

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 28 年 5 月 27 日現在

機関番号：32660

研究種目：若手研究(B)

研究期間：2014～2015

課題番号：26790081

研究課題名(和文) 離散転位動力学を基礎とするマルチスケール多結晶転位塑性モデルの構築

研究課題名(英文) Development of multiscale polycrystal plasticity model based on discrete dislocation dynamics

研究代表者

高橋 昭如 (Takahashi, Akiyuki)

東京理科大学・理工学部・准教授

研究者番号：00366444

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 2,900,000円

研究成果の概要(和文)：重ね合わせの原理と均質化法を三次元転位動力学法に適用し、マルチスケール多結晶転位塑性モデルを構築した。ハイブリッド並列化を行い、計算の高速化に成功した。双結晶中の転位ループが作る応力場を計算した結果、理論解と一致する解を得ることができた。

銅の多結晶体の塑性変形を計算した結果、弾性異方性を考慮すると、弾性等方性の場合と比べて高い変形応力になることがわかった。その原因を調べるために、転位に作用する力を計算した結果、単結晶中では与えた変形(ひずみ)から生じる応力が弾性異方性と等方性で大きく異なることがわかった。多結晶中では、粒界付近の応力集中が低いシュミット因子の転位源を活性化することがわかった。

研究成果の概要(英文)：A multiscale polycrystal dislocation plasticity model was developed by applying the superposition principle and homogenization theory to 3D dislocation dynamics. The model was then implemented into a parallel computer environment using a hybrid parallelization model. The stress field in a bi-crystal with a dislocation loop was calculated. The numerical result agrees well with the analytical solution.

Plastic deformation of a copper polycrystal was simulated. The flow stress calculated with the elastic anisotropy becomes higher than that calculated with the elastic isotropy. In order to reveal the mechanism, the force acting on dislocations was calculated. It could be found that, the stress arisen from the externally applied deformation (strain) in elastically anisotropic single crystals is larger than that in elastically isotropic single crystals. In polycrystals, dislocation sources with low Schmid factors are activated by the stress concentration at crystal grain boundaries.

研究分野：計算材料科学

キーワード：転位 離散転位動力学 マルチスケール 多結晶 弾性異方性

1. 研究開始当初の背景

金属の機械的特性を強化する最も一般的な方法として、結晶粒径依存性(寸法効果)を応用した、結晶粒微細化強化がある。この機械的特性強化の指標として、ホール・ペッチの関係が用いられてきた。しかし、ホール・ペッチの関係は経験則であるため、結晶粒径依存性の詳細なメカニズムの理解に至っていない。さらに、近年ではマイクロ/ナノスケールの寸法を持つ結晶粒から成る超微細粒金属の機械的特性の寸法効果が注目され、結晶粒微細化による強化に関して新しい議論が展開されるようになった。したがって、結晶粒微細化による金属の機械的特性の強化を精度良く制御することや、これまでにない高強度な新しい金属の創出のためには、多結晶金属の機械的特性における寸法効果のメカニズムを詳細に理解することが必要である。寸法効果のメカニズムの理解のためには、多結晶金属の塑性変形をその素過程である転位の運動から導出し、ミクロな転位の運動とマクロな塑性変形の間をマルチスケールに理解することが必要である。

2. 研究の目的

多結晶金属の塑性変形を転位の運動によるミクロな塑性変形からマクロな変形までまるごと解析可能な、離散転位動力学を基礎とする三次元マルチスケール多結晶転位塑性モデルを構築する。具体的には、結晶粒の弾性異方性の考慮を可能にする重ね合わせの原理に基づく領域分割型の離散転位動力学の定式化を行い、転位の運動によるミクロな塑性変形とマクロな変形の連成を、均質化理論を応用することによって実現する。さらに、並列化を行い、高速化することによって、大規模数値解析を可能にする。構築したモデルを多結晶金属の変形解析に応用し、多結晶金属に特有の変形特性を明らかにする。

3. 研究の方法

(1) 三次元離散転位動力学による多結晶金属のミクロ・マクロ塑性変形解析の定式化と実装

これまでに開発を行ってきた、三次元離散転位動力学を基礎として、領域分割型の重ね合わせの原理を応用し、弾性異方性を有する多結晶の転位の運動に基づいた塑性変形解析を実現する。さらに、均質化理論を応用し、多結晶金属の機械的特性を導くことを可能にする。

(2) 多結晶構造の有限要素モデルの作製法の開発

多結晶金属中の各結晶粒を四面体に分割し、その四面体を六面体要素に分割することによって、簡便に多結晶の有限要素モデルを作成する方法を開発する。

(3) 開発したモデルの検証

開発したモデルの精度検証を行う。具体的には、多結晶金属中で転位が作る応力を計算し、その結果を解析解と比較する。

(4) 並列化による計算の高速化

転位動力学では、転位の移動速度の計算量が転位の要素分割数の自乗に比例するため、転位密度が増加すると、計算量(計算時間)が飛躍的に増加する。すなわち、大規模な転位動力学シミュレーションを実施するためには、計算の並列化による高速化が必要である。本研究では、大規模数値計算を可能にすることを目的として、分散メモリ型および共有メモリ型の計算機の両者に対して MPI および OpenMP を用いたハイブリッド並列化を行い、計算速度の高速化を行う。

(5) 多結晶金属の塑性変形解析

開発したマルチスケール多結晶転位塑性モデルを用いて、多結晶金属の塑性変形を転位の運動から解析し、多結晶金属特有の変形メカニズムを転位の観点から調べる。さらに、弾性異方性を考慮した数値解析を行い、弾性異方性が与える塑性変形への影響を明らかにし、多結晶金属の塑性変形解析において、弾性異方性を考慮することの必要性を調べる。

4. 研究成果

(1) 従来、転位動力学の有限体問題や析出物問題への応用のための方法として、重ね合わせの原理が用いられてきたが、弾性定数の異なる領域の体積が大きい場合には適用が困難である問題があった。そこで、重ね合わせの原理の一種である領域分割型の重ね合わせの原理を転位動力学に適用し、弾性異方性を考慮した多結晶中の転位の応力を精度良く計算する方法の実装に成功した。さらに、多結晶金属の特性を評価するために、均質化理論を、本手法に適用し、多結晶のバルク状態の数値解析を可能にした。

(2) 多結晶構造を多面体の集合と近似し、六面体要素で要素分割を行うコードを開発した。まず個々の結晶粒において、各面を面の重心と一辺からなる三角形に分割し、その三角形と結晶粒の重心をつなぐ四面体を作成する。このようなやり方によって、任意の多面体を四面体の集合に容易に分割することが可能である。さらに、四面体について六面体要素を用いた分割パターンを適用すれば、四面体を六面体に分割することが可能である。すべての四面体が同様のパターンで分割されることから、最終的にすべての四面体を組み合わせることによって、結晶粒の六面体要素分割を行うことができ、さらに結晶粒を組み合わせることによって多結晶の六面体要素モデルを作成することを可能にした。

(3) 多結晶中の転位が作る応力の解析的

な研究は非常に限られているが、双結晶中の転位ループが作る応力の解析解との比較を行った。具体的には、2つの立方体結晶粒を作成し、これらを合体させることによって、双結晶モデルを作成した。さらに、1つの転位ループを片方の結晶粒内に作成し、他方の結晶粒内のできる応力について計算した。その結果と解析解を比較し、一致する解を得ることができた。すなわち、本計算手法により多結晶中の転位が作る応力を精度良く計算できることを確認した。

(4) 結晶粒の持つ弾性異方性を取り扱うために適用した領域分割型の重ね合わせの原理では、各結晶粒内の転位が、結晶粒界位置に作る無限体中での応力と変位を計算し、多結晶として各結晶粒界において変位の連続性と面力の釣り合いを満足するように計算する。すなわち、転位の弾性場の直接的な計算は、各結晶粒内に閉じており、他の結晶粒に作る弾性場は、結晶粒界における変位の連続性と面力の釣り合いの計算の結果として計算される。この性質を利用し、各結晶粒を各計算ノードに割り当て、転位が結晶粒界に作る応力や転位間の相互作用は、マルチコア(共有メモリ)を用いて計算し、結晶粒界における変位の連続性と面力の釣り合いは、分散メモリ並列によって、共役勾配法を用いて解く方法を実装した。特に共有メモリ型並列には OpenMP を用い、分散メモリ型並列には MPI を採用し、ハイブリッド型並列モデルを実装した。さらに、共役勾配法の前処理として、不完全対角前処理付きバランシング領域分割法を採用し、大規模問題においても安定して収束解を得ることを可能にした。

(5) 開発したマルチスケール多結晶転位塑性モデルを用いて、多結晶銅の塑性変形解析を実施した。弾性異方性を考慮し、結晶粒の大きさを2から8 μm に変化させ、応力歪み関係を計算した結果、小さい結晶粒の場合において高い変形応力が計算された。すなわち、一般的なホール・ペッチの関係に見られる。結晶粒が小さくなることによって変形応力が大きくなる現象を再現することに成功した。さらに、弾性等方性を仮定した計算も行い、弾性異方性を考慮した場合と比較した結果、弾性異方性を考慮した場合の方が低い変形応力となることがわかった。また、転位の運動を観察すると、弾性等方性を仮定した場合は、高いシュミット因子を持つ転位源のみが活動していたのに対し、弾性異方性を仮定すると、低いシュミット因子を持つ転位源も活動することがわかった。これらの要因を調べるために、単結晶および多結晶中における転位に作用する力を調べた。その結果、単結晶中において、転位が感じる自己力や、他の転位から受ける相互作用力は、弾性異方性や等方性の影響を強く受けていないことがわかった。一方、外力として加える変形(

ひずみ)について、そのひずみが物体中に生み出す応力の大きさについて大きな違いがあることがわかった。一方、多結晶中において、転位限の活性化応力について調べたところ、結晶粒界付近において、特に低いシュミット因子を持つ転位限の活性化応力が著しく低下することがわかった。これは、外力に加えて、結晶粒界間の変形の違いに起因する結晶粒界における応力集中が転位の活性化を促進している結果であることがわかった。低いシュミット因子の転位源からの転位が与えるマクロな応力-ひずみ応答への影響を調べるために、低いシュミット因子の転位源を除いた場合の塑性変形解析も実施した。その結果、応力-ひずみ関係上には大きな影響は見られず、微視的な転位組織にのみ影響を与えるものであることがわかった。

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文](計 3 件)

河手遥, 高橋昭如, FCC 金属中のすべり面間相互作用の3次元転位動力学モデリング, 日本機械学会第28回計算力学講演会講演論文集, 査読無, CD-ROM, 2015
鈴木祐哉, 高橋昭如, 多結晶金属の塑性変形における弾性異方性の影響の基礎的検討, 第20回計算工学講演会講演論文集, 査読無, CD-ROM, 2015
河手遥, 高橋昭如, FCC 金属中のすべり面間相互作用の3次元転位動力学解析, 第19回計算工学講演会講演論文集, 査読無, CD-ROM, 2014

[学会発表](計 9 件)

Y. Suzuki, A. Takahashi, Influence of Elastic Anisotropy on Flow Stress of Polycrystalline Metals: A Dislocation Dynamics Study, KSME-JSME Joint Symposium on Computational Mechanics & CAE 2015, 2015年10月26日, 早稲田大学
河手遥, 高橋昭如, FCC 金属中のすべり面間相互作用の3次元転位動力学モデリング, 日本機械学会第28回計算力学講演会, 2015年10月11日, 横浜国立大学
H. Kawate, A. Takahashi, Dislocation Dynamics Modeling of Slip System Interactions in FCC Metals, 13th U.S. National Congress on Computational Mechanics, 2015年7月29日, サンディエゴ(アメリカ)
高橋昭如, 離散転位動力学シミュレーションの基礎と非均質体への応用, 第122回金属物性研究会「金属材料に含まれる転位組織と運動解析の最前線」2015年6月27日, 島根大学
鈴木祐哉, 高橋昭如, 多結晶金属の塑性

変形における弾性異方性の影響の基礎的
検討, 第 20 回計算工学講演会講演論文集,
2015 年 6 月 8 日, つくば国際会議場

Y. Suzuki, A. Takahashi, Dislocation
Dynamics Study on Influence of Elastic
Anisotropy in Polycrystal Plastic
Deformation, Mechanical Engineering
Seminar 2015, 2015 年 3 月 25 日, 諏訪
東京理科大学

A. Takahashi, Role elastic anisotropy
in plastic deformation of
polycrystalline metals: A dislocation
dynamics study, 11th World Congress
on Computational Mechanics, 2014 年 7
月 24 日, バルセロナ (スペイン)

河手遥, 高橋昭如, FCC 金属中のすべり
面間相互作用の 3 次元転位動力学解析,
第 19 回計算工学講演会, 2014 年 6 月 11
日, 広島国際会議場

A. Takahashi, Role of elastic anisotropy
in plastic deformation of polycrystals,
SKKU-TUS Workshop, Sungkyunkwan
University (韓国), 2014 年 5 月 22 日)

(3) 連携研究者
()

研究者番号:

〔図書〕(計 0 件)

〔産業財産権〕
出願状況 (計 0 件)

名称:
発明者:
権利者:
種類:
番号:
出願年月日:
国内外の別:

取得状況 (計 0 件)

名称:
発明者:
権利者:
種類:
番号:
取得年月日:
国内外の別:

〔その他〕
ホームページ等

6. 研究組織

(1) 研究代表者

高橋 昭如 (TAKAHASHI, Akiyuki)
東京理科大学・理工学部・准教授
研究者番号: 00366444

(2) 研究分担者

()

研究者番号: