

FTMP場の理論に基づく多結晶Bauschinger効果モデリング

FTMP-based Modeling of Bauschinger Behavior for Polycrystals

長谷部忠司¹⁾, 橋本泰生²⁾, 塚本巧海³⁾

Tadashi Hasebe, Xinpeng You and Akihiro Takebe

1) 博(工) 神戸大学 工学部 准教授 (〒657-8501 神戸市灘区六甲台町1-1, E-mail: hasebe@mech.kobe-u.ac.jp)

2) IHI

3) 神戸大学大学院 工学研究科 (〒657-8501 神戸市灘区六甲台長1-1, E-mail: tsukamoto.takumi@mail.mm4.scitec.kobe-u.ac.jp)

Modeling Bauschinger behavior, a typical softening stress response, is complicated than it seems, because its sources are distributed over evolving nonhomogeneous fields at various scale levels. The present study tackles the fundamental aspects afresh based on FTMP (Field Theory of Multiscale Plasticity). Specifically, two representative scales of grain aggregates (Scale C) and dislocation substructures evolved intra-granularly (Scale B) are systematically scrutinized, together with their interactions.

Key Words : Bauschinger effect, Polycrystal plasticity, Crystal plasticity, Field theory, FEM

1. はじめに

Bauschinger 効果の精密な評価はプレス成形時のスプリングバック予測における重要な因子の一つである。Bauschinger 挙動には、永久軟化に加えて遷移軟化という過渡応答が含まれておらず、その発現機構は複雑で必ずしも明らかではない。それゆえこれまで詳細な機構を問わないで済むよう、主として古典塑性論に基づく現象論が用いられてきた。多結晶金属における Bauschinger 効果の原因として、大きくは結晶粒内の転位下部組織と結晶粒集合体それぞれのオーダーからの背応力が考えられる(後者には結晶粒界からの寄与も含まれる)。これらを陽に考慮したシミュレーション・モデルはまだ確立しておらず、現象論を越えた評価には大きな困難が未だ存在している。本研究では、変形誘起の不均質場の発展を容易に扱うことのできる FTMP(Field Theory of Multiscale Plasticity) [1-11]を駆使したアプローチについて論じる。

2 単結晶モデルの場合

多結晶体の議論の前に単結晶材に対して得られた既報[5,6]での結果の概要を Fig.1 に示す。ここでは純鉄の代表的 γ 方位に対する単純せん断変形下での実験結果との比較を行っており、双対線図についても併せて示している。最初のせん断においてはほぼ同様の応力-ひずみ応答を示したのち、反転せん断では大きな差が生じることが示されており、とくに応力停滞の傾向が認められるのが特徴的である。シミュレーションではこの傾向を定性的であるが再現しており、しかもその機構として形成される転位下部組織の違いに伴う弾性ひずみエネルギーの蓄積→解放挙動差異に起因することが、双対線図(図中右下に示す)によって明確に示されている。

本一連の研究では主として引張-圧縮変形下における

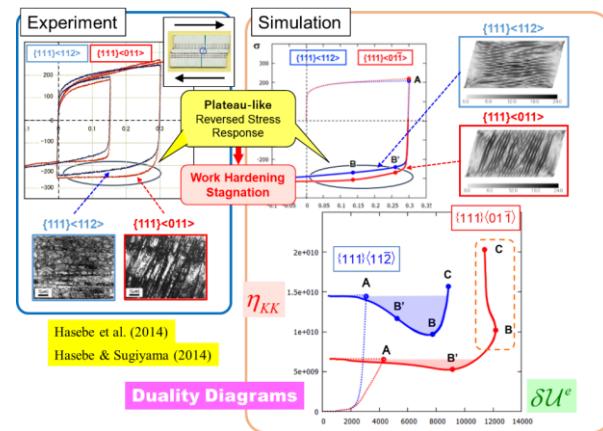


Fig.1 Summary of simple shear load reversal tests for γ -oriented α -Fe single crystal samples, comparing experiment and simulation.

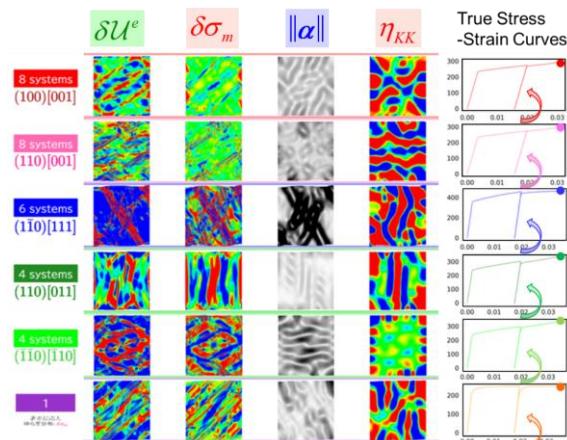


Fig.2 Single crystal Bauschinger behaviors.

Bauschinger 効果[10]を議論する。改めて代表的結晶方位に対する単結晶モデルの結果を Fig.2 に示す。ここでは負

荷反転後の最大圧縮時における各種分布図を転位密度 $\|\alpha\|$ 図とともに併記しているが、ほとんど Bauschinger 効果は生じていない。比較的大きな Bauschinger ひずみ ε_B が認められる(111)[123]方位に対する結果を改めて Fig.3 に示す。この場合、引張時に形成されたバンド状の転位下部組織(A 点)が、除荷後の反転圧縮時(C 点)で一旦解消され、さらなる圧縮変形で別途再構築される様子が $\|\alpha\|$ 分布図において確認でき、それに伴って比較的不規則な応力停滞が生じていることがわかる。これは Fig.1 で示した例と同様、Scale B 起源による遷移軟化の発現である。

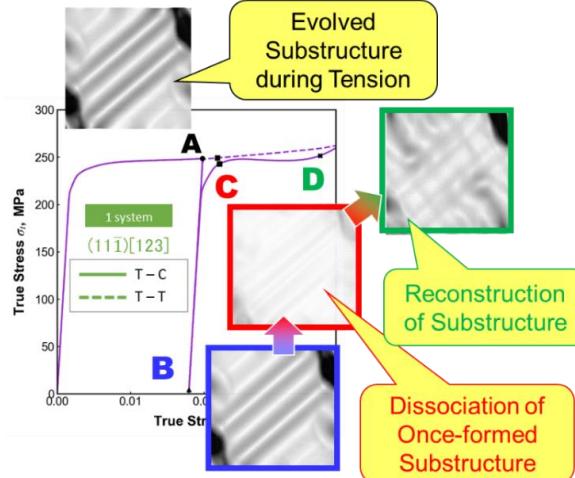


Fig.3 An example of single crystal simulation for (111)[123].

3 多結晶モデルの場合

3.1 勾配半径の影響と Scale B/C の区別

多結晶の議論において、勾配半径 r_{GR} の選び方によって種々のスケール(例えば Scale B および Scale C)の不均質場からの寄与を議論することができる。7 結晶粒モデルにおいて r_{GR} を系統的に増加させた場合の不適度分布 (η_{KK})を Fig.4 に示す。図中左上に示すように、勾配計算では r_{GR} で規定される円(2D)もしくは球(3D)内に含まれる有限要素の情報から最小二乗近似により超平面の方程式を決定することで各方向の微係数を評価している。

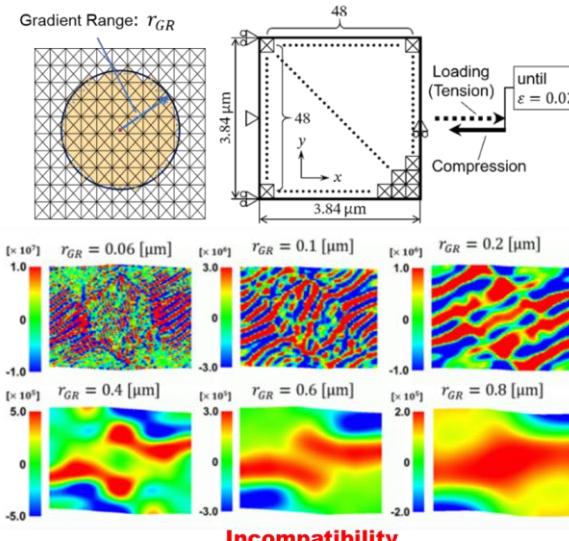


Fig.4 Variation of incompatibility distribution with various gradient evaluation range for 7-grained multigrain model.

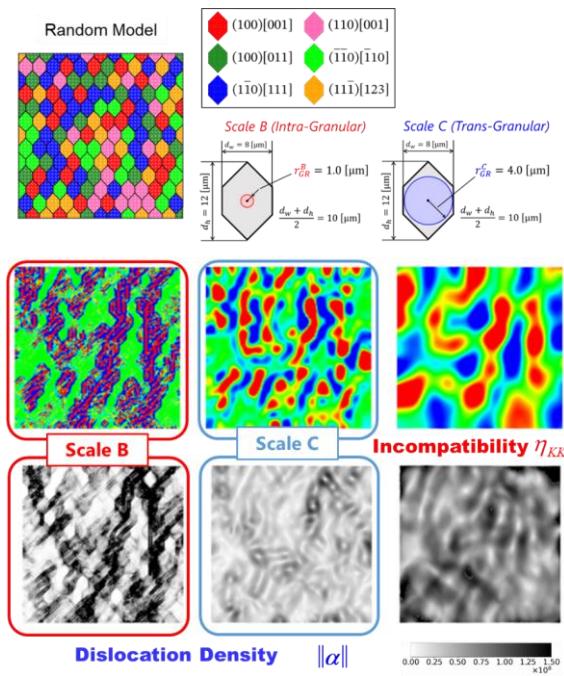


Fig.5 Polycrystal model with 167 grains, together with incompatibility contours with three gradient ranges, including for Scale B/Scale C conditions.

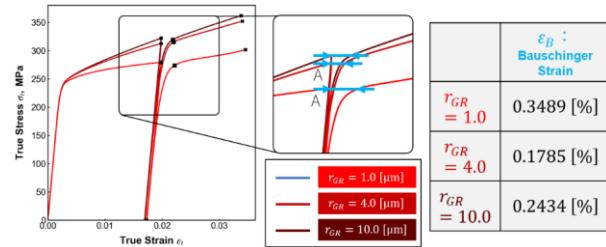


Fig.6 Comparison of stress-strain curves among three r_{GR} conditions, where Bauschinger strains are also compared.

本研究では、Fig.5に示す167結晶粒(代表6結晶方位をランダムに配置)より成る多結晶モデルを考え、 $r_{GR}=1.0\mu\text{m}$ (Scale B)および $4.0\mu\text{m}$ (Scale C)の2種を設定する。同図には両者を含む3レベルの r_{GR} に対する η_{KK} および $\|\alpha\|$ 分布を比較しており、各結晶粒内の下部組織から結晶粒を跨ぐ領域での不均質場がそれぞれ捉えられている様子が確認できる。なお、負荷方向(引張→除荷→圧縮)は紙面の水平方向であるとする。Fig.6に、Fig.5の各 r_{GR} 条件において得られた応力-ひずみ曲線の比較を示す。同図より、いずれの条件下においても遷移軟化が自然に生じており、系としての応力レベル自体は r_{GR} が大きいほど大きく、Bauschingerひずみ ε_B は減少する傾向にある。この点については3.4において詳しく調べる。

3.2 転位密度・不適合度テンソルの役割について

転位密度テンソル α はいわゆる“幾何学的に必要な(GN)転位”と等価な概念であり、本研究においては転位密度項 $F(\alpha)$ により考慮されている。同項の寄与を明確にすることを目的に、Fig.7 に不適合度項 $F(\eta)$ の有無という文脈で $\|\alpha\|$ 分布図および応力-ひずみ応答を比較する。前者

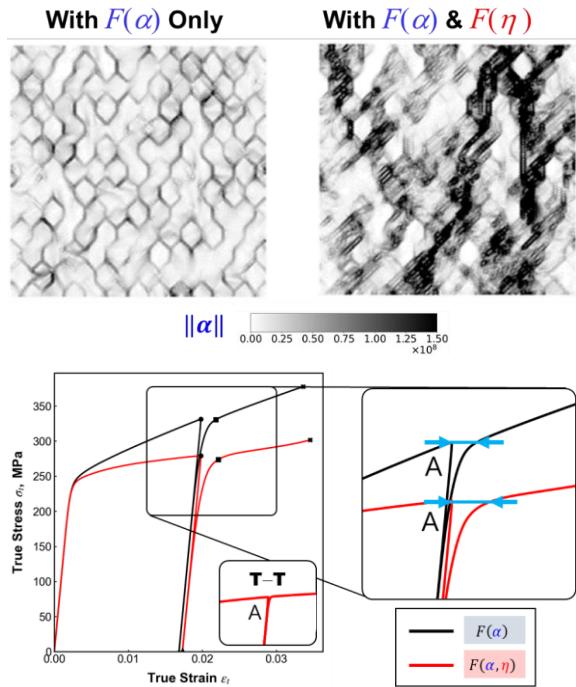


Fig.7 Comparison of dislocation density contour and S-S responses between with/without $F(\eta)$.

より、 $F(\alpha)$ の影響は予想通り結晶粒界に選択的に現れており、同項の導入に伴い、主として結晶粒界からの背応力が考慮されることがわかる。一方、不適合度項 $F(\eta)$ を導入した場合では、各結晶粒内に転位下部組織が発展している様子が確認できる。これは変形のアコモデートを促進する役割を担う。したがって、応力-ひずみ線図を比べると、 $F(\eta)$ の寄与によって系の応力レベルは低下するとともに、主として下部組織(Scale B)からの背応力に伴って遷移軟化がより促進されていることがわかる。

3.3 相互作用場に関する検討

FTMP場の理論の特徴の一つとして、不適合度テンソル場を通じてスケール間相互作用を顕わに表現・評価できる点がある[1,8,9]。ここでは、上記Scale BとScale Cを同時に考慮しつつ、加えて相互作用場 η_{BC} (Scale CからBへの相互作用)の寄与を考える。

この場合の不適合度テンソル場は次式で表現される。

$$\tilde{\eta}_B = \eta_B + e_{BC}^{-1} \eta_{BC} \quad (1)$$

$$\eta_{BC} = -(\nabla_B \times \alpha_C)_{sysm} \quad (2)$$

ここではScale Bを観測スケールとした場合を示しており、Scale Cにおける転位密度テンソル場に対し、Scale Bにおいてcurl演算を施すことによって算出される。本研究では、空間相互作用のみを考え、時空混合成分は考えないことにとする。なお、後者は回復過程などを表現する際に用いることができる[11]。ちなみに、逆の過程、すなわちScale BからScale Cへの相互作用は次式で評価される。

$$\eta_{CB} = -(\nabla_C \times \alpha_B)_{sysm} \quad (2)$$

上記相互作用場を不適合度項に加え、得られた結果を

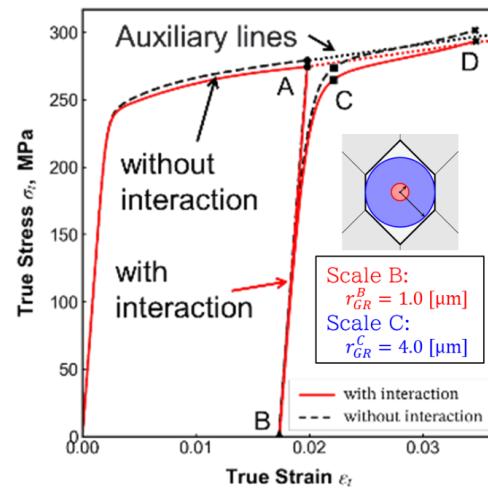


Fig.8 Comparison of S-S curves between with/without contribution of interaction field.

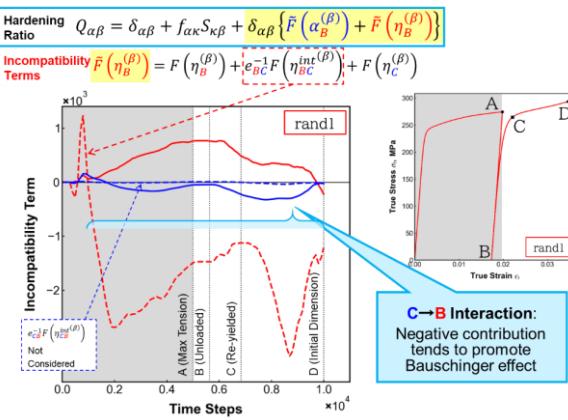


Fig.9 Variation of incompatibility terms with time steps showing breakdown of incompatibility terms.

Fig.8およびFig.9に示す。Fig.8は相互作用考慮の有無に関する応力-ひずみ応答、Fig.9は $F(\eta_{BC})$ を含む各項の変化をそれぞれ比較している。これらより、相互作用により ε_B は増加すること、さらにその原因として $F(\eta_{BC})$ 項が大きく負方向に発展することで遷移軟化を促進していることが確認される。

3.4 スケール・フリー性と相互作用場の関係

これまで、応力分布等にスケール・フリー的な傾向がみられるごとを指摘[1]していたが、同時にスケール間相互作用との因果関係については不明なままであった。3.3では同相互作用場を考慮した場合についても検討しているが、ここではあえて同寄与がない場合を考える。改めて、Scale BとScale Cを同時に考慮した場合(相互作用は陽に考えない)とScale Cのみを考慮した場合について比較を行った。系の応答としては、Fig.10に示すように一般にScale B“のみ”を考慮した場合に比べ、Scale Cのみを考慮した場合の方が遷移軟化への寄与は大きい。ここでは定量比較のためにA点において基準化したものを併記(右図)している。

Fig.11に負荷方向に対する偏差応力のスペクトル強度

分布を両条件の結果に対して示すが、上述のように、スケール・フリー的傾向を示すことがわかる。ここで横軸は結晶粒あたりの波数 k/d を表しており、 $k/d < 1$ の領域は結晶粒内、 $k/d > 1$ は粒を越えたスケールをそれぞれ示す。同図より、 $k/d > 1$ でスペクトル強度は両条件下でほぼ一致しているのに対し、Scale Bを考慮した場合では $k/d < 1$ において比較的大きくなっている、結晶粒内の転位下部組織形成を反映していることがわかる。

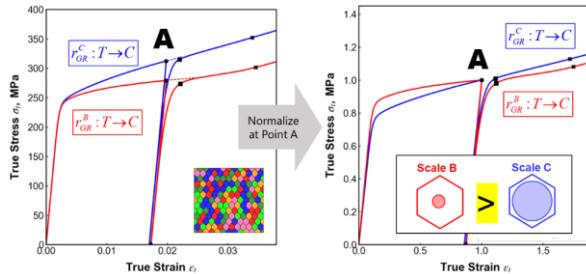


Fig.10 Comparison of stress-strain response between Scale B and Scale C conditions for polycrystal model.

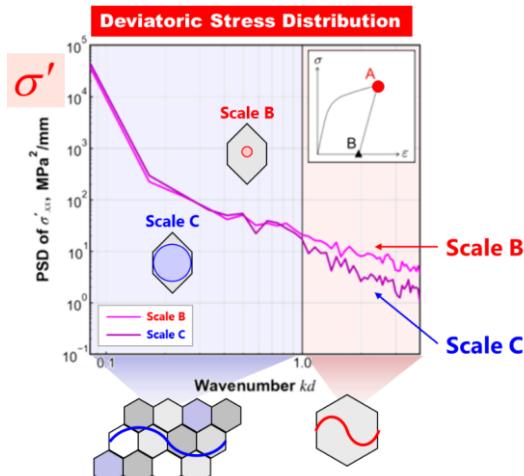


Fig.11 Spectral distribution of deviatoric stress comparing two conditions.

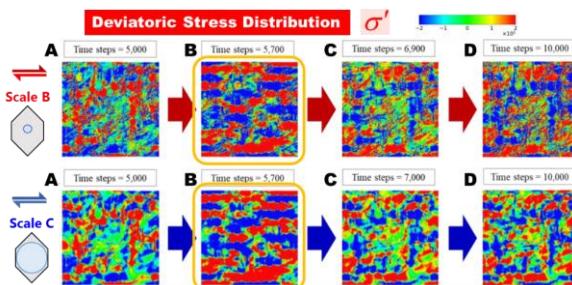


Fig.12 Variation of snapshots of deviatoric stress contours at A through D, comparing Scale B/ Scale C conditions.

このような応力におけるスケール・フリー的傾向は、負荷方向に形成される応力支持構造(SSS: stress supporting structure)によるものであると理解される。Fig.12に変形各段階における偏差応力分布を示す。いずれの条件に対しても、ほぼ同様の分布傾向を示すが、とくにB点において顕著なSSSの発達が確認できる。なお、このSSSはいわゆる遠隔効果を誘起することがわかっており、SSSを辿って

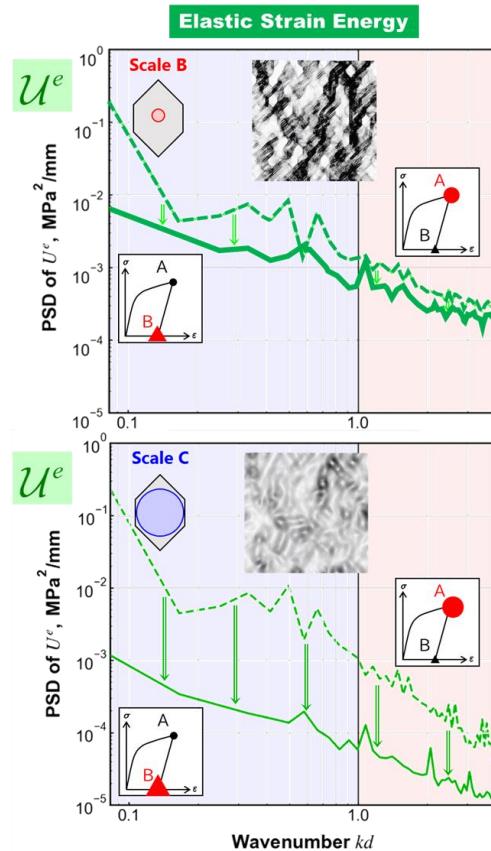


Fig.13 Recovery of spectral distribution for elastic strain energy during unloading, comparing conditions with Scale B (above) and Scale C (bottom).

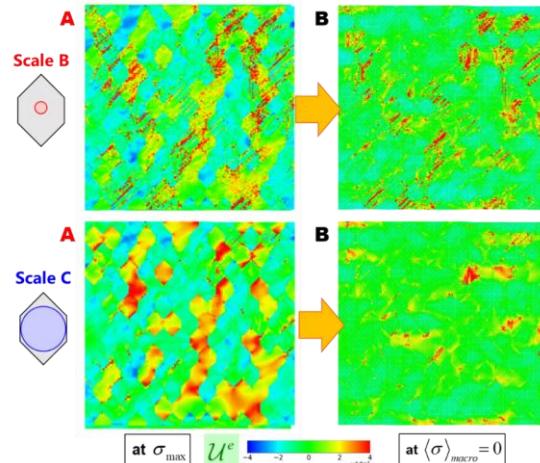


Fig.14 Recovery of elastic strain energy contour during unloading, comparing conditions with Scale B (above) and Scale C (bottom).

局所的な応力状態(情報)が遠方へと伝達される。

遷移軟化の大小関係とこのスケール・フリー性の関係を調べるために、弾性ひずみエネルギーのスペクトル分布をFig.13において比較する。ここでは、最大引張時(A点)と系の応力が0となる除荷時(B点)を各条件に対して比較している。一般に除荷に伴い弾性ひずみエネルギーは解放され、そのスペクトル分布も減少すると考えられる。Scale Cのみを考慮した場合(下図)では確かにそのような結果となっているが、Scale Bを考慮した上図では減少量は著し

く小さく抑えられていることがわかる。すなわち除荷後にも拘わらず弾性ひずみエネルギーが蓄積されたまま残存していることを意味している。Fig.14にAおよびB点における弾性ひずみエネルギーの分布図をそれぞれの条件に対して示すが、同図よりその様子が確認できる。すなわち、Scale Bを考慮した上図において、最大引張時A点で発達した転位下部組織に蓄積された弾性ひずみエネルギーが除荷時B点においても同組織形態に沿った形で微細に残存している様子が観察される。一方、Scale Cのみを考慮した場合の下図においても、弾性ひずみエネルギーは多少残存しているものの、各結晶粒内において一様に近い分布となっており、同スケールの背応力源としては前者と比べあまり機能しない。

上記の結果に基づき、本題について現時点でのような解釈が可能である。前提として、弾性ひずみエネルギー分布にスケール・フリーの性質が発現し、かつそれが応力分布における負荷方向への応力支持構造(SSS)の発達と対応している状態を考える。同条件下では、SSSを通じてミクローマクロ間の情報が自然に相關することになる。したがって、Scale Bすなわち結晶粒内での転位下部組織発展の影響が、同SSSを通じてScale Cすなわち粒集合体オーダーの不均質場と自発的に連動することになる。言い換えると、この場合にはスケール間相互作用がスケール・フリー性として自然に現れており、系の応答として自動的に連携するということを意味する。

3.3においてはScale BからScale Cへの相互作用 η_{BC} を顧ねに用いた計算を行った。この場合、逆に若干ではあるがBauschingerひずみは小さくなっている。これは同相互作用を二重に考慮したことが却って負の影響をもたらした可能性を示唆している。

以上のこと総括すると、以下のようなになる。すなわち、応力分布にスケール・フリー性が自然に生じるような場合においては、転位下部組織オーダーの不均質場発展を正しくシミュレートすることによって、上位スケールとのスケール間相互作用は自動的に考慮される。このとき、不適合度場に基づく相互作用場、例えば η_{BC} は、その様子を可視化・モニタリングするためのパラメータとして活用することができる。

3.5 二層組織(DP)鋼への応用についてのコメント

本稿で展開した議論は、結晶粒形状やサイズに分布のある場合(UFG材や調和組織材など)や、複相組織を有する場合など、より複雑な条件に対して容易に拡張することが可能である。紙面の都合で標記について硬質粒を体積分率50%含むDP鋼モデルに対する結果[1,12]について簡単に言及するにとどめる。

Fig.15は3種の硬質粒分布形態(青色)に対して得られた引張-除荷-圧縮解析の結果を比較したものであり、分布および強度比の違いにより生じるBauschingerひずみ ε_B に大きな違いが見られる。なお、ここでは2すべり系モデル

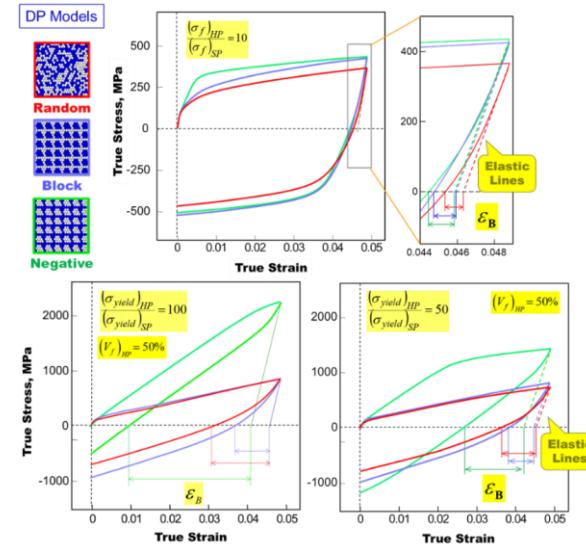


Fig.15 Summary of CP-FE simulations for three typical DP alloy models, comparing transient softening behaviors manifested as Bauschinger strain.

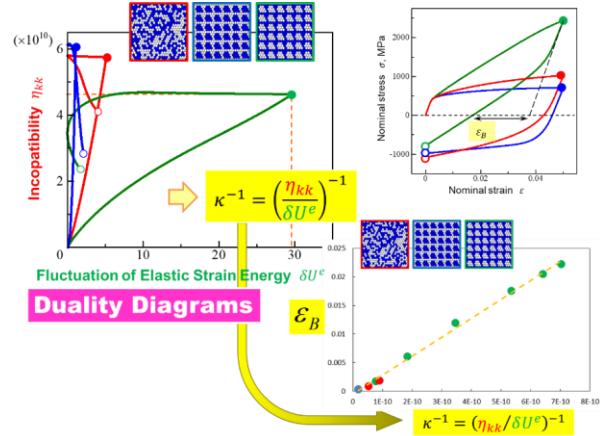


Fig.16 Representative duality diagrams for the three DP models corresponding to the results in Fig.17, together with a correlation of the Bauschinger strain with reciprocal of duality coefficient.

を仮定しており、硬化則中に不適合度項を考慮していない。Fig.16は、この ε_B が、それぞれに対応する双対線図上で、最大引張時において評価される双対係数(の逆数) $K^{-1} \equiv (\eta_{KK} / \delta U^e)^{-1}$ によって、硬質粒分布形態の違いや強度比に拘わらず一本の直線で統一的に整理できることを示している。

4. 結言

本稿では、多結晶金属材料におけるBauschinger挙動の中でもその自然な表現が難しい遷移軟化現象について、FTMP場の理論に基づく結晶塑性有限要素法(CP-FEM)解析を行い、転位下部組織(Scale B)および結晶粒集合体(Scale C)という2つのスケールにおける変形誘起不均質場が及ぼす影響を詳細に調べた。単独では後者(Scale C)の影響が比較的大きいものの、応力分布に負荷方向に発達する応力支持構造に起因するスケール・フリー(SF)性が自発

的に構築される場合には、前者(Scale B)の影響がSFを通じてScale Cと有機的に相互作用することで、後者単独の場合よりも大きな遷移軟化が生じることを明らかにした。

参考文献

- [1] Hasebe, T.: Field Theory of Multiscale Plasticity, Cambridge Univ. Press, 2023.
- [2] Hasebe, T.: Multiscale crystal plasticity modeling based on field theory, *CMES*, Vol.11, pp.145-155, 2006.
- [3] Hasebe, T.: Continuum description of inhomogeneously deforming polycrystalline aggregate based on field theory, in meso-scale simulation and modeling of strength and fracture of materials, *IUTAM Symp. Mesoscopic Dynamics of Fracture Process and Materials Strength* (eds. Kitagawa, H. and Shibutani) Y.), pp. 381–390, Kluwer, 2004.
- [4] Hasebe, T.: Field theoretical multiscale modeling of polycrystal plasticity, *Trans. MRS-J*, Vol.29, pp.3619–3624, 2004.
- [5] Hasebe, T. et al.: Modeling and simulations of experimentally observed dislocation substructures based on Field Theory of Multiscale Plasticity (FTMP) combined with TEM and EBSD-Wilkinson method for FCC and BCC poly/single crystals, *Materials Transactions*, Vol. 55, pp.779 -787, 2014.
- [6] Hasebe, T. and Sugiyama, M.: FTMP-based simulation for self-evolving dislocation substructures under simple shear for steel single crystals having BCC structure, *Proc. 35th Riso Inter. Symp. on Materials Science: New Frontiers of Nanometals*, (Eds: Fæster, S., Jensen, D. J., Hansen, H., Ralph, B. and Sun, J.), pp.313-320, 2014.
- [7] Ihara, S. Uematsu, M. and Hasebe, T., FTMP-based simulation and evaluation of apparent reduction in elastic modulus, *Int. J. Multiphysics*, Vol.15, pp.151-167, 2021.
- [8] Hasebe, T.: Interaction fields based on incompatibility tensor in Field Theory of Plasticity, Part I: Theory, *IMMIJ*, (*Interaction and Multiscale Mechanics: An Int. J.*), Vol.2, pp.1-14., 2009.
- [9] Hasebe, T. Interaction fields based on incompatibility tensor in Field Theory of Plasticity, Part II: Application,” *IMMIJ*, (*Interaction and Multiscale Mechanics: An Int. J.*), Vol.2, pp.15-30., 2009.
- [10] 橋本, FTMP 場の理論に基づく FCC 金属材料のバウシンガ挙動に関する研究, 神戸大学大学院工学研究科修士論文, 2023.
- [11] 長谷部, 高島 : FTMP 場の理論に基づく 3D 汎用シミュレータについて第 72 期通常総会・学術講演会講演論文集, 2023.
- [12] Takeuchi, K., Hasebe, T. and Tomita, Y.: Effect of trans-granular inhomogeneity on Bauschinger behavior of dual phase polycrystalline aggregates, *Proc. APCOM'07*, 2007.