

平成 22 年 5 月 1 日現在

研究種目： 若手研究(B)
 研究期間： 2008 ～ 2009
 課題番号： 20760069
 研究課題名(和文) 転位の離散的特性を考慮した非局所結晶塑性理論の構築とマルチスケール解析による検証
 研究課題名(英文) Development of nonlocal crystal plasticity theory accounting for discrete dislocation properties and its verification due to multiscale analysis
 研究代表者
 奥村 大 (OKUMURA DAI)
 名古屋大学・大学院工学研究科・講師
 研究者番号： 70362283

研究成果の概要(和文)：本研究では、理論構築として、幾何学的に必要な転位の自己エネルギーを考慮した非局所結晶塑性モデルを新たに開発した。つづいて、このモデルに基づいた有限要素解析のために、陰解法を用いた効率的な解析手法を開発し、従来法と比較することによって、本手法は増分安定性や計算効率において優れていることを確かめた。さらに、この理論を検証するために、離散転位動力学解析のための均質化理論の定式化を行った。

研究成果の概要(英文)：In this study, a strain gradient theory of crystal plasticity that accounts for the self-energy of geometrically necessary dislocations was developed. Then, an implicit iterative finite element scheme for the theory was also developed. It was demonstrated that this scheme is superior to the conventional method from the point of the incremental stability as well as of the computational efficiency. Furthermore, to verify the theory, the formulation of a homogenization theory for discrete dislocation dynamics analysis was successfully performed.

交付決定額

(金額単位：円)

| | 直接経費 | 間接経費 | 合計 |
|---------|-----------|---------|-----------|
| 2008 年度 | 2,400,000 | 720,000 | 3,120,000 |
| 2009 年度 | 900,000 | 270,000 | 1,170,000 |
| 年度 | | | |
| 年度 | | | |
| 年度 | | | |
| 総計 | 3,300,000 | 990,000 | 4,290,000 |

研究分野：工学

科研費の分科・細目：機械工学・機械材料・材料力学

キーワード：塑性，転位，材料強度，離散転位動力学法，ひずみこう配理論

1. 研究開始当初の背景

非局所結晶塑性理論はマイクロ～ナノ領域における単結晶金属の塑性変形を連続体力学の枠組みで表現できる理論として注目されており、この理論を用いて数値解析を行えば、マイクロ・ナノマシンに用いられる超

微小機械要素や超微細粒多結晶体の高精度な変形および強度の評価が可能になるだけでなく、これらの材料の有するスケール依存性の発現機構に関する統一的な解明も期待できる。しかしながら、非局所結晶塑性理論において幾何学的に必要な転位（GN 転位）

と呼ばれる転位の力学的な挙動はまだ十分に明らかにされておらず、とりわけ界面での転位挙動を正確に予測できる理論の確立が要求される。さらに、GN 転位は塑性変形の高次こう配として表され、非局所塑性理論を用いた有限要素解析を行うためには、従来の有限要素離散化とは異なる解析手法の開発が新たに必要になる。したがって、上述のようなスケール依存性を有する材料の解析のためには、界面における GN 転位の挙動を詳細に表現することのできる非局所結晶塑性理論の構築ならびに効率的かつ高精度な解析手法の確立が重要な課題となる。なお、理論の特徴および妥当性を確かめるためには、実験結果との比較のほかにも、離散転位力学シミュレーションを用いたマルチスケール解析との比較研究が非常に有用である。

2. 研究の目的

そこで本研究では、界面に堆積する転位の再可動性に着目することによって、非局所結晶塑性理論を再構築する。このため、従来とは異なった新しい形式によって GN 転位密度を定義する。また、構築された理論を用いて効率的かつ高精度な数値解析を行うために、均質化理論に基づく有限要素離散化の方法を考案する。つづいて、離散化の妥当性を確かめるために、結晶粒モデルと多結晶モデルの有限要素解析を行うとともに、本理論と従来の理論の違いを調べる。さらには、離散転位力学解析のための均質化理論の定式化を行い、結果を比較することによって、転位の離散的な挙動との対応関係から本理論の特徴を調べる。

3. 研究の方法

はじめに、界面に堆積する転位の再可動性に着目し、非局所結晶塑性理論を再構築する。このためまず、従来とは異なる形式での GN 転位密度を考える。つづいて、転位論に基づき転位の有する弾性ひずみエネルギーを検討し、GN 転位密度に対応する自由エネルギーを導出する。最後に、この自由エネルギーを用いて非局所結晶塑性理論の再定式化を行う。

次に、構築した理論に基づく有限要素解析手法を開発する。このため最初に、著者らの開発した均質化理論に基づく有限要素離散化の枠組みを拡張することによって、多結晶塑性の粒径依存性を解析するためのマルチスケール解析手法を開発する。ここでは増分安定性や計算効率の向上を目指して、完全陰解法に基づいた離散化を行い、解くべき有限要素方程式を導く。離散化の妥当性を確かめるために、結晶粒モデルの解析結果と解析解を比較する。従来の非局所塑性理論に基づく解析も行い、ミクロとマクロの双方の観点か

らこれらの理論の特徴の違いを調べる。

最後に、離散転位力学シミュレーションとの比較から、本理論が再現する転位の力学的挙動の妥当性を検討する。このため、離散転位力学解析のための均質化理論の定式化を行う。

4. 研究成果

最終的に得られた成果は3つの査読付き論文に主にまとめられている（5章参照）。したがって、この章では、これらの3つの成果について、順に述べることにする。

① 転位の離散的な特性を考慮した非局所結晶塑性理論の構築を目的として、この研究では、逆負荷時の転位の再可動性に着目して、著者らの理論(Ohno and Okumura 2007)の拡張を行った。すなわち、GN 転位の自己エネルギーに基づく自由エネルギーを従来の結晶塑性理論に導入し、この結果として、すべりのこう配に共役な高次応力とそのつり合い式を導いた。ただし、前報との違いは、自由エネルギーを GN 転位密度の関数とするのではなく、累積 GN 転位密度の関数として定義していることにあり、累積塑性ひずみの考え方を GN 転位に対して適用したものである。この拡張は、逆負荷時には堆積した GN 転位が再可動化するのではなく、異なるすべり面の転位が可動化するという物理的特徴をモデル化したものであるといえる。

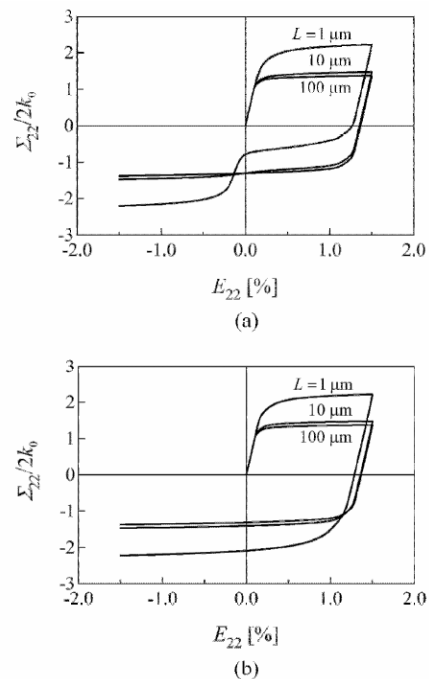


図1. 多結晶モデル (L : 結晶粒径) の巨視的応力ひずみ曲線 (a) 従来の高次応力, (b) 新しい高次応力.

多結晶モデルの解析に対して、ふたつの

高次応力をそれぞれ適用したところ、図1に示されるように、従来の高次応力を用いた場合には、粒径が小さいときの逆負荷時においてに不自然なバウシinger効果を予測するのに対して、拡張されたモデルでは等方硬化的で自然な応答を示すことがわかった。実験観察において、上述のようなバウシinger効果が観察されていないことを考えると、GN転位の自己エネルギーを考慮した非局所結晶塑性理論の構築において、GN転位密度を用いるのではなく、累積GN転位密度を用いることは適切であるといえ、この結果は構築された理論の妥当性および有用性を示している。

- ② ひずみこう配(非局所)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(Ohno and Okumura 2007; Ohno et al. 2008)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、図2に示されるように、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、本研究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(Okumura et al. 2007)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。

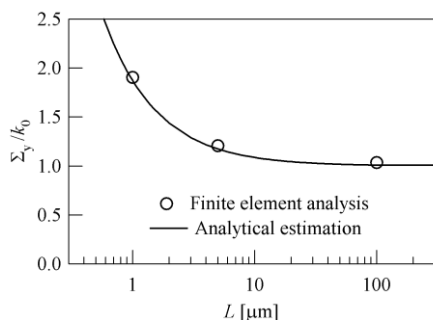


図2. 有限要素解析結果と解析解との比較

最後に、この研究では、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、本研究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。

- ③ 離散転位動力学解析のための均質化理論の定式化に関する研究では、解析する問題を設定し、理論を展開した。また、この結果として、解くべき均質化方程式を導くとともに、複合材料モデルの解析によって、その有用性を確かめた。得られた知見を以下に述べる。

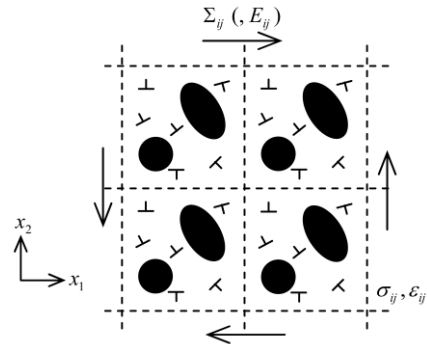


図3. 巨視的一様変形を受ける周期複合材料

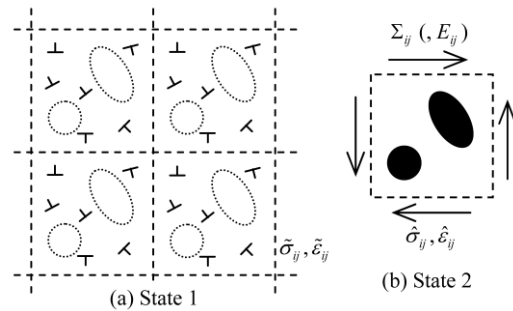


図4. 問題の分離

はじめに、母材中に転位を有する周期複合材料が巨視的一様変形を受ける問題(図3)に対して、微小変形の準静的つり合いを考え、解くべき問題を状態1と状態2に分離して考えることを示した(図4)。このような方法は文献(Van der Giessen and Needleman 1995; Cleveringa et al. 1997; Yashiro et al. 2006; Takahashi and Ghoniem 2008)でも取られているが、周期単位もしくは代表体積要素の境界条件として、Y周期境界条件を考えているところが、本研究の特徴である。

状態1の問題は、無負荷状態にあり、強化材を母材で置き換えた母材無限体中に転位が配置された問題である。この問題の微視的応力とひずみは、自己つり合い状態にあるそれぞれの転位の弾性場の解析解を重ね合わせることによって求められ、それらの分布は自発的にY周期性を満足する。また、微視的応力の巨視的応力への寄与は零であり、巨視的ひずみには、転位の運動による不連続変位、すなわちすべりの

みが寄与する。

状態1の関係に基づき、状態2の境界値問題を調べることによって、均質化方程式を導いた。この中には、弱形式の境界値問題が2つ含まれており、これらの2つの問題は、強化材の存在によって生じる擾乱変位成分と転位と強化材の相互作用によって生じる擾乱変位成分をそれぞれ求めるために有限要素解析される。さらに、導かれた均質化方程式は、弾性周期複合材料のための均質化方程式を内包しており、強化材がない場合を考えれば、外部応力を受ける母材無限体中の周期単位に対する離散転位動力学解析のための数値構造と等価であった。すなわち、本論文で構築された理論は、上述のような従来の力学問題との間に正しく整合関係を有している。

最後に解析例では、転位の弾性場の打ち切り誤差と境界条件の影響をそれぞれ調べた。打ち切り誤差の検討では、その値を十分に大きく取ることによって、巨視的かつ微視的に収束した解を得られることを示した。ただし、本理論の3次元問題への適用を考えると、いかに正確かつ高効率に転位群の弾性場を解析するかということは、重要な問題であり、例えば多重極子法(Wang and LeSar 1995)は有力な計算手法のひとつである。つづいて、周期単位境界での擾乱変位の発生を許すことは、本理論を用いることで可能であり、その発生を無視したときの結果との比較では、微視的な挙動だけでなく巨視的な応力ひずみ関係に対しても有意な差異が確認された。さらに、本理論はどのような形状の周期単位に対しても適用可能である。したがって、周期複合材料の系統的かつ高精度な離散転位動力学解析のためには、本研究で導出した均質化方程式を使用することが非常に有用であるといえる。

なお、当初の計画では、構築した非局所結晶塑性理論の妥当性を確かめるために、離散転位動力学解析との比較計算を行う予定であったが、離散転位動力学解析が必要とする計算負荷は予想以上であり、本研究において購入した計算機では実施することが出来なかった。この検討は今後の課題としたい。

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4件)

- ① R. Kametani, K. Kodera, D. Okumura, N. Ohno, Implicit iterative finite element scheme for strain gradient crystal plasticity model based on self-energy

of GNDs. Proceedings of 2010 M&M International Symposium for Young Researchers, 査読無, (2010), CD-ROM.

- ② 奥村 大, 大野信忠, 片桐慶大, 離散転位動力学解析のための均質化理論の定式化. 材料, 査読有, Vol.59 (2010), pp.149-156.
- ③ 小寺一輝, 奥村 大, 亀谷隆真, 大野信忠, 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. 日本計算数理工学論文集, 査読有, Vol.9 (2009), pp.43-48.
- ④ N. Ohno, D. Okumura, and T. Shibata, Grain-size dependent yield behavior under loading, unloading, and reverse loading. International Journal of Modern Physics B, 査読有, Vol.22 (2008), pp.5937-5942.

[学会発表] (計8件)

- ① D. Okumura, N. Ohno, A. Takeuchi, and K. Yamaguchi, Boundary value problem for discrete dislocation dynamics analysis of periodic composite materials. The 15th International Symposium on Plasticity & Its Current Applications (Plasticity 2010), Jan. 3-7 (2010), St. Kitts Island.
- ② D. Okumura, N. Ohno, and Y. Katagiri, Influence of boundary conditions on RVE analysis using discrete dislocation simulation. 1st International Conference on Material Modelling(ICMM1), Sep. 15-17 (2009), Dortmund, Germany.
- ③ D. Okumura, N. Ohno, and Y. Katagiri, Homogenization framework for discrete dislocation plasticity simulation. The 15th International Symposium on Plasticity & Its Current Applications (Plasticity 2009), Jan.3-8 (2009), St. Thomas Island.
- ④ N. Ohno and D. Okumura, Theory and simulation of size-dependent plasticity. The third Nagoya University - UCLA International Symposium (NUCLA 2008), Dec.8-9 (2008), Nagoya University, Japan.

6. 研究組織

(1) 研究代表者

奥村 大 (OKUMURA DAI)

名古屋大学・大学院工学研究科・講師

研究者番号: 70362283