

結晶弾塑性有限要素法を用いた疲労 き裂形成機構に関する研究 (その4)

正員 大 沢 直 樹* 正員 富 田 康 光*
正員 橋 本 聖 史* 正員 山 鹿 伸 幸**
学生員 安 永 亮*

Study on Fatigue Crack Initiation Process by Using Crystalline FEM analysis (4th Report)

by Naoki Osawa *Member*

Yasumitsu Tomita *Member*

Kiyoshi Hashimoto *Member*

Nobuyuki Yamaga *Member*

Ryo Yasunaga *Student Member*

Summary

The micromechanical hardening rules developed by the authors are employed in the FE analysis of cyclic hardening behaviour of a Cu single crystal. The validity of the presented theory is examined by comparing the changing nature of the hysteresis loop shape parameters of the simulation results and experimental results. The nature of non-uniform deformation in the crystal is also investigated.

As results, the followings are found: i) The constitutive relation employed gives a good account of the changing nature of hysteresis loop of Cu single crystals qualitatively when the mutual trapping of dislocations into dipoles and multipoles is considered. ii) The Bauschinger energy parameter reaches its maximum when the finite secondary slip onsets. This leads to the assumption that PSB formation begins when the finite secondary slip arises. iii) The localization of secondary slip occurs even if there is not severe stress concentration. The stress redistribution caused by the onset of secondary slip in the area at which stress concentrates leads this phenomena.

1. 緒 言

疲労き裂形成過程の最初期過程は残存すべり帯 (persistence slip band, PSB) 形成過程であるが, その物理的機構は不明な点が多く, PSB 形成過程の計算力学モデルは未だ確立されていない。このことが, き裂発生過程を力学的に解明する際の最大の障壁になっている。

PSB は, 繰返し硬化飽和直後に塑性変形の局在化と微視的組織変化が同時に進行して発生する。この現象を解明するには, 材料の微視的構造の差異が直接変形特性に反映されるようなすべり系硬化則を用いて, 繰返し硬化中の組織変化と変形局在化を同時に解析する必要がある。そのような硬化則で荷重反転を扱えるものとして, 林転位の点障害物としての作用が硬化の主因であるとする Ortiz ら¹⁾ の

理論があるが, 多数回繰返し変形の解析には実用上許容できない過大な計算コストが必要となる。

Repetto ら²⁾ はこの問題を解決する近似計算法を考案し, PSB 完成後の intrusion 発生過程の解析に応用した。著者らは, 前報³⁾ において, Repetto らの理論を拡張して二重すべり方位負荷をうける単一要素からなる面心立方結晶モデルの繰返し応力歪応答を結晶弾塑性有限要素法により解析し, 提案した硬化モデルにより Cu 単結晶の繰返し変形挙動の定性的特徴が表現可能であることを示した。

一方, 著者ら⁴⁾ は, Ortiz ら¹⁾ の理論の厳密解を導出し, 厳密解と Repetto らの近似法による計算結果を比較し, この近似法では弾塑性遷移挙動の計算精度が不十分で, 二次系上のすべりの発生の有無が重要な因子となる PSB 形成過程解析への適用には注意が必要であることを示した。さらに, 著者ら⁵⁾ は, 現実的計算コストで多数回繰返し変形の計算が可能で, 弾塑性遷移挙動も精度良く計算できる新しい近似計算法を開発した。

本報では, 著者ら⁵⁾ の近似計算法を前報で開発した結晶弾塑性有限要素法に組み込み, 単一要素からなる面心立方単

* 大阪大学大学院工学研究科

** 三菱重工業(株)

結晶モデルを用いて繰返し応力歪応答を解析する。そして、本報で採用した硬化モデルを用いると、前報の硬化モデルを用いた場合よりCu単結晶の変形挙動をより良く表現できることを示すとともに、PSB発生開始と同時期に生じることが知られているヒステリシスループ形状変化が二次系上のすべりの発生で生じることを明らかにする。さらに、複数要素からなる計算モデルにより繰返し硬化過程下の単結晶内部の不均一変形を解析し、PSB発生の必要条件と考えられる二次系上のすべりが局在化することを示す。そして、繰返し硬化と変形局在化の微視的機構について考察を加える。

2. すべり系硬化則

2.1 林転位モデルに基づくすべり系硬化

本報告では、前報³⁾と同様に、繰返し硬化中の加工硬化の主因が林転位が運動転位に点障害物として作用することであると仮定する。隣接する一対の点障害は自由転位の運動を阻止する。この点障害対を乗越えるための分解剪断応力臨界値を点障害対の強度 s と呼ぶ。

以下で、 t は時刻を表す。Ortiz ら¹⁾は、単位面積あたり $n(t)$ 個の点障害がランダムに存在する場合を考え、分解剪断応力が $\tau(t)$ となった時点での点障害対強度 s の確率分布密度関数 $f(s, t)$ が

$$f(s, t) = \left\{ f(s, t_0) + \frac{\bar{f}(s)P(\tau(t), t_0)}{1 - P(\tau(t))} \right\} H[s - \tau(t)] \quad (1)$$

と表せることを示した。 $H[x]$ は単位ステップ関数であり、 t_0 は計算開始時刻である。 $\bar{f}(s, t)$ 、 $\bar{P}(s, t)$ は無応力状態での s の確率分布密度関数および累積確率分布関数であり次式で与えられる。

$$\bar{f}(s, t) = 2\pi n(t) \frac{(\alpha\mu b)^2}{s^3} \exp\{-\pi n(t)(\alpha\mu b)^2/s^2\} \quad (2)$$

$$\bar{P}(s, t) = \exp\{-\pi n(t)(\alpha\mu b)^2/s^2\}$$

α は材料定数、 μ は剪断弾性係数、 b は Burgers ベクトル長である。 $f(s, t)$ がわかれば剪断歪速度 $\dot{\gamma}(t)$ が

$$\dot{\gamma}(t) = b\rho(t)f(\tau(t), t)\dot{\tau}(t)\bar{N}(t)\bar{l}(t) \quad (3)$$

と剪断応力速度 $\dot{\tau}(t)$ と関係づけられ⁶⁾、すべり系硬化則が得られる。 $\tau(t)$ は時刻 t での分解剪断応力である。 $\bar{N}(t)$ 、 $\bar{l}(t)$ は転位が飛行する点障害対間区間数および点障害対間隔の平均値であり $n(t)$ の関数として次式で与えられる。

$$\bar{N}(t) = \frac{1}{1 - P(\tau(t), t)}, \quad \bar{l}(t) = \frac{1}{2\sqrt{n(t)}} \quad (4)$$

$n^{(a)}(t)$ は全すべり系の転位密度 $\rho^{(b)}$ 、 $b=1, 2, \dots$ により

$$n^{(a)} = \sum_b a^{(ab)} \rho^{(b)} \quad (5)$$

と表される⁷⁾。 $a^{(ab)}$ は、すべり系同士の幾何学的関係と転位の相互作用で決まる係数である。無変形状態からの単調変形の場合、式(3)は前報³⁾の式(6)(7)に一致する。

2.2 繰返し変形挙動の計算方法

負荷方向が反転すると運動転位に対面する点障害対の組合せが代わり、逆方向負荷での s の確率分布密度関数 $f(s, t)$ が予負荷除荷時から変化する。Ortiz ら¹⁾は $f(s, t)$ の反転後の初期値 $f^{(-)}(s, t_0^{(-)})$ が

$$f^{(-)}(s, t_0^{(-)}) = f(s, t_R) \exp\{-[\gamma^p(t_R) - \gamma^p(t_0^{(+)})]/\gamma_c^p\} + \bar{f}(s)[1 - \exp\{-[\gamma^p(t_R) - \gamma^p(t_0^{(+)})]/\gamma_c^p\}] \quad (6)$$

と表せることを示した。 $t_0^{(+)}$ は予負荷開始時刻、 t_R は荷重反転時刻、 $t_0^{(-)}$ は反転負荷開始時刻である。 γ^p は予負荷時の剪断歪、 γ_c は $\gamma_c(t) = b\rho(t)/(2\sqrt{n(t)})$ で与えられる。 $\rho(t)$ はすべり変形を考えているすべり系の転位密度である。式(6)により、逆負荷時の $f(s, t)$ が予負荷除荷応力より小さな応力で非零となって塑性変形が生じ、Bauschinger 効果が現れる。また、予負荷剪断歪が大きいほど低応力の $f(s, t)$ が大きくなるので移動硬化的挙動が現れる。

以下で、すべり系の分解剪断応力が正から負へ、あるいは負から正へ変化する時点を「符号反転点」と呼ぶ。負荷開始から最初の符号反転点までを「第0区間」と呼び、 k 回目の符号反転点から $k+1$ 回目の符号反転点までを「第 k 区間」と呼ぶ。第 i 区間での分解剪断応力絶対値の最大値を $\tau^{(i)}$ 、第 i 区間中での剪断歪変化量絶対値を $\Gamma^{(i)}$ と表す。

Repetto ら²⁾は、 $f(s, t)$ が単調負荷時と同じ関数形で表せると近似して、一回前の負荷区間の情報のみ用いて荷重反転後の挙動を近似的に計算する方法を提案した。前報³⁾ではこの近似計算法を採用した。

一方、著者ら⁴⁾は任意回数の両振り負荷を経た後の $f(s, t)$ の厳密解を導き、この厳密解と Repetto らの近似計算法の双方を用いて単一すべりの繰返し塑性変形を解析した。その結果、Repetto らの方法は最大応力時の剪断歪は良い精度で計算できるが、弾塑性遷移域で降伏応力を過大に、硬化率を過小に評価することを示した。

以下で、硬化による分解剪断応力上昇により二次すべり系が活動して生じたすべりを「二次系上すべり」とよぶ。このすべりは、単調変形のステージ II で観察される二次系の活動に伴うすべりに相当するものであり、単一すべり時の交差すべりによる二次系への転位移動をさすものではない。式(5)の係数 $a^{(ab)}$ が $a=b$ で非零値をもつことは、転位が他系上に移動して自系への点障害となることを意味する。交差すべりの影響は、材料定数 $a^{(ab)}$ の設定により考慮される。

繰返し硬化中の変形局在化過程では二次すべり系の活動が重大な役割を果たすとされる。疲労すべり帯形成過程の解析では従属すべり系の活動開始時期の挙動を詳しく調べる必要がある。よって、本研究の目的には、Repetto らの方法より著者らが導いた厳密解を用いた計算法の方が適しているといえる。しかし、上の厳密解の計算には、現時刻

に至る全負荷区間の $\tau^{(i)}$, $\Gamma^{(i)}$ が必要であり, 区間数につれて計算量が単調に増大するので, 多数回繰返し負荷を受ける疲労過程の解析には直接使用できない。

この問題を解決するために, 著者ら⁵⁾は, 多数回繰返し変形の解析が可能で弾塑性遷移部の変形挙動も精度良く解析できる計算方法を開発した。この方法では, 著者ら⁴⁾による $f(s, t)$ の厳密解を現在および前回負荷サイクル中の情報のみ用いて評価する。この場合, 第 k 区間逆負荷開始時を計算開始時刻としたときの分布密度 $f(s, t)$ および累積分布 $P(s, t)$ の初期値 $f_0^{(k)}$, $P_0^{(k)}$ は, $k < 2$ では既法⁴⁾の式(11)~(16)で得られ, $k \geq 2$ のときは次式で与えられる。

$$\begin{aligned} f_0^{(k)}(s) &= \{c_0^{(k)} + c_{k-1}^{(k)} H[s - m_{k-1}^{(k)}] \\ &\quad + c_k^{(k)} H[s - m_k^{(k)}]\} \tilde{f}(s) \\ P_0^{(k)}(s) &= c_{k-2}^{(k)} \tilde{P}(s) \\ &\quad + c_{k-1}^{(k)} \{\tilde{P}(s) - \tilde{P}(m_{k-1}^{(k)})\} H[s - m_{k-1}^{(k)}] \\ &\quad + c_k^{(k)} \{\tilde{P}(s) - \tilde{P}(m_k^{(k)})\} H[s - m_k^{(k)}] \\ c_{k-2}^{(k)} &= 1 - \exp\left(-\frac{\Gamma^{(k-1)}}{\gamma_c}\right) \\ c_{k-1}^{(k)} &= \left[c_{k-2}^{(k-1)} + \frac{k-1}{1 - \tilde{P}(\tau^{(k-1)})} \{c_{k-2}^{(k-1)} \tilde{P}(\tau^{(k-1)}) \right. \\ &\quad \left. + c_{k-1}^{(k-1)} \{\tilde{P}(\tau^{(k-1)}) - \tilde{P}(\tau^{(k-2)})\} \right. \\ &\quad \left. H[\tau^{(k-1)} - \tau^{(k-2)}] \right] \exp\left(-\frac{\Gamma^{(k-1)}}{\gamma_c}\right) \\ c_k^{(k)} &= c_{k-1}^{(k-1)} \exp\left(-\frac{\Gamma^{(k-1)}}{\gamma_c}\right) \end{aligned} \quad (7)$$

ここで, $m_k^{(k)} = \max(\tau^{(i)}, \tau^{(i+1)}, \dots, \tau^{(k)})$ である。式(1)で $f(s, t_0)$ として $f_0^{(k)}$ を, $P(\tau(t), t_0)$ として $P_0^{(k)}$ を用いれば $f(s, t)$ が計算でき, 式(3)によりすべり変形が計算できる。

著者ら⁵⁾は, 式(7)の計算法と既報⁴⁾で示した厳密解の双方によって, 転位密度一定の場合の単一すべり系繰返し塑性変形挙動を計算した。そして, Repettoらの方法では厳密解と大きな差異が生じた弾塑性遷移域の過渡変化も, 式(7)を用いれば高い精度で解析できることを示した。本報告では, 式(7)を採用し, 各すべり系の転位密度の変化を考慮してすべり系硬化係数を計算する。

2.3 すべり系転位密度

転位密度は, 前報³⁾と同様に次式で与える。

$$\rho(t) = \rho_{sat} \left\{ 1 - \left(\frac{\rho_0}{\rho_{sat}} \right) \exp\left(-\frac{\gamma_{acc}(t)}{\gamma_{sat}}\right) \right\} \quad (8)$$

$\gamma_{acc}(t) = \int_{s=0}^t |\dot{\gamma}(s)| ds$ はすべり系累積剪断歪であり, ρ_{sat} , γ_{sat} は転位増殖飽和時の転位密度および累積剪断歪である。

実在金属では繰返し変形により転位双極子, 多極子が形成される。これらを構成した転位は互いに拘束されて自由転位でなくなる。双極子, 多極子の数は繰返しにつれて増大し一定繰返し数で変化が飽和する傾向を示す。

この実験事実を表現するため, すべり系全転位中の自由転位比率 $f_{gr}(t)$ とすべり系累積剪断歪 $\gamma_{acc}(t)$ の関係を次式で表す。

$$f_{gr}(t) = f_{gr,sat} \left\{ 1 - \left(\frac{1}{f_{gr,sat}} \right) \exp\left(-\frac{\gamma_{acc}(t)}{\gamma_{gr,sat}}\right) \right\} \quad (9)$$

$f_{gr,sat}$, $\gamma_{gr,sat}$ は比率変化収れん時の自由転位比率および累積剪断歪である。

式(3)による硬化係数の計算にあたっては, 式中の $\rho(t)$ を $f_{gr}(t) \cdot \rho(t)$ に置き換える。ただし, 自由転位, 拘束転位とも林転位の点障害としての作用は等しいと仮定して, 式(5)の $n^{(a)}$ の計算では式(8)の $\rho(t)$ をそのまま用いる。

3. 結晶弾塑性有限要素法

本報告の有限要素法は, 前報³⁾で開発した繰返し変形を解析可能な結晶弾塑性有限要素法の硬化係数計算部分に前節の硬化則を組み込み, 計算アルゴリズムに改良を加えたものである。計算法の詳細は前報³⁾に記したので, ここではアルゴリズムの変更点のみを述べる。

前報では, 形式的に全すべり系が活動するとして, 接線係数法を拡張した反復計算方法で剪断歪増分 $\Delta\gamma^{(a)}$ を計算した。一方, 剪断歪速度 $\dot{\gamma}^{(a)}$ は分解剪断応力 $\tau^{(a)}$ が臨界剪断応力 $g^{(a)}$ を下回るとき零となるよう規定した(前報式(17))。この定式化は $\dot{\gamma}^{(a)}$ の $\tau^{(a)}$, $g^{(a)}$ に関する微分可能性を前提とする接線係数法との整合性に欠ける。前報で開発した計算コードでは, 計算条件により数値不安定性が発生する場合があったが, その一因はこの $\dot{\gamma}^{(a)}$ の規定方法にあったと推測される。

以下で, 添字 a^{act} は活動すべり系番号を表す。上述した前報計算法の欠点を解消するため, 本報では事前に活動すべり系の集合 $A = \{a_1^{act}, a_2^{act}, \dots\}$ を決定したうえで, A に属するすべり系のみを対象に前報式(20)~(25)と同様に $\Delta\gamma^{(a^{act})}$ を計算した。その際, 剪断歪速度 $\dot{\gamma}^{(a^{act})}$ は前報式(17)の単位ステップ関数部分を除いた次式で計算した。

$$\dot{\gamma}^{(a^{act})} = \dot{\gamma}_0 \left\{ \left(\frac{\tau^{(a^{act})}}{g^{(a^{act})}} \right)^{1/m} - 1 \right\} \quad (10)$$

m は変形速度依存性を表す材料定数である。

集合 A は荷重ステップごとに以下の手順で決定した。

1. 全すべり系が活動しないと仮定し $A = \text{NULL}$ とおく。
2. 仮定した A に対して, 仮想仕事原理を解き応力積分を実施して時刻 $t + \Delta t$ における変形と応力を計算する。その結果から $t + \Delta t$ における全すべり系の分解剪断応力 $\tau^{(a)}|_{t+\Delta t}$ を計算する。同時に, $\Delta\gamma^{(a^{act})}$ を計算する。
3. 時刻 t でのすべり系情報をもとに硬化係数 $h^{a^{act}}$ を計算し, 臨界剪断応力増分を $\Delta g^{a^{act}} = h^{a^{act}} \Delta\gamma^{(a^{act})}$

と求めて A に属するすべり系の $t+\Delta t$ における臨界剪断応力 $g^{acc}|_{t+\Delta t}$ を計算する。

4. A に属する系 a^{acc} で $\tau^{(a)}|_{t+\Delta t} < g^{acc}|_{t+\Delta t}$ または $\Delta\gamma^{(a^{acc})} < 0$ なるものがあればその系を A から除く。 A に属さない系で $\tau^{(a)}|_{t+\Delta t} \geq g^a|_t$ なるものがあればその系を A に加える。
5. A の元の追加, 削除がなかったら A を $t+\Delta t$ における活動すべり系の集合とする。 A の元の追加, 削除があった場合は手順 2~4 を繰り返す。

4. 解析対象および計算条件

解析対象に Cu 単結晶を想定し, 面心立方単結晶について計算を行った。以下で Table 1 の記号ですべり系を識別する。結晶の弾性変形は等方線形であると近似した。材料定数には Table 2 の値を用いた。Table 2 の a^0, a^1, a^2, a^3 は, 式(5)の係数 $a^{(ab)}$ の, 自分自身との組合せ, Glissile junction を形成する組合せ, Lomer-Cottrell 不動転位を形成する組合せ, およびその他の場合の組合せに対する値である。

転位密度 $\rho(t)$ は, 初期値 ρ_0 を $\rho_0=10^{12}(\text{m}^{-2})$ とし, 取れん値 ρ_{sat} および取れん時累積剪断歪 γ_{sat} を $\rho_{sat}=10^{14}(\text{m}^{-2})$, $\gamma_{sat}=5 \times 10^{-3}$ とした場合と, $\rho(t) \equiv \rho_0$ とした場合の二とおりを解析した。

式(9)の自由転位比率 f_{gr} については, 取れん値 $f_{gr,sat}$ および取れん時累積剪断歪 $\gamma_{gr,sat}$ を $f_{gr,sat}=0.3$, $\gamma_{gr,sat}=2.0 \times 10^{-2}$ とした場合と, $f_{gr} \equiv 1.0$ とした場合の二とお

Table 1 Slip systems of f.c.c. crystal.

1	A2	(111)[1 $\bar{1}$ 0]	7	B2	(1 $\bar{1}$ 1)[1 $\bar{1}$ 0]
2	A6	(111)[01 $\bar{1}$]	8	B5	(1 $\bar{1}$ 1)[011]
3	A3	(111)[10 $\bar{1}$]	9	B4	(1 $\bar{1}$ 1)[101]
4	D1	($\bar{1}$ 11)[110]	10	C1	(1 $\bar{1}$ 1)[110]
5	D6	($\bar{1}$ 11)[01 $\bar{1}$]	11	C5	(1 $\bar{1}$ 1)[011]
6	D4	($\bar{1}$ 11)[101]	12	C3	(1 $\bar{1}$ 1)[10 $\bar{1}$]

Table 2 Material properties.

Young's modulus E	100.0×10^3	(MPa)
Poisson's ratio ν	0.3	
α of Eq. (2)	0.3	
Length of Burgers vector b	2.56×10^{-10}	(m)
$\dot{\gamma}_0$ in Eq. (10)	1.0	
m in Eq. (10)	0.01	
Initial value of g in Eq. (10)	0.5	(MPa)
a^0 for a^{ab} in Eq. (5)	75×10^{-5}	
a^1 for a^{ab} in Eq. (5)	$5.7 \times a^0$	
a^2 for a^{ab} in Eq. (5)	$10.2 \times a^0$	
a^3 for a^{ab} in Eq. (5)	$16.6 \times a^0$	

りを解析した。

Fig. 1 の [001] ステレオ投影図に設定した荷重方位を表す。計算は, Fig. 1 の S 点に示す Schmid 因子が A 6 すべり系で最大値をとり C 5 が従属すべり系となる単独すべり方位 S と, Fig. 1 の N 点に示す C 5, D 4 すべり系の Schmid 因子がともに最大値をとる非同一次すべり面二重すべり方位 N について行った。これらの方位での荷重方向ベクトルと各すべり系 Schmid 因子を Table 3 に示す。

繰返し硬化中の変形挙動は, 変形に伴うすべり硬化特性の変化と, 結晶内部の応力・歪分布が不均一になることの双方の影響をうける。前報³⁾では, ただ一つ有限要素からなる計算モデルを考えて応力・歪の不均一性を除外し, すべり系硬化モデルの適否を論じた。

本報でも, まず前報³⁾と同様に有限要素一つからなる計算モデルを用いて, 提案した硬化モデルが実材料の変形局在化前の繰返し変形挙動の特徴を再現できるか否かを調べる。このモデルは無変形状態で x, y, z 軸方向寸法が単位長さの立方体形状をもつ面心立方単結晶であり, これを一つの 8 節点アイソパラメトリック 6 面体要素でモデル化

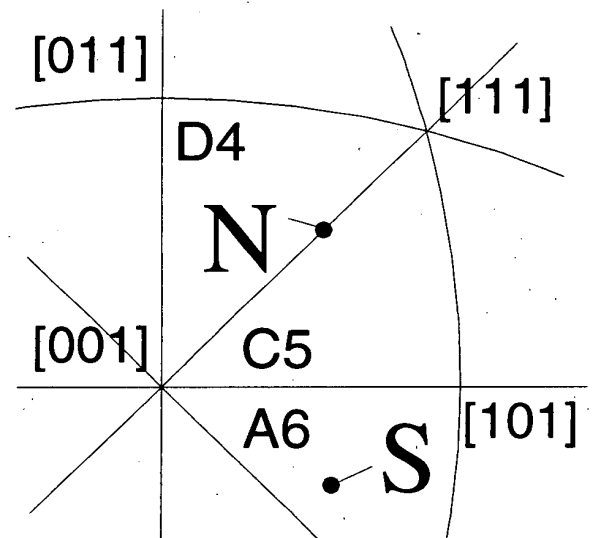


Fig. 1 Inverse pole figure of loading directions ([001] stereographic projection).

Table 3 Schmid factors of slip systems.

Load Dir.	direction S	direction N
	[0.438948,-0.260393,0.859953]	[0.408411,0.408085,0.816497]
A2	0.296	0.000
A6	0.475	0.272
A3	0.178	0.272
D1	0.012	0.272
D6	0.073	0.136
D4	0.085	0.408
B2	0.195	0.000
B5	0.167	0.000
B4	0.361	0.000
C1	0.114	0.272
C5	0.382	0.408
C3	0.268	0.136

した。

本報では、これに加えて無変形状態で x , y , z 軸方向寸法比が 32 : 8 : 1 であるような矩形板形状の面心立方単結晶を 16×8×1 個の 8 節点アイソパラメトリック 6 面体選択低減積分要素に分割したモデルを用いて応力・歪分布の不均一の影響を調べた。モデルには、 yz 断面の y 方向(板幅方向)幅 w_y が、断面位置 x により

$$w_y/w_y^0 = -0.0042 \cos\left\{\pi\left(\frac{x'-x_0/2}{x_0/2}\right)^2\right\} + 0.0024 \cos\left\{2\pi\left(\frac{x'-x_0/2}{x_0/2}\right)^2\right\}; x' = x_0 + \text{sgn}(x-x_0/2)\left(\frac{|x-x_0/2|}{x_0/2}\right)^{0.8} \quad (11)$$

と変化するような初期不整を与えた。 x_0 はモデル全長、 w_y^0 は初期不整を与える前のモデル y 方向幅である。式(11)は端面からモデル長さの 12/32 離れた断面の y 方向幅が端面での幅より約 1% 小さくなるような形状を与える。

これらのモデルを、Fig. 2 に示すように一方の yz 端面の x 方向変位を拘束し、他端に均一な x 方向変位を定変位速度で与えて荷重を負荷した。負荷は、公称塑性歪が 10^{-3} になるまで引張りその後公称塑性歪が零になるまで圧縮する片振り負荷を 50 サイクル与えた。負荷速度は、公称歪速度が $10^{-4}/\text{sec}$ となるよう制御した。この場合、先の $\rho(t)$, f_{gr} の設定では、両者の変化を考える場合に、主すべり系の $\rho(t)$ の増大は数サイクルで、 f_{gr} の減少は約 20 サイクルで飽和する。この変化は実在の Cu 結晶に比べ

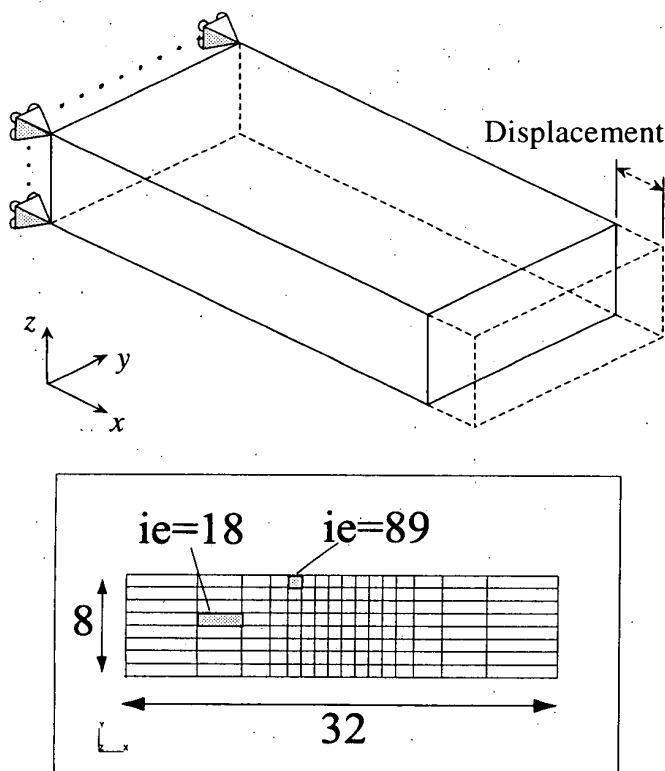


Fig. 2 Finite element models for f.c.c. crystals.

て数十～数百倍早い、計算時間を短縮するためにこのような設定を用いた。

5. 解析結果および考察

本報では定公称塑性歪振幅試験を模した解析を行なったので、公称応力片振幅 σ_P の増大が繰返し硬化の進行を表す。

ヒステリシスループ形状の変化を表す形状パラメータには、前報³⁾と同様に Abel⁸⁾が提案した Bauschinger energy parameter β_E を用いる。

β_E は、Fig. 3 のヒステリシスループから

$$\beta_E = \frac{2\sigma_P \Delta \epsilon_{pl} - \int \sigma d\epsilon}{\int \sigma d\epsilon} = \frac{E_s}{E_p} \quad (12)$$

と定義される。 σ は公称応力、 ϵ は公称歪である。Abel⁸⁾によれば、定塑性歪振幅負荷をうける Cu および Cu-Al 単結晶では、負荷開始後一定期間は負荷サイクルにつれて σ_P , β_E がともに増大する。その後 β_E が先に極大値を示した後減少に転じ、これに遅れて σ_P が極大値に達する。 β_E が極大値に達してから σ_P が極大値に達するまでの間に塑性変形の局在化が発生し、塑性変形局在部で転位組織に変化が生じて PSB が発生・成長する。

5.1 単一要素モデルの変形挙動

単一すべり方位で負荷した単一要素モデルの公称応力-公称塑性歪線図を Fig. 4 に示す。また、公称応力片振幅 σ_P および Bauschinger energy parameter β_E の変化を Fig. 5 に示す。図で、(S: C-C) は $\rho \equiv \rho_0$, $f_{gr} \equiv 1.0$ (Single slip: Constant-Constant) の場合、(S: I-C) は ρ 増大, $f_{gr} \equiv 1.0$ (Single slip: Increase-Constant) の場合、(S: I-R) は ρ 増大, f_{gr} 減少 (Single slip: Increase-Reduce) の場合の計算結果である。

(S: C-C) では以下の傾向がみられる。i) 約 15 サイクルで繰返し硬化が飽和する。硬化の程度は小さく σ_P の増大は 2% 弱である。ii) 負荷開始直後の 1/4 サイクルを除き、繰返し硬化中の応力歪線図は歪振幅範囲の途中まで繰

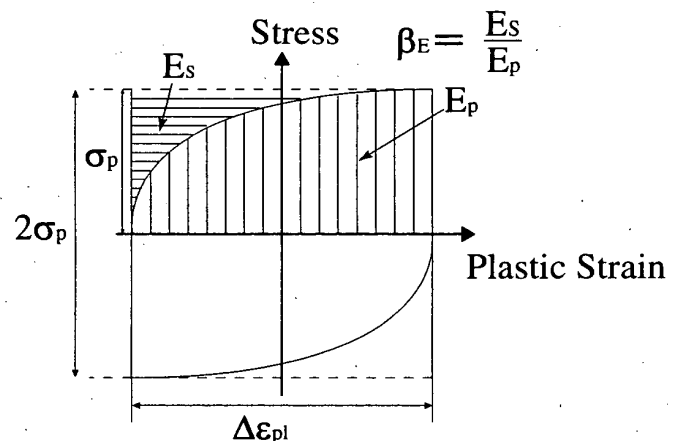


Fig. 3 Bauschinger energy parameter β_E .

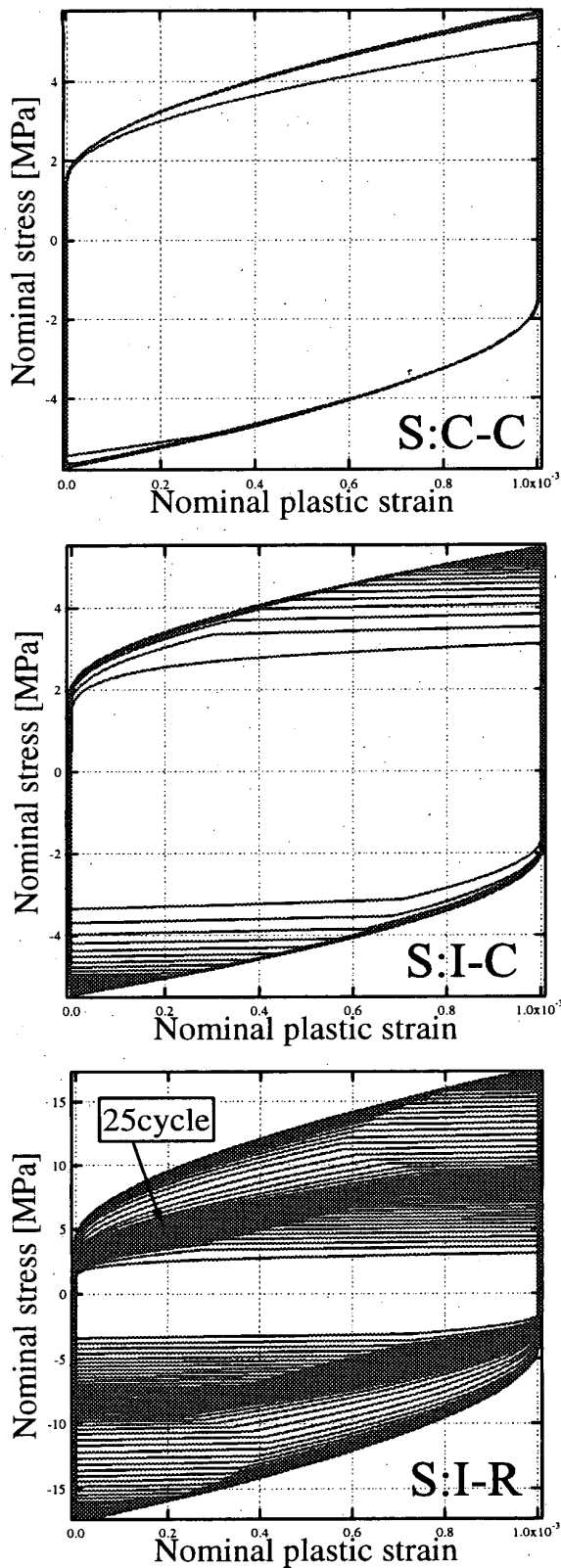


Fig. 4 Calculated nominal stress strain relations of single element models for single slip loading cases.

返し硬化飽和後の線図にほぼ一致する。iii)繰返し硬化中では、応力が前回荷重反転応力に達すると硬化率が急減する。この時点から応力歪線図が硬化飽和後の線図から逸脱し、応力振幅が硬化飽和後の値より小さくなる。iv)硬化率低下が生じる応力は負荷サイクルにつれて上昇し、最終

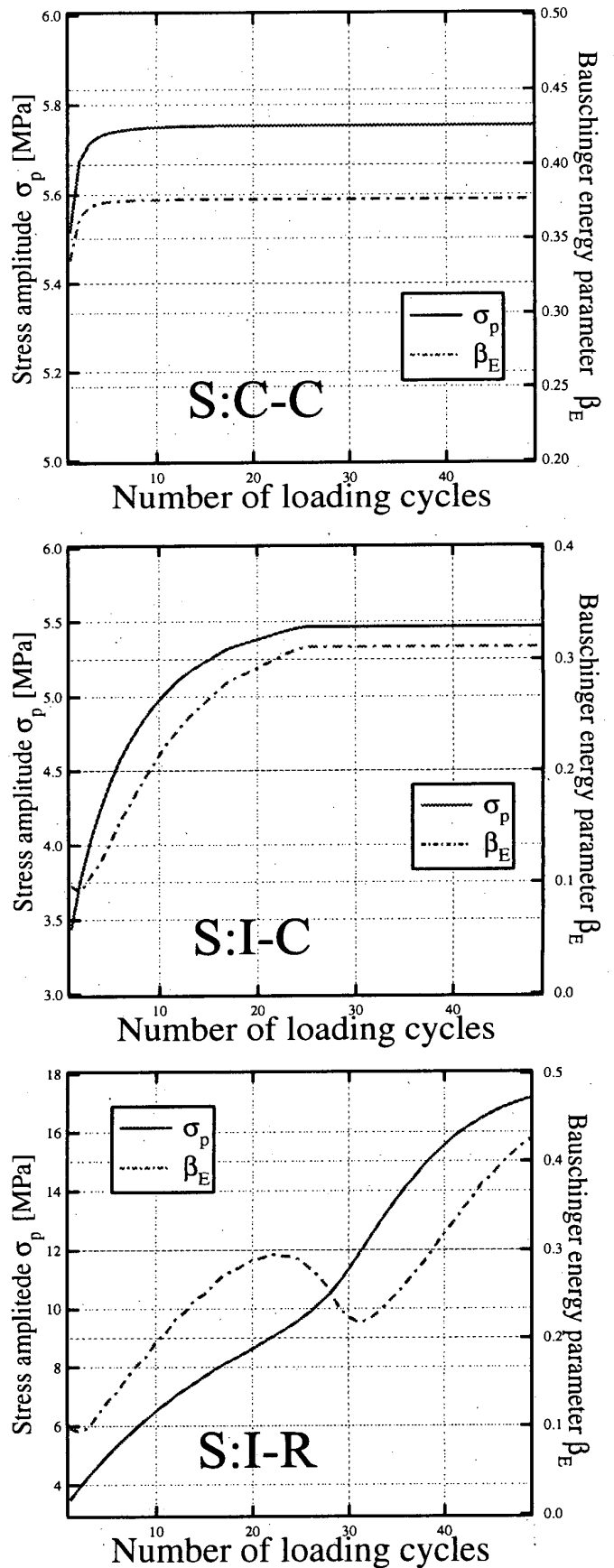


Fig. 5 Calculated time histories of stress amplitude σ_p and Bauschinger energy parameter β_E of single element models for single slip loading cases.

的には歪振幅範囲全域で低下が生じなくなり硬化が飽和する。v) β_E と σ_P の双方とも負荷サイクルにつれてほぼ同じ割合で単調に増加し約 15 サイクルで一定値に収れんする。これらは、単一すべり系で自由転位密度および点障害密度が一定との条件で計算した既報⁴⁾⁵⁾の結果と定性的に一致している。

上の傾向 iii), iv) は、本報で計算した単一要素モデルの全ての計算結果で共通にみられた。

(S: I-C) では以下の傾向がみられる。i) 約 20 サイクルで繰返し硬化が飽和する。 σ_P の増大率は約 30% である。ii) β_E , σ_P とも負荷サイクルにつれて増大し一定値に収れんする。変化が飽和するサイクル数は σ_P の方が早い。

(S: I-R) では以下の傾向がみられる。i) 約 20 サイクル

で硬化の速度がいったん鈍化し、その後再び増大する。その後約 45 サイクルで繰返し硬化が飽和する。 σ_P の増大率は約 300% である。ii) β_E は約 25 サイクルで極大値を示し、いったん減少したのち再び増大する。 σ_P は約 45 サイクルまで負荷サイクルにつれて単調に増大する。

以上より、本報の計算範囲では、単一すべり方位においては、転位密度上昇と自由転位密度比率減少を考慮した場合には限り、Cu 単結晶の変形挙動の特徴である顕著な繰返し硬化と硬化飽和前の β_E の極大値の発生が表現できることが示された。

二重すべり方位の公称応力-公称塑性歪線図を Fig. 6 に、 σ_P および β_E の変化を Fig. 7 に示す。図で、(D: I-C) は ρ 増大, $f_{gr} \equiv 1.0$ (Double slip: Increase-Constant) の場合、の場合、(D: I-R) は ρ 増大, f_{gr} 減少 (Double slip: Increase-Reduce) の場合の計算結果である。

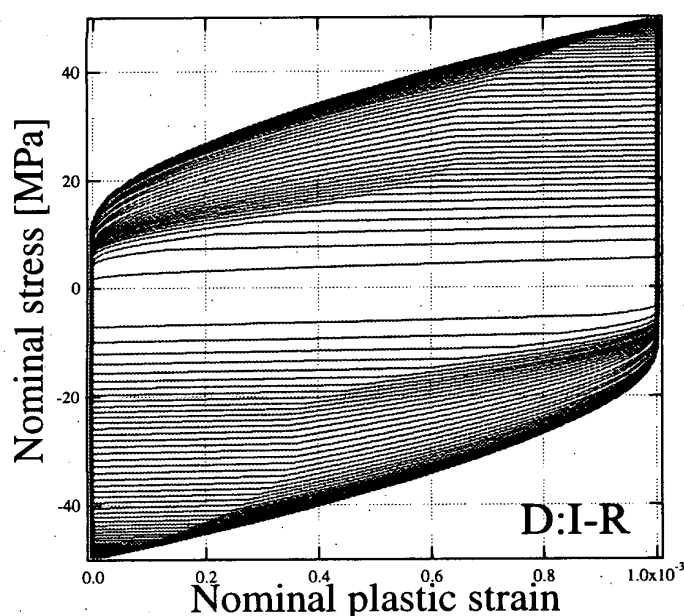
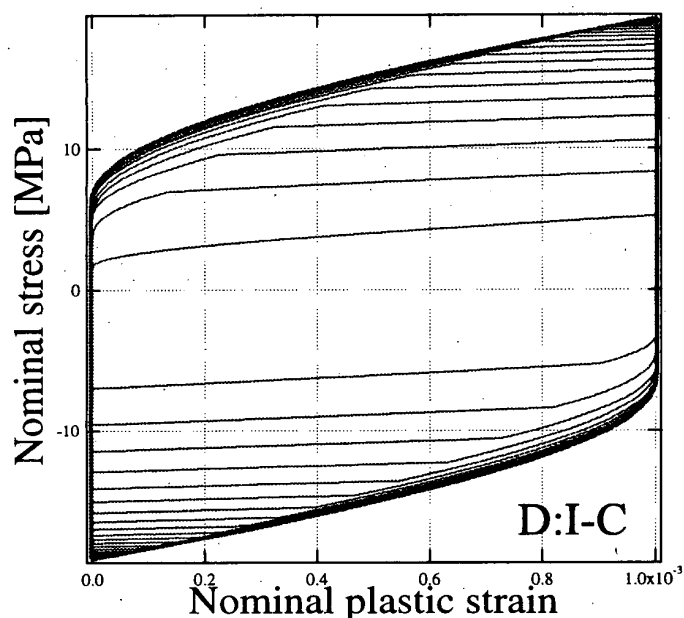


Fig. 6 Calculated nominal stress strain relations of single element models for double slip loading cases.

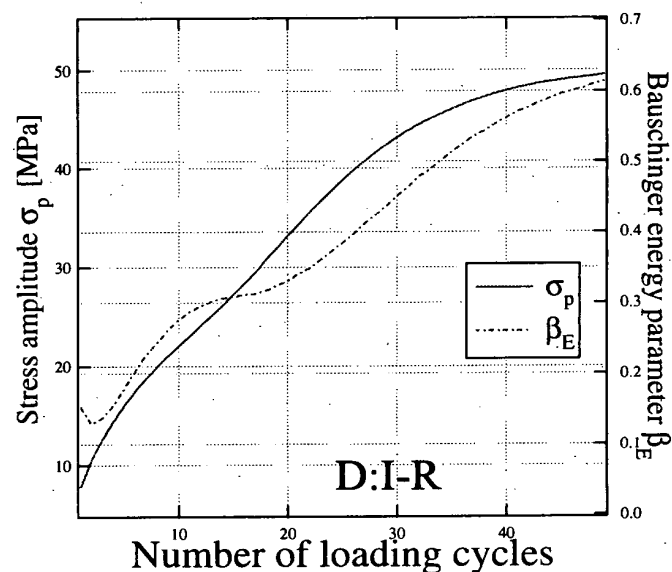
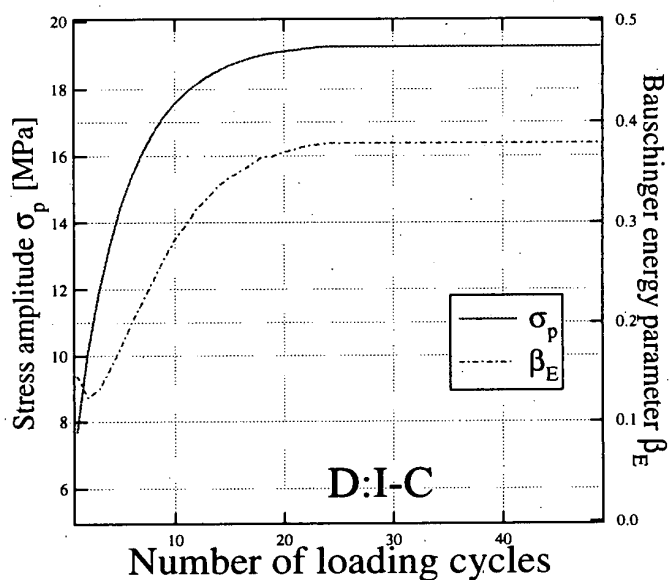


Fig. 7 Calculated time histories of stress amplitude σ_P and Bauschinger energy parameter β_E of single element models for double slip loading cases.

(D: I-C) では以下の傾向がみられる。i) 約15サイクルで硬化が飽和する。 σ_P の増大率は約109%である。ii) β_E , σ_P とも負荷サイクルにつれて増大し一定値に収れんする。変化が飽和するサイクル数は σ_P の方が早い。

(D: I-R) では以下の傾向がみられる。i) 約35サイクルで硬化が飽和する。 σ_P の増大率は約340%である。ii) 約15サイクルで β_E の増大がいったん停止したのち再び増大する。 σ_P は負荷サイクルにつれて単調に増大する。

二重すべりで $\rho \equiv \rho_0$, $f_{gr} \equiv 1.0$ (D: C-C, Double slip: Constant-Constant) の場合は約10サイクルで硬化が飽和し, σ_P の増大率は4%と小さく, β_E , σ_P とも急速に増大が飽和する。

以上より、本報の計算範囲では、二重すべり方位においても、転位密度上昇と自由転位密度比率減少を考慮する場合に限り、Cu単結晶の変形挙動の特徴である顕著な繰返し硬化と β_E の増大の一時的停止が表現できることが示された。

5.2 すべり硬化モデルの評価

著者らは前報³⁾において、本報と同様に硬化が転位の点障害としての作用で生じるとして面心立方結晶単一要素モデルの定歪振幅繰返し変形挙動を計算した。

前報では、転位が全て自由転位として扱った。荷重反転時の扱いは、式(6)をRepettoら²⁾の近似法により評価したが、式(6)の予負荷時剪断歪 γ^p を、本来の定義である荷重反転前半サイクルの剪断歪でなく負荷開始からの逆方向累積剪断歪 $\int \dot{\gamma}^p dt$ に置き換えて計算した。その結果、二重すべり方位負荷において、実材料の変形挙動の特徴である顕著な繰返し硬化と β_E が極値をとる挙動が表現できたが、 γ^p から $\int \dot{\gamma}^p dt$ への置き換えをしないと、繰返し硬化が極端に小さく、 β_E に極大値も変曲点も表れない計算結果しか得られなかった。この置き換えの物理的意味は不明瞭であり、このような操作なしに実材料の変形挙動を表現できることが望ましい。また、同じ計算方法で単一すべり方位の変形を計算すると、顕著な繰返し硬化が表現できず、 β_E の極値も表れなかった。

前節によれば、本報の硬化モデルを用いれば、式(6)を理論に忠実に評価しても、荷重方位によらず顕著な繰返し硬化と β_E の増大が停止する挙動を表現できる。また、既報⁴⁾⁵⁾に示したように式(6)を直接評価する本報のモデルは、Repettoら²⁾の近似法に比べて弾塑性遷移部の計算精度に優れている。よって、繰返し硬化過程の変形挙動解析に使用する目的には、前報のモデルより本報のモデルの方が適しているといえる。

単一要素モデルによる全ての計算結果でみられた、(S: C-C)の傾向ii), iii)は式(6)に由来する。式(6)によれば、逆方向塑性変形開始時の点障害強度確率密度分布

$f(s, t)$ は荷重反転前半サイクル間の剪断歪量 γ^p で決まる。塑性歪振幅一定試験では各サイクルで γ^p がほぼ一定であるので自由転位密度と点障害密度が同じなら塑性変形開始時の硬化係数が各サイクルでほぼ等しくなる。また、式(6)および(1)では分解剪断応力 τ が荷重反転時分解剪断応力 τ_R を越えるとき $f(s, t)$ が不連続に増大する。式(3)より $f(s, t)$ の急増は剪断歪増分 $d\gamma$ の急増をもたらすし硬化率を急減させる。この挙動は実在材料と異なり、硬化係数の急減による数値不安定の誘発も懸念される。

後述するように、PSB形成には二次系すべりの発生が深く関与すると推定されるので、本研究では従属すべり系活動開始時期と従属系すべり量の推定精度が重要となる。本報のモデルは、塑性変形進行後の一時期の計算精度には問題があるが、すべり系活動開始前後の挙動、および最大荷重発生時までの総すべり量は合理的推定ができると考えられる。

よって、前記の欠点にもかかわらず、本報のモデルは本研究の目的に合致したモデルであるといえる。

5.3 繰返し硬化の微視的機構

式(3)(4)より、転位密度 ρ 、自由転位比率 f_{gr} 、分解剪断応力 τ に対するすべり系硬化係数 h は次式で与えられる。

$$h = \frac{1 - \bar{P}(\tau)}{b(f_{gr}\rho)f(\tau, t)} 2\sqrt{n} \quad (13)$$

本報では主すべり系の ρ が数サイクルで飽和する設定とした。このとき n も数サイクルで変化がなくなる。同じ τ に対する $\bar{P}(\tau)$, $f(s, t)$ は負荷サイクルごとに大幅には代わらない。式(13)によれば、この場合 f_{gr} が減少しないと h の大幅な増大は得られない。これが、前節で、 ρ が上昇し f_{gr} が減少する場合にのみ顕著な繰返し硬化が生じた理由である。

前節では、 ρ の上昇と f_{gr} の減少を考える場合に限り、 β_E の極大値あるいは停留値が発生することが示された。この原因を探るため、(S: I-R)の主すべり系A6と従属すべり系C5について、累積剪断歪 γ_{acc} 、点障害密度 n 、自由転位密度 $\rho_{mob} = f_{gr} \cdot \rho$ の変化を調べた。これらの結果をFigs. 8, 9および10に示す。

Fig. 8によれば、 β_E の増大が鈍化した時期と、従属すべり系C5ですべり変形が有限量発生しはじめた時期は一致している。Figs. 9および10によれば、第5サイクルから第25サイクルまでの間、C5の n はほぼ一定である一方、 ρ_{mob} は6倍強に増大する。これは、 n は増殖が飽和したA6の全転位密度で決まるのに対し、C5では累積剪断歪が微小であるため、急激な繰返し硬化による分解剪断応力上昇により僅かずつ増殖した転位がほぼ全て自由転位となるためである。式(13)によれば、自己硬化係数は \sqrt{n}/ρ_{mob} に比例する。A6, C5での \sqrt{n}/ρ_{mob} の変化をFig. 11に示す。Fig. 11では、はじめA6の値より100倍

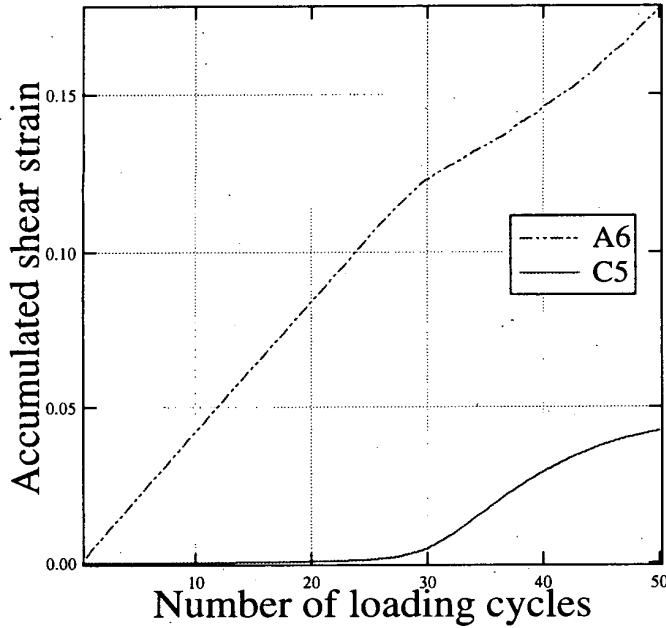


Fig. 8 Calculated time histories of accumulated shear strain γ_{acc} of A 6 and C 5 systems for case S: I-R.

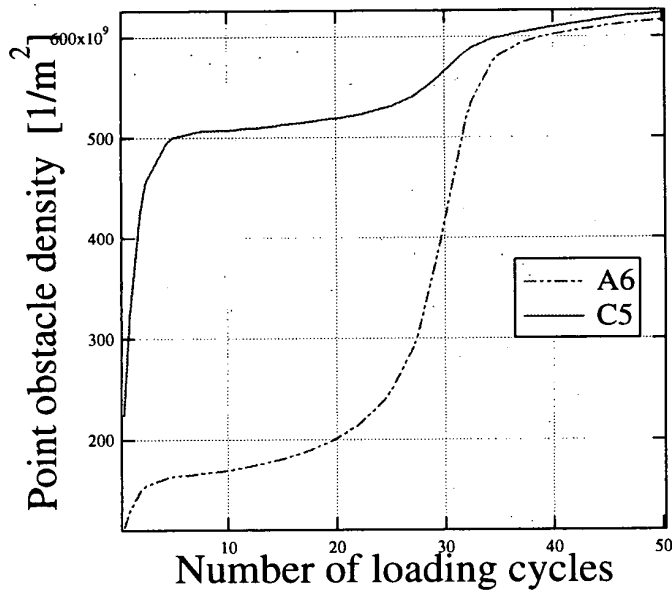


Fig. 9 Calculated time histories of point obstacle density n of A 6 and C 5 systems for case S: I-R.

以上大きかった C5 の \sqrt{n}/ρ_{mob} が, β_E の増大が鈍化した第 25 サイクルでは A6 とほぼ同程度に低下していたことが示されている。このとき, C5 と A6 の自己硬化係数は同程度となり, C5 で A6 と同じオーダの有限量すべり変形が発生する。

C5 で有限量のすべりが生じると C5 の転位増殖が顕著になる。C5 での転位増殖は A6 の n を増大させ, その結果 A6 の自己硬化係数が増大する。C5 がすべりを開始しても, 塑性変形は A6 のすべりが支配的なので, 要素全体の公称応力・公称歪関係では弾塑性遷移点付近の硬化が大きくなる。その後, 前回荷重反転応力に達すると硬化率

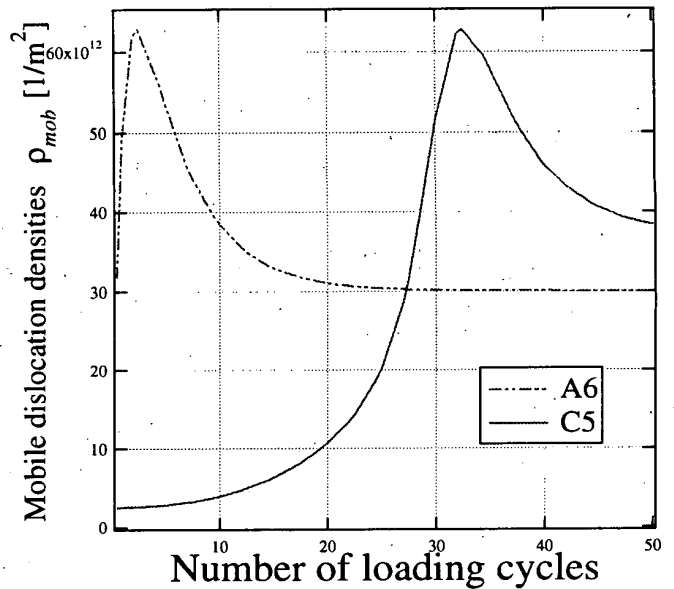


Fig. 10 Calculated time histories of mobile dislocation densities ρ_{mob} of A 6 and C 5 systems for case S: I-R.

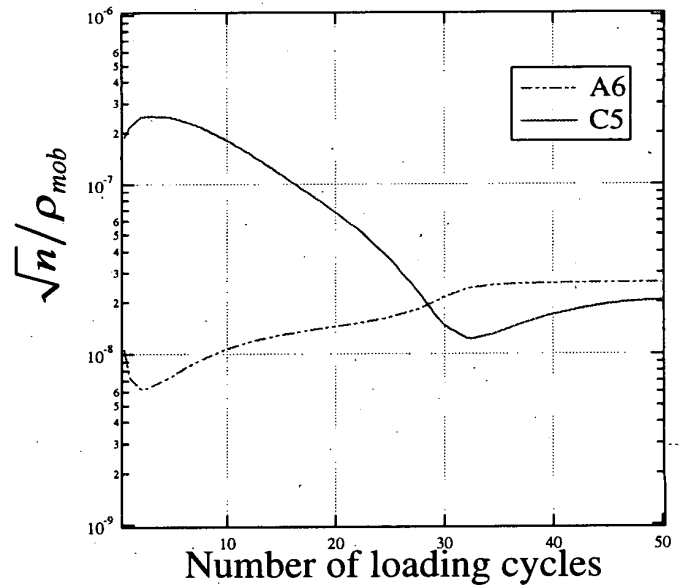


Fig. 11 Calculated time histories of \sqrt{n}/ρ_{mob} of A 6 and C 5 systems for case S: I-R.

が急減するので, C5 すべり開始後は最大応力に対する弾塑性遷移終了応力の比が大きくなり β_E が減少する。

この現象の発生には, 従属すべり系で自由転位密度が一定量以上増大できるよう分解剪断応力を上昇させる, 急激な繰返し硬化が必要である。前記のように, それには負荷につれて ρ の上昇と f_{gr} の減少が生じる設定が必要である。これが, ρ の上昇と f_{gr} を考える場合に限り, β_E の極大値が発現する理由である。

二重すべり方位で ρ の上昇と f_{gr} を考えた (D: I-R) における主すべり系 D4, C5 および従属系 A6, A3, D1, C1 の γ_{acc} および \sqrt{n}/ρ_{mob} の変化を Figs. 12 および 13 に示す。これらでは, (S: I-R) と同じ機構により約

20 サイクルで従属系の硬化率が主すべり系と同程度となり、従属系に有限量のすべりが生じて β_E の増大が一時停止したことが示されている。

5.4 多要素モデルの変形挙動

Fig. 2 の多要素モデルで ρ 増大と f_{or} 減少を考えた場合の、単一すべり方位 (主すべり系 A6, 従属系 C5) 負荷時の公称応力-公称塑性歪線図を Fig. 14 に示す。このときの公称応力片振幅 σ_p および Bauschinger energy parameter β_E の変化を Fig. 15 に示す。図では、単一要素モデルの (S: I-R) と同様に顕著な繰返し硬化が生じ、硬化飽和前の 31 サイクルに β_E の極大値が出現している。

以下で、各物理量計算値について、ある時刻でのモデル

中最大値の最小値に対する比を最大最小比とよぶ。 β_E が極大となった直後の 32 サイクル引張り最大荷重点での等価応力 $\bar{\sigma}$ および全すべり系累積剪断歪総和 $\Gamma = \int \sum |\dot{\gamma}^{(a)}| dt$ の分布を Figs. 16 に示す。図によると、 $\bar{\sigma}$, Γ とも初期不整部に若干の集中がみられるが最大最小比は各々 1.19, 1.11 と小さい。 β_E が極大となる前後で $\bar{\sigma}$, Γ の分布形状に変化がみられたが、計算の全期間を通じて最大最小比は高々 1.2 であった。

β_E 増大がつづく 20 サイクルと β_E が極大となった直後の 32 サイクルの引張り最大荷重点における、従属系 C5

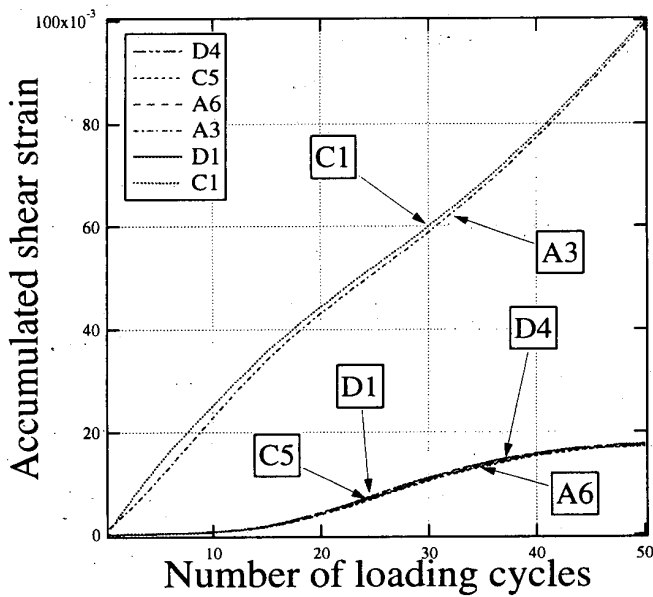


Fig. 12 Calculated time histories of accumulated shear strain γ_{acc} of D4, C5, A6, A3, D1 and C1 systems for case D: I-R.

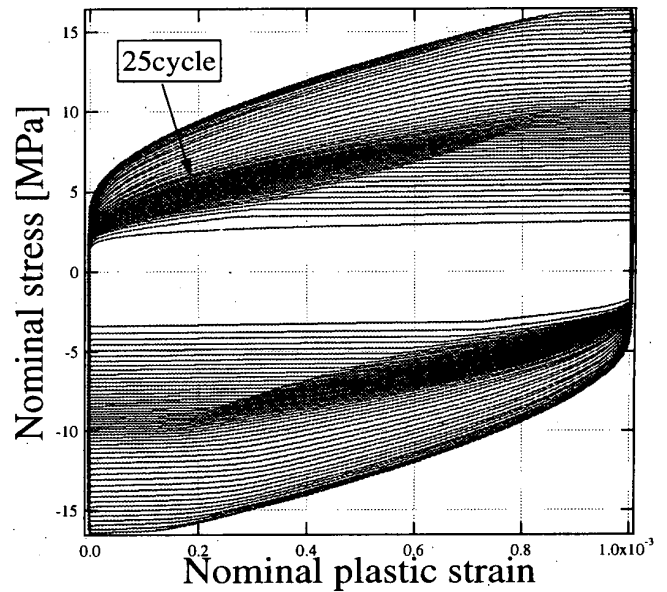


Fig. 14 Calculated nominal stress strain relations of the multi element model for the single slip loading case.

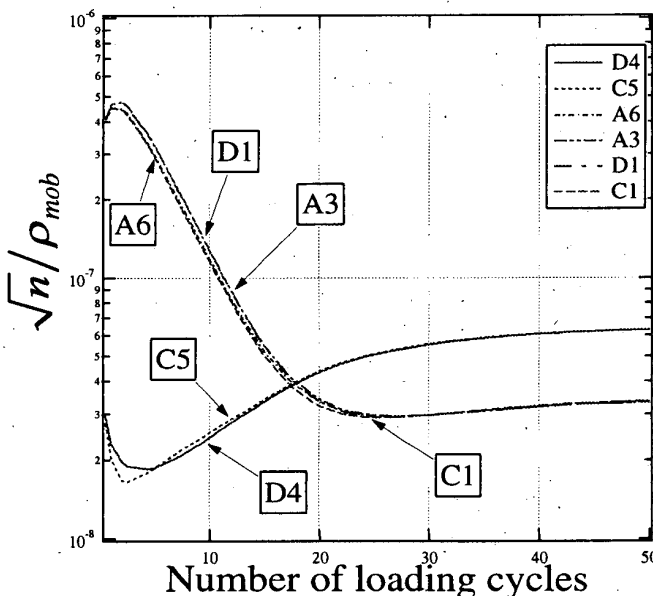


Fig. 13 Calculated time histories of \sqrt{n}/ρ_{mob} of D4, C5, A6, A3, D1 and C1 systems for case D: I-R.

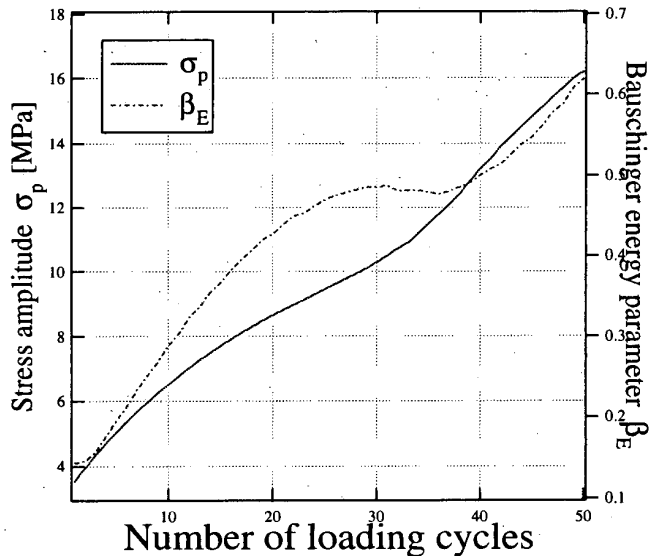


Fig. 15 Calculated time histories of stress amplitude σ_p and Bauschinger energy parameter β_E of the multi element model for the single slip loading case.

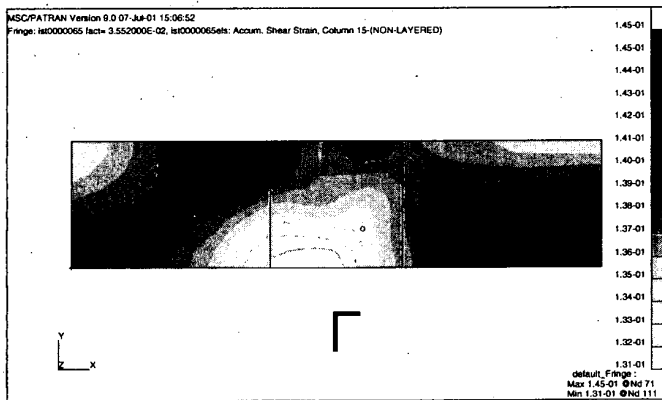
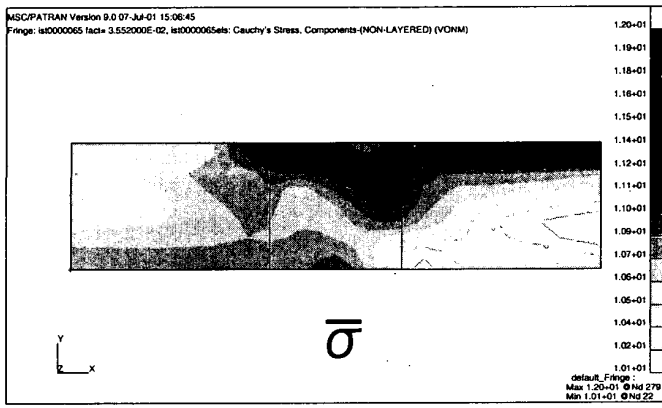


Fig. 16 Distributions of equivalent stress $\bar{\sigma}$ and accumulates sum of slip Γ at the 32 th cycle.

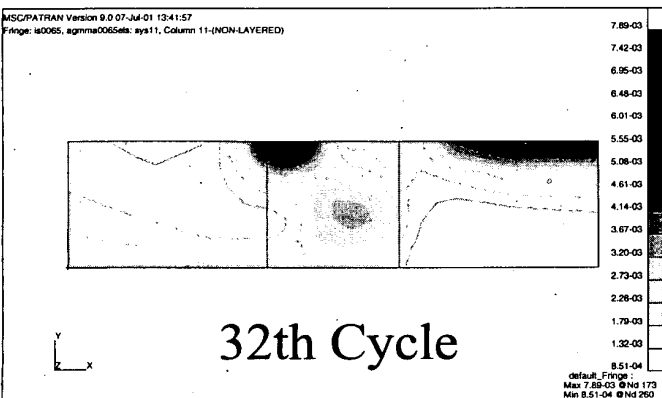
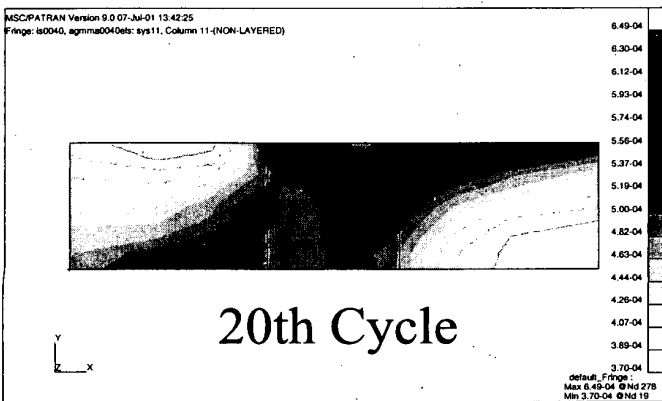


Fig. 17 Distributions of accumulated shear strain γ_{acc} of C5 system at the 20 th and 32 th cycle.

の累積剪断歪 γ_{acc} の分布を Fig. 17 に示す。図によると、 β_E が増大中は初期不整部の値が若干大きいものの最大最小比は 1.75 と小さく、モデル全体でほぼ均一に近いすべりが生じている。一方、 β_E が極大となるときには初期不整部に顕著なすべりの集中が生じ、最大最小比は 9.27 に達している。

C5 の γ_{acc} の変化を、最大値をとった初期不整底部の 89 番要素と、初期不整から離れた 18 番要素と比較した結果を Fig. 18 に示す。図は、20 サイクルを過ぎると初期不整底部で局所的に従属系 C5 の活動が始まることを示している。

Fig. 18 の二つの要素での、従属系 C5 の分解剪断応力 τ の変化を Fig. 19 に示す。図は、局在部と非局在部の τ の比が、二次系上すべりがはじめて発生した 25 サイクル以降に増大することを示す。この変化は、一部で生じた従属系剪断歪による応力再分配が原因と考えられ、二次系上すべり発生領域の従属系の活動を加速し、二次系上すべりの局在化を生じさせる。

5.5 変形局在化の微視的機構

Abel⁸⁾ によれば、Cu 結晶で β_E は極大値に達した後単調に減少し、その間に塑性変形の局在化が進行して σ_P が最大値をとる。単一要素モデル (S: I-R) および (D: I-R) の計算結果は β_E がいったん増大から減少に転ずる傾向を再現しているが、 β_E が再び増大に転じるとの結果が得られた。多要素モデルでも単一要素モデルと同様に実材料と異なる結果が得られ、また β_E 極大点以降でも塑性変形の顕著な局在化はみられなかった。つまり、本報の硬化モデルだけでは、 β_E 極大点以降の実材料の変形局在化挙動を表現できない。

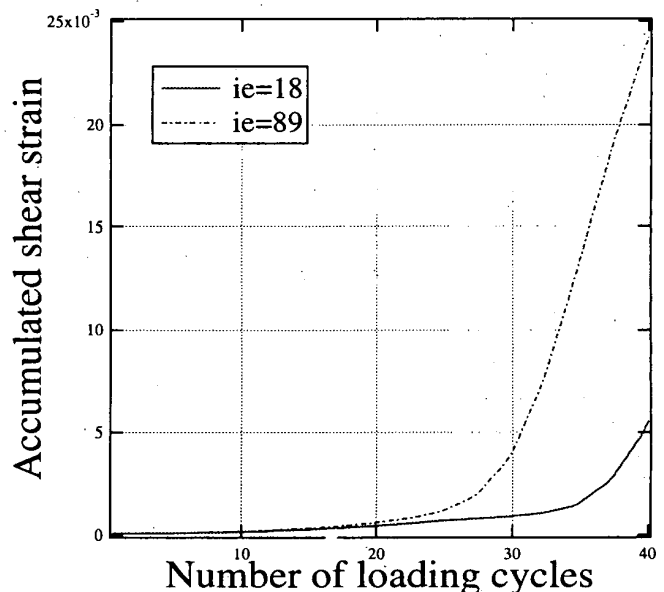


Fig. 18 Calculated time histories of accumulated shear strain γ_{acc} of C5 system in the 18 th and 89 th element.

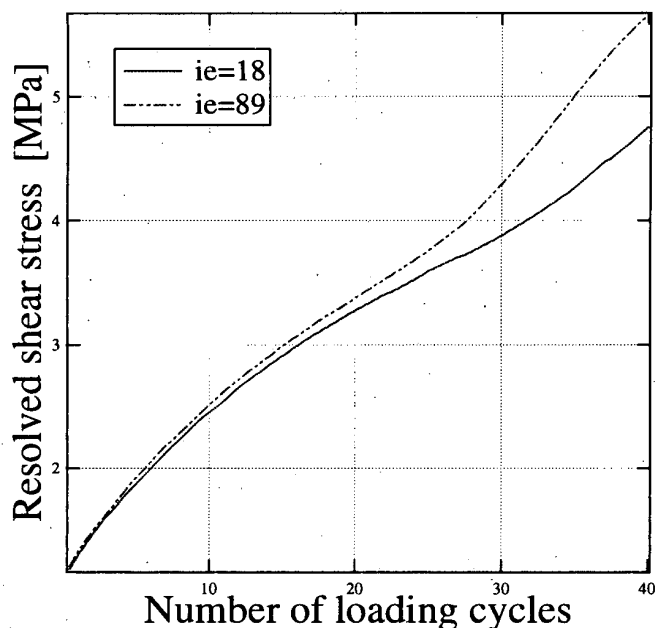


Fig. 19 Calculated time histories of resolved shear stress τ of C5 system in the 18th and 89th element.

β_E 極大点以降に変形局在部に形成される PSB では、転位壁の張出しが塑性変形の素過程となり、林転位中の自由転位の運動を素過程とする本報のモデルは適用できない。PSB の硬化率はマトリクス組織に比べて大幅に小さいことが知られている。疲労転位組織の直接観察結果の多くは、繰返し硬化で生じる双極子・多極子の集合組織の存在と、二次すべり系の活動が PSB 形成に関与するとの仮説を支持している。よって、双極子・多極子が一定量生成された状態で（本報の硬化モデルでは自由転位比率が一定以下になった状態で）二次系上すべりが有限量発生すると PSB 形成が始まると仮定することができる。

多要素モデルの結果では、全活動すべり系のすべりの総和としての塑性変形は局在化しなかったが、従属系すべり量は β_E 極大点直前から急激に局在化した。上の仮定を採用すれば、このときモデルのごく一部の従属系すべり発生部でのみ PSB が形成され、本報のモデルが与える値より大幅に小さい硬化率をもった局部領域が生じる。この場合、低硬化率領域の周辺で応力集中により従属すべりの活動が早まり、連鎖的に PSB が形成され、低硬化率領域の体積比が上昇して公称応力歪関係で急激な軟化が生じると予想できる。このように、本報のモデルを、二次系上すべり発生による組織変化と硬化率低下を考慮できるよう拡張すれば、変形局在化を含む繰返し硬化過程の統一的説明が可能になると考えられる。よって、実材料の変形局在化挙動を表現できないことを理由に本報の硬化モデルを棄却するのは早計といえ、むしろ β_E が極値を示すまでの挙動は合理的に説明していると考えられる。

上の推論に従えば、 β_E 極大値以降の変形局在化は、二

次系上すべりが局所的に発生することが原因と考えることができる。前節によれば、二次系上すべりの局在化は、一部分で従属すべり系が活動する際に、従属系の分解剪断応力を上昇させる応力再分配が生じることで生じる。

このメカニズムを考えれば、僅かな応力の不均一が変形局在化をもたらす理由が説明できる。また、変形局在化が一定サイクル負荷後に急激に進行する理由を説明することができる。

6. 結 言

現実的計算コストで多数回繰返し変形の計算が可能で、弾塑性遷移挙動も精度良く計算できる新しい硬化モデルを結晶弾塑性有限要素法に組み込み、面心立方単結晶の繰返し変形を解析した。そして、PSB 形成の必要条件である、繰返し硬化と変形局在化の微視的機構について考察を加えた。

本報で得られた知見は以下のように要約できる。

1. 林転位を硬化の主因と考え、著者ら⁵⁾が開発した方法で荷重反転を扱えば、負荷につれた転位双極子・多極子の形成による自由転位比率の減少を考慮することにより、実材料の変形挙動の特徴である、顕著な繰返し硬化と Bauschinger energy parameter β_E の極大値の発生を表現できる。
2. その発現時期が PSB 形成開始と同時であることが実験的に知られている β_E の増加率減少は、従属すべり系で二次系上すべりが発生することで生じる。
3. 単結晶内部の応力・歪分布がほぼ均一とみなせる場合でも二次系上すべりは局在化する。この現象は、最初に二次系上すべりが発生した局部領域で応力再分配により従属系の分解剪断応力が上昇することにより生じる。二次系上すべりの局在化は、PSB 形成時の変形局在化の原因であると考えられる。

参 考 文 献

- 1) Ortiz M. and Popov E. P.: "A statistical theory of polycrystalline plasticity" Proc. R. Soc. Lond. A 379 (1982) pp. 439-458
- 2) Repetto E. A. and Ortiz M.: "A Micromechanical Model of Cyclic Deformation and Fatigue-Crack Nucleation in f.c.c. Single Crystals" Acta Mater. 45, 6 (1997) pp. 2577-2595
- 3) 大沢直樹, 富田康光, 橋本聖史, 山鹿伸幸, 山田礼子: "結晶弾塑性有限要素法を用いた疲労き裂形成機構に関する研究 (その 3)", 日本造船学会論文集, 186 (1999) pp. 535-544
- 4) 富田康光, 橋本聖史, 大沢直樹, 山鹿伸幸, 山田礼子: "船体構造用多結晶金属材料の繰返し塑性変形挙動の数値シミュレーションに関する研究 (その 6)" 関西造船協会誌, 233 (2000) pp. 135-140

- 5) 大沢直樹, 富田康光, 橋本聖史, 山田礼子: “転位モデルに基づく繰返し塑性変形挙動の数値シミュレーション” 日本機械学会第13回計算力学講演会講演論文集 (2000) pp. 535-536
 - 6) Kocks U. F.: “A statistical theory of flow stress and work-hardening” *Phil. Mag.* 13 (1966) p. 541
 - 7) Franciosi P. and Zaoui A.: “Multislip in F.C.C. Crystals a Theoretical Approach Compared with Experimental Data” *Acta metall.* 30 (1982) pp. 1627-1637
 - 8) Abel A.: “Low-Cycle Fatigue of Single Crystals of α Cu-Al Alloys” *Materials Science and Engineering*, 37 (1979) pp. 187-200
-