

多結晶金属のマルチスケール解析

Multi-scale analysis for polycrystalline metals

渡邊育夢*, 寺田賢二郎**, 松井和己***, 秋山雅義****, 根石豊†

Ikumu WATANABE, Kenjiro TERADA, Kazumi MATSUI, Masayoshi AKIYAMA, Yutaka NEISHI

*学生員 修士(工学) 東北大学大学院工学研究科土木工学専攻 (〒980-8579 仙台市青葉区荒巻字青葉 06)

**正会員 Ph.D. 助教授 東北大学大学院工学研究科土木工学専攻 (〒980-8579 仙台市青葉区荒巻字青葉 06)

***正会員 博士(工学) 産業技術総合研究所 (〒305-8561 茨城県つくば市東 1-1-1)

****Ph.D. 住友金属(株)総合技術研究所 (〒660-0891 兵庫県尼崎市扶桑町 1-8)

†博士(工学) 住友金属(株)総合技術研究所 (〒660-0891 兵庫県尼崎市扶桑町 1-8)

By incorporating the constitutive framework of crystal plasticity into the multi-scale modeling based on the mathematical homogenization theory, we introduce the multi-scale analysis method for polycrystalline metals. The macroscopic material behavior of polycrystalline metals is characterized by the microscopic mechanical behavior affected by the shape and the chain axis of crystal grain, whereas the constitutive model for a single crystal is formulated by means of the multiplicative decomposition of the deformation gradient. Several numerical analyses are conducted to evaluate the macroscopic yield surface of a polycrystalline metal and examine the micro-scale inelastic behavior, which is very complex and inhomogeneous in the microstructure composed of several crystals.

Key Words : Multi-Scale Analysis, Crystal Plasticity, Homogenization Method, Polycrystalline metal

1. はじめに

観測技術の発達により, 多結晶金属のミクロな構造と各結晶粒の結晶方位とを観測することができるようになった。観測されるこれらのミクロな情報がマクロな材料特性を支配することはよく知られており¹⁾, 数値シミュレーションにこれらの情報を漏れなく利用することができれば, 多結晶金属のマクロ材料特性のより正確な評価に結びつくものと期待されている。

多結晶体のマクロ材料特性を得る手法としては, セルフコンシステントモデル^{2)~4)}や森・田中理論⁵⁾が知られている。これらは結晶方位や結晶構造といった結晶粒の特性を考慮することができる。しかし, 結晶粒の形状としては電子顕微鏡で観測できる任意の形状の結晶粒からなる多結晶体の複雑な構造の影響を考慮することは現状では困難である。

他方, 均質化法による two scale モデリング⁶⁾は, 有限要素法により任意のミクロな構造をモデル化できる非均質体の数値解析手法である。しかし, この解析手法で多結晶金属をモデル化するためには結晶方位や結晶構造という結晶のミクロな情報に支配される結晶粒の特性をモデルに導入する必要がある。結晶構造や結晶方位をパラメータを用いた弾塑性構成モデルは古くから研究が進められている⁷⁾。Asaro により定式化された単結晶のすべりに基づく弾塑性構成モデルは有限変形に一般化された代表的な結晶塑性構成モデルであ

る⁸⁾。この構成モデルは結晶の規則正しい原子配列から Schmid 則に基づき弾塑性構成モデルとして現象論的に定式化したものであり, これによれば結晶方位と結晶構造に応じた結晶粒の挙動を再現できる。

単結晶の塑性挙動を反映させる弾塑性構成モデルと two scale モデリングを併用することで観測される材料のミクロな情報を用いた多結晶金属のマクロ力学応答の評価が可能となると考えられる。Miehe らは単結晶のすべりに基づく構成モデルを独自に定式化し, 均質化法に基づく two scale モデリングを用いて多結晶金属の数値解析を行った⁹⁾。彼らの報告は解析手法の提案を目的としており, 計算例としては簡単なものに留まっている。

そこで本研究では, 変形勾配の乗算分解に基いて定式化した two scale モデリング¹⁰⁾と単結晶のすべりに基づく弾塑性構成式を用いて, 多結晶スケールにおける異方的な塑性変形挙動に着目した数値解析を行い, 考察を与える。

2. 多結晶金属のマルチスケール解析法

ここでは多結晶金属のマルチスケール解析手法の定式化を示す。この手法は単結晶のすべりに基づく弾塑性構成モデルを均質化理論による two scale モデリングのミクロ構造に導入したものである。

2.1 均質化理論に基づく two scale モデリング

ミクロな非均質体に対する一般化収束論¹¹⁾を用いた均質化法に基づく有限変形マルチスケールモデリングを適用する¹⁰⁾.

観察できないほど非常に微細な非均質性を有する物体を考え、その非均質性が代表長さ ϵ を有し周期的に分布する代表体積要素 (ユニットセル) によって特徴づけられているものと仮定する. この物体全体の n_{dim} 次元領域 $B_0^e \subset \mathcal{R}^{n_{\text{dim}}}$ を基準配置として考えると、領域内の物質点は位置ベクトル $X \in B_0^e$ によって表すことができる. また、この物体の現配置における位置ベクトル $x \in B^e$ は運動を表す写像 $\varphi^e : B_0^e \rightarrow B^e$ によって $x = \varphi^e(X)$ と関係づけられている.

均質化理論の一般的な手続きに従って、この非均質体の占める領域 B_0^e を非均質性を持たない全体領域 B_0 と、非均質性が定義される微視領域 $\epsilon\mathcal{R}^{n_{\text{dim}}}$ という2つのスケールが異なる領域に分離する. このとき、微視領域 $\epsilon\mathcal{R}^{n_{\text{dim}}}$ は、 $\mathcal{Y}_0 \subset \mathcal{R}^{n_{\text{dim}}}$ で定義されるユニットセルを繰り返し配置することによって表現できるものと仮定すると、非均質な全体領域 B_0^e は両者の積空間 $B_0 \times \epsilon\mathcal{R}^{n_{\text{dim}}}$ として見なすことができる. また、それぞれの領域における力学挙動を記述するために、マクロスケール $X \in B_0$ とミクロスケール $Y \in \mathcal{Y}_0$ という2つの異なるスケールを導入し両者を $Y = X/\epsilon$ と関係づけると、変位や第1Piola-Kirchhoff 応力、変位勾配などはそれぞれ $u(X, Y)$, $P(X, Y)$, $H(X, Y) = F(X, Y) - I$ のように2変数の関数として表現することができる. ここに、 $F(X, Y)$ は変形勾配、 I は2階の単位テンソルである. また、ユニットセルの周期的な配置を考慮して、これらの変数がミクロスケール Y について「 $\mathcal{Y}_0$ -周期的」であると仮定する.

以上の仮定により、導出されるミクロとマクロの境界値問題は、この代表体積を介して従属関係にあることになり、例えば、非均質弾性体の平均密度 $\rho^H(X)$ 、第1Piola-Kirchhoff 応力 $\tilde{P}(X)$ 、変位勾配 $\tilde{H}(X)$ は、マクロスケール X を測度としてミクロスケール $Y = X/\epsilon$ ではそれぞれ $\rho(X, Y)$, $P^0(X, Y)$, $H^0(X, Y)$ により表され、両者は、

$$\rho^H(X) := \frac{1}{|\mathcal{Y}_0|} \int_{\mathcal{Y}_0} \rho(X, Y) dY = \langle \rho(X, Y) \rangle_{\mathcal{Y}_0} \quad (1)$$

$$\tilde{P}(X) := \frac{1}{|\mathcal{Y}_0|} \int_{\mathcal{Y}_0} P^0(X, Y) dY = \langle P^0(X, Y) \rangle_{\mathcal{Y}_0} \quad (2)$$

$$\tilde{H}(X) := \frac{1}{|\mathcal{Y}_0|} \int_{\mathcal{Y}_0} H^0(X, Y) dY = \langle H^0(X, Y) \rangle_{\mathcal{Y}_0} \quad (3)$$

なる関係にあることが示される. ここで、ある物質点 $\bullet$ の参照配置におけるユニットセル内体積平均を

$$\langle \bullet \rangle_{\mathcal{Y}_0} := \frac{1}{|\mathcal{Y}_0|} \int_{\mathcal{Y}_0} \bullet dY$$

と表記した. また、変形勾配についても以下のような同様の関係が成り立つ.

$$\begin{aligned} \tilde{H}(X) &= \langle H^0(X, Y) \rangle_{\mathcal{Y}_0} = \langle F^0(X, Y) - I \rangle_{\mathcal{Y}_0} \\ &= \tilde{F}(X) - I \end{aligned} \quad (4)$$

さらに、空間表記の変位勾配を $h^0 = H^0[F^0]^{-1}$ とし、

$$J_Y(Y) := \det(H^0(X, Y) + 1) = \det F^0(X, Y) > 0 \quad (5)$$

によるミクロの体積変換 $dy = J_Y dY$ を定義すると、ミクロの Kirchhoff 応力 $\tau^0 = J_Y \sigma^0$ についての自己つり合い問題は、

$$\int_Y \tau^0(x, y) : \nabla_y \eta^1 \frac{dy}{J_Y} = 0, \quad \forall \eta^1 \in W_{\text{per}}^{1,p}(\mathcal{Y}), \quad (6)$$

$$h^0(x, y) = \nabla_x u^0(x) \tilde{F}^{-1} + \nabla_y u^1(x, y) \quad (7)$$

で与えられる. ここで、 $W^{1,p}(\mathcal{Y})$ を1階の微分が $L^p(\mathcal{Y})$ に属する空間で

$$W_{\text{per}}^{1,p}(\mathcal{Y}) = \{ \eta^1 \mid \eta_i^1 \in W^{1,p}(\mathcal{Y}); \mathcal{Y}\text{-periodic} \}$$

と定義した. また、ミクロの Kirchhoff 応力 τ^0 は後述の弾塑性構成式により与えられる.

一方、現配置 B ($dx = \tilde{J}dX$) におけるマクロ境界値問題は、

$$\int_B \tilde{\tau} : \nabla_x \eta^0(x) \frac{dx}{\tilde{J}} - g_{\text{ext}}(\eta^0) = 0, \quad \forall \eta^0 \in W_0^{1,p}(B) \quad (8)$$

$$\tilde{h}(x) = \langle h^0 \rangle = \nabla_x u^0(x) \tilde{F} \quad (9)$$

$$\tilde{\tau}(x) = \langle \tau^0 \rangle \quad (10)$$

で与えられる. ここに、 g_{ext} は外力項であり、 $W_0^{1,p}(B)$ は1階の部分関数が $L^p(B)$ に属し、幾何学的境界において零になるような関数の空間である.

2.2 単結晶のすべりに基づく弾塑性構成モデル

多結晶金属を対象とするときミクロスケールは多結晶スケールとなる. この領域での力学挙動を再現するために単結晶のすべりに基づく弾塑性構成モデル⁹⁾を適用する.

金属結晶の塑性変形は主に単結晶のすべりにより生じる. 塑性流れ中に結晶格子は変形せず弾性変形のみで変形すると仮定すると、結晶の弾塑性変形は変形勾配の弾塑性乗算分解として

$$F = F^e F^p \quad (11)$$

と書くことができる.

単結晶のすべりの進む方向とすべりの生じる面の組合せはすべり系と呼ばれる. 以下では n_{slip} 個のすべり系を想定する. あるすべり系 α において、基準配置におけるすべり方向の単位ベクトルを $s_0^{(\alpha)}$ 、すべり面の単

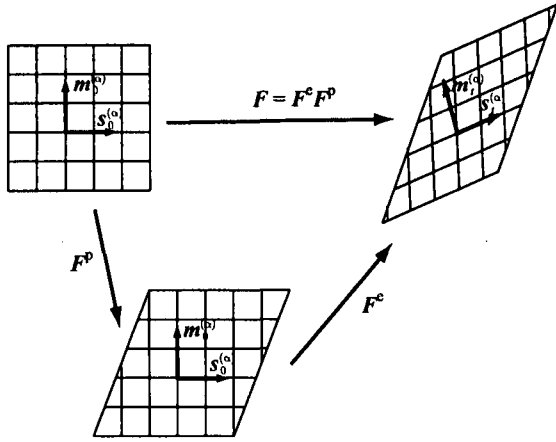


図-1 単結晶の弾塑性変形

位法線ベクトルを $m_0^{(\alpha)}$ と定義する。これらのベクトルは単結晶の変形と共に変形し、現配置における両ベクトルは直交性が変形後も成立することを考慮すると

$$s_i^{(\alpha)} = F^c s_0^{(\alpha)} \quad (12)$$

$$m_i^{(\alpha)} = F^{c-T} m_0^{(\alpha)} \quad (13)$$

と表される。図-1 はこの変形過程を模式的に表したものである。

単結晶のすべりの降伏関数はすべり系ごとに決められる。応力状態 τ と α 番目のすべり方向ベクトル $s_i^{(\alpha)}$ とすべり面の法線ベクトル $m_i^{(\alpha)}$ が与えられたとき、この α すべり系の降伏関数は次のように定義できる。

$$\phi^{(\alpha)} := s_i^{(\alpha)} (\tau m_i^{(\alpha)}) - \tau_Y^{(\alpha)} + q_i^{(\alpha)} \quad (14)$$

$$= \tau^{(\alpha)} - \tau_Y^{(\alpha)} + q_i^{(\alpha)} \leq 0 \quad (15)$$

ここに、 $\tau^{(\alpha)}$ はすべり方向への分解せん断応力、 $\tau_Y^{(\alpha)}$ は降伏応力であり、 $q_i^{(\alpha)}$ は硬化パラメータである。降伏関数が降伏条件 $\phi^{(\alpha)} = 0$ を満たしたときに塑性負荷状態となる。また、 $s_i^{(\alpha)}$ 、 $m_i^{(\alpha)}$ は現配置のベクトルなので参照配置のベクトル $s_0^{(\alpha)}$ 、 $m_0^{(\alpha)}$ で式 (14) の第一項を表すと以下のようになる。

$$\tau^{(\alpha)} = s_0^{(\alpha)} \{ (C^e \hat{S}) m_0^{(\alpha)} \} \quad (16)$$

$$= (C^e \hat{S}) : \text{sym}[s_0^{(\alpha)} \otimes m_0^{(\alpha)}] \quad (17)$$

$$= \Sigma : P^{(\alpha)} \quad (18)$$

ここで、 C^e は弾性右 Cauchy-Green 変形テンソルであり、 $\hat{S}$ は中間配置における第 2Piola-Kirchhoff 応力である。また、新たに中間配置における応力と変形状態からなる新たなテンソル Σ と参照配置でのすべり系からなる Schmid テンソル $P^{(\alpha)}$ を次のように定義した。

$$\Sigma = C^e \hat{S}$$

$$P^{(\alpha)} = \text{sym}[s_0^{(\alpha)} \otimes m_0^{(\alpha)}]$$

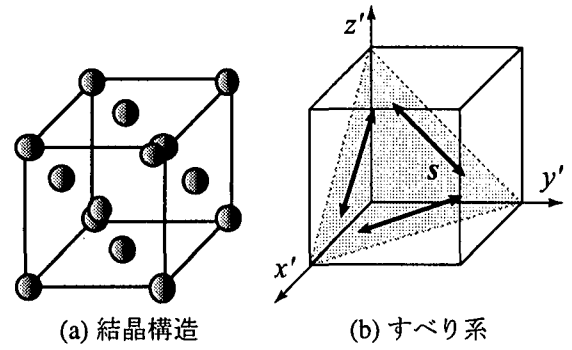


図-2 FCC 金属

さらに、以下のような硬化則を仮定する。

$$q_i^{(\alpha)} := \sum_{\beta=1}^{n_{\text{slip}}} h_{\alpha\beta} \xi_i^{(\beta)} \quad \text{for } \alpha = 1, 2, \dots, n_{\text{slip}} \quad (19)$$

ここで、 $\xi_i^{(\alpha)}$ は塑性履歴パラメータ (α すべり系のすべり量) であり、 $h_{\alpha\beta}$ は硬化定数で $h_{\alpha\alpha}$ (自己硬化)、 $h_{\alpha\beta} (\alpha \neq \beta)$ (潜在硬化) の 2 種類を考える。したがって、 α すべり系の降伏関数は

$$\phi^{(\alpha)} = \Sigma : P^{(\alpha)} - \tau_Y^{(\alpha)} - \sum_{\beta=1}^{n_{\text{slip}}} h_{\alpha\beta} \xi_i^{(\beta)} \quad (20)$$

と表すことができる。この降伏関数はすべり系の数 n_{slip} 個存在する。複数の降伏関数を持つ問題における関連流れ則¹²⁾から流れ則は以下のように与えられる。

$$d^p = \sum_{\alpha=1}^{n_{\text{slip}}} \gamma^{(\alpha)} \text{sym}[s_\tau^{(\alpha)} \otimes m_\tau^{(\alpha)}] \quad (21)$$

$$\dot{\xi}_\tau^{(\alpha)} = \gamma^{(\alpha)}, \quad \text{for } \alpha = 1, 2, \dots, n_{\text{slip}} \quad (22)$$

ここで、 $\gamma^{(\alpha)}$ は塑性パラメータ (α すべり系のすべり量増分) である。また、Kuhn-Tucker の負荷/除荷条件は

$$\phi^{(\alpha)} \gamma^{(\alpha)} = 0, \quad \phi^{(\alpha)} \leq 0, \quad \gamma^{(\alpha)} \geq 0, \quad \text{for } \alpha = 1, 2, \dots, n_{\text{slip}} \quad (23)$$

である。

2.3 結晶構造の特性を反映したマルチスケール解析手法

単結晶のすべりに基づく弾塑性構成モデルでは、弾性定数、ポアソン比、降伏値、硬化定数に加えて結晶構造や結晶方位が材料特性を決める。この構成モデルで重要な役割を果たすすべり系は結晶構造によりその種類が決まり、結晶方位により向きが規定される。例えば、アルミニウムや SUS の結晶構造は図-2(a) のような面心立方 (FCC) 構造である。この結晶構造におけるすべり系はひとつのすべり面に関して図-2(b) のような 3 つのすべり系が存在し、構造の対称性から同様な

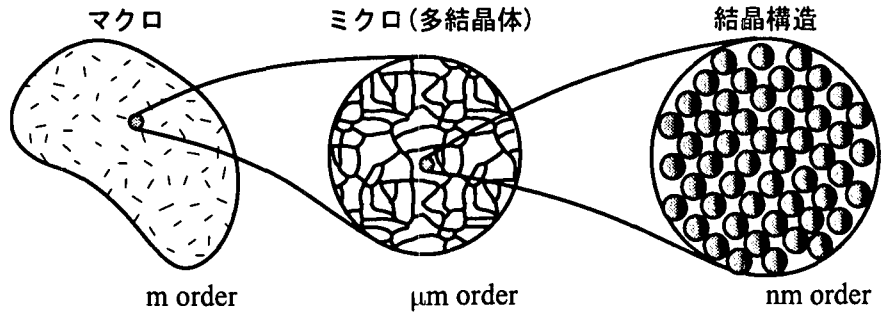


図-3 多結晶体金属のマルチスケール解析

すべり面が4面あるので合計12組のすべり系が存在する¹。

このように、単結晶のすべりに基づく構成モデルは結晶粒のさらにミクロな構造の特性を反映させるものであり、これを two scale モデリングにより多結晶体構造の内部の詳細な応力評価に用いることにより、図-3に示すような3つの異なるスケールを結ぶマルチスケール解析手法を構築したことになる。

3. マルチスケール解析によるマクロ初期降伏面

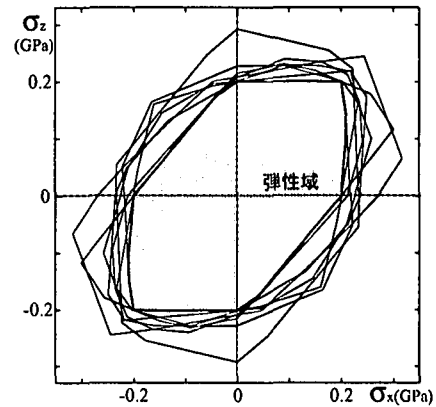
ここでは、マルチスケール解析法によって結晶粒の集合体としてモデル化される多結晶体モデルのマクロな初期降伏面を求め、その発現メカニズムについて考察する。

3.1 解析モデルの設定

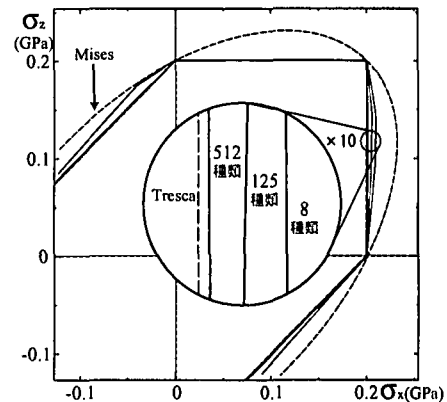
単結晶のすべりに基づく構成モデルは結晶方位によって結晶粒の塑性特性が変化する。多結晶体内における各結晶粒は異なる結晶方位を持つことから塑性負荷状態となる応力状態は異なる。ここではミクロスケールにおいて弾性材料特性が同じ複数の結晶粒を想定し、いずれかの結晶粒に塑性が生じたときをマクロな初期降伏として定義する。このモデルは弾性状態において均質体となるので、定義した初期降伏は非均質性が発現する時点となる。この初期降伏面をマクロに様々な応力状態を与えることで求める。対象材料としてはFCC金属を想定し、弾塑性構成式にはFCC構造のすべり系(図-2(b))を用いる。また、結晶方位は乱数によって与える。

3.2 解析結果

8種類の結晶粒の初期降伏面は $\sigma_x - \sigma_z$ 面ではそれぞれ図-4(a)のようになる。マクロな初期降伏面は8つの降伏面の最も内側に位置する部分となる。降伏面は与えられた方位によって大きく異なるが、多結晶体とし



(a) 結晶粒の降伏面



(b) 降伏条件との比較

図-4 多結晶体の降伏面

て重ね合わせると $\sigma_x : \sigma_z = 1 : 1$ を軸とする楕円に近い形状になる。この形状は金属のマクロな塑性降伏条件として知られるTrescaやMisesの降伏条件による形状である。8種類、125種類、512種類の結晶粒をミクロスケールに考えた場合のマクロな初期降伏面とTrescaとMisesの降伏条件による降伏面を図-4(b)に示す。多数の結晶粒を想定することで初期降伏面はTrescaの降伏条件に近づく。単結晶のすべりに基づく弾塑性構成モデルではすべり面の表面力のすべり方向成分の値により降伏判定が行われる。ここではどの結晶粒・すべり系の分解降伏応力も等しいとしているので結晶粒を増やすことによって結晶方位による方向依存性が消え、

¹ 単結晶のすべりに基づく弾塑性構成モデルでは正負の向きを考慮するため、すべり系は24組として扱う。

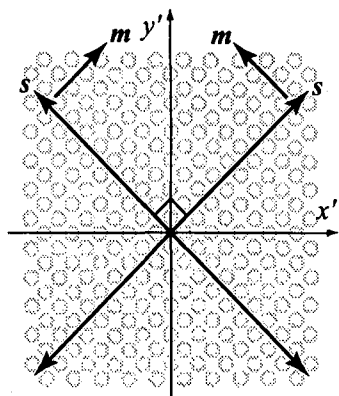


図-5 2次元すべり系

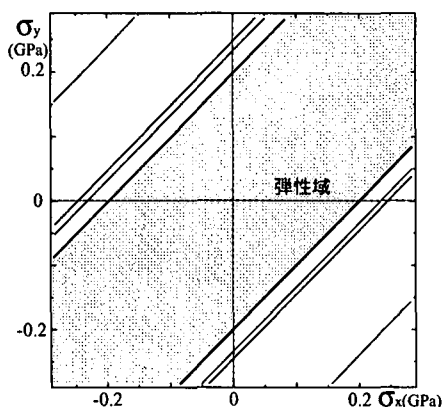


図-6 2次元すべり系の降伏面

どの応力比でも塑性が生じるせん断応力が一定となり、Tresca の降伏条件と一致する。

Bishop and Hill はマクロな降伏を想定される全ての結晶粒が塑性状態になったときに定義し、降伏面を理論的に導いた¹³⁾。この降伏面は Mises と Tresca の中間に位置し、実験において観測される降伏面と対応している。換言すれば、実験で得られる多結晶金属の降伏を数値解析で再現するためにはここで示したひとつの結晶粒が塑性負荷状態になるというような設定のみで表現できるものではなく、結晶粒の塑性により発現する多結晶体の非均一な変形挙動を考慮しなければならない。次節ではこの塑性状態における多結晶体の挙動について考察する。

4. 多結晶体の塑性挙動のシミュレーション

ここではミクロスケールにおける多結晶体の塑性挙動に着目し、2次元モデルに対して数値解析を行う。

4.1 解析モデルの設定

(1) 弾塑性構成モデル

2次元モデルに単結晶のすべりに基づく弾塑性構成モデルを用いるためには、平面の仮定からすべり系の2つのベクトルが想定する面内に存在しなければなら

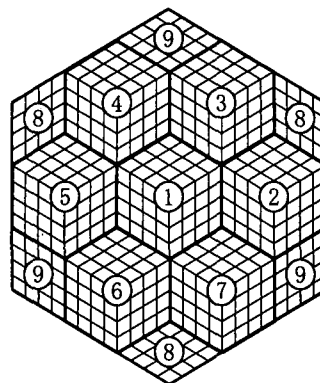


図-7 2次元解析モデル

弾性係数	E (GPa)	200
ポアソン比	ν	0.3
降伏分解応力	$\tau_Y^{(\sigma)}$ (GPa)	0.1
自己硬化定数	$h_{\alpha\alpha}$ (GPa)	0.01
潜在硬化定数	$h_{\alpha\beta} (\alpha \neq \beta)$ (GPa)	0.1

表-1 材料定数

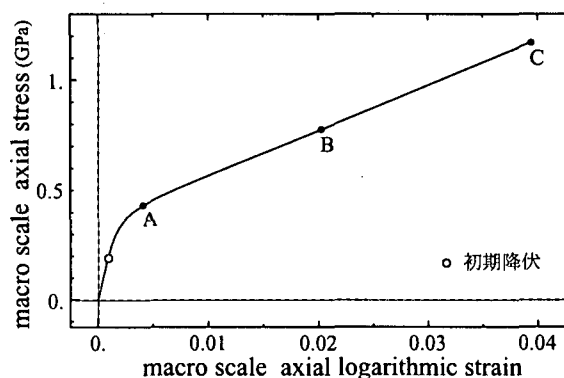


図-8 応力-ひずみ関係

ない。ここでは図-5に示すような直交した2つのすべり方向からなるすべり系を用い、結晶方位はこれを面内に回転させることにする。

2次元モデルの降伏面は図-6のような降伏面となり、平面に関する等方応力状態ではせん断応力が生じないため、塑性は生じない。このモデルでは降伏面は常に同一形状であり、結晶方位は $\sigma_x - \sigma_y$ 面において原点と降伏面の距離を決めるパラメータとなる。

(2) ミクロ構造モデル

有限要素モデルとして9つの同形状の正六角形の結晶粒からなる図-7のモデルを用いる。このモデルは対辺同士が周期性を持つように配置されており、図中の数字は結晶方位の種類を表す。材料定数は表-1のように与え、各結晶粒の結晶方位は乱数により与えることにする。外力は図中の横方向にマクロな一様引張りを与える。

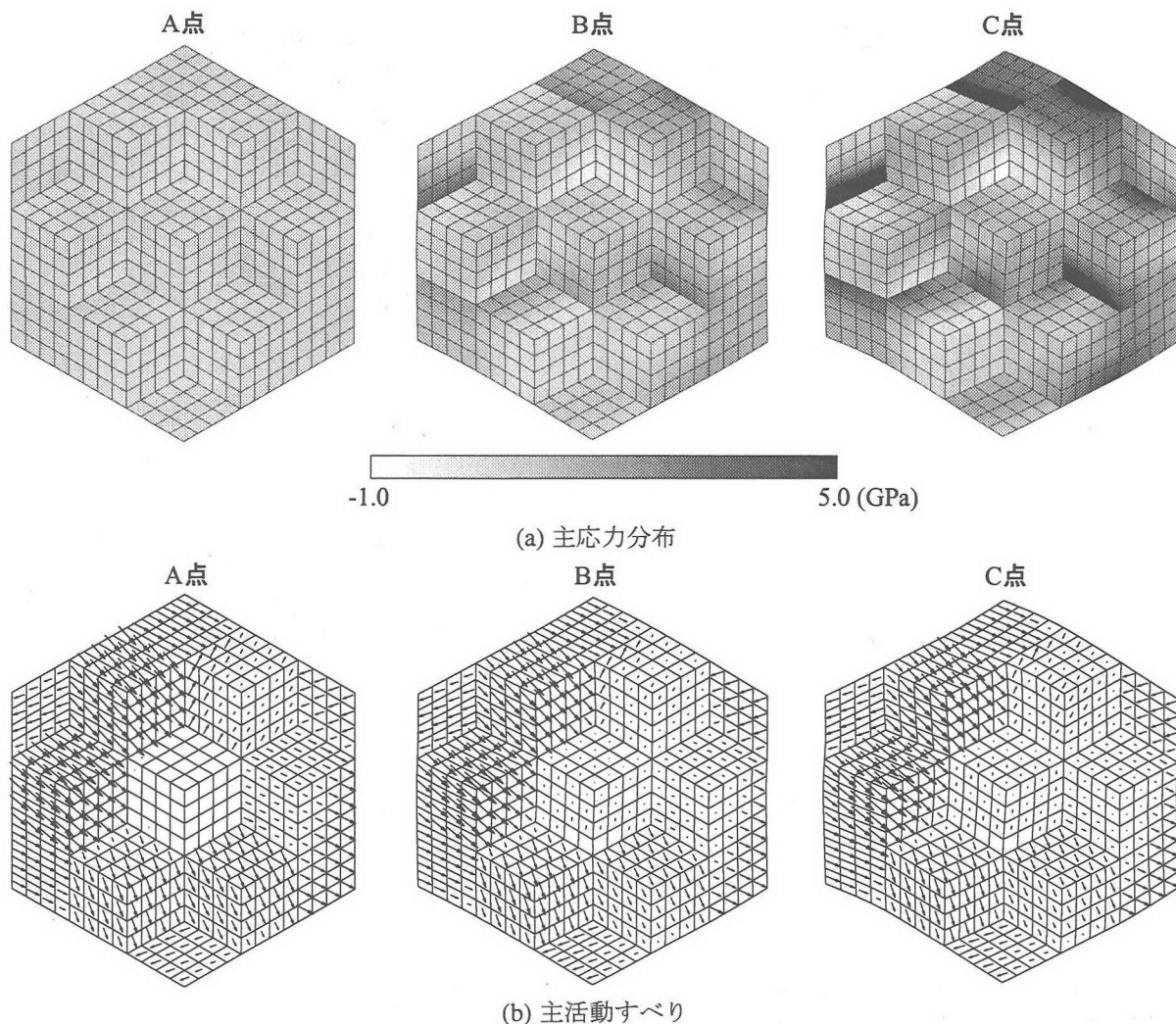


図-9 解析結果

4.2 解析結果

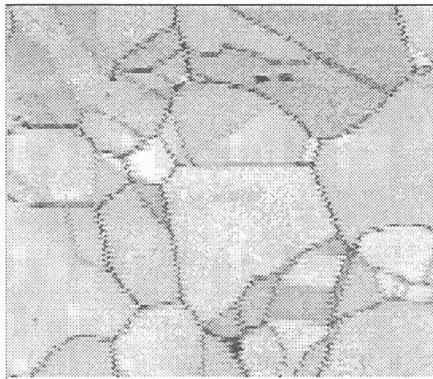
マクロ応答として得られる軸方向応力-軸方向ひずみ関係は図-8となる。図中の白丸は前節の定義に基づく初期降伏点である。図中に示す各点の主応力分布と主活動すべり系のすべり方向ベクトルは図-9のようになる。このベクトルは要素内に生じた活動すべり系の中で最もすべり量の大きいすべり系のすべり方向を示しており、その長さはマイクロ構造の有限要素モデル内の相対的なすべり量を反映している。塑性挙動初期である図-8中のA点において結晶粒ごとのすべり挙動の差により一様変形状態が崩れているが、この段階では同じ結晶粒内ではすべり量ともにほぼ同一である。塑性変形が進展したB点では周囲の結晶粒の変形状態の影響を受けることにより、結晶粒内でのすべり量に差異が生じる。さらに塑性が進展することによりC点の主応力状態からわかるように非常に複雑かつ不均一な応力状態となる。与えている外力は一樣引張りであるにも関わらず、すべりが生じることで発生するこの非均一性により圧縮応力の生じる結晶粒も観察される。また、すべりが生じていない結晶粒は応力が高くなって

いる。これはすべりによる塑性変形が生じない等方応力状態となった場合、図-6に示したように弾性変形を続けるためである。

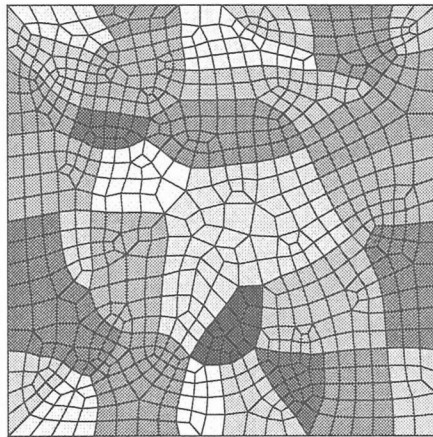
また、結晶粒の境界に応力が集中する傾向が見られる。これは結晶粒がそれぞれ方向性の異なる塑性変形を起こそうとするが結晶粒界面において変位の連続性を保とうとするためにその近傍で大きな変形が生じた結果である。転位論では結晶粒界で転位の運動が拘束され、結晶粒界に転位が蓄積すると言われており、結晶粒界の存在は金属の強度を支配する大きな要因となりうる¹⁾。電子顕微鏡による観測でも塑性進展により結晶粒界に欠陥が蓄積することが確認されている¹⁴⁾。ここでの解析結果で見られる応力やひずみの集中は、多結晶金属のマイクロ構造を考慮した有限要素解析で結晶粒界の材料特性への影響をシミュレートできる可能性を示すものであり興味深い。

4.3 多結晶体モデルの解析

最後に、任意の結晶粒形状からなる多結晶体モデルの解析を示す。解析モデルは電子顕微鏡により観測さ



(a) 電子顕微鏡画像



(b) 有限要素モデル

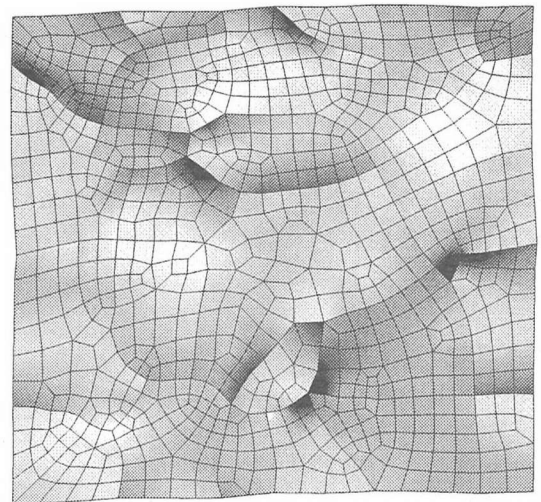
図-10 多結晶体の構造

れた図-10(a) から 20 種の結晶粒からなる有限要素モデル図-10(b) を作成した。このモデルも対辺同士が周期性を持つように配置されており、材料定数、結晶方位、外力は先のモデルと同様に与える。このモデルに対する解析結果として先の解析と同様の外力をひずみ 4% まで与えた時の主応力分布、主活動すべりベクトルを図-11 に示す。

有限要素モデルにおける構造の複雑さを反映して、同一結晶粒内で主活動すべり方向が異なるものが存在するなど、先の結果と比較してもさらに力学挙動は複雑化する。このような有限要素モデルはある多結晶体の 1 例に過ぎないが、開発した手法によれば森・田中理論のような解析的手法では考慮することができない任意の結晶粒形状からなる多結晶体の構造とそのマクロ応答の関係を評価することができ、多結晶金属のマクロ材料挙動の発現メカニズムの解明にも有用であると考ええる。

5. まとめ

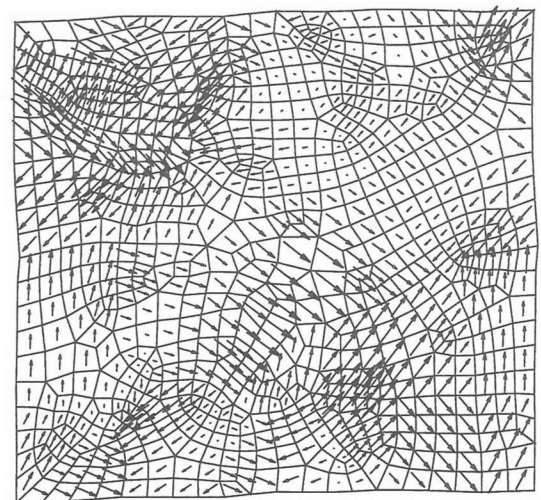
本研究では、多結晶金属のミクロな塑性挙動に着目したマルチスケール解析手法を提案し、マクロな降伏点と多結晶体スケールにおける塑性挙動に着目した数値



-0.5

4.0 (GPa)

(a) 主応力分布



(b) 主活動すべり

図-11 多結晶体モデル解析結果

解析を行った。この解析結果より、以下の知見を得た。

(1) 多結晶体内のひとつの結晶粒が塑性負荷状態になる応力状態は最大せん断で定義される Tresca の降伏条件と一定する。マクロに観測される降伏は結晶粒レベルでは塑性が進展している状態であり、数値解析で評価するためには塑性後の解析を行わなければならない。

(2) マルチスケール解析で結晶粒の塑性特性の違いにより塑性進展後はミクロスケールでの非均質性が高まり、結晶粒界に応力が集中することが示された。これにより本マルチスケール解析手法を適用することで結晶粒界の力学挙動とマクロ材料特性の関係を評価し得るものと期待される。

(3) 任意の結晶粒形状からなる複雑な多結晶体構造では、さらにミクロ構造内の塑性変形挙動はさらに複雑化する。

開発したマルチスケール解析手法では、多結晶体の

構造や結晶方位などの幾何学的な特性も入力データとなるが、実際の観測データを具体的にどのように数値モデルに反映するべきかということが今後の検討課題である。

謝辞

本研究を行うにあたり、東北大学大学院工学研究科の岩熊哲夫教授に貴重なご意見を頂きました。ここに感謝の意を表します。

参考文献

- 1) C. R. Barrett, W. D. Nix and A. S. Tetelman: *The Principles of Engineering Materials*, Prentice Hall, 1973.
- 2) Kröner, E.: Zur plastischen Verformung des Vielkristalls, *Act. Metall.*, Vol. 9, pp.155–161, 1961.
- 3) Budiansky, B. and Wu, T. T.: Theoretical prediction of plastic strains of polycrystal, *Proc. 4th. Congr. Appl. Mech.*, Vol. 2, pp.1175–1185, 1962.
- 4) Hill, R.: Continuum micro-mechanics of elasto-plastic polycrystals, *J. Mech. Phys. Solids*, Vol. 13, pp.89–101, 1965.
- 5) Mori, T. and Tanaka, K.: Average stress in matrix and average energy of materials with misfitting inclusions, *Act. Metall.*, Vol.21, pp.571–574, 1973.
- 6) Terada, K. and Kikuchi, N.: A class of general algorithms for multi-scale analyses of heterogeneous media, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, Vol.190, pp.5427–5464, 2001.
- 7) Gotoh, M.: A finite element formulation for large elastic-plastic deformation analysis of polycrystals and some numerical considerations on polycrystalline plasticity, *Int. J. Numer. Methods. Engrg.*, Vol. 12, pp.101–114, 1978.
- 8) Asaro, R. J.: Crystal plasticity, *J. Appl. Mech.*, Vol.50, pp.921–934, 1983.
- 9) Miehe, C., Schröder, J. and Schotte, J.: Computational homogenization analysis in finite plasticity Simulation of texture development in polycrystalline materials, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, Vol.171, pp.387–418, 1999.
- 10) Terada, K., Saiki, I., Matsui, K. and Yamakawa, Y.: Two-scale kinematics and linearization for simultaneous two-scale analysis of periodic heterogeneous solids at finite strain, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, in press.
- 11) Allaire, G.: Homogenization and two-scale convergence, *SIAM J. Math. Anal.*, Vol.23, pp.1482–1518, 1992.
- 12) Simo, J. C.: Numerical analysis and simulation of plasticity, *Handbook of numerical analysis*, Elsevier Science, Vol.6, pp.183–499, 1998.
- 13) Bishop, J. F. W. and Hill, R.: A theory of the plastic distortion of a polycrystalline aggregate under combined stresses, *Phil. Mag.*, Vol. 42, pp.414–427, 1951.
- 14) Akiyama, M., Neishi, Y., Adachi, Y. and Terada, K.: Trigger for the occurrence of grain coarsening phenomenon of BS304S31 austenite stainless steel under small plastic strain at high temperature, *Engineering Computations*, in press.

(2003 年 4 月 18 日 受付)