} + \phi_i \right) \quad (46)$$

式(46)に対して、巨視構造のある一点に微視構造が無限に周期的に存在するという仮定に基づいてスケール比を零にする極限化を導入する。したがって、巨視構造に対して微視構造が十分小さく上記仮定が成り立つ場合、巨視的な変位速度はつぎに示す式により評価できると考える。

$$v_{macro}^{\eta}(x) = v_i^0 \quad (47)$$

また、微視的な変位速度は、巨視構造の様な変位速度に基づいてつぎのように評価できるとする。

$$v_i^{micro} = \frac{\partial v_i^0}{\partial x_j} y_j - \chi_i^{mn} \frac{\partial v_m^0}{\partial x_n} + \phi_i \quad (48)$$

2・4 有限要素定式化⁽¹⁰⁾

2.3 節で得られた結晶均質化法定式化に基づく基礎関係式を有限要素離散化し、連立方程式を解くことにより巨視・微視運動学記述量を求めることができる。

本研究では、ソリッド要素(8 節点アイソパラメトリック要素)を用いて離散化を行った。積分方法として偏差ひずみに関する積分項、体積ひずみに関する積分項とに分けて積分を行う選択低減積分法を採用した。

これにより塑性変形の非圧縮性に伴う変形拘束ならびにアワーグラスモードを排除した精度の良い計算を行うことができる。この手法による式(38)~(41)および式(45)の離散化式を導出する。以下 (p) は巨視構造の第 p 番目の積分点に関する量を示し、 $[p, q]$ は巨視構造の第 p 番目における微視構造の第 q 番目の要素に関する量であることを示す。また、下付添字 α, β は節点番号を示すものとする。自然座標 ξ での巨視構造に関する形状関数を $N_{\alpha}^{0(p)}(\xi) \equiv N_{\alpha}^{0(p)}$ 、自然座標 ζ での微視構造に関する形状関数を $N_{\alpha}^{1[p, q]}(\zeta) \equiv N_{\alpha}^{1[p, q]}$ とし、つぎのように表すことにする。

$$N_{\alpha}^{0(p)} = \frac{1}{8} (1 + \xi_1 \xi_{1\alpha}^{(p)}) (1 + \xi_2 \xi_{2\alpha}^{(p)}) (1 + \xi_3 \xi_{3\alpha}^{(p)}) \quad (49)$$

$$N_{\alpha}^{1[p, q]} = \frac{1}{8} (1 + \zeta_1 \zeta_{1\alpha}^{[p, q]}) (1 + \zeta_2 \zeta_{2\alpha}^{[p, q]}) (1 + \zeta_3 \zeta_{3\alpha}^{[p, q]}) \quad (50)$$

これらの形状関数を用いて $v_i^{0(p)}$ 、 $v_i^{1[p, q]}$ 、 $\chi_i^{mn[p, q]}$ および ϕ_i の速度勾配を表すと、

$$\frac{\partial v_i^{0(p)}}{\partial x_j} = \sum_{\alpha=1}^8 \frac{\partial N_{\alpha}^{0(p)}}{\partial x_j} v_i^{0(p)} = \sum_{\alpha=1}^8 N_{\alpha, j}^{0(p)} v_i^{0(p)} \quad (51)$$

$$\frac{\partial v_i^{[p,q]}}{\partial y_j} = \sum_{a=1}^8 \frac{\partial N_a^{[p,q]}}{\partial y_j} v_i^{[p,q]} = \sum_{a=1}^8 N_{a,j}^{[p,q]} v_i^{[p,q]} \quad (52)$$

$$\frac{\partial \chi_i^{mn[p,q]}}{\partial y_j} = \sum_{a=1}^8 \frac{\partial N_a^{[p,q]}}{\partial y_j} \chi_i^{mn[p,q]} = \sum_{a=1}^8 N_{a,j}^{[p,q]} \chi_i^{mn[p,q]} \quad (53)$$

$$\frac{\partial \phi_i^{[p,q]}}{\partial y_j} = \sum_{a=1}^8 \frac{\partial N_a^{[p,q]}}{\partial y_j} \phi_i^{[p,q]} = \sum_{a=1}^8 N_{a,j}^{[p,q]} \phi_i^{[p,q]} \quad (54)$$

となる。ここで、速度勾配を体積部分および偏差部分とに分け、以下の定義式を導入する。上付き添字 c は要素中心で計算された値を示す。

$$a_r^{0c(p)} = \frac{1}{3} (N_{\alpha,r}^{0c(p)} - N_{\alpha,r}^{0(p)}) \quad (55)$$

$$a_r^{1c[p,q]} = \frac{1}{3} (N_{\alpha,r}^{1c[p,q]} - N_{\alpha,r}^{1[p,q]}) \quad (56)$$

式(36)、(37)の微視構造に関する平衡方程式を離散化するとつぎのようになる。

$$\begin{aligned} & \int_{\Gamma[p,q]} \left[\sum_{a=1}^8 (N_{\alpha,j}^{[p,q]} \delta v_{i\alpha}^{[p,q]} + a_r^{1c[p,q]} \delta v_{r\alpha}^{[p,q]} \delta_{ij}) \right] \cdot \\ & C_{ijkl}^{[p,q]} \left[\sum_{\beta=1}^8 (N_{i,\beta}^{[p,q]} \chi_{k\beta}^{mn[p,q]} + a_r^{1\beta[p,q]} \chi_{r\beta}^{mn[p,q]} \delta_{ik}) \right] dY^{[p,q]} \\ & = \int_{\Gamma[p,q]} C_{ijmn}^{[p,q]} \left[\sum_{a=1}^8 (N_{\alpha,j}^{[p,q]} \delta v_{i\alpha}^{[p,q]} + a_r^{1c[p,q]} \delta v_{r\alpha}^{[p,q]} \delta_{ij}) \right] dY^{[p,q]} \quad (57) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \int_{\Gamma[p,q]} \left[\sum_{a=1}^8 (N_{\alpha,j}^{[p,q]} \delta v_{i\alpha}^{[p,q]} + a_r^{1c[p,q]} \delta v_{r\alpha}^{[p,q]} \delta_{ij}) \right] \cdot \\ & C_{ijkl}^{[p,q]} \left[\sum_{\beta=1}^8 (N_{i,\beta}^{[p,q]} \phi_{k\beta}^{[p,q]} + a_r^{1\beta[p,q]} \phi_{r\beta}^{[p,q]} \delta_{ik}) \right] dY^{[p,q]} \\ & = \int_{\Gamma[p,q]} R_{ij}^{[p,q]} \left[\sum_{a=1}^8 (N_{\alpha,j}^{[p,q]} \delta v_{i\alpha}^{[p,q]} + a_r^{1c[p,q]} \delta v_{r\alpha}^{[p,q]} \delta_{ij}) \right] dY^{[p,q]} \quad (58) \end{aligned}$$

$$R_{ij}^{[p,q]} = \sum_{(n)} R_{ij}^{(n)} \dot{\epsilon}^{(n)} \quad (59)$$

つぎに、等価特性値を離散化表示すると次式となる。

$$\begin{aligned} C_{ijmn}^H(p) &= \sum_S \frac{1}{|Y^{[p,q]}|} \int_{\Gamma[p,q]} C_{ijmn}^{[p,q]} - \\ & C_{ijkl}^{[p,q]} \left[\sum_{\beta=1}^8 (N_{i,\beta}^{[p,q]} \chi_{k\beta}^{mn[p,q]} + a_r^{1\beta[p,q]} \chi_{r\beta}^{mn[p,q]} \delta_{ik}) \right] dY^{[p,q]} \quad (60) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} R_{ij}^H(p) &= \sum_S \frac{1}{|Y^{[p,q]}|} \int_{\Gamma[p,q]} R_{ij}^{[p,q]} - \\ & C_{ijkl}^{[p,q]} \left[\sum_{\beta=1}^8 (N_{i,\beta}^{[p,q]} \phi_{k\beta}^{[p,q]} + a_r^{1\beta[p,q]} \phi_{r\beta}^{[p,q]} \delta_{ik}) \right] dY^{[p,q]} \quad (61) \end{aligned}$$

巨視構造に関する平衡方程式の離散化も微視構造と同様に行うことでつぎの関係式を得る。

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega(p)} \left[\sum_{a=1}^8 (N_{\alpha,j}^{0(p)} \delta v_{i\alpha}^{0(p)} + a_r^{0c(p)} \delta v_{r\alpha}^{0(p)} \delta_{ij}) \right] \cdot \\ & C_{ijkl}^H(p) \left[\sum_{\beta=1}^8 (N_{i,\beta}^{0(p)} v_{k\beta}^{0(p)} + a_r^{0\beta(p)} v_{r\beta}^{0(p)} \delta_{ik}) \right] d\Omega^{(p)} \\ & = \int_{\Omega(p)} R_{ij}^H(p) \left[\sum_{a=1}^8 (N_{\alpha,j}^{0(p)} \delta v_{i\alpha}^{0(p)} + a_r^{0c(p)} \delta v_{r\alpha}^{0(p)} \delta_{ij}) \right] d\Omega^{(p)} \quad (62) \end{aligned}$$

3. 結晶均質化有限要素解析結果

3・1 有限要素解析による単結晶の巨視的降伏解析

結晶均質化有限要素解析法の適用例を示す。微視結晶構造において、純アルミニウム単結晶を想定し、初期結晶方位として Cube および Goss 方位を持つ場合の降伏曲面を求めた。結晶方位は微視結晶有限要素モデルの一積分点につき一結晶粒を与え、すべり系は fcc 構造の 12 個を考慮した。有限要素分割は立方体形状のユニットセルにおいて規則メッシュを採用し 8 要素モデルを採用した。微視有限要素のいずれか一つのすべり系のせん断応力が臨界分解せん断応力を超えたとする。この状態が巨視有限要素にある全ての積分点で発生した時点以降を降伏とみなし、巨視的降伏曲面を求めた。解析結果を図 3 に示す。巨視的降伏曲面は、単結晶であることから特性値の揺らぎがなく、Schmid 因子を用いて降伏を決定した理論的な降伏曲面と一致した。

(a) Cube orientation (001)[100]

(b) Goss orientation (110)[001]

Fig.3 Macroscopic yield surface of FCC single crystal

3・2 微視結晶粒数が巨視的特性評価に及ぼす影響

微視結晶構造で採用する結晶方位数と巨視的塑性特性との関係を検討するため、要素分割数の異なる微視結晶構造モデルを用いて純鉄多結晶の巨視的降伏曲面を検討した。微視結晶構造の有限要素モデルは、3.1 節の単結晶材料の場合と同様に立方体形状のユニットセルにおいて規則メッシュにて 8, 27, 64, 125,

216 要素 (64, 216, 512, 1000, 1728 積分点・結晶方位数) とし, 無限個存在するランダム方位の母集団から方位を選択し微視結晶有限要素の一積分点に割当てた。

図 4 に, 本結晶均質化有限要素解析によって得られた 8 および 216 要素の場合の巨視的降伏曲面を von Mises の等方降伏曲面と比較して示す。また, 図 4 の破線で示す方向で, 原点からの距離で求めた降伏応力値を, 27, 64, 125 要素を含めて図 5 に比較して示す。

解析結果より, 結晶方位数が 64 個の巨視的降伏曲面は等 2 軸応力方向で鋭く尖っている。一方, 結晶方位数 1728 個においてはより緩やかな曲線なり, von Mises の等方性降伏曲面の形状に近くなっていることがわかる。しかし, 応力値が低く見積もられた。その原因は採用した降伏判定が厳しく, 微視結晶構造において降伏していない要素も併せて平均化した応力を巨視的降伏応力として採用しているためと考える。図 5 より結晶方位数の増加に伴い降伏応力値はある値に収束することが確認され, 等方性の塑性特性を得るためには最低 1000 個の結晶方位数が必要であることが分かった。

Fig.4 Macroscopic yield surfaces of 64 and 1728 orientations

Fig.5 Specified value

3・3 集合組織が巨視的特性に及ぼす影響

本結晶均質化有限要素法を用い, 微視結晶構造の集合組織と巨視的異方降伏特性との関係を検討した。塑性特性に影響する結晶形態因子としては, 粒径, 粒界および析出物も考えられるが, ここでは結晶方位分布と巨視的異方特性を主に検討した。3.2 節では一様に分布する結晶方位を仮定し, ランダムな抽出, つまりランダムな方位選定を行い微視有限要素の積分点に割当てた。しかし集合組織を有する結晶方位分布には偏りがあることから, より少ない結晶方位の抽出で巨視異方特性が推定できるものとする。そこで, 等方性降伏曲面の場合と同様に結晶方位数と巨視降伏応力値の関係を求めた。解析対象は鉄系材料のフェライトおよびマルテンサイト組織を持つ単相の多結晶材料とした。すべり系は bcc 構造の 48 個を考慮した。両者の集合組織を SEM・EBSD (走査電子顕微鏡・結晶方位分布計測装置) によって観測した。フェライトおよびマルテンサイトの{100}極点図を図 6 に示す。フェライトの場合は γ ファイバーへの集積が顕著であることが分かる。一方, マルテンサイトの場合は α ファイバーへの集積が見られるがフェライトに比べるとその偏り度が低い。マルテンサイトに関しては, α ファイバー以外の方位でその出現頻度が α ファイバーの 5% 以下と極端に低いものを除外することとした。つぎに, 実験で得られた応力-ひずみ線図を用いて, 微視結晶有限要素の弾/結晶粘塑性特性値である臨界分解せん断応力 τ_0 , 飽和分解せん断応力 τ_s , 初期硬化係数 h_0 を同定した。同定結果を表 1 に示す。

Fig.6 {100} pole figure of martensite and ferrite

Table.1 Material properties for crystal model

	Ferrite	Martensite
C_{11} [GPa]	237.0	
C_{12} [GPa]	141.0	
C_{44} [GPa]	116.0	
τ_0 [MPa]	75.0	350.0
h_0 [MPa]	125.0	1680.0
τ_s [MPa]	133.0	455.0

(a) Ferrite

(b) Martensite

Fig.7 Homogenized elastic constants

Fig.8 Macroscopic yield surface

つぎに、解析によって得られたフェライトとマルテンサイトの等価特性値 C_{11}^H 、 C_{22}^H および C_{33}^H を図 7 に示す。フェライトにおいては結晶方位数を 64 から 1728 個へと増加させてもその変化は小さく各成分でほぼ同値を得た。これは、先に述べたように方位に偏りを持った集合組織の場合、比較的少ない結晶方位数で巨視的な材料特性を記述できることを裏付ける結果であると言える。また、マルテンサイトにおいては優先方位以外の結晶方位を多く含んでいるため結晶方位数 64 から 216 個の間では数値に開きはあるが、結晶方位数

216 個以上においてはフェライトと同様に各成分共に大きな変化はなく安定した数値を示すことが分かった。

図 8 に、1000 個の結晶方位数を採用した場合の降伏曲面を比較して示す。降伏曲面と各軸との交切角は、マルテンサイトでは直角であり引張軸方向と直交する方向へのひずみが生じにくいのに対し、フェライトでは鋭い交切角を有しマルテンサイトとは反対の特性を有することが初期降伏曲面から予測される。

4. 結 言

結晶均質化法に基づく弾／結晶粘塑性有限要素定式化、およびその適用例として、単結晶および多結晶の巨視的弾塑性特性および降伏曲面の推定を行い、本解析手法の有効性を示した。微視結晶構造における結晶方位分布、特にここでは、結晶方位分布に偏りを持つ集合組織を考慮することで、巨視的な異方特性を記述できることが分かった。ランダムな方位分布が巨視的等方性を表現するために必要な結晶方位数が 1000、つまり、微視有限要素数が 125 以上であることが分かった。一方、集合組織を持つ多結晶体では方位数 216、有限要素数 27 程度で十分であることを確認した。

本研究を遂行するにあたり、大阪大学大学院工学研究科知能・機能創成工学専攻・比嘉吉一先生より有益な助言を得たことを記して謝意を表す。

文献

- (1) Eshelby, J.D., Proc. R. Soc. Lond., **A241** (1957), 367-396.
- (2) Nemat-Nasser, S., Iwakuma, T. and Hejazi, M., Mech. Matr., **1**(1982), 239-267.
- (3) Guedes, J. M., Kikuchi, N., Comp. Mech. Appl. Mech. Engng., **83**(1990), 143-198.
- (4) Takano, N., Onishi, Y., Nishiyabu, K., Int. J. Solids Struct., **37**(2000) 6517-6535.
- (5) 寺田賢二郎・弓削康平・菊地昇, 機論, **61**-590, A(1995), 2199-2205.
- (6) 大野信忠・吳旭, 機論, **63**-613, A(1997), 1971-1978.
- (7) 比嘉吉一・吉國宏之・富田佳宏, 機論, **67**-656, A(2001), 638-643.
- (8) 比嘉吉一・富田佳宏, 機論, **66**-648, A(2000), 1441-1446.
- (9) 富田佳宏, 値弾塑性力学, (1998), 185-189, 養賢堂
- (10) 日本塑性加工学会編, 非線形有限要素法, (1994), 85-88, コロナ社