

多結晶金属のマルチスケール解析によるマクロ材料特性評価 における有限要素の性能

The importance of finite element performance for characterizing the macroscopic material behavior
with two-scale finite element analysis for polycrystalline metals

渡邊育夢*, 寺田賢二郎**, Eduardo Alberto de Souza Neto***, Djordje Perić****
Ikumu WATANABE, Kenjiro TERADA, Eduardo Alberto de SOUZA NETO, Djordje PERIĆ

*正会員 博士(工学) 研究時 日本学術振興会特別研究員(PD) 東北大学大学院工学研究科土木工学専攻
現在 客員研究員 (株)豊田中央研究所 (〒480-1192 愛知郡長久手町大字長湫字横道 41-1)

**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 6-6-06)

***非会員 Ph.D. Lecturer Civil and Computational Engineering Research Centre, Swansea University (Swansea SA2 8PP)

****非会員 Ph.D. Professor Civil and Computational Engineering Research Centre, Swansea University (Swansea SA2 8PP)

We examine the finite element performance at micro scale for the evaluation of the macroscopic material behavior and strength with two-scale finite element analysis method incorporating the elastic-plastic-damage constitutive model for crystal grain. In the two-scale analysis, the intragranular deformations are non-homogeneous as a result of intergranular deformation even if the macroscopic deformation is simply homogeneous. Hence it is vital that the effect of finite element mesh discretizing each grain is examined in order to characterize the macroscopic material behavior. And then the two-scale analyses are conducted to assess the convergence of solutions with mesh refinement of each grain. Besides numerical simulations obtained with the F-bar element and the standard enhanced assumed strain element are compared against the standard displacement-based isoparametric element so as to assess the importance of finite element formulation on computational results.

Key Words : Finite Element Method, Homogenization method, Heterogeneous Media, Nonlinear problem, Polycrystalline metals

1. はじめに

金属材料は一般にミクロスケールでは多結晶組織によって構成されており、結晶粒およびその集合体としてのミクロな変形挙動を評価することで、複雑なマクロ材料挙動を数値的に評価することができる。特に、この多結晶金属のマルチスケールモデリングの概念は結晶粒の持つ異方的な変形特性に起因する多結晶金属のマクロな異方性の評価と理解にしばしば用いられてきた^{1),2)}。さらに、近年では、この手法を用いて、Hall-Petchの関係^{3),4)}として知られる強度特性の結晶粒径依存性や結晶粒の局所的な損傷によるマクロ剛性の低下の評価しようとする試みがなされている。これらの研究では、多結晶組織の幾何構造を有限要素によってモデル化し、結晶粒の材料挙動を反映した構成モデルを適用するアプローチが一般的であり、その拡張性から材料開発などへの応用が期待されている。

Taylor モデル⁵⁾などの古典的な多結晶金属のマルチスケールモデリングと比較して、有限要素法に基づくこの手法は結晶粒内部の変形状態を考慮できることが特徴である。粒内の変形状態は周囲の結晶粒の影響を受けて、非均質な状態となり、特に、結晶粒界付近は変形が集中する⁶⁾。実際、結晶粒内の非均質変形を十分に

考慮することでマクロ材料挙動が変化することが確認されている⁷⁾。これは、結晶粒内の変形状態を有限要素法で十分に再現できないため、その解に誤差が含まれることが原因であり、有限要素法の一般的な性質から考えると、要素サイズを小さくするか、補間関数の多項式の次数を増加させることによって解を改善することができる。有限要素法は数学的に導出される支配方程式の近似解を求めているにすぎず、厳密解に十分に近い解を得るために、どの程度の要素分割を必要とするかを解析者は認識しておかねばならない。しかしながら、多結晶金属のマルチスケールモデリングでは結晶粒内の要素分割数を増加させることによる解の収束傾向を調査した研究はこれまでない。

また、一般的な仮想仕事の原理に基づく低次の近似関数を用いた有限要素(以下、単に低次要素と呼ぶ。)では、材料が非圧縮性に近い変形特性を持つ場合、有限要素の性能は著しく低下する。これは主にゴム材料に代表される非圧縮弾性体の数値解析で重要視される事象であるが、結晶塑性構成モデルを含む金属塑性モデルも一般に体積変化を伴わない塑性変形となるため、同様な傾向が見られる。この現象はロッキングと呼ばれ、低次要素で採用されている形状関数では非均質変

形とともに要素の等体積変形を再現することができないことが原因である。したがって、単に高次の近似関数を採用することで、一般にこの問題は回避することができる。しかし、要素を高次化するためには要素内の節点や応力評価点が増えてしまうことから、産業的な数値シミュレーションでは低次要素が好まれることが多く、これらを変化させずにロッキングを回避する手法が提案されてきた。例えば、有限変形問題では

- u/p 2 変数混合法⁸⁾
- B-bar 法⁹⁾の幾何学的非線形問題への拡張¹⁰⁾
- Enhanced assumed strain (EAS) 法¹¹⁾
- F-bar 法^{12),13)}

などが知られている。ロッキングは要素分割数を増やすことで改善することはできないため、有限要素に関する検討において、これらの要素技術と低次要素との比較から、しばしば有用な情報を得ることができる。

そこで、本研究では多結晶金属のマルチスケール解析において、結晶粒内の要素分割数に関する解、特にミクロスケールの材料挙動の平均として得られるマクロ材料特性および強度特性の収束状況を調査する。この際、ロッキングを回避するために、変形勾配の体積変化成分を修正する F-bar 要素と拡張変位勾配を追加する EAS 要素を適用した際の解と比較し、ミクロスケールの要素性能の影響を調査する。

2. 結晶粒の弾塑性損傷構成モデル

2.1 2 変数境界値問題

two-scale 運動学により幾何学的非線形性を考慮した均質化法に基づくマルチスケールモデリング¹⁴⁾では、現配置のミクロ領域 $\mathcal{Y} \subset \mathcal{R}^{n_{\text{dim}}}$ とマクロ領域 $\mathcal{B} \subset \mathcal{R}^{n_{\text{dim}}}$ において、釣り合い式がミクロおよびマクロスケールの位置ベクトル $y \in \mathcal{Y}$, $x \in \mathcal{B}$ を変数として以下のように与えられる。

- ミクロ構造の境界値問題：

$$\int_{\mathcal{Y}} \tau^0(x, y) : \nabla_y \eta^1 \frac{dy}{J_y} = 0, \quad \forall \eta^1 \in \mathcal{V}_y^{\text{per}} \quad (1)$$

$$\mathcal{V}_y^{\text{per}} = \left\{ v : \mathcal{Y} \mapsto \mathcal{R}^{n_{\text{dim}}} \mid v_i \in W^{1,p}; \mathcal{Y}\text{-periodic} \right\}$$

$$\tau^0(x, y) \text{ [determined by constitutive equations]} \quad (2)$$

- マクロ構造の境界値問題：

$$\int_{\mathcal{B}} \tilde{\tau}(x) : \nabla_x \eta^0 \frac{dx}{\tilde{J}} - g_{\text{ext}}(\eta^0) = 0, \quad \forall \eta^0 \in \mathcal{V}_{\mathcal{B}} \quad (3)$$

$$\mathcal{V}_{\mathcal{B}} = \left\{ v : \mathcal{B} \mapsto \mathcal{R}^{n_{\text{dim}}} \mid v_i \in W^{1,p}, v = 0 \text{ on } \Gamma_u \right\}$$

$$\tilde{\tau}(x) = \frac{1}{|\mathcal{Y}|} \int_{\mathcal{Y}} \tau^0(x, y) dy \quad (4)$$

ここで、 $J_y, \tilde{J}$ は $dy = J_y dY$, $dx = \tilde{J} dX$ で定義される各スケールにおける体積変化を表し、 g_{ext} は外力項、 $W^{1,p}$ は 1 階の導関数が p 乗可積分な空間 L_p に属す関数の

空間である。また、 η^1 と η^0 , τ^0 と $\tilde{\tau}$ は、それぞれミクロおよびマクロスケールにおける変分、Kirchhoff 応力である。各変数の添え字 (0 or 1) は two-scale 収束論¹⁵⁾における非均質性の代表長さのオーダーに対応するものである。

この 2 変数境界値問題の特徴のひとつはミクロ構造の境界値問題で任意の構成モデルを適用できることである。多結晶金属のマルチスケール解析手法では、ミクロスケールの構成モデルとして本研究で定式化した結晶体の構成モデルを採用し、異なる結晶方位を与えた複数の結晶粒の集合体を多結晶金属のミクロ構造とする。

2.2 結晶塑性・損傷構成モデル

ここでは、結晶粒の弾塑性・損傷挙動を再現する構成モデル¹⁶⁾の基礎式を定義する。

(1) 超弾性構成モデル

超弾性構成モデルでは、応力は損傷の影響を含む弾性ひずみエネルギー関数 Ψ^E の弾性変形テンソルによる微分として次式で与えられる。

$$\tau = 2 \frac{\partial \Psi^E}{\partial b^E} b^E \quad \text{or} \quad \hat{S} = 2 \frac{\partial \Psi^E}{\partial C^E} \quad (5)$$

ここで、 τ は Kirchhoff 応力、 $\hat{S}$ は中間配置の第 2 Piola-Kirchhoff 応力、 b^E は弾性左 Cauchy-Green 変形テンソル、 C^E は弾性右 Cauchy-Green 変形テンソルである。また、中間配置の基底で記述した超弾性接線係数を次式で定義しておく。

$$\hat{C}^E = 2 \frac{\partial \hat{S}}{\partial C^E} = 4 \frac{\partial^2 \Psi^E}{\partial C^E \partial C^E} \quad (6)$$

(2) 結晶塑性構成モデル

一般に結晶体の塑性構成モデルには単結晶のすべりに基づく結晶塑性構成モデル¹⁷⁾が用いられる。単結晶のすべりは結晶構造によって決まるすべり系で記述され、あるすべり系 α の降伏関数は次式で定義される。

$$\phi^{(\alpha)} := |\tau^{(\alpha)}| - \tau_Y^{(\alpha)} + q^{(\alpha)} \leq 0 \quad \forall \alpha \in \{1, \dots, n_{\text{slip}}\} \quad (7)$$

ここで、 $\tau_Y^{(\alpha)}$ は各すべり系の降伏応力に対応する臨界せん断応力、 $\tau^{(\alpha)}$ はすべり方向の分解応力、 $q^{(\alpha)}$ は硬化パラメータであり、 n_{slip} はすべり系の数である。また、すべり方向の分解応力はある時刻 t におけるすべり系 α のすべり方向の接線ベクトル $s_i^{(\alpha)}$ とすべり面への法線ベクトル $m_i^{(\alpha)}$ を用いて次式で表される。

$$\tau^{(\alpha)} = s_i^{(\alpha)} \cdot (\tau m_i^{(\alpha)}) = (C^E \hat{S}) : M^{(\alpha)} \quad (8)$$

ここで、 $M^{(\alpha)}$ は基準配置におけるすべり系 α のすべり方向の初期単位接線ベクトル $s_0^{(\alpha)}$ とすべり面への単位法線ベクトル $m_0^{(\alpha)}$ によって記述される Schmid テンソルである。

$$M^{(\alpha)} := s_0^{(\alpha)} \otimes m_0^{(\alpha)} \quad \forall \alpha \in \{1, \dots, n_{\text{slip}}\} \quad (9)$$

本論文では、塑性硬化則を次式のように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。

$$q^{(\alpha)} := - \sum_{\beta=1}^{n_{\text{slip}}} h_{\alpha\beta} \xi^{(\beta)} \quad \forall \alpha \in \{1, \dots, n_{\text{slip}}\} \quad (10)$$

潜在硬化に関して、FCC 金属ではあるすべり系が塑性状態になった際に他のすべり系は 1.0 ~ 1.4 倍の範囲で硬化するという実験事実が Kocks¹⁸⁾ によって確認されている。

(3) 損傷構成モデル

結晶粒内および粒界面におけるマイクロクラックやボイドの生成を損傷とみなし、連続体損傷理論¹⁹⁾を適用する。ここでは、物体内部(結晶格子)に蓄積できるエネルギーに上限があり、これを超えると損傷が開始すると考え、弾性ひずみエネルギー関数 Ψ^E を用いて損傷の判定基準を次式で定義する。

$$\varphi(C^E, D) := \Psi^E(C^E, D) - E_D + A(D) \leq 0 \quad (11)$$

ここで、 E_D は損傷開始のエネルギー値、 D は損傷パラメータ、 A は E_D の一種の硬化則であり、ここでは次式の D との線形関係を仮定する。

$$A(D) := -HD \quad (12)$$

また、弾性変形 b^E と損傷パラメータ D を変数とする損傷変形を含むエネルギー $\Psi^E(b^E, D)$ を一般的な超弾性モデルのひずみエネルギー関数 $\Psi^e(b^E)$ と損傷の影響を表現する任意の関数 $g(D)$ の積として次のように分解できると考える。

$$\Psi^E(b^E, D) := g(D) \Psi^e(b^E) \quad (13)$$

よって、超弾性構成式(5)は次式で書き換えられる。

$$\tau = 2g(D) \frac{\partial \Psi^e}{\partial b^E} b^E \quad \text{or} \quad \hat{S} = 2g(D) \frac{\partial \Psi^e}{\partial C^E} \quad (14)$$

また、弾性の接線係数テンソル(6)は次のようになる。

$$\hat{C}^E = 4g(D) \frac{\partial^2 \Psi^e}{\partial C^E \partial C^E} \quad (15)$$

すなわち、このモデルは式(11)の損傷発生条件を満たすことによって、損傷が発生・進展し、その結果、材料の剛性が低下するという現象論的なモデルである。

本論文では、関数 $g(D)$ を健全な状態 $g(0) = 1$ から損傷が進展することで最終的に

$$\lim_{D \rightarrow \infty} g(D) = 0. \quad (16)$$

となるように、次式のように指数関数で定義する。

$$g(D) := \exp[-D] \quad (17)$$

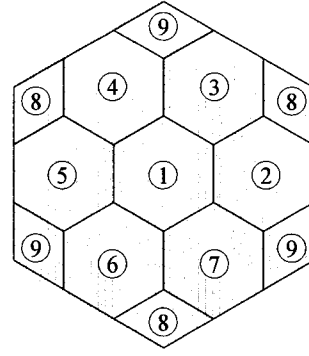


図-1 ミクロ多結晶有限要素モデル

表-1 結晶粒の材料定数

弾性定数	E [GPa]	200
ポアソン比	ν	0.3
降伏応力	$\tau_Y^{(\alpha)}$ [GPa]	0.3
自己硬化定数	$h_{\alpha\beta} (\alpha = \beta)$ [GPa]	0.5
潜在硬化定数	$h_{\alpha\beta} (\alpha \neq \beta)$ [GPa]	0.7
損傷判定値	E_D [kJ]	0.01
損傷硬化定数	A [kJ]	0.01

3. 要素性能とマクロ強度特性

本節では多結晶金属のマルチスケール解析を実施し、マクロ強度特性を評価する際の有限要素の分割数および要素の定式化の影響に関する検討を行う。

3.1 ミクロモデルの設定

本論文では、平面ひずみ条件において2次元問題を設定し、図-1に示すような正六角形に理想化された幾何形状からなる9個の結晶粒で構成された多結晶構造をミクロモデルとする。均質化法に基づくマルチスケールモデリングではミクロモデルに対して周期境界条件が設定される。

また、以下の数値解析では、引張強度まで扱うことから塑性変形が卓越するため、弾性異方性は無視できるものとする。超弾性モデルとして、Neo-Hookean型超弾性構成モデルを採用する。各結晶粒の材料定数は表-1で与え、結晶方位は乱数を発生させ、表-2で設定する。

2次元すべり系モデル 2次元解析を行う場合、現実の結晶構造のすべり系では平面の仮定を満足しない。そこで、すべり方向ベクトル、すべり面の法線ベクトルの両者が同一平面内に存在する図-2(a)のような2次元すべり系が用いられる²⁰⁾。現実の結晶は3次元的に多数のすべり系が存在することから、2次元すべり系モデルでは2重すべりモデルよりも図-2(a)のように多数のすべり系を仮定するモデルが適している。また、こ

表-2 結晶方位

粒番号	1	2	3	4	5	6	7	8	9
回転角 [度]	12.7	5.6	18.0	28.3	41.2	3.3	8.0	52.9	59.3

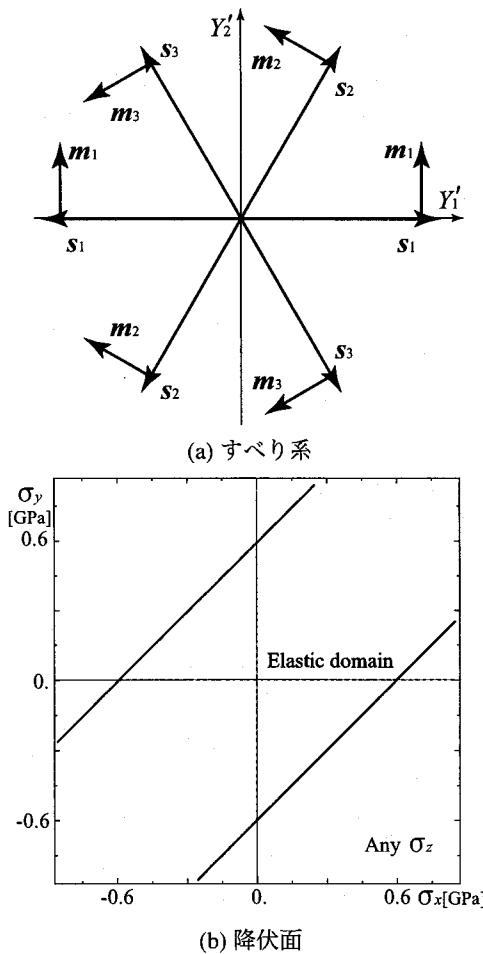


図-2 2次元すべり系モデル

のモデルは多数の方向にすべり系ベクトルが存在することで、構成モデルとしての異方性が小さくなる。しかし、2次元すべり系を用いた場合、図-2(b)に示すように、定義上、面外への塑性変形が生じないことから、面内等方応力では塑性状態とならず、降伏面は常に直線状となる。結晶塑性構成モデルを2次元解析に適用する際はこの点に注意が必要である。

本節の数値計算で採用する図-2(a)のすべり系は120°ごとに3組のすべり方向ベクトルを想定したものである。要素に関する検討項目 以下の数値解析では、図-1のモデルにおいて、各結晶粒を3要素、12要素、27要素のように適宜、定型メッシュで要素分割数を変化させる。この際、解析時に採用するミクロモデルの有限要素として、以下の3つの異なる定式化に基づく要素を用いたときの結果を比較し、ロッキングの影響を調査する。

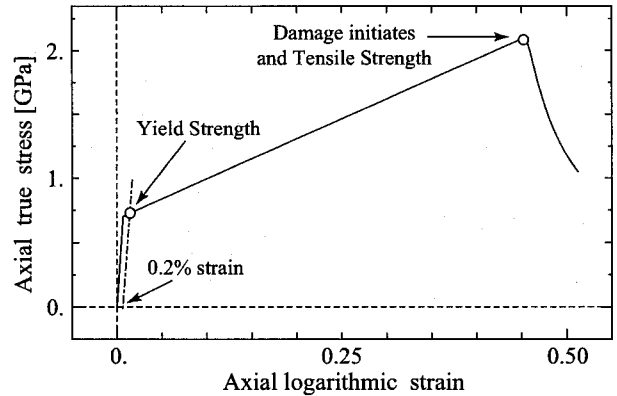


図-3 単結晶体の応力-ひずみ関係と強度特性の定義

- **Quad4 要素:** 仮想変位の原理から導出されるアイソパラメトリック4節点四辺形一次要素。
- **F-bar 要素¹²⁾:** 等体積変形時に生じるロッキングを回避するために、低次要素に修正を加える要素(付録I参照)。
- **Q1E4 要素¹¹⁾:** EAS法に基づき低次要素に4つの拡張ひずみモードを追加した要素。

3.2 単結晶体の応力-ひずみ関係と強度の定義

表-1の材料定数と図-2のすべり系で特徴付けられる単結晶体に対して単軸引張試験のシミュレーションを実施する。この際、変形は図-2(a)の Y_1' 方向に与えられる。この時の軸真応力-軸対数ひずみ(以下では、簡単に応力-ひずみと呼ぶ。)関係を図-3に示す。2.2節で示した結晶粒の弾塑性・損傷構成モデルでは弾塑性変形中に、ひずみエネルギーが蓄積されていき、ある点でクライテリアを満たし、損傷が発生する。そして、損傷発生後は材料の剛性低下に至る。

ここで、以降の数値解析のために、図-3を用いて単軸引張試験の材料応答において2つの強度特性を次のように定義する。

- **降伏強度:** 弾性応答と平行な直線をひずみ0.2%から伸ばし、応力-ひずみ曲線との交点の応力値。
- **引張強度:** 結晶粒の損傷による材料の軟化が生じた際の応力-ひずみ関係における応力の最大値。

両者はミクロスケールの変数とは関係なくマクロ応答のみから定義されており、図-3より、単結晶体の降伏強度は0.698 GPaであり、引張強度は2.093 GPaであることが読み取れる。

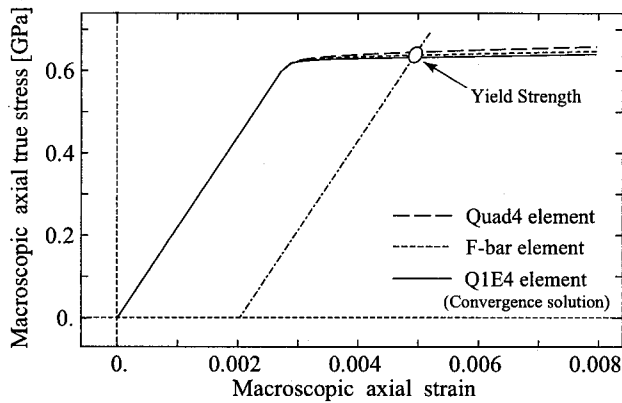


図-4 マクロ応力-ひずみ関係 (各結晶粒 3 要素のケース)

3.3 ミクロスケールの要素に関する検討結果

単一のマクロ有限要素に対して一様引張応力状態となるような境界条件を設定し、単軸引張試験を想定した変形を与え、マルチスケール解析を実施する。

(1) 弾塑性応答

はじめに、降伏強度が評価される微小な変形レベルに注目する。この変形量ではミクロスケールにおいて損傷は発生しない。

図-4 は降伏強度周辺のマクロ応力-ひずみ関係である。図中には図-1 の各結晶粒を 3 要素としたケースの Quad4 要素、F-bar 要素、Q1E4 要素のマクロ応答が示されている。それぞれ塑性硬化において多少の剛性の違いが確認されるが、その差は微小である。また、別途行った検討により、Q1E4 要素に関しては、結晶粒内の要素分割数を増やしたとしてもマクロ応答は図-4 とほぼ同一で、損傷の生じないマクロ軸ひずみ 1. % 以下の変形レベルで各結晶粒が 3 要素のケースで収束したことを確認している。一方、Quad4 要素および F-bar 要素では、結晶粒内の要素分割数を増やすことで、マクロ応答は図-4 中の Q1E4 要素のマクロ応答へ近づいていくことも確認した。

次に、ミクロスケールの変形状態に注目する。図-5 と図-6 は各結晶粒 3 要素および 75 要素のケースにおける軸ひずみ 2.5% 時の圧力分布と Mises 応力¹分布を Quad4 要素、F-bar 要素、Q1E4 要素に関して比較したものである。前述のように結晶塑性構成モデルの塑性変形は体積変化を伴わず、ロッキングを生じやすい。このロッキングを回避するための手段を講じていない Quad4 要素の結果では圧力分布、Mises 応力分布の両者において応力集中が見られ、一方、F-bar 要素と Q1E4 要素の結果では滑らかな応力分布となっている。特に、Quad4 要素の圧力分布に関しては、応力値の高い領域がある一方で、逆に、低い領域も見られる。これらを領域全体

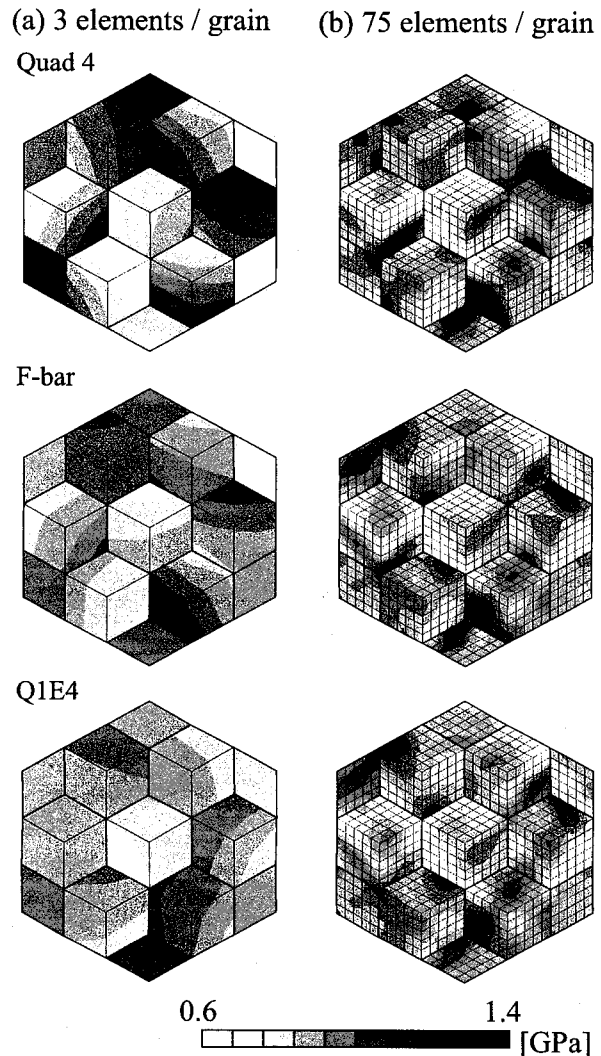


図-5 ミクロスケールの圧力分布 (軸ひずみ 2.5%)

において平均化した結果として得られるマクロ応答では図-4 のようにロッキングの影響がわかりにくくなっている。上記の Quad4 要素の結果における応力集中の傾向は各結晶粒 3 要素のケースでも確認できるが、詳細なメッシュではさらに顕著に現れている。

(2) 弾塑性・損傷応答

次に、ミクロスケールで損傷が発生・進展し、マクロ剛性の低下に至るまでマルチスケール解析を実施した。この数値解析では Quad4 要素と F-bar 要素の 2 つを比較した。解析結果として、マクロ応力-ひずみ関係を図-7 に示す。図中には図-1 の各結晶粒を 3 要素および 147 要素としたときの結果が示されている。ここで、結晶粒内の要素分割数に関するマクロ強度特性の収束結果を図-8 にまとめる。

前述のように変形が小さいときのマクロ応答は要素分割数または要素の定式化に関わらず、ほとんど差はないことから、降伏強度も各ケースでほぼ一定となっている。これはミクロスケールの非均質性は塑性開始とともに現れるため、軸ひずみ数十 % の大変形領域で

¹ Mises 応力を $\sigma^* := \sqrt{\frac{3}{2} s_{ij} s_{ij}}$ と定義する。ここで、 $s_{ij} = \sigma_{ij} - \delta_{ij} \sigma_m$ は Cauchy 応力の偏差成分、 $\sigma_m = \frac{1}{3} \sigma_{pp}$ は平均 (圧力) 成分である。

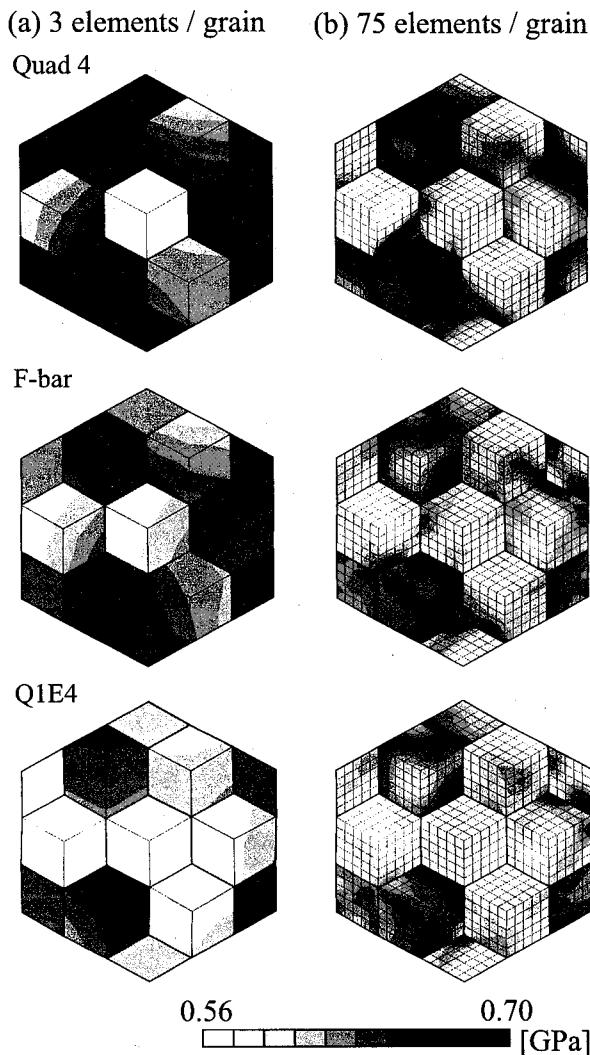


図-6 ミクロスケールの Mises 応力分布 (軸ひずみ 2.5%)

評価される引張強度に対して、軸ひずみ 0.5 % 程度で評価される降伏強度では要素分割数や要素性能の影響は相対的に小さくなることに起因する。

引張強度に関しては結晶粒内の要素数の増加で収束傾向が見られ、Quad4 要素と F-bar 要素の収束解には顕著な差が見られる。収束傾向としては両者ともに各結晶粒が 3 要素のケースでは引張強度を高く評価し、要素数を増やすにつれて収束していく。これはマクロ剛性の低下を誘起する結晶粒の損傷は局所的に生じるが、粗い有限要素では局所的な変形を再現できるだけの分解能がないため、損傷が発生・進展し難くなることが原因と考えられる。また、図-8 から本論文で採用した解析条件では、マクロ材料挙動や強度を評価したい場合は各結晶粒を 50~100 要素ほどで分割すれば良いと読み取れる。

なお、Quad4 要素と F-bar 要素で引張強度の収束解に大きな差は、前項でも示したミクロスケール内のロッキングの影響と考えられる。ロッキングの影響により、ミクロスケールでは図-5 と図-6 に見られるような応

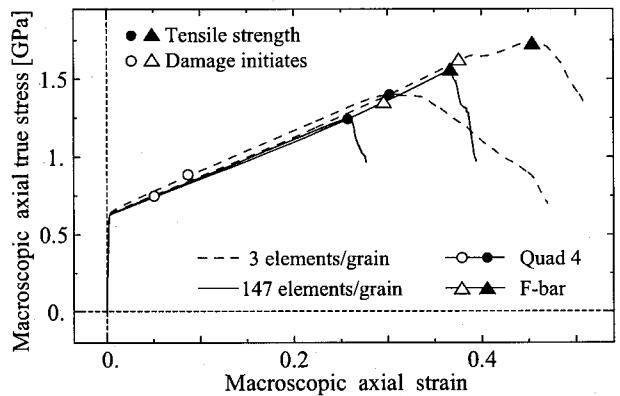


図-7 マクロ応力-ひずみ関係 (弾塑性・損傷応答)

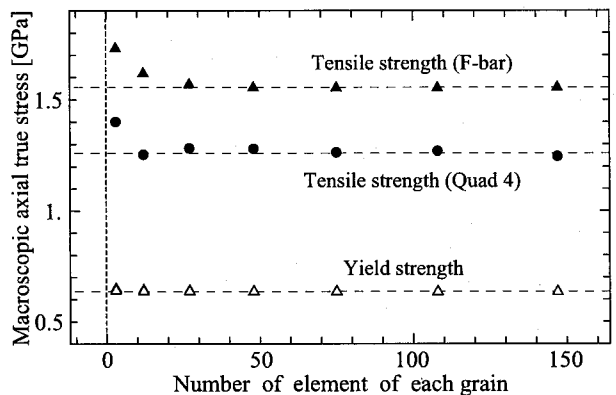


図-8 強度特性の収束傾向

力集中が生じている。さらに変形が進展すると、これらの領域において優先的に損傷が発生する。その結果、図-7 に示したように、Quad4 要素では F-bar 要素に対してかなり小さな変形レベルで損傷が発生する。また、単結晶では損傷発生と剛性低下が同時に生じていたが、多結晶金属では両者は一致しない。ミクロスケールで損傷が発生した後も、その領域の応力または剛性の低下を損傷の発生していない領域が分担し、しばらく損傷発生前と同様のマクロ応答となる。この結果、軸ひずみ 20 % 程度までは図-7 の Quad4 要素と F-bar 要素のマクロ応答はほぼ同じとなる。しかしながら、最終的に引張強度では顕著な差として現れる。

ここで、Quad4 要素と F-bar 要素の引張強度発現時における損傷分布 (式 (13)) と Mises 応力の分布を図-9 に示す。Quad4 要素のケースでは図-5 と図-6 で応力集中が生じていた領域を中心に半数以上の結晶粒に局所的な損傷が発生している。それに対して、F-bar 要素のケースで損傷は 2 つの結晶粒の限られた領域のみで発生している。この結果、損傷が発生している周辺を中心に両者の Mises 応力の分布状況に差が生じている。また、Quad4 要素では損傷が徐々に進展した結果、マクロ剛性低下に至るが、F-bar 要素では引張強度付近で急激に発生・進展していることから、マルチスケール解析の結果から解釈されるミクロなメカニズムも異なる

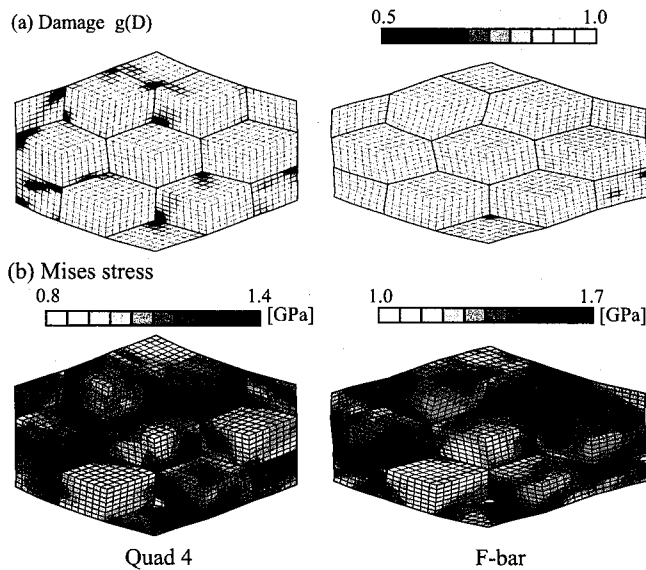


図-9 ミクロスケールの変形状態 (引張強度)

ものになってしまう。

以上で示したように多結晶金属のマルチスケールモデリングにおいて、マクロ材料応答およびミクロ組織の変形メカニズムを評価するためには、ミクロスケールにおいてロッキングを回避する要素技術を適用することが必要である。

4. 結論

本研究では、多結晶金属のマルチスケールモデリングにおいて、ミクロスケールの有限要素に関する検討を行った。この検討では各結晶粒の要素分割数に対するマクロ材料応答および強度の収束傾向の調査とロッキングの影響を調べるために、低次要素と F-bar 要素、Q1E4 要素の比較を実施した。この結果、以下のような知見が得られた。

- 弾塑性変形では要素分割数または要素の定式化によらず、ほぼ同じマクロ応答が得られる。しかし、ミクロスケールではロッキングが生じているため、低次要素では応力集中が見られる。
- 本論文で採用した単純な解析条件においては、各結晶粒を 50~100 要素ほどで離散化すれば、マクロ的には収束した解が得られる。
- ロッキングによる応力集中は損傷の発生を誘起するため、低次要素とロッキングを回避することのできる要素では損傷の発生する応力またはひずみに大きな差が生じる。その結果、引張強度は異なる値となり、同様にこのときのミクロスケールの変形状態も全く異なるものとなる。

以上のように、本論文では多結晶金属のマルチスケールモデリングにおいてミクロスケールでロッキングを回避することの重要性を示した。近年、注目されてい

る多結晶金属のマルチスケールモデリングに転位論から導出された非局所またはひずみ勾配項を持つ結晶塑性構成モデル²¹⁾を適用することで、結晶粒径依存性を再現しようとする研究のように、現状よりもミクロスケールのメカニズムを正確に評価する必要のある場合では、特に重要となると考えられる。

謝辞： 本研究は日本学術振興会特別研究員制度 (課題番号 17-4721) による支援のもとで行われた。

付録 I F-bar 要素¹²⁾

F-bar 要素は非圧縮材料の有限要素解析時に生じるロッキングを回避するために提案された要素であり、微小変形問題における B-bar 要素⁹⁾と密接な関係がある。この要素では、変形勾配 F を

$$F = F_{\text{iso}} F_v, \quad (18)$$

と乗算分解する。ここで、 F_{iso} 、 F_v はそれぞれ F の等体積と体積変化成分として

$$F_{\text{iso}} = (\det F)^{-1/3} F, \quad F_v = (\det F)^{1/3} I \quad (19)$$

と記述する。要素中心の変形勾配を F_0 とすると、F-bar 変形勾配は

$$\bar{F} = F_{\text{iso}}(F_0)_v = \left(\frac{\det F_0}{\det F} \right)^{1/3} F. \quad (20)$$

と定義される。四辺形と六面体の F-bar 要素は応力評価において単に F を $\bar{F}$ で置き換えることによって得られる。また、反復収束計算のための接線係数も容易に導出することができる。さらに、この要素は高次な要素はもちろん定ひずみ要素にも適用可能な形式に一般化されている¹³⁾。

付録 II Q1E4 要素¹¹⁾

有限変形問題における EAS 法では変形勾配 F に拡張変位勾配 $\bar{H}$ を追加する。

$$\bar{F} = F + \bar{H}. \quad (21)$$

この定義から、独立変数として変位、第一 Piola-Kirchhoff 応力と拡張変位勾配に関して Hu-Washizu の汎関数が再変数化され、有限要素法の支配方程式が定式化される。

拡張変位勾配場はアイソパラメトリック要素の局所座標系 ξ を用いて、次の内挿関数によって定義される。

$$\bar{H}_i(\xi) \equiv \frac{J_0}{J(\xi)} J_0^T E_i(\xi). \quad (22)$$

ここで、 J_0 は要素中心 ($\xi = 0$) で評価された参照配置における要素のアイソパラメトリックマッピングに関

するヤコビアン, J_0 と $J(\zeta)$ は要素中心と任意の点におけるヤコビアンの行列式であり, $E_i(\zeta)$ は拡張モードを表すテンソルである.

Q1/E4 要素は式 (22) において, 次に示す 4 つの拡張モードを用いた 4 節点四辺形要素である.

$$\begin{aligned} E_1 &= \begin{bmatrix} \zeta_1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} & E_2 &= \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ \zeta_1 & 0 \end{bmatrix} \\ E_3 &= \begin{bmatrix} 0 & \zeta_2 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} & E_4 &= \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \zeta_2 \end{bmatrix} \end{aligned}$$

参考文献

- 1) Takahashi, H., Tsuchida, S. and Motohashi, H.: Development of plastic anisotropy in rolled aluminium sheets, *Int. J. Plast.*, Vol.12, pp.935-949, 1996.
- 2) Watanabe, I., Terada, K. and Akiyama, M.: Two-scale analysis for deformation-induced anisotropy of polycrystalline metals, *Comput. Mater. Sci.*, Vol.32, pp.240-250, 2005.
- 3) Hall, E.O.: The deformation and ageing of mild steel, *Phys. Soc. Lond. Proc.*, Vol.64, pp.747-753, 1951.
- 4) Petch, N.J.: The cleavage strength of polycrystals, *J. Iron Steel Inst.* Vol.174, pp.25-28, 1953.
- 5) Taylor, G. I.: Plastic Strain in Metals, *J. Inst. Metals*, Vol.62, pp.307-324, 1938.
- 6) 渡邊育夢, 寺田賢二郎, 松井和己, 秋山雅義, 根石豊: 多結晶金属のマルチスケール解析, 応用力学論文集, Vol.6, pp.239-246, 2003.
- 7) Terada, K., Watanabe, I. and Akiyama, M.: Effects of shape and size of crystal grains on the strengths of polycrystalline metals, *Int. J. Mult. Comp. Eng.*, Vol.4, pp.445-460, 2006.
- 8) Sussman, T. and Bathe, K.J.: A finite element formulation for nonlinear incompressible elastic and inelastic analysis, *Comp. Struct.*, Vol.26, pp.357-409, 1987.
- 9) Hughes, T.J.R.: Generalization of selective integration procedures to anisotropic and nonlinear media, *Int. J. Numer. Methods Engrg.*, Vol.15, pp.1413-1418, 1980.
- 10) Moran, B., Ortiz, M. and Shih, C. F.: Formulation of implicit finite element methods for multiplicative finite deformation plasticity, *Int. J. Numer. Methods Engrg.*, Vol.29, pp.483-514, 1990.
- 11) Simo, J.C. and Armero, F.: Geometrically non-linear enhanced strain mixed methods and the method of incompatible modes, *Int. J. Numer. Methods Engrg.*, Vol.33, pp.1413-1449, 1992.
- 12) de Souza Neto, E.A., Peric, D., Dutko, M. and Owen, D.R.J.: Design of simple low order finite elements for large strain analysis of nearly incompressible solids, *Int. J. Solids Struct.*, Vol.33, pp.3277-3296, 1996.
- 13) de Souza Neto, E.A., Pires, F.M. and Owen, D.R.J.: F-bar-based linear triangles and tetrahedra for finite strain analysis of nearly incompressible solids. Part I: formulation and benchmarking, *Int. J. Numer. Methods Engrg.*, Vol.62, pp.353-383, 2005.
- 14) 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.*, Vol.192, pp.3531-3563, 2003.
- 15) Allaire, G.: Homogenization and two-scale convergence, *SIAM J. Math. Anal.*, Vol.23, pp.1482-1518, 1992.
- 16) 渡邊育夢, 寺田賢二郎: 結晶粒の損傷を考慮した多結晶金属のマルチスケール解析手法, 土木学会論文集 A, Vol.62, pp.772-781, 2006.
- 17) Asaro, R. J.: Crystal plasticity, *J. Appl. Mech.*, Vol.50, pp.921-934, 1983.
- 18) Kocks, U. F.: The relation between polycrystal deformation and single crystal deformation, *Metall. Trans.*, Vol.1, pp.1121-1143, 1970.
- 19) Kachanov, L.M.: *Introduction to Continuum Damage Mechanics*, M. Nijhoff, Boston, 1986.
- 20) Harren, S. V. and Asaro, R. J.: Nonuniform deformations in polycrystals and aspects of the validity of the Taylor model, *J. Mech. Phys. Solids*, Vol.37, pp.191-232, 1989.
- 21) Gurtin, M.E.: A gradient theory of single-crystal viscoplasticity that accounts for geometrically necessary dislocations, *J. Mech. Phys. Solids*, Vol.50, pp.5-32, 2002.

(2007 年 4 月 12 日 受付)