

I - 6

 結晶塑性構成モデルの陰解法アルゴリズムにおける
弾塑性接線係数の比較・検討

 東北大学大学院 学○ 渡邊育夢
正 寺田賢二郎

1. はじめに

金属のミクロなメカニズムに基づく構成モデルとして知られる結晶塑性構成モデルは多結晶体中の結晶粒の構成関係を与えるモデルとしてさまざまな研究で持ちいられている¹⁾。この構成モデルは複数の降伏関数からなり、異方性を持つことが特徴であり、数値計算が困難であり、数々の問題点が指摘され、研究されてきた²⁾。既往の研究では塑性変形の積分において、現れる行列の指数関数を Taylor 展開の第一項までで近似することが一般的である。しかし、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、より効率良く安定的に解くことのできる結晶塑性構成モデルの陰解法アルゴリズムを提案する。また、既往の手法と数値計算で比較することで、提案手法の性能を検証する。

2. 結晶塑性構成モデル

変形勾配の弾塑性乗算分解 $F = F^e F^p$ では、基準配置、現配置に加えて 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 b や Kirchhoff 応力 τ に対して、弾性右 Cauchy-Green 変形テンソル $C^e := F^{eT} F^e$ 、第 2Piola-Kirchhoff 応力 $\hat{S} := F^{e-1} \tau F^{e-T}$ 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が与えられる。

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

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、 $M^{(\alpha)}$ 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 X に関して、時刻 t_n での変形状態 F_{t_n} 、 $F_{t_n}^e$ 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 $\dot{F}^p = L^p F^p$ 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

性部は次のように離散化近似可能である。

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

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

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

となり、弾性変形勾配 F_{τ}^e は

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

と表される。ここで、

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

と定義した。また、行列の指数関数 Q は微分関係

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

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、

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

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。

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

このとき、行列の指数関数 $\tilde{Q}$ の微分関係は次式となる。

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

行列の指数関数 Q の第一近似 (8) は $\theta \Delta t L^p$ 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 Q を用いた定式化を指数近似、その Taylor 展開の第一項までによる $\tilde{Q}$ を用いた定式化を差分近似と呼ぶ。

表-1 Taylor 展開の項数と Mises 応力 (単結晶)

項数	変形 A	変形 B
1	0.4473098	1.772484
2	0.4487932	1.759120
3	0.4485826	1.757290
4	0.4485854	1.757280
差分	0.4470681	1.782313

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、指数近似と差分近似の2つの定式化を比較検討する。数値計算は、Neo-Hookeen 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 差分近似と Taylor 展開による指数関数の近似度

指数近似では Taylor 展開 (7) において十分に高次の項まで扱わなければ微分関係 (6) が成り立たなくなる。一方、差分近似は $k=1$ で近似した場合の微分関係 (9) は常に成立する。ここでは、指数近似で Taylor 展開の項数を変化させたときの解と差分近似の解を比較することで差分近似の近似度を調査する。

変形が生じていない物体のある点において、下記の2つのテンソルで表される変形勾配が生じる状況を想定する。

$$F_A = \begin{bmatrix} 1. + 0.1 & 0. & 0. \\ 0. & 1. & 0. \\ 0. & 0. & 1. \end{bmatrix}, F_B = \begin{bmatrix} 1. & 0.1 & 0. \\ 0.1 & 1. & 0. \\ 0. & 0. & 1. \end{bmatrix} \quad (10)$$

ここで、変形 A は一軸変形、変形 B はせん断変形に対応する。2つの定式化において、この変形により生じる応力状態を表-1に示す。ここで、固有値解析により指数関数を計算し、得られた解を参照解 $\hat{\sigma}_{ref}$ として誤差ノルムを $e = \|\hat{\sigma}_{ref} - \hat{\sigma}\| / \hat{\sigma}_{ref}$ と定義し、項数との関係を図-1に示す。指数近似では Taylor 展開の項数を増やすことで変形 A、B ともに参照解へ収束する。この収束傾向は行列の指数関数 Q 、または、式 (4) の近似度を表すと考えられる。この計算において差分近似は指数近似の Taylor 展開で第一項まで考慮した場合と比較して近似度は同程度かやや悪い。

4.2 指数近似と差分近似の比較

ここでは単一の六面体要素に軸ひずみ 10% の一様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-2に示す。ここで、分割ステップは変位増分の逆数である。指数近似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、差分近

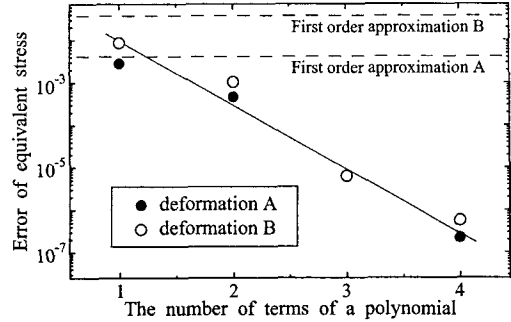


図-1 Taylor 展開の項数と応力状態の誤差

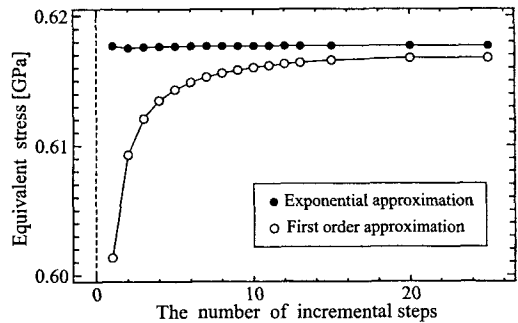


図-2 変形ステップ数 (変位増分) と Mises 応力

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、差分近似も指数近似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、差分近似の定式化は 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。

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差分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) Watanabe, I. and Terada, K.: 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.