

幾何学的に必要な転位の自己エネルギーを考慮した ひずみこう配結晶塑性理論のための陰的有限要素方程式

IMPLICIT FINITE ELEMENT EQUATION FOR STRAIN GRADIENT CRYSTAL PLASTICITY THEORY THAT ACCOUNTS FOR SELF-ENERGY OF GEOMETRICALLY NECESSARY DISLOCATIONS

小寺 一輝¹⁾, 亀谷 隆真²⁾, 奥村 大³⁾, 大野 信忠⁴⁾

Kazuki KODERA, Ryushin KAMETANI, Dai OKUMURA, and Nobutada OHNO

- 1) 名古屋大学大学院工学研究科 (〒464-8603 名古屋市千種区不老町, E-mail: kodera@mml.mech.nagoya-u.ac.jp)
- 2) 名古屋大学大学院工学研究科 (平成 20 年度博士課程前期課程修了生, 現 パイオニア株)
- 3) 名古屋大学大学院工学研究科 (〒464-8603 名古屋市千種区不老町, E-mail: okumura@mech.nagoya-u.ac.jp)
- 4) 名古屋大学大学院工学研究科 (〒464-8603 名古屋市千種区不老町, E-mail: ohno@mech.nagoya-u.ac.jp)

In this study, an implicit finite element equation is developed for a strain gradient theory of single-crystal plasticity that accounts for the self-energy of geometrically necessary dislocations (GNDs). This theory, which was proposed by the present authors (J. Mech. Phys. Solids 55 (2007)), is based on introducing the self-energy of GNDs into the Gurtin strain gradient framework. The introduction allows us to estimate the size-dependent yield behavior of crystalline metals. The discretization is performed for a set of homogenization equations based on this gradient theory, leading to an implicit finite element equation. This equation is verified by a model grain analysis and a comparison with an analytical estimation obtained by the present authors. The stability and the efficiency due to applying this equation are also discussed.

Key Words: Strain gradient plasticity, Dislocation, Finite element analysis, Homogenization

1. 緒 言

結晶金属材料の塑性変形に寸法効果を引き起こす要因のひとつとして、幾何学的に必要な転位⁽¹⁾ (GN 転位) の作る長距離弾性場の存在が上げられる。著者ら⁽²⁾は、GN 転位の自己エネルギーが及ぼす影響に着目して、従来の結晶塑性理論の拡張を行った。また、単純なモデルを用いて解析的にその影響を検討したところ、粒径がサブミクロンから数ミクロンの多結晶金属の初期降伏応力の粒径依存性を高精度に予測できることがわかった⁽²⁾。しかしながら、これらの結果は単純な解析的検討であり、より実際的な問題への理論の適用のためには、数値解析手法、とりわけ効率的な有限要素解析手法の開発が要求される。

上述の理論⁽²⁾は、結晶塑性理論⁽³⁾に GN 転位の自由エネルギーの影響を導入したひずみこう配結晶塑性理論⁽⁴⁾の枠組みに属している。GN 転位の密度はすべりの一次こう配を用いて表現される⁽¹⁾から、自由エネルギーの導入によって、このこう配に共役な力 (以後、高次応力と呼ぶ) が生じることになる。したがって、ひずみこう配結晶塑性理論では、応力のつり合いだけでなく、高次応力のつり合いも考慮する必要

があり、通常の有限要素解析のための離散化方法を直接利用することはできない。

ひずみこう配結晶塑性を考慮した有限要素解析は、これまでいくつか行われており⁽⁵⁾⁽⁷⁾、著者ら⁽⁸⁾もひずみこう配結晶塑性を考慮した均質化理論を構築し、準陰解法的な有限要素方程式を導出した。この方法を、GN 転位の自己エネルギーを考慮した解析に適用することは可能であるが、GN 転位の自己エネルギーに基づく高次応力は、非常に強い非線形性を有しており (Fig.2 を参照)、効率的かつ高精度な解析のためには、完全陰解法に基づく有限要素解析手法を開発することが望まれる。しかしながら、陰解法に基づく有限要素方程式は、これまでの研究⁽⁶⁾では、近似的にしか解析に用いられおらず、増分安定性や計算効率の検討もなされていない。したがって、陰解法に基づく有限要素方程式を導出し、その妥当性を確かめるとともに、増分安定性や計算効率についての検討を行うことは、著者らの理論⁽²⁾を含め、より一般にはひずみこう配結晶塑性理論⁽⁴⁾の実際的な問題への応用を進展させる上で、非常に有用である。

そこで本研究では、ひずみこう配結晶塑性理論に基づく効率的な有限要素解析手法の開発を目的として、ひずみこう配結晶塑性を考慮した均質化理論⁽⁸⁾の陰的有限要素離散化を

行う。高次応力には GN 転位の自己エネルギーに基づくもの⁽²⁾を用い、結晶粒モデルの有限要素解析の結果を解析解⁽²⁾と比較することによって、妥当性を確かめる。さらに、準陰解法⁽⁸⁾による結果との比較によって、増分安定性や計算効率についても議論する。

2. ひずみこう配結晶塑性理論

この章では、GN 転位の自己エネルギーを考慮したひずみこう配結晶塑性理論⁽²⁾に用いられる基礎式と理論の特徴について述べる。このため、直交座標 x_i ($i=1, 2, 3$) を考え、 x_i に関する偏微分を $(\cdot)_{,i}$ と表すことにする。なお、物体力は作用しないと、変形は微小であるとする。

2.1. すべり 単結晶金属材料中の塑性変形がすべりによって生じることを考える。このとき、塑性ひずみ ε_{ij}^p は各すべり系 β ($\beta=1, 2, \dots, N$) に生じるすべり $\gamma^{(\beta)}$ によって

$$\varepsilon_{ij}^p = \sum_{\beta} \gamma^{(\beta)} p_{ij}^{(\beta)}, \quad p_{ij}^{(\beta)} = \frac{1}{2} (s_i^{(\beta)} m_j^{(\beta)} + m_i^{(\beta)} s_j^{(\beta)}) \quad (1)$$

と表される⁽³⁾。上式中の $p_{ij}^{(\beta)}$ はシュミットテンソルと呼ばれ、 $s_i^{(\beta)}$ と $m_j^{(\beta)}$ はそれぞれすべり方向とすべり面法線を表す単位ベクトルであり、 $s_k^{(\beta)} m_k^{(\beta)} = 0$ を満足する。

塑性ひずみ ε_{ij}^p と弾性ひずみ ε_{ij}^e の和によって、全体のひずみ ε_{ij} は、

$$\varepsilon_{ij} = \varepsilon_{ij}^e + \varepsilon_{ij}^p \quad (2)$$

と書ける。また、変位 u_i との間には、次の関係が成り立つ。

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2} (u_{i,j} + u_{j,i}) \quad (3)$$

2.2. GN 転位密度 すべり系 β に関する GN 転位密度 $\rho_G^{(\beta)}$ は、すべりの一次こう配 $\gamma_{,i}^{(\beta)}$ を用いて次のように表される^{(1),(2)}。

$$\rho_G^{(\beta)} = \left\{ \left(\rho_{G,edge}^{(\beta)} \right)^2 + \left(\rho_{G,screw}^{(\beta)} \right)^2 \right\}^{1/2} \quad (4)$$

$$\rho_{G,edge}^{(\beta)} = b^{-1} |\gamma_{,i}^{(\beta)} s_i^{(\beta)}|, \quad \rho_{G,screw}^{(\beta)} = b^{-1} |\gamma_{,i}^{(\beta)} t_i^{(\beta)}| \quad (5)$$

ここで、 $\rho_{G,edge}^{(\beta)}$ と $\rho_{G,screw}^{(\beta)}$ は GN 転位密度の刃状成分とらせん成分であり、Fig.1 に示されるように、 $\rho_G^{(\beta)}$ を構成する転位は一般に混合転位である。また、 b はバーガーズベクトルの大きさを表し、 $t_i^{(\beta)}$ は $s_i^{(\beta)}$ と $m_i^{(\beta)}$ に直交する単位ベクトル、すなわち交代記号 e_{ijk} を用いて $t_i^{(\beta)} = e_{ijk} s_j^{(\beta)} m_k^{(\beta)}$ と表される。

すべりの一次こう配 $\gamma_{,i}^{(\beta)}$ を、互いに直交する単位ベクトル $s_i^{(\beta)}$ 、 $m_i^{(\beta)}$ 、 $t_i^{(\beta)}$ を用いて書き直すと

$$\gamma_{,i}^{(\beta)} = \left(\gamma_{,i}^{(\beta)} s_i^{(\beta)} \right) s_i^{(\beta)} + \left(\gamma_{,i}^{(\beta)} m_i^{(\beta)} \right) m_i^{(\beta)} + \left(\gamma_{,i}^{(\beta)} t_i^{(\beta)} \right) t_i^{(\beta)} \quad (6)$$

となる。したがって、 $\gamma_{,i}^{(\beta)}$ のすべり面内成分 $\gamma_{-,i}^{(\beta)}$ は、

$$\gamma_{-,i}^{(\beta)} = \left(\gamma_{,i}^{(\beta)} s_i^{(\beta)} \right) s_i^{(\beta)} + \left(\gamma_{,i}^{(\beta)} t_i^{(\beta)} \right) t_i^{(\beta)} \quad (7)$$

と書ける。上式を用いると、式(4)と式(5)で表される GN 転位密度 $\rho_G^{(\beta)}$ を、次のように簡単に書くことができる。

$$\rho_G^{(\beta)} = b^{-1} \left(\gamma_{-,i}^{(\beta)} \gamma_{-,i}^{(\beta)} \right)^{1/2} \quad (8)$$

Fig.1 に示すように、 $\gamma_{-,i}^{(\beta)}$ の方向は式(4)、(5)、(7)の関係より転位線の方向と垂直である。

2.3. 自己エネルギーに基づく高次応力 等方弾性体の無限物体中に無限に長い転位が一本存在するとき、単位長さ当た

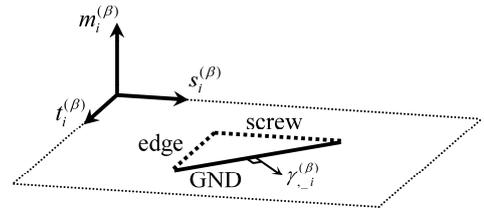


Fig.1 Mixed geometrically necessary dislocation (GND) on slip system β .

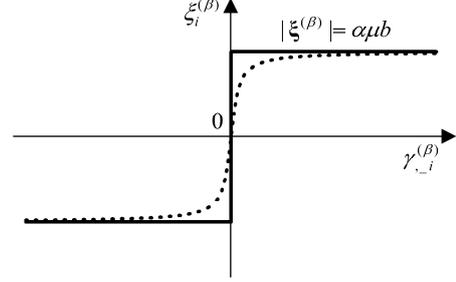


Fig.2 Step change in higher-order stress $\xi_i^{(\beta)}$ as a function of in-plane slip gradient $\gamma_{-,i}^{(\beta)}$, and dotted line indicates approximation using Eq.(39).

りの転位の自己エネルギー E_0 は、

$$E_0 = a\mu b^2 \quad (9)$$

と表される⁽⁹⁾。ここで、 μ はせん断係数であり、 a は 0.5~1.0 程度の係数である。

初期降伏直後のように、GN 転位密度が十分に低く、GN 転位間の相互作用が十分に小さいときには、式(9)に示される自己エネルギー E_0 が、GN 転位の有する自由エネルギーであるとみなすことができる。このとき、単位体積当たりの GN 転位の自由エネルギー ψ は次のように書ける⁽²⁾。

$$\psi = \sum_{\beta} E_0 \rho_G^{(\beta)} \quad (10)$$

上式に式(8)と式(9)を代入すると、次式となる。

$$\psi = \sum_{\beta} a\mu b \left(\gamma_{-,i}^{(\beta)} \gamma_{-,i}^{(\beta)} \right)^{1/2} \quad (11)$$

したがって、転位の自己エネルギーに基づく GN 転位の自由エネルギー ψ は、 $\gamma_{-,i}^{(\beta)}$ の大きさと線形関係にあり、式(7)よりすべりの一次こう配 $\gamma_{,i}^{(\beta)}$ の関数であることがわかる。

式(11)に示される ψ から、すべりの一次こう配 $\gamma_{,i}^{(\beta)}$ に共役な力として、

$$\xi_i^{(\beta)} = a\mu b v_i^{(\beta)}, \quad v_i^{(\beta)} = \gamma_{-,i}^{(\beta)} / \left(\gamma_{-,k}^{(\beta)} \gamma_{-,k}^{(\beta)} \right)^{1/2} \quad (12)$$

が導かれる⁽²⁾。これらの関係は、

$$\xi_i^{(\beta)} = \partial \psi / \partial \gamma_{,i}^{(\beta)} \quad (13)$$

に式(11)と式(7)を用いることによって得られる。また、ひずみこう配理論⁽⁴⁾では、この共役力 $\xi_i^{(\beta)}$ を一般に高次応力と呼び、弾性ひずみに共役な力である応力と区別する。

Fig.2 は高次応力 $\xi_i^{(\beta)}$ とすべりの一次こう配の面内成分 $\gamma_{-,i}^{(\beta)}$ の関係を示しており、GN 転位の自己エネルギーに基づ

く高次応力 $\xi_i^{(\beta)}$ は、 $\gamma_{-i}^{(\beta)}$ の発生，すなわち GN 転位の出現と同時にステップ的に生じ，一定値 $a\mu b$ を取る．また、 $v_i^{(\beta)}$ は $\gamma_{-i}^{(\beta)}$ の単位方向であることから，高次応力 $\xi_i^{(\beta)}$ はすべり面内において転位線に垂直な方向に生じる．

2.4. 応力, 高次応力のつり合い ひずみこう配結晶塑性理論⁽⁴⁾では，GN 転位の自由エネルギー ψ ，すなわち，すべりの一次こう配と共役な高次応力 $\xi_i^{(\beta)}$ が仮想仕事の原理に導入され，この節で示されるように，応力のつり合い式のほかに高次応力のつり合い式が導かれる．まず，応力のつり合い式は，応力を σ_{ij} と表すとき，

$$\sigma_{ij,j} = 0 \quad (14)$$

であり，境界条件として変位もしくは表面力が規定される．つづいて，すべり系 β に関する高次応力のつり合い式は， $k^{(\beta)}$ をすべり抵抗， $\tau^{(\beta)}$ を分解せん断応力

$$\tau^{(\beta)} = p_j^{(\beta)} \sigma_{ij} \quad (15)$$

とするとき，

$$\tau^{(\beta)} - k^{(\beta)} + \xi_{i,i}^{(\beta)} = 0 \quad (16)$$

である．上式は，高次応力 $\xi_i^{(\beta)}$ の項を無視すれば従来の結晶塑性理論⁽³⁾における降伏条件と同じであり，したがって，高次応力によって拡張された降伏条件とみなすことができる．

高次応力のつり合い式(16)に対する境界条件はいくつか提案されており，弾性体との界面のように転位が通過できず，堆積すると考えられるところでは，すべり拘束条件

$$\gamma^{(\beta)} = 0 \quad (17)$$

が用いられる．また，自由表面のように転位が自由に貫通できると考えられるところでは，すべり自由条件

$$n_i \xi_i^{(\beta)} = 0 \quad (18)$$

が用いられる．ここで， n_i は表面の外向き単位法線である．

2.5. 結晶粒モデルの解析解 この節では，二次元結晶粒モデル (Fig.3) の解析結果を示し，GN 転位の自己エネルギーが結晶粒モデルの初期降伏応力の粒径依存性に及ぼす影響について述べる．このため，Fig.3 に示すように，ひとつのすべり系 β を有する二次元の円形および六角形結晶粒モデルをそれぞれ考える．負荷条件として，すべり面内のすべり方向 $s_i^{(\beta)}$ に分解せん断応力 $\tau^{(\beta)}$ を加える．また，粒内のすべり抵抗 $k^{(\beta)}$ は一定値 k_0 であるとして，粒界 ∂V では式(17)に示されるすべり拘束条件 ($\gamma^{(\beta)} = 0$) が成り立つとする．

解析手順の詳細は文献⁽²⁾を参考にすることとして，はじめに，高次応力のつり合い式(16)により，粒内での分解せん断応力 $\tau^{(\beta)}$ の平均値は，

$$\langle \tau^{(\beta)} \rangle = k_0 - \langle \xi_{i,i}^{(\beta)} \rangle \quad (19)$$

と書ける．ここで，記号 $\langle \cdot \rangle$ は粒内での体積平均

$$\langle \cdot \rangle = \frac{1}{V} \int_V (\cdot) dV \quad (20)$$

を表す．結晶粒モデルが降伏し，粒内にすべり $\gamma^{(\beta)}$ が生じるとき，粒界では $\gamma^{(\beta)} = 0$ であるため，粒界近傍にはすべりの一次こう配 $\gamma_{-i}^{(\beta)}$ が生じ，その方向は，Fig.3 に示すように，粒界に垂直となる．この結果，式(12)から粒界 ∂V に作用する高次応力 $\xi_i^{(\beta)}$ は，次式のように表される．

$$\xi_i^{(\beta)} = -a\mu b n_i \quad (21)$$

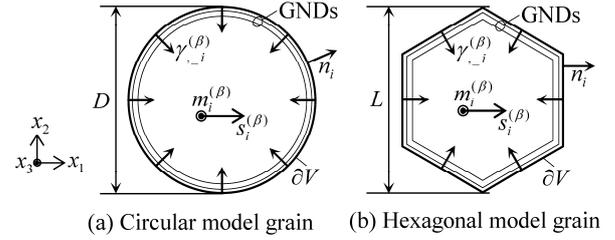


Fig.3 2D model grains with a single slip system β .

式(19)の右辺第 2 項に，発散定理を適用し，式(21)を代入すると，

$$\langle \xi_{i,i}^{(\beta)} \rangle = \begin{cases} -4a\mu b/D & \dots \text{(Circular model)} \\ -(8/\sqrt{3})a\mu b/L & \dots \text{(Hexagonal model)} \end{cases} \quad (22)$$

となる．したがって，式(19)と式(22)から，結晶粒モデルの初期降伏応力 Σ_y は，

$$\Sigma_y = \begin{cases} k_0 + 4a\mu b/D & \dots \text{(Circular model)} \\ k_0 + (8/\sqrt{3})a\mu b/L & \dots \text{(Hexagonal model)} \end{cases} \quad (23)$$

と導かれる．ここで，六角形結晶粒モデルの代表長さ L を，円形結晶粒の面積 V による換算式 $V = \frac{3\sqrt{3}}{8} L^2 = \frac{\pi}{4} D^2$ を用いて，平均結晶粒径 D によって表すことを考える．このとき，式(23)は次のように一般に書き換えられる．

$$\Sigma_y = k_0 + \Theta \frac{a\mu b}{D} \quad (24)$$

上式に含まれる係数 Θ は結晶粒の形状に依存した値であり，円形結晶粒の場合⁽²⁾には $\Theta = 4$ ，六角形結晶粒の場合には $\Theta = 4\sqrt{2\sqrt{3}/\pi} \approx 4.2$ である．

式(24)は，GN 転位の自己エネルギーの影響が粒径に反比例する形で結晶粒モデルの初期降伏応力寸法依存性を引き起こすことを示す．この結果は三次元結晶粒モデルの解析⁽²⁾でも示されており，係数 Θ の値のみが結晶粒の形状によって異なり，おおよそ 4~5 の値を取ることがわかっている．さらに前報⁽²⁾では，テイラー因子を用いて式(24)から多結晶体の初期降伏応力を見積もり，いくつかの実験結果と比較したところ，サブミクロンから数ミクロンの粒径範囲において，本理論に基づく予測は実験結果とよく一致した．したがって，上述の粒径範囲における多結晶塑性の粒径依存性を調べる上で，GN 転位の自己エネルギーの影響を考慮することは非常に重要であると結論できる．

3. 陰的有限要素離散化

この章では，前章で示したひずみこう配結晶塑性理論のための陰的有限要素離散化の方法について述べる．ただし，2.5 節での解析解との比較を容易にするために，著者らの研究⁽⁸⁾によって導かれた均質化方程式に対して，その有限要素方程式を導出することにする．このためまず，均質化方程式について簡単に説明し，つづいて離散化を行う．また，式(12)の GN 転位の自己エネルギーに基づく高次応力の導入方法についても説明する．

3.1. 材料の弾性・粘塑性応答 著者ら⁽⁸⁾によって構築された均質化理論は，材料が微小ひずみの粘塑性体であることに基

づいている。したがって、応力ひずみ関係はフックの法則に従うとし、すべり速度 $\dot{\gamma}^{(\beta)}$ とすべり抵抗 $k^{(\beta)}$ の間には、べき乗型の粘塑性則が成り立つとする。すなわち、

$$\sigma_{ij} = c_{ijkl} \epsilon_{kl}^c \quad (25)$$

$$k^{(\beta)} = k_0 \left| \frac{\dot{\gamma}^{(\beta)}}{\dot{\gamma}_0} \right|^{n-1} \quad (26)$$

である。式(25)と(26)の c_{ijkl} , $\dot{\gamma}_0$, k_0 , n は材料定数であり、それぞれ弾性剛性、参照ひずみ速度、参照すべり抵抗、ひずみ速度指数である。

3.2. 均質化方程式 巨視的応力 Σ_{ij} (もしくは巨視的ひずみ E_{ij} との組合せ) によって規定された巨視的一様変形を受ける周期材料を考え、その周期単位を Y とする。このとき、応力のつり合い式(14)と高次応力のつり合い式(16)より均質化方程式⁽⁸⁾

$$\langle \sigma_{ij} \rangle = \Sigma_{ij} \quad (27)$$

$$\langle \sigma_{ij} \delta u_{i,j}^* \rangle = 0 \quad (28)$$

$$\langle (k^{(\beta)} - \tau^{(\beta)}) \delta \gamma^{(\beta)} + \xi_i^{(\beta)} \delta \gamma_{i,j}^{(\beta)} \rangle = 0 \quad (29)$$

が導かれる。ここで、 $\delta(\cdot)$ は (\cdot) の変分を表し、 $\langle \cdot \rangle$ は周期単位 Y 内での体積平均である。また u_i^* は、変位 u_i から巨視的な成分 $E_{ij} x_j$ を差し引いた擾乱成分である。したがって、 u_i^* は周期単位 Y の周期配列に基づく空間的周期性を満足する(以後、 Y 周期性と呼ぶ)⁽⁸⁾。このため、式(28)の境界条件は擾乱変位 u_i^* の Y 周期性に基づいて与えられる。また、式(29)の境界条件についても、 $\gamma^{(\beta)}$ に Y 周期性を適用することが可能であるが、式(17)や(18)に示されるすべり拘束条件 ($\gamma^{(\beta)} = 0$) やすべり自由条件 ($n_i \xi_i^{(\beta)} = 0$) も用いられる。

3.3. 離散化 時刻 $t_{(n)}$ における変形状態 n が既知であるとして、時刻 $t_{(n)} + \Delta t_{(n+1)}$ における変形状態 $n+1$ を反復計算によって解析することを考える。このため、変形状態 n と $n+1$ における状態量をそれぞれ $(\cdot)_{(n)}$, $(\cdot)_{(n+1)}$ と表し、さらに変形状態 $n+1$ を求めるための第 i 回目の反復計算後の状態量を $(\cdot)_{(n+1,i)}$ と表して区別することにする。

すべり速度は、後退オイラー法の考え方を採用すれば、

$$\dot{\gamma}_{(n+1,i)}^{(\beta)} = (\gamma_{(n+1,i)}^{(\beta)} - \gamma_{(n)}^{(\beta)}) / \Delta t_{(n+1)} \quad (30)$$

と表される。したがって、上式を用いて式(26)を表現し、第 i 回目の反復計算後の状態量を既知として、変形状態 $n+1$ での状態量を近似的に表せば、

$$k_{(n+1)}^{(\beta)} - k_{(n+1,i)}^{(\beta)} = \frac{\partial k_{(n+1,i)}^{(\beta)}}{\partial \gamma_{(n+1,i)}^{(\beta)}} (\gamma_{(n+1)}^{(\beta)} - \gamma_{(n+1,i)}^{(\beta)}) \quad (31)$$

である。また、式(13)で定義される高次応力は、式(12)の GN 転位の自己エネルギーによる高次応力が示すように、一般に非線形的であり、上式と同様に表せば、

$$\xi_{k(n+1)}^{(\beta)} - \xi_{k(n+1,i)}^{(\beta)} = \frac{\partial \xi_{k(n+1,i)}^{(\beta)}}{\partial \gamma_{j(n+1,i)}^{(\beta)}} (\gamma_{j(n+1)}^{(\beta)} - \gamma_{j(n+1,i)}^{(\beta)}) \quad (32)$$

である。上のどちらの式についても、右辺の接線係数の項は、式(26)と(13)をそれぞれ微分し、状態量 $(\cdot)_{(n+1,i)}$ の値を用いて作成されることにする。したがって、これらの式を用いた反復計算法はニュートンラプソン法に属する。

式(31)と(32)を用いて、反復計算に用いるための有限要素方程式を導くため、各有限要素内における変位 u_i^* とすべり $\gamma^{(\beta)}$ を次のように表す⁽⁸⁾。

$$u_i^* = \sum_{k=1}^{k_m} M^{(k)} U_i^{*(k)}, \quad \gamma^{(\beta)} = \sum_{k=1}^{k_n} N^{(k)} \Gamma_{(k)}^{(\beta)} \quad (33)$$

ここで $M^{(k)}$ と $N^{(k)}$ はそれぞれ形状関数であり、 k_m と k_n は各有限要素を構成するそれぞれの節点数である。このとき、式(27)~(29)の均質化方程式を解くために必要である状態量 σ_{ij} と $\tau^{(\beta)}$ は、マトリックス形式の表現を用いて、それぞれ、

$$\sigma_{(n+1)} - \sigma_{(n+1,i)} = \mathbf{C} (\mathbf{E}_{(n+1)} - \mathbf{E}_{(n+1,i)}) + \mathbf{CB} (\mathbf{U}_{(n+1)}^* - \mathbf{U}_{(n+1,i)}^*) - \mathbf{CPN} (\mathbf{\Gamma}_{(n+1)} - \mathbf{\Gamma}_{(n+1,i)}) \quad (34)$$

$$\tau_{(n+1)} - \tau_{(n+1,i)} = \mathbf{P}^T \mathbf{C} (\mathbf{E}_{(n+1)} - \mathbf{E}_{(n+1,i)}) + \mathbf{P}^T \mathbf{CB} (\mathbf{U}_{(n+1)}^* - \mathbf{U}_{(n+1,i)}^*) - \mathbf{P}^T \mathbf{CPN} (\mathbf{\Gamma}_{(n+1)} - \mathbf{\Gamma}_{(n+1,i)}) \quad (35)$$

と書くことができる。また、 $k^{(\beta)}$ と $\xi_i^{(\beta)}$ は、式(31)と(32)より、

$$\mathbf{k}_{(n+1)} - \mathbf{k}_{(n+1,i)} = \mathbf{\Phi}_{(n+1,i)} \mathbf{N} (\mathbf{\Gamma}_{(n+1)} - \mathbf{\Gamma}_{(n+1,i)}) \quad (36)$$

$$\xi_{(n+1)} - \xi_{(n+1,i)} = \mathbf{\Psi}_{(n+1,i)} \mathbf{H} (\mathbf{\Gamma}_{(n+1)} - \mathbf{\Gamma}_{(n+1,i)}) \quad (37)$$

である。ここで、 \mathbf{C} と \mathbf{P} は弾性剛性 c_{ijkl} とシュミットテンソル $p_{ij}^{(\beta)}$, $\mathbf{\Phi}_{(n+1,i)}$ と $\mathbf{\Psi}_{(n+1,i)}$ はそれぞれ式(31)と(32)の接線係数である。また、 \mathbf{B} は式(33)₁の形状関数に基づくひずみ-変位マトリックス、式(33)₂の形状関数が \mathbf{N} , そのこう配マトリックスが \mathbf{H} である。最後に $(\cdot)^T$ は転置記号である。

3.4. 有限要素方程式 式(34)~(37)を式(27)~(29)の均質化方程式に代入することによって、次の有限要素方程式が組み立てられる。

$$\begin{bmatrix} \mathbf{K}_{00} & \mathbf{K}_{0*} & \mathbf{K}_{0\gamma} \\ \mathbf{K}_{*0} & \mathbf{K}_{**} & \mathbf{K}_{*\gamma} \\ \mathbf{K}_{\gamma 0} & \mathbf{K}_{\gamma*} & \mathbf{K}_{\gamma\gamma} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{E}_{(n+1)} - \mathbf{E}_{(n+1,i)} \\ \mathbf{U}_{(n+1)}^* - \mathbf{U}_{(n+1,i)}^* \\ \mathbf{\Gamma}_{(n+1)} - \mathbf{\Gamma}_{(n+1,i)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{R}_0 \\ \mathbf{R}_* \\ \mathbf{R}_\gamma \end{bmatrix} \quad (38)$$

ここで、 $\mathbf{K}_{00} = \langle \mathbf{C} \rangle$, $\mathbf{K}_{0*} = \langle \mathbf{CB} \rangle$, $\mathbf{K}_{0\gamma} = -\langle \mathbf{CPN} \rangle$, $\mathbf{K}_{*0} = \mathbf{K}_{0*}^T$, $\mathbf{K}_{**} = \langle \mathbf{B}^T \mathbf{CB} \rangle$, $\mathbf{K}_{*\gamma} = \langle \mathbf{B}^T \mathbf{CPN} \rangle$, $\mathbf{K}_{\gamma 0} = \mathbf{K}_{0\gamma}^T$, $\mathbf{K}_{\gamma*} = \mathbf{K}_{*\gamma}^T$, $\mathbf{K}_{\gamma\gamma} = -\langle \mathbf{N}^T \mathbf{P}^T \mathbf{CPN} \rangle + \langle \mathbf{N}^T \mathbf{\Phi}_{(n+1,i)} \mathbf{N} \rangle + \langle \mathbf{H}^T \mathbf{\Psi}_{(n+1,i)} \mathbf{H} \rangle$, $\mathbf{R}_0 = \mathbf{\Sigma}_{(n+1)} - \langle \sigma_{(n+1,i)} \rangle$, $\mathbf{R}_* = -\langle \mathbf{B}^T \sigma_{(n+1,i)} \rangle$, $\mathbf{R}_\gamma = -\langle \mathbf{N}^T \tau_{(n+1,i)} \rangle + \langle \mathbf{N}^T \mathbf{k}_{(n+1,i)} \rangle + \langle \mathbf{H}^T \xi_{(n+1,i)} \rangle$ である。反復計算を行うことによって、 $\mathbf{E}_{(n+1)}$, $\mathbf{U}_{(n+1)}^*$, $\mathbf{\Gamma}_{(n+1)}$ の値は更新される。また、小さな値 δr を設定しておき、最大値で正規化された $\mathbf{E}_{(n+1)} - \mathbf{E}_{(n+1,i)}$, $\mathbf{U}_{(n+1)}^* - \mathbf{U}_{(n+1,i)}^*$, $\mathbf{\Gamma}_{(n+1)} - \mathbf{\Gamma}_{(n+1,i)}$ のそれぞれの成分がすべてこの許容値より小さくなったときに反復計算の収束が達成されたとみなす。

3.5. 式(12)の高次応力の導入方法 ここまでの離散化の枠組みに高次応力を導入するためには、式(32)に示されるように、高次応力 $\xi_i^{(\beta)}$ の $\gamma_j^{(\beta)}$ に関する微分が可能でなければならない。しかしながら、式(12)の GN 転位の自己エネルギーに基づく高次応力は、Fig.2 に示されるように、 $\gamma_{-j}^{(\beta)} = 0$ でステップ的に変化し、微分可能ではない。そこで、次のように近似的に表現することを考える。

$$\xi_i^{(\beta)} = \chi^{(\beta)} a \mu b v_i^{(\beta)}, \quad \chi^{(\beta)} = \frac{2}{\pi} \arctan \left(\frac{\rho_G^{(\beta)}}{\rho_0} \right) \quad (39)$$

上式の ρ_0 は近似の程度を表す係数であり、材料特有の定数ではないことに注意が必要である。Fig.2 の点線は、式(39)

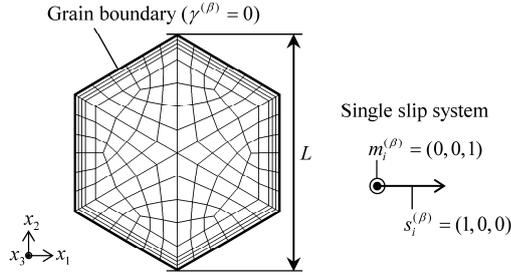


Fig.4 Hexagonal model grain with a single slip system and slip constrained on grain boundary, and its finite element meshes (234 elements, 734 nodes).

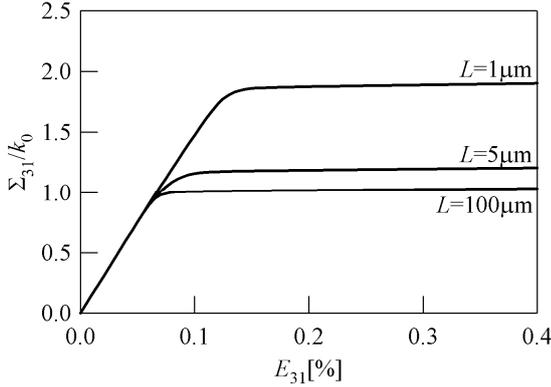


Fig.5 Macroscopic stress-strain relation for $L=1\mu\text{m}$, $5\mu\text{m}$, and $100\mu\text{m}$.

を表しており、 ρ_0 に小さな値を選ぶことによって、式(12)と式(39)は等価になると考えられる。

4. 有限要素解析

この章では、前章で示した陰的有限要素離散化手法を用いて、六角形結晶粒モデルを有限要素解析し、解析解との比較によって、解析手法の妥当性を確かめるとともに、準陰解法⁽⁸⁾との比較によって、増分安定性や計算効率についても議論する。

4.1. 有限要素モデル 2.5節の解析解との比較を容易にするために、有限要素モデルを以下に述べるように作成した。はじめに、Fig.4に示すように、六角形結晶粒を周期単位 Y であるとみなし、粒界での境界条件として、擾乱変位増分には Y 周期境界条件を与え、すべりには式(17)に示されるすべり拘束条件を与える。また、負荷条件として、巨視的なせん断ひずみ E_{31} を一定速度 $\dot{E}_{31} = 0.05\% \text{sec}^{-1}$ で与える。結晶粒の代表長さ L は、 $1\mu\text{m}$ 、 $5\mu\text{m}$ 、 $100\mu\text{m}$ の場合をそれぞれ解析する。

結晶粒を構成している単結晶体の弾性係数は等方的であるとして、ヤング率を 121GPa 、ポアソン比を $1/3$ と与える。したがって、これらの値より、式(25)の弾性剛性 c_{ijkl} は決定され、せん断係数 μ は 45.4GPa である。次に、式(26)の粘塑性則に含まれる材料定数には、 $\dot{\gamma}_0 = 0.1\% \text{sec}^{-1}$ 、 $k_0 = 0.0005 \times E$ 、 $n = 0.05$ の値を用いる。本解析では、 $\dot{\gamma}_0$ に $\dot{\epsilon}_{31}^0$ の2倍の値を選び、 n に比較的小きな値を選ぶことによって、この粘塑性則が擬似的にすべり抵抗を k_0 とする時間非依存応答をするものとみなす。さらに、式(39)の高次応力に含まれる材料定数として、パーガースベクトルの大きさ b を

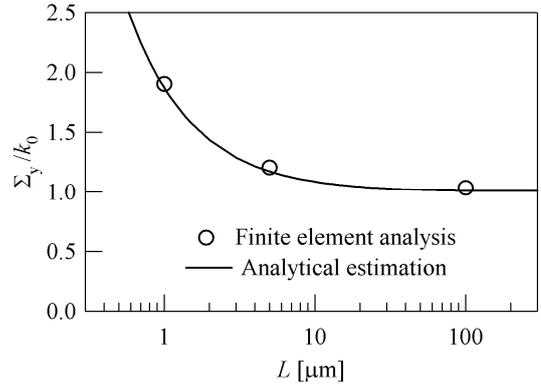


Fig.6 Comparison of finite element analysis and analytical estimation of Eq. (23) for hexagonal model grain.

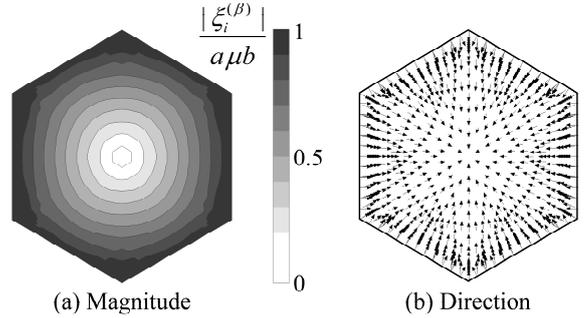


Fig.7 Distribution of higher-order stress for $L=1\mu\text{m}$ at $E_{31}=0.4\%$.

$2.5 \times 10^{-4}\mu\text{m}$ 、係数 a を 1 とする。また、近似係数 ρ_0 には $6.25 \times 10^{-8} b^{-2}$ 、収束判定に用いる微小値 δr には 10^{-8} をそれぞれ用いる。これらの値は、十分に収束した解を得るために、あらかじめ試験計算を行うことによって決定された。

Fig.4 に示される有限要素分割には、 x_3 方向に一般化平面ひずみ条件 ($\partial u_i^* / \partial x_3 = 0$ 、 $\partial \gamma^{(\beta)} / \partial x_3 = 0$) を適用し、二次元のアイソパラメトリック八節点二次要素 ($k_m = k_n = 8$) を用いる。また、時間増分は一定値 $\Delta t = 0.1\text{sec}$ とする。

4.2. 妥当性 Fig.5 は巨視的な応力ひずみ関係であり、GN 転位の自己エネルギーに基づく高次応力 (理論的には式(12)、近似的には式(39)) の導入によって、結晶粒モデルの降伏応力には顕著な粒径依存性が現れることを示している。十分に大きな結晶粒 ($L=100\mu\text{m}$) では、結晶粒モデルの降伏はおおよすべり抵抗 k_0 の値で生じる。これに対して、結晶粒が小さくなると、降伏応力は増大する。

Fig.5 の結果の妥当性を確かめるために、巨視的ひずみ E_{31} が 0.4% での巨視的応力 Σ_{31} を初期降伏応力 Σ_y とみなし、初期降伏応力 Σ_y と結晶粒の長さ L の関係をプロットした図が Fig.6 である。図中の○印と実線はそれぞれ有限要素解析の結果と式(23)の六角形結晶粒モデルの解析解の結果であり、有限要素解析の結果は解析解より若干大きい値を示す傾向にある。しかしながら、この差はわずかであり、有限要素解析の結果は解析解とよい一致を示すことがわかる。

つづいて、Fig.7 は $L=1\mu\text{m}$ の場合の $E_{31}=0.4\%$ における結晶粒内での高次応力の分布である。Fig.7(a)は高次応力の大きさ $|\xi_i^{(\beta)}| / (a\mu b)$ を示しており、粒界において $a\mu b$ となり、中

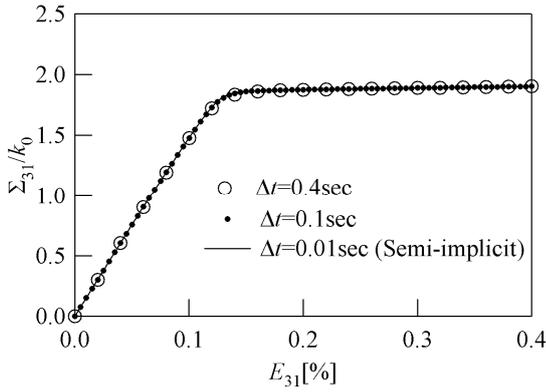


Fig.8 Influence of time increment on macroscopic stress-strain relation for $L=1\mu\text{m}$.

Table 1 Total number of solving finite element equations needed for getting to $E_{31}=0.4\%$ with $L=1\mu\text{m}$.

Time increment Δt [sec]	Present method		Semi-implicit ⁽⁸⁾
	0.1	0.4	0.01
Total number	370	151	800

心部では零となる。また、Fig.7(b)はその方向を示しており、粒界に対して面内垂直であり、全体には中心部を向いている。このような傾向は、前報⁽²⁾における円形結晶粒モデルの解析結果と完全に対応している。

4.3. 増分安定性と計算効率 増分安定性を調べた結果をFig.8に示す。図中には、時間増分を0.1secのほかにも0.4sec（これ以上の大きさでは、安定した増分計算が行えなかった）とした場合の結果、さらには準陰解法⁽⁸⁾を用いたときの結果が示されている。ただし、準陰解法を用いたときの時間増分は0.01secであり、これ以上に大きな時間増分では安定した増分計算を行えなかった。この図が示すように、いずれの解析も同じ結果である。すなわち、本研究における解析方法は、準陰解法と比較して、時間増分の大きさを10~40倍に大きく取ることができ、したがって、高い増分安定性を有していることがわかる。

本研究で用いる式(38)の有限要素方程式と準陰解法⁽⁸⁾で用いる有限要素方程式は基本的には同じ構造を有している。前段落で述べたように、本手法は時間増分を大きく取ることができる。しかしながら、増分を進めるために反復計算を必要とする。したがって、計算効率を比較するためには、有限要素方程式を何回解いたかを比較すればよい。Table 1は、それぞれの解析方法において、 $L=1\mu\text{m}$ の場合の巨視的ひずみ E_{31} が0.4%に達するまでに有限要素方程式を解いた回数である。この表が示すように、本手法は、準陰解法と比較して、2~5倍程度の高い計算効率を示している。したがって、計算効率の観点からも本論文で提案する手法は優れている。

5. 結 言

本論文では、ひずみこう配結晶塑性理論に基づいた効率的な有限要素解析手法の開発を目的として、ひずみこう配結晶塑性を考慮した均質化方程式⁽⁸⁾の陰的有限要素離散化を行

った。高次応力にはGN転位の自己エネルギー⁽²⁾に基づくものを用い、結晶粒モデルの解析によって、妥当性の確認と増分安定性、計算効率の検討を行った。

得られた知見を以下にまとめると、まず、導出された有限要素方程式は、後退オイラー法とニュートンラプソン法に基づいている。したがって、この方程式を用いた反復計算は完全な陰解法であり、収束解は増分変形後のつり合い状態を満足する。つづいて、結晶粒モデルの有限要素解析の結果は、解析解の有する特徴と定性的かつ定量的にも一致しており、したがって、本論文で構築した陰的有限要素離散化の方法は妥当である。また、準陰解法⁽⁸⁾を用いた解析と比較して、増分安定性については10~40倍、計算効率についても2~5倍程度に優れていることがわかった。

最後に、本論文では、結果の検証を容易にするために、均質化方程式に対して陰的有限要素離散化の方法を示した。また、解析対象には非常に単純な結晶粒モデルを用いた。しかしながら、本論文で示した離散化の方法は、一般の境界値問題に対しても適用可能であり、したがって、ひずみこう配結晶塑性理論に基づいた効率的な有限要素解析を行う上で、大変有用であるといえる。

本研究の一部は科研費（課題番号19360048, 20760069）の助成を受けたものであり、深く感謝の意を表す。

参考文献

- (1) M.F. Ashby: Deformation of plastically non-homogeneous materials, *Phil. Mag.*, **21**(1970), pp.399-424.
- (2) N. Ohno, D. Okumura: Higher-order stress and grain size effect due to self-energy of geometrically necessary dislocations, *J. Mech. Phys. Solids*, **55**(2007), pp.1879-1898.
- (3) R.J. Asaro: Micromechanics of crystals and polycrystals, *Adv. App. Mech.*, **23**(1983), pp.1-115.
- (4) M.E. Gurtin: A gradient theory of single-crystal viscoplasticity that accounts for geometrically necessary dislocations, *J. Mech. Phys. Solids*, **50**(2002), pp.5-32.
- (5) E. Bittencourt, A. Needleman, M.E. Gurtin, E. Van der Giessen: A comparison of nonlocal continuum and discrete dislocation plasticity predictions, *J. Mech. Phys. Solids*, **51**(2003), pp.281-310.
- (6) S.P. Lele, L. Anand: A small-deformation strain-gradient theory for isotropic viscoplastic materials, *Phil. Mag.*, **88**(2008), pp.420-453.
- (7) M. Kuroda, V. Tvergaard: Studies of scale dependent crystal viscoplasticity models, *J. Mech. Phys. Solids*, **54**(2006), pp.1989-1910.
- (8) D. Okumura, Y. Higashi, K. Sumida, N. Ohno: A homogenization theory of strain gradient single-crystal plasticity and its finite element discretization, *Int. J. Plasticity*, **23**(2007), pp.1148-1166.
- (9) J.P. Hirth, J. Lothe: *Theory of dislocations*, (1982), John Wiley & Sons.