

# 直接法による自己無撞着法の精度の推定

小畑 誠\*・奥田純三\*\*・後藤芳顕\*\*\*・  
松浦 聖\*\*\*\*

自己無撞着法は有限変形をする多結晶体の平均的挙動を知るための有力な手段である。しかしながら、それがどの程度の精度をもつのかについては必ずしもあきらかにはなっていない。本論文では、有限要素法を用いた直接的な数値シミュレーションによってそれを考察した。その結果、基本構成要素の性質にもよるが現実の多結晶体に対しては、有限要素解析の結果と自己無撞着法の結果は非常によく一致した。これはある意味で有限要素解析も材料特性の解析に有用な一つの方法であることを示している。

**Keywords:** self-consistent method, finite elasto-plastic deformation, finite element analysis

## 1. はじめに

限界状態設計法への移行の流れのなかで、限界状態をより正確に捉える必要が増している。そのために鋼構造物においては、継手部や応力集中部などで発生する非常に大きな塑性変形を扱う必要が生じる場合があるが、大変形下での金属の塑性挙動についての知識は必ずしも十分ではなく、現在でも数多くの研究が種々の観点から進められている。この問題は有限変形の合理的な記述と有限変形下での構成関係をどう扱うかに大きく分けることができるかと考えられるが、特に困難なのは後者の方である。破壊時にはひずみは数十%にもおよぶし、また土木構造物においては繰り返し荷重下での挙動も重要となる。そのような要請に対しては等方-移動硬化、単純なべき乗則をはじめ多曲面モデル<sup>1)</sup>など多くの提案がなされてきている。これらはいずれも、実験式、経験式とも呼ぶべきもので、適用範囲を誤らなければ実用に耐え得るとしても、おのおのの式の間の関連やそこにあらわれるパラメーターの意味については明確でないものが多い。

こういった考え方とは別に金属材料の微視構造である結晶レベル(図-1)にまで立ち帰り、その基本的性質を明らかにした上で、何らかの平均化手法を用いて物理構造のヒエラルキを登り全体としての性質を求めようとする流れがある。事実、金属材料においては結晶レベルで生じる塑性変形の特徴が全体しても現れてくる例は知られており特に弾塑性屈座やひずみの集中化といった問題に関連してこの点は明らかにされてきた<sup>2),3)</sup>。この考え方ではヒエラルキを登るための平均化の手法が問題と

結晶粒

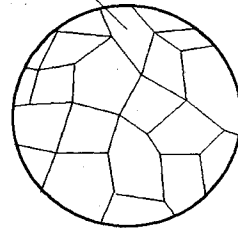


図-1 多結晶モデル

なるが、これについては金属材料にとどまらず複合材料の材料学的性質を求める問題として、これまでに非常に幅広くかつ精力的に研究が行われてきている。

なかでも摂動展開法のひとつと見なされる自己無撞着法(self-consistent method)は最初は電磁気学の分野で提唱され、その後金属材料にも応用された方法であるが、有限変形による微視構造の変化による影響をより多くとり入れることが可能であるという特徴をもっている。実際これは塑性変形を扱う場合には非常に重要となる。鋼材を考えたとき塑性変形は弾性変形とはオーダーが違って大きいものであり、単に結晶面の回転にとどまらない有限変形による微視構造の発達の影響を考慮することが不可避と考えられるからである。弾塑性変形する多結晶金属に対しては有効で合理的な自己無撞着法自体はヒル<sup>4)</sup>により提案されたが、これは微小変形問題についてであり、より大きな意味をもつ有限変形問題への厳密な意味での拡張は文献5)により詳細に明かにされた。そして結晶塑性の仮想的なモデルのひとつである2重すべりモデルに対し数値解析例を示している。また現実の結晶構造へ応用するために結晶面上のすべりにひずみ速度依存性を導入した場合の数値解析法としての拡張は文献6)によってなされている。これらの方法は理論的には確かに興味深く潜在的に強力な手段であることは認め

\* 正会員 Ph. D. 名古屋工業大学助教授  
(〒466 名古屋市昭和区御器所町)

\*\* 工修 東海旅客鉄道株式会社

\*\*\* 正会員 工博 名古屋工業大学教授

\*\*\*\* 正会員 工博 名古屋工業大学教授

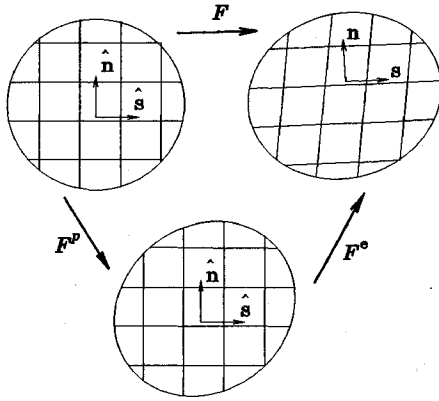


図-2 結晶塑性モデルにおける弾塑性変形

るにしても、グリーン関数の積分と複雑な収束過程を含むその数値解析法は現実には3次元の問題に適用することは必ずしも簡単ではないと容易に予想される。またこの方法がどの程度の精度をもつものなのかについては、どのような意味においても触れられていないのが現状である。実際問題として多結晶金属の平均化の手法そのものの精度を実験的に確認することは非常に難しい。

そこで本研究ではこの問題に対する一つの解決法として、ある程度の大きさをもったモデルに対し境界値問題を設定し有限要素法などのすでに確立された数値解法によって直接的にそれを解くことにより、自己無撞着法などの平均化の方法の解析結果を検定する方法を提案する。これは近年、デジタル計算機の能力が非常に勢いで上昇していることに関連して提案する材料の力学的性質を求める一つの手段でもある。

## 2. 数値解析法の概要

ここでは本研究で用いる有限変形下でひずみ速度依存性を考慮した結晶塑性モデルの構成方程式とその数値解法、そしてその場合の自己無撞着法の適用法についてその概略を述べる<sup>5),6)</sup>。

### (1) 構成方程式

金属材料中で塑性変形の原因となり得るものは、相変態、双晶化、粒界すべりそして転位を含むあらゆる意味での材料欠陥の運動と拡大にあると考えられるが、ここでは常温下で優勢な転位の運動によるもののみを考えることにする。そして原子レベルでの現象である転位の運動を応用力学の立場から取り扱うために結晶の幾何構造に対応したすべり系での連続的なすべりで代表させた結晶塑性モデルを用いることにする。これは、ジョグや増殖を含む実際の転位の運動を考えるとかなり粗いモデル化であるが、 $J_2$ 系の巨視的理論よりは物理現象に即したものである。結晶塑性モデルによると弾塑性変形は例えば図-2のように捉えることができ、変形率テンソル

の次のような表現は明確な意味をもつ。

$$F_{ij} = F_{ik}^e F_{kj}^p \dots \dots \dots (1)$$

テンソルの成分はデカルト座標におけるものをあらわし、添字  $p$  と  $e$  はそれぞれ、塑性変形と塑性変形以外のすべての変形に対応する。このときすべり面に垂直なベクトル  $n_i^p$  とすべりの方向を表すベクトル  $s_i^p$ 、そして各すべり系でのすべり率  $\dot{\gamma}^\alpha$  を用いて速度勾配テンソル  $L_{ij}$  の塑性部分は次で与えられる。

$$L_{ij}^p = \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^\alpha s_i^p n_j^p \dots \dots \dots (2)$$

ただし

$$s_i^p = F_{ij}^p s_j^0, \quad n_i^p = \hat{n}_i^p F_{ij}^{p-1} \dots \dots \dots (3)$$

$s_j^0, \hat{n}_i^p$  は  $s_i^p, n_i^p$  の初期状態を表す単位ベクトルである(図-2)。次に弾性の関係としてキルヒホフ応力の  $F_{ij}^e$  で表される変形に関するヨーマン変化率  $\dot{\tau}_{ij}^e$  と変形率テンソルの弾性部分  $D_{ij}^e$  との線形関係を仮定する。

$$\dot{\tau}_{ij}^e = \mathcal{L}_{ijkl} D_{kl}^e \dots \dots \dots (4)$$

$\mathcal{L}_{ijkl}$  は弾性係数テンソルであり添字に関する通常の対称性を有するものとする。そしてこの式からただちに次式を得る。

$$\dot{\tau}_{ij}^e = \mathcal{L}_{ijkl} \left( D_{kl} - \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^\alpha p_{kl}^\alpha \right), \quad p_{ij}^\alpha = \frac{1}{2} (s_i^\alpha n_j^\alpha + s_j^\alpha n_i^\alpha) \dots \dots \dots (5)$$

$\dot{\gamma}^\alpha$  に関する構成方程式を与えることによって式(5)は完結する。ひずみ速度依存性を導入する場合には様々なものが考えられるがここでは次のべき乗則を用いる。

$$\dot{\gamma}^\alpha = \eta \left( \frac{\tau_{ij}^\alpha}{\tau_{ij}^p} \right)^m \dots \dots \dots (6)$$

ここで、ひずみ速度独立性流れの場合と同様に  $\tau^\alpha$  と  $\tau^p$  は次式で定義する。

$$\tau^\alpha = \tau_{ij} p_{ij}^\alpha, \quad \tau^p = \tau_0^\alpha + \sum_{\beta} h^{\alpha\beta} \dot{\gamma}^\beta \dots \dots \dots (7)$$

そしてすべり面レベルでの加工硬化係数  $h^{\alpha\beta}$  は次式で与えるものとする。

$$h^{\alpha\beta} = h \dots \dots \dots (8)$$

式(7)の時間微分を取ると

$$\begin{aligned} \dot{\tau}^\alpha &= \dot{\tau}_{ij} p_{ij}^\alpha + 2(D_{ik}^e \tau_{kj} - \tau_{ik} D_{kj}^e) \omega_{ij}^\alpha \\ &= p_{ij}^\alpha \mathcal{L}_{ijkl} D_{kl}^e + 2(D_{ik}^e \tau_{kj} - \tau_{ik} D_{kj}^e) \omega_{ij}^\alpha \\ \omega_{ij}^\alpha &= \frac{1}{2} (s_i^\alpha n_j^\alpha - s_j^\alpha n_i^\alpha) \end{aligned} \dots \dots \dots (9)$$

となる。ここでこの論文で扱う例では弾性係数が応力レベルに比べて十分に大きいことと、弾性の構成方程式に式(5)を用いていることから生ずる複雑さを避けるために以下では式(9)の右辺第2項を無視することにする。

式(6)の指数  $m$  は常温でかつ通常の変形速度の範囲では  $10^2$  程度の大きな数になるので効率の良い数値計

算のために文献7)にある方法を導入する。すると増分式は次のように表される。

$$\dot{N}_{ij} \Delta t = \mathcal{F}_{ijkl} L_{kl} \Delta t - \mathcal{S}_{ij} \Delta t \dots (10)$$

ただし

$$\mathcal{F}_{ijkl} = \mathcal{L}_{ijkl} - \frac{1}{2}(\delta_{ik}\sigma_{ij} + \delta_{il}\sigma_{kj}) - \frac{1}{2}(\sigma_{ik}\delta_{ij} - \sigma_{il}\delta_{kj}) - \sum_{\alpha\beta} (\mathcal{L}_{ijmn} p_{mn}^\alpha + \omega_{is}^\alpha \sigma_{sj}) - \sigma_{is} \omega_{sj}^\alpha M^{\alpha\beta} \frac{\theta m \Delta t \gamma^\beta(t)}{\tau^\beta} p_{pq}^\beta \mathcal{L}_{pqki}$$

$$\mathcal{S}_{ij} = \sum (\mathcal{L}_{ijmn} p_{mn}^\alpha + \omega_{is}^\alpha \sigma_{sj} - \sigma_{is} \omega_{sj}^\alpha) M^{\alpha\beta} \gamma^\beta(t)$$

$$M^{\alpha\beta} = \left[ \frac{1}{m} \delta_{\alpha\beta} + \frac{\theta \Delta t}{\tau^\alpha} \gamma^\alpha(t) \left( p_{ij}^\alpha \mathcal{L}_{ijkl} p_{kl}^\beta + \frac{\tau^\alpha}{\tau^\beta} h^{\alpha\beta} \right) \right]^{-1} \dots (11)$$

$N_{ij}$  は第一種ピオラキルヒホフ応力である。 $M^{\alpha\beta}$  は右辺の行列と見なしたときの逆行列を表す。 $\theta$  は数値的安定を得るために導入されたパラメーターで詳細については文献7)にある。

(2) 自己無撞着法<sup>5),6)</sup>

多結晶体の平均的特性を知るひとつの方法である自己無撞着法について以下概略を示す。自己無撞着法はヒルによりひずみ速度独立性塑性流れに対し定義されたものであり、その後いくつかの特殊な例を別にすれば、有限変形問題に対し一般的な形でひずみ速度依存性塑性流れに対して自己無撞着法を行う手法は文献6)により提案された。自己無撞着法では解析対象である非一様体を仮想的に一様体とみなし、その中に埋め込まれた一定のひずみをもつ楕円体(2次元問題では楕円柱)がまわりから受ける拘束を求めなければならない。この拘束は基本的には仮想一様体の接線剛性係数に依存し、時間依存性流れによる影響は受けない。したがって式(5),(6)に従うような材料については初期の弾性係数のみによることになる。しかしながら、数値計算を考えたとき、これは式(5),(6)に対し単純な増分法を適用することに相当し必ずしも効率が良くない。そこで文献6)では効率的な近似増分式である式(11)についてヒルによって示された自己無撞着法の方法をあてはめ次のようにそれを与えた。

$$\left. \begin{aligned} \mathcal{F}_{ijkl} &= \langle \mathcal{F}_{ijmn}^{\Omega} \mathcal{A}_{mnkl}^{\Omega} \rangle \\ \mathcal{S}_{ij} &= \langle I_{ijmn} + \mathcal{F}_{ijkl}^{\Omega} \mathcal{A}_{klpq}^{\Omega} J_{pqmn}^{\Omega} \rangle^{-1} \\ &\quad \langle (I_{mnes} + \mathcal{F}_{mnab}^{\Omega} \mathcal{A}_{abcd}^{\Omega} \mathcal{F}_{cdef}^{\Omega}) \mathcal{S}_{ef}^{\Omega} \rangle \\ \mathcal{A}_{ijkl}^{\Omega} &= \{ I_{ijkl} + J_{ijmn}^{\Omega} (\mathcal{F}_{mnkl} - \mathcal{F}_{mnkl}^{\Omega}) \}^{-1} \\ I_{ijkl} &= \delta_{ik} \delta_{jl} \end{aligned} \right\} \dots (12)$$

ここで添字  $\Omega$  は同じ方向性を有する単結晶に付随する量を、そして  $\langle \rangle$  は体積平均を表す。 $\mathcal{S}_{ij}$  は全体としての  $s_{ij}^{\Omega}$  であり、 $\mathcal{F}_{ijkl}^{\Omega}$  に対する  $\mathcal{F}_{ijkl}$  に対応するものである。 $\mathcal{A}_{ijkl}^{\Omega}$  を用いて全体の平均的な速度勾配  $V_{i,j}$  と各

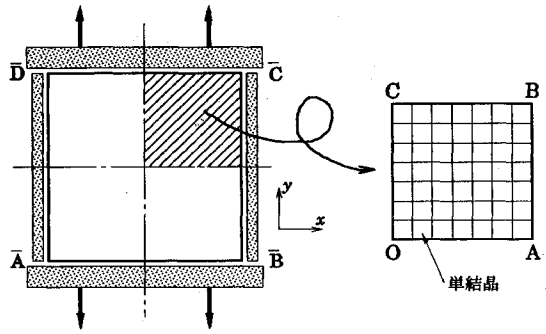


図-3 有限体の数値解析モデル

単結晶中の平均的な速度勾配  $v_{i,j}^{\Omega}$  は次のように関係づけられている。

$$v_{i,j}^{\Omega} = \mathcal{A}_{ijkl}^{\Omega} V_{k,l} \dots (13)$$

$\mathcal{A}_{ijkl}^{\Omega}$  に含まれる  $J_{ijkl}^{\Omega}$  はモデルとして用いる楕円体の幾何学的形状と仮想一様体の接線剛性係数によって決定される。2次元問題の場合  $J_{ijkl}^{\Omega}$  は煩雑な計算の後、複素関数の留数を求めることに帰着される。このことは有限変形を考慮するときに、自己無撞着法が基本構成要素(この場合は単結晶)の変形の影響も取り入れることができることを意味している。これは幾何学的要素がいきい入り込まないテイラー流の方法<sup>8)</sup>と好対照をなす。式(12)は求めるべき  $\mathcal{F}_{ijkl}$  と  $\mathcal{S}_{ij}$  に関する陰な表現になっており、実際には何らかの収束過程によってそれらを求めなければならない。式(13)から  $\mathcal{A}_{ijkl}^{\Omega}$  の全体での平均を取ると  $I_{ijkl}$  でなければならないことになるが、有限変形を含む場合にはこれは自明には成立せず、そのことも考慮する必要がある。したがって実際の数値計算自体はかなり複雑なものになる。詳細については文献5), 6)にある。

(3) 有限体の切り出しによる数値解析

上に述べたように、自己無撞着法は背後にある理論構成自体はユニークであり、有限変形の影響を広く取り入れる余地を含んでいる点で優れたものである。実際に有限変形を考慮した一般の3次元問題に関して  $\mathcal{F}_{ijkl}$  などを求める数値計算は必ずしも簡単ではなくなる。そこでここでは、自己無撞着法の精度を検定する意味に加えて、直接的なシミュレーションの一つの方法を示唆する意味でも、有限の大きさをもつ部分に対する境界値問題を他の確立された数値解法で解き材料特性を推定する方法を考える。具体的には数値解法として有限要素法を用いる。一軸引張りの下の材料特性を議論する仮想試験体として図-3のようなものを考える。本来、非一様な材料の特性は非一様性が問題となるスケールよりも十分に大きな代表長をもつ試験体に対して考えられるものであり、それは当然統計的な根拠をもって論じられるべき性質のものである。この場合で考えると非一様性を示す尺度は

単結晶の大きさ程度であるが、仮想試験体としてどの程度の大きさをとればよいかについては定量的にはあきらかではない。そこで本論文では境界条件に疑似周期構造体のそれを想定し、その一単位に対し数値解析を行うことにする。すなわち境界条件としては、四辺形の4個の辺を直線に、4個の角を直角に保持させるように辺の変位を与える。そして一軸引張り ( $\sigma_{xx} = \sigma_{yy} = 0$ ) の条件として辺  $\overline{BC}$ ,  $\overline{DA}$  上の合力を0とする。この境界条件によって図-3をひとつの単位とする四辺形で境界条件を乱さないまま無限平面を構成することができるので結果として十分大きなスケールの試験体を間接的に解析していることになる。しかしながらあくまで単位の形状を四角形に拘束しているために、正確には周期構造体の一般的な解析にはなっていないことはいうまでもない。しかしこの有限体を十分に大きくすると形式的には通常の一軸引張り試験の供試体に近づいていく。本論文では平均化手法の一つである自己無撞着法との比較を主目的におき、結晶粒内のひずみ速度分布による影響よりも各結晶粒間の相互作用に注目するので、図-3の要素正方形を一つの結晶粒と見なすことにする。そしてそれぞれは対角線によって区切られる4個の三角形より構成されているものとみなす。離散化要素は三角形一次要素であり、したがってこれは数値計算上安定した対角三角形要素 (crossed triangular element) を用いたことになる。

### 3. 数値解析結果

#### (1) 有限体の大きさについて

上でも述べたように挙動を解明したい対象が非常に多数の基本構造体の集合であるとして、ここではその一部分を切り出して解析し全体の挙動を追跡しようとする。そこでまず、図-3で定義した疑似周期構造体の1単位を解析対象とした場合に、その結果が何らかの意味をもつと結論するに足るだけの大きさを数値的に推定することにし、結晶の方向性も含めて対称性を仮定し図-3の四角形  $OABC$  をそれぞれ  $5 \times 5$ ,  $10 \times 10$ ,  $15 \times 15$ ,  $20 \times 20$ ,  $25 \times 25$ ,  $30 \times 30$  個の正方形に分割した場合を考えることにする。

体積変形を含まない任意の2次元変形を記述するには2つの独立したすべり系で、3次元変形では5個で十分となるが、一般に実在の結晶のすべり系はそれよりも多い。つまり任意の変形をするのに必要以上に多い冗長なすべり系をもっている。そこですべりモデルについては図-4にあるように2, 3そして5すべりモデルについて考え、すべり系の数の影響に対しても考察を加えることにした。本来は3次元的な結晶面でのすべりを2次元的に模倣しているので現実の結晶の変形とのつながりが問題となる。2次元的に変形するすべり系の少ないFCC系の結晶に対しては2すべりモデルが有効である

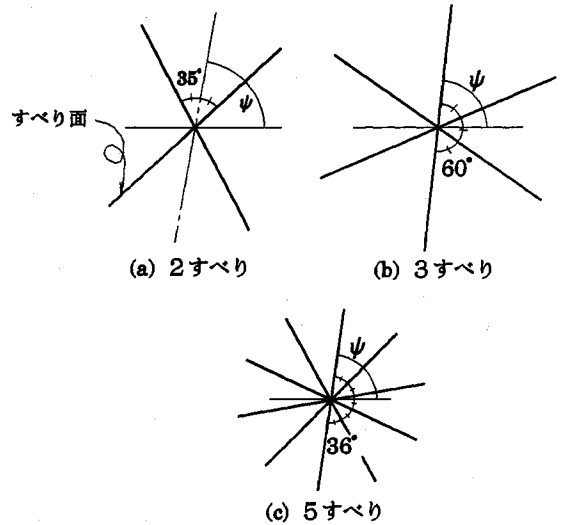


図-4 多重すべりモデル

ことは知られているが、すべり系の多いBCC系では必ずしも明解ではない。またどのように考えたとしてもここで用いる2次元すべり系による結晶構造の近似はあくまで仮想的なものであり、特定の方向をもつ面上での連続すべりをもつという以上の具体的な対応は薄いと考えるべきであろう。

基本構造体の幾何学的構成要素は形状とは別に結晶の方向  $\phi$  がある。  $\phi$  の方向の密度が全体として均等になるようにし、その具体的な各要素への配置については乱数を発生させることによりランダムに与えた。ただし2すべりモデルでは  $\phi = 0 \sim 180^\circ$  の間を  $10^\circ$  間隔のとびとびの角度とし、3すべりモデルでは  $60^\circ$  回転対称であることから  $0 \sim 60^\circ$  の間を9等分して考えた。5すべりモデルに対しては  $0 \sim 36^\circ$  を9等分した。すべり系の冗長性は同時に変形に対しすべり率が幾何学的条件からのみは決定できないことを意味し、ひずみ速度独立性の問題では塑性仕事率などなんらかの付帯条件が必要となるが、ここではすべり率は式(6)にあるように、応力増分ではなく応力状態のみで決定できるのでその種の考察は不必要となり数値計算上の困難は生じない。弾性定数など数値計算に用いた各種の材料定数およびひずみ速度については次のとおりである。

$$\left. \begin{aligned} m=200, \quad \nu=0.3 \\ \frac{1}{\eta} \left( \frac{\dot{u}_y}{L} \right) = 1, \quad \frac{E}{\tau_0^0} = 600, \quad \frac{h}{\tau_0^0} = 0.01 \end{aligned} \right\} \dots\dots\dots (14)$$

$L$  は有限体の初期長さ、 $\dot{u}_y/L$  は公称伸びひずみ速度である。数値計算はそれぞれの場合について、乱数によって発生させた最低でも4つの異なる  $\phi$  の空間的配置の場合について行った。数値計算上のパラメーターである式(11)の  $\theta$  は0.5とした。

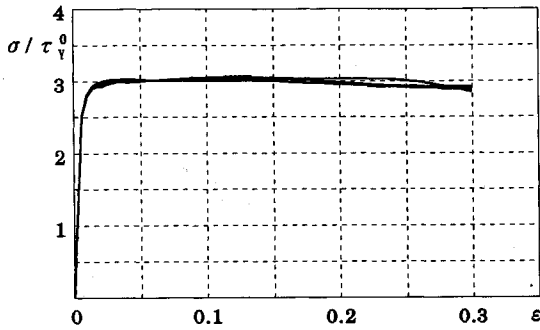
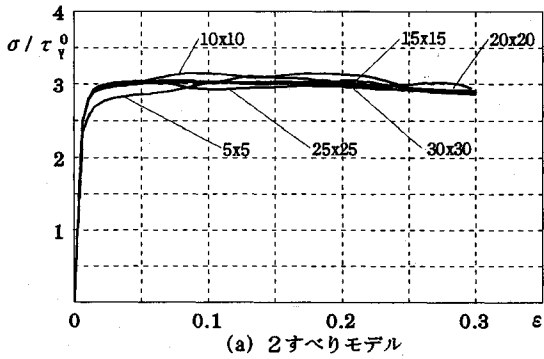
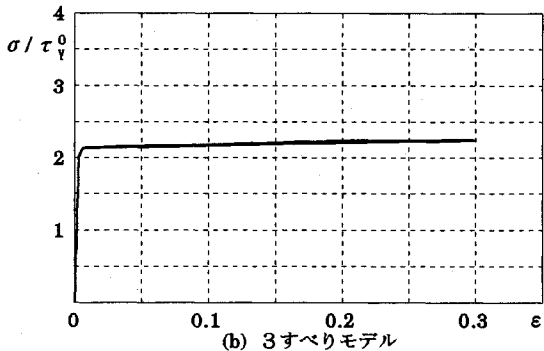


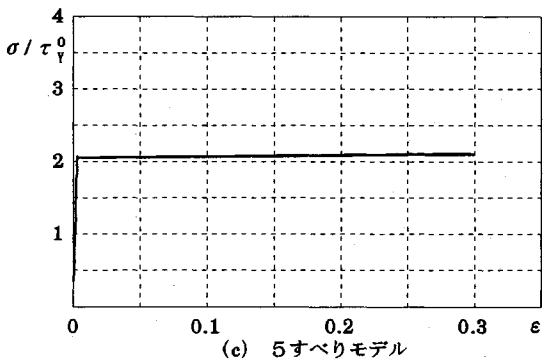
図-5 2すべりモデル 30×30要素



(a) 2すべりモデル



(b) 3すべりモデル



(c) 5すべりモデル

図-6 応力ひずみ曲線

図-5は2すべりモデルで30×30個からなる疑似多結晶体で乱数によって発生させて4つの異なる $\phi$ の配置に対する応力ひずみ曲線をまとめて示した。また図-

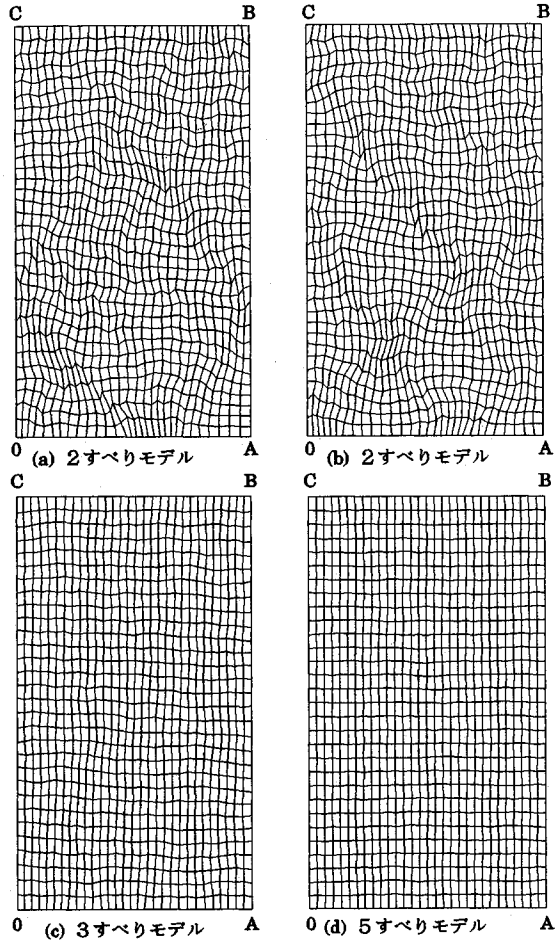


図-7 各すべりモデルの変形状態  $\epsilon=0.30$

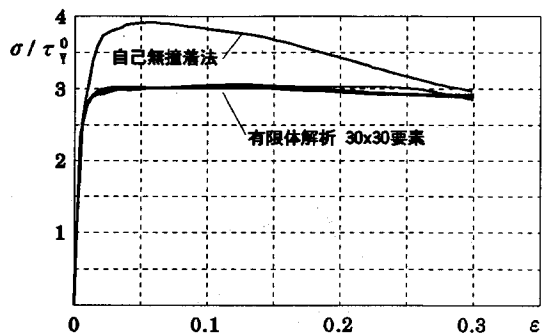
6は各すべりモデルについて有限体の大きさの応力ひずみ曲線への影響をまとめたものである。ただし図-6 (b), (c) について各曲線が差が図上では表れない場合は、それぞれの曲線がどの大きさの有限体に対応するかは示していない。応力は平均化された真応力、ひずみは対数ひずみである。図-7にはそれぞれのモデルに対して変形状態の一例を示した。図-7 (a), (b) は同じ2すべりモデルによる結果であるが $\phi$ の空間的な配置が異なるものである。図-6 (a) からわかるようにすべり系の最も少なくその意味で変形に対する拘束の多い2すべりモデルでは、応力ひずみ曲線はある一定の範囲にはあるものの不規則にばらついている。最も大きい30×30の有限体でも、図-5に示されるように結晶の方向の配置が異なるだけでわずかではあるが全体の挙動が影響をうけている。図-7 (a), (b) にも例示したが、2すべりモデルでは有限体のスケールに対し無視できない程度の大きさをもつひずみ集中化領域が現れている。したがってこれらの例では材料としての特性より、有限の

大きさをもつ構造体としての特性があらわれていると考える方が妥当であろう。これは鋼材の引張り試験などに見られるリュース帯の発生に相当すると考えることもできる。工学的な材料特性はリュース帯よりも十分大きな尺度をもつ供試体で決定している。巨視的な意味での材料特性を求めめるためには図-7に観察される変形の集中化域の大きさに対して十分な大きな試験体を切り出す必要があることになる。したがって少なくとも2すべりモデルに対してはこの境界条件で30×30個の正方形単結晶からなる集合体を考えたとしても一樣体としての性質を数値的に明らかにするには十分ではないことが予想される。

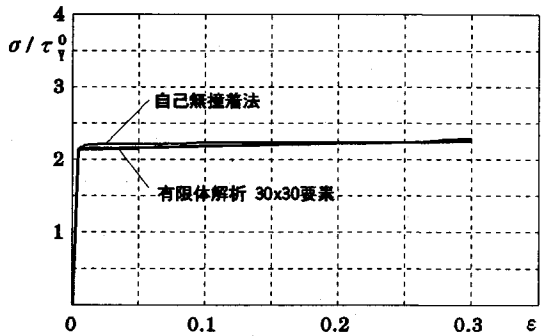
これは、本研究のように数値実験的に材料の力学的挙動を求めようとするのが困難であることを予想させるものであるが、次に3つ以上のすべりをもつ冗長すべりモデルについて見ると(図-6(b), (c)), 2重すべりモデルとは全く対照的な挙動を示すことがわかる。すなわち代表有限体の大きさをパラメータにしたときの挙動の収束性はきわめてよく、3, 5すべりモデルともに10×10個の正方形による代表有限体をとるだけでも応力ひずみ曲線はほぼ完全に収束している。したがってこの解析によって得られた結果は少なくとも材料の何らかの意味で代表値であると考えられることになる。このように、すべり系の冗長性を認めることの効果は劇的であり、実際の結晶構造がすべり系の少ないFCC系でも3次元変形に対しては十分な冗長性をもっていることから、これらの有限体の切り出しによる境界値問題としての材料挙動の解明が比較的小さい有限体を対象に簡単に行える可能性があることを示唆している。また当然ではあるが結晶の方向配置の差による全体の挙動への影響もほとんど見られなかった。図-7(c), (d)に3, 5すべりモデルでの変形状態を示した。この場合でも変形の非一様性は確かに認められるものの、2すべりモデルにおけるような変形の集中は見られない。

(2) 自己無撞着法との比較

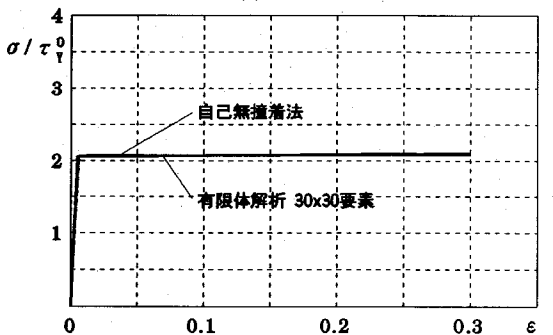
ここまでで明らかになったように、非常に多数の基本構造体からなる巨視的一様体を周期境界条件をもつ有限体によって近似し、それを既に確立された手法により境界値問題を解いた場合、有限体の基本構造体に対する相対的な大きさと無作為に与えた基本構成要素の構造的分布(ここでは単結晶の方向)とから解がほとんど影響を受けなくなるという意味で、なんらかの材料の代表値を得ることができた。それを受けてここでは、こうして得られた代表値が、他の平均化手法による代表値とどのような関係にあるのかを明らかにする。もちろん平均化の方法には種々のものが考えられるが、有限変形の影響をある程度まで合理的に取り入れることに成功している自己無撞着法によるものとの比較を中心に考えることにす



(a) 2すべりモデル



(b) 3すべりモデル



(c) 5すべりモデル

図-8 応力ひずみ曲線の比較

る。

有限変形を考慮した自己無撞着法については具体的な数値計算の方法も含めて文献(5), (6)によるものとし、各単結晶粒の方向φの分布については各すべりモデルに対し、それぞれ有限体におけるものに対応させた。基本構造体の初期形状は円(柱)、材料定数は有限体の解析と同一とし、自己無撞着法でも公称ひずみ速度を式(12)に与えられるように一定かつσ<sub>xx</sub>=σ<sub>xy</sub>=0とした。数値計算上のパラメーター、式(10)のθも前節と同様に0.5としている。

図-8は応力ひずみ曲線を有限体での解析結果と比較したものである。有限体の結果は最も大きい30×30要素の結果を示している。2すべりモデルでは乱数によって発生させた4つの異なるφの配置についての結果を

示し、3すべりモデル以上では先にあきらかにしたように、有限体でも基本構成要素の構造的分布の影響をほとんど受けないので一つの例で代表させている。大変興味深いことに、すべり係が少ないという意味で変形に対する自由度の小さい2すべりモデルでは2つの異なる方法による結果はまったく違った結果を与えている。図-6

(a)の結果を考えると、有限体の大きさが十分でないために応力ひずみ曲線がある仮想的な代表値に収束していない、というのではなく、むしろこの2つの方法では収束する先の値が違うと見なすべきであることがわかる。これは図-7 (a), (b)にあるような変形の集中化が原因であると考えられる。自己無撞着法でも、個々の構成要素間での変形の不均一性は認めるものの図-7

(a), (b)に示されるような意味での変形の集中化は概念から除外されている。あくまで巨視スケールでの変形の一様性を前提としており、いったん変形の一様性が失われると連続した解は求めることができない。そのような変形の一様性の喪失は不安定性の出現と同義であり、有限変形によって惹起されるすべり面の回転や構成要素の幾何学的な変化によって導かれる $\sigma_{ijk}$ の微分オペレーターとしての楕円形性の喪失のみが、部分ではなく全体の不安定に対応すると文献5)に指摘されている。しかしその結論はひずみ速度独立性塑性流れに対するものであり、ここでのようにひずみ速度依存性流れに対するものではない。これらのことは2すべりモデルのように、ある意味で変形に対する自由度の小さい基本構成要素に対しては、自己無撞着法も含めて材料としての挙動を大ひずみ領域にいたるまで解析することは困難であることを示唆していると言えよう。なお、図-8 (a)はひずみ速度依存性塑性流れに対する結果であるが、ひずみ速度独立性塑性流れについて文献5)が材料不安定が生じると予測している程度のひずみの大きさで、有限要素法と自己無撞着法の解析結果が離れていっている点は大変興味深い。

一方、3すべりモデル、5すべりモデルでは有限体の解析による代表値と自己無撞着法による結果は非常によく一致する(図-8 (b), (c))。3すべりモデルではひずみの小さい領域でわずかに差が見られるもののひずみが大きくなるにしたがって2つの差は小さくなっていく。5すべりモデルではすべての区間にわたって有限体の解析結果との非常によい一致が見られる。したがって2.で述べたような境界条件の設定による有限体の解析によって得られる結果と自己無撞着法による結果は十分な意味をもつものと推定できる。

自己無撞着法では基本構成要素は楕円体(2次元問題では楕円柱)として扱っており、有限体では文献9)のモデルのように立方体(四角柱)と見なしているが、結果にほとんど差異が見られないことには注目してよい。

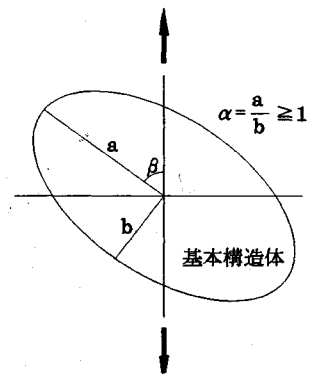


図-9 アスペクト比と主方向

先にも述べたように、現実の結晶構造は任意の変形を記述するのに必要以上の、言い替えれば冗長なすべり系を有している。したがって、より現実に近い3次元モデルに対してここで考えたような有限体を疑似周期境界値問題として有限変形解析を行うことによって材料の力学挙動を推定しても、意味のある結果が得られることが期待できる。実際に3次元問題ではグリーン関数の積分が数値的にしか行えないことに加えて収束過程を含むことから自己無撞着法の実行の方が数値的には困難になるであろう可能性も考えると、疑似周期境界条件による有限体の有限変形解析は非常に有力な手段になり得るということを示している。

### (3) 基本構造物の有限変形

非一様体の材料挙動を対象にした場合、解析の対象となるのは単に平均化応力と平均化ひずみの間の平均化構成関係にとどまらず、基本構成要素、この場合は単結晶の変形の様子も含まれる。そこで次に基本構成要素の変形を主方向伸びの比と主ひずみの方向について、有限体の有限変形解析の結果と自己無撞着法による結果の比較を行うことにする。ここで用いる指標はひずみの主方向と主伸び値の比であり、自己無撞着法に即して考えると基本構成要素である楕円体(柱)の主方向( $\beta$ )とアスペクト比( $\alpha$ )を表している(図-9)。これらは相互作用を見積る式(12)の $A_{ijk}^0$ を求める上で影響する幾何学的要素である。

各すべりモデルに対し、いくつかのひずみの状態での、主方向の結果を図-10に、アスペクト比の結果を図-11に示した。横軸は結晶の方向 $\psi$ 、図中の数字はひずみの大きさを表している。これらはひとつの例についての結果であるが、2すべりモデルについては $\psi$ の配置によるばらつきが大きいので、ひずみが0.30の場合の4つの結果を図-12に示した。有限体の大きさは最も大きい $30 \times 30$ 要素である。2すべりモデルを除いて有限体の大きさに関する結果の収束性はきわめてよかった。有限体の結果については同じ結晶方向 $\psi$ をもつ要素に

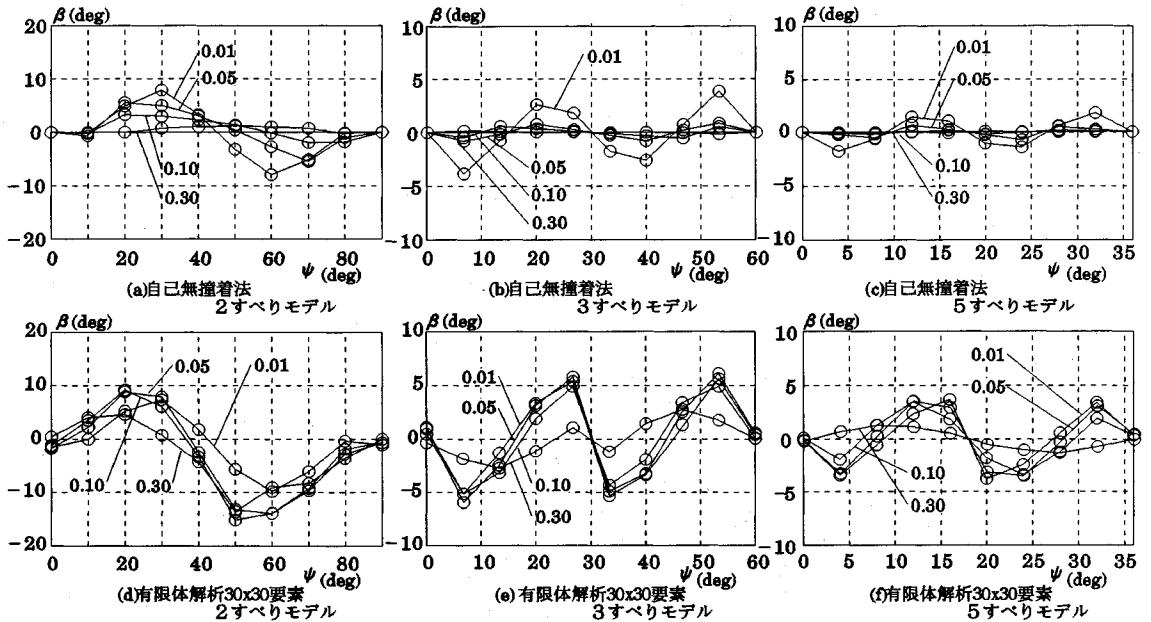


図-10 主方向の分布

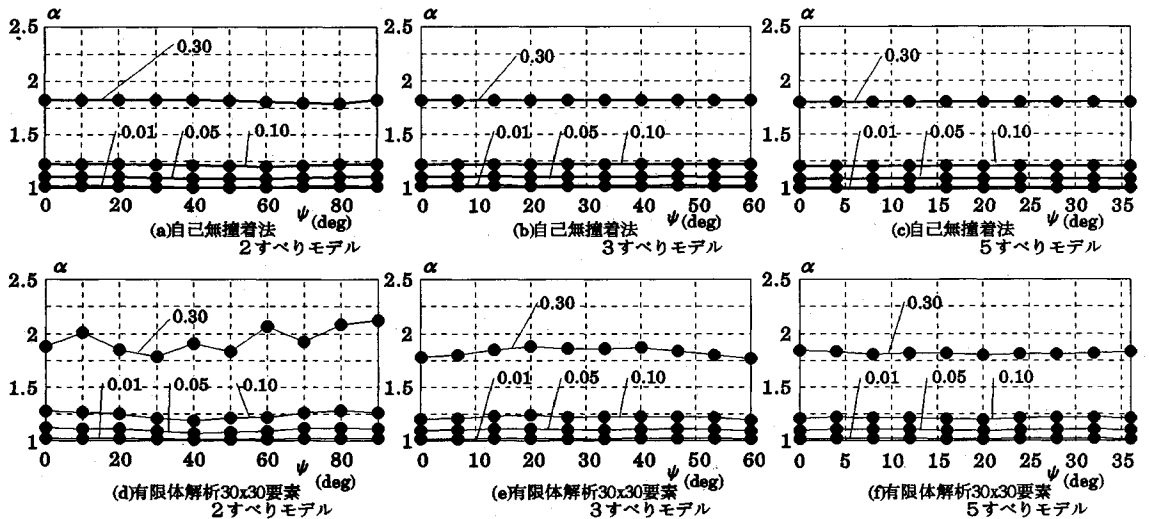


図-11 アスペクト比

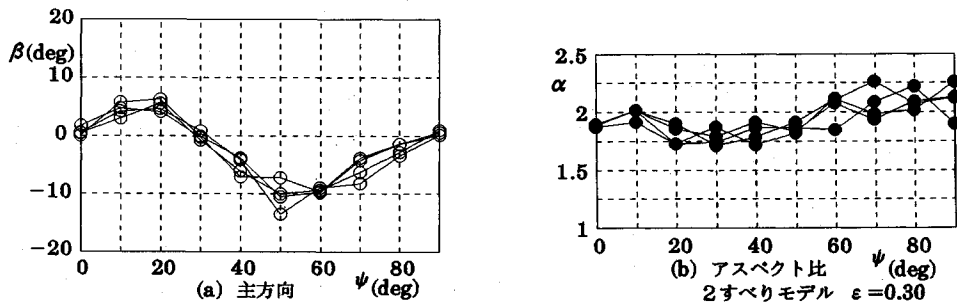


図-12 2すべりモデルでのばらつき



についての平均を表している。2すべりモデルに対し自己無撞着法では一軸引張りの対称性を考えて $0\sim 90^\circ$ の間のみの $\phi$ の配置を考えたので、ここに示した結果も $\phi=0\sim 90^\circ$ についての対応を示すことにした。2すべりモデルでは変形が大きくなると図-7(a), (b)に見られるように変形の集中化が生じ、それぞれの構造的分布における差異が大きくなることが予想される。しかし、有限体を大きくすると変形が集中する領域は相対的に小さくなり、平均という指標で表したときには主方向( $\beta$ )の分布、アスペクト比ともに予想されるほど大きなばらつきが見られないことには注目してよいであろう(図-12)。図-10(a), 11(a)に見えるように自己無撞着法では変形の初期からアスペクト比の $\phi$ に対する依存性は小さいし、また主方向分布の $\phi$ 依存性も変形の進行とともに急速に失われている。それに対し有限体の解析結果図-10(d), 11(d)を見るとここで与えた材料定数の設定では対照的にひずみが0.30に達したときは0.10にくらべて逆に一樣な変形から大きくはずれていっている。

3すべり以上のモデルでの有限体についての結果を見ると、アスペクト比では $\phi$ に対する依存性が全体として小さくなっている。すべり系の最も多い5すべりモデルでその傾向は最もよく現れており、ほぼすべての変形領域でアスペクト比の $\phi$ 依存性は失われている。そしてこれらの結果はアスペクト比の値も含めて自己無撞着法の結果とよく一致している。主方向の分布についての結果は極めて興味深いものである。有限体の解析で得られた変形の小さくひずみが0.01程度までの結果は各すべりモデルごとに特徴ある傾向をみせているが、それは自己無撞着法による解析でもほぼ完全に予想されているものである。わずかに自己無撞着法による結果のほうが $\phi$ に対する依存性が小さいが、定量的にもそれほど大きな差はない。変形が進むと自己無撞着法では2すべりモデルと同様に $\phi$ に対する依存性は急速に失われひずみが $\varepsilon=0.05$ でほぼ一樣となってしまう。自己無撞着法では $\sigma_{ijk}$ は、単に基本構成要素の幾何学的指標だけでなく $\sigma_{ijk}$ と $\sigma_{ihk}$ の差にも依存するので、この結果をもってひずみ増分の一樣性を主張することは短絡的であるが、少なくとも各構成要素間の相互作用が小さいと予想していることにはなる。

有限体の解析でも変形の進行とともに $\phi$ に対する依存性は失われていくがそれはすべりの冗長性の大きい5重すべりモデルで最も顕著である。また主方向が一樣となるのは少なくともひずみが0.10を越えた後であり自己無撞着法に比べると大きく変形した後となっている。有限体の解析において上に述べた結果は少なくとも有限体の大きさに対しては収束していると考えられることから、この結果の相違は根本的なものであると考えられる。

原因の一つに有限変形を考慮した自己無撞着法では $\alpha$ ,  $\beta$ が異なる基本構造体に対してすべての無撞着性を満足させるために拘束条件を用いており<sup>5), 6)</sup>、それが構造体間の変形の差を小さく見積もると考えられること、さらに自己無撞着法では楕円体(柱)を、有限体の解析ではより角張った四角形(柱)を基本構造体に行っていることを挙げることができる。しかし強調されなければならないことは、2つの結果の定量的な相違よりもひずみの小さい領域での定性的な一致である。ヒルにより提唱された多結晶体の自己無撞着法は本来は微小変形に対するものであり、そこで最も重要なものは応力ひずみ曲線の対応である。有限変形を考慮した場合には単に全体的な挙動だけではなく、ローカルな構成要素の構造的変化も重要になる。ここに与えた結果は文献5), 6)で与えられた有限変形を考慮した自己無撞着法による予想がローカルな変数も含めて十分な程度の正当性をもつことを示すものであると考えられる。

#### 4. おわりに

本研究では非一樣材料の有限変形下での力学的挙動を推定する有力な手段の一つである自己無撞着法の妥当性を、すでに確立された数値解析手法によって直接的に解くことによって明らかにした。具体的には強い塑性異方性をもつ基本構成要素からなる多結晶体をとりあげた。自己無撞着法の予測と、有限体の有限変形解析による結果は基本構成要素の性質にも大きく依存していることが明らかになった。体積変形の伴わない塑性変形を記述するのに必要最低限のすべり系しかもたない2すべりモデルでは2つの方法による応力ひずみ関係はまったく異なるものに収束していくことが示された。有限体の解析では変形の集中化がどの場合でも認められ、そのことが影響していることは明かであるが、有限体を大きく取ると一応全体の応力ひずみ曲線は収束していく傾向が見られた。一方、より多いすべり系を有する基本構成要素に対しては、2つの結果は極めてよく一致した。そしてその一致は単に平均応力、平均ひずみの関係にとどまらず基本構成要素の幾何学的な指標となるひずみの主方向のびと主方向の傾向にも見られた。しかし全体として自己無撞着法では、有限体の解析に比較して変形の小さい段階で変形の非一樣性が失われていく傾向が見られた。少なくともこのように有限変形も含めた場合で自己無撞着法の結果を直接的な方法で比較した例は著者らの知る限りでは見られない。

材料の塑性変形まで考えたときに、有限変形を考慮することは根本的な要請であり、それはここでとりあげたように非一樣に変形する材料の平均的な挙動を考える場合にも当然あてはまる。これまでこの種の研究は主に自己無撞着法などの方法によって行われてきたが、それら

の具体的な数値解析に関しては多くの困難が伴う場合がある。それに対し有限体を考えて適当な境界条件の下で、すでに確立された手法で数値解析を行う方法はある面から見た優雅さには欠けるが、特に有限変形下の材料挙動を追跡する上では十分有力かつ強力な方法である。これまでも構造物ではなく、材料の力学的挙動や破壊特性などの解析にこの種の方法が用いられた例は多数あるが、個々の具体的な問題に対するものである。大規模な数値シミュレーションを基本におく方法も材料挙動を解明する上で見直されてもよいのではないかと考える。

謝辞：本論文を書き上げるにあたり議論を通じていくつかの貴重な助言をいただいた住健太郎氏（名古屋工業大学大学院）と、この論文の完成度を高めるのに有用なそして示唆に富んだ数多くのご指摘を下さった査読者の皆様に感謝いたします。

参 考 文 献

1) Dafalias, Y.F. and Popov, E.P. : Plastic internal variable variables formalism of cyclic plasticity, *J. Appl. Mech.*, Vol.43, pp.645~651.

2) Hutchinson, J.W. : Plastic Buckling, *Advances in applied mechanics*, Academic Press, 1975.  
 3) Christoffersen, J. and Hutchinson, J.W. : A class of corner theories of plasticity, *J. Mech. Phys. Solids*, Vol.27, pp.465~487, 1979.  
 4) Hill, R. : Continuum micro-mechanics of elasto-plastic polycrystals, *J. Mech. Phys. Solids*, Vol.13, pp.89~101, 1965.  
 5) Iwakuma, T. and Nemat-Nasser, S. : Finite elastic-plastic deformation of polycrystalline metals, *Proc. Roy. Soc. Lond.* A394, pp.87~119, 1984.  
 6) Nemat-Nasser, S. and Obata, M. : Rate-dependent finite elasto-plastic deformation of polycrystals, *Proc. Roy. Soc. Lond.* A407, pp.343~375, 1986.  
 7) Peirce, D., Shih, F. and Needleman, A. : A tangent modulus method for rate dependent solids, *Comp. Struct.* Vol.18, pp.875~887, 1984.  
 8) Taylor, G.I., Plastic strain in metals : *J. Inst. Metals*, Vol.62, pp.307~325, 1938.  
 9) Lin, T.H. : Analysis of elastic and plastic strains of a face centred cubic crystal, *J. Mech. Phys. Solids*, Vol.5, pp.143~149, 1957.

(1991.6.11 受付)

FEM ESTIMATION OF THE ACCURACY OF SELF-CONSISTENT AVERAGING METHOD

Makoto OBATA, Junzo OKUDA, Yoshiaki GOTO and Sei MATSUURA

Self consistent averaging scheme is one of the prominent methods to estimate the finite elasto-plastic deformations of polycrystalline solids. Although it is a unique and potentially powerful method, its accuracy as averaging scheme has remained to be envisaged. To this end, we applied a direct numerical approach based on finite element computation to two dimensional elasto-plastic deformation of polycrystals under uni-axial tension. The results by these two methods depend heavily on the kinematic characteristics of a micro-constituent. While a double slip model yields different overall behaviors, triple or more slip models lead to surprisingly good coincidence. When real 3D behaviors are concerned, the self-consistent method seems to involve very much complicated numerical procedure. Direct numerical approach could be a better alternative.