

結晶塑性構成モデルに対する陰解法アルゴリズムの再検討

東北大学大学院 学生員 渡邊育夢 東北大学大学院 正員 寺田賢二郎

1. はじめに

多結晶体中の結晶粒の構成関係を与えるモデルとして用いられている¹⁾ 結晶塑性構成モデルは結晶構造に依存した特定の方向成分に分解された複数の降伏関数からなる独特の数値構造を持ち、その数値計算法に関して様々な研究がなされてきた²⁾。これらの既往の研究では塑性変形の発展則に含まれる $\exp[(\text{行列})]$ のような指数関数表現を Taylor 展開の第一項までで近似することが一般的であるが、この近似により、正しい解を得るためには変形増分が制限される可能性がある。

そこで本研究では、行列の指数関数の近似を行わずに定式化を行い、結晶塑性構成モデルの陰解法アルゴリズムについて再検討する。また、提案手法の性能を検証するため、単結晶の数値計算を行い、計算精度や収束性に関して既往の手法と比較する。

2. 結晶塑性構成モデル

変形勾配の弾塑性乗算分解 $\mathbf{F} = \mathbf{F}^e \mathbf{F}^p$ では、基準配置、現配置に加えて $\mathbf{F}^{e-1}$ により弾性除荷された中間配置と呼ばれる応力解放状態が定義される。中間配置では、現配置で定義される左 Cauchy-Green 変形テンソル $\mathbf{b}$ や Kirchhoff 応力 $\boldsymbol{\tau}$ に対して、弾性右 Cauchy-Green 変形テンソル $\mathbf{C}^e := \mathbf{F}^{eT} \mathbf{F}^e$ 、第2Piola-Kirchhoff 応力 $\hat{\mathbf{S}} := \mathbf{F}^{e-1} \boldsymbol{\tau} \mathbf{F}^{e-T}$ が定義される。

結晶塑性構成モデルでは結晶構造に応じて規定される n_{slip} 個のすべり系ごとに降伏関数を与えられる。

$$\phi^{(\alpha)} := \|\tau^{(\alpha)}\| - g^{(\alpha)} = \|(\mathbf{C}^e \hat{\mathbf{S}}) : \mathbf{M}^{(\alpha)}\| - g^{(\alpha)} \quad (1)$$

ここで、 $g_Y^{(\alpha)}$ はすべりに対する抵抗値であり、 $\tau^{(\alpha)}$ はすべり方向の分解応力、 $\mathbf{M}^{(\alpha)}$ は Schmid テンソルである。硬化則として塑性履歴パラメータ $\xi^{(\alpha)}$ に対して、2種類の硬化定数 $h_{\alpha\alpha}$ (自己硬化)、 $h_{\alpha\beta} (\alpha \neq \beta)$ (潜在硬化) により線形硬化するモデルを採用する。

3. 結晶塑性構成モデルの計算スキーム

3.1 一般的な塑性変形の積分方法

物質点 $\mathbf{X}$ に関して、時刻 t_n での変形状態 $\mathbf{F}_{t_n}$ 、 $\mathbf{F}_{t_n}^e$ および塑性履歴パラメータ $\xi_{t_n}^{(1)}, \dots, \xi_{t_n}^{(n_{\text{slip}})}$ を既知として、任意の時刻 $\tau = t_n + \theta \Delta t$ ($\theta \in [0, 1]$) での運動が与えられるとする。このとき、時刻 τ における変形勾配の塑性部の微分は $\dot{\mathbf{F}}^p = \mathbf{L}^p \mathbf{F}^p$ で与えられ、この一般解を用いると時刻 $\tau \in [t_n, t_{n+1}]$ における変形勾配の塑性部は次のように表記可能である。

$$\mathbf{F}_{\tau}^p = \exp[\theta \Delta t \mathbf{L}^p] \mathbf{F}_{t_n}^p, \quad \tau \in [t_n, t_{n+1}] \quad (2)$$

結晶塑性構成モデルにおいて、中間配置における速度勾配の塑性部は

$$\mathbf{L}_{\tau}^p = \sum_{\alpha=1}^{n_{\text{slip}}} \gamma^{(\alpha)} \text{sign}[\tau_{\tau}^{(\alpha)}] \mathbf{M}^{(\alpha)} \quad (3)$$

となり、弾性変形勾配 $\mathbf{F}_{\tau}^e$ は

$$\mathbf{F}_{\tau}^e = \mathbf{F}_{\tau} \mathbf{F}_{t_n}^{p-1} \mathbf{Q} \quad (4)$$

と表される。ここで、

$$\mathbf{Q} := \exp[-\theta \Delta t \mathbf{L}^p] \quad (5)$$

と定義した。また、行列の指数関数 $\mathbf{Q}$ は微分関係

$$\frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial \Delta \gamma^{(\alpha)}} = -\text{sign}[\tau_{\tau}^{(\alpha)}] \mathbf{Q} \mathbf{M}^{(\alpha)} \quad (6)$$

を満足する。ここで、 $\Delta \gamma^{(\alpha)} := \theta \Delta t \gamma^{(\alpha)}$ である。

一般に、行列の指数関数は Taylor 展開により、

$$\exp[\mathbf{A}] = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} \mathbf{A}^k \quad (7)$$

と表現できる。結晶塑性構成モデルでは式 (7) において通常 $k = 1$ までの項で行列の指数関数が近似される。

$$\tilde{\mathbf{Q}} := \mathbf{1} - \theta \Delta t \mathbf{L}^p \simeq \mathbf{Q} \quad (8)$$

このとき、行列の指数関数 $\tilde{\mathbf{Q}}$ の微分関係は次式となる。

$$\frac{\partial \tilde{\mathbf{Q}}}{\partial \Delta \gamma^{(\alpha)}} = -\text{sign}[\tau_{\tau}^{(\alpha)}] \mathbf{M}^{(\alpha)} \quad (9)$$

行列の指数関数 $\mathbf{Q}$ の第一次近似 (8) は $\theta \Delta t \mathbf{L}^p$ が小さくなければ成り立たない、すなわち、時間増分 Δt が小さくなければならないという計算上の制約を設けてしまうことに注意が必要である。

3.2 行列の指数関数の計算法

行列の指数関数は Taylor 展開 (7) において十分に高次の項まで扱うことで可能である。この計算法は単純な積と和の計算のみであり、常に安定的に求めることができる。また、固有値解析を用いた行列の対角化により計算することも可能である。これらの計算法に関しては Ortiz らの研究³⁾ が詳しい。

これらの手法を用いれば、式 (5)、(6) を用いて、指数関数のままで結晶塑性構成モデルの定式化が可能である。ここで、行列の指数関数 $\mathbf{Q}$ を用いた定式化を指数関数表現、その Taylor 展開の第一項までによる $\tilde{\mathbf{Q}}$ を用いた定式化を第一次近似と呼ぶ。

キーワード：結晶塑性構成モデル、陰解法アルゴリズム、有限要素解析

〒980-8579 仙台市青葉区荒巻字青葉 6-6-06, TEL 022-795-7126, FAX 022-795-7127 URL: <http://www.nde.civil.tohoku.ac.jp/>

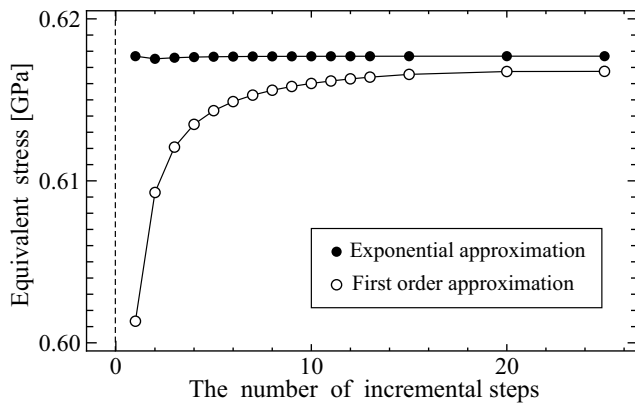


図-1 変形ステップ数(変位増分)とMises 応力

4. 数値解析による手法の比較検証

ここでは、単結晶の数値計算を行い、指数関数表現と第一次近似の2つの定式化を比較検討する。数値計算は、Neo-Hookeanの超弾性モデルを採用し、FCC結晶のすべり系を仮定する。

4.1 指数関数表現と第一次近似の比較

ここでは単一の六面体要素に軸ひずみ10%の一樣引張変形を等分割して増分的に与える数値解析を実施し、そのステップ数(変位増分)と応答の関係を調査し、2つの定式化を比較する。

最終変形時におけるMises応力と分割ステップとの関係を図-1に示す。ここで、分割ステップは変位増分の逆数である。指数関数表現は分割ステップが小さくともほぼ同じ応力状態を得ることができるが、第一次近似では分割ステップに応じて異なる応答となる。分割ステップが多くなるにつれて、第一次近似も指数関数表現と同じ解に収束するが、数百の分割ステップを必要とする。したがって、第一次近似の定式化はTaylor展開の第一項まで用いた近似であるために、小さな変位増分で計算しなければ、正しい解を得ることができない。

4.2 接線係数の違いによる収束性の比較

3つの接線係数(指数関数表現の接線係数、第一次近似のconsistent接線係数とcontinuum接線係数)について収束性に関する比較を行う。

軸方向に長さが2倍になるような一軸引張変形を20分割の増分ステップ数で与える。この変形増分は4.1節の計算における2分割ステップに相当する。図-2には軸応力-軸ひずみ関係(マーク)と計算時におけるNewton-Raphson法の反復回数(折れ線)を示す。このとき、収束計算における残差ベクトルのノルム $e_f = \sum \sqrt{r_i^2}$ の収束判定値を 10^{-7} とした。この図からわかるように、この計算において指数関数表現の(consistent)接線係数と第一次近似のconsistent接線係数の反復回数は同一である。また、図-3にはこの解析の第1ステップ(丸印)および反復回数が同一であった第18ステップ(三角印)において各接線係数を用いるこ

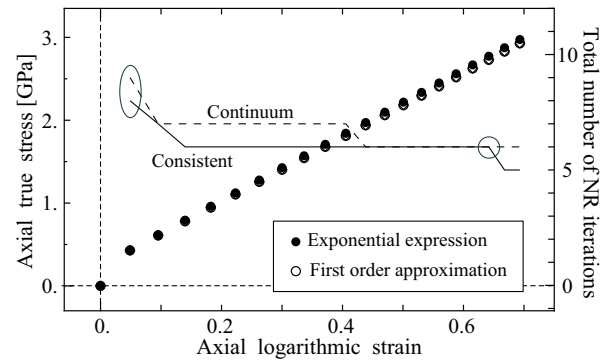


図-2 異なる接線係数の応答とNR反復回数

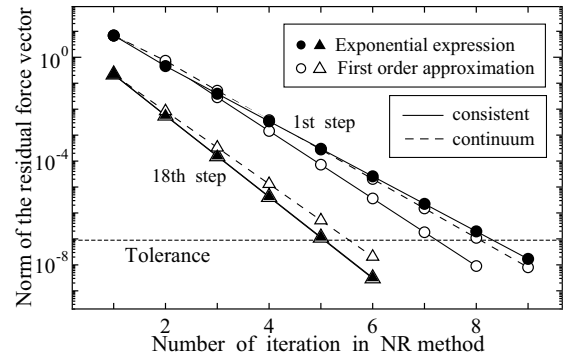


図-3 3つの接線係数における収束性の比較

と求められた残差ベクトルのノルムを示す。図中の点線は第一次近似のcontinuum接線係数である。計算全体の傾向として指数関数表現と第一次近似の収束性の優劣をつけるのは困難であるが、この計算では第一次近似においてconsistent接線係数はcontinuum接線係数よりもわずかに収束性が良い。continuum接線係数の収束性が悪いことは一般に言われることであるが、図-2、図-3に見られるようにそれほど大きな差はなく、continuum接線係数も良好の収束性を示している。

5. まとめ

本研究では、結晶塑性構成モデルを用いた有限変形弾塑性問題をより効率良く解くために行列の指数関数をそのまま用いて定式化を行い、単純な数値計算により一般に用いられるTaylor展開の第一項までで近似した第一次近似の定式化と比較することでその性能を示した。

参考文献

- 1) I. Watanabe and K. Terada and M. Akiyama: Two-scale analysis for deformation-induced anisotropy of polycrystalline metals, *Computational Materials Science*, Vol. 32, pp. 240-250, 2005.
- 2) C. Miehe, J. Schroder and J. Schotte: Computational homogenization analysis in finite plasticity Simulation of texture development in polycrystalline materials, *Comput. Appl. Mech. Engrg.*, Vol.171, pp.387-418, 1999.
- 3) M. Ortiz, R. A. Radovitzky, and E. A. Repetto: The computation of the exponential and logarithmic mappings and their 1st and second linearizations, *Int. J. Numer. Meth. Engrg.*, Vol.52, pp.1431-1441, 2001.